

Научная статья

УДК 502/504

DOI: 10.15372/ChUR2025662

EDN: HTFDIY

Хемометрический подход к оценке состава вод Исаковского водохранилища

О. М. РОЗЕНТАЛЬ¹ , Г. Б. КРОХИН^{1,2}

¹Институт водных проблем РАН, Москва, Россия

²МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия

E-mail: omro3@yandex.ru[✉], kgb.9@yandex.ru

Аннотация

Эффективность охраны и рационального использования водных ресурсов понижается из-за трудностей оценки их качества в условиях непрерывно меняющихся контролируемых показателей и уникальности такой изменчивости. Рассмотрена возможность решения возникающих проблем путем применения многомерных статистических методов контроля, распространенных при решении задач хемометрики. На примере анализа вод Исаковского водохранилища (Луганская Народная Республика) было обнаружено влияние годовых пиков некоторых загрязняющих веществ на повышенную волатильность исследованных временных рядов. А двойные контрольные карты Шухарта и тесты на коинтеграцию позволили выявить периоды состояния статистической стабильности процесса и сделать предположение об активном вовлечении загрязняющих воду веществ в физико-химико-биологические процессы. В частности, обнаружено существование стационарных линейных комбинаций ряда нестационарных (интегрированных) временных рядов контролируемых показателей. Полученные на примере исследования конкретного водоема результаты показывают, что методы хемометрики открывают возможности получения информации для более глубокого понимания уникальных процессов, происходящих в водных объектах. Это позволит решить одну из главных задач водно-экологического управления – достижение баланса между потребностями водопользователей и возможностью воспроизводства водных ресурсов путем принятия оптимальных водохозяйственных решений в зависимости от текущей ситуации.

Ключевые слова: хемометрика, гидрохимические ряды данных, показатели качества воды, карты Шухарта, коинтеграция

Финансирование: работа выполнена в рамках государственного задания Института водных проблем РАН (тема № FMWZ-2025-0002).

Для цитирования: Розенталь О. М., Крохин Г. Б. Хемометрический подход к оценке состава вод Исаковского водохранилища // Химия в интересах устойчивого развития. 2025. Т. 33, № 3. С. 373–382. DOI: 10.15372/ChUR2025662. EDN: HTFDIY.

Original article

Chemometric approach to the assessment of water composition in the Isakovskoye Reservoir

O. M. ROZENTAL¹ , G. B. KROKHIN^{1,2}¹*Institute of Water Problems, Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia*²*MIREA – Russian Technological University, Moscow, Russia**E-mail: omro3@yandex.ru* , *kgb.9@yandex.ru*

Abstract

The effectiveness of protection and rational use of water resources is reduced due to the difficulties of assessing their quality under the conditions of continuously changing controlled indicators and the uniqueness of such variability. The possibility of solving the arising problems by applying multivariate statistical methods of control, which are common in solving chemometric problems, is considered. By the example of the analysis of the Isakovskoye Reservoir waters (Lugansk People's Republic), the influence of annual peaks of some pollutants on the increased volatility of the investigated time series was found. The double Schuchart control charts and cointegration tests allowed us to identify the periods of statistical stability of the process and to make an assumption about the active involvement of water pollutants in physical-chemical-biological processes. In particular, the existence of stationary linear combinations of a number of non-stationary (integrated) time series of controlled indicators has been found. The results obtained in the case study of a particular water body show that the methods of chemometrics offer opportunities to obtain the information for deeper understanding of the unique processes occurring in water bodies. This will make it possible to solve one of the main tasks of water-environmental management – to achieve a balance between the needs of water users and the possibility of water resources reproduction by taking optimal water management decisions depending on the current situation.

Keywords: chemometrics, hydrochemical data series, water quality indicators, Schuchart charts, cointegration

ВВЕДЕНИЕ

Уникальные физические и химические свойства природных вод, непостоянство их состава и свойств создают сложности нормативно-правового водохозяйственного регулирования [1, 2]. Решение проблемы обычно связывают с необходимостью развития и модернизации государственной наблюдательной сети (ГНС) [3] и намного реже – с задачей полноценного анализа результатов, получаемых ГНС, вместо чего официальными документами (например, [4]) приводится концентрированная информация, отличающаяся априорной неопределенностью [5]. Представляется недостаточным одно только увеличение объема измерительной информации без развития методологии исследования данных гид-

рометеорологических наблюдений, статистического анализа неоднородных и нестационарных временных гидрохимических рядов, поиска необходимых в отраслях экономики закономерностей периодических и непериодических (случайных) изменений контролируемых показателей воды.

Природная вода является многомерной неравновесной системой, ежемесячно, ежесуточно и ежечасно изменяющей свои состав и свойства на каждом наблюдательном створе. Для выяснения закономерностей такой изменчивости необходимо обратиться к анализу первичных данных ГНС методами хемометрики, описанными в обзорах [6–12], изложенными в учебных пособиях [13, 14], ранее использованными в отдельных водно-экологических исследованиях [15–23],

и исследовать некоторые особенности формирования химического состава объектов, провести проверки гипотез и прогнозирования.

Для иллюстрации возможностей хемометрического подхода были использованы результаты ежедневных измерений состава и свойств воды Исаковского водохранилища (Луганская Народная Республика) – основного источника воды для хозяйственной деятельности населения и промышленных предприятий этого региона. Предварительный анализ variability концентрации загрязняющих воду веществ в данном объекте позволил сделать предположение об их полном или частичном участии в протекающих здесь физико-химико-биологических процессах в качестве продуктов/реагентов [24].

Цель работы – на примере Исаковского водохранилища с помощью методов хемометрики исследовать закономерности формирования состава и свойств природной воды для выбора оптимального режима водопользования.

ОБЪЕКТ ИССЛЕДОВАНИЯ

Для настоящего исследования использовались результаты ежесуточных измерений качества воды Исаковского водохранилища в 2014–2020 гг., полученные аккредитованной лабораторией Алчевской городской санитарно-эпидемиологической станции. Некоторое представление об объекте исследования дает рис. 1. Хорошо заметно влияние температуры на состав воды, что в сочетании с ежесуточной изменчивостью, подлежит дальнейшему исследованию.

МЕТОДИКИ ИССЛЕДОВАНИЯ

Хемометрический подход

Из представленных на рис. 1 данных видно, что контролируемым показателям качества воды свойственна не только изменчивость, но и меняющийся направление тренд, для жесткости и щелочности наиболее отчетливо проявляющийся в годовой цикличности, а для других показателей – также и во внутригодовой. Суточная изменчивость сопровождается структурными сдвигами, свидетельствующими о существовании сравнительно редких событий, скачкообразно изменяющих исследуемые характеристики воды и влияющих на тренд рядов данных. Всем показателям свойственна кластеризация

волатильности, в частности, хорошо выраженная для металлов.

С целью спецификации модели в табл. 1 приведены результаты исследования временных рядов каждого контролируемого показателя в 2014–2020 гг. и значения их предельно допустимой концентрации (ПДК) [25].

Как следует из представленных данных, нормируемые показатели в среднем соответствуют установленным требованиям (столбцы 3, 5), хотя они нарушаются для меди, а в отдельные моменты времени – для аммония, нитритов, железа (столбец 6), вероятно, по причинам неудовлетворительной очистки сточных вод. О том же свидетельствуют повышенные коэффициенты вариации для этих веществ (столбец 7), а также положительная асимметрия (столбец 8), означающая “хвост” в правой части распределения. Концентрациям нитритов, хлоридов и железа, кроме того, свойственны высокие (относительно нормального распределения) выбросы (столбец 9), указывающие на образование “толстых” хвостов распределений. Такой эксцесс подтверждает существование кластеризации волатильности, а также свидетельствует о неслучайности и длинной памяти временных рядов [26]. Очевидно также, что данные по всем показателям не имеют нормального распределения. Это подтверждается повышенной статистикой теста Жарке–Бера (столбец 10).

Уточненная и дополнительная информация выполнена далее средствами хемометрического подхода, прежде всего, путем выделения в рядах данных сезонной и случайной составляющих.

Периодограммы

Были проанализированы амплитудно-частотные характеристики массивов данных [27]. Примеры графиков спектральной плотности приведены на рис. 2, где пики на низких частотах свидетельствуют о наличии тренда и несезонной цикличности обращения загрязняющих воду веществ при их кругообороте в природном водном объекте. Такой результат указывает на активное протекание физико-химико-биологических процессов, свойственных данному водоему с его многочисленными видами фитопланктона [24]. Характеристики периодограмм представлены в табл. 2.

Высокий пик означает, что соответствующая ему частота играет повышенную роль в описании соответствующего временного ряда, так как здесь сосредоточена большая часть мощности

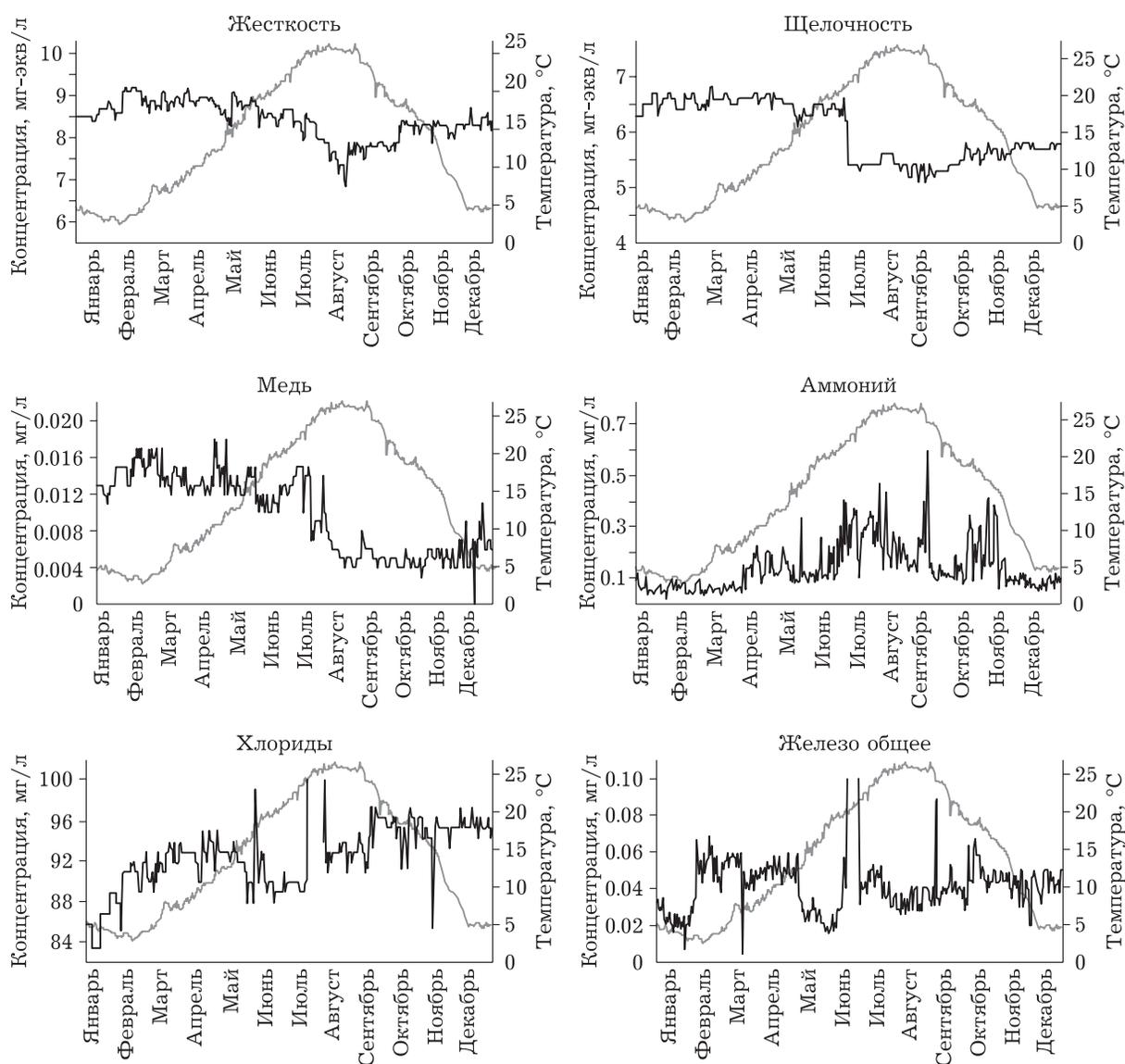


Рис. 1. Динамика показателей качества воды (черная линия) и ее температура (серая линия) в 2020 г.

ТАБЛИЦА 1

Описательная статистика контролируемых показателей

Показатель	КО	ПДК	Единицы измерения	Среднее значение	Max	C_p	Ассиметрия	Эксцесс	J-B test
pH	-	6.5–8.5	-	7.93	8.58	0.04	-0.22	-1.25	94.35
Мутность	-	-	мг/л	2.003	3.96	0.32	0.19	-0.41	10.88
Жесткость	-	-	мг-экв/л	8.43	9.2	0.05	-0.57	-0.01	5.02
Щелочность	-	-	мг-экв/л	6.01	6.8	0.09	-0.08	-1.66	168.78
Медь	3	0.001	мг/л	0.009	0.02	0.44	-0.07	-1.48	133.87
Аммоний	4	0.5	мг/л	0.14	0.59	0.64	1.49	2.39	381.59
Нитриты	2	0.08	мг/л	0.03	0.38	2.33	3.40	11.47	8184
Хлориды	4	300	мг/л	94.94	171.7	0.14	4.66	21.57	28634
Железо	4	0.1	мг/л	0.04	0.40	1.00	6.45	48.80	145546

Примечания. 1. КО – класс опасности; ПДК – предельно допустимая концентрация; Max – максимальное значение; C_p – коэффициент вариации; J-B test – статистический тест Жарке-Бера, оценивающий вероятность нормального распределения остатков. 2. Прочерк – не нормируется.

сигнала. Таковы 12-месячные пики для щелочности и меди. Для железа эта величина 4-месячная, что, возможно, характеризует периодичность циклов водоотведения. Во всяком случае, интенсивность годового пика для этого металла ослаблена, а 4- и 2-месячные пики сочетаются с такими же вторичными пиками для щелочности и меди. Другие пики, не слишком заметно выделяющиеся из шума, здесь не рассматриваются. Что же касается сезонных составляющих в целом, то знание о них позволяет для органов водного контроля формулировать гипотезы их происхождения, а для водопользователей – корректировать режим водоподготовки.

Контрольные карты Шухарта

Использование контрольных карт Шухарта (ККШ) широко распространено для анализа статистической стабильности экспериментальных результатов [28–30]. Это позволяет избежать ошибочных решений органов управления, контролирующих состав и свойства природной воды. Ошибки возникают, если:

- статистически допустимое повышение концентрации загрязняющих веществ принимается за результат недопустимых внешних воздействий и на этом основании осуществляется широкомасштабная проверка потенциальных предприятий-загрязнителей, дестабилизирующая производства;
- статистически недопустимое повышение концентрации принимается за неизбежную в переменном ряду флуктуацию и специальной проверки не проводится.

Поскольку концентрация загрязняющих воду веществ – непрерывная величина, которая может принимать любое значение в некотором диапазоне, целесообразно использовать ККШ, образованную картами индивидуальных значений (x) и скользящих размахов (mR) (moving range, модуль разности между последовательными значениями контролируемого показателя). Как известно, эта карта двойная и состоит из двух частей: одна – для самих значений процесса, другая – для величины абсолютного значения разности следующих друг за другом данных, т. е. разности первого и второго результата измерений, затем второго и третьего и т. д. Такая ККШ де-факто стала одной из самых распространенных в силу своей простоты. При этом mR -карта, известная также как карта текущих расхождений [31], строится с целью отфильтровать “шумы”, т. е. незначительные колебания концентрации.

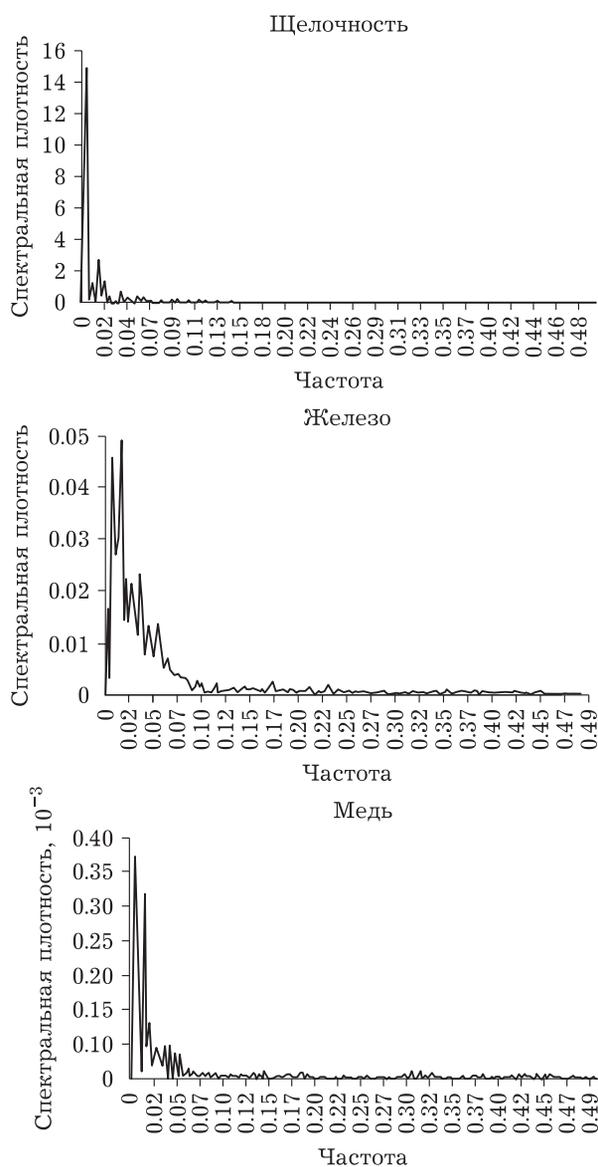


Рис. 2. Периодограммы некоторых контролируемых показателей качества воды в 2014–2020 гг.

В данной работе x -карта характеризует концентрацию загрязняющих воду веществ и позволяет выявить особые причины варибельности данных, а mR -карта – разброс концентрации от замера к замеру.

Построенные по установленным правилам карты (рис. 3) содержат пунктирные линии, отражающие верхний и нижний контрольные пределы, из которых последний может совпадать или быть ниже оси абсцисс, и тогда он не приводится. Сплошная линия на картах равна среднему арифметическому по всем показанным данным. Смысл этих линий на ККШ заключается в установлении зоны, внутри которой процесс является статистически стабильным, т. е. предсказуемым и управляемым.

ТАБЛИЦА 2

Характеристики периодограмм контролируемых показателей

Параметр	Контролируемый показатель	Значение									
		11.03	2.757	1.076	0.894	0.565	0.449	0.421	0.391	0.313	0.230
Высота пика	Щелочность	0.052	0.037	0.021	0.011	0.007	0.005	0.005	0.005	0.004	0.004
	Железо	0.00145	0.00023	0.00015	0.00012	0.00011	0.00011	0.00010	0.00007	0.00007	0.00006
	Медь	0.002	0.008	0.005	0.016	0.010	0.021	0.013	0.038	0.027	0.043
Частота (в шкале 0–0.5)	Щелочность	0.008	0.003	0.005	0.016	0.014	0.041	0.019	0.027	0.052	0.036
	Железо	0.002	0.016	0.032	0.010	0.021	0.008	0.030	0.041	0.024	0.038
	Медь	364	121.3	182	60.66	91	45.5	72.8	26	36.4	22.75
Периоды (примерно), сут	Щелочность	121	364	182	60.66	72.8	24.26	52	36.4	19.15	28
	Железо	364	60.66	30.33	91	45	121.3	33	24.26	40.44	26
	Медь										

Из приведенных на рис. 3 данных видно, в какие периоды года система выходит из состояния стабильности. Так, по щелочности это происходит весной и поздней осенью, по железу – преимущественно летом, по меди – периодически весной, в середине лета и в начале зимы, по аммиаку – в конце весны, периодически летом и осенью. Это означает, что в соответствующие моменты времени водный объект оказывался под значительным внешним, например, антропогенным воздействием. Величины на карте текущих расхождений в данных случаях в основном совпадают с величинами на карте индивидуальных значений, хотя в принципе это не обязательно.

Подобные карты нетрудно построить также и по любым контролируемым показателям, что обеспечивает режим обоснованного управления водными ресурсами, в том числе идентификации недопустимых внешних воздействий на качество воды, а также прогнозирование ее состава и свойств.

Поиск связей между контролируемыми показателями

Поставленная в подзаголовке задача имеет важнейшее значение для понимания механизма формирования состава и свойств воды, гидрохимического прогнозирования, а также сокращения объема химико-аналитических измерений. К сожалению, во многих гидрохимических исследованиях временных рядов такая связь обнаруживается ошибочно потому, что регрессионные оценки нестационарных рядов и соответствующие им отношения отклонения оценочного значения параметра от гипотетического значения к его стандартной ошибке не имеют смысла, если расходится t -статистика. При этом

кажущиеся характеристики корреляции являются результатом случайной реализации данных.

Выявление долгосрочных соотношений между показателями состава и свойств воды требует выяснения вопроса о том, существует ли стационарная линейная комбинация временных рядов данных. Только при положительном ответе имеется искомая взаимозависимость, означающая их совместную вариабельность. Другими словами, в этом случае ряды коинтегрированы, т. е. взаимно связаны некоторой линейной комбинацией, описывающей стационарный процесс, при котором оценки наименьших квадратов состоятельны.

Распространенной методологией исследования этой взаимосвязи является тестирование на единичный корень каждого временного ряда и остатков. В соответствии с методом Энгла–Гренджера [32] временной ряд является коинтегрированным на уровне порядка k и обозначается $x_t \sim I(k)$, если он и разности его остатков порядка $k-1$ включительно нестационарны, а разность остатков порядка k стационарна. При этом процедура исследования включает анализ регрессии одной переменной (X) на другую (Y), если оба регрессора относятся к типу $I(1)$.

Отметим, что принято считать временные ряды X_t и Y_t коинтегрированными при условии, что остатки регрессии являются стационарными даже при отсутствии одной из взаимных связей [32].

Исследования, выполненные в прикладном программном пакете Gretl, позволили получить результаты, приведенные в табл. 3, где наличие коинтеграции отмечено знаком “+”, а отсутствие – знаком “–”.

Как видно, большинство рядов данных коинтегрированы между собой. Это означает, что, несмотря на кажущийся индивидуальный ха-

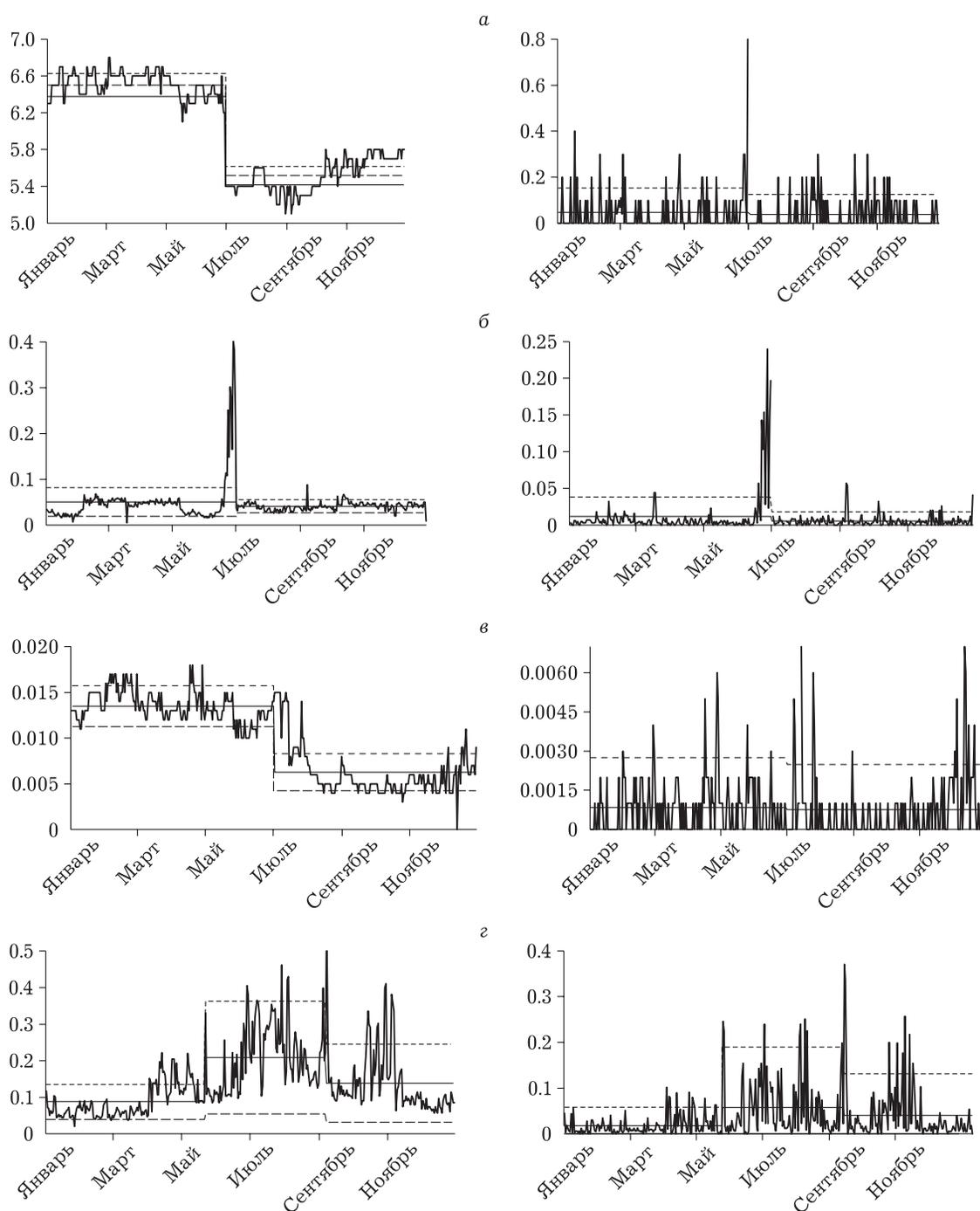


Рис. 3. Двойные контрольные карты Шухарта: x -карта (слева) и mR -карта (справа) для ежедневных измерений контролируемых показателей: щелочности воды (а), концентрации железа (б), меди (в) и аммиака (z) в 2020 г. Пунктирные линии на картах – верхний и нижний контрольные пределы, сплошные линии – среднее арифметическое использованных данных.

рактически изменение концентраций химических веществ в воде, существует долгосрочная зависимость между ними, которая, вполне вероятно, отражает протекание некоторого совместного физико-химико-биологического процесса.

Дополнительные исследования были выполнены с использованием теста Йохансена [33, 34],

допускающего в отличие от теста Энгла–Грейнджера обнаружение более одной коинтеграционной взаимосвязи.

Такая проверка носит асимптотический характер, но ее результат для рассматриваемой выборки является достоверным, поскольку последняя достаточно большого размера.

ТАБЛИЦА 3

Результаты теста на коинтеграцию рядов за период 2014–2020 г. методом Энгла–Гренджера

Показатель	$I(1)$	Результат в целом
$\Pi_{\text{общ}} - \text{°Ж}$	+	+
$\text{°Ж} - \Pi_{\text{общ}}$	+	
$\Pi_{\text{общ}} - \text{Fe}$	–	+
$\text{Fe} - \Pi_{\text{общ}}$	+	
$\Pi_{\text{общ}} - \text{Cl}$	–	+
$\text{Cl} - \Pi_{\text{общ}}$	+	
$\Pi_{\text{общ}} - \text{Cu}$	–	+
$\text{Cu} - \Pi_{\text{общ}}$	+	
$\Pi_{\text{общ}} - \text{NH}_4$	–	–
$\text{NH}_4 - \Pi_{\text{общ}}$	–	
$\text{°Ж} - \text{Fe}$	–	+
$\text{Fe} - \text{°Ж}$	+	
$\text{°Ж} - \text{Cl}$	–	+
$\text{Cl} - \text{°Ж}$	+	
$\text{°Ж} - \text{Cu}$	+	+
$\text{Cu} - \text{°Ж}$	+	
$\text{°Ж} - \text{NH}_4$	–	–
$\text{NH}_4 - \text{°Ж}$	–	
$\text{Fe} - \text{Cl}$	+	+
$\text{Cl} - \text{Fe}$	+	
$\text{Fe} - \text{Cu}$	+	+
$\text{Cu} - \text{Fe}$	–	
$\text{Fe} - \text{NH}_4$	+	+
$\text{NH}_4 - \text{Fe}$	–	
$\text{Cl} - \text{Cu}$	+	+
$\text{Cu} - \text{Cl}$	–	
$\text{Cl} - \text{NH}_4$	+	+
$\text{NH}_4 - \text{Cl}$	–	
$\text{Cu} - \text{NH}_4$	–	–
$\text{NH}_4 - \text{Cu}$	–	

Примечание. 1. $\Pi_{\text{общ}}$ – общая щелочность; °Ж – жесткость.
2. Влияющие факторы отмечены полужирным шрифтом.

Пусть $I(1)$ ряды X_{1t} и X_{2t} в совокупности образуют векторный ряд, который можно представить в виде $X_t = \mu + A_1 X_{t-1} + \dots + A_p X_{t-p} + \varepsilon_t$, где A_p – матрицы коэффициентов для каждого лага, а ε_t – многомерный гауссовский шум со средним нулевым значением.

Ранг матрицы A_p задается r , и тест Йохансена последовательно проверяет, равен ли этот ранг 0 или 1, вплоть до $r = n - 1$, где n – количество тестируемых временных рядов.

При этом:

1) если $r = 0$, то ряды X_{1t} и X_{2t} не коинтегрированы;

ТАБЛИЦА 4

Результаты теста Йохансена на коинтеграцию (количество уравнений = 2, порядок лага = 7)

Ранг	Собственное значение	Тест на след матрицы	L_{max}
0	0.045106	17.565 (0.0224)	16.523 (0.0196)
1	0.0029051	1.0415 (0.3075)	1.0415 (0.3075)

Примечания. 1. L_{max} – максимальное число матрицы.
2. В скобках указаны p -значения.

ТАБЛИЦА 5

Результаты теста на коинтеграцию временного ряда за период 2014–2020 гг.

Показатель	$I(1)$
$\Pi_{\text{общ}} - \text{°Ж}$	+
$\Pi_{\text{общ}} - \text{Fe}$	+
$\Pi_{\text{общ}} - \text{Cl}$	+
$\Pi_{\text{общ}} - \text{Cu}$	+
$\Pi_{\text{общ}} - \text{NH}_4$	–
$\text{°Ж} - \text{Fe}$	+
$\text{°Ж} - \text{Cl}$	+
$\text{°Ж} - \text{Cu}$	+
$\text{°Ж} - \text{NH}_4$	–
$\text{Fe} - \text{Cl}$	+
$\text{Fe} - \text{Cu}$	+
$\text{Fe} - \text{NH}_4$	+
$\text{Cl} - \text{Cu}$	+
$\text{Cl} - \text{NH}_4$	+
$\text{Cu} - \text{NH}_4$	–

Примечание. $\Pi_{\text{общ}}$ – общая щелочность; °Ж – жесткость.

2) если $r = 1$, то это соответствует коинтегрированной VAR (ряды X_{1t} и $X_{2t} \sim I(1)$ коинтегрированы).

В табл. 4 представлены результаты при проверке на коинтеграцию временных рядов щелочности ($\Pi_{\text{общ}}$) и жесткости (°Ж) в период с 2014 по 2020 гг. Видно, что нулевая гипотеза о том, что ранг матрицы равен 0, отвергается. Поэтому принимается гипотеза о том, что этот ранг равен 1, и временные ряды коинтегрированы [34].

В сводной табл. 5 представлены результаты теста на коинтеграцию за весь период наблюдений с 2014 по 2020 гг. Результаты практически во всех случаях совпадают с полученными при использовании метода Энгла–Гренджера. Любопытно, однако, что при тестировании данных по каждому отдельному году результаты тестов Йохансена совпали только в 85 % случаев, возможно, из-за недостаточного объема данных,

снижающих достоверность проверки, имеющей, как указано выше, асимптотический характер.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Хемометрический анализ временных гидрохимических рядов позволяет получить важную в отраслях экономики и управления информацию о закономерностях периодического и непериодического (случайного) изменения состава и свойств природной воды. В работе продемонстрированы возможности такого анализа на примере Луганского водохранилища. Показано для этого водного объекта, в частности, что повышенную роль в изменчивости временного ряда играют годовые пики для щелочности и концентрации меди, а 4-месячные пики – для железа. Хорошо заметны также вторичные 4- и 2-месячные пики для целого ряда контролируемых показателей. С использованием двойных контрольных карт Шухарта ($x-mR$) установлена возможность наблюдения периодов, в которые система может выйти из состояния статистической стабильности. Так, в 2020 г. по щелочности это происходит весной и поздней осенью, по железу – преимущественно летом, по меди – периодически весной, в середине лета и в начале зимы, по аммиаку – в конце весны, периодически летом и осенью. Это означает, что в соответствующие моменты времени водный объект оказывался под внешним, например, антропогенным воздействием.

Обнаружено, что изменение (повышение или понижение) пар контролируемых показателей часто коррелирует. Результат получен с использованием коинтеграции методом Энгла–Гренджера и подтвержден с помощью теста Йохансена. Это означает, что, несмотря на кажущийся стохастический характер пульсаций концентраций химических веществ в воде, существует долгосрочная зависимость между ними, которая, возможно, отражает протекание некоторых совместных физико-химико-биологических процессов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Хемометрический анализ может повысить эффективность работы водопользователей, сети постов Росгидромета и отраслей гидробиологии. Первые смогут применять сведения об амплитудно-частотных характеристиках состава и свойств воды, риске выхода из состояния стабильности; вторые получают возможность огра-

ничения количества контролируемых показателей путем учета их стационарной линейной комбинации; у третьих появится дополнительный инструмент анализа физико-химико-биологических процессов, свойственных конкретному водному объекту. Конечно, точность выводов неизбежно определяется наличием и качеством имеющейся статистической информации, однако в любом случае универсальность и открытость хемометрической методики позволяют использовать ее для изучения гидрохимических процессов с целью достижения баланса между потребностями водопользователей и возможностью воспроизводства водных ресурсов.

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

1. Болгов М. В., Веницианов Е. В., Шашков С. Н. О проблемах развития нормативно-методической базы управления водными ресурсами и водопользованием в Российской Федерации // Водное хоз-во России: проблемы, технологии, управление. 2022. № 2. С. 8–21.
2. РД 52.24.643-2002. Метод комплексной оценки степени загрязненности поверхностных вод по гидрохимическим показателям. СПб.: Гидрометиониздат, 2003. 50 с.
3. Кучеренко О. Е., Аксянов Т. М., Яковлева Т. И. Современное состояние и перспективы развития гидрологической сети Росгидромета // Гидрометеорология и экология: науч. достижения и перспективы развития: труды 2-й Всерос. конф., Санкт-Петербург, 19–20 дек. 2018 г. СПб.: Химиздат, 2018. С. 385–388.
4. Государственный доклад “О состоянии и использовании минерально-сырьевых ресурсов Российской Федерации в 2020 году”. М., 2021. 569 с. URL: https://www.mnr.gov.ru/docs/o_sostoyanii_ozera_baykal_i_merakh_po_ego_okhrane/gosudarstvennyy_doklad_o_sostoyanii_ozera_baykal_i_merakh_po_ego_okhrane_v_2020_godu/ (дата обращения: 19.07.2024).
5. Розенталь О. М., Шпер В. Л. Разведочный анализ характеристик природных вод // Экол. системы и приборы. 2023. № 3. С. 21–29.
6. Massart D. L., Vandeginste B. G. M., Deming S. N., Michotte Y., Kaufman L. Chemometrics: a Textbook. Amsterdam: Elsevier, 1988. 488 p.
7. Шараф М. А., Иллман Д. Л., Ковальски Б. Р. Хемометрика. Л.: Химия, 1989. 269 с.
8. Brereton R. G. Chemometrics: Data Analysis for the Laboratory and Chemical Plant. Chichester: Wiley, 2003. 489 p.
9. Родионова О. Е., Померанцев А. Л. Хемометрика: успехи и перспективы // Успехи химии. 2006. Т. 75, № 4. С. 302–321.
10. Geladi P., Esbensen K. Chemometrics, a growing and maturing discipline // Chemom. Intell. Lab. Syst. 1987. No. 7. P. 37–52.
11. De Juan A., Tauler R. Chemometrics applied to unravel multicomponent processes and mixtures: revisiting latest trends in multivariate resolution // Anal. Chim. Acta. 2003. Vol. 500, No. 1–2. P. 195–210.
12. Otto M. Chemometrics: Statistics and Computer Application in Analytical Chemistry. 2nd ed. Weinheim: Wiley, 2007. 400 p.
13. Kramer R. Chemometric Techniques for Quantitative Analysis. New York: Marcel Dekker, 1998. 216 p.

14. Дребущак Т. Н. Введение в хемометрику: практика анализа экспериментальных данных: учеб. пособие. Новосибирск: НГУ, 2011. 88 с.
15. Грановский Ю. В., Маркова Е. В. Хемометрика и экология – вопросы взаимодействия // XV Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, Минск, 24–29 мая 1993 г. Т. 1. Минск: Наука и техника, 1993. С. 275–277.
16. Librando V. Chemometric evaluation of surface water quality at regional level // *Fresenius J. Anal. Chem.* 1991. Vol. 339, No. 9. P. 613–619.
17. Unaeze C. H., Salau R. B., Jacob J. O., Ndamitso M. M., Mohammed A. K. Chemometrics in water quality criteria and appraisal // *International Journal of Research and Innovation in Applied Science.* 2021. Vol. 6, No. 10. P. 43–51.
18. Kumari M., Tripathi S., Pathak V., Tripathi B. D. Chemometric characterization of river water quality // *Environ. Monit. Assess.* 2013. Vol. 185, No. 4. P. 3081–3092.
19. Giridharan L., Venugopal T., Jayaprakash M. Assessment of water quality using chemometric tools: a case study of river Cooum, South India // *Arch. Environ. Contam. Toxicol.* 2009. Vol. 56, No. 4. P. 654–669.
20. Hildebrandt A., Guillamón M., Lacorte S., Tauler R., Barceló D. Impact of pesticides used in agriculture and vineyards to surface and groundwater quality (North Spain) // *Water Res.* 2008. Vol. 42, No. 13. P. 3315–3326.
21. Terrado M., Borrell E., de Campos S., Barceló D., Tauler R. Surface-water-quality indices for the analysis of data generated by automated sampling networks // *TrAC, Trends Anal. Chem.* 2010. Vol. 29, No. 1. P. 40–52.
22. Felipe-Sotelo M., Andrade J. M., Carlosena A., Tauler R. Temporal characterisation of river waters in urban and semi-urban areas using physico-chemical parameters and chemometric methods // *Anal. Chim. Acta.* 2007. Vol. 583, No. 1. P. 128–137.
23. Николаев В. Ф., Колоненкова О. О., Сулайман Б. Ф., Дильмухаметова З. Р., Залальтдинова Н. Д., Ханова Д. Р. Идентификационные карты Куртца–Лорентца в хемометрике водных растворов, органических жидкостей, жидких пищевых продуктов и биологических жидкостей: полярные координаты // *Вестн. технолог. ун-та.* 2020. Т. 23, № 4. С. 81–86.
24. Bakumenko Yu. S., Larina E. G., Rosenthal O. M. Hydrochemical dynamics of waters of the Isakovskiy reservoir // *BIO Web of Conf.* 2024. Vol. 108. Art. 14001.
25. Об утверждении нормативов качества воды водных объектов рыбохозяйственного значения, в том числе нормативов предельно допустимых концентраций вредных веществ в водах водных объектов рыбохозяйственного значения: приказ Минсельхоза России от 13 дек. 2016 г. № 552 (с изм. на 22 авг. 2023 г.). Доступ из электрон. фонда правовых и нормативно-техн. док. “КОДЕКС”. URL: <https://docs.cntd.ru/document/420389120?ysclid=m46hi2dg7z244301372> (дата обращения: 19.07.2024).
26. Peters E. E. *Fractal Market Analysis: Applying Chaos Theory to Investment and Economics.* New York: Wiley, 1994. 336 p.
27. Айфичер Э., Джервис Б. Цифровая обработка сигналов: практ. подход. 2-е изд. М.: Вильямс, 2004. 989 с.
28. ГОСТ Р 50779.42-99. Статистические методы. Контрольные карты Шухарта. М.: Госстандарт, 2004. 32 с.
29. Адлер Ю., Шпер В. Практическое руководство по статистическому управлению процессами. М.: Альпина Паблишер, 2019. 234 с.
30. Тьюки Д. У. Анализ результатов наблюдений: разведочный анализ. М.: Мир, 1981. 693 с.
31. ГОСТ Р ИСО 5725-6-2002. Точность (правильность и прецизионность) методов и результатов измерений. Ч. 6. Использование значений точности на практике. М.: Стандартиформ, 2009. 42 с.
32. Engle R. E., Granger C. W. J. Co-integration and error correction: representation, estimation and testing // *Econometrica.* 1987. Vol. 55, No. 2. P. 251–276.
33. Hänninen R. The law of one price in United Kingdom soft sawnwood imports – a cointegration approach // *Modern Time Series Analysis in Forest Products Markets / J. Abildtrup, F. Helles, P. Holten-Andersen, J. F. Larsen, B. J. Thorsen (Eds.).* Dordrecht: Springer, 1999. P. 55–68.
34. Johansen S. Estimation and hypothesis testing of cointegration vectors in Gaussian vector autoregressive models // *Econometrica.* 1991. Vol. 59, No. 6. P. 1551–1580.

Поступила в редакцию 22.07.2024

Одобрена после рецензирования 16.08.2024

Принята к публикации 30.08.2024