

АНОТАЦІЯ

Герцюк М.М. Інформаційна технологія прогнозування забруднення річок в умовах надзвичайних ситуацій на основі методів регресії та евристичних алгоритмів. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії з галузі знань 12 «Інформаційні технології» за спеціальністю 123 «Комп'ютерна інженерія» - Державний університет інформаційно-комунікаційних технологій Міністерства освіти і науки України, Київ, 2024.

В дисертаційній роботі вирішено наукове завдання розробки інформаційної технології, що прогнозує рівень забруднення річок небезпечними речовинами в умовах надзвичайних ситуацій.

Робота висвітлює проведені дослідження, що дозволяють здійснити прогнозування забруднення русла річок при обмеженій кількості вхідних характеристик.

У роботі проаналізовано такі існуючі рішення, як Qual2K, MONERIS, Aquatox, WASP8, EXAMS, Visual Plumes, RUSLE2, MMSOILS, RESRAD, MEPAS, Hydrologic Micro Services, SWToolbox, MOIRA DSS та деякі емпіричні моделі. Аналіз дозволяє провести прогнозування наслідків забруднення річок та вивести такі недоліки цих систем, як:

- незручний користувацький інтерфейс, що включає в себе складність аналізу отриманих результатів;
- необхідність залучення широкого спектру характеристик, необхідних для проведення прогнозування;
- недостатню адаптованість до умов конкретної надзвичайної ситуації;
- необхідність мати широку експертизу в моделях, щоб застосовувати їх правильно;
- відсутність користувацького інтерфейсу.

В роботі проаналізовані закони Фіка, як закони моделювання процесу дифузії. Особлива увага приділяється рівнянню Фіка виведеним Тейлором, що здійснює обчислення в потоці. Важливість такого аналізу полягає в розумінні процесів дифузії та логіки роботи методів типу Фіка, тобто методів

прогнозування наслідків забруднення, що моделюють тільки поширення дифузії, не включаючи інші фактори навколишнього середовища, які описують моделі не Фікового типу.

Для усунення таких недоліків здійснено ряд досліджень, що дадуть змогу усунути їх. Для цього, вибрано та удосконалено емпіричний метод проведення наслідків забруднення. Результатом методу є концентрація речовини в деякому місці, в деякий час. Такі характеристики усувають недолік складності аналізу отриманих результатів. Враховуючи такий недолік, як необхідність залучення широкого спектру характеристик, необхідних для проведення прогнозування прийнято рішення використовувати серію емпіричних гідрологічних рівнянь Харві Джобсона, як модель, що не вимагає деталізованих характеристик та може бути отримана шляхом ПС аналізу та деяких статистичних даних.

Вибраний метод здійснює прогнозування між точкою забруднення та точкою вимірювання. Це є недоліком, що унеможлиблює використання методу в необхідних умовах. Тому, розроблено такі базові удосконалення, як метод багатоточковості та метод мультимаршрутизації. Метою методу багатоточковості є адаптація вибраної моделі до використання між декількома точками. Метод мультимаршрутизації передбачає використання моделі у випадку таких явищ, як розгалуження та з'єднання русла річки.

Частину методу прогнозування наслідків забруднень можна використати для прогнозування рівня спадання забруднення в деякій локації. В роботі проведені та описані дослідження, що показують логіку роботи цієї частини.

Метод прогнозування забруднення, що вимагає базової кількості характеристик може мати меншу точність та недостатню адаптованість до умов надзвичайної ситуації, тому на основі нейронної мережі розроблено метод коригування наслідків забруднення, що навчається на основі існуючої інформації про попередні забруднення. Навчання відбувається шляхом регресії обчислених даних мережею до існуючих статистичних. В основі такої нейронної мережі лежить задача регресії. Вхідною характеристикою до обчислення є концентрація речовини в деякій точці. Даний метод допомагає усунути такий недолік, як недостатня адаптованість до умов конкретної надзвичайної ситуації

та адаптувати результати до деяких можливих закономірностей локації з ефективністю, залежно від самої локації та інформації, що зібрана для даної локації.

Метод прогнозування наслідків забруднення є точковим, тобто використовує інформацію з точок моніторингу, що розташовані по руслу річки. Відповідно, результати обчислення доступні лише в цих локаціях. Тому, розроблено метод, що дає змогу отримувати результати між точками моніторингу. Базою для цього методу є методи інтерполяції та рекурсії. Такий підхід дозволяє проводити обчислення з масштабуванням відстані, таким чином формуючи градієнт результатів. Вхідними параметром до методу є концентрації в двох сусідніх точках моніторингу та дистанція між точками. Отже, така інформація доступна, з результату та вхідної характеристики до основного методу.

Інформація про можливі підприємства, що могли здійснити забруднення може бути корисною для ліквідації наслідків надзвичайної ситуації. Тому, на основі алгоритмів фільтрації та сортування розроблено метод, що дозволяє класифікувати такі підприємства для надзвичайної ситуації. У якості вхідного параметру такого методу є точка моніторингу на річці, біля якої стався викид, а отже ця інформація доступна, як вхідна характеристика до методу прогнозування забруднення.

Важливою інформацією є розуміння рівня небезпеки для деякого рівня концентрації. Тому, в роботі описується логіка оцінки шляхом порівняння значень концентрації з граничними значеннями бази даних потенційно-небезпечних об'єктів. Таку базу формують відповідні нормативно-правові документи, а саме санітарні правила і норми охорони поверхневих вод від забруднення - СанПіН 4630-88. Через громіздкість такого документу, база даних наповнюється тільки можливими для деякої річки речовинами.

Всі описані методи потребують бази даних, застосунок для здійснення обчислень, застосунок для наповнення бази даних та застосунок для проведення навчання. База даних необхідна для збереження інформації для роботи всіх існуючих методів. Застосунок для здійснення обчислень має використовуватись

сторонами, що потребують в проведенні досліджень надзвичайної ситуації. Такими можуть бути співробітники розрахунково-аналітичних груп Державної служби з надзвичайних ситуацій України. Наявність такого застосунку усуває такий недолік, як відсутність користувацького інтерфейсу та незручність користувацького інтерфейсу, що включає в себе складність аналізу отриманих результатів. Застосунок для наповнення бази даних необхідний для актуалізації інформації в базі даних. Такий процес може проводитись співробітниками Метеорологічної служби України, та/або Екологічної інспекції України. Застосунок для проведення навчання є технічним застосунком, що дозволяє актуалізувати метод коригування наслідків забруднення та проводитись, як автоматизована технічна процедура. Такий ряд вимог сформував необхідність розробити інформаційну систему для поєднання усіх методик та автоматизованих вимог. Єдиною додатковою вимогою є наявність серверу, як служби, що забезпечує всі складові системи цілісною інформацією.

Інформація про поточні витрати води в точках моніторингу є необхідною складовою, що повинна бути врахована при проведенні обчислення. З цією метою розроблено теоретичний метод інтеграції датчиків обчислення поточних витрат води, що знаходяться у точках моніторингу, з інформаційною системою. Його принцип полягає у взаємодії точки моніторингу з сервером через протокол HTTP, таким чином включаючи і цю частину взаємодії з пристроями до інформаційної системи.

Разом, усі описані складові, тобто методики та інформаційна система формують інформаційну технологію.

Валідність розроблених методів підтверджується шляхом проведення симуляцій та регресії очікуваних даних з обчисленими.

Правильність роботи інформаційної системи підтверджується тестуванням її компонентів. З цією метою, для кожного компонента розроблено ряд тестових ситуацій, що при правильному результаті підтверджують правильність роботи функції. Такі тести можуть бути проведеними вручну або автоматизованими.

Описані розробки усувають недоліки, що виявлені в ході аналізу існуючого програмного забезпечення та формують такі переваги, як наявність

бази даних, та інтерактивний користувачський інтерфейс. Інші такі переваги, як широкий спектр характеристик, що можуть бути враховані для прогнозування, що покращує точність прогнозованих результатів, широкий спектр моделей для проведення прогнозування, можливість здійснювати моделювання не тільки якості води, а й вплив на водні екосистеми не є важливими для проведення обчислень в умовах надзвичайної ситуації.

Ключові слова: оцінка якості водойм, нейронна мережа, штучний інтелект, русло річки, регресія, прогнозування наслідків забруднення водойм, математичне моделювання, оцінка якості водних об'єктів, русло, прогноз наслідків забруднення водойм, математичне моделювання, інтерполяція, рекурсія, потенційно небезпечний об'єкт, алгоритм фільтрації, інформаційна система, інформаційна технологія, RESit, автоматизовані методи прогнозування забруднення, надзвичайна ситуація.

SUMMARY

Gertsyuk M.M. Information technology for river pollution forecasting in emergencies based on regression methods and heuristic algorithms. – Qualifying scientific work on manuscript rights.

The dissertation for obtaining Philosophy Doctor scientific degree in the field of knowledge 12 “Information technologies”, specialty 123 “Computer engineering”. State University of Information and Communication Technologies of the Ministry of Education and Science of Ukraine, Kyiv, 2024.

An information technology development that predicts rivers pollution level with hazardous substances in emergencies scientific task is solved in the dissertation.

The work highlights conducted research that allows riverbed pollution forecasting with a limited input characteristics number.

The work analyzed such existing solutions as Qual2K, MONERIS, Aquatox, WASP8, EXAMS, Visual Plumes, RUSLE2, MMSOILS, RESRAD, MEPAS, Hydrologic Micro Services, SWToolbox, MOIRA DSS and some empirical models. An analysis makes it possible to forecast river pollution consequences and to deduce such disadvantages of mentioned systems as:

- inconvenient user interface, that includes the obtained results analyzing complexity;
- a need to involve a characteristics wide range necessary for forecasting;
- insufficient adaptability to the specific emergency conditions,
- a necessity to have extensive expertise in models to apply them correctly;
- user interface absence.

Fick's laws are analyzed in work as modeling the diffusion process laws. Special attention is allocated to the Fick equation derived by Taylor, which performs calculations in the flow. Such analysis is important cause of diffusion processes understanding and Fickian-type methods logic, means pollution effect predicting methods, that model only diffusion spread, without including other environmental factors that describe non-Fickian type models.

To eliminate such disadvantages, a number of studies were carried out, which will make it possible to eliminate them. For this purpose, a pollution effect assessing empirical method are selected and improved. A method result is substance concentration in certain location, at certain time. Such characteristics eliminate obtained results analysis complexity disadvantage. Considering a need to involve a wide range of characteristics necessary for forecasting, a decision to use Harvey Jobson empirical hydrological equations series as a model that does not require detailed characteristics and can be obtained through GIS analysis and some statistical data was made.

Chosen method performs predictions between pollution and measurement points. This is a disadvantage that makes it impossible to use method in necessary conditions. Therefore, such basic improvements as the multipoint method and the multirouting method were developed. The purpose of the multipoint method is to adapt selected model to use between several points. A multirouting method involves model usage in the case of such phenomena as branching and merging of river channels.

A part of pollution effects forecasting method can be used to predict pollution level decline in some location. Researches that show work logic of this part are conducted and described in the work.

A pollution forecasting method, that requires a basic number of characteristics, may have less accuracy and insufficient adaptability to the emergency conditions. Therefore, a method for adjusting pollution consequences, which is learned based on existing information about previous pollution, was developed based on a neural network. Training is performed based on regression of concentration data calculated by the network to the existing statistical ones. Such neural network basis is based on regression problem. An input characteristic for the calculation is the substance concentration at some point. This method helps to eliminate such a disadvantage as insufficient adaptation to specific emergency conditions and to adapt the results to some possible regularities of the location, with efficiency depending on the location itself and the information collected for the given location.

A pollution consequences forecasting method is point-based, means it uses information from monitoring points located along the riverbed. Accordingly, calculation results are available only in these locations. Therefore, a method that allows obtaining results between monitoring points was developed. A basis for this method is interpolation and recursion methods. This approach allows calculations with distance scaling, thus forming a results gradient. Input parameters to the method are concentrations in two neighboring monitoring points and distance between the points. So, such information is available, from result and input characteristic from main method data.

Information about possible enterprises that could have caused pollution can be useful for emergency consequences eliminating. Therefore, based on filtering and sorting algorithms, a method that allows classifying such enterprises for an emergency was developed. As an input parameter of such a method, there is a monitoring point on the river near which the release occurred, and therefore this information is available as an input characteristic to the pollution forecasting method.

Understanding the hazard level for a given concentration value is important information. Therefore, the work describes assessment logic by comparing concentration values with potentially dangerous objects database limit values. Such a database is formed by relevant legal documents, namely sanitary rules and regulations for the surface water protection from pollution - SanPiN 4630-88. Due to the bulkiness

of such a document, the database is filled only with substances possible for a certain riverbed.

All described methods require a database, an application for performing calculations, an application for filling the database, and an application for training. A database is necessary to store information for all existing methods operations. The calculation application should be used by parties requiring emergency investigations. Such parties can be State Emergency Service of Ukraine calculation and analytical group employees. Such an application presence eliminates such a disadvantage as the lack of a user interface and user interface inconvenience, that includes obtained results analyzing complexity. Application for database filling are necessary for updating database information. Such a process can be carried out by employees of the Meteorological Service of Ukraine and/or the Environmental Inspection of Ukraine. The training application is a technical application that allows you to update the method of pollution effect correcting and conduct it as an automated technical procedure. Such a series of requirements created a necessity to develop information system to combine all methods and automated requirements. The only additional requirement is the server as a service presence that provides all system components with complete information.

Information about current water consumption at monitoring points is a necessary component that must be taken into account during calculation process. For this purpose, a sensors integration theoretical method for calculating current water flows located at monitoring points with the information system was developed. Its principle lies in interaction between monitoring point and server through HTTP protocol, thus including this interaction part with the devices in the information system.

Together, all described components, i.e. methods and information system, form information technology.

A developed methods validation is confirmed by conducting simulations and expected with calculated data regression.

An information system operation correctness is confirmed by testing its components. For this purpose, a few test situations were developed for each component, which, if the result is correct, confirm operation correctness of the function. Such tests can be conducted manually or automated.

Described developments eliminate disadvantages revealed during existing software analysis and form such advantages as presence of a database and an interactive user interface. Other advantages such as a wide range of characteristics that can be considered for forecasting, which improves the forecasted results accuracy, models wide range for forecasting and the ability to model not only water quality but also the impact on aquatic ecosystems are not important for calculations in emergencies.

Key words: water body quality assessment, neural network, artificial intelligence, riverbed, regression, water body pollution consequences prediction, mathematical modeling, water bodies quality assessment, river bed, water body pollution effects prediction, mathematical modeling, interpolation, recursion, potentially dangerous object, filtering algorithm, information system, information technology, RESit, automated pollution forecasting methods, emergency situation.

Список опублікованих праць за темою дисертації

Матеріали й тези наукових конференцій

1. **Gertsyuk Mod.M., Skobley M.P., Gertsyuk Myk.M., Lysychenko G.V.** Chemically dangerous objects Zakarpattia region Ukraine. *Third international conference: «Chemical and radiation safety: problems and solutions»*. Works and messages (Kyiv, 19-22 May 2015), 2015. P. 3.

2. **Герцюк Мод.М., Мельниченко Т.І., Герцюк Мик.М., Лисиченко Г.В.** Дослідження та моделювання стану забруднення токсичними речовинами річки Тиса на території України при надзвичайних ситуаціях. *Четверта міжнародна конференція: «Хімічна і радіаційна безпека: проблеми і рішення»*. Праці та повідомлення (Київ, 17-20 травня 2016 р.), Київ, 2016. P. 8.

3. **Gertsyuk Myk.M., Horvath C., Gertsyuk Mod.M., Lysychenko G.V.** Software for modeling and predicting pollution dispersion on the Tisza river and its tributaries in case of emergencies. *Fourth International Conference: «Chemical and radiation safety: problems and solutions»*. Work and message (Kyiv, 17-20 May 2016), Kyiv, 2016. P. 11.

4. **Gertsyuk Mod., Melnychenko T., Gertsyuk Myk., Lysychenko G.** Research and modeling of the state Tisza river pollution by toxic substances on the territory of Ukraine in emergencies. *Book of abstracts 18th International symposium on advances in extraction technologies & 22nd international symposium on separation sciences*. Torun, Poland, July 3-6, 2016. P. 83.

5. **Герцюк Мод.М., Лисиченко Г.В., Мельниченко Т.І., Герцюк Мик.М., Товмаченко А.В., Дмитрієва Т.Ф., Пилипенко В.О., Кулібаба Т.О.** Дослідження складу забруднюючих речовин у річці Тиса на території України. *П'ята міжнародна конференція: «Хімічна і радіаційна безпека: проблеми і рішення»*. Праці та повідомлення (Київ, 24-26 травня 2017 р.), Київ, 2017. С. 7.

6. **Герцюк Мод.М., Кулібаба Т.О., Мельниченко Т.І., Герцюк Мик.М., Дмитрієва Т.Ф., Товмаченко А.В., Кузенко С.В.** Моніторинг вмісту важких металів в річці Тиса Закарпаття. *П'ята міжнародна конференція: «Хімічна і радіаційна безпека: проблеми і рішення»*. Праці та повідомлення. Київ, 24-26 травня 2017 р. С. 8.

7. **Герцюк Мод.М., Пилипенко В.О., Мельниченко Т.І., Герцюк Мик.М., Дмитрієва Т.Ф., Товмаченко А.В.** Моніторинг вмісту поліциклічних ароматичних вуглеводнів у річці Тиса. *П'ята міжнародна конференція: «Хімічна і радіаційна безпека: проблеми і рішення»*. Праці та повідомлення. Київ, 24-26 травня 2017 р. С. 9.

8. **Gertsyuk M, Horvath C.** RESit: program for predicting of spread rivers pollution. *Fifth International Conference: «Chemical and radiation safety: problems and solutions»*. Work and message. Kyiv, 24-26 May 2017. P. 10.

9. **Gertsyuk Myk., Horvath C., Gertsyuk Mod.** Software for predicting of spread rivers pollution in emergencies. *23rd International Symposium on Separation Sciences. Abstracts*. Vienna, Austria, September 19-22, 2017, (PO-46). P. 194.

10. **Gertsyuk Mod., Lysychenko G., Melnychenko T., Gertsyuk Myk.** Determination and Monitoring of the content of pollutants in the river Tisza on Ukrainian territory. *23rd International Symposium on Separation Sciences. Abstracts*, (KL-8). P. 80

11. **Герцюк М.М.** Метод та можливості для прогнозування забруднення річок web-додатком «RESit». *Проблеми інформатизації. тринадцятої міжнародної науково-технічної конференції. Тези доповідей*. Київ, 11–12 квітня 2019 року. С. 113-114.

12. **Герцюк М.М.** Застосування нейронних мереж для підвищення точності прогнозування наслідків забруднення річок. *Всеукраїнська науково-технічна конференція «Застосування програмного забезпечення в інфокомунікаційних технологіях»*, Київ, Україна, 12 лютого 2021 року. С. 78-79.

13. **Герцюк М.М.** Доцільність створення інформаційної системи RESit на базі програмного забезпечення RESit. Міжнародна науково-практична конференція «Сучасні аспекти діджиталізації та інформатизації в програмній та комп'ютерній інженерії», Київ, Україна, 1-3 червня 2023 року. С. 98-99.

Статті в наукових фахових виданнях

1. **Герцюк М.М., Жебка В.В.** Аналіз програмного забезпечення для прогнозування забруднення річок небезпечними речовинами. *Зв'язок*, N 2, 2019. С. 45-48.
2. **Gertsruk Myk., Horvath C., Gertsruk Mod.** Computer application for predicting pollution of the Tisza River in emergency situations. *Aparatura badawcza i dydaktyczna*, 2. 2019, 110-114.
3. **Герцюк М.М.** Модель математичного моделювання наслідків забруднення водою річок з використанням нейронної мережі, що базується на основі задач регресії. Системи управління, навігації та зв'язку. Збірник наукових праць. Полтава: ПНТУ, 2022, Т. 2 (68). С. 95-98. DOI: <https://doi.org/10.26906/SUNZ.2022.2.095>.
4. **M. Gertsruk** Prediction of Pollution Level Between Measurement Points by Mathematical Modeling Using Interpolation and Recursion. *Science and Innovation*, 19(3), pp. 65–70. DOI: <https://doi.org/10.15407/scine19.03.065>.
5. **Герцюк М. М.** Методика визначення потенційно небезпечних об'єктів, причасних до викидів забруднюючих речовин в русло річки. Телекомунікації та інформаційні технології. Київ, 2022, №3(76), С. 21-27. DOI: <https://doi.org/10.31673/2412-4338.2022.032127>.
6. **Герцюк М.М.** Створення інформаційної системи RESit для прогнозування забруднення річок в умовах надзвичайних ситуацій. Телекомунікації та інформаційні технології. Київ, 2023, №2(79). С. 13-21. DOI: <https://doi.org/10.31673/2412-4338.2022.021322>.