

УДК 504.064:004.8

ЭКОЛОГИЧЕСКИЙ МОНИТОРИНГ ПФАС С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

А. С. БАЗУЕВ, В. И. НОВИКОВА

Научный руководитель М. В. ГОНЧАРОВ, канд. техн. наук, доц.
Филиал Национального исследовательского университета «МЭИ» в г. Смоленске
Смоленск, Россия

Пер- и полифторалкильные вещества (ПФАС) – это большая группа синтетических фторированных органических соединений, обладающих поверхностно-активными свойствами [1]. Поэтому ПФАС широко применяются в промышленности и для товаров массового потребления: чистящие средства, средства для пропитки тканей, окраски и защиты поверхностей [1]. ПФАС также являются и причиной экологической опасности: отмечается, что соединения очень устойчивы в окружающей среде и не поддаются разрушению [2]. Также некоторые соединения в ПФАС являются летучими, что способствует большому радиусу загрязнения от источника выброса.

Длительное воздействие таких соединений потенциально опасно для здоровья. Так, например, отмечалось, что ПФАС могут воздействовать негативно на эндокринную и репродуктивную системы, щитовидную железу и т. д. [1]. Одной из проблем экологического контроля является разнообразие соединений данной группы. ПФАС обладают длинной углеродной цепью и изомерией. Поэтому основная задача экологического контроля – выявление различных представителей группы ПФАС и оценивание возможной опасности соединений.

Машинное обучение (ML) – это активно развивающееся направление, которое облегчает работу в различных отраслях за счет автоматизированной обработки больших объемов данных, выявления закономерностей и прогнозирования свойств объектов исследования. В экологическом мониторинге такие методы могут применяться для анализа данных о загрязняющих веществах и оценки их потенциальной опасности. Так, например, в статье 2026 г. были проанализированы 267 соединений ПФАС. Для испытания были использованы 6 разных моделей. Основная задача была понять, какая модель покажет лучший результат при условии сложных и нелинейных зависимостей. В ходе эксперимента было выявлено, что модель RANDOM FOREST показала лучший результат: на тестовой выборке $R^2 = 0,7788$, где R^2 – это коэффициент детерминации, метрика того, насколько хорошо модель объясняет реальные данные [3]. Предполагаем, что RANDOM FOREST показала более стабильные результаты относительно других моделей за счет своей особенности: модель строит множество деревьев решений и объединяет их результаты. Однако стоит здесь уточнить ограничения: в статье авторы отмечали, что из-за недостатка данных и малого разнообразия исследованных молекул необходимо полученные данные экспериментально проверить.

Исходя из иностранных источников, машинное обучение активно внедряется для анализа и экологического мониторинга ПФАС. При отборе и анализе источников по данной теме можно сделать вывод о том, что алгоритмы МЛ используются не только для предварительного скрининга, но и для ранжирования соединений по степени потенциальной опасности, прогнозируя токсичность, сорбции и миграцию в окружающей среде [4].

При этом эффективность таких моделей во многом зависит от состава исходных данных и условий, для которых они были разработаны. Поэтому при практическом применении подобных подходов на территории России необходимо учитывать разнообразие почв и возможность адаптации такого подхода к региональным условиям.

В рамках данной статьи была сформирована общая концепция локальной модели прогнозирования миграции ПФАС вблизи промышленного предприятия в г. Смоленске.

В Смоленске преобладают дерново-подзолистые почвы супесчаного и суглинистого типов. Также стоит отметить, что почвы имеют повышенную кислотность, что влияет на миграцию ПФАС – ускоренное вымывание в грунтовые воды из-за сорбции [5]. Однако это не является исчерпывающим для списков входных данных. Для построения модели, помимо свойств почв, нужно учитывать климатические условия, конкретный ПФАС исходя из промышленного предприятия, рельефа территории, количества осадков, направления поверхностного стока и глубины залегания грунтовых вод. Результатом работы модели будет являться карта зон накопления и миграции ПФАС.

В заключение стоит отметить, что внедрение машинного обучения в мониторинге ПФАС в России находится на начальной стадии. Однако это направление является перспективным. Важно отметить, что особый интерес представляет локальная модель, которая учитывает все экологические особенности региона.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Химическая безопасность : [сайт] / НИАЦ РПОХБВ ФБУН «ФНЦГ им. Ф. Ф. Эрисмана» Роспотребнадзора.
2. Per- and polyfluoroalkyl substances (PFAS) : информационный бюллетень, май 2024 г. / State Water Resources Control Board, Division of Drinking Water (California).
3. Machine learning-driven quantitative modeling and mechanistic interpretation of per and poly-fluoroalkyl substances (PFAS) toxicity / C. Ye, H. Liu, J. Liu [et al.] // Journal of Environmental Chemical Engineering. – 2026. – Vol. 14. – P. 121063.
4. Global prioritization of PFAS in groundwater based on multi-scale evaluation of national and source-level data / Y. Zhou, J. Tao, W. Tang [et al.] // Journal of Environmental Chemical Engineering. – 2026. – Vol. 14. – P. 124712.
5. Effect of pH, surface charge and soil properties on the solid–solution partitioning of perfluoroalkyl substances (PFASs) in a wide range of temperate soils / H. Campos-Pereira, D. B. Kleja, L. Ahrens [et al.] // Chemosphere. – 2023. – Vol. 321. – P. 138133.