

Исследование закономерностей вариации показателей качества воды реки Исеть с использованием нейросетевых методик

О.М. Розенталь¹ , В.Х. Федотов² 

 fvh@inbox.ru

¹ Институт водных проблем Российской академии наук, Москва, Россия

² Чувашский государственный университет им. И.Н. Ульянова, Чебоксары, Россия

АННОТАЦИЯ

Актуальность. Повышение эффективности управленческих решений с помощью современных методов искусственного интеллекта представляет интерес в связи с активным внедрением информационных технологий во всех отраслях экономики. **Методы.** Исследованы показатели качества речных вод с помощью технологии искусственных нейронных сетей, позволяющей строить регрессии, описываемые не только аналитической формой, доступной стандартным методам. Суть методики сводится к построению, с помощью пакета программ Statistica Neural Networks, искусственной нейросети достаточно хорошо аппроксимирующей экспериментально наблюдаемые зависимости, связанные с влиянием расхода воды, сезона и концентраций взвесей на концентрацию соединений железа и цветных металлов – меди, цинка, никеля. **Результаты.** Выполненные с использованием нейросетевых методик экологические исследования показали, что ряд динамических и химических характеристик воды р. Иsetь в окрестностях Екатеринбурга взаимно коррелированы. Наибольшие нейрокорреляции выявлены между концентрацией взвешенных частиц, а также расходом воды и соединениями металлов. Обнаруженные высокие веса нейросвязей исследованных показателей и значительные в ряде случаев множественные коэффициенты нейрокорреляции позволяют допустить влияние пульсаций скорости турбулентного речного потока на распределение загрязняющих воду веществ, характеризующееся, как известно, высокой вариабельностью. Предположительно такая вариабельность обусловлена сочетанием физико-химических процессов микроструктурной самоорганизации и турбулентности. Полученная информация может быть полезна для понимания природы вариабельности показателей состава и свойств воды и в дальнейшем для повышения эффективности прогноза качества водных ресурсов.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: качество воды, производственные сбросы, гидрохимический створ, искусственные нейронные сети, нейросетевой анализ, р. Иsetь.

Финансирование: Работа выполнена в рамках государственного задания ФГБУН Институт водных проблем РАН (тема FMWZ-2022-0002).

Для цитирования: Розенталь О.М., Федотов В.Х. Исследование закономерностей вариации показателей качества воды реки Иsetь с использованием нейросетевых методик // Водное хозяйство России: проблемы, технологии, управление. 2023. № 6. С. 33–43. DOI: 10.35567/19994508_2023_6_3.

Дата поступления 14.08.2023.

INVESTIGATION OF PATTERNS OF VARIATION IN WATER QUALITY INDICATORS OF THE ISET RIVER WITH THE USE OF NEURONET METHODS

Oleg M. Rosenthal¹  , Vladislav K. Fedotov² 

 fvh@inbox.ru

¹ Institute of Water Problems of the Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

² I.N. Ulyanov Chuvash State University, 428015 Cheboksary, Russia

ABSTRACT

Relevance. Improving the efficiency of management decisions using modern artificial intelligence methods is relevant due to the increased interest in information technologies in the national economy and environmental protection. **Methods.** The article examines the quality indicators of river waters using the technology of artificial neural networks of the Statistica Neural Network software package. **Results.** Water-ecological studies performed using neural network techniques have shown that a number of dynamic and chemical characteristics of the water of the Iset River in the vicinity of Yekaterinburg are mutually correlated. The detected high weights of the neural connections of the studied indicators and, in some cases, increased multiple coefficients of neurocorrelation allow us to assume the influence of pulsations of the turbulent river flow velocity on the distribution of water pollutants, characterized, as is known, by high variability. It is assumed that such variability is due to a combination of physicochemical processes of microstructural self-organization and turbulence. In particular, the features of hydrochemical dynamics in this case may be due to forward and reverse energy cascades in a two-dimensional turbulent water flow in combination with micro-delamination of pollutants. The information obtained can be useful for understanding the nature of variability in the composition and properties of water, and in the future to improve the efficiency of forecasting the quality of water resources.

Keywords: water quality, industrial discharges, hydro/chemical gate, artificial neural networks, neural network analysis, weights of neural network connections.

Financing: The work has been done within the framework of governmental assignment of the Russian Academy of Sciences Institute of Water Problems (FMWZ-2022-0002).

For citation: Rosenthal O.M., Fedotov V.K. Investigation of patterns of variation in water quality indicators of the Iset River with the use of neuronet methods. *Water Sector of Russia: Problems, Technologies, Management*. 2023. No. 6. P. 33–43. DOI: 10.35567/19994508_2023_6_3.

Received 14.08.2023.

ВВЕДЕНИЕ

Оценка и прогноз качества речных вод демонстрируют, как правило, высокую вариабельность контролируемых показателей. Непрерывное перераспределение растворенных в природной воде веществ происходит под воздействием внешних сил и массообмена [1–5]. Однако часто только этими причинами не удается объяснить неизменно высокий коэффициент вариации состава речных вод. Высказываются предположения о значимости при этом сложных, неизвестных ранее, динамических процессах формирования гидрохимических показателей [6–9]. Среди доводов в пользу подобных утверждений отметим значительную изменчивость контролируемых показателей в пунктах наблюдения, расположенных ниже створов «полного смешения»¹ [10], т. е. там, где она должна бы снижаться.

¹ Руководящий документ РД 52.24.309-2016. Организация и проведение режимных наблюдений за состоянием и загрязнением поверхностных вод суши. Режим доступа: <https://docs.cntd.ru/document/495872993> (дата обращения 12.03.2023).

В данной работе для исследования этих дискуссионных вопросов рассмотрена возможность и результативность использования неклассических по сравнению с обычной статистикой нейросетевых методик анализа, позволяющих учитывать как явные, так и неявные (неучтенные) факторы, способные оказывать влияние на исследуемые процессы, причем без априорного задания точного (формульного) вида этих зависимостей. Для эксперимента был выбран участок р. Исеть, крупного левого притока Тобола, в окрестностях г. Екатеринбурга. Территория водосбора данного участка реки отличается развитием металлургической промышленности, сказывающейся на качестве речной воды, вследствие чего Исеть относится к наиболее загрязненным рекам не только в бассейне Оби, но и в целом по России. Характерными загрязняющими веществами являются соединения металлов, поэтому в рамках проведенного исследования рассматривалось возможное влияние на них внутренних, ранее не учитываемых факторов.

ОБЪЕКТ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Проанализированы результаты ежемесячного мониторинга, выполненного Уральским управлением Росгидромета в 1990–2010 гг. на постах: на 5,2 км выше Екатеринбурга (пост 1), в черте города (2), на 7 км ниже (3), на 19,1 км ниже (пост 4). На каждом посту для каждого показателя учитывалось 240 значений. Полный массив данных составил 1680 значений.

Повсеместно наблюдалось хаотическое поведение контролируемых показателей, как это иллюстрирует рисунок, где приведен лишь малый фрагмент использованных данных. Очевидно, что на всех постах рассматриваемой промышленной зоны концентрация соединений меди превышает предельно допустимую в разы или в десятки раз (см. рисунок).

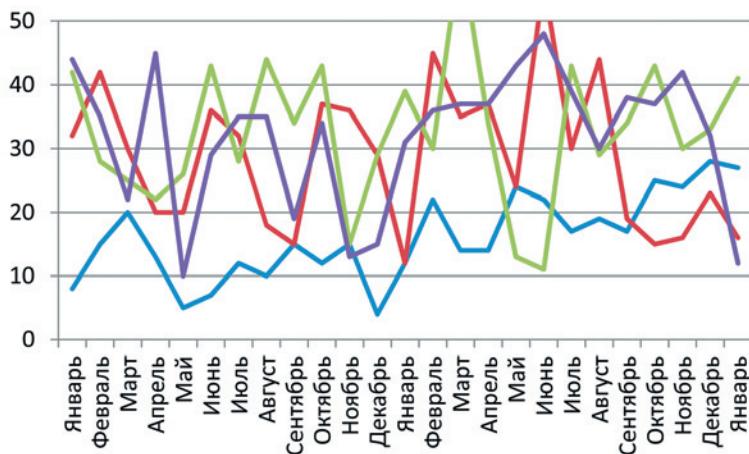


Рисунок. Результаты ежемесячного мониторинга меди (мкг/дм³) в окрестностях Екатеринбурга на гидрохимических постах 1 (синяя линия), 2 (красная), 3 (зеленая), 4 (коричневая) в 2007–2009 гг.

Figure. The results of monthly monitoring of copper, mkg/dm³, in the vicinity of Yekaterinburg at hydro/chemical posts 1 (blue line), 2 (red), 3 (green), 4 (brown) in 2007–2009.

Для решения поставленной задачи использованы методы искусственного интеллекта, позволяющие учитывать широкий диапазон влияющих факторов (в т. ч. неучтенных) без явного задания вида этих зависимостей. Основу этих методов составляют искусственные нейронные сети (ИНС), способные обучаться на примерах («обучение с учителем») и улавливать скрытые зависимости в экспериментальных данных [11–13]. Выбор структуры сети определяется экспертно, а критерием качества сети являются ошибки обучения и тестирования [12].

Перед обучением нейросети все множество исходных данных (образцов) разбивается на три подмножества: основное обучающее (*Training*) 50–70 %; проверочное (*Verification*) 20–30 %; тестовое (*Test*) 10–20 %². Затем производится разделение показателей на типы – входные (*Input*) и выходные (*Output*). Процесс обучения состоит в численной оценке влияния входных показателей (причин) на выходные (следствия) и осуществляется с помощью линейных (*Linear*) и нелинейных методов оптимизации (обратного распространения ошибки, *Back Propagation*), псевдо-обратных (*Pseudo Invert*) и др. Обобщающими показателями, позволяющими судить о качестве обучения ИНС, являются коэффициенты корреляции и значения ее весовых коэффициентов. Эти показатели рассчитываются численно по критерию минимальной невязки между исходными и расчетными данными и характеризуют уровень влияния входных показателей на выходные.

Использование технологий искусственных нейронных сетей позволило строить регрессии, описываемые не только аналитическими зависимостями, доступными стандартным методам. Это обеспечило решение поставленной гидродинамической задачи при неизвестных закономерностях и устойчивость результата к шумам во входных данных.

В данной работе методы ИНС с применением пакета программ Statistica Neural Networks (SNN) [13] использованы для анализа влияния трех входных показателей (потенциально влияющие факторы) – расхода воды ($\text{м}^3/\text{с}$), сезона (летне-осенняя или зимне-весенняя межень (месяцы) и концентрации взвесей ($\text{мг}/\text{дм}^3$) на четыре выходных показателя (зависимые факторы) – концентрацию соединений железа ($\text{мг}/\text{дм}^3$) и цветных металлов – меди, цинка, никеля ($\text{мкг}/\text{дм}^3$). Анализировали веса связей нейросетей и статистику нейрорегрессий (характеристики их точности – множественные коэффициенты корреляции Пирсона и др.). По каждому створу исследовали и сравнивали различные подходящие для решения задач регрессии реализации архитектур нейросетей: линейные (*Linear*); нелинейные (*MLP* – многослойный персептрон); RBF-сети с радиально-базисной функцией. Число нейронов на входе и в промежуточном слое сети варьировало, число нейронов на выходе сети было постоянным (*Output=4*). Параметры обучения принимались стандартными.

² В данной работе использованы различные варианты разбиений, статистика которых различалась незначительно.

Для детального исследования выбирались несколько лучших сетей, с минимальными ошибками обучения, проверки и тестирования (табл. 1). По результатам исследования многочисленных типов и архитектур сетей для дальнейшего детального анализа была выбрана линейная сеть, т. к. получаемые с ее помощью результаты наиболее стабильны и информативны. В качестве примера регрессионная статистика для последнего (нижнего) створа 4 приведена в табл. 2.

Таблица 1. Исследованные нейросети (фрагмент)

Table 1. The studied neural networks (a fragment)

Type	Inputs	Output	TError	VError	TeError	TPerf	VPerf	TePerf	Training
RBF	3	4	1.3746	2.5012	27.1149	0.25869	2.28172	0.283	KM, KN, PI
MLP	3	4	1447.8	16.483	1.37230	0.53488	0.47147	1.604	QN, PI, BP
Linear	3	4	304.851	11.6175	0.5919	0.5348	0.4714	1.604	PI

Примечание: Type – тип архитектуры сети (Linear – линейная, MLP – многослойный персепtron и RBF – радиальная); Inputs – число нейронов на входе сети; Hidden – число нейронов в промежуточном (Hidden – скрытом) слое сети; Output – число нейронов на выходе сети; TError, VError, TeError – ошибки на обучающем, проверочном и тестовом (ошибка прогнозирования) множествах соответственно (среднеквадратичные значения ошибок в каждом отдельном случае). Ошибка обучения (TError) имеет мало значения как показатель способности модели делать прогнозы с учетом новых данных. Ошибка проверки (VError) важна при выборе сетей. Ошибка теста (TeError) дает окончательную перекрестную проверку прогнозирующих качеств сети: если цифры сильно расходятся, это может указывать на проблемы с исходными данными. Во-первых, возможно, что неправильно распределены наблюдения между тремя подмножествами, и в этом случае сеть, вряд ли, будет хорошо обобщать новые наблюдения, акажущаяся производительность будет ненадежной. Во-вторых, может оказаться слишком мало случаев, чтобы результаты сети были надежными. Напротив, если цифры ошибок проверки и теста очень близки, то это убедительное эмпирическое свидетельство того, что сеть научилась надежно обобщать. TPerf, VPerf, TePerf измеряют производительность (меру) сети, которая указывает на ошибку предсказания. В сети с несколькими выходными переменными (как в нашем случае) показатель производительности относится только к первой выходной переменной. Training – примененные алгоритмы обучения (QN – Quasi Nuton, PI – Psevdo Invert, BP – Back Propagation и др.).

В табл. 2 относительная ошибка нейрорегрессии (S.D. Ratio) для обучающего и проверочного множеств меньше единицы (кроме Zn), т. е. стандартные отклонения по металлам существенно меньше стандартных отклонений в исходных данных. Коэффициенты корреляции (Correlation) достаточно высоки по всем металлам (кроме тестового по Fe), т. е. линейная нейросеть архитектуры «3–4» неплохо воспроизводит все исходные данные, включая те, которые не учитывались при обучении и проверке (тестовые).

Таблица 2. Статистка нейропререссии для сети «Linear 3-4» на створе 4
 Table 2. Neuroregression statistics for the "Linear 3-4" network on slot 4

	Tr. FE	Ve. FE	Te. FE	Tr. CU	Ve. CU	Te. Cu	Tr. Zn	Ve. Zn	Te. Zn	Tr. Ni	Ve. Ni	Te. Ni
Data Mean	0.823	2.523	0.296	51.455	75.625	28.666	140.895	130.35	69.666	17.21	24.8	18.333
Data S.D.	2.666	12.330	0.220	162.718	225.953	26.102	549.935	203.036	59.045	41.491	66.553	2.886
Error Mean	0.004	-1.032	0.058	0.783	15.147	-4.704	2.875	137.895	-23.302	0.532	2.4361	-7.645
Error S.D.	1.426	5.813	0.354	87.395	176.77	25.592	319.665	1209.092	50.040	25.443	31.141	3.799
Abs E. Mean	0.667	1.332	0.252	40.266	53.460	19.843	148.269	288.843	39.716	13.658	13.455	7.645
S.D. Ratio	0.534	0.471	1.604	0.537	0.782	0.980	0.5812	5.955	0.847	0.613	0.467	1.316
Correlation	0.844	0.998	0.276	0.843	0.992	0.536	0.813	0.4816	0.998	0.789	0.987	0.904

Примечание: Data Mean – среднее значение концентрации на створе. Data Standard Deviation (S.D.) – стандартное отклонение (от среднего значения Data Mean) концентрации на створе. Error Mean – средняя ошибка (средняя остаточная разность между измеренными и расчетными (по нейросети) концентрациями на створе. Error S.D. – стандартное отклонение исходных данных от расчетных по нейросети. Abs E. Mean – абсолютная средняя ошибка (среднее арифметическое модулей разностей между исходным и расчетным значениями на створе). S.D. Ratio = Error S.D./Data S.D относительная ошибка нейрорегрессии. Correlation – коэффициент множественной корреляции.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

По имеющимся экспериментальным данным для исследованных гидрохимических постов было обнаружено:

- линейные и нелинейные нейросети при использовании различных алгоритмов обучения примерно одинаково точно улавливали возможные взаимосвязи между элементами сети для постов 1–3. Для поста 4 нелинейные нейросети показали большую по сравнению с линейными сетями точность при использовании различных алгоритмов обучения;
- не было зафиксировано заметного влияния сезонности на концентрацию металлов;
- существенное влияние на концентрации всех металлов оказывает содержание в воде взвешенных частиц, наиболее высокий вес связей нейросети при этом наблюдается для концентрации железа;
- коэффициент нейрорегрессии, характеризующий влияние расхода воды на металлы редко превышает 0,3, хотя, возможно, он оказался бы значительно выше, если бы отсутствовал эффект размытия такой зависимости из-за плохо регулируемых сбросов сточных вод многочисленными предприятиями региона.

В табл. 3 приведены усредненные значения весов связей линейной нейросети, рассчитанные для исследованных створов при разбиении входных данных на обучающее (200 строк), контрольное (40 строк) и тестовое (3 строки) множества.

Таблица 3. Веса связей нейросети «Linear 3–4»

Table 3. Weights of connections of the neural network «Linear 3–4»

	Fe	Cu	Zn	Ni
Threshold	-0.0078	-0.0131	-0.0103	-0.0215
Расход	0.33	0.228	0.20	0.28
Сезонность	0.0074	0.0052	0.0011	0.0024
Концентрация взвешенных частиц	0.85	0.82	0.83	0.83

Примечание: Threshold – веса неявных связей, соединяющих «пороговые» нейроны с соответствующим выходным нейроном, отражающие влияние неучтенных факторов на створе.

Из табл. 3 следует, что значения Threshold малы, это указывает на незначительность влияния неучтенных факторов. Под неучтеными факторами здесь понимаются любые, кроме тех, которые использовались как входные в явной форме (отметим, что это только наш, возможно, дискуссионный взгляд на интерпретацию неявных или скрытых элементов нейросети, который ранее в литературе не встречался). Влияния сезонности в рамках использованных экспериментальных данных также не выявлено. При этом проявляется положительное влияние расхода и особенно влияние концентрации взвеси на содержание металлов. Это влияние примерно одинаково, но существенно выше, чем влияние расхода воды.

Достоверность данных статистических выводов определяется репрезентативностью выборки, которую можно оценить по формуле:

$$N > W/\varepsilon,$$

где N – объем выборки,

W – число связей в сети;

ε – доля допустимых в ходе тестирования ошибок [12].

В данном случае $W=12$, $\varepsilon=0,2$ (20 %), поэтому достоверность считается удовлетворительной при $N > 60$. Последнее неравенство безусловно выполнено для использованного в работе объема выборки $N \approx 240$ по каждому створу и каждому металлу.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Данные, полученные с использованием ИНС, свидетельствуют о существовании зависимостей между формированием распределений металлов и расходом воды, а также (более отчетливо) – с содержанием взвешенных частиц. На постах 2–4, расположенных в зонах интенсивных промышленных сбросов на водосборную площадь, это влияние заметно слабее, чем на посту 1, где такое загрязнение понижено. В то же время во всех случаях обнаруженные корреляции статистически значимы (не случайно отличаются от нуля).

Нетрудно объяснить высокую корреляцию концентраций металлов и взвешенных частиц процессами адсорбции. Этот результат значим для практических целей, прежде всего, при выборе метода подготовки (доочистки) речной воды. Сложнее понять природу не слишком высокой, но достоверной нейрокорреляции расхода воды с вариабельной концентрацией растворенных металлов – зависимости, неожиданно обнаруженной, но устойчиво повторяющейся в более чем полуторатысячном массиве гидрометеорологических данных. Предположения, возможные по этому поводу, вынесены в дискуссию.

ДИСКУССИЯ

Нейрокорреляция учтенных вариабельных динамических и химических показателей обнаружена на всех четырех постах наблюдения. Влияние расхода воды на концентрацию металлов в зонах интенсивных промышленных сбросов заметно слабее, чем там, где такое загрязнение понижено. В то же время во всех случаях такая связь статистически значима (не случайно отличается от нуля).

Неочевидна природа данного явления. Из общих представлений о процессах в речном потоке можно предположить, что данный эффект инициирован микропульсациями речного потока в сочетании с флуктуациями структуры слабого водного электролита, каковым является природная вода [14]. Известно, что благодаря упругости сетки водородных связей воды происходит выталкивание частиц примеси к местам дефектов структуры [15]. Эти и подобные ионно-молекулярные процессы, которые «быстро нарастают ...и, в отличие от равновесных процессов, изучаемых классической термодинамикой, определяют всю дальнейшую судьбу нелинейной системы», считают ведущие ученые-физики [16]. Такой нелинейной системой является речная вода, в кото-

рой причиной указанного «быстрого нарастания» (увеличения масштаба ионно-молекулярных отклонений) могут быть прямой и обратный каскады энергии в квазидвумерной турбулентной среде [17]. Возможны, конечно, и другие причины обнаруженной связи, пополняющие ряд пока что невыясненных эффектов гидрологии [18]. Можно, например, предположить, что таков результат структурной самоорганизации в области генерации турбулентности и в поле многих сил: центробежной, Кариолиса, Эйлера и т. д. Их совокупность, как известно, создает неожиданные физические эффекты [19], среди которых парадоксы Грея, Даламбера, Эйнштейна (парадокс «чайного листа»). Возможно, что и формирование показателей качества воды в речных струях подвержено подобным явлениям, а также взаимодействиям между совокупностями примесей в соответствии с известным эффектом взаимной синхронизации слабосвязанных систем [20]. Во всяком случае, маловероятно, чтобы без участия влияющих факторов непрерывный случайный процесс повышения/понижения концентрации металлов (рисунок) мог бы быть заметно синхронизирован с вариабельным расходом воды. В связи с этим стоит обратить внимание на исследования полной системы уравнений механики движения жидкости [21], где показана возможность влияния на разброс примеси пульсаций, волн и вихрей речного потока.

Таким образом, необходимо принять, что обнаруженная нейрокорреляция исследованных вариабельных показателей обусловлена сочетанием малоизученных в настоящее время механических, физических и химических процессов, описанных в работах [16–22] и определяющих устойчивость и хаос, колебания и волны в нелинейной динамической среде, каковой является речной поток. Учет роли указанных процессов, а также развитие методов воздействия на них будут способствовать совершенствованию подходов к водохозяйственному управлению.

Авторы благодарны д-ру геогр. наук С.Д. Беляеву за ценные замечания, позволившие повысить качество работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bowes M.J., E.J. Palmer-Felgate, et al. High-frequency phosphorus monitoring of the River Kennet, UK: are ecological problems due to intermittent sewage treatment works failures? *Journal of Environmental Monitoring*. 2012. Vol. 14. No. 12. P. 3137–3145.
2. Cohen M.J., Heffernan J.B. at al. Inference of riverine nitrogen processing from longitudinal and diel variation in dual nitrate isotopes // *Journal of Geophysical Research, Biogeosciences*. 2012. Vol. 117. G01021 1 of 17. DOI: 10.1029/2011JG001715.
3. Bieroza M., Heathwaite A.L. et al. Understanding nutrient biogeochemistry in agricultural catchments: the challenge of appropriate monitoring frequencies // *Environmental Science: Processes & Impacts*. 2014. Vol. 16. No. 7. P. 1676–1691.
4. Loucks P., Eelco V.B. Water Quality Modeling and Prediction // *Water Resource Systems Planning and Management*. N.Y.: Springer, 2017. P. 417–467. DOI: 10.1007/978-3-319-44234-1_10.
5. Gossweiler B., Wesström I. et al. Spatial and temporal variations in water quality and land use in a semi-arid catchment in Bolivia // *Water*. 2019. Vol. 11. No. 11. P. 2227-2232. DOI: 10.3390/w1112227.
6. Wilby R., Gilbert J. Hydrological and hydrochemical dynamics // Petts, G.E., Amoros, C. (eds). *The Fluvial Hydro/systems*, Chapman & Hall Ltd, Springer, Dordrecht, Netherlands, 1996. 322 p. DOI: 10.1007/978-94-009-1491-9_3.

7. Kirchner J.W., Feng X.H. et al. The fine structure of water-quality dynamics: the (high-frequency) wave of the future // *Hydrological Processes*. 2004. Vol. 18. P. 1353–1359. DOI: 10.1002/hyp.5537.
8. Macintosh K.A., Jordan P. et al. Low flow water quality in rivers; septic tank systems and high-resolution phosphorus signals. *Science of the Total Environment*. 2011. Vol. 412. P. 58–65. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2011.10.012.
9. Halliday S.J., Skeffington R.A. et al. Upland stream water nitrate dynamics across decadal to sub-daily timescales: A case study of Plynlimon. // Wales. *Biogeosciences*. 2013. Vol. 10. P. 8013–8038. DOI: 10.5194/bg-10-8013-2013.
10. Данилов-Данильян В.И., Розенталь О.М. Методология достоверной оценки качества воды. III. Оценка качества пресной воды в условиях непостоянства контролируемых показателей // Экология и промышленность России. 2022. Т. 26. № 5. С. 44–49. DOI: 10.18412/1816-0395-2022-5-44-49.
11. Anthony M., Bartlett P. *Neural Network Learning: Theoretical Foundations*. Cambridge, New York: Cambridge University Press, 2002. 504 p.
12. Каллан Р. Основные концепции нейронных сетей. Москва, Санкт-Петербург, Киев: Изд. Дом «Вильямс», 2001. 161 с.
13. Боровиков В.П. Нейронные сети *Statistica Neural Networks: Методология и технология современного анализа данных*. М: StatSoft, 2015. 354 с.
14. Волошин В.П., Желиговская Е.А. и др. Структуры сеток водородных связей и динамика молекул воды в конденсированных водных системах // Российский химический журнал. 2001. Т. 45. № 3. С. 31–37.
15. Родникова М.Н. Об упругости пространственной сетки водородных связей в жидкостях и растворах. Структурная самоорганизация в растворах и на границе фаз. М.: Изд-во АКИ, 2008. С. 151–198.
16. Капица С.П., Курдюмов С.П., Малинецкий Г.Г. Синергетика и прогнозы будущего. М.: УРСС, 2019. 286 с.
17. Boffetta G., Ecke R.E. Two-dimensional turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics*. 2012. Vol. 44. P. 427–451.
18. Бетяев С.К. Гидродинамика: проблемы и парадоксы // Успехи физических наук. 1995. Т. 165. № 3. С. 299–330.
19. Eckstein M., Horodecki P. The Experiment Paradox in Physics // *Foundations of Science*. 2022. Vol. 27. No. 12. P. 1–15. DOI: 10.1007/s10699-020-09711-y.
20. Пиковский А., Розенблум М., Куртс Ю. Синхронизация. Фундаментальное нелинейное явление. Москва: Техносфера, 2003. 496 с.
21. Chashechkin Yu.D., Rosental O.M. River Flow Structure and its Effect on Pollutant Distribution // *Water Resources*. Vol. 46. No. 6. P. 910–918. DOI: 10.1134/S0097807819060022.

REFERENCES

1. Bowes M.J., E.J. Palmer-Felgate, et al. High-frequency phosphorus monitoring of the River Kennet, UK: are ecological problems due to intermittent sewage treatment works failures? *Journal of Environmental Monitoring*. 2012. Vol. 14. No. 12. P. 3137–3145.
2. Cohen M.J., Heffernan J.B. et al. Inference of riverine nitrogen processing from longitudinal and diel variation in dual nitrate isotopes. *Journal of Geophysical Research, Biogeosciences*. 2012. Vol. 117. G01021 of 17. DOI: 10.1029/2011JG001715.
3. Bieroza M., Heathwaite A.L. et al. Understanding nutrient biogeochemistry in agricultural catchments: the challenge of appropriate monitoring frequencies. *Environmental Science: Processes & Impacts*. 2014. Vol. 16. No. 7. P. 1676–1691.
4. Loucks P., Eelco V.B. Water Quality Modeling and Prediction. *Water Resource Systems Planning and Management*. N.Y.: Springer, 2017. P. 417–467. DOI: 10.1007/978-3-319-44234-1_10.
5. Gossweiler B., Wesström I. et al. Spatial and temporal variations in water quality and land use in a semi-arid catchment in Bolivia. *Water*. 2019. Vol. 11. No. 11. P. 2227–2232. DOI: 10.3390/w1112227.
6. Wilby R., Gilbert J. Hydrological and hydrochemical dynamics. Petts, G.E., Amoros, C. (eds). *The Fluvial Hydrosystems*, Chapman & Hall Ltd, Springer, Dordrecht, Netherlands, 1996. 322 p. DOI: 10.1007/978-94-009-1491-9_3.

7. Kirchner J.W., Feng X.H. et al. The fine structure of water-quality dynamics: the (high-frequency) wave of the future. *Hydrological Processes*. 2004. Vol. 18. P. 1353–1359. DOI: 10.1002/hyp.5537.
8. Macintosh K.A., Jordan P. et al. Low flow water quality in rivers; septic tank systems and high-resolution phosphorus signals. *Science of the Total Environment*. 2011. Vol. 412. P. 58–65. DOI:10.1016/j.scitotenv.2011.10.012.
9. Halliday S.J., Skeffington R.A. et al. Upland streamwater nitrate dynamics across decadal to sub-daily timescales: A case study of Plynlimon. *Wales. Biogeosciences*. 2013. Vol. 10. P. 8013–8038. DOI: 10.5194/bg-10-8013-2013.
10. Danilov-Danilyan V.I., Rosenthal O.M. Methodology of reliable assessment of water quality. III. Assessment of fresh water quality in conditions of variability of controlled indicators. *Ecology and industry of Russia*. 2022. Vol. 26. No. 5. C. 44–49. DOI: 10.18412/1816-0395-2022-5-44-49 (In Russ.).
11. Anthony M., Bartlett P. Neural Network Learning: Theoretical Foundations. Cambridge, New York: Cambridge University Press, 2002. 504 p.
12. Callan R. Basic concepts of neural networks. Moscow, St. Petersburg, Kiev: Ed. Williams House, 2001. 161 p. (In Russ.).
13. Borovikov V.P. Neural networks Statistica Neural Networks: Methodology and technology of modern data analysis. M: StatSoft, 2015. 354 p. (In Russ.).
14. Voloshin V.P., Zheligovskaya E.A. et al. Structures of hydrogen bond grids and dynamics of water molecules in condensed water systems. *Russian Journal General Chemisrty*. 2001. Vol. 45. No. 3. P. 31–37 (In Russ.).
15. Rodnikova M.N. *On the elasticity of the spatial grid of hydrogen bonds in liquids and solutions. Structural self-organization in solutions and at the phase boundary*. Moscow: LKI Publishing House, 2008. P. 151–198. (In Russ.).
16. Kapitsa S.P., Kurdyumov S.P., Malinetsky G.G. Synergetics and forecasts of the future. Moscow: URSS, 2019. 286 p.
17. Boffetta G., Ecke R.E. Two-dimensional turbulence. *Annual Review of Fluid Mechanics*. 2012. Vol. 44. P. 427-451.
18. Betyaev S. K. Hydro/dynamics: problems and paradoxes. *Successes of physical sciences*. 1995. Vol. 165. No. 3. C. 299–330 (In Russ.).
19. Eckstein M., Horodecki P. The Experiment Paradox in Physics. *Foundations of Science*. 2022. Vol. 27. No. 12. P. 1–15. DOI:10.1007/s10699-020-09711-y.
20. Pikovsky A., Rosenblum M., Kurts Yu. *Synchronization. A fundamental nonlinear phenomenon*. Moscow: Technosphere, 2003. 496 p. (In Russ.).
21. Chashechkin Y.D., Rosental O.M. River Flow Structure and its Effect on Pollutant Distribution. *Water Resources*. Vol. 46. No. 6. P. 910–918. DOI: 10.1134/S0097807819060022.

Сведения об авторах:

Розенталь Олег Моисеевич, д-р техн. наук, главный научный сотрудник, ФГБУН «Институт водных проблем Российской академии наук», Россия, 119333, Москва, ул. Губкина, д. 3; ORCID: 0000-0001-6261-6060; e-mail: omro3@yandex.ru

Федотов Владислав Харитонович, канд. хим. наук, доцент кафедры информационных систем, ФБОУ «Чувашский госуниверситет им. И.Н. Ульянова», Россия, 428015, Чебоксары, Московский просп., д. 15; ORCID: 0000-0001-8395-6849; e-mail: fvh@inbox.ru

About the authors:

Rozental Oleg Moiseevich, Dr. Tech. Sci., Chief Researcher, Institute of Water Problems of the Russian Academy of Sciences, ul. Gubkina, 3, Moscow, 119333, Russia; ORCID: 0000-0001-6261-6060; e-mail: omro3@yandex.ru

Fedotov Vladislav Kharitonovich, Ph.D. Chem. Sci., Associate Professor of the Department of Information Systems, Chuvash State University named after I.N. Ulyanov, pr. Moskovskiy, 15, Cheboksary, 428015, Russia; ORCID: 0000-0001-8395-6849; e-mail: fvh@inbox.ru