
*МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ГИДРОБИОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ*

УДК 556.5:(282.247.32)

*В. И. Пичура¹, Ю. В. Пилипенко¹, Ф. Н. Лисецкий²,
О. Э. Довбыш³*

**ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ГИДРОХИМИЧЕСКОГО
РЕЖИМА НИЗОВЬЯ ДНЕПРА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
НЕЙРОТЕХНОЛОГИЙ**

В статье представлены алгоритм и результаты применения интеллектуальных систем для прогнозирования гидрохимического режима низовий Днепра на основе нейротехнологий. Впервые созданы нелинейные многослойные искусственные нейронные сети для прогнозирования основных химических показателей. Идентифицированы оптимальные значения параметров алгоритма обучения, проведена оценка обобщающей способности на контрольной выборке и достоверности прогнозирования на тестовой выборке созданных искусственных нейросетей, а также реализован прогноз гидрохимического режима до 2015 года.

Ключевые слова: гидрохимический режим, нейронные сети, многослойный перцептрон, прогнозирование, временные ряды.

Днепр — одна из крупнейших рек Европы, бассейн которой расположен в пределах трех государств — Российской Федерации, Беларуси и Украины. Общая природная длина реки составляет 2285 км, после создания каскада из шести водохранилищ она сократилась до 2201 км, площадь бассейна равняется 504 тыс. км², высота истока — 252 м, средний наклон русла — 11 см на 1 км.

Нерациональное водопользование и возрастающая антропогенная нагрузка обусловили деградационные процессы в экосистеме Днепра, что сопровождается нарушением связей между абиотическими и биотическими элементами. К основным причинам сложившейся кризисной ситуации принято относить строительство каскада водохранилищ, полностью изменивших динамику стока, крупномасштабную мелиорацию, строительство в бассейне ряда мощных промышленных комплексов, забор огромных объемов воды для промышленности и сельского хозяйства, сброс значительного количества загрязненных вод [1, 4, 7, 14, 21].

Создание водохранилищ днепровского каскада позволило существенно увеличить водоресурсный потенциал Украины, однако при этом оказалось не-

© В. И. Пичура, Ю. В. Пилипенко, Ф. Н. Лисецкий, О. Э. Довбыш, 2015

гативное воздействие на окружающую среду, что проявилось в повышении уровня грунтовых вод, усилении засоления почв, значительном увеличении подземного стока и уровня загрязнения подземных вод, усилении эрозии береговой зоны. В результате масштабного гидростроительства речной режим реки был искусственно трансформирован в озерный, что привело к резкому замедлению водной циркуляции и появлению обширных зон застоя.

Одним из основных показателей речных вод является их гидрохимический режим, который определяется влиянием многих факторов. Среди них можно выделить динамику водности (стока) рек, природно-климатические условия, интенсивность хозяйственной деятельности человека и др.

Вопросы комплексной оценки экологического состояния, в частности исследования особенностей формирования динамики стока и качества воды низовий Днепра, представлены во многих научных трудах [1, 4, 7, 14, 16, 17, 20, 21]. Также сформулированы новые методологические подходы к прогнозированию реальных систем, в том числе с применением метода искусственных нейронных сетей (ИНС) [2, 3, 5, 6, 8, 9—13, 15, 18, 22—24].

Вопросы оценки и прогнозирования многолетних временных рядов динамики основных гидрохимических показателей, которые определяют качественные параметры водных объектов, являются актуальными и недостаточно изученными. При этом отсутствуют четкие алгоритмы системного использования современных методов и подходов комплексного статистически обоснованного исследования водных экосистем. В этой связи целью исследований было изучить возможности системного использования многомерной статистики с применением нейротехнологий для оценки и прогнозирования динамики гидрохимического режима низовий Днепра.

Материал и методика исследований. Для определения особенностей формирования гидрохимического режима низовий Днепра был проанализирован массив результатов наблюдений за 32 года — с 1978 по 2010 г. (статистические данные Херсонской гидробиологической станции НАН Украины).

Было установлено, что достоверность моделирования динамики природных и трансформированных гидроэкосистем зависит от сложности их формирования, имеющегося временного интервала и присутствия дискретного «белого шума». Поэтому для оценки и прогнозирования этих сложных явлений принципиально необходимо системно использовать многомерный статистический аппарат с применением современных нелинейных методов.

Для разложения на составляющие (трендовая составляющая, основные циклы, белый шум) и оценки общих многолетних динамических процессов формирования гидрохимического режима низовий Днепра был использован метод сезонной декомпозиции и корректировки ряда Census I. Периодичную компоненту выделяли с помощью одномерного спектрального анализа Фурье. Для нелинейного прогнозирования гидрохимического режима использовали различные типы архитектур интеллектуальных ИНС: линей-

ные сети, сети, основанные на радиальных базисных функциях, обобщенные регрессионные нейронные сети, многослойные перцептроны. Обучение сетей проводили с помощью алгоритма обратного распространения ошибки, применены функции активации нейронов — сигмоидальная и синусоид-гиперболического тангенса. Для системной обработки данных использовали STATISTICA 6.0. Основные этапы создания нейронных сетей для прогнозирования гидрохимического режима водных объектов представлены на рис. 1.

Основными преимуществами ИНС являются независимость методов их синтеза от размерности пространства признаков, высокая допустимость к использованию зашумленных данных и низкий коэффициент ошибок, параллельная обработка информации одновременно всеми нейронами, что делает возможным аппаратный анализ сложных сигналов в реальном времени, аппроксимация любой непрерывной функции, самоорганизация и отказоустойчивость структуры, корректировка синоптических весов при поступлении новой информации и др. [18, 19]. К недостаткам и ограничениям ИНС можно отнести отсутствие четких алгоритмов выбора функции активации и механизмов, регулирующих работу сети в целом, большое количество весов и пороговых уровней НС снижает скорость обработки входных данных, что также может привести к «параличу» сети при обучении, сложность обучения, формирования и аппроксимации НС. Однако, несмотря на недостатки, с начала 1990-х годов нейротехнологические подходы и методы успешно используются для решения многих проблем в гидроэкологии, разносторонний обзор возможностей их применения изложен ранее [25].

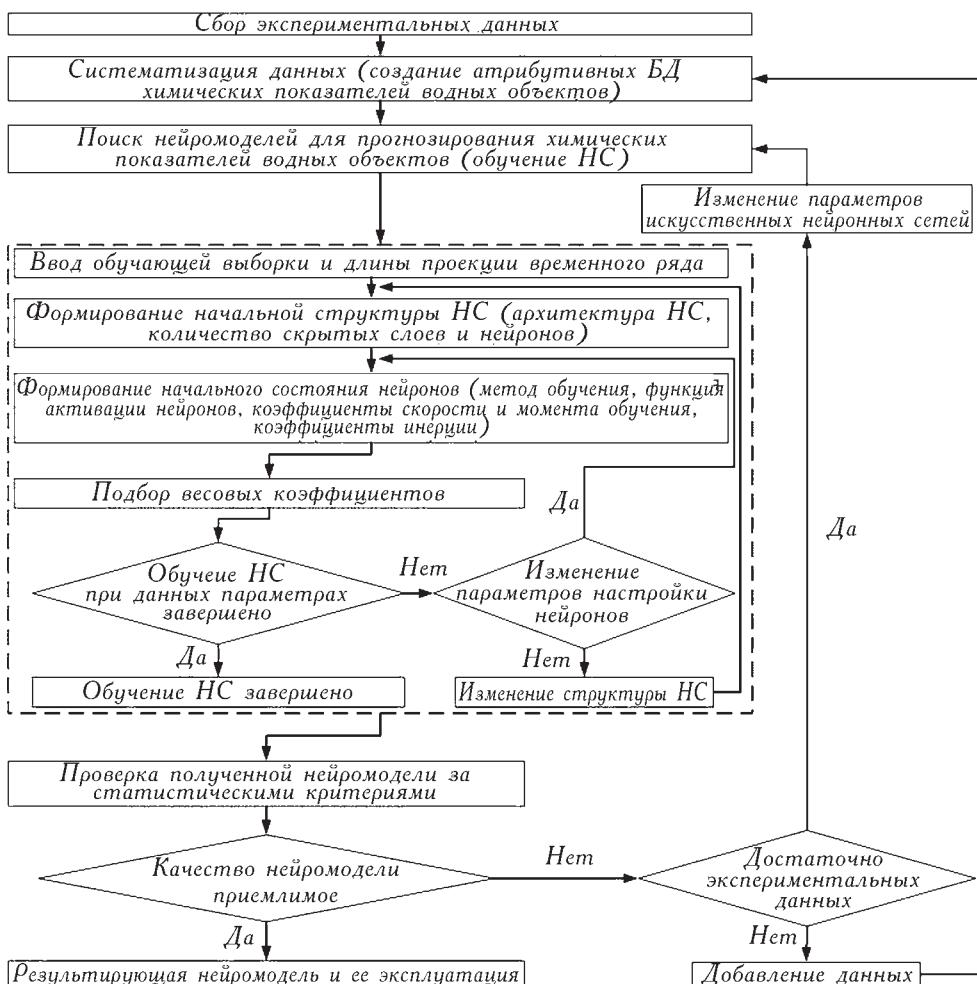
Обобщающие возможности и достоверность прогнозирования нейромоделей оценены по уровню их чувствительности, сравнению эмпирических и аппроксимирующих данных по статистическим критериям на трех выборках: обучающей, контрольной и тестовой. К статистическим критериям оценки достоверности ИНС относятся математическое ожидание ошибки, стандартное отклонение ошибки, математическое ожидание абсолютной ошибки (в натуральных единицах и процентах — МАРЕ), значение корреляции. Способность обобщения нейронными сетями результатов полевых и лабораторных исследований дает возможность получать обоснованный результат с использованием данных, которые не встречались в процессе обучения.

Результаты исследований и их обсуждение

В результате обработки массива исходных данных за все время наблюдений динамических рядов было определено два периода формирования гидрохимического режима: первый, длительностью 19 лет (1978—1997 гг.), который характеризуется значительными вариационными изменениями, и второй, длительностью 13 лет (1998—2010 гг.), для которого свойственны более стабильные значения изучаемых показателей.

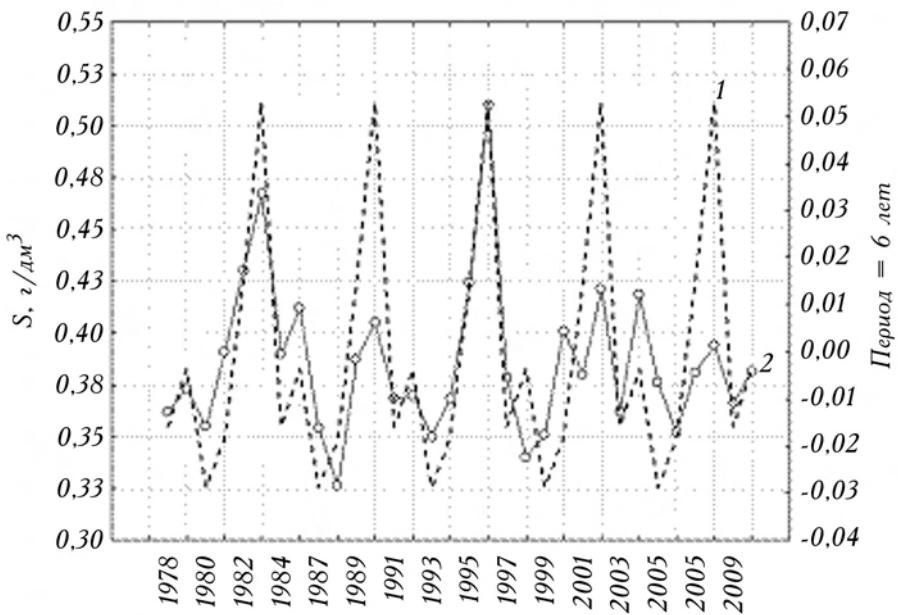
Оценка гидрохимических характеристик показала, что по длине реки минерализация возрастает на 27,4% — от 0,303 (в районе Киева) до 0,386 г/дм³ (в районе Херсона). В то же время в низовьях Днепра на протя-

Математическое моделирование гидробиологических процессов



1. Алгоритм создания нейронных сетей для прогнозирования гидрохимического режима водных объектов.

жении 32 лет минерализация была относительно стабильной с незначительными вариационными (V) изменениями — 9,7% (1-й период — 11,2%, 2-й — 6,6%). Уменьшение значения V в 1,7 раза во втором периоде указывает на процессы стабилизации динамики минерализации с периодичностью шесть лет (рис. 2). Практически по всем основным ионам также наблюдается уменьшение среднегодовых вариационных колебаний (табл. 1), что подтверждает устойчивость формирования гидрохимического режима низовий Днепра за последние 13 лет. Несмотря на стабильные вариационные процессы гидрохимического режима, отмечено присутствие незначительной (1,4—12,2%) отрицательной трендовой составляющей во всех показателях химического состава воды.



2. Динамика и периодическая составляющая минерализации.

В результате установления достоверности НС с помощью статистических критериев оценки погрешности модели и многократных экспериментальных действий над типами архитектур (исследовано 8000 моделей) и коэффициентами настройки созданы ИНС для прогнозирования химических показателей воды:

— минерализации (рис. 3, а): трехслойный перцептрон (1:10-6-1:1) с шестью нейронами в скрытом слое, метод обучения: обратное распределение (100 эпох) и связанных градиентов (52 эпохи); матрица искусственной нейронной сети состоит из 66 весовых коэффициентов; функция активации нейронов — синусоид-гиперболического тангенса; параметры алгоритма обучения: коэффициент скорости обучения $\eta = 0,01$, коэффициент инерции $\alpha = 0,2$; производительность обучения — 0,186, контрольная — 0,507, тестовая — 0,555; погрешность обучения — 0,047, контрольная — 0,164, тестовая — 0,238; функция коррекции весовых коэффициентов:

$$E(w(t)) = \frac{1}{2} \left(f \left(\sum_{j=1}^6 w_j^{(2)}(t) f \left(\sum_{n=1}^{10} w_n^{(1)}(t) x_n^{(t)} \right) \right) - d^{(t)} \right)^2,$$

функция отклика сети:

$$y_i(t) = f \left(\sum_{j=1}^6 w_j^{(2)}(t) f \left(\sum_{n=1}^{10} w_n^{(1)}(t) x_n^{(t)} \right) \right),$$

где $i = 1$;

1. Вариационные изменения и периодическая составляющая формирования динамики основных ионов по периодам исследований

Основные ионы	Значения вариации, %			Средние значения, мг-экв/дм ³			Значимые периоды, лет
	1-й период	2-й период	+ / -	1-й период	2-й период	+ / -	
HCO ₃ ⁻	8,7	10,6	+ 1,9	2,85	2,81	- 0,04	2,5 и 10,0
Cl ⁻	25,2	18,6	- 6,6	1,13	1,05	- 0,08	6,0 и 10,0
SO ₄ ²⁻	33,0	19,3	- 13,7	1,44	1,35	- 0,09	2,0 и 10,0
Ca ²⁺	11,1	10,9	- 0,2	2,40	2,32	- 0,08	2,0 и 4,0
Mg ²⁺	39,6	29,0	- 10,6	1,69	1,48	- 0,21	6,0 и 10,0
Na ⁺ + K ⁺	25,4	18,2	- 7,2	1,51	1,48	- 0,03	3,0 и 7,5

— основных ионов (HCO₃⁻, Cl⁻, SO₄²⁻, Ca²⁺, Mg²⁺; Na⁺ + K⁺) (рис. 3, б): четырехслойный перцептрон (6:72-10-10-6:6) с десятью нейронами в первом скрытом слое и десятью нейронами во втором скрытом слое; метод обучения: обратное распределение (100 эпох) и связанных градиентов (20 эпох); матрица искусственной нейронной сети состоит из 880 весовых коэффициентов; функции активации нейронов: первого скрытого слоя — синусоид-гиперболического тангенса, второго скрытого слоя — сигмоидальная; параметры алгоритма обучения: $\eta = 0,08$, $\alpha = 0,5$; производительность обучения — 0,424, контрольная — 0,166, тестовая — 0,662; погрешность обучения — 0,074, контрольная — 0,069, тестовая — 0,194; функция коррекции весовых коэффициентов:

$$E(w(t)) = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^6 \left(f \left(\sum_{m=1}^{10} w_m^{(3)}(t) f \left(\sum_{j=1}^{10} w_j^{(2)}(t) f \left(\sum_{n=1}^{72} w_n^{(1)}(t) x_n^{(t)} \right) \right) \right) - d^{(t)} \right)^2 \right),$$

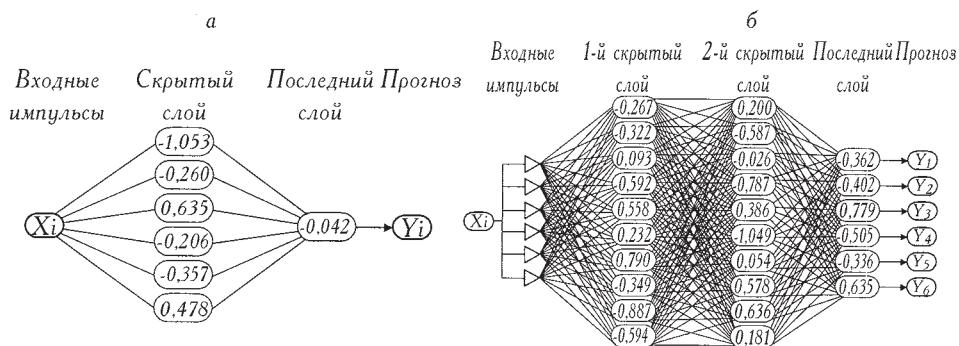
функция отклика сети:

$$y_i(t) = f \left(\sum_{m=1}^{10} w_m^{(3)}(t) f \left(\sum_{j=1}^{10} w_j^{(2)}(t) f \left(\sum_{n=1}^{72} w_n^{(1)}(t) x_n^{(t)} \right) \right) \right),$$

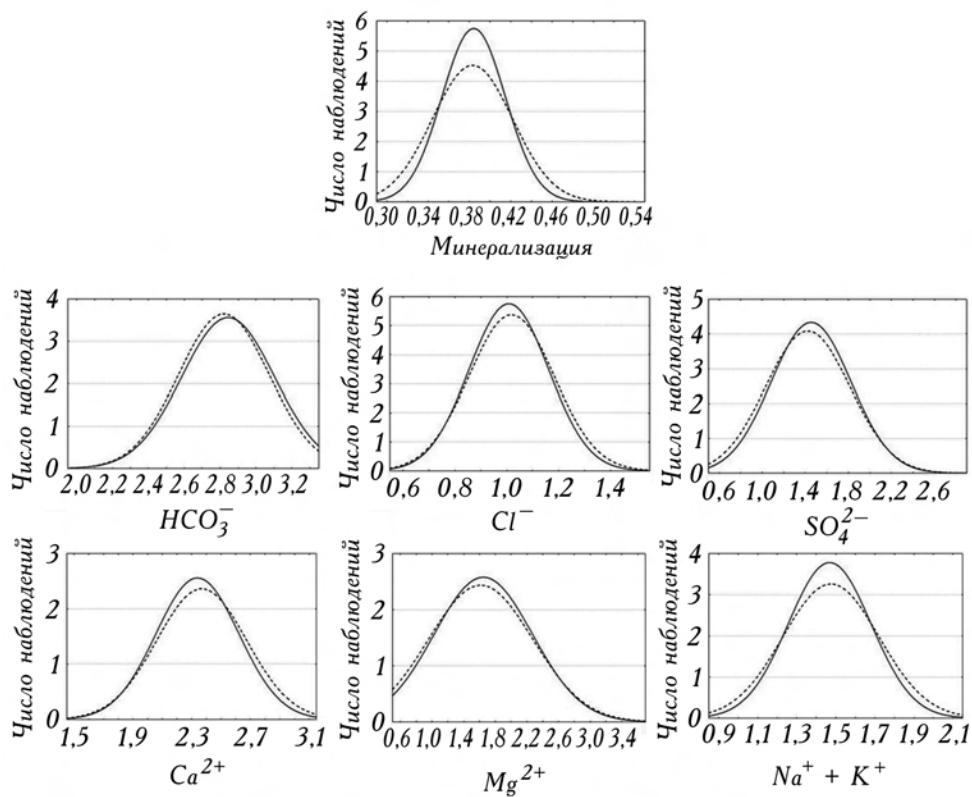
где $i = \overline{1,6}$.

Искусственные нейронные сети обладают достаточно высокими обобщающими способностями, что указывает на хорошее совпадение исходных и аппроксимированных значений (верно выделенных закономерностей из входных данных) на рабочем (тестируемом) участке (рис. 4).

На основе экспериментального моделирования и оценки достоверности установлено, что наилучшее качество прогноза многослойных НС достигнуто при таком соотношении объемов выборок: обучающая — 50%, контрольная — 25%, тестовая — 25% временного ряда исследований. Точность результатов прогнозирования в значительной мере зависит от презентативности обучающей выборки. Хорошие обобщающие особенности многослойных ИНС обеспечили возможность корректно отображать данные, не испо-



3. Архитектура прогнозных нейросетей и пороги активации нейронов: *a* — минерализация; *б* — основные ионы.



4. Сравнительные гистограммы (обобщение) распределения исходных и аппроксимированных нейронными сетями значений химического состава воды низовий Днепра.

льзованные в процессе обучения, и с достаточно высокой достоверностью прогнозировать дальнейшее изменение параметров гидрохимического режима.

2. Итоговая статистика обучения нейронной сети для прогнозирования гидрохимического режима низовий Днепра

Описательные статистические критерии	Обучающая выборка	Контрольная выборка	Тестовая выборка
Минерализация			
Математическое ожидание ошибки	0,00029	0,01275	0,00746
Стандартное отклонение ошибки	0,00447	0,01871	0,01371
Математическое ожидание абсолютной ошибки	0,00309	0,01369	0,00988
Корреляция	0,98261	0,91370	0,90884
Основные ионы			
Математическое ожидание ошибки	0,03041	0,07704	0,11883
Стандартное отклонение ошибки	0,13193	0,13001	0,13773
Математическое ожидание абсолютной ошибки	0,09798	0,13777	0,15772
Корреляция	0,93865	0,83974	0,91673

Подтверждением результатов эффективного моделирования нейросетей для прогнозирования является анализ итоговой статистики реализации НС на обучающей, контрольной и тестовой выборках (табл. 2). Результаты прогнозирования динамики показателей минерализации и состава ионов воды низовий Днепра до 2015 года представлены на рис. 5.

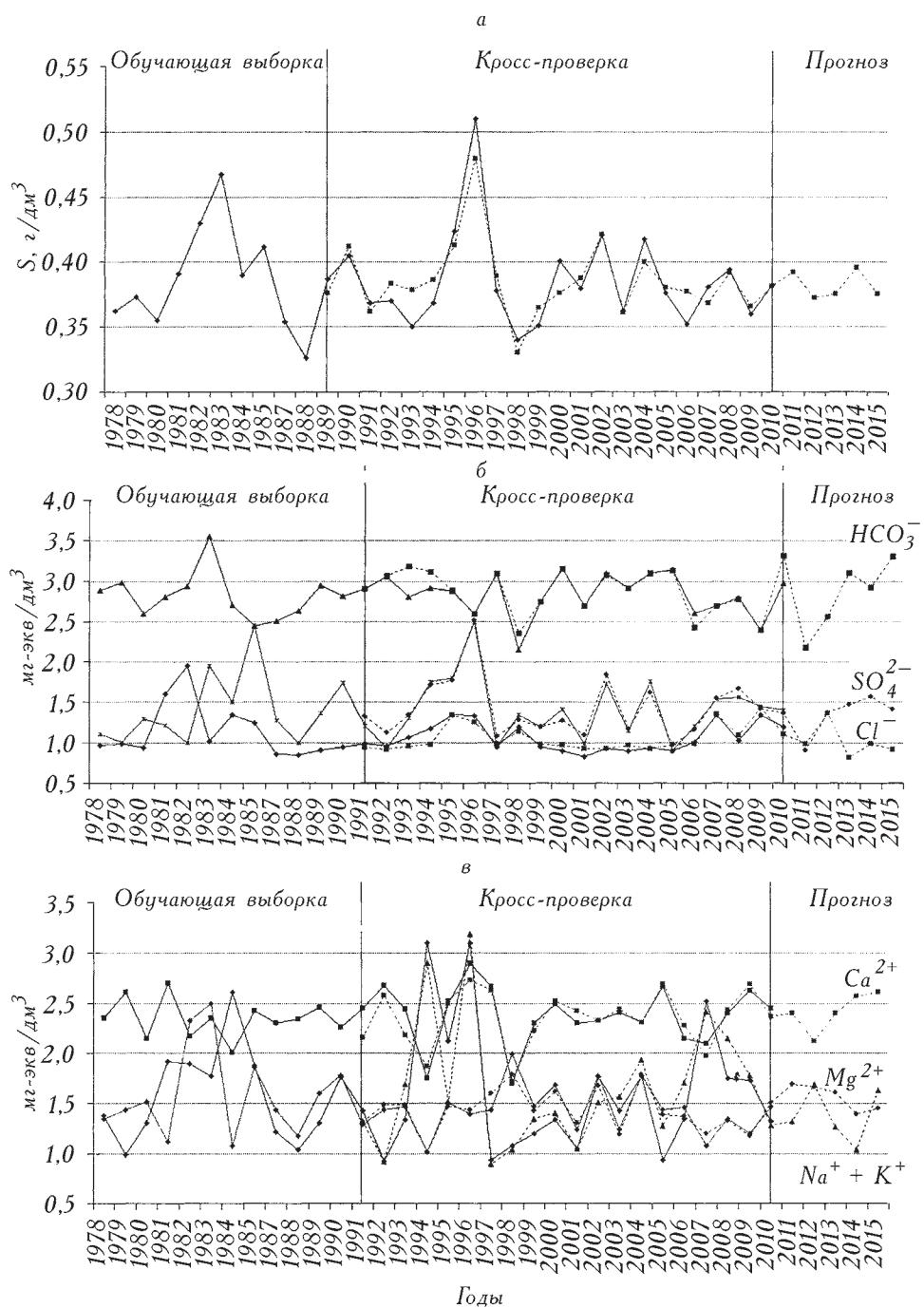
Тестирование на контрольных независимых экспериментальных выборках показало достаточно высокую аппроксимационную способность созданных нейромоделей. Для прогнозирования химических показателей воды низовий Днепра достоверность ИНС на независимых (тестируемых) выборках составила по минерализации — 92%, по основным ионам — 89%.

Заключение

В результате обработки динамических рядов за 1978—2010 гг. были определены два периода (1978—1997 и 1998—2010 гг.) формирования гидрохимического режима низовий Днепра, которые характеризуются разными вариационными особенностями.

Несмотря на стабильные вариационные процессы гидрохимического режима, отмечено наличие незначительной (1,4—12,2%) отрицательной трендовой составляющей во всех показателях химического состава воды. Впервые с использованием метода Фурье изучены особенности периодического формирования химических показателей (минерализации и основных ионов) воды низовий Днепра.

В процессе оценки достоверности 8000 нейромоделей и многократных экспериментальных действий над типами архитектур и коэффициентами настройки созданы искусственные нейронные сети типов архитектуры четырех- и трехслойных



5. Результаты прогнозирования гидрохимического режима низовий Днепра до 2015 года: минерализации (a), анионного состава (б), катионного состава (в).

перцептронов, достоверность которых на независимых (тестируемых) выборках составила от 89 (для основных ионов) до 92% (для минерализации).

Впервые определены оптимальные значения параметров алгоритма обучения нейронных сетей для прогнозирования гидрохимического режима низовий Днепра: коэффициент скорости обучения $\alpha = 0,01—0,08$; коэффициент момента обучения (коэффициент инерции) $\beta = 0,2—0,5$; количество итераций (эпох) до запоминания $N = 30—50$; количество итераций (эпох) для обучения нейросетей в зависимости от массива выборки и сложности развития прогнозируемой системы $N = 120—150$. Количество скрытых слоев и нейронов сети определяется для каждого временного ряда индивидуально. Функции активации нейронов — синусоид-гиперболического тангенса и сигмоидальная.

Результаты прогнозирования гидрохимического режима низовий Днепра показали, что при существующих условиях его формирования будет происходить незначительное, но стабильное ухудшение всех показателей химического состава воды.

**

Представлено алгоритм і результати застосування інтелектуальних систем для прогнозування гідрохімічного режиму пониззя Дніпра на основі нейротехнологій. Вперше створено нелінійні багатошарові штучні нейронні мережі для прогнозування основних хімічних показників води. Встановлено оптимальні значення параметрів алгоритму навчання, проведено оцінку узагальнюючої здібності на контрольній вибірці і достовірності прогнозування на тестовій вибірці створених штучних нейромереж, а також здійснено прогноз гідрохімічного режиму до 2015 року.

**

The article presents the algorithm and results of application of intellectual systems for forecasting of the hydrochemical regime of the lower Dnieper based on neurotechnology. Nonlinear multilayer artificial neural networks for forecasting the main hydrochemical parameters has been created for the first time. Optimal parameters of the learning algorithm, estimated the generalization capability on the control sample and reliability of forecasting on the test sample of artificial neural networks were identified, forecast of hydrochemical regime until 2015 was realized.

**

1. Александрова Н.Г., Мороз Т.Г., Пилищук В.С., Россова Е.Я. Комплексная оценка качества воды низовья Днепра // Вод. ресурсы. — 1985. — № 6. — С. 199—127.
2. Арзамасцев А.А. Алгоритм самоорганизации структуры искусственной нейронной сети в процессе ее обучения // Вестн. Тамбов. ун-та. Сер. Естеств. и техн. науки. — 2007. — Т. 12, № 1. — С. 105—106.
3. Бахметова Н.А., Токарев С.В. Моделирование технологических процессов с помощью нейронных сетей // Совр. научно-технические технологии. — 2008. — № 2. — С. 87.
4. Будкіна Л.Г., Тимченко В.М., Колісник М.П. Деякі аспекти водного режиму дельти р. Дніпра в умовах антропогенного впливу // Вісн. Київ. ун-ту. Географія. — 1985. — Вип. 27. — С. 44—49.

5. *Владимирский Б.М.* Нейронные сети как источник идей и инструмент моделирования процессов самоорганизации и управления // Эконом. вестн. Ростов. ун-та — 2006. — Т. 4, № 4. — С. 14.
6. *Денисов С.В.* Автоматизация интерпретации результатов гидродинамических исследований скважин путем применения искусственных нейронных сетей // Тр. междунар. симп. «Надежность и качество». — 2008. — Т. 2. — С. 98—103.
7. *Журавлева Л.А., Жукинский В.Н., Иванов А.И.* Влияние гидротехнического строительства на гидрологию и качество воды в Днепровско-Бугской устьевой области // Тр. IV Всесоюз. гидрол. съезда. — Л.: Гидрометеоиздат. — 1976. — Т. 9. — С. 146—152.
8. *Заенцев И.В.* Нейронные сети: основные модели. — Воронеж: Изд-во Воронеж. ун-та, 1999. — 76 с.
9. *Козадаев А.С.* Техническая реализация искусственного нейрона и искусственной нейронной сети // Вестн. Тамбов. ун-та. Сер. Естеств. и техн. науки. — 2010. — Т. 15, № 1. — С. 301—302.
10. *Копыткова Л.Б.* К вопросу построения нейросетевой модели цифровой обработки сигналов // Вестн. Ставроп. ун-та. — 2009. — № 4. — С. 10—16.
11. *Кравченко Ю.А.* Построение прогнозных моделей динамических систем на основе интеграции нейронных сетей и генетических алгоритмов // Изв. Таганрог. радиотехн. ун-та. — 2006. — Т. 64, № 9 (1). — С. 103—104.
12. *Лаврик В.И.* Методологические аспекты математического моделирования экосистем // Научно-технический прогресс и биология. — Киев: Наук. думка, 1988. — С. 197—215.
13. *Лаврик В.И., Никифорович Н.А.* Методические основы разработки информационно-экспертной системы для автоматизированной оценки состояния водных экосистем. — Киев, 1993. — 51 с.
14. *Лисецкий Ф.Н., Столба В.Ф., Пичура В.И.* Периодичность климатических, гидрологических процессов и озерного осадконакопления на юге Восточно-Европейской равнины // Проблемы региональной экологии. — М., 2013. — № 4. — С. 19—25.
15. *Морозов В.В., Пічура В.І.* Застосування нейромоделей для прогнозування нестационарних хімічних показників якості зрошувальної води (на прикладі р. Дніпро та Інгулецького магістрального каналу) // Гідромеліорація та гідротехнічне будівництво: Міжвідом. наук.-техн. зб. — Рівне, 2009. — Вип. 34. — С. 51—58.
16. *Пилипенко Ю.В., Плоткін С.Я.* Впровадження геоінформаційної системи у екологічний моніторинг гідроекосистем малих водосховищ // Таврій. наук. вісн. — 2006. — Вип. 45. — С. 173—176.
17. *Пилипенко Ю.В., Філіна О.М., Нароха Н.С., Ліпсивицький А.А.* ГІС якісних параметрів водних об'єктів // Материалы 4-й Междунар. науч.-практ. конф. «Использование ГІС-технологий при нормировании водопользования в орошаемом земледелии и в экологическом мониторинге». — Херсон, 2008. — С. 146—150.

18. Пичура В.И. Применение интеллектуальных искусственных нейронных сетей для прогнозирования химических показателей оросительной воды (на примере Ингулецкого магистрального канала) // Вод, хоз-во России: проблемы, технологии, управление. — 2012. — № 2. — С. 17—28.
19. Пичура В.И. Пространственно-временное прогнозирование агрохимических показателей мелиорируемых почв с использованием нейротехнологий (на примере Херсонской области) // Агрохімія і ґрунтознавство: Міжвідом. темат. наук. зб. Спец. вип. — Житомир: Рута, 2012. — № 78. — С. 87—95.
20. Плоткин С.Я., Пилипенко Ю.В., Лобанов И.А. и гр. Формирование геоинформационной базы данных для экомониторинга пойменных водоемов низовий Днепра // Материалы 2-го Междунар. экол. форума «Чистый город. Чистая река. Чистая планета». — Херсон, 2010. — С. 115—117.
21. Романенко В.Д., Свтушенко М.Ю., Линник П.М. та ін. Комплексна оцінка екологічного стану басейну Дніпра — К., 2000. — 103 с.
22. Солдатова О.П., Семенов В.В. Применение нейронных сетей для решения задач прогнозирования // Исследовано в России. — 2006. — С. 1270—1276. — Режим доступа: <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2006/136.pdf>.
23. Терешков А.М. Однородная многослойная нейронная сеть прямого распространения с локальными связями с условно-рефлекторным механизмом обучения на основе двухпороговых равновесных нейроподобных элементов // Изв. Том. политехн. ун-та. — 2007. — Т. 310, № 1. — С. 206—211.
24. Хайкин С. Нейронные сети: полный курс. — М.: Вильямс, 2006. — 1104 с.
25. ASCE Task Committee on Application of Artificial Neural Networks in Hydrology. Artificial neural networks in hydrology II: Hydrologic applications. — J. Hydrol. Eng. ASCE 2000. — 213 р.

¹ Херсонский государственный аграрный университет

² Белгородский государственный национальный исследовательский университет, РФ

³ Региональный Южно-Днепровский филиал Государственной экологической академии, Херсон

Поступила 02.12.13