

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
«Институт водных проблем Российской академии наук»

Подпись аспиранта

КРОХИН ГЕОРГИЙ БОРИСОВИЧ

**ИССЛЕДОВАНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ
ФОРМИРОВАНИЯ ГИДРОХИМИЧЕСКИХ
ПОКАЗАТЕЛЕЙ ПРИРОДНОЙ ВОДЫ В УСЛОВИЯХ
РАЗЛИЧНОЙ АНТРОПОГЕННОЙ НАГРУЗКИ**

Специальность 1.6.21 – «Геоэкология»

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Научный руководитель:
главный научный сотрудник Института водных проблем Российской академии
наук, профессор, доктор технических наук
РОЗЕНТАЛЬ ОЛЕГ МОИСЕЕВИЧ

Москва, 2026 г.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность

В практике оценки качества природных вод традиционно используются либо детерминистические имитационные модели (требующие детального знания гидрологии и химии веществ), либо классические статистические методы (регрессия, корреляция), которые не учитывают нелинейную, нестационарную и фрактальную природу временных рядов концентраций растворенных в воде веществ. При этом огромные массивы гидрохимических наблюдений, накопленные за десятилетия, остаются не полностью использованными – из них извлекаются лишь средние значения, тренды или сезонные компоненты, но игнорируются такие свойства, как долговременная память, внутренняя цикличность, причинно-следственные связи между разными показателями [1].

Существует необходимость более полной, репрезентативной оценки качества воды в рамках геоэкологического мониторинга, которая опиралась бы не только на знания о химизме и поведении веществ в водной среде, но также и на закономерностях, содержащихся в самих массивах данных. В работе предложен подход, который принимает все известные массивы данных за верные – не рассматриваются ошибки химического анализа, место отбора проб, условия хранения, гидрологическая фаза в момент отбора и т.п. Такой отказ от предварительной фильтрации оправдан тем, что большинство используемых статистических методов (R/S-анализ, коинтеграция, DTW, SARIMA) чувствительны именно к структуре временного ряда, а не к абсолютным значениям. Если данные получены по стандартизированной методике, они могут быть обработаны как есть, без дополнительных гипотез о том, правильно ли отобрана проба или нет.

Цель работы – разработка научно обоснованных принципов анализа гидрохимических данных, дающих возможность выявить закономерности временных рядов (долговременную память, цикличность, причинно-следственные связи) и на этой основе повысить репрезентативность оценки качества воды, что позволит что позволит более детально изучать имеющиеся данные и повысить качество управления водными ресурсами.

Для достижения цели поставлены следующие **задачи**:

1. Выявить принципиальные ограничения линейных статистических методов в части их способности работать с нестационарными временными рядами, и обосновав тем самым необходимость перехода к методам нелинейной статистики.

2. Адаптировать и применить нелинейные статистические методы (фрактальный и коинтеграционный анализы) для обнаружения долговременной памяти и устойчивых циклических компонент в гидрохимических временных рядах, а также подтвердить наличие устойчивых долгосрочных (коинтеграционных) и краткосрочных (причинных) связей между гидрохимическими показателями, которые проявляются даже при высокой антропогенной нагрузке.

3. Усовершенствовать методику прогнозирования качества воды, используя выявленную внутреннюю цикличность и данные о неоднородности в качестве альтернативного параметра сезонности в SARIMA-моделях, что повышает точность прогноза по сравнению с традиционным подходом, ориентированным на жесткую сезонность.

4. Рассмотреть колебания концентраций гидрохимических показателей с точки зрения открытых систем: выявить в изменении временных рядов незатухающих автоколебаний, характерных для упорядоченных структур в открытых термодинамических системах; показать, что противофазная динамика временных рядов может успешно описываться с помощью имитационных моделей на основе фазовых портретов и систем простых дифференциальных уравнений.

Основные научные положения, выносимые на защиту:

1. Временные ряды гидрохимических данных характеризуются эффектом долговременной памяти и внутренними циклическими закономерностями, проявляющимися даже при высокой антропогенной нагрузке.
2. Методы нелинейной статистики позволяют обнаружить устойчивые коинтеграционные зависимости и причинно-следственные связи в динамике временных рядов гидрохимических показателей, что может стать основой для обнаружения общности источников загрязнения водных объектов в рамках геоэкологического мониторинга.

3. Метод прогнозирования на основе SARIMA-моделей с параметром сезонности, равным глубине памяти временного ряда, повышает точность статистических прогнозов и закладывает основу для новых методов прогнозных расчетов с учетом обнаруженных закономерностей.
4. В гидрохимическом временном ряду наблюдаются незатухающие автоколебания, проявляющиеся в изменении значений концентраций и отражающие существование упорядоченных структур. Противофазная динамика показателей при этом адекватно воспроизводится имитационными моделями, построенными на основе фазовых портретов и систем простых дифференциальных уравнений.

Научная новизна работы:

- к гидрохимическим временным рядам применён комплекс методов нелинейной статистики, что позволило преодолеть ограничения традиционного анализа, установить факт долговременной памяти и доказать неслучайный характер динамики концентраций, а также выявить устойчивые тренды и скрытые циклические составляющие;
- впервые использован DTW-анализ (динамическая трансформация временной шкалы) для сравнения временных рядов данных на разных створах, что позволило выявить эффект «наследования» гидрохимического состава воды;
- впервые для гидрохимических данных реализован комплекс «тест причинности Грейнджера – коинтеграционный анализ Йохансена», позволяющий разделять краткосрочные направленные причинно-следственные связи и долгосрочные равновесные соотношения между показателями, что дает возможность создать новую основу для выявления источников загрязнения и прогнозирования геоэкологического состояния водных объектов;
- усовершенствована схема построения модели SARIMA, в которой значение сезонной компоненты устанавливается индивидуально для каждого времен-

ного ряда на основе «глубины памяти», что обеспечивает статистически значимое улучшение точности прогноза концентраций загрязняющих веществ по сравнению с моделями с фиксированной годовой сезонностью.

Обоснованность и достоверность результатов

В работе были использованы реальные эмпирические данные, характеризующие химический состав воды на трех различных водных объектах. Полученные в ходе работы результаты проверялись с помощью метрик с соответствующими доверительными интервалами. Для калибровки и верификации прогнозных моделей использовались как общепринятые оценочные методики, так и сопоставление с имеющимися данными гидрохимического мониторинга.

Методология и методы исследования

Методологическая основа работы включает в себя линейные и нелинейные статистические методики. Линейный блок методологии включает статистический подход к аппроксимации временных рядов, критерий однородности Уилкоксона и сезонную модель SARIMA для построения прогностических зависимостей. Нелинейный блок представлен методом фрактального анализа для оценки долговременной памяти и персистентности рядов (R/S-анализ), алгоритмом динамической трансформации временной шкалы (DTW-анализ) для проверки гипотез об однородности выборок в условиях неизвестного распределения данных, тестированием на наличие причинно-следственных связей (тест Грейнджера) и коинтеграционным анализом по методу Йохансена с целью выявления долгосрочных равновесных соотношений.

Практическая значимость исследования заключается в возможности существенного повышения точности оценки качества вод за счёт перехода от усреднённых нормативных показателей к динамическим критериям, учитывающим внутреннюю инерционность и скрытую цикличность временных рядов гидрохимических показателей. Полученные в работе данные о долговременной памяти рядов и причинно-следственных связях позволили сформировать новый подход для совершенствования экологического нормирования. Результаты исследования легли в основу проектов двух национальных стандартов: ГОСТ Р 72538-2026 «Охрана

окружающей среды. Охрана водных объектов. Методика оценки риска ошибочного определения фоновое содержания загрязняющих веществ в водных объектах» и ГОСТ Р 72527-2026 «Охрана окружающей среды. Охрана водных объектов. Методика выбора очистки системы воды по критерию эффективности», что подтверждено соответствующими актами внедрения (приложение А и Б).

Личный вклад автора заключается в постановке задач исследования, в непосредственном участии на всех этапах исследований: при планировании работ, сборе и обобщении научно-технической информации; адаптации и применении комплекса статистических методов для выявления скрытых закономерностей и упорядоченности в динамике гидрохимических показателей, кажущихся хаотичными; установлении причинно-следственных связей между временными рядами гидрохимических показателей, позволяющими их использовать для детального прогнозирования загрязнения вод.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на VII Всероссийском водном конгрессе (20-22 июня 2023 г., Москва), Международной научно-технической конференции «Науки о Земле» (online 29-30 апреля 2024 г., Владивосток), VIII Всероссийском водном конгрессе (18-20 июня 2024 г., Москва), IX Всероссийском водном конгрессе (08-10 апреля 2025 г., Москва).

Структура работы. Диссертация состоит из четырех глав, введения, заключения, списка литературы и двух приложений. Работа выполнялась в лаборатории управления водными ресурсами Института водных проблем РАН в рамках тем государственного задания № FMWZ-2022-0002.

Благодарности. Диссертант выражает искреннюю благодарность своему научному руководителю, д.т.н., главному научному сотруднику ИВП РАН Розенталю О.М. за предоставление данных, консультации, внимание к работе и постоянную поддержку. Автор также признателен за всестороннюю помощь научному руководителю ИВП РАН, д.э.н., член-корр. РАН Данилову-Данильяну В.И., выражает благодарность всем сотрудникам ИВП РАН за содействие в работе над диссертацией.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В первой главе диссертации проведен анализ существующих методов исследования пространственно-временной изменчивости концентраций загрязняющих веществ. Рассмотрены две основные группы подходов: имитационное (детерминистическое) моделирование и статистические методы.

Детерминистические имитационные модели (ECOMAG-HM, DELWAQ, ANH, WASP5) характеризуются глубокой физико-химической проработкой процессов миграции и трансформации веществ [Ouboter, 1998; Tufford, 1999; Haifeng, 1999; Meixner, 2004; Мотовилов 2013, 2018]. Они позволяют воспроизводить сезонную динамику показателей качества воды, оценивать последствия климатических и антропогенных изменений, а также детально описывать гидрологический цикл водосбора. Но для калибровки подобных моделей требуется большое число входных параметров, что подразумевает наличие масштабной информационной базы, часто недоступной для многих водных объектов. В дополнении к этому зависимость от специализированного программного обеспечения также ограничивает оперативное применение в практике водохозяйственного управления.

Статистические подходы включающие регрессионный анализ, исследование корреляционных связей (например, зависимость мутности от расхода воды в виде степенной функции) и подбор параметрических распределений, ориентированы на непосредственную обработку рядов наблюдений [Jansson, 1996; Attrill, 2000; Beaudeau, 2001; Feng, 2004; Hadas, 2004; Долгоносов 2005, 2006]. Они более просты в реализации, не требуют специализированных программ, работают исключительно с массивами данных и позволяют выявлять статистические закономерности, включая оценку риска экстремальных загрязнений. При этом для применения регрессионных методов часто требуется искусственная нормализация данных, что может исказить исходные свойства рядов и приводить к некорректным выводам, к тому же полностью игнорируется факт нестационарности [Долгоносов, 2010; Синцова, 2024; Лепихин, 2024].

В связи с этим в работе предлагается использовать адаптированные для гидрохимических данных методы нелинейной статистики. Их преимуществом является возможность работать с нестационарными рядами, содержащими тенденции, сезонные компоненты и случайные колебания. Нелинейные методы не требуют знаний закона распределения исходных данных и позволяют выявлять скрытые закономерности в тенденциях формирования временных рядов.

В конце главы также представлена обобщенная гидрохимическая характеристика объектов исследования, чьи временные ряды наблюдений послужили эмпирической базой для апробации предлагаемых методов:

- *Река Исеть* в пределах Свердловской области является примером водного объекта, испытывающего высокую антропогенную нагрузку. На формирование химического состава воды в этом регионе влияют не столько природные факторы, сколько прямое и масштабное загрязнение от промышленных центров и урбанизированных территорий. В работе рассматривались ежемесячные временные ряды гидрохимических показателей воды на створах города Екатеринбурга (5,2 км выше города, в центре города и 7,2 км ниже), деревни Калюткино и в районе Каменск-Уральского (20 и 5,3 км выше города, а также 9,3 км ниже) в период с 1983 по 2013 гг. Качество воды на всех створах согласно УКИЗВ варьируется от 4-го класса (грязная) до 5-го (экстремально грязная).

- *Исаковское водохранилище* в Луганской области является примером умеренно-нарушенного водного объекта где техногенные факторы изменяют природные процессы, влияя на формирования химического состава вод, но при этом сохраняется потенциал для восстановления при своевременном вмешательстве. По данным ежедневного гидрохимического мониторинга за 2014-2022 гг., нормируемые показатели в среднем соответствуют установленным требованиям, хотя и имеются периоды превышения нормативов для некоторых веществ. УКИЗВ определяет класс качества воды от 2-го (слабо загрязненная) до 3-го (загрязненная).

- *Река Катунь* расположена на территории республики Алтай вдали от промышленных районов. Для анализа использовались ежемесячные данные за период с 2008 по 2018 гг. на трех последовательно расположенных створах (Теректа,

Тюнгур, Кокша). Качество воды по УКИЗВ соответствует 1-му классу (условно чистая) на створе Кокша и 2-му классу (слабо загрязненная) на створах Теректа и Тюнгур, расположенных в животноводческих районах.

Во второй главе предложен подход к обработке гидрохимических данных, основанный на методах линейной и нелинейной статистики. Он позволяет выделить в структуре временных рядов скрытые составляющие – долговременную память, внутреннюю цикличность и пространственную однородность.

В разделе главы, описывающем **аппроксимацию данных аналитическими функциями**, проведено сравнение эффективности алгебраической и тригонометрической аппроксимации временных рядов гидрохимических показателей на всех трех водных объектах. Оценивалась достоверность аппроксимации временных рядов полиномиальными функциями двух типов: алгебраическим полиномом 6-й степени и тригонометрическим полиномом (ряд Фурье) с числом гармоник, равным степени полинома. Порядок полинома определён балансом точности и устойчивости: полиномы не выше 3-й степени не способны описать сложные нелинейные изменения, тогда как степени выше 7-й склонны к переобучению и не дают существенного прироста точности.

Сравнение по величине среднеквадратического отклонения для всех временных рядов показало, что тригонометрическая аппроксимация описывает экспериментальные данные в 1,5-2 раз точнее алгебраической. Так, в табл. 1 приведены результаты аппроксимации временных рядов на 4-х створах реки Исеть. Данное превосходство не является случайным: тригонометрические функции по своей природе ориентированы на описание периодических процессов, что позволяет им эффективно воспроизводить повторяющиеся структуры в рядах концентраций.

Таблица 1. Среднеквадратичное отклонение при аппроксимации алгебраическим полиномом (числитель) и тригонометрическим полиномом (знаменатель)

Место отбора пробы	pH	Fe _{общ}	Cu ²⁺	Cl ⁻	NH ₄ ⁺
5,2 км выше г. Екатеринбург	0,6/0,82	0,5/0,8	0,8/0,95	0,46/0,86	0,34/0,85
В черте города	0,41/0,86	0,37/0,9	0,71/0,95	0,5/0,89	0,61/0,92
На 7 км ниже	0,5/0,9	0,51/0,84	0,4/0,81	0,53/0,86	0,5/0,85
На 19,1 км ниже	0,56/0,83	0,56/0,92	0,58/0,9	0,59/0,93	0,62/0,89

Высокая точность тригонометрической аппроксимации служит доказательством существования скрытой периодичности в гидрохимических временных рядах. Разложение в ряд Фурье дает возможность не только сгладить случайные выбросы, но и выделить вклад отдельных гармоник с разными периодами. Величина $A_k = \sqrt{a_k^2 + b_k^2}$ количественно характеризует «энергетический вклад» каждой k -й гармоники в общую изменчивость, а совокупность значений A_k образует амплитудный спектр функции. Исследование спектра позволило выявить основные частотные составляющие и характерные периоды, формирующих временную структуру рядов концентраций, что может быть использовано для первичного прогнозирования периодов повышенных концентраций.

Таким образом, тригонометрическая аппроксимация выступает не только как средство описания данных, но и как инструмент первичной диагностики периодической структуры временных рядов, что создает основу для последующего фрактального анализа, поиска циклических компонент и выявления «долговременной памяти» [2].

Фрактальный анализ (R/S-анализ) применяется для выявления скрытой упорядоченности в динамике гидрохимических показателей. С его помощью можно обнаружить долговременную память временного ряда и циклические компоненты, не определяемые линейными методами, например, тригонометрической аппроксимацией. В работе впервые применительно к гидрохимическим данным использован метод последовательного R/S-анализа, предназначенный для выявления фрактальных характеристик временных рядов [4]. Такой подход даёт возможность не только установить наличие фрактальной структуры динамики, но и оценить её устойчивость при уменьшении объёма выборки. Главным итогом каждой итерации служит определение временного масштаба корреляций, или «глубины памяти» ряда, — величины, обратной скорости спада автокорреляционной функции. Для рядов гидрохимических показателей предложено количественно выражать этот масштаб через продолжительность периодов циклических составляющих. С точки зрения нелинейной статистики средняя продолжительность цикла интерпретируется как характерное время (выраженное числом наблюдений), по прошествии которого

система утрачивает информацию о начальных условиях, что находит отражение в изломе R/S-диаграммы (рис. 1).

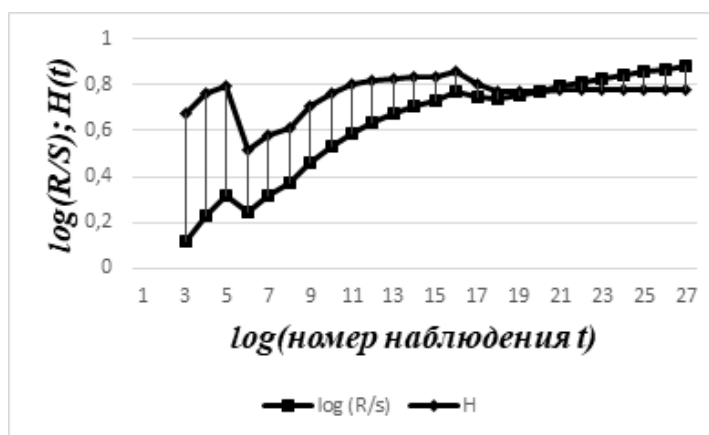


Рис. 1. Смена R/S- и H-траекторий для временного ряда NH_4^+ в створе Теректа реки Катунь

Как видно из рисунка 1 для временного ряда NH_4^+ в створе Теректа реки Катунь H-траектория первоначально находится в зоне персистентности, при переходе из 5-ой в 6-ую точку происходит резкий срыв графика в нейтральную область ($H=0,51$), что позволяет предварительно определить глубину памяти в данной окрестности ряда в 5 месяцев.

Для подавляющего большинства рассмотренных временных рядов установлено наличие персистентного поведения (показатель Хёрста $H > 0,6$), что свидетельствует о существовании устойчивых корреляций между текущими и будущими значениями концентраций. Например, для 90–95 % анализируемых «отсечений» на реке Катунь удалось выявить наличие памяти, глубина которой варьируется в диапазоне от 2 до 7 месяцев в зависимости от показателя и створа наблюдений (табл. 2).

Таблица 2. Результаты R/S-анализа для реки Катунь

Створ	Диапазон «глубины памяти», в месяцах					C_i для которого удалось выявить наличие длин- ной памяти, %				
	pH	Fe _{общ}	Cl ⁻	Cu ²⁺	NH ₄ ⁺	pH	Fe _{общ}	Cl ⁻	Cu ²⁺	NH ₄ ⁺
Теректа	3-4	2-4	2-6	3-4	3-4	95	85	85	90	90
Тюнгур	3-4	2-4	2-6	3-4	3-4	95	85	85	90	90
Кокша	2-5	2-7	2-7	3-6	3-5	90	80	83	87	85

В случаях, когда R/S-анализ не позволял однозначно определить длину циклической компоненты (особенно на створах реки Исеть), применялся фазовый анализ, который позволил выявить явление «вложенности» циклов различной продолжительности и позволил уточнить «глубину памяти» системы в сложных случаях.

С учётом эффекта долговременной памяти во временных рядах гидрохимических данных возникает задача оценки «реактивности» функции распределения – скорости её трансформации и длительности сохранения (наследования). При наличии «наследования» однородность характеристик хорошо сохраняется в течение времени, что важно с практической точки зрения для прогноза качества воды на нижерасположенных створах по данным вышерасположенных [6].

В работе использован комплексный **подход к оценке однородности** гидрохимических данных, основанный на совместном использовании рангово-суммарного критерия Уилкоксона и алгоритма динамической трансформации временной шкалы (DTW), впервые примененного для временных рядов гидрохимических показателей. Показано, что эти методы взаимно дополняют друг друга: в то время как критерий Уилкоксона оценивает статистическую эквивалентность распределений, DTW-анализ выявляет сходство временной структуры данных и учитывает временные деформации рядов.

Преимущество метода динамической трансформации проявляется при анализе сложных и шумных временных рядов. В то время как Уилкоксон работает только со статическими распределениями и игнорирует порядок наблюдений, DTW сопоставляет локальные особенности (пики, провалы, тренды) и учитывает фазовые сдвиги. Нормализованное расстояние менее 0.3 служит надежным критерием однородности временных рядов.

Таблица 3. Результаты DTW-анализа на реке Исеть

Локация	pH	Fe _{общ}	Cl ⁻	Cu ²⁺	NH ₄ ⁺
5,2 км выше города-в черте города Екатеринбург	0,28	0,19	0,27	0,3	0,2
в черте города-7 км ниже города	0,38	0,34	0,38	0,4	0,34
7 км ниже города-19,1 км ниже города	0,37	0,31	0,3	0,5	0,44

19,1 км ниже города-Калюткино	0,4	0,37	0,43	0,43	0, 48
Калюткино-21,3 км выше Каменск-Уральского	0,44	0,35	0,35	0,35	0,35
21,3 км выше города-5,3 км выше города	0,32	0,37	0,37	0,37	0,3
5,3 км выше города-9,3 км ниже города	0,38	0,28	0,4	0,4	0,3

Установлено, что на малых расстояниях между створами для большинства показателей сохраняется статистическая однородность («наследование» состава), которая нарушается на больших расстояниях или под влиянием мощных антропогенных факторов (табл. 3). При этом важную роль играет визуальная составляющая анализа: DTW представляет матрицу выравнивания, оптимального пути, локальные зоны расхождений/совпадений. На рисунке 2 представлены визуализированные результаты DTW-анализа временных рядов железа на реке Исети в створах в черте города и 7 км ниже города Екатеринбурга.

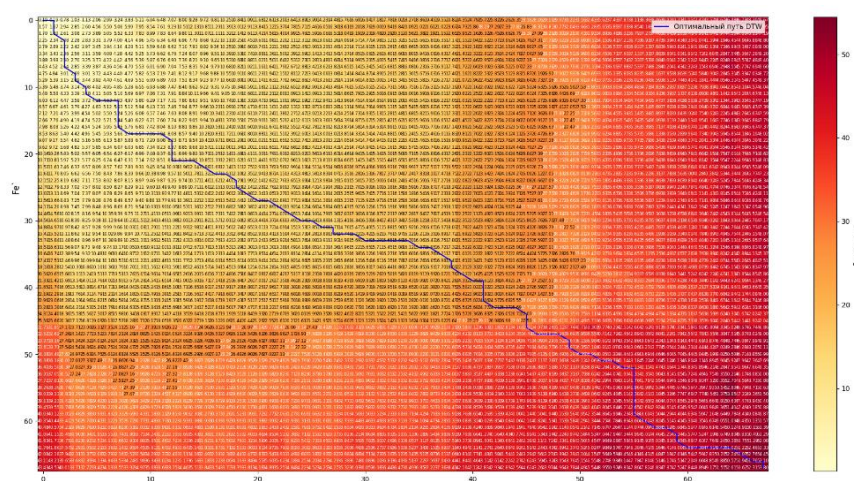


Рис. 2. Визуализированные результаты DTW-анализа временного ряда железа на реке Исеть в створах в черте города и 7 км ниже города Екатеринбурга

Из рисунка видны зоны неоднородности временных рядов, которые представлены изломами графика оптимального пути (синяя линия) и разными цветовыми тонами (чем ярче цвет, тем сильнее расхождение). Так, резкий срыв графика оптимального пути и нахождение его в зоне сильного расхождения свидетельствует о нарушении однородности временного ряда железа, что проявляется в виде увеличения значения концентрации железа на створе ниже города Екатеринбурга.

Использование DTW-анализа также позволило выявить связь между однородностью данных и проявлением эффекта памяти в R/S-анализе. Обнаружено, что резкие «срывы» R/S-траектории и аномалии в поведении показателя Хёрста часто соответствуют зонам неоднородности, обусловленным внешними антропогенными воздействиями, что можно определить с помощью визуальной составляющей метода.

Третья глава диссертации посвящена поиску связей между временными рядами гидрохимических показателей и их прогнозированию с учетом обнаруженных закономерностей. Обоснована и впервые реализована методология комплексного анализа, основанная на последовательном применении теста причинности Грейнджера и коинтеграционного теста Йохансена. Необходимость использования данного комплекса методов обусловлена тем, что традиционный корреляционный анализ часто выявляет статистически значимые, но ложные связи между нестационарными временными рядами, что может привести к некорректным выводам о наличии взаимозависимостей между гидрохимическими параметрами.

Тест Грейнджера позволяет установить направленное влияние одного временного ряда на другой. В случае гидрохимических временных рядов он помогает установить, может ли изменение концентрации одного вещества стать причиной изменения концентрации другого вещества. Но смысл теста на причинность не в том, чтобы найти истинную причинно-следственную связь, а в том, чтобы обнаружить полезность прошлых данных одной переменной для прогнозирования другой.

Для установления устойчивых взаимосвязей между временными рядами гидрохимических показателей необходимо определить, образуют ли их временные ряды стационарную линейную комбинацию. Наличие такой комбинации свидетельствует о коинтеграции – статистически значимой долгосрочной зависимости, при которой ряды движутся согласованно во времени. **Тест Йохансена** на коинтеграцию показывает, существует ли долгосрочное равновесное соотношение между временными рядами. Он способен подтвердить или опровергнуть существование устойчивых связей, смоделировать долгосрочную динамику, а также выявить общие источники загрязнения (табл. 4).

Таблица 4. Результаты теста Йохансена для реки Исеть

5,2 км выше города		в черте города		7 км ниже города		19 км ниже города	
Показатель	$I(1)$	Показатель	$I(1)$	Показатель	$I(1)$	Показатель	$I(1)$
pH - Fe _{общ}	-	pH - Fe _{общ}	-	pH - Fe _{общ}	-	pH - Fe _{общ}	-
pH - Cu ²⁺	-	pH - Cu ²⁺	-	pH - Cu ²⁺	+	pH - Cu ²⁺	-
pH - Cl ⁻	-	pH - Cl ⁻	-	pH - Cl ⁻	+	pH - Cl ⁻	-
pH - NH ₄ ⁺	-	pH - NH ₄ ⁺	-	pH - NH ₄ ⁺	-	pH - NH ₄ ⁺	-
Fe _{общ} - Cu ²⁺	+	Fe _{общ} - Cu ²⁺	+	Fe _{общ} - Cu ²⁺	+	Fe _{общ} - Cu ²⁺	+
Fe _{общ} - Cl ⁻	-	Fe _{общ} - Cl ⁻	-	Fe _{общ} - Cl ⁻	-	Fe _{общ} - Cl ⁻	-
Fe _{общ} - NH ₄ ⁺	-	Fe _{общ} - NH ₄ ⁺	-	Fe _{общ} - NH ₄ ⁺	-	Fe _{общ} - NH ₄ ⁺	-
Cu ²⁺ - Cl ⁻	+	Cu ²⁺ - Cl ⁻	-	Cu ²⁺ - Cl ⁻	+	Cu ²⁺ - Cl ⁻	+
Cu ²⁺ - NH ₄ ⁺	+	Cu ²⁺ - NH ₄ ⁺	+	Cu ²⁺ - NH ₄ ⁺	-	Cu ²⁺ - NH ₄ ⁺	+
Cl ⁻ - NH ₄ ⁺	-	Cl ⁻ - NH ₄ ⁺	-	Cl ⁻ - NH ₄ ⁺	-	Cl ⁻ - NH ₄ ⁺	-
Калюткино		21,3 км выше города		5,3 км выше города		9,3 км ниже города	
Показатель	$I(1)$	Показатель	$I(1)$	Показатель	$I(1)$	Показатель	$I(1)$
pH - Fe _{общ}	-	pH - Fe _{общ}	+	pH - Fe _{общ}	+	pH - Fe _{общ}	-
pH - Cu ²⁺	+	pH - Cu ²⁺	+	pH - Cu ²⁺	+	pH - Cu ²⁺	-
pH - Cl ⁻	-	pH - Cl ⁻	-	pH - Cl ⁻	-	pH - Cl ⁻	-
pH - NH ₄ ⁺	-	pH - NH ₄ ⁺	-	pH - NH ₄ ⁺	-	pH - NH ₄ ⁺	-
Fe _{общ} - Cu ²⁺	+	Fe _{общ} - Cu ²⁺	-	Fe _{общ} - Cu ²⁺	-	Fe _{общ} - Cu ²⁺	+
Fe _{общ} - Cl ⁻	+	Fe _{общ} - Cl ⁻	-	Fe _{общ} - Cl ⁻	-	Fe _{общ} - Cl ⁻	-
Fe _{общ} - NH ₄ ⁺	-	Fe _{общ} - NH ₄ ⁺	-	Fe _{общ} - NH ₄ ⁺	-	Fe _{общ} - NH ₄ ⁺	-
Cu ²⁺ - Cl ⁻	+	Cu ²⁺ - Cl ⁻	-	Cu ²⁺ - Cl ⁻	-	Cu ²⁺ - Cl ⁻	-
Cu ²⁺ - NH ₄ ⁺	+	Cu ²⁺ - NH ₄ ⁺	+	Cu ²⁺ - NH ₄ ⁺	+	Cu ²⁺ - NH ₄ ⁺	+
Cl ⁻ - NH ₄ ⁺	-	Cl ⁻ - NH ₄ ⁺	-	Cl ⁻ - NH ₄ ⁺	-	Cl ⁻ - NH ₄ ⁺	-

Например, по результатам анализа теста на коинтеграцию для реки Исеть медь выступает центральным загрязняющим элементом, формирующим устойчивые связи с другими компонентами, особенно на участках в черте и ниже населенных пунктов. Связь меди и железа, нехарактерная для природных процессов, говорит об общем источнике загрязнения, содержащего оба металла, при этом их совместное поведение сохраняется даже на довольно большом расстоянии от промышленных районов.

Таким образом, основное преимущество предложенного комплексного подхода заключается в его способности дать многомерную и достоверную характеристику гидрохимических процессов, преодолевая ограничения, присущие каждому из методов в отдельности и корреляционному анализу в целом. Так, отсутствие причинности по Грейнджеру не исключает наличия устойчивой долгосрочной коинтеграционной связи, а наличие причинности может не подкрепляться долгосроч-

ным равновесием. Это демонстрирует необходимость дифференцированного подхода к управлению качеством воды и открывает перспективы для разработки более точных моделей прогнозирования в рамках геоэкологического мониторинга [7].

Прогнозирование качества воды является критически важной задачей в области геоэкологического мониторинга и управления водными ресурсами. В настоящее время в системе Росгидромета используется методика в соответствии с РД.52.24.755 – 2011. Ее суть состоит в поиске уравнения линейной регрессии, которое наиболее точно характеризует статистическую связь между коррелируемыми признаками (между значениями ингредиента и значениями времени), с использованием 16 видов уравнений. Однако, значения концентраций химических веществ в воде представляют собой сложные временные ряды, характеризующиеся тенденциями, сезонностью и случайными колебаниями, что свидетельствует об их нестационарности. Поэтому в рамках диссертационного исследования была разработана и апробирована **методика прогнозирования колебаний концентраций гидрохимических показателей с использованием моделей класса SARIMA**. Особенностью данного подхода явилось целенаправленное определение параметров данной модели на основе предварительного анализа свойств временных рядов, в частности использования «глубины памяти», установленной по результатам R/S-анализа, в качестве альтернативного параметра сезонности (m) и введении корректирующих переменных на основе DTW [5]. Это позволило перейти от стандартной годичной сезонности ($m = 12$) к индивидуальным для каждого показателя и водного объекта значениям, более адекватно отражающим внутреннюю динамику процессов. Результаты показали, что модели с альтернативной сезонностью, основанной на «глубине памяти» и после корректировки аномальных выбросов с помощью фиктивных переменных по результатам DTW, демонстрируют статистически значимо более высокое качество (коэффициент детерминации R^2 , информационные критерии AIC , BIC) для большинства изучаемых показателей по сравнению со стандартными моделями (табл. 5).

Таблица 5. Оценка моделей SARIMA для гидрохимических показателей воды Исаковского водохранилища в период с 01.01.2020 г. по 31.12.2020 г.

Модель		R^2	AIC	BIC
NH ₄ ⁺	SARIMA (3, 0, 3)(0, 0, 1) ₁₂	0,7	-1252,7	-1218,2
	SARIMA (3, 0, 3)(0, 0, 1) ₄	0,79	-1413,8	-1374,8
pH	SARIMA (0, 1, 1)(0, 1, 1) ₁₂	0,81	-808,8	-793,2
	SARIMA (0, 1, 1)(0, 1, 1) ₃	0,82	-809,8	-794,2
Cl ⁻	SARIMA ((3, 0, 3)(2, 0, 0) ₁₂	0,8	2270,6	2309,6
	SARIMA (3, 0, 3)(2, 0, 0) ₆	0,89	2150,3	2200,9
Fe	SARIMA ((3, 0, 3)(2, 0, 0) ₁₂	0,76	-1728,1	-1704,7
	SARIMA (3, 0, 1)(0, 0, 0) ₂	0,84	-1996,8	-1961,7
Cu	SARIMA ((3, 0, 3)(2, 0, 0) ₁₂	0,86	-3506,7	-3477,4
	SARIMA (0, 1, 2)(2, 1, 2) ₄	0,91	-3710,6	-3679,6

Исследуемые временные ряды на всех трёх водных объектах демонстрируют долгосрочную устойчивость статистических характеристик, что позволяет успешно применять модель SARIMA для прогнозирования. Однако в районах с интенсивной хозяйственной деятельностью (река Исеть) точность и прогнозная сила модели снижается. В связи с этим актуальной задачей становится развитие наблюдательной сети Росгидромета, в частности организация непрерывного мониторинга с увеличенной частотой отбора проб. Это позволит проводить более тщательную предобработку данных: фильтровать аномальные выбросы и сохранять репрезентативные значения, критически важные для построения моделей. Перспективы развития методики связаны не только с улучшением сбора и предварительной обработки данных, но и с применением более сложных моделей, учитывающих экзогенные факторы (SARIMAX). В качестве таких переменных могут выступать гидрологические показатели (расход воды, скорость течения, температура) или данные о антропогенной нагрузке (объёмы и концентрация сбросов).

В четвертой главе гидрохимический временной ряд рассматривается как открытая термодинамическая система, проявляющая незатухающие автоколебания, что свидетельствует о формировании упорядоченных структур.

Так временной ряд может быть описан фазовой траекторией $\vec{C}(C_1, C_2, \dots, C_n)$, где C_n – текущая концентрация вещества в воде. Тогда изменение состояния рассматриваемой подсистемы удовлетворяет сумме дифференциальных уравнений типа:

$$\frac{dc_i}{dt} = F_i(\vec{C}, \vec{B}),$$

где $i = 1, 2, 3 \dots n$, $\vec{B} = (b_1, b_2, \dots, b_n)$ – воздействующие на растворенные вещества вещества внешние факторы, среди которых могут быть пульсации вихреволнового потока, турбулентности и т.д.

Неизвестны аналитические методы решения уравнений данного типа. Однако для того, чтобы получить представление о том, как ведет себя подсистема, достаточно найти контрольные (равновесные) точки, в которых скорость изменения концентрации равна нулю и далее – линеаризовать записанные уравнения вблизи указанных точек. Это позволяет представить поведение растворенных в воде веществ на локальном масштабе, и тем самым приблизительно описать их поведение.

Например, выбранный вектор $\vec{C}^s$ представляет собой стационарное решение i -го вышенаписанного уравнения. Это означает, что $\frac{dc_i^s}{dt} = F_i(\vec{C}^s, \vec{B}) = 0$. Решения последнего уравнения – это как раз контрольные (равновесные) точки. Другие же решения описывают отклонения, которые испытывают концентрации растворенных веществ на некоторую малую величину возмущения $\vec{c}(t)$, так что собственно отклонения равны $\vec{C}(t) = \vec{C}^s + \vec{c}(t)$. Таким образом, разлагая характеристику $F_i(c)$ в ряд по c , и в простейшем случае ограничиваясь линейными членами, найдем, что $\frac{dc_i}{dt} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial F_i}{\partial c_j} \Big|_{\vec{c}=\vec{c}^s} \cdot c_j$. Если для упрощения обозначить сумму $\sum_{j=1}^n \frac{\partial F_i}{\partial c_j} \Big|_{\vec{c}=\vec{c}^s} = \alpha_{ij}$ то нетрудно получить систему линейных уравнений с постоянными коэффициентами $\alpha_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial c_j} \Big|_{\vec{c}=\vec{c}^s}$.

Для нахождения спектра возможных решений представим c как величину e^{pt} и для нахождения спектра возможных значений p воспользуемся собственными значениями матрицы α_{ij} : $\det(\alpha_{ij} - p\delta_{ij}) = 0$. Получено алгебраическое уравнение, позволяющее выяснить уровень устойчивости системы, т.е. вопроса о том, возвращается ли она в исходное состояние после некоторого отклонения. Известно, что если имеется хоть одно решение, действительная часть которого $p > 0$, то особая точка $\vec{C}^s$ неустойчива. Устойчивость этой точки возникает при условии, что для

всех решений $Re\, p < 0$. Траектории в фазовом пространстве вблизи устойчивых особых точек могут представлять собой так называемый фокус. Тогда траектории движения системы приближаются к ней («притягиваются»). В этих случаях временная зависимость $C(t)$ носит колебательный и затухающий характер. Наоборот, колебания усиливаются, если имеются неустойчивые особые точки, вокруг которых траектория движения системы, совершает вращательные движения с возрастающим радиусом («отталкивание»). Наблюдение точек изменения знака p в водных средах позволит прогнозировать бифуркации, – переломные моменты поведения концентраций веществ в воде, что в свою очередь откроет возможность предвидеть и избегать непредсказуемых катастрофических ситуаций.

Противофазное поведение гидрохимических показателей может быть описано **имитационными моделями** с помощью фазовых портретов и простых дифференциальных уравнений. Возьмем два временных ряда А и Б с концентрациями C_A и C_B и удельными (отнесенными к единице массы) объемами v_A и v_B . После вывода уравнений и последующих преобразований получается система уравнений, описывающие взаимное превращение $A \leftrightarrow B$:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_A}{\partial t} = (Qv_{AB} - Qv_{BA}v_A)C_A \\ \frac{\partial C_B}{\partial t} = (QC_Av_{AB}v_B - Qv_{BA})C_B \end{cases}$$

Здесь в круглых скобках представлены характеристики частоты процессов увеличения и уменьшения C_A и C_B , где Q – эффективная скорость обратимого процесса $C_A \leftrightarrow C_B$. Если ввести новые обозначения: $\alpha = Qv_{AB}$, $\beta = Qv_{BA}$, $\gamma = Qv_{BA}v_A$, $\delta = Qv_{AB}v_B$, то приходим к выражению, описывающему простейшую имитационную модель типа:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_A}{\partial t} = \alpha C_A - \gamma C_A C_B \\ \frac{\partial C_B}{\partial t} = \beta C_A C_B - \delta C_B \end{cases}$$

Исследовали результаты ежемесячных измерений содержания загрязняющих воду реке Катунь веществ, все в мг/л, выполненные постом Росгидромета на створе

с. Теректа. Из рисунка 3, для удобства наблюдения построенного в логарифмическом масштабе, видно, что формирование концентрации загрязняющих воду веществ достаточно неустойчиво.

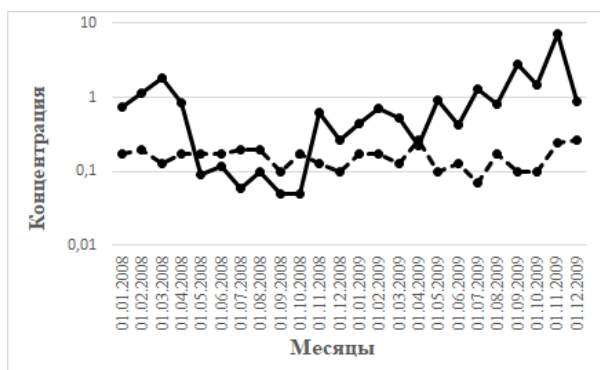


Рис. 3. Результаты ежемесячных измерений концентрации хлоридов (пунктирная линия) и аммония (сплошная линия) в 2008-2009 гг на створе Теректа реки Катунь

Колебания концентрации веществ в ряде случаев оказались синхронными (например, в августе и сентябре 2008 г.) или асинхронными, в противофазе (с мая по октябрь 2009 г.). С помощью Microsoft Excel и языка программирования Python оценивали коэффициенты α , β , γ и δ , после чего получили систему уравнений:

$$\begin{cases} \frac{\partial C_{NH_4}}{\partial t} = (0.028C_{Cl})C_{NH_4} \\ \frac{\partial C_{Cl}}{\partial t} = (0.09 - 0.013C_{NH_4})C_{Cl} \end{cases}$$

Так для пары аммоний-хлориды на створе Теректа реки Тюнгур выявлена устойчивая отрицательная корреляционная связь – коэффициент парной корреляции Пирсона $r = -0.68$. (рис. 4).

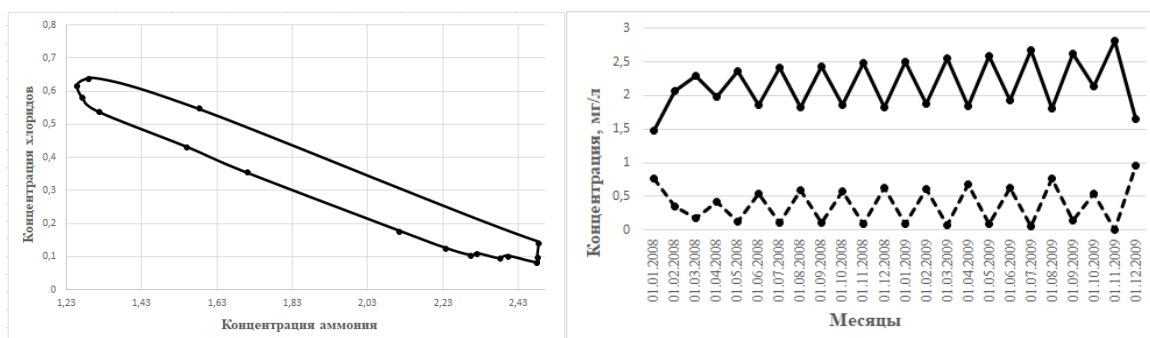


Рис. 4. Система «аммоний – хлориды» в створе Теректа реки Катунь: слева – фазовый портрет; справа – изменение по времени C_{Cl} (пунктирная линия) и C_{NH_4} (сплошная линия) в логарифмическом масштабе

Хорошо заметно на левом рисунке, что в пространстве C_{NH_4} и C_{Cl} эллипс, образующий фазовый портрет, практически сплюснут ($\varepsilon \rightarrow 1$), вследствие чего изменения концентраций веществ происходят синхронно в противофазе, как это видно из правого рисунка. Это указывает на стремление системы к динамическому равновесию. Хлориды считаются консервативным компонентом, поэтому вопрос о том, означает ли обнаруженная взаимосвязь прямое или опосредованное участие хлорид-иона и катиона аммония в общем биогеохимическом цикле, подлежит дальнейшему изучению [3].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В диссертации, представляющей собой научно-квалификационную работу, на основе выполненных автором теоретических и экспериментальных исследований решена задача по применению новых подходов для выявления скрытых закономерностей и элементов упорядоченности в гидрохимических временных рядах более информативной оценки качества воды.

Основные выводы и рекомендации, полученные автором:

1. Установлено, что временные ряды гидрохимических показателей характеризуются внутренними самоповторяющимися циклами и эффектом долговременной памяти, выявляемыми методами нелинейной статистики. Применение аппроксимации рядами Фурье и R/S-анализа, позволило формализовать скрытую периодичность и фрактальную структуру рядов, а также подтвердить наличие детерминированной составляющей в динамике изменения временных рядов.
2. Статистическая однородность данных гидрохимических показателей хорошо сохраняется на малых расстояниях между створами и на больших расстояниях в случае их расположения вдали от промышленных районов.
3. Использование метода динамической трансформации (DTW-анализ) позволило не только более точно установить однородность данных, но также визуализировать зоны неоднородности, обусловленным внешними антропогенными воздействиями.

4. Последовательное использование тестов на причинность и коинтеграцию позволило установить направленное влияние одного временного ряда на другой, обнаружить наличие устойчивых связей между гидрохимическими временными рядами и выявить общие источники загрязнения, что может повысить точность оценки качества вод в рамках геоэкологического мониторинга.

5. Предложена модификация SARIMA-моделей с параметром сезонности, равным «глубине памяти» (по R/S-анализу), что статистически повышает точность прогноза качества вод по сравнению с фиксированной годовой сезонностью.

6. Показана возможность описания гидрохимических временных рядов, проявляющих автоколебания и противофазное поведение, с помощью дифференциальных уравнений и имитационных моделей, что позволит в дальнейшем более детально изучить протекающие в водной среде биогеохимические процессы и обеспечить научную основу для геоэкологического прогнозирования.

СПИСОК РАБОТ, ОБУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

Статьи, опубликованные в рецензируемых научных изданиях, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science, в т. ч. из списка ВАК:

1. Розенталь, О. М. Анализ достоверности оценки химических показателей качества сточных вод / О. М. Розенталь, **Г. Б. Крохин** // Законодательная и прикладная метрология. – 2023. – № 5(185). – С. 31-35.

2. Розенталь, О. М. Гармонический анализ показателей качества речной воды / О. М. Розенталь, **Г. Б. Крохин** // Экологические системы и приборы. – 2023. – № 11. – С. 3-9. [DOI: 10.25791/esip.11.2023.1408]

3. Розенталь, О. М. Анализ вариабельности концентрации неорганических веществ в речной воде, и возможное влияние на нее биогеохимических процессов / О. М. Розенталь, **Г. Б. Крохин** // Экологические системы и приборы. – 2024. – № 3. – С. 38-45. [DOI: 10.25791/esip.3.2024.1438]

4. Розенталь, О. М. Гидрохимическая динамика речного потока горной реки (на примере р. Катунь) / О. М. Розенталь, **Г. Б. Крохин** // Экология и промышленность России. – 2025. – Т. 29, № 1. – С. 59-65. [DOI: 10.18412/1816-0395-2025-1-59-65]

5. Розенталь, О. М. Хемометрический подход к оценке состава вод Исаковского водохранилища / О. М. Розенталь, **Г. Б. Крохин** // Химия в интересах устойчивого развития. – 2025. – Т. 33, № 3. – С. 373-382. [DOI: 10.15372/KhUR2025662]

6. **Крохин, Г. Б.** Наследование состава и свойств воды речного потока / Г. Б. Крохин, О. М. Розенталь // Экология промышленного производства. – 2025. – № 2(130). – С. 12-17. [DOI: 10.52190/2073-2589_2025_2_12]

7. Н. Д. Дубов, **Г. Б. Крохин**, О. М. Розенталь Влияние характеристик состава подземного сброса на качество воды Москвы-реки / Н. Д. Дубов, Г. Б. Крохин, О. М. Розенталь // Водное хозяйство России: проблемы, технологии, управление. – 2025. № 5. – С. 43-58. [DOI: 10.35567/1999-4508-2025-5-23-38]