

УДК 628.1.032+574.52

НЕЙРОСЕТЕВОЙ АНАЛИЗ КАК ОСНОВА БУДУЩЕЙ СИСТЕМЫ ВОДНО-ЭКОЛОГИЧЕСКОГО РЕГУЛИРОВАНИЯ¹

© 2023 г. О. М. Розенталь^а, *, В. Х. Федотов^б, **

^аИнститут водных проблем РАН, Москва, 119333 Россия

^бЧувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова,
Чебоксары, 428015 Россия

*e-mail: omro3@yandex.ru

**e-mail: fvh@inbox.ru

Поступила в редакцию 22.02.2022 г.

После доработки 28.06.2022 г.

Принята к публикации 04.10.2022 г.

Рассмотрены относительно новые даже для многих ученых и специалистов нейросетевые методы и технологии применительно к их использованию для целей водно-экологического регулирования. Эффективность нейросетей в указанном направлении обусловлена их способностью к самообучению, и связанными с этим возможностями обнаруживать сложные нелинейные зависимости между контролируемыми показателями. В работе описаны методология и особенности функционирования искусственных нейронных сетей. Приведены учебно-методические примеры, иллюстрирующие возможности их использования. В качестве практической задачи применения методов ИНС исследована возможность повышения эффективности выявления крупных предприятий-загрязнителей природной воды из числа многих водопользователей промышленного региона. С этой целью использованы данные по концентрации ряда приоритетных загрязняющих воду металлов на гидрохимических створах р. Исети в зоне г. Екатеринбурга. Показано, что здесь нейросетевой анализ позволяет обнаружить взаимозависимости отдельных показателей качества воды на соседних створах. Благодаря этому удалось сделать вывод о существовании тесных логистических хозяйственных связей водопользователей, упрощающем обнаружение загрязнителей воды по “водному следу”, оставленному предприятиями-смежниками. Показано также, что с использованием методов ИНС появляются новые возможности установления вклада производственных сбросов в уровень загрязнения воды веществами двойного генезиса (естественного и техногенного). Достоверность выводов подтверждается возможностью по имеющимся на заданном гидрохимическом створе данным удовлетворительно предсказывать качество воды на створе, расположенном ниже по течению реки.

Ключевые слова: искусственные нейронные сети, нейросетевой анализ, качество воды, производственные сбросы, водный след, гидрохимический створ.

DOI: 10.31857/S0321059623030112, EDN: DEBXQG

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Нарастающее разнообразие загрязняющих веществ в природных и сточных водах и их истощение в условиях ограниченного гидромониторинга представляют собой глобальный вызов цивилизации, нарушающий среду обитания в угоду экономической конъюнктуре. Угроза от загрязненной воды промышленных регионов для биоценоза и людей становится все более явственной по мере того, как обнаруживается неэффективность систем биосигнализации и автоматического контроля качества воды. Тем более, что официальная информация содержит лишь ограниченное число

усредненных показателей, каждый из которых лишь дезориентирует пользователей, поскольку часто оказывается, что его величина ниже характеристик variability.

Необратимую деградацию водных запасов планеты невозможно остановить без достоверных данных о динамике их состава и свойствах, о достоверной системе раннего предупреждения водно-экологических рисков и о корректном разграничении природных и антропогенных загрязнений. В свою очередь это требует обращения не к усредненной, а к первичной измерительной информации, повышенная variability которой, отражающая нестационарность и нелинейность контролируемых показателей, затрудняет исследования имеющихся закономерностей. Между

¹ Работа выполнена в рамках Государственного задания Института водных проблем РАН (тема FMWZ-2022-0002).

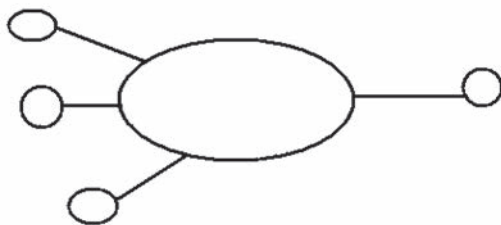


Рис. 1. Искусственный нейрон (овал), преобразующий входные сигналы в выходной (кружочки).

тем знание именно таких закономерностей необходимо для расшифровки протекающих в водных потоках сложных процессов, без учета которых невозможно сохранение и рациональное использование природных вод. Инструменты для указанных исследований – специализированные аналитические системы, опирающиеся на широкий спектр математических моделей от классической регрессии до изящных схем искусственного интеллекта на основе нейронных сетей, возможности которых для водно-экологического регулирования рассмотрены в данной работе.

МЕТОДОЛОГИЯ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Появление и развитие технологии искусственных нейронных сетей (ИНС), начатое с середины прошедшего столетия, недолго оставалось уделом немногочисленной группы теоретиков в области искусственного интеллекта [11, 12, 29]. Уже с 1980-х гг. стало понятно, что методы ИНС могут быть исключительно полезны в разнообразных отраслях науки, экономики и техники, благодаря способности систем самообучаться, распознавать скрытые закономерности и классифицировать большие массивы данных [1, 2, 9, 10, 15, 21, 24], а также благодаря тому, что их идеология доступна даже не математику. Поэтому с появлением первых моделей искусственного интеллекта они используются для диагностики и прогнозных оценок в экологии, климатологии и сельском хозяйстве [19].

Использование ИНС для целей водно-экологического регулирования также представляется исключительно эффективным, что обосновывается в настоящей работе.

Структура искусственных нейронных сетей

Искусственный нейрон – это модельный объект, функционирующий как нейропроцессор, преобразующий входные сигналы в выходные по алгоритму, имитирующему работу естественного нейрона (рис. 1).

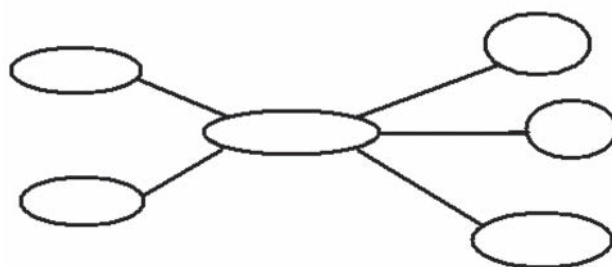


Рис. 2. ИНС с двумя входными, одним промежуточным и тремя выходными нейронами.

Модель ИНС предусматривает: 1) набор нейронов; 2) набор связей между ними; 3) правило обработки входных сигналов; 4) правило вычисления величины активации нейрона; 5) правило вычисления выходных сигналов; 6) правило корректировки силы связей (обучения). На рис. 2 показана трехслойная ИНС с двумя входными нейронами (слева), одним промежуточным (в середине), тремя выходными нейронами (справа), двумя входными связями между первым и вторым слоями сети и тремя выходными связями между вторым и третьим слоями.

Как указано выше, отличительная особенность ИНС – способность оценивать выходную информацию на основе входной в режиме самообучения, обеспечивающем наилучшее соответствие исходных и расчетных данных. Для этого задается типовая архитектура ИНС, включающая линейные сети, многослойные перцептроны (математическая модель мозга) и др. Далее выбирается подходящий алгоритм оптимизации (обучения) [9].

ИНС может моделировать функцию практически любой степени сложности, определяемую числом слоев и нейронов в слое. На практике выбор архитектуры многослойной сети, приспособленной для решения конкретной задачи, устанавливается экспертно.

В рамках обучения сети обнаруживаются возможные скрытые функциональные или статистические зависимости между входными и выходными данными, результатом чего являются числовые оценки весов связей, характеризующих силу влияния нейронов друг на друга. Обученная сеть может использоваться для решения таких важных для водно-экологического регулирования задач, как поиск причинно-следственных связей между контролируруемыми показателями и прогнозирование состава и свойств воды. С этой целью в пакете программ “Statistica Neural Networks” (SNN) [2] могут использоваться различные сети, в том числе наиболее простая линейная,

Таблица 1. Показатели работы автоматической линии

Время (x)	Имеющиеся данные										Прогноз			
	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	20	100
Количество деталей (y)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	20	100

а также более полная многослойная, радиальная базисная или обобщенно-регрессионная.

Линейная сеть (LNN) состоит только из двух слоев (входной и выходной). Это простейший перцептрон и хорошая точка отсчета для оценки возможностей ИНС. Если в задаче немного обучающих данных, то нет оснований использовать более сложные модели.

Многослойный перцептрон (MLP) состоит из двух и более слоев (входной, промежуточные и выходной). Такая сеть может моделировать функцию практически любой степени сложности и является универсальным аппроксиматором. Доказано, что для моделирования любой задачи достаточно MLP с двумя промежуточными слоями [1, 10]. Однако для решения большинства практических задач достаточно всего одного промежуточного слоя.

Сеть радиальных базисных функций (RBF) содержит один промежуточный слой радиально симметричных нейронов и выходной слой из элементов с линейными функциями активации [9, 24]. Элемент этой сети реагирует на расстояние от данной точки до “центра” радиального элемента. Сети RBF имеют ряд преимуществ перед MLP: моделируют любую нелинейную функцию с помощью одного промежуточного слоя, т. е. избавляют от выбора числа слоев; параметры выходного слоя можно оптимизировать с помощью хорошо известных методов линейного моделирования, которые работают быстро и не испытывают трудностей с локальными минимумами, мешающими при обучении MLP. Поэтому сеть RBF обучается на порядок быстрее MLP, но для адекватного моделирования требует, как правило, несколько большего числа элементов, работает медленнее и плохо экстраполирует данные.

Обобщенно-регрессионная сеть (GRNN) построена на вероятностных принципах [9, 21]. В точку расположения каждого обучающего наблюдения помещается гауссова ядерная функция. Считается, что каждое наблюдение свидетельствует о некоторой уверенности в том, что поверхность отклика в данной точке имеет определенную высоту, и эта уверенность убывает при отходе в сторону от точки. GRNN запоминает все обучающие наблюдения и использует их для оценки отклика в произвольной точке. Окончательная выходная оценка сети получается как взвешенное среднее выходов по всем обучающим наблюдениям, где величины весов отражают рас-

стояние от этих наблюдений до точки оценивания (так более близкие точки вносят больший вклад в оценку).

Функционирование искусственных нейронных сетей

Создание любой сети начинается с задания ее структуры, т. е. набора параметров (тип сети, число входов, число слоев, число нейронов в слое, число выходов и др.). Функция Советник (“Advise”) предлагает эвристически определенные разумные значения этих параметров (рекомендуемые). Выбор сети для практической работы выполняется с учетом смысла задачи и опытных соображений. Для обучения ИНС в пакете реализованы типовые алгоритмы: линейного обучения (по умолчанию предполагает обучение методом псевдообратных), радиально-базисного обучения, обратного распространения ошибки, быстрые методы второго порядка и др. Все эти алгоритмы оптимизационные, и способы их применения схожи.

Обученная сеть позволяет анализировать данные в различных режимах: на отдельных наблюдениях, на полном наборе известных наблюдений или выполнять анализ в рекуррентном режиме с вновь появляющимися данными. В результате, обучив сеть на данных, описывающих некоторый класс объектов, можно воспользоваться ей как специализированным инструментом прогнозирования или даже как “экспертом” в заданной предметной области. Выходные данные такой системы рассматриваются как “нейропрогноз” или “нейроэкспериза”. Таким образом, можно построить и обучить несколько модификаций сетей для работы с определенными подклассами данного класса, т. е. создать нейросетевую библиотеку, которая будет всегда быстро доступна, способна быстро дообучаться и обрабатывать большие объемы данных [15].

Примеры

Линейные сети позволяют решить множество практических задач, и можно рекомендовать начинать моделирование именно с них.

Пример 1. Опишем линейную сеть архитектуры 1-1 некоторой автоматизированной производственной линии, которая задана двумя показателями при значениях времени $x \leq 9$ (табл. 1).

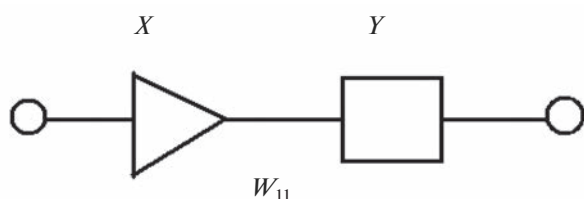


Рис. 3. Простейшая линейная сеть архитектуры 1-1.

Решение. По табл. 1 нетрудно предположить, что скорость работы линии может быть описана уравнением $y = x$. Проверим эту гипотезу с помощью линейной нейросети. Создадим сеть с одним входом и одним выходом, где имеются два нейрона X , Y и одна связь. На рис. 3 входной нейрон сети показан треугольником, выходной – квадратиком. Кружочки соответствуют исходным переменным – они не входят в архитектуру сети. Линия W_{11} обозначает единственную явную связь от входного нейрона к выходному. Сумма взвешенных значений входных сигналов (свертка) равна $W_{11}X$. Если порог включения нейрона обозначить W_{01} , то получим сеть, которая моделирует линейную функцию с двумя параметрами $Y = W_{11}X + W_{01}$.

Обучим приведенную сеть на данных табл. 1. Для этого первые 8 образцов используем для обучения (“Train”), а оставшиеся два из числа известных – для контроля качества обучения (“Verify”). Ход обучения отражен на рис. 4, где видно, что ошибки обучения (нижняя линия) и ошибки верификации (верхняя) близки к нулю и стабилизировались примерно на 500-м шаге (эпохе), что говорит о хорошем качестве обучения и модели в целом.

Найденные в результате обучения веса $W_{11} = 1$, $W_{01} = 6.6 \times 10^{-16} \approx 0$ означают, что сеть нашла зависимость $y \approx 1x + 0 = x$, что совпадает с предложенным выше уравнением.

Для прогноза протестируем сеть при $x > 9$, т. е. получим значения y при 10, 11 и 20, 100. Как видно из правой части табл. 1, нейронная сеть рассчитала недостающие значения с идеальным прогнозом.

Данный пример тривиален и лишь позволяет понять, как работают нейросети.

Пример 2. Усложним задачу, учитывая, что время измерения фиксируется с погрешностью $\pm 10\%$, и внесем возникающий при этом случайный “шум” (табл. 2).

Таблица 2. Показатели работы автоматической линии с учетом погрешности оценки времени

Время (x)	0	1.05	2.1	3.07	4.05	5.07	6.02	7.01	8.03	9.04
Количество деталей (y)	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9

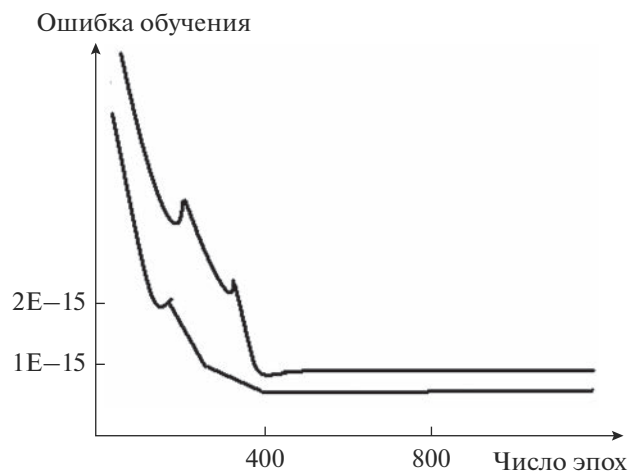


Рис. 4. График ошибок обучения (нижняя линия) и ошибок проверки (верхняя линия), характеризующий алгоритм обучения ($2e - 15$, $1e - 15$ означают 2×10^{-15} , 1×10^{-15}).

Решение. Повторяя описанный выше алгоритм, получим следующее уравнение нейросети: $y = 1.0017x + 0.0034$ с ошибкой 0.026. Аналогичный результат для обычной регрессии следующий: $y = 0.9951x - 0.0309$ с ошибкой 0.029. Как видно, здесь результаты с использованием ИНС и классической регрессии практически одинаковы, но ошибка сети немного меньше.

Убедиться в устойчивости сети можно, повторяя обучение с новыми исходными данными или с новыми начальными значениями весов сети (операция переинициализации, “Reinitialize”). Нетрудно убедиться, что в данном случае результаты практически не изменяются, что указывает на устойчивость сети и на факт единственности найденного решения.

На практике ИНС умеют решать намного более сложные задачи, когда обычные методы статистики малоэффективны.

Пример 3. Пусть требуется исследовать данные табл. 3 ($Y1$ и $Y2$ – выходы):

Решение. На базе этих данных может быть создано четыре сети разной архитектуры: 1-1, 2-1, 1-2 и 2-2. Рассмотрим подробнее две из них, показанные на рис. 5 и 6.

Результаты обучения этих сетей приведены в табл. 4.

Видно, что в данном случае все веса (включая пороги) получили равные значения. Это показывает, что выходы равновероятно связаны с входа-

Таблица 3. Исходные данные, описывающие некоторый процесс

Номер наблюдения	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
X1	1	1	2	1	2	3	3	3	1	0
X2	1	2	2	3	3	3	2	1	3	0
Y1	2	3	4	4	5	6	5	4	4	0
Y2	4	6	8	8	10	12	10	8	8	0

ми и обе сети (рис. 5 и 6) хорошо улавливают линейные связи, имеющиеся в исходном наборе данных. Следовательно, вполне достаточно использовать простейшую из них – 2-1.

Примеры использования нейросетей для решения задач гидрологии

Модели искусственного интеллекта в настоящее время – наилучший инструмент для анализа высоко вариабельных рядов данных, например – свойственных для состава и свойств природных вод. Благодаря этому методы ИНС успешно используются при обработке гидрологической информации, обеспечивая возможность безошибочно решать многие водохозяйственные вопросы. В обзорной работе [26] приведены примеры использования ИНС при моделировании состояния водных ресурсов речных бассейнов, а в [22] – также и для оценки состояния прибрежных вод при условии выбора подходящей архитектуры нейросетей. Ограничения ИНС при обработке данных для целей краткосрочного прогнозирования и классификации показателей качества воды описаны в работе [30]. Другие обзорные работы посвящены “эволюционным алгоритмам при планировании и управлении водоснабжением подземными водами” [27] и моделированию гидрологических характеристик таких вод [28]. В работах последних лет также приводятся результаты исследования данных о качестве воды речных бассейнов, смоделированных с помощью нечетких методов [23, 31].

В целом необходимо отметить, что развитие гидрологических исследований в области искусственного интеллекта происходит с 1990-х гг. При этом заметное место занимают и работы российских ученых. В [8] представлены результаты разработки комплекса средств автоматизации, объединенных в систему мониторинга и прогнозирования гидрологической обстановки с использованием гибридных имитационно-нейросетевых моделей. Система позволяет автоматизировать полный цикл моделирования речных наводнений. Она была апробирована в ходе весеннего половодья в 2014–2018 гг. на участке русла р. Северная Двина от г. Великий Устюг до г. Котласа. Специалисты МГУ им. М.В. Ломоносова и ИВП РАН также неоднократно проводили исследования с применением методов ИНС [17, 18, 20, 25], в частности – на участке слияния рек Сухоны и Юга. Для прогноза затопления Великого Устюга, связанного с формированием ледовых заторов, с помощью ИНС был составлен прогноз на период 9 марта – 29 апреля 2018 г. для следующих районов: посты Тотьма и Каликино (р. Сухона); пост Гаврино (участок слияния рек Юга и Лузы); пост в Великом Устюге. Анализ показал, что ИНС эффективнее работают при обычном ледоходе, прогнозируя длительные по времени и инерционные эффекты. Опыт авторов для анализа водно-экологических рядов описан ниже.

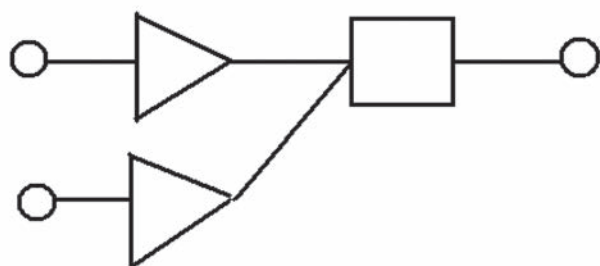


Рис. 5. Линейная сеть с двумя входами и одним выходом 2-1.

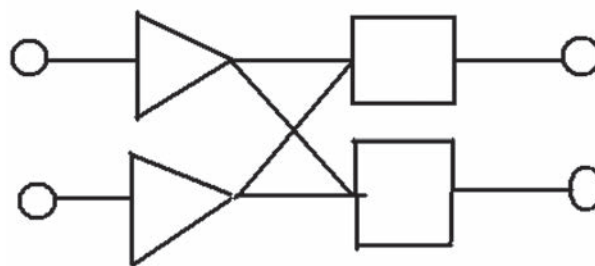


Рис. 6. Линейная сеть с двумя входами и двумя выходами 2-2.

Таблица 4. Веса связей сетей 2-1 и 2-2

	Сеть 2-1	Сеть 2-2	
Пороги	$-1.331e-16$	$-1.331e-16$	$-1.331e-16$
Веса	$W_{11} = 0.5$	$W_{11} = 0.5$	$W_{12} = 0.5$
	$W_{21} = 0.5$	$W_{21} = 0.5$	$W_{22} = 0.5$

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА ВОД ПРОМЫШЛЕННОГО РЕГИОНА НА ОСНОВЕ НЕЙРОСЕТЕВОГО АНАЛИЗА

Данная часть работы выполнена с учетом установленного около ста лет назад положения о том, что качество речной воды селитебных территорий отражает характер человеческой деятельности [14]. Это положение было подтверждено позднее многочисленными исследованиями, в том числе позволяющими выявить такие заболевания, как COVID-19 [32] по обнаруженным фрагментам вируса в сточных водах. Не менее важна задача идентификации по качеству природных вод источников их загрязнения производственными отходами. Оказалось, однако, что это просто решить при наличии единичных предприятий-загрязнителей, но непросто — при многочисленности последних в промышленных регионах [5, 6, 13, 16], когда приоритетной задачей — обнаружение наиболее крупных источников загрязнения. Поэтому была сделана попытка развития методологии такой идентификации с применением методов ИНС для исследования закономерностей, зашифрованных в массивах гидрометеорологической информации. Предполагалось, что нейросети позволят изучить динамику формирования качества воды в условиях его пространственно-временной вариабельности.

Постановка задачи идентификации предприятий-загрязнителей промышленного региона

Для предметного введения в поставленную задачу рассмотрим трудности указанной идентификации на основе имеющихся массивов гидрометеорологических данных. Использовались данные мониторинга качества воды, полученные в 1990–2010 гг. Уральским управлением Росгидромета на гидрохимических постах (створах) р. Исети (правый приток Тобола). Таковы результаты 250 измерений концентрации каждого из выбранных четырех приоритетных металлов-загрязнителей в пунктах выше г. Екатеринбурга (+5.2 км, пункт наблюдения 1), в городе (пункт 2) и ниже его (–4 км, пункт 3), итого $3 \times 4 \times 250 = 3000$ точек. Обнаружилось, что концентрация железа (здесь и далее — в мг/дм^3 , остальных металлов — в мкг/дм^3) изменяется в диапазоне от 0.05 до 5; меди — от 2 до 500; цинка — от 1 до 1000; никеля — от 0 до 500. В результате наблюдается ситуация полного хаоса, при котором признаки вариабельности — размах, амплитуда, среднеквадратическое отклонение концентрации — превышают их средние значения (рис. 7).

Такова типичная ситуация на малых и средних реках в зоне промышленных регионов. Поэтому здесь никакой идентификации отдельных (преобладающих) предприятий-загрязнителей выявить невозможно. Также невозможно и установление вклада стоков в загрязнение природных вод веществами двойного генезиса (естественного и техногенного). В лучшем случае приходится ограничиваться оценкой средних значений контролируемых показателей [5, 13], по которым можно сравнить качество вод на разных створах. Так, из рис. 8 видно, что на участке р. Исети между ство-

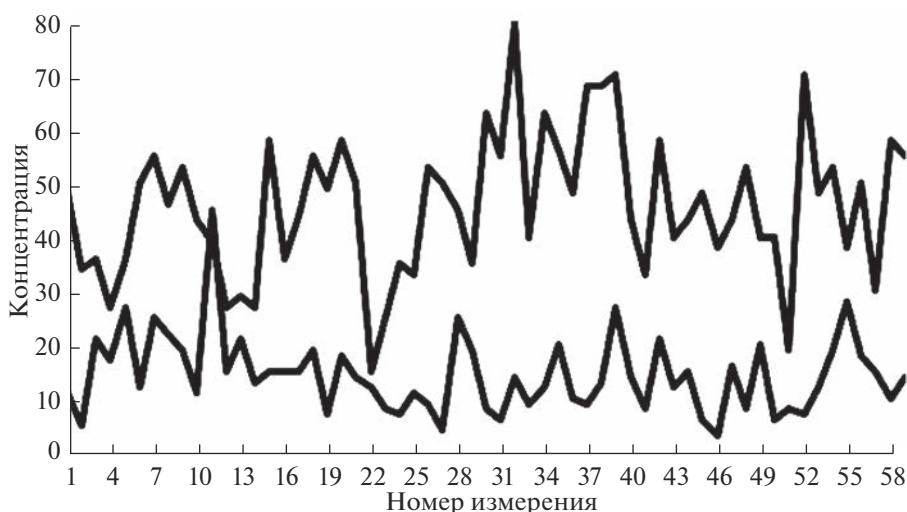


Рис. 7. Ежемесячные измерения в 1999–2000 гг. на створе 2 концентраций соединений цинка (верхняя линия) и никеля (нижняя линия).



Рис. 8. Отнесенные к содержанию металлов на створе 2 средние концентрации железа общего (сплошная линия), никеля (штриховая), меди (пунктирная) и цинка (штрихпунктирная) на створах 1 и 3.

рами 1 и 2 качество воды снижается по цветным металлам, практически вдвое, а на участке 2 → 3 изменяется меньше по всем металлам, кроме цинка, среднее содержание которого повышается втрое.

Возникает первоочередная задача снижения сбросов соединений цинка как особо токсичного загрязнения [16]. Однако, как уже указано, не просто выявить основного предприятия-загрязнителя в развитом промышленном регионе с его металлургическими, машиностроительными, металлообрабатывающими, химическими производствами, где соли цинка используются для нанесения покрытий, травления, обезжиривания и т. д. Как правило, эти производства оснащены очистными сооружениями, но резкий рост цинка на створе 3 означает, что часть из них не работает в плановом режиме, гарантирующем полноту водоподготовки. Неочевидно также, происходит ли точечное (сосредоточенное) загрязнение вод или преобладает неточечный (диффузный) сток с производственных площадок [7]. Здесь недостаточно используемых на практике методов оценки качества воды. Поэтому рассмотрены возможности исследования динамики его формирования на основе ИНС с их способностью оценивать выходную статистическую информацию на основе входной в режиме самообучения, обеспечивающем наилучшее соответствие исходных и расчетных данных.

Предполагалось, что ИНС позволит обнаружить взаимную зависимость “водных следов” [3, 4] сбросов загрязнений на соседних пунктах контроля (створах) реки. Такая зависимость возникает при наличии тесных логистических хозяйственных связей смежных производств, работающих синхронно. Принималось, что тем самым удастся облегчить идентификацию предприятий-загрязнителей по признаку сходной вариабельности контролируемых показателей сбросов [14, 32]. Была задана типовая архитектура ИНС с автома-

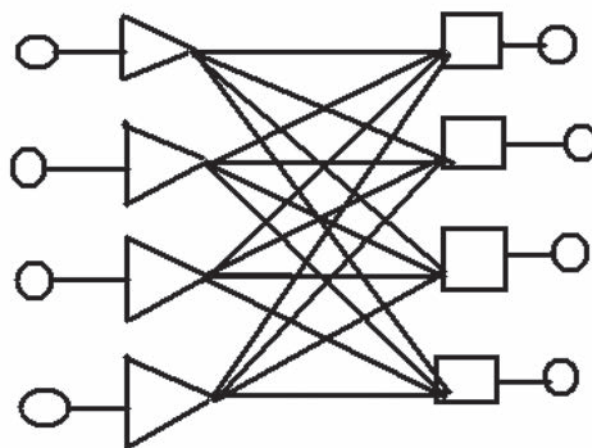


Рис. 9. Полносвязная бинарная линейная сеть архитектуры 4-4.

тизированным процессом описания данных для высоковариабельных рядов, таких как на рис. 7.

Нейросетевой анализ. Бинарная система

Взаимосвязь суммы металлов вышерасположенного створа с каждым металлом на нижерасположенном створе исследовалась с помощью полносвязной бинарной (для двух створов) линейной нейросети архитектуры 4-4, где первая цифра обозначает число металлов на входном створе, а вторая – на выходном (рис. 9).

Анализировали статистику нейрорегрессий (характеристики их точности и множественные коэффициенты корреляции Пирсона) и веса нейросвязей с учетом “влияния суммы загрязнений на каждое из них” и “влияния каждого загрязнителя на каждый”. Результат анализа для створов 1 и 2 приведен в табл. 5.

В табл. 5 показатель “Error Mean” близок к нулю, т. е. нейросеть, обученная на результатах замеров на створах 1 и 2, практически без ошибок воспроизводит исходные данные на этих створах. При этом разброс расчетных значений даже несколько меньше разброса исходных значений. Видно также, что “Abs E. Mean” > “Error Mean”, т. е. знаки разностей измеренных и расчетных значений примерно равномерно чередуются и при вычислении “Error Mean” взаимно погашаются. Кроме того, “S.D. Ratio” < 1, т. е. нейрорегрессия дает меньшие отклонения, чем исходные данные. Коэффициент корреляции здесь варьирует от среднего (влияние металлов створа 1 на Cu2) до умеренного (Fe2) и слабого (Zn2, Ni2) уровня. Это позволяет сделать предположение о возможном пополнении природных загрязнений воды медью в предместье Екатеринбурга, а также об отсутствии избыточных сбросов соединений

Таблица 5. Статистика нейрорегрессии для системы створов 1 → 2 (здесь и далее цифра после обозначения металла соответствует номеру створа; Data Mean – среднее значение концентрации вещества на выходном створе; Data Standard Deviation (S.D.) – стандартное отклонение концентрации на выходном створе; Error Mean – среднее значение разности между измеренным и расчетным (по нейросети) значениями концентрации на выходном створе; Error S.D. – стандартное отклонения исходных данных от расчетных по нейросети; Abs E. Mean – абсолютная средняя ошибка (среднее арифметическое модулей разностей между исходным и расчетным значениями концентрации на выходном створе); S.D. Ratio = Error S.D./Data S.D. – относительная ошибка нейрорегрессии; Correlation – коэффициент множественной корреляции)

Показатель	Fe2	Cu2	Zn2	Ni2
Data Mean	0.67	34.01	47.83	13.94
Data S.D.	0.54	23.56	56.74	16.19
Error Mean	≈0	≈0	≈0	0.17
Error S.D.	0.48	18.59	55.85	15.53
Abs E. Mean	0.34	13.89	23.96	9.59
S.D. Ratio	0.89	0.78	0.98	0.95
Correlation	0.43	0.61	0.17	0.28

цинка и никеля на участке реки между створами 1 и 2.

Другой результат получен для участка реки между створами 2 и 3 (табл. 6), где повышенная корреляция наблюдается для Zn3 и Ni3. При этом снизился разброс корреляций. Такой эффект, вероятно, указывает на однотипность систем очистки сточных вод на взаимозависимых производствах (участках, цехах).

В табл. 6 показатель “Error Mean” близок к нулю, т. е. нейросеть хорошо воспроизводит исходные данные. Показатель “S.D. Ratio” почти не изменился по сравнению с приведенным в табл. 6, но коэффициенты корреляции повысились, особенно по Zn3 и Ni3. Это указывает на пополнение природных загрязнений сбросами.

Нейросетевой анализ. Тернарная система

Взаимосвязь системы двух вышерасположенных створов с нижерасположенным (1 + 2) → 3

Таблица 6. Статистика нейрорегрессии для системы створов 2 → 3

Показатель	Fe3	Cu3	Zn3	Ni3
Data Mean	0.63	42.86	150.11	14.46
Data S.D.	0.58	39.21	266.74	13.58
Error Mean	≈0.00	0.17	1.22	0.23
Error S.D.	0.54	34.31	212.19	10.89
Abs E. Mean	0.36	19.34	123.62	7.92
S.D. Ratio	0.92	0.87	0.79	0.80
Correlation	0.37	0.48	0.60	0.59

исследовалась с помощью полносвязной тернарной линейной нейросети 8-4 (рис. 10).

Для этой системы обнаруживается повышенное снижение разброса корреляций (табл. 7).

Из табл. 7 видно, что сеть, обученная на результатах замеров на створах 1, 2 и 3, хорошо воспроизводит исходные данные. Разброс расчетных значений также меньше разброса исходных значений, а показатель “S.D. Ratio” снизился, свидетельствуя, что тернарная нейрорегрессия несколько точнее бинарной. Коэффициенты корреляции по всем металлам также стали выше, чем в табл. 5 и 6. Дополнительное по сравнению с данными табл. 5 и 6 снижение разброса корреляций и их повышение свидетельствуют о существовании тесных логистических хозяйственных связей предприятий рассматриваемого промышленного региона. Таковым может быть обмен сырьем, материалами и продуктами. Усиление или ослабление такого обмена естественным образом отражается и на интенсивности сбросов в соответствии с моделями, предложенными в работах [14, 32].

Таблица 7. Статистика нейрорегрессии для системы створов (1 + 2) → 3

Показатель	Fe3	Cu3	Zn3	Ni3
Data Mean	0.63	42.86	150.11	14.46
Data S.D.	0.58	39.21	266.74	13.58
Error Mean	0.00	0.17	1.22	0.23
Error S.D.	0.52	33.89	202.12	10.30
Abs E. Mean	0.35	19.34	123.50	7.39
S.D. Ratio	0.88	0.86	0.75	0.75
Correlation	0.45	0.50	0.65	0.65

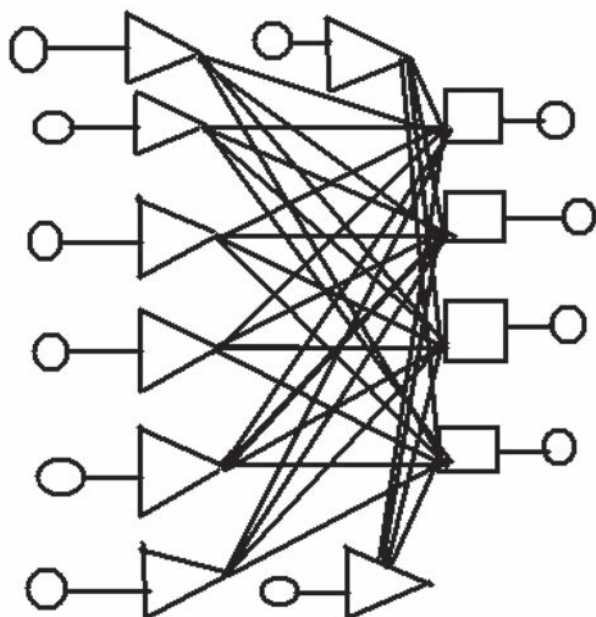


Рис. 10. Полносвязная бинарная линейная сеть архитектуры 8-4.

Дифференцированное влияние загрязняющих воду металлов “каждого на каждый”

Такое влияние рассчитывалось через веса нейросвязей, дополняющих и уточняющих регрессионную статистику. В программе SNN веса подбираются с помощью нейросетевых оптимизационных алгоритмов обучения [2], обеспечивая наилучшее соответствие исходных и расчетных данных. Результаты обучения зависят от таких его параметров, как число эпох обучения (итераций), ошибка обучения, начальные веса связей и др. В данной работе расчеты проводились с использованием стандартных значений параметров обучения. Веса нейросвязей, рассчитанные для бинарных систем, приведены в табл. 8, 9, где “Threshold” – веса пороговых (неявных) связей, соединяющих “пороговые” нейроны с соответствующим выходным нейроном, отражающие влияние неучтенных факторов на выходной створ.

Из приведенных таблиц видно, что веса порогов (“Threshold”) малы, что указывает на незна-

Таблица 8. Веса нейросвязей в системе Створ 1 → Створ 2

	Fe2	Cu2	Zn2	Ni2
Threshold	-0.04	-0.06	-0.03	-0.04
Fe1	0.14	0.11	0.00	0.09
Cu1	-0.04	0.65	0.03	-0.11
Zn1	0.48	0.08	0.05	0.16
Ni1	0.15	0.00	-0.02	0.08

тельность влияния неучтенных факторов. По данным табл. 9 отчетливо проявляется влияние концентрации меди Cu1 на створе 1 на медь Cu2 на створе 2 (вес 0.65), что согласуется с табл. 5 (где корреляция для Cu2 составляет 0.61). Это подтверждает вывод о природном происхождении меди, возможно поступающей в речной поток при выщелачивании подстилающих пород в верховьях Исети. По данным табл. 10 отчетливо проявляется влияние Ni2 на металлы створа 3, особенно – на Zn3, что согласуется с табл. 6 (где корреляции для Zn3 составляет 0.60).

На практике к настоящему времени основные предприятия-загрязнители установлены, и избыточное накопление солей цинка на створе 3 р. Исети прекращено. Однако для этого потребовались немалые усилия межрегиональной прокуратуры с привлечением общественного экологического контроля. Между тем нейросетевая идентификация хозяйственных связей производителей и потребителей никельсодержащего сырья, сбрасывающих стоки в зонах створов 1–2 и 2–3 данного промышленного региона, позволила бы намного меньшими усилиями обеспечить нормальное водно-экологическое регулирование.

Оценка достоверности выводов, полученных с использованием ИНС, была выполнена путем прогноза качества воды в форме его оценки на заданном створе на основе анализа данных выше-расположенных створов, не участвовавших в обучении сети.

Прогноз качества воды

Для прогнозирования все данные были поделены на обучающие (75–80%) и тестовые (20–25%), которые не использовались при обучении. Входные данные для прогноза выбирались реальными (из тестового множества), а выходные рассчитывались на основе обучающих (предполагались заранее не известными). Ошибку прогноза оценивали по формуле $E = \{[\sum(C_i - C_i^*)/C_i]^2\}^{1/2}/4$, где C_i – измеренная концентрация загрязнителя на створе, по которому осуществляется прогноз;

Таблица 9. Веса нейросвязей в системе Створ 2 → Створ 3

	Fe3	Cu3	Zn3	Ni3
Threshold	-0.06	-0.05	-0.04	-0.07
Fe2	0.10	0.06	0.13	0.21
Cu2	0.08	-0.00	-0.23	-0.07
Zn2	0.19	0.06	0.18	0.17
Ni2	0.35	0.46	0.80	0.64

Таблица 10. Прогноз по системе Створ 1 → Створ 2

Тестовый образец	Измеренные концентрации на створе 1				Измеренные концентрации на створе 2				Прогнозные (расчетные) концентрации на створе 2				Ошибка прогноза E
	Fe1	Cu1	Zn1	Ni1	Fe2	Cu2	Zn2	Ni2	Fe2	Cu2	Zn2	Ni2	
1	1.12	6	35	0	1.04	18	51	44	0.85	21.54	32.38	26.04	0.07
2	0.75	5	64	13	1.36	28	45	17	1.44	24.88	47.62	35.44	0.05
62	1.38	16	52	9	3.36	85	93	38	1.19	32.60	45.74	32.90	0.48
63	1.1	24	58	0	1.15	52	50	25	1.12	41.18	50.56	26.03	0.04
76	1.31	30	36	17	0.72	110	48	35	0.91	42.95	53.91	24.25	0.27
77	0.77	26	31	11	1.15	70	78	22	0.74	39.28	50.76	16.77	0.16
112	0.32	33	30	7	0.85	54	36	14	0.60	46.04	56.06	7.85	0.07
113	0.5	23	38	11	0.85	54	80	8	0.85	37.83	52.48	17.26	0.10
214	0.41	22	36	5	0.338	5	14	6	0.76	36.85	49.34	14.27	0.17
215	0.325	4	14	3	0.152	7	14	3	0.47	17.49	31.27	12.88	0.09
Средняя ошибка													0.15

C_i^* – прогнозные (расчетные) значения концентрации на том же створе. Результаты приведены в табл. 10–12, где тестовые образцы выбраны из массива данных.

Из табл. 10–12 видно, что ошибка рассматриваемого прогноза преимущественно изменяется в диапазоне 4–40% и в среднем $\leq 20\%$, что существенно ниже погрешности измерения контролируемых показателей, приписанная норма которой для основных рассматриваемых металлов $\geq 50\%$ [11].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Обширные исследования по моделированию гидрологических, гидрохимических и гидро-

биологических характеристик с использованием моделей искусственного интеллекта позволяют надеяться, что эти методы будут внедрены в практику и облегчат решение многих вопросов водно-экологического регулирования, полноценного анализа и прогноза состава и свойств воды. Уже к настоящему времени работы с использованием ИНС позволили получить убедительную информацию о том, что большая часть негативных изменений водных ресурсов связана с антропогенной деятельностью. В целом, все настойчивее звучит вывод о том, что единственный способ сохранения и восстановления водных ресурсов – разработка эффективной политики водопользования, основанной на детальном мониторинге водно-экологических показателей. При этом важно внедрять методы ИНС для обработки данных

Таблица 11. Прогноз по системе Створ 2 → Створ 3

Тестовый образец	Измеренные концентрации на створе 2				Измеренные концентрации на створе 3				Прогнозные (расчетные) концентрации на створе 3				Ошибка прогноза E
	Fe2	Cu2	Zn2	Ni2	Fe3	Cu3	Zn3	Ni3	Fe3	Cu3	Zn3	Ni3	
6	0.74	14	75	13	2.62	140	1200	40	0.68	41.15	197.11	14.85	0.52
8	0.8	13	35	13	0.47	12	110	22	0.68	40.94	181.57	14.54	0.07
11	1.31	29	75	51	0.88	180	870	0	1.09	94.32	424.69	34.16	0.29
22	0.49	37	54	21	0.63	8	110	20	0.70	53.05	178.52	16.57	0.08
133	0.9	58	80	33	0.56	40	50	28	0.97	70.26	224.81	23.93	0.10
134	0.66	44	85	17	0.53	39	45	14	0.78	47.67	151.00	15.99	0.05
135	1.22	44	75	5	0.43	22	53	24	0.91	30.55	73.88	13.19	0.08
207	0.326	28	28	13	0.285	34	33	1	0.57	41.62	132.47	11.98	0.07
227	0.143	2	17	5	0.125	7	11	3	0.38	29.78	136.71	7.76	0.07
237	1	1	11	4	0.213	7	6	6	0.39	38.07	172.15	10.15	0.09
Средняя ошибка													0.14

Таблица 12. Прогноз по системе Створ 1 + 2 → Створ 3

Тестовый образец	Измеренные концентрации на створе 1 + 2								Измеренные концентрации на створе 3				Прогнозные концентрации на створе 3				Ошибка прогноза E
	Fe1	Cu1	Zn1	Ni1	Fe2	Cu2	Zn2	Ni2	Fe3	Cu3	Zn3	Ni3	Fe3	Cu3	Zn3	Ni3	
6	0.48	8	36	8	0.74	14	75	13	2.62	140	1200	40	0.73	46.17	298.12	21.44	0.42
12	0.24	9	42	0	1.6	30	39	94	1.07	40	1800	12	1.03	180.29	776.98	47.31	0.42
13	0.4	14	40	6	0.37	15	29	15	1.23	48	370	47	0.55	44.34	176.63	14.63	0.20
14	0.61	8	17	7	0.86	24	40	0	1.37	58	540	61	19.19	162.74	13.28	19.19	0.31
15	0.94	21	67	8	1.86	37	34	18	0.43	24	210	28	48.80	309.22	25.31	48.80	0.07
207	15	15	5	0.326	28	28	13	15	0.285	34	33	1	0.44	37.9	112.44	12.95	0.06
208	23	14	0	0.163	32	34	3	23	0.16	37	51	4	0.46	30.41	26.10	6.34	0.04
214	22	36	5	0.338	5	14	6	22	0.08	43	28	11	0.42	31.53	89.17	6.67	0.06
215	4	14	3	0.152	7	14	3	4	0.406	39	33	3	0.23	25.23	134.20	8.06	0.05
237	4	1	1	0.138	1	1	11	4	0.213	7	6	6	0.14	38.70	170.71	7.64	0.07
Средняя ошибка																	0.17

гидромониторинга и формирования системы моделирования качества водопользования, позволяющего решать такие задачи, как, например, уменьшение риска внезапного снижения качества воды из-за производственных сбросов.

Способность ИНС обнаруживать и оценивать веса связей между статистическими данными эффективна для изучения динамики формирования качества воды в условиях его пространственно-временной вариабельности. На примере р. Исети в промышленном регионе (г. Екатеринбург) показано, что нейросетевой анализ позволил обнаружить взаимосвязи отдельных показателей качества воды на соседних створах и, тем самым, выявить логистические хозяйственные связи водопользователей. Это облегчает идентификацию приоритетных загрязнителей воды по “водному следу” загрязнений, оставленному предприятиями-смежниками. Показано также, что ИНС упрощает выявление техногенного снижения качества воды на фоне ее природного загрязнения. Достоверность полученных выводов подтверждается возможностью удовлетворительно предсказывать качество воды на некотором гидрохимическом створе по данным, полученным для створов, расположенных выше.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Арнольд В.И. О функциях трех переменных // ДАН СССР. 1957. Т. 114. № 4. С. 679–681.
2. Боровиков В.П. Нейронные сети Statistica Neural Networks: Методология и технология современного анализа данных. М.: StatSoft, 2015. 354 с.
3. ГОСТ 27384-2002 Вода. Нормы погрешности измерений показателей состава и свойств.

4. ГОСТ Р ИСО 14046-2017 Экологический менеджмент. Водный след. Принципы, требования и руководящие указания.
5. Государственный доклад “О состоянии и использовании водных ресурсов Российской Федерации в 2020 году”. М.: Росводресурсы, НИА-Природа, 2022. 510 с.
6. Данилов-Данильян В.И., Веницианов Е.В., Аджиенко Г.В., Козлова М.А. Оценка современных подходов к управлению качеством поверхностных вод и их охране // Вестн. РАН. 2019. Т. 89. № 12. С. 1248–1259.
7. Диффузное загрязнение водных объектов: проблемы и решения / Под ред. В.И. Данилова-Данильяна. М.: РАН, 2020. 512 с.
8. Зеленцов В.А., Потрясаев С.А., Пиманов И.Ю., Пономаренко М.Р. Автоматизация мониторинга и комплексного моделирования гидрологической обстановки в бассейнах рек // Уч. зап. Рос. гос. гидрометеорол. ун-та. 2019. № 55. С. 74–85.
9. Каллан Р. Основные концепции нейронных сетей. М.: Изд. Дом “Вильямс”, 2001. 287 с.
10. Колмогоров А.Н. О представлении непрерывных функций нескольких переменных в виде суперпозиции непрерывных функций одного переменного // ДАН СССР. 1957. Т. 114. № 5. С. 953–956.
11. Минский М., Пайперт С. Перцептроны. М.: Мир, 1971. 264 с.
12. Розенблатт Ф. Принципы нейродинамики. Перцептрон и теория механизмов мозга. М.: Мир, 1965. 480 с.
13. Розенталь О.М., Александровская Л.Н., Кириллин А.В. Байесовский подход к повышению достоверности контроля качества вод // Аналитика и контроль. 2018. Т. 22. № 3. С. 334–340.
14. Строганов С.Н. Связь питания жителей и состава сточной воды: Питание Москвы в 1903–1922 гг. // Тр. Совещания по очистке сточных вод, состоя-

- шего при Канализационном отделе М.К.Х. М.: М.К.Х., 1923. Вып. 2.
15. Федотов В.Х. Нейронные сети в экономике. Чебоксары: Изд-во Чувашского гос. ун-та, 2006. 298 с.
 16. Яковлев С.В., Воронов Ю.В. Водоотведение и очистка сточных вод. М.: АСВ, 2002. 704 с.
 17. Agafonova S.A., Frolova N.L., Krylenko I.N. et al. Dangerous ice phenomena on the lowland rivers of European Russia // *Natural Hazards*. 2017. V. 88. № S1. P. 171–188.
 18. Alabyan A.M., Lebedeva S.V. Flow dynamics in large tidal delta of the Northern Dvina river: 2D simulation // *J. Hydroinformatics*. 2018. V. 20. № 4. P. 798–813.
 19. Bandyopadhyay S., Maulik U., Wang J.T.L. Analysis of Biological Data: A Soft Computing Approach. Analysis of Biological Data: A Soft Computing Approach. World Scientific. Singapur, 2007.
 20. Belikov V.V., Krylenko I.N., Alabyan A.M. et al. Two-dimensional hydrodynamic flood modelling for populated valley areas of Russian rivers // *Proc. IAHS*. 2015. V. 370. P. 69–4.
 21. Bishop C. Neural Networks for Pattern Recognition. Oxford: Univ. Press, 1995.
 22. Chau K. A review on integration of artificial intelligence into water quality modelling // *Mar. Pollut. Bull.* 2006. V. 52. P. 726–733.
<https://doi.org/10.1016/j.marpolbul.2006.04.003>
 23. Che Osmi S.F., Malek M.A., Yusof M., Azman N.H., Faizal W.M. Development of river water quality management using fuzzy techniques: a review // *Int. J. River Basin Manag.* 2016. V. 14. P. 243–254.
<https://doi.org/10.1080/15715124.2015.1105232.2016>
 24. Haykin S. Neural Networks: A Comprehensive Foundation. New York: McMillan College Publ. Co., 1994. 696 p.
 25. Krylenko I., Motovilov Yu., Antokhina E. et al. Physically-based distributed modelling of river runoff under changing climate conditions // *Proc. IAHS*. 2015. V. 368. P. 156–161.
 26. Maier H.R., Dandy G.C. Neural networks for the prediction and forecasting of water resources variables: a review of modelling issues and applications // *Environ. Model. Softw.* 2000. V. 15. P. 101–124.
[https://doi.org/10.1016/S1364-8152\(99\)00007-9](https://doi.org/10.1016/S1364-8152(99)00007-9)
 27. Nicklow J., Asce F., Reed P., Asce M., Savic D., Desalegne T., Asce M., Harrell L., Asce M., Chan-hilton A., Asce M., Karamouz M., Asce F., Minsker B., Asce M., Ostfeld A., Asce M., Singh A., Asce M., Zechman E., Asce M. State of the Art for Genetic Algorithms and Beyond in Water Resources Planning and Management // *J. Water Resour. Planning Management*. 2010. V. 136 (4). P. 412–432.
 28. Raghavendra S., Deka P.C. Support vector machine applications in the field of hydrology: a review // *Appl. Soft Comput. J.* 2014. V. 19. P. 372–386.
<https://doi.org/10.1016/j.asoc.2014.02.002.2014>
 29. Rumelhart D.E., Hinton G.E., Williams R.J. Learning internal representations by error propagation // *Parallel Distributed Processing: Exploration in the Microstructure of Cognition*. Cambridge, MA: MIT Press, 1986. V. 1. P. 318–362.
 30. Solomatine D.P., Ostfeld A. Data-driven modelling: some past experiences and new approaches // *J. Hydroinformatics*. 2008. V. 10. P. 3–22.
<https://doi.org/10.2166/hydroj>
 31. Tayasha, Tran Minh Thang, Zahar her Yasin. A survey on river water quality modeling using artificial intelligence models. // *J. Hydrol.* 2020. V. 585. № 6. P. 1–62.
 32. Virender K. Sharma, Eric Lichtfouse, Etienne Decroly. COVID-19 epidemiologic surveillance using wastewater // *Environ. Chem. Lett.* 2021. V. 19 (45). № 1. P. 1911–1915.