

**В.С. Валиев, Д.В. Иванов, Д.Е. Шамаев,
И.И. Зиганшин, Л.К. Мустафина, Н.В. Шурмина,
О.А. Богданова, Ф.М. Абдуллина**

АНАЛИЗ СТРУКТУРНЫХ СВЯЗЕЙ МЕЖДУ ГИДРОХИМИЧЕСКИМИ ПОКАЗАТЕЛЯМИ РЕЧНОГО СТОКА

В статье на примере реки Казанка с применением методов вероятностной статистики апробирована динамико-стохастическая модель качественного состояния водных объектов, учитывающая пространственно-временные вариации фонового гидрохимического режима. Выделены три ортогональных фактора, репрезентативных при моделировании гидрохимической ситуации в целом, являющихся одновременно структурообразующими при оценке локальных изменчивостей гидрохимических показателей на отдельных участках русла. Первый фактор составляют переменные, которые формируют основную структуру гидрохимического режима: электропроводность, сухой остаток, жесткость, кальций, магний, сульфаты и объем речного стока, при этом периодическая составляющая гидрохимической модели представлена сезонной изменчивостью стока основных ионов. Второй фактор объединяет переменные, отражающие интенсивность протекающих в воде процессов поступления и трансформации органических соединений: перманганатная и бихроматная окисляемость, биохимическое потребление кислорода. Установлена корреляционная связь указанных показателей с цветностью воды, что можно использовать при обобщенной оценке органического загрязнения поверхностных вод. Третий фактор гидрохимической модели – концентрация взвешенных форм тяжелых металлов. Мутность воды детерминирует долю металлов – кадмия, меди, цинка, марганца и железа, мигрирующих в твердой фазе.

В результате проведенного исследования дана оценка вероятности превышений предельно допустимых концентраций загрязняющих веществ. Показано, что их содержание, обусловленное антропогенным воздействием, распределено стохастически, поэтому следует проводить его оценку вероятностными методами, а также раскрывать реальную динамику стохастической системы, позволяя адекватно оценивать сложившуюся в водном объекте экологическую ситуацию

качество вод; гидрохимический режим; факторный анализ; динамико-стохастические модели; река Казанка

В научной литературе, посвященной моделированию гидрохимических и гидрологических процессов, выделяются два основных типа разрабатываемых математических моделей: детерминированные (динамические)¹ и стохастические (имитационные)².

Детерминированные модели предполагают, что существуют и могут быть математически описаны закономерности, однозначно определяющие значения рассматриваемых характеристик водного объекта в зависимости от определенных, задаваемых внешних воздействий. Стохастические модели рассматривают переменные как случайные величины, а их распределение – как распределение случайных величин, либо как случайные процессы стандартизованного типа, параметры которых следует определить по данным наблюдений. Строго говоря, любой процесс, изменяющийся во времени, имеет стохастическую природу. Таким образом, динамику, даже строго детерминированных систем, следует оценивать в вероятностных категориях³.

¹ См.: Кучмент Л.С., Демидов В.Н., Мотовилов Ю.Г. Формирование речного стока. М.: Наука, 1983. 216 с.; Виноградов Ю.Б. Математическое моделирование процессов формирования стока. Л.: Гидрометеиздат, 1988. 312 с.

² См.: Раткович Д.Я., Болгов М.В. Стохастические модели колебаний составляющих водного баланса речного бассейна. М.: ИВП РАН, 1997. 262 с.; Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo Method // J. of the American Statistical Association. 1949. 44, № 247. Pp. 335–341; Peter C. Nonstationary time series analysis and forecasting // Progr. Environ. Sci. 1999. Vol. 1, no. 1. Pp. 3–48.

³ Q.v.: Metropolis N., Ulam S. The Monte Carlo Method // J. of the American Statistical Association. 1949. 44, № 247. Pp. 335–341.

Дальнейшее развитие этих идей привело к созданию гибридных, динамико-стохастических моделей⁴. Такие модели представляют собой поиск и описание детерминированных взаимосвязей зависимых переменных и задаваемых случайным образом независимых переменных с помощью методов вероятностной статистики. Данный подход оправдан во многих случаях оценки естественных процессов, формирующих открытые устойчивые во времени и пространстве системы, обладающие выраженной периодичностью. Бесконечное число воздействующих на систему факторов оправдывает стохастический подход, а ее устойчивое состояние предопределяет детерминированность явлений и процессов, происходящих в ней⁵.

В своей начальной реализации динамико-стохастические модели качественного состояния водных объектов опираются на учет флуктуаций фонового гидрохимического режима⁶. Под гидрохимическим фоном здесь понимается сложившийся в водном объекте устойчивый гидрохимический режим, который формируется в результате выноса веществ с водосборной территории вместе с водным и твердым стоком, а также в результате трансформации веществ при миграции внутри самого водного объекта. Для моделирования фонового режима необходимо выделить как факторы устойчивости, так и факторы изменчивости, регулирующие гидрохимический фон в пространственно-временном отношении. Под устойчивостью в данном случае подразумеваются постоянно действующие факторы, неизменные на каждом конкретном участке водного объекта и формирующие его специфический гидрохимический режим в целом. Факторами изменчивости являются стохастические переменные, непостоянные во времени и пространстве. Определение факторов устойчивости является задачей классификации, включающей выделение детерминированных переменных. С этой задачей хорошо справляется факторный анализ.

Цель исследования заключалась в выявлении особенностей гидрохимического режима водного объекта методами вероятностной статистики на примере реки Казанка – одной из основных рек Предкамья Республики Татарстан.

Река Казанка имеет статус памятника природы регионального значения⁷, впадает в р. Волга (Куйбышевское водохранилище) в районе г. Казани. Протяженность Казанки – 140 км. Река испытывает различную по интенсивности и формам проявления антропогенную нагрузку со стороны промышленных, коммунальных и сельскохозяйственных предприятий, расположенных в ее бассейне.

В течение 2017 года был выполнен гидрохимический мониторинг реки по широкой сети станций, охватывающих участки верхнего, среднего и нижнего течения, дополненный гидрометрической съемкой по ключевым створам. Методика отбора и анализа проб описана нами ранее⁸. Сводная база данных, сформированная по результатам мониторинга, включает 252 записи, что позволяет объективно оценивать масштабы пространственно-временных флуктуаций отдельных показателей качества речных вод, а также выявлять взаимосвязи между изучаемыми параметрами с учетом их изменчивости, обусловленной природными и антропогенными факторами.

Методом главных компонент факторного анализа была проведена классификационная оценка всех гидрохимических и гидрологических показателей, полученных в ходе исследования р. Казанка. В результате выделено три ортогональных фактора, изменчивость которых формирует объясняемую дисперсию всех наблюдаемых параметров в их совокупности. Внутри каждого фактора отобраны параметры с модулем весовых коэффициентов (факторных нагрузок), превышающим 0,7 (см. табл.). Именно эти параметры являются репрезентативными при моделировании гидрохимической ситуации по бассейну р. Казанка в целом, а также являются

⁴ См.: Великанов Н.Л., Наумов В.А., Великанова М.Н. Особенности мониторинга состояния водотоков рыбохозяйственного значения // Вода: химия и экология. 2012. № 3. С. 27–32 ; Gagnon P., Sheedy C., Farenhorst A., McQueen D.A., Cessna A.J., Newlands N.K. A coupled stochastic/deterministic model to estimate the evolution of the risk of water contamination by pesticides across Canada // Integrated Environmental Assessment Management. 2014, Jul. No. 10 (3). Pp. 429–436.

⁵ Q.v.: Solomatine D.P., Dual K.N. Model trees as alternative to neural networks in rainfall runoff modeling // Hydrol. Sci. J. 2003. Vol. 48, no. 3. Pp. 399–411.

⁶ См.: Великанов Н.Л., Наумов В.А., Великанова М.Н. Особенности мониторинга состояния водотоков ... ; Parker G.T., Droste R.L., Rennie C.D. Stochastic calibration of riverine water quality models // Water Environment Research. 2010, Feb. No. 82 (2). Pp. 99–108.

⁷ См.: Государственный реестр особо охраняемых природных территорий в Республике Татарстан. Казань: Идел-Пресс, 2007. 407 с.

⁸ Валиев В.С., Иванов Д.В., Шагидуллин Р.Р., Шамаев Д.Е., Мустафина Л.К., Шурмина Н.В., Абдуллина Ф.М., Богданова О.А., Зиганшин И.И. Оценка вклада загрязняющих веществ в формирование класса загрязненности поверхностных вод // Российский журнал прикладной экологии. 2018. № 3. С. 57–64.

структурообразующими при оценке локальных изменчивостей гидрохимических показателей на конкретных участках реки. Выделенные параметры определяют детерминированную составляющую гидрохимической модели. Наряду с периодической (сезонность) и стохастической (флуктуации всех других переменных) составляющими, они формируют особый, свойственный только для данного водного объекта, гидрохимический режим.

Т а б л и ц а

Результаты факторного анализа гидрохимических показателей р. Казанка

Параметры	Фактор 1	Фактор 2	Фактор 3
Расход воды	- 0,79		
Цветность		0,73	
Мутность			0,71
Электропроводность	- 0,95		
Сухой остаток	- 0,96		
Жесткость	- 0,96		
Ca	- 0,91		
Mg	- 0,79		
Сульфаты	- 0,95		
Окисляемость		0,90	
ХПК		0,82	
БПК ₅		0,70	
Cd _{взв}			0,71
Cu _{взв}			0,78
Zn _{взв}			0,78
Mn _{взв}			0,74
Fe _{взв}			0,82

Первый фактор составляют переменные, характеризующие минерализацию: электропроводность, сухой остаток, жесткость, концентрации кальция, магния, сульфатов, а также объем речного стока, оцениваемый по величине расхода воды. Изменчивость этих параметров формирует основную структуру гидрохимического режима р. Казанка, на которую накладываются все остальные показатели качества вод.

Так, значения общей жесткости изменялись за период наблюдений (январь–декабрь) в широких пределах – от 4,8 до 29,5 ммоль/л, с медианой 14 ммоль/л и квартильным размахом 9,8–17,1 ммоль/л. При этом отмечалось четкое возрастание по руслу реки, с приближением к ее устью, величины жесткости, а ее значения сильно коррелировали со значениями всех переменных первого фактора (рис. 1).

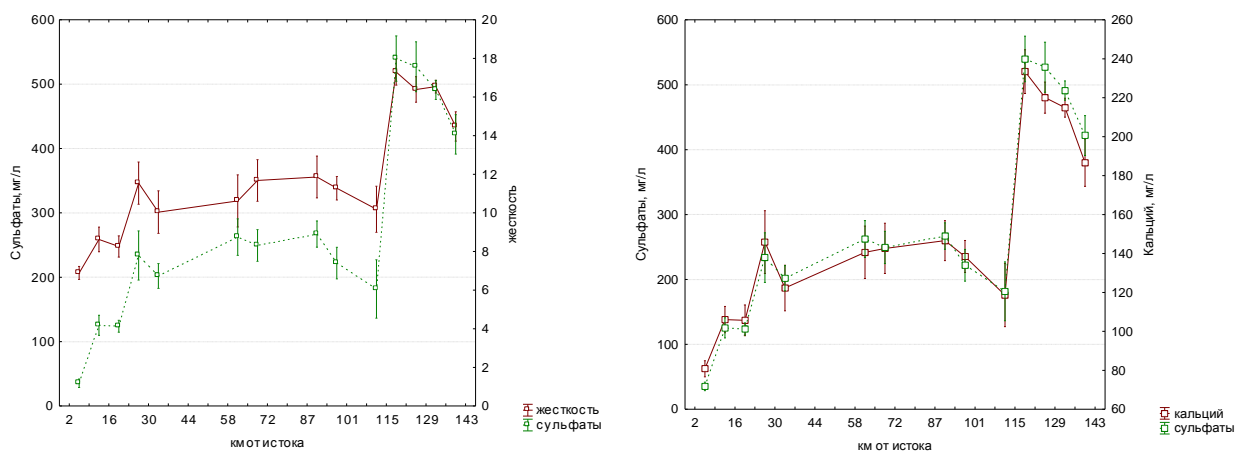


Рис. 1. Изменчивость концентраций сульфатов, кальция и жесткости в р. Казанка в зависимости от расстояния от истока

На рисунке 1 хорошо заметна практически идентичная изменчивость сравниваемых показателей, измеряемых по течению реки, а также резкий скачок их значений, который приходится на место впадения в русло Казанки вод из системы минерализованных Голубых озер (122 км от истока). Этим обстоятельством обусловлено участие в составе первого фактора такого показателя, как расход воды, который формируется за счет жестких подземных вод, дренирующих гипсоносные отложения пермской системы. Взаимосвязь переменных, составляющих первый фактор, с расходом воды в реке, выражается следующими коэффициентами корреляции Пирсона ($p < 0,01$): электропроводность 0,65; сухой остаток 0,64; жесткость 0,58; кальций 0,54; магний 0,53; сульфаты 0,59.

Периодическая составляющая анализируемой гидрохимической модели представлена сезонностью, которая задает воспроизводящиеся из года в год колебания основных ее параметров. Так, сезонную изменчивость фактора минерализации также можно продемонстрировать на примере жесткости воды (рис. 2). Закономерно, что такая же периодичность характерна и для концентраций в воде Казанки кальция, магния, сульфатов, а также для значений сухого остатка.

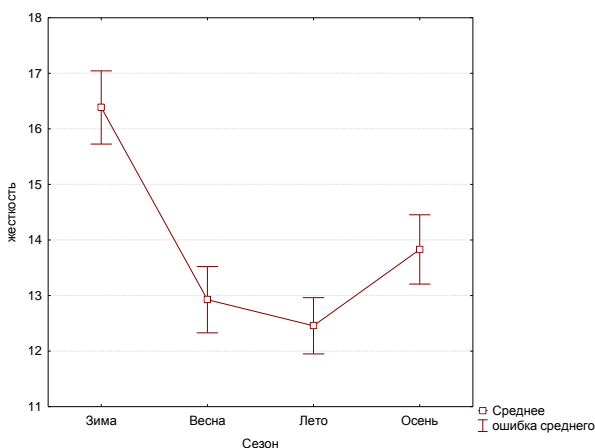


Рис. 2. Сезонная изменчивость жесткости воды в водах р. Казанка

Таким образом, первый фактор гидрохимической модели характеризует общую минерализацию воды в реке и состоит из тесно взаимосвязанных показателей, прямо коррелирующих с величиной речного стока и обладающих ярко выраженной сезонной изменчивостью.

Второй фактор включает переменные, отражающие потребление кислорода и интенсивность протекающих в воде окислительно-восстановительных процессов, а именно: окисляемость (перманганатную и бихроматную) и БПК₅ (табл.).

Известно, что содержание в воде растворенного кислорода зависит от температуры, атмосферного давления, гидрологических условий, количества осадков, минерализации воды, интенсивности процессов фотосинтеза и окисления органического вещества и др. Следовательно, этот чрезвычайно важный показатель качества вод отличается изменчивостью во времени и пространстве, а его значения мультиколлинеарны, поэтому их сложно рассматривать в качестве отдельного фактора. Гораздо надежнее использовать параметры, отражающие процессы окисляемости и потребления кислорода, что и продемонстрировал проведенный анализ, выделив их в отдельный фактор.

В целом для р. Казанка характерен очень нестабильный кислородный режим. Несмотря на то, что в течение года в русловой части среднее содержание растворенного кислорода не опускалось ниже ПДК (рис. 3), достигая максимальных значений в весенний период, а минимальных – зимой, частотный анализ распределения абсолютных значений показал, что концентрации растворенного кислорода ниже ПДК отмечались зимой в 40,6 % наблюдений, весной – в 6,2 %, летом – в 27 %, а осенью – в 12,7 %. При этом среднее содержание кислорода на всем протяжении реки в течение года составило $7,95 \pm 0,15$ мгО₂/л и в 21 % случаев было ниже допустимого.

Перманганатная окисляемость характеризует содержание в воде легкоокисляемых, а бихроматная (ХПК) – трудноокисляемых органических веществ, позволяя судить о степени органического загрязнения вод. Перманганатная окисляемость вод р. Казанка в вегетационный период (май–сентябрь) колебалась в очень широких пределах – от 0,64 до 14,4 мгО₂/л. Медиана оцениваемого ряда составила 2,4 мгО₂/л при квартильном размахе 1,6–4,0 мгО₂/л.

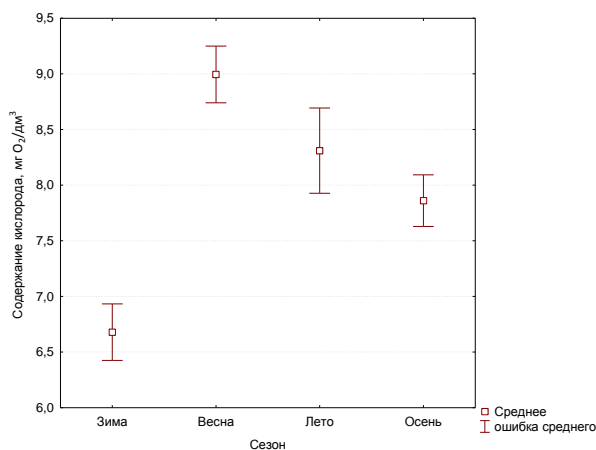


Рис. 3. Среднее содержание растворенного кислорода в водах р. Казанка в зависимости от сезона

Значения ХПК за период наблюдений достигали 61 мгO₂/л при медиане 10,7 мгO₂/л, а значения БПК₅ – 14,2 мгO₂/л при медиане 1,38 мгO₂/л; при этом превышения рыбохозяйственных ПДК для БПК₅ (2 мгO₂/л) отмечены в 30 % случаев.

Перманганатная окисляемость речных вод, так же как и ХПК и БПК₅, подвержена закономерным сезонным колебаниям. Их динамика определяется, с одной стороны, гидрологическим режимом реки и зависящим от него поступлением органических веществ с водосбора, с другой – гидробиологическим режимом, в связи с этим максимальные значения указанных показателей отмечаются в летний период (рис. 4). Таким образом, периодическая составляющая оказывает регулирующее влияние и на второй фактор рассматриваемой модели.

Все переменные, формирующие второй фактор, демонстрируют высокую корреляционную связь с цветностью воды (коэффициент корреляции Пирсона колеблется от 0,52 до 0,86, при уровне значимости $p < 0,01$), что делает последний показатель очень информативным при оценке органического загрязнения р. Казанка.

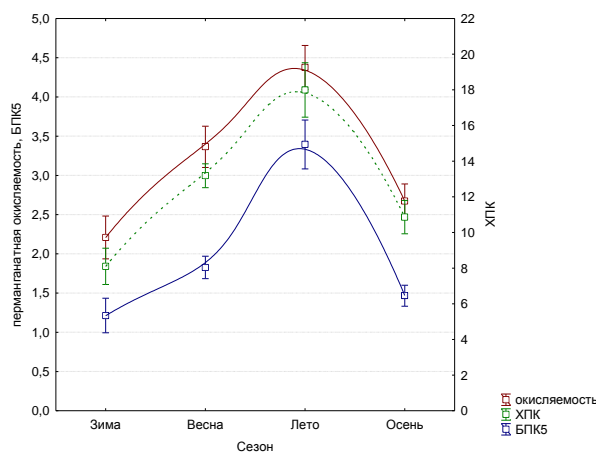


Рис. 4. Сезонная динамика содержания органического вещества в водах р. Казанка

Третьим фактором гидрохимической модели является содержание в воде тяжелых металлов. Четко детерминированное содержание отмечено для кадмия, меди, цинка, марганца и железа, причем особое значение имеет их присутствие в твердой фракции (взвеси) речной воды (см. табл.). Обусловлено это тем, что именно взвеси как органического, так и минерального происхождения реализуют основной путь автохтонного и аллохтонного переноса металлов в водных объектах. На взвешях протекают реакции и транслокационного (межсредового) переноса, а также фиксируется пул того или иного металла, захваченный планктоном. Поэтому доля металлов, содержащихся в твердых фракциях, имеет четкую взаимосвязь с содержанием взвешенных веществ и, особенно, с мутностью воды: Cd 0,23; Cu 0,28; Zn 0,32; Mn 0,41; Fe 0,48 ($p < 0.05$) (рис. 5).

Более того, сезонная периодичность оказывает влияние на распределение взвешенных форм металлов в силу резкого возрастания мутности в весенне-летний период и снижения ее зимой и осенью (рис. 6). Эта закономерность, в свою очередь, обусловлена сезонными изменениями гидрологического и гидробиологического режимов.

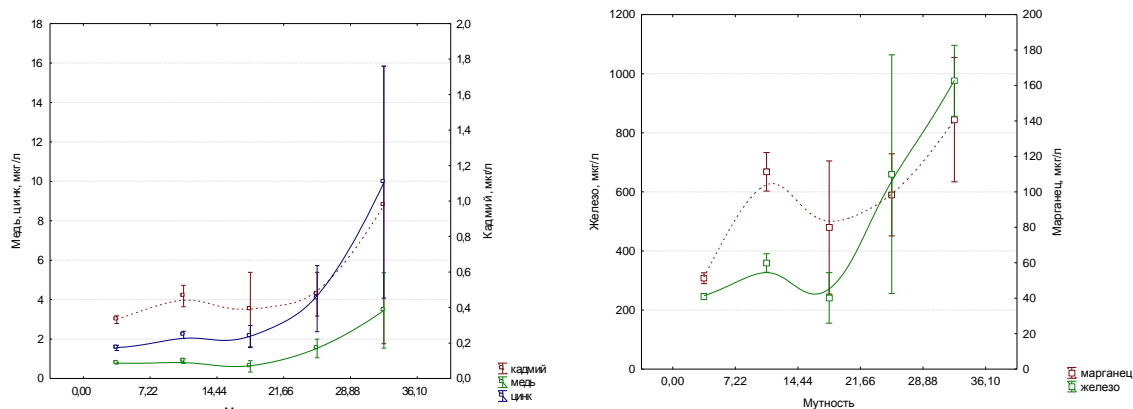


Рис. 5. Возрастание концентраций металлов с

увеличением мутности воды (ед. мутности) за счет увеличения в ней содержания твердых фракций

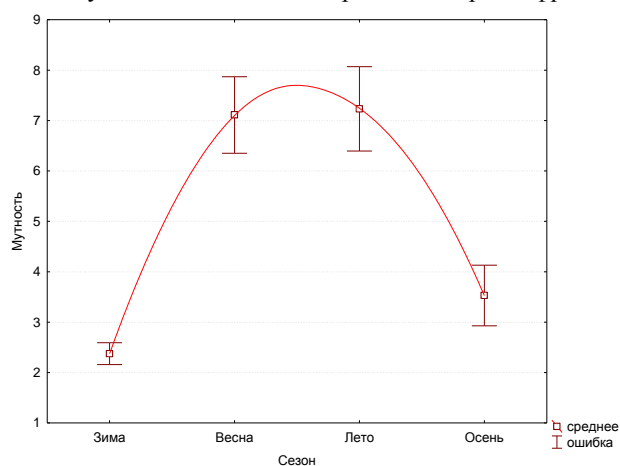


Рис. 6. Сезонная динамика мутности воды в р. Казанка

Таким образом, проведенные исследования позволяют сформировать гидрохимическую модель р. Казанка, в основе которой лежат три ортогональных фактора, состоящих из детерминированных переменных. Структура составляющих модель переменных, динамика значений которых воспроизводится на любом участке реки, выглядит следующим образом:

1. *Жесткость воды.* Детерминирует электропроводность воды, сухой остаток, концентрацию ионов кальция, магния и сульфатов. В целом, по руслу реки, нарастает пропорционально объему речного стока.

2. *Цветность воды.* Детерминирует перманганатную, бихроматную окисляемость и БПК₅, что в свою очередь, указывает на динамику в воде растворенного кислорода и окисляемых органических соединений.

3. *Мутность воды.* Детерминирует долю тяжелых металлов, мигрирующих в твердой фазе. С количеством взвешенных веществ в воде особенно тесно коррелируют концентрации кадмия, меди, цинка, марганца и железа.

Взаимосвязи основной структуры гидрохимического режима наблюдаются на любом, произвольно взятом, участке русла реки. На основную структуру накладываются стохастические переменные, динамика которых формируется за счет воздействия и взаимодействия множества условий, поэтому их содержание хорошо моделируется распределением случайных величин.

К таким переменным относятся концентрации в воде многих загрязняющих веществ: от биогенных элементов до фенолов и нефтепродуктов. Распределение абсолютных значений этих переменных формирует области, которые удобно оценивать вероятностными методами, хотя относительное их содержание часто функционально взаимосвязано. Поскольку нитриты

представляют собой промежуточную ступень в цепи бактериальных процессов окисления аммония до нитратов (нитрификация в аэробных условиях) и, напротив, восстановления нитратов до азота и аммиака (денитрификация при недостатке кислорода), то можно ожидать некоторую закономерность в распределении концентраций нитритов и нитратов, обусловленную содержанием растворенного кислорода.

Заметим, что минимальные концентрации нитратов и максимальные нитритов фиксируются именно в условиях наименьшей обеспеченности кислородом (рис. 7), при этом отмечается четкая сезонная «противофаза» их абсолютных концентраций (рис. 8).

Такие закономерности отражают вторичное преобразование веществ, уже поступивших в водный объект, но не объясняют абсолютное содержание этих веществ, которое может быть результатом как диффузного плоскостного стока загрязненных вод с водосбора, так и залпового сброса загрязняющих веществ со сточными водами.

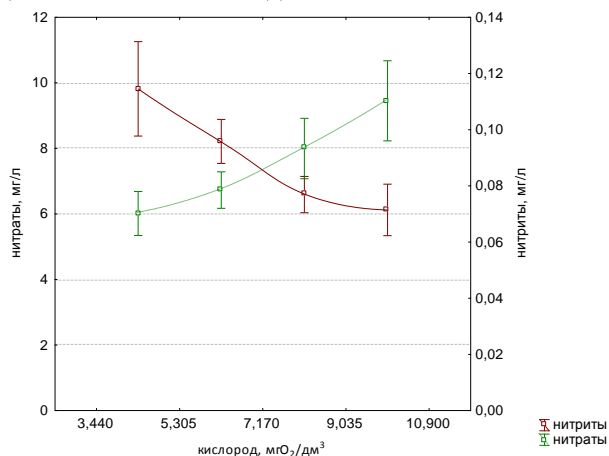


Рис. 7. Изменчивость концентраций нитратов и нитритов в зависимости от обеспеченности воды растворенным кислородом

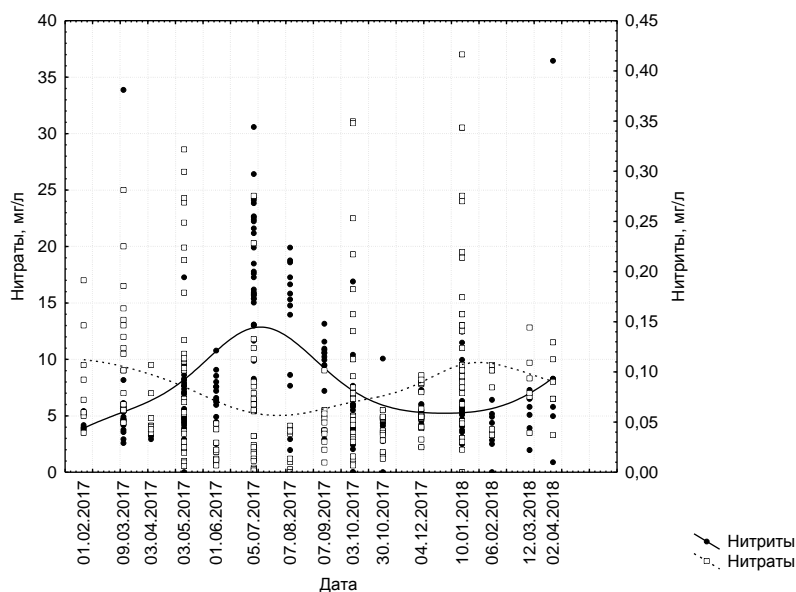


Рис. 8. «Противофаза» изменчивости концентраций нитратов и нитритов в воде в течение года

Для вероятностной оценки распределения содержания загрязняющих веществ нами использовалась методика расчета удельного комбинаторного индекса загрязненности воды (УКИЗВ) ⁹, которая основывается на пороговой модели загрязнения, базирующейся на ПДК.

⁹ Метод комплексной оценки степени загрязненности поверхностных вод по гидрохимическим показателям : РД 52.24.643-2002. Ростов н/Д. : Гидрометеоиздат, 2002. 48 с.

Расчет УКИЗВ на сегодняшний день является приоритетным при оценке качества вод. Классификация качества воды по УКИЗВ позволяет разделять поверхностные воды на 5 классов в зависимости от степени их загрязненности, однако особый интерес для исследователей представляет то, что при расчетах определяется не только кратность превышения ПДК, но и их вероятность.

Для получения комплексных оценок был сформирован «свободный» перечень ингредиентов и показателей качества воды, куда вошли ингредиенты из обязательного перечня (15 показателей), а также все те показатели, по которым отмечались превышения ПДК. В результате проведенных расчетов установлено, что класс качества в р. Казанка, в зависимости от сезона, варьирует от грязной воды 4 «а» класса до очень грязной 4 «г» класса. Наиболее загрязненной вода была в зимний период, а самой чистой – весной (рис. 9).

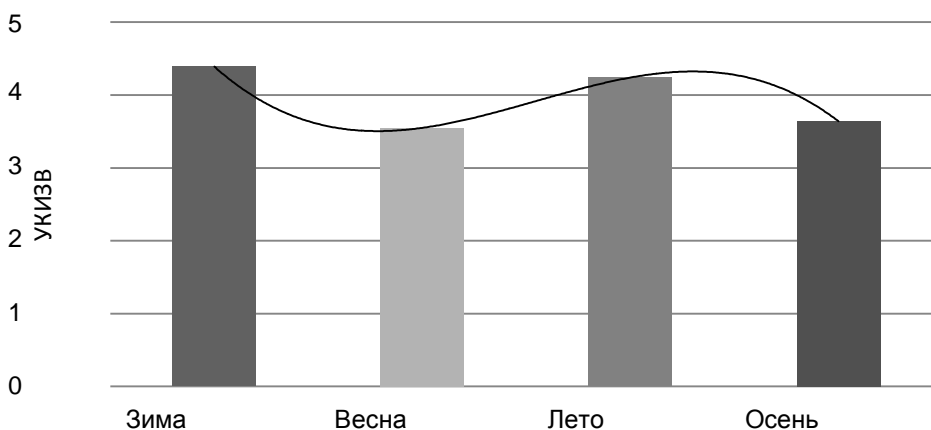


Рис. 9. Динамика УКИЗВ р. Казанка по сезонам

Интересная динамика УКИЗВ наблюдается при оценке его значений, определяемых для разных участков русла. Вероятность того, что будут отмечены превышения предельно-допустимой концентрации условного загрязняющего вещества, нарастает в направлении от истока к устью, достигая максимальных значений в устье р. Казанки (рис. 10).

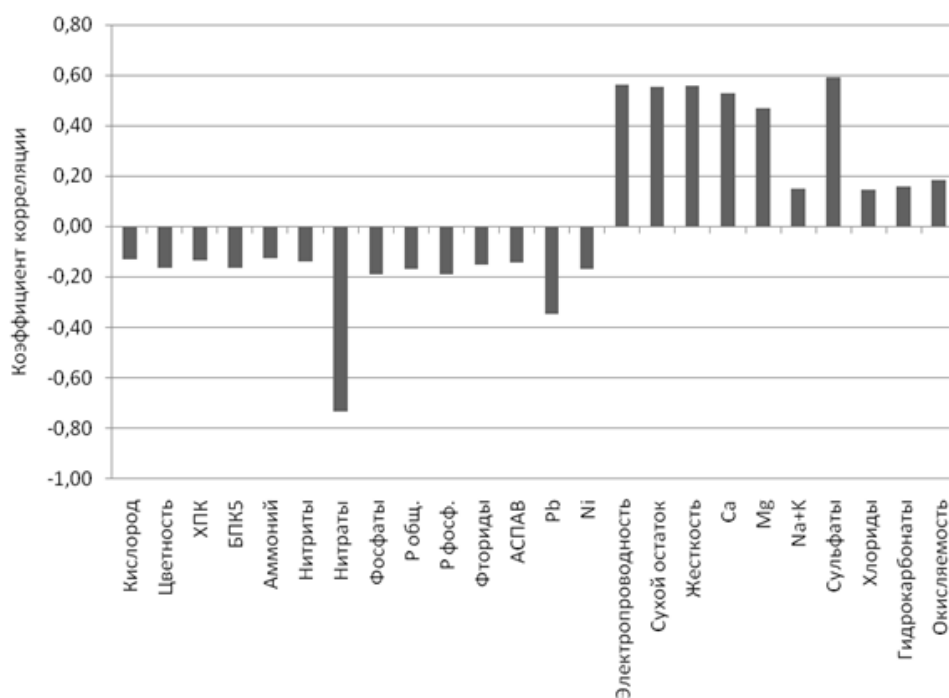


Рис. 10. Значения коэффициентов корреляции между содержанием различных веществ в воде и расстоянием от истока реки

Вместе с тем по распределению средних значений концентраций различных загрязняющих веществ нарастающей динамики не наблюдается, более того, отмечен небольшой тренд на их снижение за счет разбавления водой, поступающей из системы Голубых озер. Как видно из рисунка 10, с приближением к устью реки возрастает среднее содержание только солей жесткости, все остальные показатели демонстрируют хоть и слабую, но отрицательную взаимосвязь. В связи с этим четкий положительный тренд значений УКИЗВ по мере приближения к устью реки указывает на увеличение удельной доли наблюдений, при которых фиксируется превышение ПДК ($S_{уд}$ возрастает от 2,81 до 4,42). Подобная вероятностная характеристика раскрывает реальную динамику стохастической системы, позволяя адекватно оценивать сложившуюся в водном объекте ситуацию.

Таким образом, гидрохимический режим р. Казанки складывается из пространственной и сезонной динамики нескольких независимых друг от друга факторов. Основой гидрохимического режима р. Казанка является динамика веществ, обуславливающих жесткость воды. На нее накладывается окисляемость воды и БПК₅, а также мутность, детерминирующая долю тяжелых металлов, содержащихся в осадке. Содержание загрязняющих веществ, обусловленное антропогенным воздействием, распределено стохастически: пробы воды, отобранные на одном и том же участке, могут содержать как высокие, так и низкие их концентрации. Поэтому их оценку следует проводить вероятностными методами, указывающими на пропорциональное возрастание доли загрязненных проб вдоль всего русла реки, особенно в ее устье.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ И ЭЛЕКТРОННЫХ РЕСУРСОВ

1. Валиев, В.С. Оценка вклада загрязняющих веществ в формирование класса загрязненности поверхностных вод [Текст] / В.С. Валиев, Д.В. Иванов, Р.Р. Шагидуллин, Д.Е. Шамаев, Л.К. Мустафина, Н.В. Шурмина, Ф.М. Абдуллина, О.А. Богданова И.И. Зиганшин // Российский журнал прикладной экологии. – 2018. – № 3. – С. 57–64.
2. Великанов, Н.Л. Особенности мониторинга состояния водотоков рыбохозяйственного значения [Текст] / В.А. Наумов, М.Н. Великанова // Вода: химия и экология. – 2012. – № 3. – С. 27–32.
3. Виноградов, Ю.Б. Математическое моделирование процессов формирования стока [Текст]. – Л. : Гидрометеиздат, 1988. – 312 с.
4. Государственный реестр особо охраняемых природных территорий в Республике Татарстан [Текст]. – Казань : Идел-Пресс, 2007. – 407 с.
5. Кучмент, Л.С. Формирование речного стока [Текст] / Л.С. Кучмент, В.Н. Демидов, Ю.Г. Мотовилов. – М. : Наука, 1983. – 216 с.
6. Метод комплексной оценки степени загрязненности поверхностных вод по гидрохимическим показателям [Текст] : РД 52.24.643-2002. – Ростов н/Д. : Гидрометеиздат, 2002. – 48 с.
7. Раткович, Д.Я. Стохастические модели колебаний составляющих водного баланса речного бассейна [Текст] / Д.Я. Раткович, М.В. Болгов. – М. : ИВП РАН, 1997. – 262 с.
8. Gagnon, P. A coupled stochastic/deterministic model to estimate the evolution of the risk of water contamination by pesticides across Canada [Text] / P. Gagnon, C. Sheedy, A. Farenhorst, D.A. McQueen, A.J. Cessna, N.K. Newlands // Integrated Environmental Assessment Management. – 2014, Jul. – No. 10 (3). – Pp. 429–436.
9. Metropolis, N. The Monte Carlo Method [Text] / N. Metropolis, S. Ulam // J. of the American Statistical Association. – 1949. – Vol. 44, no. 247. – Pp. 335–341.
10. Parker, G.T. Stochastic calibration of riverine water quality models [Text] / G.T. Parker, R.L. Droste, C.D. Rennie // Water Environment Research. – 2010, Feb. – No. 82 (2). – Pp. 99–108.
11. Peter, C. Nonstationary time series analysis and forecasting [Text] // Progr. Environ. Sci. – 1999. – Vol. 1, no. 1. – Pp. 3–48.
12. Solomatine, D.P. Model trees as alternative to neural networks in rainfall runoff modeling [Text] / D.P. Solomatine, K.N. Dual // Hydrol. Sci. J. – 2003. – Vol. 48, no. 3. – Pp. 399–411.

REFERENCES

1. Valiev, V.S. Ocenka vklada zagryaznyayushchih veshchestv v formirovanie klassa zagryaznen-nosti poverhnostnyh vod [Text] / V.S. Valiev, D.V. Ivanov, R.R. Shagidullin, D.E. Shamaev, L.K. Mustafina, N.V. Shurmina, F.M. Abdullina, O.A. Bogdanova I.I. Ziganshin // Rossijskij zhurnal prikladnoj ehkologii. – 2018. – No. 3. – S. 57–64.
2. Velikanov, N.L. Osobennosti monitoringa sostoyaniya vodotokov rybohozyajstvennogo znache-niya [Text] / V.A. Naumov, M.N. Velikanova // Voda: himiya i ehkologiya. – 2012. – No. 3. – S. 27–32.
3. Vinogradov, Yu.B. Matematicheskoe modelirovanie processov formirovaniya stoka [Text]. – L. : Gidrometeoizdat, 1988. – 312 s.
4. Gosudarstvennyj reestr osobo ohranyaemyh prirodnyh territorij v Respublike Tatarstan [Text]. – Kazan' : Idel-Press, 2007. – 407 s.
5. Kuchment, L.S. Formirovanie rechnogo stoka [Text] / L.S. Kuchment, V.N. Demidov, Yu.G. Motovilov. – M. : Nauka, 1983. – 216 s.

6. Metod kompleksnoj ocenki stepeni zagryaznennosti poverhnostnyh vod po gidrohimicheskim pokazatelyam [Text] : RD 52.24.643-2002. – Rostov n/D. : Gidrometeoizdat, 2002. – 48 s.
7. Ratkovich, D.Ya. Stohasticheskie modeli kolebanij sostavlyayushchih vodnogo balansa rechnogo bassejna [Text] / D.Ya. Ratkovich, M.V. Bolgov. – M. : IVP RAN, 1997. – 262 s.
8. Gagnon, P. A coupled stochastic/deterministic model to estimate the evolution of the risk of water contamination by pesticides across Canada [Text] / P. Gagnon, C. Sheedy, A. Farenhorst, D.A. McQueen, A.J. Cessna, N.K. Newlands // Integrated Environmental Assessment Management. – 2014, Jul. – No. 10 (3). – Pp. 429–436.
9. Metropolis, N. The Monte Carlo Method [Text] / N. Metropolis, S. Ulam // J. of the American Statistical Association. – 1949. – Vol. 44, no. 247. – Pp. 335–341.
10. Parker, G.T. Stochastic calibration of riverine water quality models [Text] / G.T. Parker, R.L. Droste, C.D. Rennie // Water Environment Research. – 2010, Feb. – No. 82 (2). – Pp. 99–108.
11. Peter, C. Nonstationary time series analysis and forecasting [Text] // Progr. Environ. Sci. – 1999. – Vol. 1, no. 1. – Pp. 3–48.
12. Solomatine, D.P. Model trees as alternative to neural networks in rainfall runoff modeling [Text] / D.P. Solomatine, K.N. Dual // Hydrol. Sci. J. – 2003. – Vol. 48, no. 3. – Pp. 399–411.

**V.S. Valiev, D.V. Ivanov, D.Ye. Shamaev, I.I. Ziganshin,
L.K. Mustafina, N.V. Shurmina, O.A. Bogdanova, F.M. Abdulina**

THE ANALYSIS OF THE STRUCTURE OF HYDROCHEMICAL INDICES OF RIVER SYSTEMS

The article describes an attempt to test a dynamic stochastic model of the qualitative assessment of water resources taking into consideration temporal and spatial variations of the hydrochemical background at the example of the Kazanka River. The article singles out three orthogonal factors essential for modeling a hydrochemical situation and being formative for the assessment of local changes of hydrochemical indices in certain riverbed areas. The first factor is constituted by variables forming the major structure of hydrochemical processes: conductivity, dry residue, hardness, calcium, magnesium, sulfates, river flow volume, seasonal flexibility of major ions flow. The second factor unites variables reflecting the intensity of water processes associated with organic compounds entering a water system to be transformed: permanent and dichromate oxidizability, biochemical oxygen consumption. There is a correlation between the aforementioned indices and water color, which can be used to assess the organic contamination of surface waters. The third factor of this hydrochemical model is the concentration of suspended forms of heavy metals. Water turbidity determines the amount of metals (cadmium, copper, zinc, manganese, iron) migrating in their solid phase. The conducted research enables the author to assess the potential exceedance of maximum permissible concentrations of pollutants. The article shows that their percentage accounted for by anthropogenic impact is distributed stochastically. Hence, an assessment should rely on probabilistic methods. Probabilistic characterization of a stochastic system enables a researcher to adequately and efficiently assess environmental situation at any particular water source.

water quality; hydrochemical processes; factor analysis; dynamic and stochastic models; the Kazanka River