

На правах рукописи

Макарова Анна Сергеевна



Методическое обеспечение и компьютерные инструменты системного подхода к оценке воздействия на окружающую среду ртути и ее соединений

05.13.01 – Системный анализ, управление и обработка информации
(химическая технология)

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора технических наук

Москва – 2018

Работа выполнена на кафедре ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития»
Российского химико-технологического университета имени Д.И. Менделеева

Научный
консультант:

чл.-корр. РАН, доктор химических наук, профессор
Тарасова Наталия Павловна
директор Института химии и проблем устойчивого
развития Российского химико-технологического
университета имени Д.И. Менделеева,
заведующая кафедрой ЮНЕСКО «Зеленая химия для
устойчивого развития» Российского химико-
технологического университета имени
Д.И. Менделеева

Официальные
оппоненты:

доктор технических наук
Степанченко Илья Викторович
заведующий кафедрой «Автоматизированные
системы обработки информации и управления»
Камышинского технологического института
(филиал) ФГБОУ ВО «Волгоградский государственный
технический университет»

доктор технических наук, профессор
Панарин Владимир Михайлович
Заведующий кафедрой охраны труда и окружающей
среды Тульского государственного университета

доктор технических наук, профессор
Зиятдинов Надир Низамович
заведующий кафедрой системотехники, декан
факультета повышения квалификации преподавателей
вузов Казанского национального исследовательского
технологического университета

Ведущая
организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение
науки Институт проблем точной механики и
управления Российской академии наук

Защита состоится 4 сентября 2018 года в 11:00 на заседании диссертационного совета
Д 212.204.16 при РХТУ им. Д. И. Менделеева (125047 г. Москва, Миусская пл., д. 9) в
конференц-зале (ауд. 443) .

С диссертацией можно ознакомиться в Информационно-библиотечном центре РХТУ
им. Д.И. Менделеева и на интернет-сайте: <http://diss.muctr.ru>.

Автореферат диссертации разослан _____ 2018 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета
Д 212.204.16

Дударов С.П.

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы.

Важность разработки методологии системного анализа и теории принятия решений по оценке воздействия на окружающую среду (ОВОС) химических веществ (ХВ) обусловлена рядом факторов:

- широкое использование ХВ в экономике. В докладе Организации экономического сотрудничества и развития (ОЭСР) отмечено, что за период с 2000 г. по 2009 г. в мире удвоились объемы продаж ХВ и растут экспоненциально, в Российской Федерации (РФ) химизация экономики - это одна из стратегических задач устойчивого развития экономики;

- использование большого количества еще недостаточно изученных ХВ, воздействие которых на окружающую среду (ОС) может носить значимый и непредсказуемый характер, как это было, например, с фреонами и/или перфторсоединениями;

- отсутствие методологии системного подхода и компьютеризированных систем поддержки принятия решений по комплексной ОВОС для всех находящихся в обращении на исследуемой территории ХВ.

В диссертационной работе сформулирована и решена актуальная научная проблема разработки методического обеспечения и компьютерных инструментов системного подхода к ОВОС особо опасных ХВ – ртути и ее соединений (далее Ch^{Hg}). Необходимость рентабельного использования в экономике ХВ с одновременным обеспечением безопасности для ОС и человека отмечена в документе ООН «Повестка дня на 21 век» (1992 г.). Однако разнообразие и широта применения ХВ, объемы их производства, наличие сложных цепей поставок ХВ создают риски негативного воздействия на окружающую среду (ВОС). В обзоре Программы ООН по окружающей среде (ЮНЕП) «Global Chemicals Outlook»¹ (2012 г.) отмечено, что мировой уровень обеспечения безопасности при обращении ХВ является недостаточным, и зачастую вещества, попадающие в ОС в составе отходов, стоков и выбросов химических предприятий (ХП), а также ХВ, целенаправленно вносимые в ОС (например, агрохимикаты), являются причиной негативного ВОС.

Начиная с 1990-х годов по настоящее время под научным руководством академика РАН Мешалкина В.П. в РХТУ им.Д.И. Менделеева активно проводятся ориги-

¹ <http://web.unep.org/chemicalsandwaste/what-we-do/policy-and-governance/global-chemicals-outlook>

нальные научные исследования по информатизации, компьютеризации и математическому моделированию экологических систем, эколого-экономической оптимизации ХП, и ОВОС химико-технологических систем (ХТС), включая научные работы профессоров Бутусова О.М. и Панарина В.М.

Основные методы и инструменты системного анализа при решении задач ОВОС предложены в работах отечественных ученых: академиков РАН Моисеева Н.Н., Марчука Г.И. и Саркисяна С.А., профессоров Львовской К.Б., Чепурных Н.В., Новоселова А.Л., Дунаевского Л.В., Егорова А.Ф., Савицкой Т.В. и зарубежных ученых: M.L. McKinney, A. Gnauk, L. Posthuma, M.C. Zijp, J.J. Klemeš, R.K. Rosenbaum и др. Российские ученые (академики РАН Каптлюг В.А., Белецкая И.П. и Лунин В.В.; чл.-корр. РАН Ягодин Г.А. и чл.-корр. РАН Тарасова Н.П.) и зарубежные ученые (P.Tundo, M.Poliakoff, P.Anastas) проводят научные исследования по применению принципов «зеленой химии» для решения задач минимизации ВОС химических веществ.

Необходимо отметить, что, хотя мировые исследования антропогенного воздействия отдельных ХВ на подсистемы ОС (атмосферу, гидросферу и литосферу/почву) в последние годы широко распространены, и учёными предложены методы ОВОС химических веществ, но, к сожалению, большинство проводимых исследований ориентированы на конкретные ХВ и на конкретные территории и трудно применимы для других регионов из-за различий в составах их почвы, рельефах, распределении водных ресурсов и т.д. Большинство этих методов требуют наличия больших массивов специфических данных и поэтому не могут быть использованы для разработки общей методологии системного подхода к глобальным или региональным оценкам и прогнозам ВОС химических веществ. Полученное в результате ОВОС отсутствие превышений установленных допустимых норм для отдельно взятых ХВ не может свидетельствовать об отсутствии комплексного ВОС сложной смеси находящихся в обращении веществ. Однако, из-за отсутствия общей методологии и доступных компьютерных инструментов, комплексная оценка химической нагрузки на ОС практически не проводится.

Ch^{Hg} вызывают наибольшую обеспокоенность во всем мире, что нашло свое отражение в принятии в 2013 г. Минаматской конвенции о ртути. РФ подписала дан-

ную конвенцию в 2014 г.² и в настоящее время готовится к ее ратификации; в связи с этим весьма важна научно-обоснованная разработка национального плана действий, включающего определение антропогенных источников Ch^{Hg} .

На основании вышеизложенного новая научная проблема разработки методических основ, логико-информационных и математических моделей, алгоритмов и компьютерных инструментов системного подхода к ОВОС химических веществ и практическое применение разработанных методик, моделей и компьютерных инструментов ОВОС и приоритизации по уровню опасности природно-техногенных источников поступления в окружающую среду Ch^{Hg} имеет **несомненную актуальность**.

Актуальность научных исследований, выполненных в докторской диссертации, также подтверждается тем, что основные разделы диссертационной работы соответствуют: пункту Плана фундаментальных научных исследований РАН до 2025 г. «7.23. Изменение природно-территориальных комплексов России в зонах интенсивного техногенного воздействия; основы рационального природопользования»; Перечню критических технологий: «21. Технологии предупреждения и ликвидации чрезвычайных ситуаций природного и техногенного характера», определенных Указом Президента РФ «Об утверждении приоритетных направлений развития науки, технологий и техники в Российской Федерации и перечня критических технологий Российской Федерации» от 07.07.2011 г.; Указу Президента РФ «О Стратегии научно-технологического развития Российской Федерации» от 01.12.2016 г. № 642

Основные разделы диссертации выполнены при финансовой поддержке РНФ (соглашение 15-17-30016), Министерства образования и науки РФ в рамках базовой части государственного задания (проект № 1294) и в рамках проектной части государственного задания в сфере научной деятельности (задание № 5.2598.2014/К).

Целью диссертационной работы является создание методического обеспечения и компьютерных инструментов системного подхода к принятию решений по ОВОС химических веществ и применение разработанных компьютерных инструментов для оценки и приоритизации по уровню опасности природно-техногенных источников поступления в окружающую среду Ch^{Hg} на территории РФ.

² Распоряжение Правительства РФ от 07.07.2014 N 1242-р "О подписании Минаматской конвенции по ртути". "Собрание законодательства РФ", 14.07.2014, N 28, ст. 4123.

Для реализации указанной цели поставлены и решены следующие взаимосвязанные научно-технические задачи:

1. Разработка комплексной методики системного подхода к принятию решений по ОВОС химических веществ с учетом концепции «экологического следа», а также с использованием процедур дифференцированного расчета констант скоростей переноса химических веществ в пресноводных объектах.

2. Создание методологии и проведение системного анализа социо-эколого-экономических индикаторов ОВОС химических веществ в РФ, с учетом оценки применения на химических предприятиях и в целях поставок для ХП «зеленых» технологий, энергоресурсоэффективных экологических безопасных ХТС, а также процедур анализа больших массивов информации от населения о воздействии ХВ.

3. Разработка логико-вычислительных алгоритмов (ЛВА) поддержки принятия решения по снижению ВОС химических производств, ХТС и отдельных веществ.

4. Сбор и анализ больших массивов данных по поступлению Ch^{Hg} в ОС от различных природно-техногенных источников с использованием инструментов функционального логико-информационного моделирования, а также алгоритмов принятия решений по приобретению и обработке дополнительных массивов данных.

5. Системный анализ ВОС ртути и ее соединений на территории РФ, разработка научно-обоснованного прогноза (до 2050) влияния климатических изменений и регулирующих воздействий для поддержки принятия научно-обоснованных решений о приоритизации по уровню опасности природно-техногенных источников поступления Ch^{Hg} в ОС.

6. Разработка научно-обоснованных предложений для Министерства природных ресурсов РФ по формированию национального плана действий по минимизации ВОС и здоровью человека Ch^{Hg} , являющегося необходимым документом в случае ратификации РФ Минаматской конвенции о ртути.

Методы реализации поставленной цели и решения задач: методология системного анализа сложных техногенно-природных объектов, в том числе производств и цепей поставок нефтехимического, топливно-энергетического и металлургического комплексов; применение современных методов и инструментов переработки больших массивов данных с использованием: географических информационных систем (ГИС), эвристическо-вычислительных методов, методов математической статистики и вы-

числительной математики, методологии создания проблемно-ориентированных комплексов программ и информационных систем поддержки принятия решений.

Научная новизна.

1. Разработана комплексная методика ОВОС химических веществ, отличающаяся учетом концепции «экологического следа», использованием методологии оценки жизненного цикла (ЖЦ), математических моделей процессов трансформации, миграции и массопереноса ХВ в различных подсистемах ОС, а также использованием показателей гигиенического нормирования ХВ в различных подсистемах ОС, что позволяет комплексно оценивать значение интегральной химической нагрузки от одновременного обращения большого количества ХВ в глобальном и в региональном масштабах.

2. Предложен алгоритм расчета констант массопереноса ХВ в гидросфере, отличающийся использованием ГИС и стандартной математической модели массопереноса ХВ в подсистеме ОС, а также универсального программного комплекса «USEtox», что позволяет получить большие массивы данных о перемещении ХВ в водных потоках и их накоплении в объектах гидросферы в глобальном и региональном масштабах.

3. Выполнен системный анализ актуальности применения на производствах и в цепях поставок ХП «зеленых» технологий и энергоресурсоэффективных ХТС, отличающийся использованием методологии системного подхода к проведению социологических опросов и процедур систематизации больших массивов данных о фактическом состоянии химико-технологических процессов и бизнес-процессов, что позволяет реально оценивать возможность снижения экологической опасности производства и потребления опасных химических веществ в РФ.

4. Разработана и практически применена методика сбора и обработки больших массивов информации от населения по его осведомленности о потенциальных опасностях ХВ, отличающаяся использованием методологии системного подхода к проведению социологических опросов и эффективных процедур обработки больших массивов неравномерных данных, что позволяет определить уровень уязвимости и защищенности населения от воздействия ХВ, а также способность населения распознавать ХВ опасные для ОС, сократив их потребление.

5. Предложены оригинальные логико-вычислительные алгоритмы поддержки принятия решения по снижению ВОС:

- обработки информации от химических предприятий о ВОС, отличающийся переработкой больших массивов многолетних массивов данных от ряда производств и использованием методологии многокритериального анализа, что позволяет, несмотря на наличие объективных пробелов в предоставляемых больших массивах данных, оценить эффективность планируемых природоохранных мероприятий, а также повысить уровень заинтересованности и добровольной вовлеченности ХП в разработку и реализацию мероприятий по энергоресурсосбережению и охране ОС, в том числе, в мероприятиях по реализации международной общественной программы «Ответственная Забота» (англ. Responsible Care)³;
- поддержки принятия решений по выбору экологически безопасных ХТС, отличающиеся использованием методов многокритериального системного анализа, и принципов «зеленой» химии, логистики ресурсосбережения и теории энерго-ресурсоэффективных ХТС, что позволяет, сравнивая однотипные ХТС, осуществить научно-обоснованный выбор наиболее безопасных по комплексному ВОС химико-технологических систем;
- выбора приоритетных ХВ по ВОС в глобальном и региональном масштабе, отличающийся использованием данных об опасных для ОС и здоровья человека свойствах ХВ с учетом объема их поступления, географического распределения, информации по регулированию обращения ХВ и наличием нормативно-правовой базы, что позволяет значительно упростить и ускорить ОВОС, а также выбрать из всего объема находящихся в обращении на исследуемой территории ХВ, наиболее значимые по опасному ВОС;
- многокритериального анализа вариантов замены производства и использования экологически опасных ХВ с учетом экономических показателей эффективности, отличающийся использованием методологии многокритериального анализа результатов экспертных опросов для оценки достоверности данных и процедуры ранжирования больших массивов данных, что позволяет принимать научно-

³ <https://www.icca-chem.org/responsible-care/>

обоснованные решения по определению менее опасных эквивалентных химических веществ в ХТС.

6. Разработаны логико-информационные модели (ЛИМ) поступления Ch^{Hg} в ОС от различных природно-техногенных источников, отличающиеся использованием стандартных инструментов функционального логико-информационного моделирования (IDEF) и др., что позволяет накапливать и анализировать большие массивы данных о количестве поступления Ch^{Hg} в ОС в РФ.

7. Разработаны алгоритм и процедуры принятия решений по приобретению дополнительных данных о поступлении Ch^{Hg} в ОС от различных ХТС, отличающиеся детальным анализом пробелов в больших массивах неоднородных данных, применением концепции оценки ЖЦ и процедур расчета дополнительных данных на основе методов интерполяции и экстраполяции, что позволяет достоверно рассчитывать и прогнозировать показатели поступления Ch^{Hg} в ОС.

8. Разработаны методика и алгоритмы компьютерного анализа различных сценариев поступления Ch^{Hg} в подсистемы ОС, отличающиеся использованием реализуемых в РФ долгосрочных Стратегий развития химического, нефтехимического, металлургического и топливно-энергетического комплексов, климатических математических моделей и ГИС, что позволяет прогнозировать возможные изменения в поступлении Ch^{Hg} в ОС, определять уровни приоритизации опасностей природно-техногенных источников поступления в ОС ртути и ее соединений и разработать научно-обоснованные рекомендации для Минприроды РФ и др. заинтересованных организаций по составлению планов инженерно-технологических и организационно-политических мероприятий при ратификации РФ Минаматской Конвенции о ртути.

Практическая значимость диссертационной работы.

1. Основные положения выводы и рекомендации диссертационной работы включены в научно-исследовательские отчеты ОАО «НИИ Атмосфера» охраны атмосферного воздуха», выполненные в рамках гранта РСА/2013/030 GLF-2310-2760-4C83 «Пилотный проект по формированию кадастра выбросов ртути в РФ» от 02.02.2013.

2. Основные результаты диссертационной работы практически использованы при сборе, накоплении и обобщении больших массивов данных, необходимых для формирования кадастра источников поступления Ch^{Hg} в подсистемы ОС в Российской Федерации и разработке критериев их приоритизации.

3. С использованием результатов диссертационной работы подготовлены научно-обоснованные предложения для Минприроды РФ по формированию национального плана действий, требуемого при ратификации Минаматской конвенции о ртути.

4. Научно-исследовательские разработки автора по оценке опасности ХВ практически используются в деятельности ООО «Колтек-ЭкоХим» и ФГУП «Всероссийский научно-исследовательский институт стандартизации оборонной продукции и технологий».

5. Основные научно-практические результаты диссертационной работы практически использованы при разработке оригинальных курсов лекций и учебно-методических материалов для обучения студентов по направлению 05.03.06 «Экология и природопользование», а также при проведении курсов повышения квалификации для работников промышленности, читаемых автором в РХТУ им. Д.И.Менделеева в период с 2012 г. по настоящее время.

На защиту выносятся следующие результаты теоретических исследований, имеющих научную и практическую значимость:

1. Комплексная методика оценки воздействия на окружающую среду химических веществ с учетом концепции «экологического следа».

2. Алгоритм расчета и визуализации информации о константах скоростей переноса химических веществ в подсистеме гидросфера с использованием ГИС.

3. Системный анализ актуальности активного использования химическими предприятиями в РФ «зеленых» технологий, методов логистики ресурсосбережения и теории энергоресурсоэффективных ХТС, которые позволяют снизить объемы производства и потребления опасных ХВ.

4. Методика сбора и обработки больших массивов неоднородной информации от населения о воздействии ХВ.

5. Комплекс ЛВА поддержки принятия решения по снижению ВОС: алгоритм обработки информации о ВОС химических производств; алгоритм поддержки принятия решений по выбору наиболее безопасных для ОС химико-технологических систем; алгоритм выбора приоритетности по уровню опасного ВОС химических веществ в глобальном и региональном масштабе; алгоритм многокритериального анализа вариантов эквивалентной замены опасных для ОС химических веществ.

6. Логико-информационные модели процессов поступления Ch^{Hg} в ОС от различных природно-техногенных источников.

7. Результаты оценки «химического следа» для Ch^{Hg} в РФ с использованием предложенной комплексной методики ОВОС химических веществ и универсального программного комплекса «USEtox».

8. Методика компьютерного анализа различных сценариев поступления Ch^{Hg} в ОС с учетом стратегий развития промышленности и двух климатических сценариев.

9. Результаты системного анализа и приоритизации по уровню опасности природно-техногенных источников поступления Ch^{Hg} в ОС.

Достоверность и обоснованность научных результатов и выводов диссертационной работы обусловлена корректным применением методологии системного подхода, принципов «зеленой» химии, методов теории сложных систем, логистики ресурсосбережения и математического моделирования. Достоверность разработанной методики ОВОС химических веществ подтверждается корректным сопоставлением полученных расчетных данных с экспериментальными данными измерений содержания Ch^{Hg} в подсистемы ОС. Результаты диссертационной работы не противоречат ранее полученным известным результатам других авторов в области методологии системного подхода и методов оценки воздействия на окружающую среду.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы доложены и обсуждены на следующих научно-технических конференциях и совещаниях:

- **За рубежом:** ChemCon Europe, г. Прага (Чехия), март, 2010 г.; 3-я конференция стран СНГ «Регулирование безопасности химической продукции. Рекомендации ООН и Европейские регламенты», г. Баку (Азербайджан), сентябрь, 2010 г.; 4-ая конференция стран СНГ по регулированию безопасности химической продукции «Рекомендации ООН-СНГ. Европейские регламенты REACH и CLP», г. Астана (Казахстан), октябрь, 2011 г.; 44th IUPAC World Chemistry Congress, г. Стамбул (Турция), август, 2013 г.; III Международная конференция по химии и химической технологии, г. Ереван (Армения), сентябрь, 2013 г.; 5th International IUPAC Conference on Green Chemistry, г. Дурбан (ЮАР), август, 2014 г.; Международная конференция: «Responsible Care: Промышленная безопасность, охрана труда, экология - лучшие практики HSE на предприятиях BASF», г. Мангейм (Германия), июль, 2014 г.; 6th

International IUPAC Conference on Green Chemistry, г. Венеция (Италия), сентябрь, 2016 г.; 46th IUPAC World Chemistry Congress, г. Сан-Пауло (Бразилия), июль, 2017 г.;

- **В России:** 2-ой Научно-практический семинар «Безопасность химической продукции», на базе ОАО «Ангарская нефтехимическая компания», июль, 2011 г.; Конференция по охране труда, промышленной безопасности и охране окружающей среды в СИБУРе, г. Пермь, апрель, 2014 г.; XI международная научно-практическая конференция «Экологические проблемы индустриальных мегаполисов», г. Москва, май, 2014 г.; 5-ая международная конференция-школа по химической технологии (ХТ-5-16), г. Волгоград, май, 2016 г.; XX Менделеевский съезд по общей и прикладной химии, г. Екатеринбург, сентябрь, 2016 г.; Научно-практическая конференция по экологическим проблемам Московского региона, г. Москва, октябрь, 2016 г.; 7-я Международная конференция ИЮПАК по зеленой химии, г. Москва, октябрь, 2017 г.; XI Международной научно-практической конференции «ЛЭРЭП -11-2017», г. Тула, ноябрь, 2017 г., Конференция EUROП2017 "Эффективность и устойчивое развитие перерабатывающих отраслей промышленности", г. Москва, ноябрь, 2017 г.

Публикации. По материалам диссертации опубликовано **70 научных работ**, в том числе: **19 публикаций** в журналах, индексируемых в международных системах SCOPUS и Web of Science; **10 публикаций** в журналах, рекомендованных ВАК; **1 патента**, **3** свидетельства о регистрации программ, **37** публикаций в прочих журналах, включая тезисы конференций.

Структура и объем диссертации. Диссертационная работа состоит из введения, семи глав, заключения, шести приложений; библиографический список из 283 наименований. Работа изложена на 370 страницах машинописного текста, включает 75 таблиц и 94 рисунка, шесть приложений на 46 страницах.

Оглавление диссертационной работы.

Введение

Глава 1. Современное состояние научных исследований по системному подходу к комплексной оценке воздействия на окружающую среду химических веществ

1.1. Краткий анализ современного состояния научных исследований по системному подходу к ОВОС химических веществ на всех этапах их ЖЦ

1.2. Системный анализ физико-химических и токсикологических свойств опасных для ОС химических веществ

1.3. Современное математическое и программное обеспечение расчета базовых

физико-химических и токсикологических свойств опасных для ОС химических веществ

1.4. Краткая характеристика современных инструментов системного подхода к комплексной оценке воздействия на ОС химических веществ

1.5. Системный анализ показателей уровня опасности ртути и ее соединений для ОС и здоровья человека

1.6. Выводы

Глава 2. Разработка методологии системного подхода к оценке воздействия на окружающую среду химических веществ в глобальном и региональном масштабе с использованием концепции «химического следа»

2.1. Основные этапы методологии ОВОС химических веществ с применением концепции «экологического следа»

2.2. Эвристическо-вычислительный алгоритм принятия решений по оценке «химического следа»

2.3. Методика применения универсального программного комплекса «USEtox» для расчета показателей дисперсии химических веществ в ОС

2.4. Алгоритм расчета констант скоростей переноса и миграции химических веществ в водной среде с использованием геоинформационных систем

2.5. Выводы

Глава 3. Методические основы системного анализа социо-эколого-экономических индикаторов воздействия на окружающую среду химических веществ

3.1. Методические основы и эвристическо-вычислительные алгоритмы классификации уровня опасности химических веществ по воздействию на ОС

3.2. Методика системного анализа взаимосвязей между экологическими, экономическими и социальными показателями обращения химических веществ в РФ

3.3. Системный анализ актуальности активного использования российскими химическими предприятиями «зеленых» технологий для снижения объемов производства и потребления опасных химических веществ

3.4. Методика сбора и обработки больших массивов информации от населения о воздействии химических веществ

3.4.1. Сравнительный анализ эффективности различных систем информирования населения об опасном воздействии химических веществ

3.4.2. Системный анализ результатов социологического опроса об оценке восприятия населением информации о воздействии химических веществ в РФ

3.5. Выводы

Глава 4. Разработка алгоритмического обеспечения поддержки принятия решений по снижению воздействия на окружающую среду опасных химических веществ

4.1. ЛВА обработки информации о воздействии на ОС предприятий химического комплекса и смежных отраслей

4.2. ЛВА поддержки принятия решений по выбору наиболее безопасных для

ОС ресурсоэнергоэффективных химико-технологических систем

4.3. ЛВА выбора приоритетности по уровню опасного воздействия на ОС химических веществ в глобальном и региональном масштабах

4.4. ЛВА многокритериального анализа вариантов эквивалентной замены опасных для ОС химических веществ

4.5. Выводы

Глава 5. Методические основы разработки информационного обеспечения для идентификации источников поступления в окружающую среду ртути и ее соединений

5.1. Методика оценки и визуализации основных источников поступления в ОС ртути и ее соединений с использованием географических информационных систем

5.2. Разработка ЛИМ процессов поступления в ОС ртути и ее соединений от различных природно-техногенных источников

5.2.1. ЛИМ процесса поступления в ОС ртути и ее соединений при добыче и применении углеводородных ресурсов

5.2.2. ЛИМ процесса поступления в ОС ртути и ее соединений при извлечении металлов

5.2.3. ЛИМ процесса поступления в ОС ртути и ее соединений в результате их использования в промышленных процессах производств

5.2.4. Логико-информационная модель процесса поступления в ОС ртути и ее соединений из промышленных и бытовых приборов

5.3. Методика поиска, обработки и визуализации информации о фактическом содержании в подсистемах ОС ртути и ее соединений

5.4. Выводы

Глава 6. Разработка алгоритмического обеспечения системного подхода к принятию решений по приобретению дополнительных данных о поступлении в окружающую среду ртути и ее соединений от различных природно-техногенных источников

6.1. Алгоритм приобретения (АП) дополнительных данных по поступлению в ОС ртути и ее соединений при добыче и применении угля

6.2. АП дополнительных данных по поступлению в ОС ртути и ее соединений при добыче и применении нефти

6.3. АП дополнительных данных по поступлению в ОС ртути и ее соединений при добыче и применении природного газа

6.4. АП дополнительных данных по поступлению в ОС ртути и ее соединений при производстве цветных металлов

6.5. АП дополнительных данных по поступлению в ОС ртути и ее соединений от химических производств

6.5.1. Хлор-щелочное производство с использованием ртутной технологии

6.5.2. Производство мономера винилхлорида с использованием дихлорида ртути как катализатора

6.6. АП дополнительных данных по поступлению в ОС ртути и ее соединений

из приборов и устройств бытового и промышленного назначения

6.6.1. Ртутные термометры

6.6.2. Ртуть-содержащие источники света

6.7. Выводы

Глава 7. Разработка научно-обоснованных решений по минимизации воздействия на окружающую среду ртути и ее соединений в глобальном и региональном масштабах

7.1. Методические основы разработки и компьютерный анализ различных сценариев поступления в ОС ртути

7.2. Алгоритм компьютерного анализа воздействия на ОС ртути в России с использованием универсального комплекса программ «USEtox»

7.3. Системный анализ результатов компьютерного расчета «химического следа» ртути и ее соединений

7.4. Методика разработки критериев принятия решений по приоритизации по уровня опасности природно-техногенных источников поступления в ОС ртути и ее соединений

7.5. Выводы

Заключение и основные результаты диссертации

Список основных условных обозначений

Список русскоязычных аббревиатур

Список англоязычных аббревиатур

Глоссарий основных терминов и понятий

Список литературы

Список иллюстративного материала

Приложение 1. Классификация методов испытаний опасных для окружающей среды химических веществ

Приложение 2. Гигиенические нормативы, установленные для ртути и ее соединений в различных подсистемах окружающей среды.

Приложение 3. Примеры трендов и индикаторов при анализе обращения химических веществ в ЗФ.

Приложение 4. Основные фрагменты таблиц сводных данных по поступлению ртути и ее соединений в окружающую среду из различных источников.

Приложение 5. Копии свидетельств о государственной регистрации программ и баз данных для ЭВМ

Приложение 6. Справки о практическом использовании результатов диссертационной работы

6.1. Справка ОАО «Научно-исследовательский институт охраны атмосферного воздуха» (ОАО «НИИ Атмосфера»).

6.2. Справка ООО «Колтек-ЭкоХим»

6.3. Справка ФГУП «Всероссийский научно-исследовательский институт стандартизации оборонной продукции и технологий»

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении кратко сформулированы актуальность поставленной и решенной научной проблемы, цели и задачи диссертационной работы; изложены научная новизна и практическая значимость полученных результатов.

В главе 1 «Современное состояние научных исследований по системному подходу к комплексной ОВОС химических веществ» изложен краткий аналитический обзор современного состояния научных исследований по методам системного анализа техногенно-природных объектов, по применению системного подхода и разработке алгоритмов по ОВОС химических веществ; дана краткая характеристика современных компьютерных инструментов системного подхода к принятию решений по комплексной ОВОС. Выполнен системный анализ физико-химических и токсикологических свойств опасных для ОС химических веществ (особое внимание уделено анализу показателей уровня опасности для ОС и здоровья человека для Ch^{Hg}). Дана сравнительная характеристика современного математического и программно-информационного обеспечения расчета базовых физико-химических и токсикологических свойств опасных для ОС химических веществ. Обоснована актуальность проблемы разработки методологии системного подхода и компьютерных инструментов для комплексной ОВОС химических веществ с учетом специфики существующей в РФ системы регулирования и современных методических подходов к глобальным ОВОС.

По результатам проведенного аналитического обзора сформулирована общая постановка задачи ОВОС химических веществ на всех этапах их ЖЦ.

Глава 2 «Разработка методологии системного подхода к ОВОС химических веществ в глобальном и региональном масштабе с использованием концепции «химического следа» посвящена определению граничных значений воздействия ХВ на ОС на основе использования результатов расчета «химического следа» (далее ChF), для чего автором разработаны и описаны совокупность методов и правил их применения включая: комплексную методику ОВОС химических веществ с учетом концепции «экологического следа» и алгоритм расчета и визуализации информации о константах скоростей переноса ХВ в водной среде с использованием ГИС.

В основу разработанной комплексной методики положено сформулированное

автором обобщённое понятие «химического следа» на основе оригинальной концепции «экологического следа», используемой при ОВОС в глобальном и региональном масштабах, как численная мера наличия в подсистеме ОС таких значений количеств природных сред (воздуха $V_{a,sys}$ (м³), воды $V_{w,sys}$ (м³) и почвы $M_{s,sys}$ (кг)), которые достаточны для разбавления антропогенных ХВ до концентраций, ниже установленных пределов (предельно допустимых концентраций – ПДК, ориентировочно безопасных уровней воздействия – ОБУВ и ориентировочно допустимых уровней - ОДУ).

Разработанная комплексная методика ОВОС химических веществ, заключается в последовательности этапов, включающих: определение границ исследования, инвентаризацию опасных ХВ, количественную оценку содержания ХВ в различных подсистемах ОС, количественную оценку негативного ВОС химических веществ через определение ChF, верификации полученных оценок ChF.

Значение ChF для i -го ХВ (ChF_i) вычисляется по формуле:

$$ChF_i = \max \left\{ \frac{V_{a,i}}{V_{a,sys}}; \frac{V_{w,i}}{V_{w,sys}}; \frac{M_{s,i}}{M_{s,sys}} \right\}, \quad (1)$$

Для множества I химических веществ с учетом принципа аддитивности общий «химический след» (ChF_Σ) равен:

$$ChF_\Sigma = \max \left\{ \sum_{i=1}^I \frac{V_{a,i}}{V_{a,sys}}; \sum_{i=1}^I \frac{V_{w,i}}{V_{w,sys}}; \sum_{i=1}^I \frac{M_{s,i}}{M_{s,sys}} \right\}, \quad (2)$$

При определении значений количеств $V_{a,sys}$, $V_{w,sys}$, $M_{s,sys}$ в (1) и (2) используются следующие допущения: высота учитываемого в расчетах слоя атмосферы составляет 10³ м; глубина почвенного слоя – 0,1 м. Требуемые количества воздуха $V_{a,i}$ (м³), воды $V_{w,i}$ и почвы $M_{s,i}$ (кг) равны отношению массы i -го ХВ, находящегося в оцениваемой подсистеме ОС, к установленным для него ПДК/ОБУВ/ОДУ в этой подсистеме ОС.

При расчете массы i -го ХВ в n -й подсистеме ОС используется методология оценки ЖЦ в соответствии с ГОСТ Р ИСО 14040-2010. В качестве основных отдельных процессов ЖЦ определены: миграция i -го ХВ из одной подсистемы ОС в другую, дегградация i -го ХВ и перенос за границу исследуемой системы, оцениваемые с использованием констант скоростей миграции (k^{migr}), дегградации (k^{deg}) и переноса (k^{transb}). Изменение массы i -го ХВ в n -й подсистеме ОС ($n = \overline{1, N}$) равно:

$$\frac{dm_{n,i}}{dt} = S_{n,i} - \sum_{j=1}^{N-1} k_{n \rightarrow j,i}^{migr} m_{n,i} + \sum_{j=1}^{N-1} k_{j \rightarrow n,i}^{migr} m_{j,i} - k_{n,i}^{deg} m_{n,i} - k_{n,i}^{transb} m_{n,i}, \quad (3)$$

При расчетах по (3) автором приняты следующие допущения: 1) ХВ в подсистеме ОС в основном поступает от стационарных техногенных источников ($S_{n,i} = const$ (кг/с)); 2) процессы обращения ХВ являются равновесными ($\frac{dm_{n,i}}{dt} = 0$).

Для расчета k^{migr} , k^{deg} и k^{transb} использован универсальный комплекс программ «USEtox». Дополнительно для учета пространственной дифференциации, обусловленной движением пресноводных масс, разработан оригинальный алгоритм расчета k^{transb} в гидросфере с использованием ГИС, включающий в себя три этапа: **этап 1** - расчет коэффициентов распределения газ-жидкость, жидкость/твердое, взвешенная фаза/вода и органический углерод/вода; **этап 2** - расчет коэффициентов распределения ХВ между различными подсистемами ОС; скорости переноса ХВ из одной подсистемы в другую за счет адвекции; скорость абсорбции и адсорбции ХВ; скорость связывания ХВ в донных отложениях; скорость накопления ХВ в донных отложениях и скорость десорбции ХВ из донных осадков; **этап 3** - расчет коэффициентов миграции ХВ из одной подсистемы ОС в другую, а также коэффициент, характеризующий поступление ХВ из объектов гидросферы в почву за счет водопотребления, и скорость переноса ХВ из j-й ячейки в j+1-ю ячейку. Каждый из заявленных этапов представлен в работе в виде отдельной блок-схемы.

Алгоритм основан на использовании ГИС и глобальных баз данных (БД), содержащих необходимые данные для всего земного шара с шагом ячейки $0,5^\circ \times 0,5^\circ$, в частности такие данные по рекам собраны в БД бассейнов рек STN-30⁴; данные по средним многолетним значениям массы перемещающейся воды (m^3), среднегодовое количество осадков (мм/год), ирригация (m^3 /год) и численности населения доступны на сайте Университета Нью-Гемпшира⁵, а доли сельскохозяйственных почв – на ресурсе EarthStat⁶. При $ChF > 1$ риск негативного ВОС химических веществ для оцениваемой географической области является недопустимым.

Для обоснования мероприятий по снижению ChF автором проведен систем-

⁴ <http://www.wsag.unh.edu/Stn-30/stn-30.html>

⁵ <http://wwdrii.sr.unh.edu>

⁶ <http://www.earthstat.org/data-download/>

ный анализ социо-эколого-экономических индикаторов ВОС химических веществ.

В главе 3 «Методические основы системного анализа социо-эколого-экономических индикаторов ВОС химических веществ» изложена методология расчета на основе системного анализа индикаторов и определения трендов ВОС находящихся в обращении ХВ, а также на экономические, социальные факторы и индивидуальное благополучие человека. Для отнесения ХВ и их смесей к категории «опасные для ОС» разработаны соответствующие алгоритмы, на рис.1 представлена блок-схема разработанного ЛВА классификации уровня опасности ХВ для ОС.

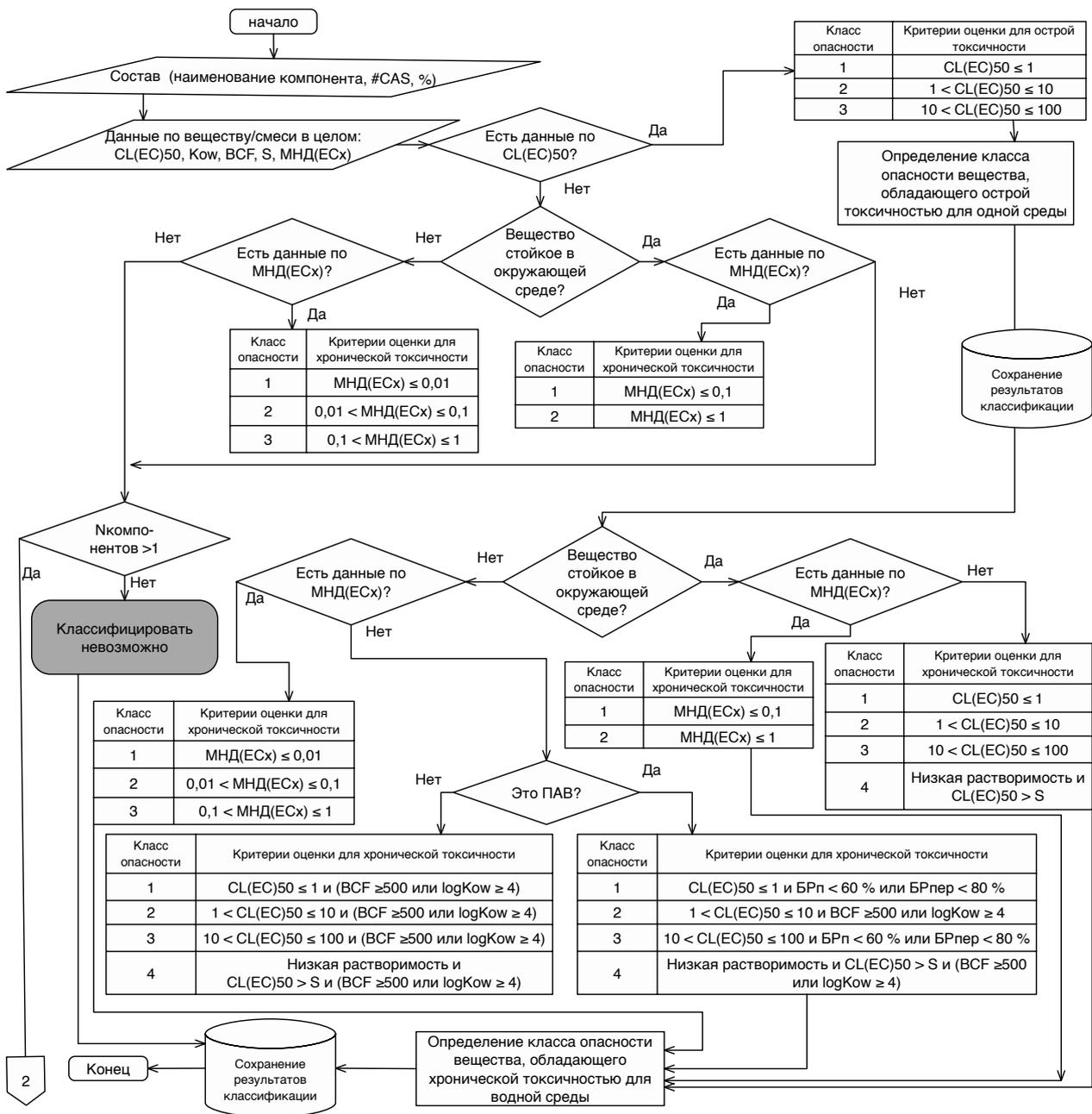


Рис. 1. Блок-схема ЛВА классификации ХВ по уровню опасности для ОС.

Разработанные ЛВА классификации уровня опасности ХВ и их смесей для ОС реализованы в виде соответствующих комплексов программ на языке программирования ActionScript 3.0.

Применение для РФ предложенной автором методологии системного анализа социо-эколого-экономических индикаторов ОВОС показало, что уменьшение значения ChF возможно в результате проведения следующих организационно-технологических мероприятий: **снижение объемов производства ХВ** (но для выполнения одной из важных стратегических целей РФ по увеличению уровня химизации экономики, усилия нужно сосредоточить на минимизации использования опасных ХВ и на создании энергоресурсоэффективных, или «зеленых», ХП и цепей поставок); **снижения потребления ХВ**, в том числе и в быту, может быть изменено за счет выбора потребителями эквивалентной продукции, не содержащей опасных ХВ; **повышения окупаемости мероприятий по охране ОС и ввода в эксплуатацию энергоресурсоэффективных экологически безопасных ХТС**, что позволит увеличить экологическую безопасность и энергоэффективность ХП и цепей поставок.

Системный анализ обеспечения необходимости активного использования на химических предприятиях в РФ «зеленых» технологий, методов логистики ресурсосбережения и теории энергоресурсоэффективных ХТС проводился на основе обработки большого количества анкет (104). Результаты социологического исследования показали, что около 80% ХП России в последние годы применяют и/или считают целесообразным активно применять для обеспечения их энергоэффективности и экологической безопасности **12 принципов «зеленой» химии**⁷, среди которых наибольший интерес вызывают принципы безопасности и экономичности ХП. Принцип реализации мероприятий по «предотвращению возможности аварий» реализовали 44% ХП, принцип «экономии атомов» в молекулах продукции – 41% , а принцип «упреждения» опасного воздействия – 40%.

Для оценки возможности снижения потребления опасных для ОС ХВ предложена на основе методологии системного подхода методика сбора и обработки больших массивов неоднородных данных по анкетированию населения и разработана, отличающаяся применением процедуры сравнительного анализа эффективности раз-

⁷ Tundo P., Anastas P., Black D. St C., Breen J., Collins T., Memoli S., Miyamoto J., Polyakoff M., Tumas W., Pure Appl. Chem., 2000, 72, 1207.

личных систем информирования населения об опасном воздействии ХВ, проведением анкетирования и системном анализе результатов социологического опроса об оценке восприятия населением информации о воздействии ХВ в РФ. Результаты использования этой методики при опросе студентов РХТУ имени Д.И.Менделеева показали, к сожалению, низкую осведомленность населения о символах маркировки ХВ, но при этом около 50% опрошенных распознали по маркировке ХВ опасные для ОС. Для развития системы информирования населения об опасных ХВ, что по мнению автора должно способствовать снижению их применения, разработана компьютерная программа «Химия в быту».

В результате системного анализа социо-эколого-экономических индикаторов ВОС и научных исследований, проведенных на ХП и среди населения, обосновано наличие возможностей для минимизации ChF в России и сделан вывод, что для реализации этих возможностей необходимо создать специальное алгоритмическое обеспечение поддержки принятия решений по снижению ВОС химических веществ.

В главе 4 «Разработка алгоритмического обеспечения поддержки принятия решений по снижению ВОС опасных химических веществ» описан комплекс разработанных ЛВА: ЛВА-1 обработки информации о воздействии ХП на ОС; ЛВА-2 (см.рис.2) поддержки принятия решений по выбору наиболее безопасных ХТС для ОС; ЛВА-3 выбора приоритетности ХВ по уровню опасного ВОС в глобальном и региональном масштабах; ЛВА-4 многокритериального анализа вариантов эквивалентной замены опасных ХВ.

ЛВА–1 (см.рис.2) основан на переработке собранных больших массивов значений ключевых индикаторов производительности (КPI) для предприятий России при реализации добровольной международной программы РС, применяемой с 2000 по 2015 г. на целом ряде российских ХП.

Из-за наличия больших пробелов в представленных массивах данных, обусловленных добровольностью представления отчетов по КPI, сделать однозначные выводы об эффективности реализации природоохранных мероприятий без дополнительной обработки этих показателей затруднительно. ЛВА-1 применен для анализа данных от рассматриваемых ХП РФ за 10 лет.

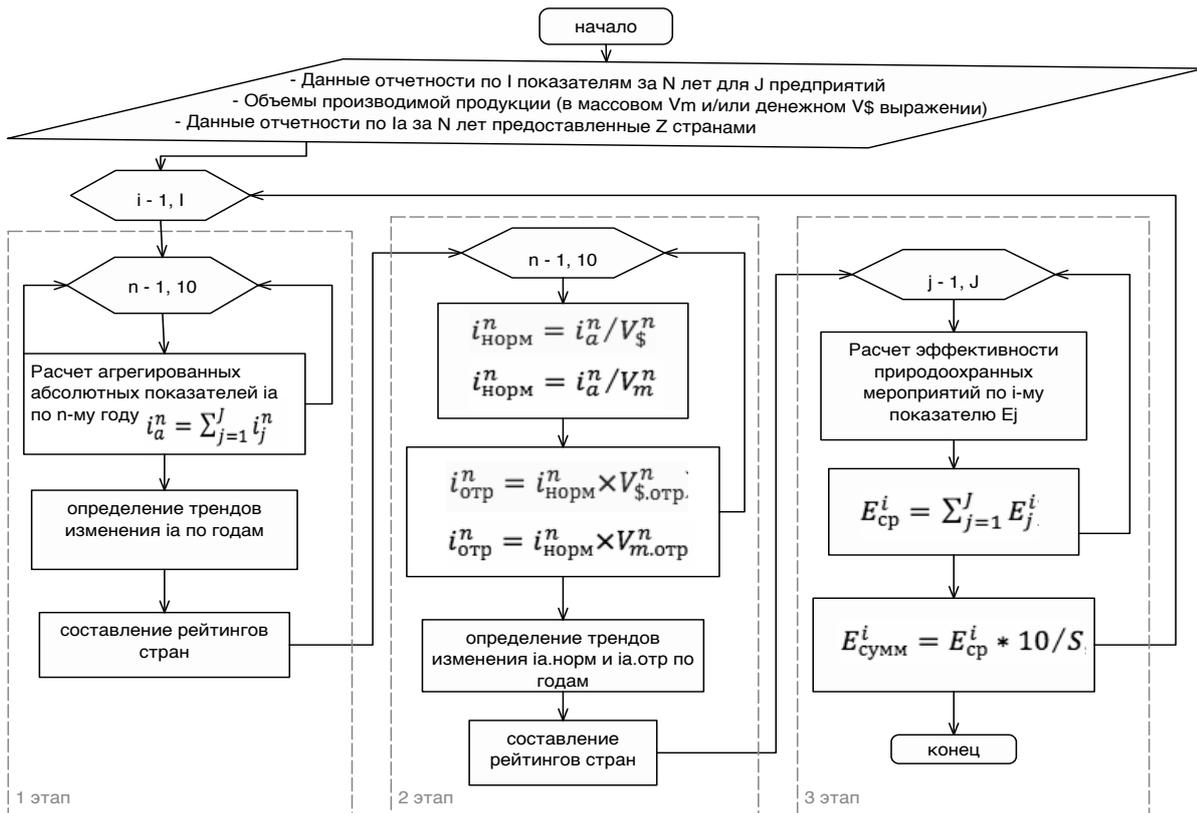


Рис. 2. Блок-схема ЛВА-1 оценки эффективности природоохранной деятельности ХП.

Для оценки эффективности природоохранных мероприятий предложена методика расчета на основе на определения тангенса угла наклона линии результирующего приближения к суммарным затратам ХП - участников программы РС на охрану ОС (см.рис.3).

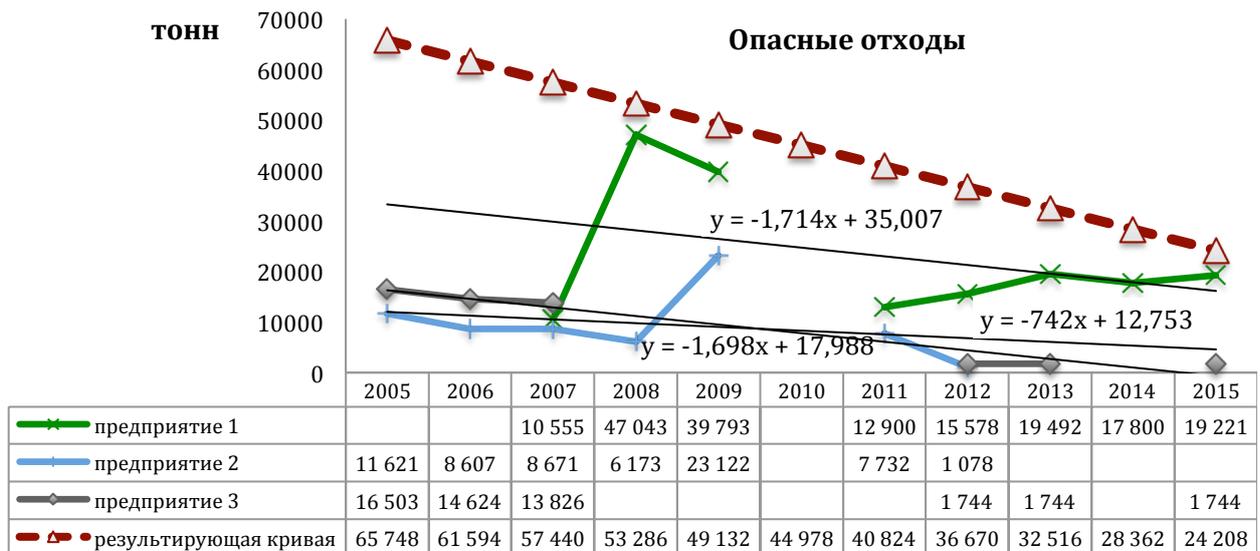


Рис. 3. Расчет эффективности реализации программы РС по показателю: размещение токсичных отходов. Графики - размещение опасных отходов на отдельных ХП-участниках программы РС, прямые тонкие линии – линейные приближения определенные для каждого ХП, прямая пунктирная линия – результирующее приближение для отрасли в целом.

Линия результирующего приближения на множестве сложных кривых (см.рис.3) для оцениваемого показателя получается путем суммирования тангенсов углов наклона индивидуальных линий трендов отдельных ХП (тонкие прямые линии на рис.3), представивших отчетность за ≥ 4 лет.

Для сравнительной оценки и выбора оптимальной экологически безопасной ХТС автором разработан ЛВА-2, применяемый в случае, когда возможно использовать различные ХТС получения ХВ различными способами (или при различных условиях). ЛВА-2 обеспечивает расчет факторов, характеризующих уровень «зелености» или показатели энергоресурсо-эффективности ХТС для выбранных N индикаторов, позволяющих количественно оценить соответствие ХТС принципам «зеленой» химии и способам обеспечения энергоресурсосбережения. Оценка уровня «зелености» ХТС (%) осуществляется по отношению к наихудшей из имеющихся альтернатив ХТС по соответствию принципам «зеленой» химии и энергоресурсосбережения. Ранжирование ХТС проводится по 4 категориям: низкоэффективные ХТС (красная зона) – ХТС, эффективность которых не превышает 75% от наихудшей альтернативы; умеренно эффективные ХТС (оранжевая зона) с эффективностью от 75% до 50%; ХТС с приемлемой эффективностью (желтая зона) от 50% до 25%; высокоэнергоресурсоэффективные ХТС (зеленая зона) с эффективностью менее 25%. Оптимальными считаются такие энергоресурсоэффективные ХТС, для которых значения всех выбранных индикаторов лежат в зеленой или в желто-зеленой зонах.

Алгоритм ЛВА-3 основан на методе многокритериального ранжирования различных критериев, которые могут быть заданы в численном, неформализованном (лингвистическом) и в формализованном виде. Вектора оценок x_i для i -го ХВ равен:

$$x_i = \sum_{j=1}^{C_p} C_{p,j} \times \mu_j, \quad (4)$$

где: $C_{p,j}$ j -й критерий выбора приоритетных ХВ; μ весовой коэффициент для каждого из выделенных критериев выбора C_p по оценкам экспертов.

Алгоритм ЛВА-4 для многокритериального анализа вариантов эквивалентной замены состоит из следующих этапов: описание требующих в замены опасных для ОС химических веществ; поиск вариантов эквивалентной замены для ХВ; оценка найденных ХВ; составление перечня вариантов эквивалентной замены ХВ.

С использованием ЛВА-3 определено, что одним из приоритетных загрязните-

лей ОС в России являются ртуть и ее соединения. Для проведения с применением предложенной автором комплексной методики ОВОС и расчета «химического следа» Ch^{Hg} необходимо собрать и обработать большой массив данных об источниках поступления Ch^{Hg} в различные подсистемы ОС.

В главе 5 «Методические основы разработки информационного обеспечения для идентификации источников поступления в ОС ртути и ее соединений» представлены ЛИМ процессов поступления Ch^{Hg} в ОС в цепях поставок различных областей реального сектора экономики: добыча и применение углеводородов; извлечение металлов (рис.4); использование Ch^{Hg} в промышленности и в приборах.

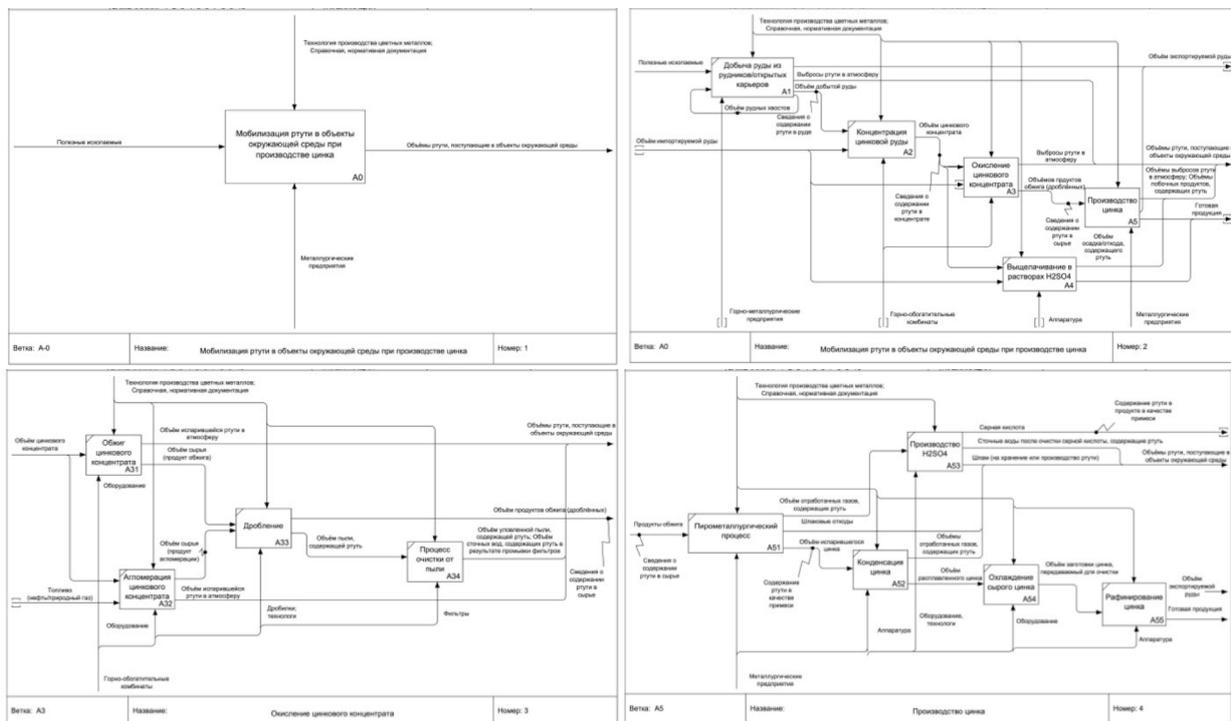


Рис. 4. Пример ЛИМ процессов поступления Ch^{Hg} от металлургических производств

Для проверки достоверности данных, полученных по разработанной автором методологии ОВОС, составлены БД о фактическом содержании Ch^{Hg} в подсистемах ОС, которые специальным образом визуализированы на географических картах существующего загрязнения Ch^{Hg} различных подсистем ОС (пример загрязнения Ch^{Hg} гидросферы см. на рис.5).

количеств Ch^{Hg} в различные подсистемы ОС: 10% изначально содержащихся в концентрате Ch^{Hg} выбрасывается в атмосферу; 2% попадают в гидросферу; 42% остаются в побочных продуктах производства, в первую очередь, в серной кислоте; 48% переходит в почву (отвалы и отходы). В расчетах поступления Ch^{Hg} в ОС при обогащении концентратов из-за отсутствия достаточной информации об объемах руд, добываемых на конкретных рудниках, использовалась информация, предоставляемая рудоперерабатывающими, а не горнодобывающими предприятиями, что является источником погрешности при определении источников эмиссии Ch^{Hg} в ОС. Результаты расчета скорости поступления Ch^{Hg} по федеральным округам (ФО) РФ представлены в табл. 1.

Таблица 1

Скорость поступления Ch^{Hg} в пересчете на ртуть (кг/год) в подсистемы ОС по ФО

	ЮФО	ЦФО	УФО	СКФО	СЗФО	ПФО	ДФО	СФО
	Скорость поступления Ch^{Hg} в подсистемы ОС							
Атмосфера	1104	2368	1771	548	1014	1971	8471	13099
Гидросфера	144	82	1056	639	75	1495	3893	5620
Почва	5265	865	18679	193	343	685	127785	36118

В главе 7 «Разработка научно-обоснованных решений по минимизации ВОС ртути и ее соединений в глобальном и региональном масштабах» для ОВОС ртути и ее соединений, поступающих в различные подсистемы ОС, проведен расчет Ch^{Hg} по формуле (1). Масса Ch^{Hg} в подсистемах ОС и требуемые количества воздуха $V_{a,\text{Hg}}$, воды $V_{w,\text{Hg}}$ и почвы $M_{s,\text{Hg}}$ оценивались с использованием универсального комплекса программ «USEtox» (см. табл. 2) и алгоритма расчета констант скоростей переноса и миграции Ch^{Hg} в гидросфере с использованием ГИС (см. раздел 2.4).

Таблица 2.

Результаты расчета «химического следа» Ch^{Hg} по федеральным округам РФ.

ФО	Подсистемы окружающей среды										«Химический след» для Ch^{Hg}
	Атмосфера			Поверхностные пресные воды гидросферы			Почвы не отнесенные к сельскохозяйственным				
	$V_{a,\text{Hg}}$ (km^3)	$V_{a,\text{sys}}$ (km^3)	$\frac{V_{a,\text{Hg}}}{V_{a,\text{sys}}}$	$V_{w,\text{Hg}}$ (km^3)	V_w^{sys} (km^3)	$\frac{V_w^{\text{Hg}}}{V_w^{\text{sys}}}$	m_s^{Hg} (тонны)	M_s^{Hg} (тонны)	M_s^{sys} (тонны)	$\frac{M_s^{\text{Hg}}}{M_s^{\text{sys}}}$	
СКФО	16,0	$2,0 \cdot 10^5$	$7,8 \cdot 10^{-5}$	19,8	4,3	4,6	$1,8 \cdot 10^4$	$8,6 \cdot 10^6$	$4,3 \cdot 10^6$	2,0	4,6
ЦФО	34,3	$7,8 \cdot 10^5$	$4,4 \cdot 10^{-5}$	75,7	23,0	3,2	$5,0 \cdot 10^4$	$2,4 \cdot 10^7$	$3,9 \cdot 10^7$	0,6	3,2
ДФО	123,6	$6,4 \cdot 10^6$	$1,9 \cdot 10^{-5}$	178,6	154,3	1,2	$1,6 \cdot 10^5$	$7,6 \cdot 10^7$	$9,2 \cdot 10^8$	0,1	1,2
СФО	200,4	$5,4 \cdot 10^6$	$3,7 \cdot 10^{-5}$	381,6	130,0	3,0	$3,5 \cdot 10^5$	$1,7 \cdot 10^8$	$6,8 \cdot 10^8$	0,2	3,0
УФО	91,8	$1,9 \cdot 10^6$	$4,8 \cdot 10^{-5}$	634,1	227,3	2,8	$1,3 \cdot 10^5$	$6,0 \cdot 10^7$	$2,0 \cdot 10^8$	0,3	2,8
СЗФО	14,7	$2,0 \cdot 10^6$	$7,3 \cdot 10^{-6}$	39,2	126,5	0,3	$1,0 \cdot 10^4$	$4,8 \cdot 10^6$	$2,1 \cdot 10^8$	0,02	0,3
ПФО	102,9	$1,2 \cdot 10^5$	$8,3 \cdot 10^{-5}$	264,9	51,8	5,1	$1,8 \cdot 10^5$	$8,3 \cdot 10^7$	$6,5 \cdot 10^7$	1,3	5,1
ЮФО	10,1	$5,0 \cdot 10^5$	$2,0 \cdot 10^{-5}$	26,2	31,5	0,8	$7,8 \cdot 10^3$	$3,7 \cdot 10^6$	$7,1 \cdot 10^6$	0,5	0,8

Из табл. 2 видно, что наибольшее воздействие на ОС оказывают Ch^{Hg} , поступающие в результате антропогенной деятельности человека в гидросферу. На рис.6 ре-

зультаты расчета «химического следа» для Ch^{Hg} представлены в виде лепестковых диаграмм.

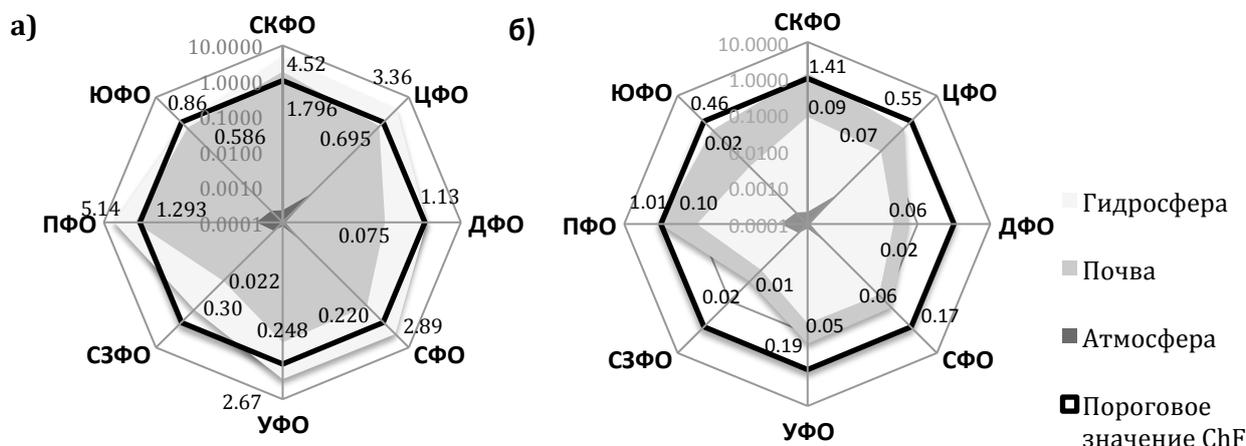


Рис. 6. Лепестковые диаграммы результатов расчета «химического следа» для Ch^{Hg} в ФО России с использованием для гидросферы в качестве пределов а) ПДК рыб.хоз. = 0,00001 мг/л б) ПДКхоз.быт. = 0,0005 мг/л

На рис.6а представлена ситуация, когда в качестве предела для гидросферы взята ПДК для рыбохозяйственных водоемов (0,00001 мг/л). Результаты расчетов показывают, что практически во всех ФО существует риск превышения данной ПДК. На рис.6б в качестве предела для гидросферы взята ПДК для хозяйственно-питьевых и культурно-бытовых водоемов (0,0005 мг/л). Полученные результаты (см. рис 6) свидетельствуют о низком риске негативного воздействия на организм человека.

Сопоставление полученных расчетных данных с экспериментальными (для гидросферы см. рис.5) позволило сделать вывод о корректности разработанного алгоритма расчета Ch^{F} . Разработанная методика выбора критериев принятия решений по приоритизации природно-техногенных источников поступления Ch^{Hg} в ОС состоит из следующих этапов: оценка опасности поступающих от различных источников Ch^{Hg} для ОС; оценка возможного влияние изменения климата и организационно-регуляторных мероприятий на содержание Ch^{Hg} в ОС. Для оценки влияния климата на содержание Ch^{Hg} в подсистемах ОС в разработанный алгоритм расчета констант скоростей переноса и миграции Ch^{Hg} (см. раздел 2.4) включены данные климатических изменений (модель INM CM4, сценарии RCP 4.5 и RCP 8.5 на 2045 и 2100 г.)⁹.

Результаты проведенных расчетов показали, что вследствие значительного увеличения количества осадков, будет снижаться концентрация Ch^{Hg} в ОС в федераль-

⁹ <https://esgf-node.llnl.gov/search/cmip5>

ных округах в атмосфере (до 22%), пресных водоемах (до 12%) и почве (до 40%). Однако установленные лимиты по прежнему будут превышены, и для их снижения потребуются дополнительные регуляторные меры. Для оценки эффективности организационно-регуляторных мероприятий разработана методика и алгоритмы компьютерного анализа различных сценариев поступления Ch^{Hg} в ОС. С использованием разработанной методики проанализирован сценарий принятия регуляторных мероприятий в соответствии с основными положениями Минаматской конвенции, требующими в 2025 г. исключить применение Ch^{Hg} в хлорно-щелочных производствах, а в 2020 г. - применение Ch^{Hg} при производстве винилхлорид мономера, в термометрах и лампах. Кроме того, в сценарии выдвинуто предположение, что извлечение Ch^{Hg} с цветными металлами остается неизменным на уровне 2012 г., а рост потребления углеводородных ресурсов, согласно энергетической стратегии РФ¹⁰, прогнозируется к 2030 г. в 2, 1.3, и 1.35 раза, соответственно. Рассчитанные значения выбросов Ch^{Hg} и образования отходов представлены на рис.7.

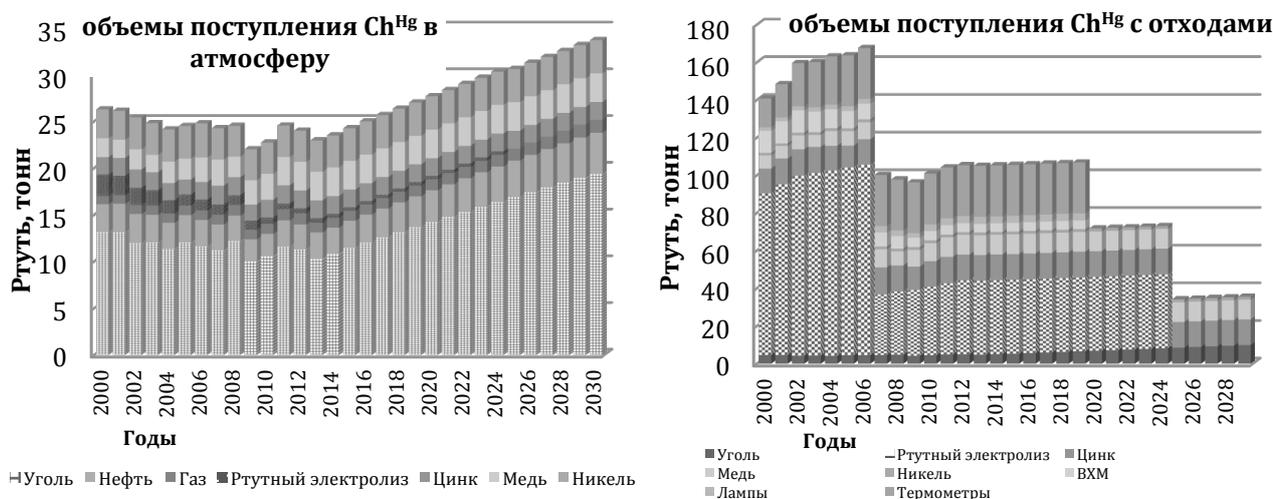


Рис. 7. Результаты расчетов объемов поступления Ch^{Hg} в атмосферу и почву РФ при ратификации Минаматской конвенции о ртути.

Возможные изменения в Ch^{Hg} к 2045 г. при внедрении регуляторных ограничений, требуемых при ратификации РФ Минаматской конвенции о ртути, которые дополнены возможными климатическими изменениями, представлены на рис.8.

¹⁰ Энергетическая стратегия России на период до 2030 года. Утверждена распоряжением Правительства Российской Федерации от 13 ноября 2009 г. № 1715-р <https://minenergo.gov.ru/node/1026>

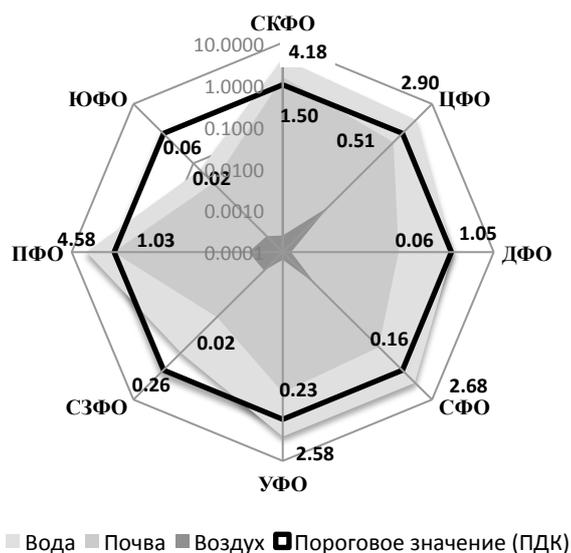


Рис.8. Лепестковая диаграмма возможного изменения «химического следа» Ch^{Hg} на уровне ФО в 2045 г. с учетом изменений климата и регуляторных ограничений при ратификации РФ Минаматской конвенции о ртути.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИОННОЙ РАБОТЫ

1. Разработана комплексная методика ОВОС химических веществ в глобальном или региональном масштабе с использованием оценок «химического следа», позволяющая провести на основе системного анализа оценку для большого количества ХВ, находящихся в одновременном обращении на исследуемой территории, в региональном и/или глобальном масштабах, отличающаяся учетом концепции «экологического следа», применением методологии оценки ЖЦ, математических моделей миграции и трансформации в подсистемах ОС, что позволяет учитывать не только поступление ХВ в ОС, но и изменение количества ХВ в результате процессов миграции из одной подсистемы ОС в другую, деградации и/или вынесения за пределы или внесения в границы исследуемого объекта ХВ в результате трансграничного переноса.

2. Разработан алгоритм расчета констант скоростей переноса ХВ в гидросфере, отличающийся использованием ГИС, что позволяет учесть пространственную дифференциацию констант на исследуемой территории за счет направленного переноса пресноводных масс.

3. Разработана комплексная методика системного анализа социо-эколого-экономических индикаторов и трендов, характеризующих воздействие ХВ на ОС и здоровье человека, отличающаяся использованием больших массивов неоднородных данных от представителей ХП и населения, что позволяет оценивать возможность внесения качественных изменений в организацию производства и потребления хими-

ческих веществ в РФ, в результате применения «зеленых» технологий, энергоресурсоэффективных ХТС и цепей поставок, при достаточно слабой осведомленности населения об опасных свойствах используемых ХВ (однако при этом примерно 50% населения способно распознать, опасные ХВ для ОС).

4. Разработан комплекс ЛВА поддержки принятия решений по снижению воздействия ХВ на ОС: ЛВА-1 обработки информации по ОВОС химических предприятий; ЛВА-2 поддержки принятия решений по выбору наиболее безопасных для ОС химико-технологических систем; ЛВА-3 выбора приоритетности по опасному ВОС химических веществ в глобальном и региональном масштабах; ЛВА-4 многокритериального анализа вариантов эквивалентной замены опасных ХВ. Результаты применения этих ЛВА обработки информации по ОВОС показали эффективность использования ХП добровольных инициатив, в том числе, международной общественной программы РС, как инструментов снижения ВОС химических веществ.

5. Разработаны логико-информационные модели поступления Ch^{Hg} в ОС от различных природно-техногенных источников и процедуры принятия решений по приобретению дополнительных данных о поступлении в ОС ртути и ее соединений, что позволяет количественно определять объемы поступления Ch^{Hg} в различных подсистемах ОС для федеральных округов и регионов России.

6. На основе обработки больших массивов неоднородных данных и с использованием разработанной комплексной методики ОВОС определено, что наибольшая нагрузка от Ch^{Hg} приходится на гидросферу и особенно велик риск превышения ПДК для рыбохозяйственных водоемов.

7. На основе результатов системного анализа сценариев поступления Ch^{Hg} в различные подсистемы ОС и разработанной компьютерной модели ОВОС обоснованы критерии принятия научно-обоснованных решений по приоритизации уровня опасности природно-техногенных источников поступления Ch^{Hg} в ОС и предложения для Министерства природных ресурсов РФ по формированию национального плана действий по минимизации воздействия Ch^{Hg} на ОС и здоровье человека, являющегося необходимым документом при ратификации РФ «Минаматской конвенции о ртути».

8. Основные положения выводы и рекомендации диссертационной работы включены в научно-исследовательские отчеты ОАО «НИИ Атмосфера» охраны атмо-

сферного воздуха», выполненные в рамках гранта PCA/2013/030 GLF-2310-2760-4C83 «Пилотный проект по формированию кадастра выбросов ртути в РФ» от 02.02.2013.

9. Научные разработки автора по оценке опасности ХВ практически используются в деятельности ООО «Колтек-ЭкоХим» и ФГУП «Рособоронстандарт».

Основные результаты диссертации изложены в следующих работах:

Статьи в журналах, индексируемых в международных системах SCOPUS и Web of Science:

1. **Makarova A.**, Shlyakhov P., Tarasova N. Estimating chemical footprint on high-resolution geospatial grid // *Procedia CIRP*. 2018. Vol.69. P. 469–474
2. **Makarova A.**, Tarasova N., Meshalkin V., Kukushkin I., Kudryavtseva E., Kantyukov R., Reshetova E. Analysis of the management system in the field of environmental protection of Russian chemical companies//*International Journal for Quality Research*. 2018. Vol.12. P.43-62
3. Тарасова Н.П., **Макарова А.С.**, Васильева Е.Г., Шляхов П.И., Занин А.А. Оценка фосфорной нагрузки на пресные водоёмы субъектов российской федерации: моделирование миграции фосфора и его соединений между компонентами окружающей среды//*Доклады академии наук*. 2018. № 480(6). С. 1–5.
4. **Makarova A.**, Meshalkin V., Klemeš J., Kudryavtseva E., Bulatov I. Ecological and economic model of performance evaluation of the companies involved in the Responsible Care® program//*Chemical Engineering Transactions*. 2017. Vol.61. P. 1477–1482
5. **Makarova A.**, Baurin D., Gordienko M., Kudryavtseva E., Grosheva V., Yakubovich L. Algorithm of multi-criterion green process assessment for renewable raw materials bioconversion//*Journal of Cleaner Production*. 2017. Vol.162(20). P. 380 – 390
6. **Makarova A.**, Baurin D., Gordienko M., Kudryavtseva E. Green chemistry for the optimum technology of biological conversion of vegetable waste//*Sustainable Production and Consumption*. 2017. Vol.10. P. 66-73
7. Kulyamin D., **Makarova A.** Modelling of middle atmosphere global response to anthropogenic climate change: Impact on general circulation and air composition in mesosphere and lower ionosphere//*In 17th International Multidisciplinary Scientific GeoConference SGEM 2017*. 2017. Vol.17. P. 437 – 444
8. Belousova A., Rudenko E., Zanin A., **Makarova A.** Resources of the underground waters of Russia, their use and quality. In 17th International Multidisciplinary Scientific Conference SGEM2017. Vol.17. P. 339–346
9. Tarasova N, **Makarova A.**, Fantke P., Shlyakhov P. Estimating chemical footprint: contamination with mercury and its compounds//*Pure Appl. Chem*. Published Online: 12.04.18
10. Tarasova N, **Makarova A.**, Vinokurov S., Kuznetsov V., Shlyakhov P. Green chemistry and sustainable development: approaches to chemical footprint analysis//*Pure Appl. Chem*. 2018. Vol. 90(1). P. 143–155
11. Tarasova N., **Makarova A.**, Vasileva E., Savelova D. Estimation of the phosphorus loading with consideration for the planetary boundaries (for the Russian Federation as an example)//*Pure and Applied Chemistry*. 2017. Vol.38(6). P. 8-11
12. Tarasova N., **Makarova A.**, Vasileva E. Phosphorus within Planetary Boundaries//*Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements*. 2016. Vol.191(11-12). P. 1447-1451
13. Тарасова Н.П., **Макарова А.С.** Оценка уровня химического загрязнения в контексте планетарных границ//*Известия Академии наук. Серия химическая*. 2016. № 5. С.1383-1394.
14. Tarasova N., **Makarova A.**, Ingel F. Systemic approach to the development of green chemistry// *Pure and Applied Chemistry*. 2016. Vol.88 (1-2). P. 37–42
15. Тарасова Н.П., Ингель Ф.И., **Макарова А.С.** Зеленая химия как инструмент снижения рисков, обусловленных воздействием на окружающую среду// *Химическая физика*. 2015.

Т.34. № 6. С.5-11.

16. Tarasova N., **Makarova A.**, Varlamova S., Vavilov S. The development of Green Chemistry in Russia as a tool to improve the competitiveness of chemical products [an opinion poll]// Journal of Cleaner Production. 2014. Vol.83. P. 491–496.
17. Тарасова Н.П., **Макарова А.С.** Сравнительный анализ систем управления обращением химикатов//Известия Академии наук. Серия химическая. 2013. № 7. С.1682-1694.
18. Тарасова Н.П., **Макарова А.С.**, Вавилов С.Ю., Варламова С.Н., Щукина М.Ю. Зеленая химия и российская промышленность//Вестник Российской академии наук. 2013. №12. С.1-8.
19. Скобелев Д.О., Зайцева Т.М. Козлов А.Д. Перепелица В.Л., **Макарова А.С.** Лабораторные информационные менеджмент-системы в практике аналитических лабораторий// Измерительная техника. 2010. № 10. С. 66-71.

Статьи в журналах, рекомендованных ВАК Минобрнауки РФ:

20. **Макарова А.С.**, Васильева Е.Г. Алгоритм расчета констант скоростей переноса химических веществ в гидросфере с использованием геоинформационных систем//Научный журнал «Известия Самарского научного центра РАН». Т.19. № 4. С.139-148
21. AtKisson A., **Makarova A.**, Makarov S., Tarasova N. Sustainable Management of Chemicals in Russia - Improving the Use of Chemicals and Minimizing the Danger for Nature and Human Beings// Безопасность в техносфере. 2014. № 6. С.3–11.
22. **Макарова А.С.** Конвенция Минамата по ртути//Токсикологический вестник. 2013. № 1 (118). С.51-53.
23. **Макарова А.С.** «Зеленая» химия – эффективный инструмент снижения риска воздействия химических веществ на здоровье человека и окружающую среду// Токсикологический вестник. 2012. № 5 (116). С.53-55.
24. Скобелев Д.О., Жажигалкин А.В., Зверкова Н.В., **Макарова А.С.** Проблемы нормативно-правового обеспечения безопасности обращения химической продукции в Российской Федерации// Стандарты и качество. 2011. №1. С.34-37.
25. Скобелев Д.О., Жажигалкин А.В., Зверкова Н.В., **Макарова А.С.** Нормативно-правовые основы обеспечения безопасного обращения отдельных видов химической продукции в Российской Федерации//Стандарты и качество. 2011. № 2. С.22-26.
26. Юрасова А.А., **Макарова А.С.**, Скобелев Д.О. Внедрение в Российской Федерации современной модели классификации опасности химической продукции// Токсикологический вестник. 2011. № 1 (106). С.2-10.
27. Андреев В.Г., Бараненко В.В., **Макарова А.С.**, Скобелев Д.О., Юрасова А.А. Основные направления совершенствования нормативного правового регулирования по вопросам обеспечения химической безопасности//Экология и промышленность России. 2011. №7. С. 56-59.
28. **Макарова А.С.**, Юрасова А.А., Козлов А.Д. Паспорт безопасности и предупредительная маркировка химической продукции//Безопасность труда в промышленности. 2009. № 12. С.54-60.
29. **Макарова А.С.** Стандарты по безопасному обращению химической продукции// Стандарты и качество». 2009. №9. С.52 – 55.

Свидетельства о праве на объекты интеллектуальной собственности.

30. Устройство экологического мониторинга атмосферы и почвы: пат. 178114 Рос. Федерация. Заявка № 2017120516; заявл. 13.06.2017; опубл. 23.03.2018, Бюл. № 9. 7 с.
31. Оценка воздействия на окружающую среду смесевой химической продукции: свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2017617751 Рос. Федерация. Зарегистр. 11.07.2017. - 1 с.
32. Оценка воздействия на окружающую среду химических веществ: свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2017617710 Рос. Федерация. Зарегистр. 11.07.2017. - 1 с.

33. «Химия в быту»: свидетельство об официальной регистрации программы для ЭВМ № 2017612718 Рос.Федерация. Зарегистр. 02.03.2017. - 1 с.

Прочие публикации:

34. Макаров С.В., Кудрявцева Е. И., **Макарова А.С.** Управление степенью визуализации воздействия промышленных объектов на окружающую среду// Экология и промышленность России. 2016. № 20. С. 44-49.
35. Макаров С.В., Кудрявцева Е. И., **Макарова А.С.** Визуальная оценка эффективности экологической деятельности предприятий// Экология промышленного производства. 2016. №3 (95). С.36-42.
36. Бурый А.С., **Макарова А.С.** Модели многокритериального выбора альтернатив для опасных химических веществ// Транспортное дело России. 2015. № 4. С. 85-89.
37. **Макарова А.**, Humphris C. SAICM Science Sector and IUPAC Activities// Chemistry International. 2016. 38(6). P.8-11.
38. Бурый А.С., **Макарова А.С.** Многокритериальный выбор альтернатив для замещения перфторсоединений в условиях разнородных признаков//Информационно-экономические аспекты стандартизации и технического регулирования. 2015. № 6(28). С.1.
39. **Макарова А.С.**, Тарасова Н.П. Методология компьютерной оценки экологического следа химических веществ. В книге: V Международная конференция-школа по химической технологии ХТ'16 сборник тезисов докладов сателлитной конференции XX Менделеевского съезда по общей и прикладной химии. 2016. С. 97-99.
40. Минко В.В., **Макарова А.С.** Организация взаимодействия с различными категориями предприятий, выбросы и сбросы которых содержат ртуть, в рамках создания кадастра источников ртути//Успехив химии и химической технологии. 2014. 28 (4). С.76-78.
41. **Макарова А.С.**, Кудрявцева Е.И., Меньшиков А.Н., Макаров С.В. Анализ эффективности управления на российских химических предприятиях – участниках программы «Ответственная Забота» с помощью комплексных эколого-социальных показателей и экологических индикаторов//Успехи в химии и химической технологии. 2014. Том. 28. № 4. С. 31-34.
42. Колесников В.А., Тарасова Н.П., **Макарова А.С.** Двенадцать принципов зеленой химии//Химия и бизнес. 2013. № 126 Март. С.39-42.
43. Канищев П.Ю., Скобелев К.Д., Чечеватов В.А., **Макарова А.С.**, Юрасова А.А. Нужная информация - в нужное время! Информирование в системе безопасного обращения химической продукции//Мир стандартов. 2012. № 03 (64). С.26-32.
44. Егоров А.Ф., Савицкая Т.В., Бачкала О.В., **Макарова А.С.** Информационная поддержка процессов безопасного обращения химической продукции // сб.трудов XXV Междунар. Науч. Конф.: в 10 т., Т.5. Секции 8,9/под общ. Ред. А.А. Большакова. – Волгоград: Волгоград. Гос. Техн. ун-т, 2012; Харьков: Национ. Техн. ун-т «ХПИ», 2012.С.52-53.
45. Бачкала О.В., Егоров А.Ф., **Макарова А.С.**, Савицкая Т.В. Информационная поддержка процессов идентификации, оценки и классификации опасности химической продукции // Международная конференция по химической технологии ХТ-2012, 18–23 марта 2012 г. Москва программа конференции п.1.36 – С.23.
46. Егоров А.Ф., Савицкая Т.В., **Макарова А.С.**, Бачкала О.В. Функциональная структура и программно-алгоритмическое обеспечение информационно-аналитической системы управления безопасным обращением химической продукции // Химическая технология. 2012. № 9. С. 574-576.
47. Скобелев Д.О., Козлов А.Д., **Макарова А.С.** Химический диалог АТЭС: основные направления деятельности в области безопасного обращения химической продукции// Мир стандартов. 2011. № 2(53). С. 33-37.
48. Скобелев Д.О., Козлов А.Д., **Макарова А.С.**, Бачкала О.В. О деятельности Подкомитета экспертов по Рекомендациям ООН - СГС на XXI сессии//Мир стандартов. 2011. № 6(57).

С. 36-41.

49. Скобелев Д.О., **Макарова А.С.**, Бачкала О.В., Макаров С.В. Описание функционирования национальной системы по безопасности химической продукции на примере безопасного обращения химической продукции для окружающей среды//Мир стандартов, 2010, № 3. С.7-13.
50. Skobelev D., **Makarova A.**, Kozlov A., Kukushkin I. Russia's approach to modern chemicals management// Chemical Watch.-2011. Issue 35, P.7-9.
51. Skobelev D., **Makarova A.**, Kozlov A., Kukushkin I. Russian non-REACH-A System of Chemical Production Safety Being Created in Russia// ChemADVISOR. 2011. № 53. С.18-20.
52. Бачкала О.В., Егоров А.Ф., **Макарова А.С.** Оценка рисков, возникающих при обращении химической продукции /XIX Менделеевский съезд по общей и прикладной химии: тез. докл. – Волгоград: ИУНЛ ВолгГТУ, 2011. Т. 3, С. 373.
53. Скобелев Д.О., Егоров А.Ф., **Макарова А.С.** Сравнительный анализ существующих подходов к оценке и классификации опасности химической продукции и обеспечению ее безопасного обращения//Химическая и биологическая безопасность. Сб. научных трудов. 2011. Т.1. С.44-64.
54. Андреев В.Г., Бараненко В.В., **Макарова А.С.**, Скобелев Д.О., Юрасова А.А. Направления совершенствования правового регулирования по обеспечению химической безопасности//Химическая техника. 2011. № 6. С.42-44
55. **Макарова А.С.**, Скобелев Д.О., Кукушкин И.Г. «Русский не-REACH»: о создаваемой в России системе безопасного обращения химической продукции//Журнал «Нижегородский Коммерсант». 2011. №5 (34).
56. Скобелев Д.О., **Макарова А.С.**, Муратова Н.М., Костылева В.М., Зверкова Н.В. Безопасность химической продукции: Международные и национальные аспекты. – М.: ООО «Маркетинг. Информационные технологии», 2011. 230 с.
57. **Макарова А.С.**, Скобелев Д.О., Кукушкин И.Г. Российское лицо REACH// Методы оценки соответствия. 2011, №3, С.12-16.
58. **Макарова А.С.**, Козлов А.Д., Скобелев Д.О. Предъяви документы, продукция!// Специальный выпуск журнала «Нефть России». 2009. №1. С.50-51
59. **Макарова А.С.**, Козлов А.Д., Скобелев Д.О. Гармонизированный с рекомендациями ООН (СГС) Паспорт безопасности — документ для безопасного обращения химической продукции//Лакокрасочная промышленность. 2009 № 11. С.28-32.
60. **Макарова А.С.**, Кузнецов Д.О., Макаров С.В., Егоров А.Ф. Разработка и использование Паспортов безопасности веществ и материалов в Российской Федерации// Химическая технология, №6, 2000, С. 27-36.
61. **Макарова А.С.**, Кузнецов Д.О., Егоров А.Ф., Макаров С.В. Идентификация, оценка и управление рисками при обращении с потенциально опасными веществами и материалами. - М.: Экологическая экспертиза. Обзорная информация ВИНТИ, 2001 Вып.3, 106 С.

Автор выражает глубокую благодарность своему учителю и научному консультанту – члену-корр. РАН, профессору, д.х.н. Тарасовой Наталии Павловне. Автор благодарит за помощь и поддержку коллектив кафедры ЮНЕСКО «Зеленая химия для устойчивого развития»

Автор выражает признательность за привитую любовь к научно-исследовательской работе профессору, заведующему кафедрой КИС ХТ, профессору, д.т.н. Егорову Александру Федоровичу.

Автор выражает глубокую благодарность за внимание и ценные научно-методические советы Мешалкину Валерию Павловичу академику РАН, директору МИ-ЛРТИ (НОЦ).

Автор благодарит сотрудников ОАО «НИИ Атмосфера», ООО «Колтек-ЭкоХим» и ФГУП «Рособоронстандарт» за проявленный интерес к научным исследованиям автора и за обсуждение практических результатов работы.