

Российская академия наук
Институт экологии Волжского бассейна

В.К. Шитиков, Г.С. Розенберг,
Т.Д. Зинченко

**КОЛИЧЕСТВЕННАЯ
ГИДРОЭКОЛОГИЯ:
методы системной идентификации**

Тольятти
2003

УДК 574.5 + 578.087.1 + 51.001.572

Шитиков В.К., Розенберг Г.С., Зинченко Т.Д. Количественная гидроэкология: методы системной идентификации. – Тольятти: ИЭВБ РАН, 2003. – 463 с.

ISBN 5-93424-109-5

В книге рассматриваются современные теоретические концепции биоиндикации применительно к экологическому мониторингу пресноводных водоемов. Предлагаются структурные схемы функционального и информационного описания экологических систем и приводится расширенный обзор методов их математического моделирования.

Дан развернутый литературный обзор существующих методик нормирования и классификации водоемов по гидрохимическим, экологическим и комбинированным показателям. Приводятся конкретные расчетные формулы и таблицы, описывающие ГОСТИруемые и традиционно употребляемые методы оценки качества вод, что дает возможность использовать монографию в качестве справочного пособия. Подробно обсуждаются критерии и расчетные индексы, применяемые в гидробиологических исследованиях.

Многомерный статистический анализ, алгоритмы распознавания образов и искусственного интеллекта рассматриваются в книге как аппарат решения конкретных задач гидроэкологического мониторинга. Приводится теоретическое обоснование широкого набора математических методов, расчетные формулы и описание процедур оценки адекватности моделей. Методическая часть подробно иллюстрируется расчетами, выполненными на основе единого массива исходных измерений, сформированного по данным мониторинга донных организмов на малых реках степной и лесостепной зон Среднего Поволжья.

Книга ориентирована на широкий круг специалистов в области гидробиологии, экологии, охраны окружающей среды, рационального использования ресурсов водоемов. Может быть использована в качестве учебного пособия по прикладной математике для студентов экологического профиля.

Табл. 109. Ил. 98. Библиогр. 764 назв.

*Рекомендована к печати Ученым советом ИЭВБ РАН
(протокол № от 2003 г.)*

Рецензенты:

Д.Б. Гелашвили, доктор биологических наук, профессор (г. Нижний Новгород)

И.А. Евланов, доктор биологических наук, профессор (г. Тольятти)

445003 Россия, Самарская обл., г. Тольятти, ул. Комзина, 10

Институт экологии Волжского бассейна РАН

Тел., факс: (8482) 489-504, e.mail: ecolog @ attack.ru

© В.К. Шитиков, Г.С. Розенберг,
Т.Д. Зинченко. 2003 г.

© ИЭВБ РАН, 2003 г.

ОГЛАВЛЕНИЕ

<i>ПРЕДИСЛОВИЕ</i>	5
ЧАСТЬ 1. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ	12
<i>Глава 1. Экологический мониторинг и биоиндикация: сущность, формы реализации и концепции развития</i>	12
1. 1. Определения и классификация систем мониторинга окружающей среды	12
1. 2. Биоиндикация как поиск информативных компонентов экосистем	15
1. 3. Анализ экологических воздействий (приемы природоохранной экспертизы)	18
1. 4. Концепции нормативов и критических нагрузок	24
1. 5. Общий подход к оценке комбинированного действия факторов	30
1. 6. Информационные системы экологического мониторинга	34
1. 7. Примеры использования ГИС-технологий в экологии	42
<i>Глава 2. Методы математического моделирования экологических систем</i>	48
2. 1. Основные понятия системной экологии	48
2. 2. Экосистема как объект математического моделирования	55
2. 3. Информационное описание экосистем: показатели, "индексы" и шкалы их измерения	64
2. 4. Математические модели в экологии	69
2. 5. Аналитические и имитационные модели	75
2. 6. Эмпирико-статистические модели	78
2. 7. Оценка качества водных экосистем по многомерным эмпирическим данным	91
2. 8. Методы и модели искусственного интеллекта	97
ЧАСТЬ 2. КРИТЕРИИ ОЦЕНКИ КАЧЕСТВА ВОДНЫХ ЭКОСИСТЕМ	106
<i>Глава 3. Факторы и критерии оценки качества вод пресноводных водоемов</i>	106
3. 1. Сущность проблемы нормирования качества вод (основные термины и понятия)	106
3. 2. Санитарно-гигиенический подход к нормированию качества вод	110
3. 3. Общеэкологический подход к нормированию качества вод	114
3. 4. Подходы к созданию многофакторных систем классификации водоемов	120
3. 5. Методики оценки качества водоемов по комплексу гидрохимических показателей	125
3. 6. Методики комбинированных оценок качества воды с использованием гидрохимических и гидробиологических показателей	129
3. 7. Оценка качества воды с использованием α -метода проверки статистических гипотез ..	146
<i>Глава 4. Критерии оценки качества вод по данным гидробиологического анализа</i>	150
4. 1. Современные концепции биомониторинга водных экосистем	150
4. 2. Оценка качества экосистемы по соотношению показателей обилия	157
4. 3. Оценка качества экосистемы по индексам видового разнообразия	160
4. 4. Классификация водоемов и биоценозов по сапробности	169
4. 5. Оценка качества экосистемы по соотношению количества видов, устойчивых и неустойчивых к загрязнению	180
4. 6. Интегральные критерии: оценка качества экосистем по нескольким показателям	183
4. 7. Оценка видового сходства биоценозов	190
4. 8. Основы продукционной гидробиологии	194
ЧАСТЬ 3. СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ В ГИДРОБИОЛОГИИ: ЗАДАЧИ И РЕШЕНИЯ	204
<i>Глава 5. Задачи о выборках: анализ распределений, сравнение, поиск зависимостей</i> ..	204
5. 1. Задача о законе распределения гидробиологических показателей	206
5. 2. Задача об однородности выборок: однофакторный дисперсионный анализ	218
5. 3. Теория и практика двухфакторного дисперсионного анализа	229
5. 4. Непараметрические критерии для оценки однородности выборок	234
5. 5. Задача о законе влияния фактора: линейный регрессионный анализ	241

5. 6. Непараметрическая корреляция и регрессия	255
<i>Глава 6.</i> Таблицы сопряженности и «интервальная» математика	259
6. 1. Оценка зависимости признаков в таблицах сопряженности	259
6. 2. Нелинейность отношений и «уйттекеровские» колокола	266
6. 3. Интервальные и бинарные структуры	274
6. 4. Нахождение пороговых значений с использованием детерминационного анализа	279
<i>Глава 7.</i> Задачи о классификациях: отношения сходства и порядка для многомерных объектов	284
7. 1. Техника выделения ассоциаций по Браун-Бланке	284
7. 2. Задача о статистической связи: корреляционный анализ признаков и объектов	289
7. 3. Задача о разбиении на группы: кластерный анализ	297
7. 4. Оценка различий многомерных комплексов наблюдений	302
7. 5. Задача о снижении размерности многомерного пространства: факторный анализ	307
7. 6. Метод многомерного шкалирования	315
7. 7. Общая методика анализа водных объектов по многомерным данным гидробиологического мониторинга (вместо резюме)	317
<i>Глава 8.</i> Задачи о классе качества вод: прогноз отклика по многомерным эмпирическим данным	323
8. 1. Модель множественной регрессии	323
8. 2. Регрессия с качественной зависимой переменной	332
8. 3. Дискриминантные функции для классификации многомерных объектов	339
8. 4. Задача о «классности» видов: алгоритм распознавания, основанный на вычислении биоиндикационных индексов	347
8. 5. Задача о двух классах и разделяющей гиперплоскости: метод «обобщенного портрета»	359
8. 6. Задача об ассоциативности видов: алгоритм формирования логических высказываний	369
<i>Глава 9.</i> На пути к интеллектуальным биоиндикационным системам	372
9. 1. Классификация наблюдений с использованием иерархических деревьев решений	372
9. 2. Генетический алгоритм селекции информативных переменных	376
9. 3. Многорядный алгоритм МГУА для оценки качества вод	381
9. 4. Нейросетевое моделирование: многослойный перцептрон	385
9. 5. Решение задач регрессии с помощью нейросетей различной архитектуры	397
9. 6. Обучение «без учителя»: нейросети Кохонена	402
<i>ЗАКЛЮЧЕНИЕ</i>	406
<i>ПРИЛОЖЕНИЯ</i>	408
1. Л.Ф.Сердюцкая, И.П.Каменева. Модели водных экосистем и их фазовые портреты (на примере модели круговорота азота в Куйбышевском водохранилище)	408
2. С.П.Крестин. Модель трансформации азотсодержащих веществ Куйбышевского водохранилища	420
3. Виртуальный разговор авторов с рецензентами	426
<i>СПИСОК ЛИТЕРАТУРНЫХ ИСТОЧНИКОВ И ИНТЕРНЕТ-ССЫЛОК</i>	442

ПРЕДИСЛОВИЕ

Мем № 1: *«Большинство экологов в настоящее время рассматривают экосистему как локализованную в пространстве и динамическую во времени совокупность совместно обитающих различных организмов и условий их существования, находящихся в закономерной взаимосвязи друг с другом и образующих систему взаимообусловленных биотических и абиотических процессов. В результате взаимодействия организмов между собой и окружающей их средой организуются потоки веществ, энергии и информации, которые характеризуют собой экосистему»* А.Ф. Алимов [2000].

Мем № 2: *«Важным показателем при выявлении зон загрязнений является количественное соотношение представителей различных эколого-генетических и трофических групп организмов. Поскольку степень влияния загрязнений на биоценозы зависит от особенностей экологии организмов, для контроля за качеством вод можно использовать соотношение численности видов, различающихся по образу жизни, в том числе по типу питания, по связи с грунтом, по отношению к кислороду и т. д.»* О.М. Кожова [1977].

Мем № 3: *«Обилие систем биологического анализа и способов оценки уровня загрязнения, появившихся в последнее время, является результатом неудовлетворенности практических работников системой Кольквитца–Марссона и их стремления найти иной подход к оценке степени загрязнения водоемов, позволяющий более оперативно получать ответы на запросы практики. В настоящее время нет общепризнанной системы биологического анализа. Нет и общего мнения по поводу того, каким требованиям эта система должна отвечать»* А.В. Макрушин [1974а].

Исследования в области теории познания привели в последние 15-20 лет к осознанию некоторых аналогий между дарвиновской теорией эволюции и эволюцией процессов накопления знаний. Практически все явления массовой культуры (научные, политические, религиозные, экономические и проч.) легко могут быть описаны с позиций распространения и внедрения элементарных "единиц познания" – репликаторов, причем, в ходе возникновения и приобретения знаний отдельными индивидами наблюдаются процессы, аналогичные биологическим процессам приспособления и отбора (в последнее время у инженеров-системотехников этот процесс называется «интеграцией знания»); [Vittikh, 1997; Виттих, 1998, 2001]).

В работе "Эгоистический ген" Ричардом Даукинсом [Dawkins, 1976] была предложена концепция репликатора в приложении к социокультурным процессам, где автор впервые ввел понятие «**мема**», используемого им для описания технологии хранения и распространения отдельных элементов культуры («Мем – содержащаяся в уме единица информации, которая влияя на ход определенных событий, способствует возникновению своих копий в других умах»). Достаточно определенно можно говорить даже о появлении новой науки – **меметики**, концепции которой позволяют описывать в терминах генетики размножение, распространение, отбор, мутации, рекомбинации, а также смерть мемов – элементарных структурных единиц знания. Такими информационными квантами (мемами), могут выступать сформулированные идеи, лозунги, религиозные догмы, мода на тот или иной стереотип поведения, музыкальные мотивы, литературные клише, обороты, используемые авторами печатных работ, и т.д. Наиболее часто роль переносчика мема выполняет человек. При этом в процессе переноса (или "инфекции") мем легко может подвергаться перестройке, рекомбинации с другими мемами, обитающими на данном носителе. Естественный отбор сохраняет в каждом индивиде в основном те мемы, которые легко им запоминаются и понимаются другими носителями, вследствие чего они являются наиболее инфекционными. При этом меметика не занимается вопросами истинности или ложности переносимой в мемах информации, т.к. именно эта проблема и решается в ходе естественного отбора. Авторам известен, по крайней мере, один

пример активного и эффективного использования меметики в отечественной культурологии [Бондаренко, 2002].

Анализ разнообразных мемов, близких по своим конструкциям, выполненный В.П. Леоновым [URL¹а,б,в], подтверждает идеи высказанные В.В. Налимовым [1989] о вероятностном распределении смыслов. Можно выделить следующие традиционные трансформации мемов в научной среде:

- находясь на одном носителе, разнородные мемы вызывают повышенную вероятность генерации принципиально новых комбинаций, которые потенциально могут оформиться в конструктивную научную гипотезу (оглашенный на Давосском форуме принцип "перекрестного опыления идеями");
- в ходе смысловой инженерии появляются мемы со сложной конструкцией, не всегда позволяющие достаточно точно и надежно представить смысл понятий и представлений, которые авторы пытаются описать с их помощью (по своему языку и стилю такие описания нередко напоминают известные произведения Андрея Платонова "Котлован" и "Чевенгур");
- тоскливую (хотя и безобидную) картину представляют длинные караваны догматизированных мемов, имеющих вид призывов ЦК КПСС по случаю социалистического праздника и представляющих собой магические заклинания, служащие, по мысли авторов, "пропуском в науку" (почти ни одна экологическая работа не обойдется без упоминания о сложном характере взаимодействия компонентов биоценозов или необходимости системного подхода к их исследованию, хотя часто авторы не делают ни малейших попыток эту сложность выделить или системно изучить);
- иногда происходит смысловой разрыв понятия, после чего отдельные части термина, подобно вирусам, начинают жить самостоятельной жизнью, перенося участки носимой ими информации в иные контексты, причем смысл прежней части присваивается смыслу нового целого (сюда можно отнести и процесс генерации новых терминов, под которыми прячутся чисто умозрительные понятия, и повторное "открытие" под новым обликом закономерностей, которые давно используются в других отраслях, и бесконечные "терминологические войны");
- "камуфляжными мемами" называются бессмысленные и абсурдные выражения, представляющие собой комбинации звучных и непонятных авторам терминов – клише, заимствованных из других публикаций и нужных для достижения основной цели – придания работе научного "веса" (использование компьютеров и статистики становится нередко "ритуально-камуфляжной" компонентой, призванной искусственно поднять значимость и весомость работы).

Пусть читатель не судит нас строго за столь пространный экскурс в механизмы научного познания, но мы не нашли иного способа доходчиво объяснить цель написания нашей книги. Даже беглый обзор работ в области количественной гидробиологии (гидроэкологии) последних десятилетий позволяет выделить три основные "публикационные ниши":

- работы, посвященные фундаментальным проблемам экологии и эволюции и формальным концепциям системного анализа в биологии (в подавляющем большинстве случаев эти исследования манипулируют с чисто абстрактными объектами, а не с массовыми реальными гидробиологическими данными);
- длинные и подробные феноменологические описания о том, где был автор, что делал и кого видел, которые сопровождаются незатейливыми графиками Excel, частотными таблицами встречаемости биологических объектов и, порой, неожиданными выводами, не вытекающими из смысла представленных данных;
- работы, в которых делаются попытки обобщения гидробиологических данных с помощью усредняющих индексов (самостоятельно придуманных, либо введенных в обиход более полувека назад), уравнений регрессии сомнительной достоверности или кластерных дендрограмм, случайно подтверждающих сформулированные теоретические гипотезы.

К числу счастливых исключений, где был найден точный и гармоничный баланс между теоретической глубиной, методологической полнотой и строгой тщательностью работы с данными, можно отнести, в частности, работы научных коллективов, связанных с

¹ URL (Uniform Resource Locator) – унифицированный локатор ресурсов. Именно так будем отмечать ссылки в списке литературы, представленные адресами в Интернет без указанного года издания.

именами авторов мемов № 1-3, представленных в настоящем предисловии, а также Института биологии внутренних вод РАН, кафедры общей экологии МГУ и ряда других. Мы не ставим целью подвергать сомнению нужность и важность текущих теоретических и феноменологических публикаций по гидробиологии, вносящих несомненный вклад в развитие предметной области (в том числе и публикаций третьей группы, если их "камуфляжный" характер не подтверждается полным пренебрежением к элементарной проверке гипотез относительно справедливости высказанных предположений). Однако остается малозаполненной четвертая важнейшая "публикационная ниша":

- разработка методик обработки гидробиологических данных с использованием обширного к настоящему времени аппарата математического моделирования, многомерного статистического анализа, распознавания образов, исследования операций и т.д. или, хотя бы, демонстрация материала, обработанного достаточно квалифицированными методами.

Наиболее популярные руководства по основам биометрии [Василевич, 1969; Плохинский, 1970; Афифи, Эйзен, 1982; Песенко, 1982; Зайцев, 1984; Любищев, 1986; Лакин, 1990] были написаны в 70-90-х годах уже прошлого столетия и, во-первых, в некотором смысле устарели, а во-вторых, использование гидробиологических примеров в качестве иллюстративного материала при описании способов расчета является в них скорее редким исключением, чем правилом. Поэтому мы рискнули представить на суд читателей обзор как классических, так и недостаточно известных математических методов обработки многомерных наблюдений, сопровождая их конкретными результатами, полученными на примере совокупности традиционно используемых показателей обилия зообентоса.

В плане познания мы ставили себе такие задачи:

- способствовать инфицированию мемов математической статистики в гидробиологической научной среде, что должно создать предпосылки к генерации новых плодотворных идей;
- уточнить смысл понятий некоторых достаточно запутанных мемов "чевенгуровской" природы;
- провести некоторые аналогии между методами оценки, традиционно принятыми в гидробиологии, с приемами, широко используемыми в фитоценологии, медицине и более отдаленных отраслях наук;
- по мере сил создать некоторую систему противовесов "ритуально-камуфляжной меметике" в гидробиологии.

Книга состоит из трех основных частей.

- В первой части ("**методы**") мы затронули общие проблемы построения систем экологического мониторинга, описали методологические основы их создания и функционирования и сделали попытку постановки задачи биоиндикации с теоретико-вероятностных позиций. Показано, что поддержка мониторинга реализуется посредством компьютерных экологических интеллектуальных систем, состоящих из четырех обязательных компонент: *нормативно справочной базы* (ГОСТы, ПДК, расчетные коэффициенты и т.д.), *базы данных* мониторинговых наблюдений, средств пространственной *визуализации* (небольшой, но полнофункциональной геоинформационной системы) и постоянно расширяемой *библиотеки методов* математической обработки, охватывающей спектр от элементарной статистики до сложных моделей искусственного интеллекта. Во второй главе этой части дан экскурс в теоретические конструкции факториальной экологии, а также приводится обзор математических методов и моделей, используемых при исследовании экосистем.
- Вторая часть ("**критерии**") также состоит из двух основных глав. В первой дается развернутое описание существующих концепций санитарно-гигиенического нормирования и классификации водоемов по гидрохимическим и комбинированным показателям. Приводятся конкретные расчетные формулы и таблицы, описывающие традиционно употребляемые методы оценки качества воды по ИЗВ, Былинкиной и Драчеву, Жукинскому и Оксюк и др., а также ГОСТы и нормативы. Все описания текстуально совпадают с труднодоступными первоисточниками, что дает возможность использовать материалы раздела как справочное пособие. Во второй главе подробно перечислены методы, критерии и расчетные индексы, применяемые в гидроэкологическом мониторинге. Значительная часть этого раздела цитирует известный фундаментальный обзор А.В. Макрушина [1974а], ставший библиографической редкостью, но дополнена описа-

нием подходов (впрочем, достаточно немногочисленных), появившихся за последние десятилетия.

- Третья часть посвящена описанию конкретных количественных методов и построена по стандартной схеме: "Общая формальная гидробиологическая и математическая постановка задачи (или **Формулировка задачи**)" → "Краткое описание теоретических идей построения статистической модели и методы оценки их достоверности (или **Математический лист**²)" → "Развернутый пример с использованием массива гидробиологических показателей (или **Полученные результаты**)". Перечислить в одном абзаце все описанные методы весьма затруднительно, в связи с чем отсылаем читателя к оглавлению книги.

На современном этапе развития средств вычислительной техники компьютер представляет собой не замену человеческого интеллекта, а лишь его усилитель. Стали доступны методы расчета, которые раньше считались очень трудоемкими в вычислениях (вспомним пример системы распознавания образов в романе А.И. Солженицына "В круге первом", реализованной с помощью небольшого концлагеря). Однако возникла опасность другого рода:

Мем № 4: «Сегодня это действительно слишком просто: вы можете подойти к компьютеру и практически без знания того, что вы делаете, создавать разумное и бессмысленное с поистине изумительной быстротой»
Дж. Мейндональд [1988].

Поэтому основное внимание при описании методов мы уделили приемам чисто статистической (т.е. формальной) оценки достоверности создаваемых моделей и гипотез. С другой стороны, авторы не претендуют в своих расчетах на точность и содержательность экологической интерпретации полученных результатов. Если это иногда и делается, то это не более чем черновая рабочая версия авторов, поскольку основная цель книги состоит в ином – продемонстрировать работоспособность и эффективность основных типовых алгоритмов, указать их "сильные" и "слабые" стороны и дать некоторые рекомендации по повышению надежности получаемых результатов. Часть выполненных расчетов оказались нам несколько неожиданными (не хочется говорить "недостоверными" без дополнительных исследований), что рекомендовалось к отбраковке рецензентами-гидробиологами. Но нас убедила фраза Дж. Максвелла: *«История науки не ограничивается перечислением успешных исследований. Она должна сказать нам о безуспешных исследованиях и объяснить, почему некоторые из самых способных людей не могли найти ключа знания, и как репутация других дала лишь большую опору ошибкам, в которые они впали»* [цит. по: Леонов, URLa].

Немного о терминологии. Как и в любой другой области, начиная с написания собственных имен и заканчивая наименованиями методик или абстрагированных объектов, терминология вызывает большое количество споров, переходящих в личные конфликты среди исследователей³. Один из нас, например, был искренне удивлен, когда он предварительно тщательно определил и использовал в своем сообщении общепринятые, вечные и хлесткие понятия «патология» и «норма» вместо трудно произносимого стандартного оборота «экосистема, находящаяся в условиях интенсивного антропогенного воздействия и имеющая доказанные нарушения в своей структуре и продуктивности», и, тем не менее, встретил активное непонимание слушателей-гидробиологов. Поэтому не приходится надеяться, что терминология когда-либо станет единой. Единственно, в чем мы убеждены: термины должны быть контекстуально определены в рамках используемого семантического поля и иметь, по возможности, краткую и точную адресацию к определяемому понятию⁴. При описании метода, индекса, критерия и проч. мы старались привязать их к именам создателей

² «...повесть Мурра то и дело перемежается вставками из совершенно другой книги... Прежде всего снисходительный читатель легко разберется в путанице, ежели обратит благосклонное внимание на пометки в скобках: Мак. л. (макулатурные листы)...» [Э.Т.А. Гофман. Житейские воззрения кота Мурра вкупе с фрагментами биографии капельмейстера Иоганнеса Крейсера, случайно уцелевшими в макулатурных листах]

³ « - Когда я беру слово, оно означает то, что я хочу, не больше и не меньше, – сказал Шалтай презрительно.

- Вопрос в том, подчинится ли оно вам, – сказала Алиса.

- Вопрос в том, кто из нас здесь хозяин – сказал Шалтай-Болтай (Humpty-Dumpty). – Вот в чем вопрос!» [Л. Кэррол. Алиса в Зазеркалье]

⁴ «Вы получите полный контроль над каким-либо объектом, вещью, существом, просто назвав его **подлинным именем**» [Урсула Ле Гуин. Волшебник Земноморья]

(метод Фрумина–Баркана, индекс Балускиной или критерий Джонкхиера–Терпстра), в первую очередь, отдавая дань культуре глобальной компьютерной сети Internet, где наиболее эффективен поиск по именам разработчиков. Оговоримся, что мы не проводили специального расследования на правильность написания этих имен и при разночтениях использовали первую встретившуюся мнемонику, например, "правило Стержесса/Стургеса", "мера Кульбака/Калбэка", по поводу чего просим снисхождения у педантичного читателя. О том же мы просим и математиков, получивших классическое образование, и ревностно относящихся к фразеологической выверенности математических оборотов. Например, несмотря на строгую рекомендацию [Зорин, URL] о недопустимости замены слова статистическая «значимость» на «достоверность», авторы так и не смогли преодолеть ни силу биологических традиций, ни силу собственных привычек.

Наконец, завершая затянувшуюся преамбулу, остановимся на следующем щекотливом моменте. Выполняя обзор литературных источников, логика событий требовала от нас некоторой авторской рецензии, которая далеко не всегда, как нам представляется, соответствовала позиции и взглядам самого создателя метода. Мы полны надежды, что наши глубокоуважаемые оппоненты и их ученики, находящиеся в пределах досягаемости, воспримут наши не всегда восторженные отзывы только как элементы научной дискуссии, не перенося их на свои персоналии, которые нам глубоко симпатичны.

Выполняя критический разбор методов, мы неизбежно столкнемся с традиционным аргументом: «А сами-то вы что предлагаете?» Отвечаем – «НИЧЕГО». Ничего из того, что можно было бы выразить несколькими фразами. Но этому посвящена **ВСЯ** часть 3. Как мир не похож на хорошо укатанное шоссе, так и проблемы гидробиологии не могут быть решены одной-двумя хорошо сформулированными теориями или уравнениями. Мы относимся прохладно к словесному жонглированию мыслительными образами, имеющими не слишком большую связь с реальным непрерывно-континуальным миром, например, к попыткам оценить границы "экосистем", выяснить, какова их предметная идентичность "биоценозу" или продолжить от γ до ω перечень типов биоразнообразия (при всем том, что само понятие «биоразнообразия» до сих пор строго не определено...) Но еще меньше доверия вызывает стремление представить *одной цифрой* – индексом или обобщенным критерием – все многообразие биотических процессов в сложной и нестационарной природной среде (цель "индексологии"). Со времен Кольквитца–Марссона экологический мир перестал быть простым и понятным. В таком мире представления о конкурентно организованном сообществе, инвариантах трофической сети, плавной закономерности реакций биоценоза на изменяющиеся факторы среды и др., бывшие всеобщими и универсальными в классической экологии, могут быть справедливы только в весьма ограниченных интервалах пространства и времени [Розенберг, Смелянский, 1997; Розенберг и др., 1999]. Мыслительный образ экологического мира (или экологическая парадигма познания) меняется от детерминистического, упорядоченного, понимаемого посредством здравого смысла – к хаотическому, принципиально не понимаемому до конца; от дискретности – к континууму; от стабильности неподвижной гармонии – к потоку нескончаемых изменений, к хаосу (от бытия – к непрерывной череде становления). Поэтому трудно надеяться, что все эти аспекты можно закрыть одной книгой. Как писал Омар Хайям:

*Даже самые лучшие в мире умы
Не смогли разогнать окружающей тьмы.
Рассказали нам несколько сказочек на ночь
И отправились, мудрые, спать. Как и мы.*

[пер. Г. Плисецкого]

В части 3 мы активно используем в качестве примеров обширные выборки из массивов гидробиологических данных по зообентосу малых рек Самарской области, полученных по результатам экспедиционных наблюдений в сезонах 1985-2001 гг. Подробно состав и атрибуты базы данных описаны в главе 1. Авторы считают своим приятным долгом выразить глубокую благодарность руководителям и членам научных коллективов бывшей Куйбышевской биологической станции, Института экологии Волжского бассейна РАН и Тольяттинской ГМО, получившим и любезно предоставившим данные многолетних наблюдений: д.б.н. Попченко В.И., к.г.н. Выхристюк Л.А., к.б.н. Паутовой В.Н., к.б.н. Номоконовой В.И., Лаврову В.Л., Слободчикову Н.Б., Молодых Н.В., Сороковой О.В., Головатюк Л.В. и др.

Наконец, мы считаем необходимым сказать слова благодарности виртуальным личностям, скрытым за серым экраном дисплея – авторам собственных и коллективных сайтов Internet, оказавших нам всемерную и бескорыстную помощь литературными ссылками, текстами, идеями и компьютерными программами. Вот те русскоязычные сайты, материалы которых, в той или иной степени, использовались при подготовке рукописи:

- библиотека "Биометрика" (организатор и редактор В.П. Леонов) – сайт содержащий большое количество интересных публикаций методического, философского и практического плана; именно там мы узнали о меметике, долгом прощании с лысенковщиной, о необходимости использовать термин «статистическая значимость» (www.biometrica.tomsk.ru);
- электронная версия замечательной книги д-ра Н. Цейтлина "Из опыта аналитического статистика", помещенная на сайте <http://matstat.gmxhome.de/>;
- подборка интересных публикаций по проблемам эмерджентной теории информации и практической реализации когнитивного анализа в системах управления активными объектами, представленная Е.В. Луценко (<http://lc.narod.ru/aidos/index.htm>);
- методический центр "Эколайн", содержащий большую подборку материалов по экологической экспертизе, законодательной базе, оценкам качества воды (www.cci.glasnet.ru/mc);
- информационная система "Экология пресных вод России" – сайт кафедры общей экологии биологического факультета Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова, руководители проекта проф. В.Н. Максимов, проф. В.А. Абакумов, А.П. Левич и Н.Г. Булгаков (www.ecograde.bio.msu.ru);
- сайт, посвященный компьютерной системе PASS (руководитель проекта проф. В.В. Поройков), прогнозирующей спектр биологической активности химических соединений по их структурным формулам (<http://www.ibmh.msk.su/PASS>); мы особенно признательны одному из ее разработчиков – Д.А. Филимонову, мысли и советы которого, высказанные в переписке с нами, по своей глубине и обширности заслуживают отдельного издания "Писем незнакомцу";
- "Интеллектуальные Системы" – сайт научно-исследовательской фирмы, специализирующейся на разработке методов системного анализа клинко-лабораторных и инструментальных данных, руководимой А.А. Генкиным, разработчиком Оболочки Медицинских Интеллектуальных систем (ОМИС) и автором оригинальных алгоритмов анализа интервальных и бинарных структур (www.intels.spb.ru);
- сайт лаборатории экологического анализа и прогноза Института проблем моделирования в энергетике им. Г.Е. Пухова Национальной Академии Наук Украины (заведующая Л.Ф. Сердюцкая), где представлены материалы по математическому моделированию последствий техногенных (аварийных) загрязнений экосистем (www.users.iptelecom.net.ua/~ipn261);
- "Высокие статистические технологии" – сайт проф. А.И. Орлова, где мы узнали много нового о статистике объектов нечисловой природы (www.antorlov.chat.ru);
- сайт А.А. Цыплакова (Новосибирский госуниверситет), интересно рассказавшего об очень математизированной науке эконометрике и распространяющего бесплатно превосходную программу статистического анализа Matrix (www.nsu.ru/ef/tsy/ecmr/mtx);
- Practical Science – сайт В.В. Артюхова, считающего себя учеником Ю.А. Урманцева, – это более **60 Мб** полезной информации научно-прикладного характера: справочники, карты, базы данных, программы, обзоры по факторам биоразнообразия России (природным, техногенным, социальным показателям); картографическая система On-Line! (www.sci.aha.ru);
- сайт И.П. Гайдышева, РНЦ "Восстановительная травматология и ортопедия" им. Г.А. Илизарова (г. Курган), написавшего прекрасный специальный справочник по анализу и обработке данных (2001 г.) и распространяющего неплохие программные модули статистического оценивания (www.ilizarov.ru/igor.htm);
- сайт лаборатории биоиндикации Калужского университета (www.kspu.kaluga.ru/biomon);
- телекоммуникационный проект "Биоиндикация природных вод" (г. Ярославль) – общеобразовательный сайт школьников со зрелым экологическим мышлением (www-windows-1251.edu.yar.ru/russian/misc/eco_page/bioind/index.html);
- сайт компании "Гидра Фильтр", содержащий химические, физические, микробиологические и целый ряд других параметров, характеризующих качество воды (www.water.ru/param);

- карты России и мира (www.nakarte.ru);
- проект ЕНПС – сайт, посвященный проблемам обработки информации о загрязнении окружающей среды и его влиянии на здоровье населения, содержащий методики обработки и реализующую их компьютерную систему (www.iki.cosmos.ru/ehips);
- сайт об уникальном природном комплексе России – Самарской Луке (www.samarskayaluka.narod.ru);
- и, наконец, сайты авторов и Института экологии Волжского бассейна РАН (www.tolcom.ru/kiril, www.citylt.ru/~ecolog и www.ecology.samara.ru/organisations/Sciense/ievb).

Мы особенно благодарны упомянутым выше в списке URL доценту кафедры прикладной информатики Томского государственного университета, редактору электронного журнала "Биометрика" В.П. Леонову и д-ру Н. Цейтлину (Natan Tseitlin) из германского города Геттингена (Max-Planck-Institut fuer Biophysikalische Chemie, Goettingen, Germany), которые взяли на себя труд внимательно прочитать рукопись книги, дав по ее тексту ценные советы и сделав подробные замечания. Наша дискуссия по отдельным пунктам их рецензий показалась нам столь интересной, что мы сочли возможным поместить ее в Приложение 3.

Понимая неизбежность допущенных в книге неточностей ⁵, силлогизмов и просто неверных сведений, авторы с признательностью учтут любые замечания коллег-читателей. Оперативно это можно сделать по e-mail первого автора: stok@tolcom.ru

⁵ *«Нельзя не признать, наконец, и того, что авторы нередко обязаны своими смелыми идеями, самыми необыкновенными оборотами речи милейшим наборщикам, которые так называемыми опечатками способствуют полету фантазии»* [Э.Т.А. Гофман. Житейские воззрения кота Мурра].

ЧАСТЬ I. МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Глава I. Экологический мониторинг и биоиндикация: сущность, формы реализации и концепции развития

1.1. Определения и классификация систем мониторинга окружающей среды

Основная задача экологических исследований состоит в накоплении, систематизации и анализе информации о количественном характере взаимоотношений между живыми организмами и средой их обитания с целью получения следующих результатов:

- оценка качества изучаемых экосистем (в конечном итоге – с точки зрения возможности их использования человеком);
- выявление причин наблюдаемых и вероятных структурно-функциональных изменений биотических компонентов и адресная индикация источников и факторов негативного внешнего воздействия;
- прогноз устойчивости экосистем и допустимости изменений и нагрузок на среду в целом;
- оценка существующих резервов биосферы и тенденций в их исчерпании (накоплении).

Способ познания, основанный на относительно длительном целенаправленном и планомерном восприятии предметов и явлений окружающей действительности, издавна применялся в различных видах научной и практической деятельности человека. Блестящие образцы организации наблюдений за природной средой описаны еще в первом веке нашей эры в "Естественной истории" Гая Секунда Плиния (старшего). Тридцать семь томов, содержащих сведения по астрономии, физике, географии, зоологии, ботанике, сельскому хозяйству, медицине, истории, служили наиболее полной энциклопедией знаний до эпохи средневековья [цит. по: Васильева и др., 1998].

Термин «мониторинг» появился перед проведением Стокгольмской конференции ООН по окружающей среде в 1972 г. Под мониторингом было решено понимать систему непрерывного наблюдения, измерения и оценки состояния окружающей среды. По мнению российского исследователя-географа И.П. Герасимова [1975] объектом общего мониторинга *«является многокомпонентная совокупность природных явлений, подверженная многообразным естественным динамическим изменениям и испытывающая разнообразные воздействия и преобразования ее человеком»*.

Мониторинг окружающей среды – комплексная система наблюдений, оценки и прогноза изменений природных сред, природных ресурсов, растительного и животного мира, позволяющие выделить изменения их состояния и происходящие в них процессы под влиянием антропогенной деятельности [Калужский государственный..., URL]. С самого начала в трактовке мониторинга проявились две точки зрения. Многие зарубежные исследователи предлагали осуществлять *систему непрерывных наблюдений одного или нескольких компонентов окружающей среды с заданной целью и по специально разработанной программе*. Другая точка зрения [Израэль, 1974] предлагала понимать под мониторингом *только такую систему наблюдений, которая позволяет выделить частные изменения состояния биосферы, происходящие только под влиянием антропогенной деятельности* (т.е. мониторинг антропогенных изменений окружающей природной среды).

В процессе мониторинга предполагается последовательная реализация двух задач:

- обеспечивается постоянная оценка "комфортности" условий среды обитания человека и биологических объектов (растений, животных, микроорганизмов), а также оценка состояния и функциональной целостности экосистем;
- создаются условия для определения корректирующих действий в тех случаях, когда целевые показатели критериев оценки качества среды не достигаются.

Следует принять во внимание, что сама система мониторинга не включает деятельность по управлению качеством среды, но, в идеале, является источником информации необходимой для

- *региональном* (проявление проблем миграции и трансформации загрязняющих веществ, совместного воздействия различных факторов, характерных для экосистем в масштабе региона);
- *фоновом*, осуществляемом в рамках международной программы "Человек и биосфера" на базе биосферных заповедников, где исключена всякая хозяйственная деятельность (имеет целью зафиксировать фоновое состояние окружающей среды, что необходимо для дальнейших оценок уровней антропогенного воздействия).

По своему структурно-функциональному составу мониторинг окружающей среды объединяет в себе все необходимые компоненты: приборно-аппаратное обеспечение, систему организации измерений и совокупность методик анализа результатов наблюдений, необходимые для реализации функций, представленных на рис 1.3.

Функции					
Задачи				Цели	
Наблюдение	Выявление	Анализ	Моделирование	Оценка	Прогноз
За состоянием окружающей среды	Изменений окружающей среды, связанных с деятельностью человека	Наблюдаемых изменений	Изменений экологической ситуации	Состояния окружающей среды	Предполагаемых изменений состояния окружающей среды

Рис.1.3. Функции мониторинга состояния окружающей среды [Бурдин, 1985]

Мониторинг охватывает весь широкий спектр анализа наблюдений за меняющейся абиотической составляющей биосферы и ответной реакцией экосистем на эти изменения, включая как геофизические, так и биологические аспекты, что определяет широкий спектр методов и приемов исследований, используемых при его осуществлении. В литературе, в качестве его синонима, часто встречается оборот «экологический мониторинг», где под термином «экология» понимается не конкретное научное направление, почти 140 лет тому назад очерченное Эрнстом Геккелем, а «энвайронментология» (от англ. *environmentology*; или биосферология), как теоретическая основа рационального природопользования [Розенберг с соавт., 1999].

Поскольку сообщества живых организмов замыкают на себя все процессы, протекающие в экосистеме, ключевым компонентом мониторинга окружающей среды – см. рис. 1.4 – является мониторинг состояния биосферы или *биологический мониторинг*, под которым понимают систему наблюдений, оценки и прогноза любых изменений в биотических компонентах, вызванных факторами антропогенного происхождения [Федоров, 1974; Израэль, 1977] и проявляемых на организменном, популяционном или экосистемном уровнях.

По определению В.С. Николаевского [1981] *биологический мониторинг* – *определение состояния живых систем на всех уровнях организации и отклика их на загрязнение среды*. То есть, это – система наблюдений, оценки и прогноза изменений состояния биологических систем под влиянием антропогенных воздействий.

По определению Н.Ф. Реймерса [1990] *мониторинг биологический* – *слежение за биологическими объектами (наличием видов, их состоянием, появлением случайных интродуцентов и т.д.) и оценка качества окружающей среды с помощью биоиндикаторов*.

Таким образом, трактовка понятия «биомониторинг» весьма широка: от наблюдения за самими живыми организмами, до контроля за состоянием каких-либо факторов среды при помощи живых организмов. И в последнем определении мы впервые сталкиваемся с *методом биоиндикации* как способом решения задач биологического мониторинга.



Рис. 1.4. Подсистемы экологического мониторинга

1.2. Биоиндикация как поиск информативных компонентов экосистем

Мем № 5: «Мониторинг источников антропогенных воздействий – это чисто техническая процедура, мало что дающая для оценки состояния экосистем, если эти антропогенные воздействия не носят катастрофического характера. Оценка загрязнения экосистем – это тоже частная задача. Ключевым элементарным объектом экологического мониторинга может быть только видовая популяция» Б.К. Павлов [Методология оценки..., 2000].

Наиболее часто цитируемой и, в то же время, наиболее идеологически расплывчатой областью экологии является некоторая совокупность методов, называемая «биоиндикацией». Хотя истоки наблюдений за индикаторными свойствами биологических объектов можно найти в трудах естествоиспытателей самой глубокой древности, до сих пор отсутствует стройная теория и адекватные методы биоиндикации.

Относительно благополучно дело обстоит с описательным объяснением терминов. Например, согласно определению Н.Ф. Реймерса [1990]: «Биоиндикатор: группа особей одного вида или сообщество, по наличию, состоянию и поведению которых судят об изменениях в среде, в том числе о присутствии и концентрации загрязнителей... Сообщество индикаторное – сообщество, по скорости развития, структуре и благополучию отдельных популяций микроорганизмов, грибов,

растений и животных которого можно судить об общем состоянии среды, включая ее естественные и искусственные изменения». Безусловно, объективные факты свидетельствуют о существовании тесного влияния факторов среды на биотические процессы экосистемы (плотность популяций, динамику видовой структуры, поведенческие особенности). Такие факторы среды, как свет, температура, водный режим, биогенные элементы (макро- и микроэлементы), соленость и другие имеют функциональную важность для организмов на всех основных этапах жизненного цикла. Однако можно использовать обратную закономерность и судить, например, по видовому составу организмов о типе физической среды. Поэтому «Биоиндикация – это определение биологически значимых нагрузок на основе реакций на них живых организмов и их сообществ. В полной мере это относится ко всем видам антропогенных загрязнений» [Кривошукский с соавт., 1988].

Основной задачей биоиндикации является разработка методов и критериев, которые могли бы адекватно отражать уровень антропогенных воздействий с учетом комплексного характера загрязнения и диагностировать ранние нарушения в наиболее чувствительных компонентах биотических сообществ. Биоиндикация, как и мониторинг, осуществляется на различных уровнях организации биосферы: макромолекулы, клетки, органа, организма, популяции, биоценоза [Биоиндикация: теория..., 1994]. Очевидно, что сложность живой материи и характера ее взаимодействия с внешними факторами возрастает по мере повышения уровня организации. В этом процессе биоиндикация на низших уровнях организации должна диалектически включаться в биоиндикацию на более высоких уровнях, где она предстает в новом качестве и может служить для объяснения динамики более высокоорганизованной системы.

Считается, что использование метода биоиндикации позволяет решать задачи экологического мониторинга в тех случаях, когда совокупность факторов антропогенного давления на биоценозы трудно или неудобно измерять непосредственно. К сожалению, современная практика биоиндикации носит в значительной мере феноменологический характер, выраженный в пространном изложении подмеченных исследователем фактов поведения различных видов организмов в конкретных условиях среды. Иногда эти описания сопровождаются не всегда обоснованными выводами, носящими, как правило, сугубо оценочный характер (типа "хорошо / плохо", "чисто / грязно" и т.д.), основанными на чисто визуальных методах сравнения или использовании недостаточно достоверных индексов. Чаще всего такой "прогноз" делается, когда "общественное" мнение по конечному результату оценки качества экосистемы уже заранее известно, например, по прямым или косвенным параметрам среды. В результате этого, роль биоиндикации оказалась сведенной к следующей совокупности действий, технологически совпадающей с биомониторингом:

- выделяется один или несколько исследуемых факторов среды (по литературным данным или в связи с имеющейся программой мониторинговых исследований);
- собираются полевые и экспериментальные данные, характеризующие биотические процессы в рассматриваемой экосистеме, причем теоретически эти данные должны измеряться в широком диапазоне варьирования исследуемого фактора (например, в условно-чистых и в условно-грязных районах);
- некоторым образом (путем простого визуального сравнения, с использованием системы предварительно рассчитанных оценочных коэффициентов или с применением математических методов первичной обработки данных) делается вывод об индикаторной значимости какого-либо вида или группы видов.

В редких случаях делаются практические попытки оценить лимитирующий уровень рассматриваемого фактора загрязнения, т.е. выполнить так называемый "анализ биологически значимых нагрузок". И только в исключительных случаях выполняется собственно операция "индикации", когда с использованием биоиндикаторных показателей прогнозируются неизвестные факторы среды и оценивается их значимость для всей экосистемы в ближайшем и отдаленном будущем. В качестве немногочисленных примеров организации комплексных гидроэкологических биоиндикационных исследований, в результате которых был сформулирован некоторый комплекс научно-обоснованных природоохранных решений, можно привести работы по оценке экологического состояния оз. Байкал [Кожова, 1986], рек Невы [Алимов с соавт., 1996б] и Чапаевки [Экологическое состояние..., 1997].

В значительной мере теоретическая и практическая неполнота работ в области биоиндикации связана с объективными методологическими трудностями отображения и моделирования предметной области. Оценка антропогенного воздействия на биотические компоненты экосистем

во многом осложняется пространственно-временной дифференциацией видовой структуры, т.к. ценопопуляции одного и того же вида, входящие в разные сообщества организмов, характеризуются различными экологическими условиями обитания и их реакции на действие фактора могут существенно отличаться. У видов со слабо выраженными механизмами популяционного гомеостаза эти реакции всегда достаточно контрастно выражаются в снижении физиологической устойчивости части особей к действию антропогенных факторов и, в конечном счете, в нарушении процессов репродукции. Однако для большинства видов реагирование на любое техногенное воздействие (если, разумеется, оно не носит катастрофический характер) принципиально не отличается от выработанных в ходе эволюции тривиальных реакций на колеблющиеся изменения среды. В процессе адаптации биоценоза к меняющимся условиям включаются компенсационные механизмы и, при умеренных воздействиях, в популяциях вырабатывается некоторый средний, генетически обусловленный уровень интенсивности воспроизводства за счет "перераспределения факторов смертности" [Северцов, 1941]. И только в том случае, когда давление антропогенных факторов выводит экосистему за рамки естественной изменчивости, происходит нарушение динамической стабилизации популяционных связей, изменяется генетический состав и идет подавление наиболее генерализированного свойства популяций – воспроизводственного процесса.

Необходимым условием для выявления качественных нарушений биотических процессов, происходящих в экосистемах под влиянием антропогенных факторов, является знание диапазона естественной изменчивости биоценозов, т.е. построение пространства состояния популяций [Шмальгаузен, 1968; Тимофеев-Ресовский и др., 1973]. В связи с этим возникает необходимость определения тех параметров, которые позволят с заданной подробностью и точностью оценить состояние биоценоза, вычленив изменения, вызванные действием антропогенных факторов, и получить необходимую и достаточную информацию для прогноза возможных изменений состояния экосистемы. Однако для получения такого «динамически достаточного описания» (термин Б.К.Павлова [Методология оценки..., 2000]) необходимо знание "правил" внутреннего преобразования популяций в результате действия каких-либо факторов. Но мы не можем сформулировать эти "правила" до тех пор, пока не определим ряд необходимых и достаточных параметров описания состояния популяций, достаточно чувствительных, информативных и обладающих достаточной селективностью в рамках поставленной задачи. Поэтому все исследования популяций и сообществ принципиально промежуточны (т.е. не конечны) и необходимо постоянное накопление информации, ее анализ и синтез, в процессе которых структурно-функциональные описания биоценозов и "правила" их преобразования приводятся в соответствие друг с другом. Этой проблематике применительно к водным экосистемам посвящены материалы главы 4 и часть 3 настоящей монографии.

Существенные методологические трудности биоиндикации возникают и при оценке состояния биоценоза по соотношению видов в конкретной экосистеме выборочным методом. Если исходить из понимания популяции, как совокупности особей, то информация, которую мы получили, не может быть экстраполирована за пределы временного периода или станции (полигона), на котором осуществлена выборка. Необходимо получить информацию о форме распределения вероятностей нахождения особей в той или иной точке пространства экосистемы. Исходя из найденного закона распределения, можно рассчитать число необходимых проб, обеспечивающих заданную точность интерполяции. Такой подход возможен для оценки состояния популяций на небольших площадях, например, в небольших замкнутых мелководных водоемах. Для крупных водоемов количество выборок ограничивается временем, за которое можно сделать пробы в сходных условиях (например, даже в течение суток может произойти перераспределение планктонных особей в пространстве). Проблемы, связанные с изучением пространственно-временной дифференциации зоопланктона при проведении мониторинговых исследований, показаны, например, на большом экспериментальном материале О.М. Кожовой и Б.К. Павловым [1986].

Таким образом, биоиндикацию можно определить как совокупность методов и критериев, предназначенных для поиска информативных компонентов экосистем, которые могли бы:

- адекватно отражать уровень воздействия среды, включая комплексный характер загрязнения с учетом явлений синергизма действующих факторов;
- диагностировать ранние нарушения в наиболее чувствительных компонентах биотических сообществ и оценивать их значимость для всей экосистемы в ближайшем и отдаленном будущем.

Рассмотрим частную задачу биоиндикации, в которой оценивается степень влияния производного фактора среды на некоторую совокупность измеренных показателей экосистемы. Если

рассматривать ее формальную сущность, то тут фигурируют две векторные переменные: одна Y - характеризует состояние экологического объекта (растительности или гидробиологического сообщества), другая X - состояние среды (например, воды или почвы). Будем считать, что обе эти переменные являются номинальными, т.е. измерены в некоторых упорядоченных шкалах. Это позволяет оценить плотность распределения вероятности $p_0(x)$ значений y_i для каждого интервала значений X (хотя с точки зрения классической математической статистики эта процедура относится к классу некорректных задач). Если распределение вероятности параметра экосистемы по оси значений фактора является равномерным, то можно говорить о том, что параметр не является индикатором фактора X .

Пусть задан некоторый критерий χ - мера отклонения закона распределения вероятности, восстановленного по эмпирическим данным, от равномерного распределения. Тогда при χ , превышающем некоторое пороговое значение $\chi_{\text{пор}}$, можно говорить, об индикаторной значимости переменной Y , а диапазоны значений X , где функция распределения принимает экстремальные значения, можно считать индицируемыми диапазонами фактора.

С точки зрения математики поставленная задача биоиндикации в реальных условиях относится к классу плохо формализуемых задач [Мазуров, 1982], поскольку характеризуется следующими особенностями:

- существенной *многомерностью* факторов среды и измеряемых параметров экосистем;
- сильной *взаимобусловленностью* всего комплекса измеренных переменных, не позволяющей выделить в чистом виде функциональную связь двух индивидуальных показателей $F(y, x)$;
- *нестационарностью* большей части информации об объектах и среде;
- *трудоемкостью* проведения всего комплекса измерений в единых координатах пространства и времени, в результате чего обрабатываемые данные имеют обширные пропуски.

В связи с этим, нахождение адекватной связи индикаторов и индицируемых факторов является типичной операцией с "размытыми" множествами [Заде, 1974], а, следовательно, характеризуется существенной неопределенностью (стохастичностью).

В то же время, к настоящему моменту сложились условия, позволяющие преодолеть некоторую математическую "ущербность" биоиндикации:

- сформированы банки многолетних данных по наблюдениям за природными экосистемами;
- разработан и апробирован ряд методов и математических моделей интегральной оценки состояния сложных систем различного типа, позволяющих, по терминологии А.П. Левича и А.Т.Терехина [1997], осуществлять «поиск детерминации и распознавание образов в многомерном пространстве экологических факторов для выделения границ между областями нормального и патологического функционирования экосистем»;
- развиваются аппаратные и программные информационные компьютерные технологии, позволяющие анализировать необходимые массивы экологических данных;
- существует огромный объем неформальных знаний высококвалифицированных специалистов, частично сконцентрированный в методических разработках [Экологический мониторинг..., 1995; Мокров, Гелашвили, 1999].

Рассмотрим в этой связи некоторые специальные методы и инструментальные средства построения автоматизированных и неавтоматизированных экспертных систем для решения задач биоиндикации.

1.3. Анализ экологических воздействий (приемы природоохранной экспертизы)

Понятие воздействия

В соответствии с природоохранительным законодательством Российской Федерации, оценка качества окружающей природной среды производится с целью установления предельно допустимых норм воздействия, гарантирующих экологическую безопасность населения, сохранение генфонда и обеспечивающих рациональное использование и воспроизводство природных ресурсов в условиях устойчивого развития хозяйственной деятельности [Федеральный закон..., 2002, ст. 1, 3,

19, 63]. При этом, под *воздействием* вообще понимается антропогенная деятельность, связанная с реализацией экономических, рекреационных, культурных интересов и вносящая физические, химические, биологические изменения в природную среду. В качестве примера более широкой понятийной трактовки можно привести определение из "Толкового словаря по охране природы" [1995], где под *отрицательным воздействием на окружающую среду* понимаются «любые [?] потоки вещества, энергии и информации, непосредственно образующиеся в окружающей среде или планируемые в результате антропогенной деятельности и приводящие к отрицательным изменениям окружающей среды и последствиям этих изменений».

Прежде всего необходимо уточнить, что сам термин «воздействие» в контексте экологической оценки имеет специфический смысл. В русском языке слово "воздействие" часто понимается как *«то, что воздействует»*, причем последствия этого события или процесса термином не охватываются. В случае, например, экологической экспертизы проекта, под "воздействием" в русском смысле можно понимать количество сбросов и выбросов загрязняющих веществ, количество отходов, объем водозабора, площадь изымаемых из пользования земель и т.д. В английском же языке, особенно в терминологии, связанной с Environmental Impact Assessment (буквально – оценка воздействия на окружающую среду), слово "impact" (буквальный перевод – столкновение, коллизия, шок) охватывает слившееся в единое целое как *«то, что воздействует»*, так и *«то, что происходит в результате»*. Таким образом, анализ или оценка воздействий в этом смысле предусматривают прогноз и описание не только "того, что воздействует" – выбросов, сбросов, отходов, изымаемых ресурсов. Они охватывают и последствия, результат действия этих "факторов воздействия" – изменения в окружающей среде, здоровье и качестве жизни населения и т.п. Именно информация об изменениях, могущих быть результатом реализации намечаемого хозяйственного проекта, является существенной для принятия решений, связанной с этой деятельностью.

Оценка значимости воздействий

Значимость воздействия непосредственно зависит от его вида или природы (шумовое, радиационное, выбросы определенных веществ в воздух и т.д.), физической *величины* и *вероятности* его возникновения [Черп и др., 2000]. Понятие величины охватывает здесь несколько факторов, таких как *интенсивность* воздействия (например, повышение величины показателя БПК₅ в реке до 10 мг/л); *продолжительность* воздействия; *масштаб* распространения воздействия. При этом масштаб распространения воздействия оценивается как в терминах площади (например, территория, на которой зафиксировано повышение радиационного уровня), так и в терминах численности биологических объектов, наличия особо охраняемых территорий и т.д., подвергающихся воздействию данного фактора. Дополнительным аспектом, который чаще всего не учитывается при оценке значимости воздействий, является его *контекст*. Воздействия, одинаковые по величине и вероятности, могут рассматриваться как более или менее важные, влиять на принимаемые решения в большей или меньшей степени в зависимости от того, где именно они имеют место, как они воспринимаются заинтересованными лицами, какова сложившаяся социальная обстановка и т.д.

Для оценки значимости существует множество методов: например, Н. Ли [1995] описывает 24 метода. Наиболее простым и часто применяемым методом оценки значимости является сравнение их с универсальными стандартами. Стандарты могут быть количественными (например, предельно допустимые концентрации загрязняющих веществ) или носить характер качественных норм (например, ограничения на определенные виды хозяйственной деятельности в пределах особо охраняемой природной территории или вблизи культурных памятников). Однако следует иметь в виду важные ограничения применимости стандартов для оценки значимости:

- на многие виды воздействия стандарты отсутствуют (например, в момент написания этой книги в России не существовало стандарта на концентрации или выбросы диоксинов);
- многие стандарты разработаны на основе приблизительных данных (недостаточно проверенных, неточных или неполных) и, таким образом, их область применения ограничена;
- стандарты основаны на представлении о "пороговом воздействии", в то время как многие виды воздействия (например, ионизирующее излучение) не имеют порогового значения: не исключено, что их влияние проявляется при сколь угодно малых величинах;
- стандарты не всегда годятся для учета непрямых, кумулятивных воздействий, синергетического действия нескольких факторов;

- стандарты редко применимы для учета уникальных условий, характерных для конкретной ситуации.

Очень близок к сравнению со стандартами метод оценки значимости, основанный на сравнении величины воздействия с усредненными значениями данного параметра для рассматриваемой местности. Такой метод вносит в оценку значимости элемент "контекста", учета местной ситуации. К этому типу методов относится сравнение параметров состояния окружающей среды с фоновыми значениями. Сравнение величины воздействий со стандартами или с характерными значениями является "объективным" методом оценки значимости воздействий (хотя стандарты, конечно, могут рассматриваться как субъективная величина).

Анализ воздействий в рамках экологического мониторинга включает в себя два основных элемента: *прогноз их абсолютной физической величины и оценку их относительного вклада*. Прогноз величины воздействий обычно осуществляется для различных компонент окружающей среды с применением специальных методов прогноза, таких, например, как математические модели. Важно, чтобы усилия исследователей были сосредоточены на предсказании наиболее значимых воздействий, чтобы точность применяемых методов соответствовала задачам экологической оценки и чтобы воздействия предсказывались в форме изменений в окружающей среде, а не просто описания факторов воздействия. Например, если вывод о влиянии фактора будет сформулирован как «*в результате будет уничтожено 15 га зеленых насаждений*», то судить о значимости воздействия будет гораздо сложнее, чем в том случае, когда в документе будет указано: «*в результате действия фактора будет уничтожено 28% зеленых насаждений в районе*».

Ранжирование *относительной значимости* воздействий осуществляется для соотнесения силы их влияния факторов друг с другом. Существует много методов ранжирования относительной значимости, и их выбор зависит от требований программы исследований и конкретной ситуации. В то же время, адекватная оценка значимости воздействий невозможна без соотнесения их эколого-физиологического эффекта с социальными ценностями, интересами и предпочтениями различных заинтересованных сторон. Л.У. Кантер [Canter, 1996] приводит пример "шкалы значимости" воздействий (табл. 1.1).

Таблица 1.1

Пример шкалы значимости воздействий на экосистемы [Canter, 1996]

Превышаемый порог	Характер нарушений	Ранг значимости
Юридический порог	Превышение стандартов, установленных законом	наивысшая значимость
Функциональный порог	Неизбежные воздействия, приводящие к необратимому разрушению экосистем	очень высокая значимость
Порог приемлемости	Воздействия, нарушающие сложившиеся местные нормы	высокая значимость
Порог конфликта	Воздействия, вызывающие конфликт между группами общества по поводу ресурса	умеренная значимость
Порог предпочтений	Воздействия, касающиеся предпочтений тех или иных групп	низкая значимость

Наиболее значимые воздействия превышают установленные стандарты. Это означает, что меры по устранению таких воздействий должны быть приняты в обязательном порядке или намечаемая хозяйственная деятельность не может быть осуществлена. Второй уровень значимости воздействий составляют неизбежные воздействия, которые необратимым образом разрушают экосистемы. Третьи по значимости воздействия – те, последствия которых нарушают сложившиеся социальные нормы и устои (деятельность, при которой необходимо переселение людей, может представлять пример воздействий такого типа). Наконец, последние две группы воздействий касаются интересов и предпочтений различных групп общества (рыбаков, велосипедистов, пенсионеров и т.д.)

Экспертные методы оценки экологических воздействий

По инициативе Программы ООН по окружающей среде (UNEP) для процесса экологической оценки был разработан целый ряд стандартизованных методов или вспомогательных инструментов, призванных повысить эффективность выявления воздействий. Эти методы основаны на коллективном опыте широкого круга специалистов и их использование позволяет упорядочить и систематизировать процесс биоиндикации и мониторинга, избегая многих ошибок, совершавшихся на ранних этапах развития.

Австралийским агентством по охране окружающей среды АЕАА, а также международной группой специалистов [Экологическая оценка..., URL] выделяются следующие стандартизованные методы, используемые для выявления воздействий:

- контрольные списки;
- матрицы;
- сети;
- наложение карт и географические информационные системы (ГИС);
- экспертные системы.

Контрольные списки, как правило, разрабатываются на основе списков компонентов окружающей среды или воздействующих факторов, которые должны быть исследованы для выявления возможных воздействий. Списки могут варьировать по сложности и назначению от очень простого списка до больших иерархических рубрикаторов, которые также подразумевает оценку значимости путем экспертного нормирования и взвешивания. Примерами таких списков являются известная система сапробности индикаторных организмов Кольквитца–Марссона в модификации Сладечека (Sládeček, 1973) или таблица обобщенных характеристик изменений в водных и наземных системах р. Чапаевки, содержащая оценки индикаторной способности различных компонент и параметров экосистемы [Экологическое состояние..., 1997]. Во втором примере на практике показано, как эффективность выводов биоиндикации может быть существенно повышена за счет сопряженного использования различных индикаторов.

Списки могут быть улучшены и адаптированы к местным условиям по мере накопления опыта их использования. Контрольные списки неэффективны для выявления непрямых воздействий (вторичных и более высокого порядка), а также взаимодействия между воздействиями.

Матрицы представляют собой таблицы, которые могут использоваться, чтобы определить взаимодействие между группами действующих факторов и компонентами (характеристиками) окружающей среды. При использовании матрицы взаимодействие между конкретным возмущением и компонентом окружающей среды может быть отмечено в клетке на пересечении рядов и столбцов. В клетках могут быть сделаны "примечания", чтобы подчеркнуть существенность воздействия или другие особенности, связанные с природой факторов, например:

- значки или символы могут наглядно определить тип воздействия (такие как прямой, косвенный, совокупный);
- цифры или размер значков могут указывать масштаб;
- могут быть сделаны описательные замечания.

В литературе [Экологическая оценка..., URL] упоминается матрица взаимодействий Леопольда, применимая для экспертизы большинства экологических проектов, которая содержит 88 всесторонних компонентов и характеристик окружающей среды, представленных столбцами таблицы, и 100 видов деятельности (воздействующих факторов), которые представлены строками. Общий подход, использованный в матрице Леопольда, получил широкое распространение, и на его основе было разработано множество других матриц. Другим примером матрицы является таблица общих критериальных характеристик [Попченко, Булгаков, 1992], содержащая в строках – качественные признаки модификаций биоценозов зообентоса, а в столбцах – различные инвариантные состояния, соответствующие прогрессу или регрессу соответственно в экологической структуре сообществ и в процессах метаболизма. В общем случае, в матрицах также трудно различать прямые и косвенные воздействия.

Сети представляют собой графы причинно-следственных отношений и иллюстрируют множественные связи между антропогенными факторами, природоохранной деятельностью и компонентами (характеристиками) окружающей среды и поэтому особенно полезны для выявления и отображения воздействий второго порядка (косвенные, синергетические и т.д.). Упрощенные сети могут использоваться в сочетании с другими методами для обеспечения того, чтобы важнейшие

воздействия второго порядка не были пропущены при исследовании. Из-за отсутствия собственных примеров, приведем на рис. 1.5 пример сети, отражающей взаимосвязи, приводящие к изменению качества жизни, состояния дикой природы и прочих условий в случае реализации мероприятий по развитию туризма в Замбии (учтена даже потеря биоразнообразия из-за роста спроса на сувениры для туристов). Разработка более детальных сетей может потребовать значительного времени и усилий, особенно если для этого не используются компьютерные программы.

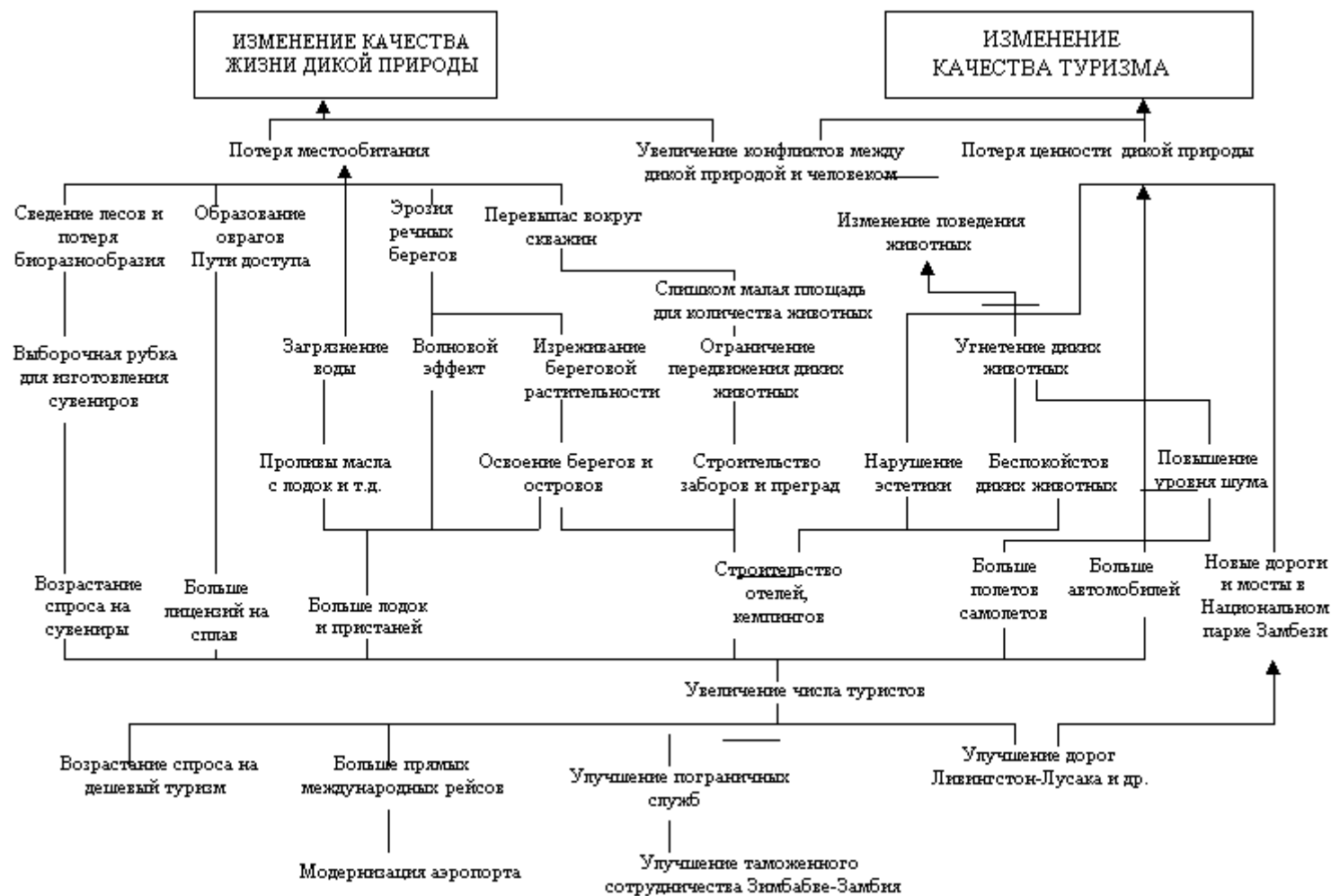


Рис. 1.5. Сеть, описывающая взаимосвязи, приводящие к изменению качества жизни, состояния дикой природы и пр. условий при реализации мероприятий по развитию туризма в Замбии по [Экологическая оценка..., URL]

Наложение карт и географические информационные системы (ГИС) – послойно накладываемые карты или компьютерные изображения, которые могут использоваться для визуализации воздействий. Как будет показано ниже, ГИС делят карту района на отдельные ячейки и хранят большой объем информации для каждой ячейки. Такие системы могут использоваться для целей анализа и компьютерного моделирования.

Экспертные системы (ЭС) – как правило, компьютеризованные системы принятия решений, основанные на знаниях. Внешне работа ЭС проста: пользователю последовательно предлагаются вопросы, сформулированные на основе имеющейся базы классифицированных фактов и заложенного в системе механизма поиска взаимосвязей между ними. Экспертная система анализирует ответ на каждый вопрос и переходит к следующему вопросу, учитывая данный ответ.

Экспертные системы возникли как первый практический результат развития алгоритмов *искусственного интеллекта* – совокупности научных дисциплин, изучающих методы решения задач интеллектуального (творческого) характера с использованием компьютеров [Нильсен, 1973; Сафонов 1992]. ЭС выполняет функции эксперта при решении задач из некоторой предметной области и состоит из следующих компонентов [Таунсенд, Фохт, 1990]:

- базы знаний (части системы, в которой содержатся факты);
- подсистемы генерации "умозаключений" (множества правил, по которым осуществляется решение задачи);
- подсистемы объяснения;
- подсистемы приобретения знаний;
- диалогового процессора.

Основными отличиями ЭС от других программных продуктов являются использование не только данных, но и знаний, а также специального механизма синтеза решений и новых знаний на основе имеющихся. Знания в ЭС представляются в такой форме, которая может быть легко обработана на ЭВМ. Наиболее распространенный способ представления знаний в экспертных системах – это непротиворечивые логические высказывания [Виттих, 1998] или продукционные правила. В таких системах предметная область описывается с помощью логических рассуждений, ведущих от причин к следствию, т.е. устанавливается некоторая детерминированная причинно-следственная связь между фактором *A* и явлением *B*.

Качество ЭС определяется размером и качеством базы знаний (правил или эвристик). Для ее построения требуется провести опрос специалистов, являющихся экспертами в конкретной предметной области, а затем систематизировать, организовать и снабдить эти знания указателями, чтобы впоследствии их можно было легко извлечь из базы. Обычно в любой момент времени в системе существуют три типа знаний

- *структурированные знания* – статические знания о предметной области (после того как эти знания выявлены, они уже не изменяются);
- *структурированные динамические знания* – изменяемые знания о предметной области (они обновляются по мере выявления новой информации);
- *рабочие знания* – знания, применяемые для решения конкретной задачи или проведения консультации.

В ЭС обычно заранее не определен алгоритм задачи, который строится "по ходу" ее решения на основании эвристических правил, поэтому обработка знаний часто может привести к получению такого результата, который трудно предусмотреть. Одним из важных вопросов, возникающих при проектировании управляющей компоненты систем, основанных на знаниях, является выбор метода поиска решения, т.е. стратегии синтеза "умозаключений" [Элти, Кумбс, 1987, Ларичев с соавт., 1989]. От выбранного метода поиска (направления и способа его осуществления) будет зависеть порядок применения и срабатывания правил.

Считается, что системы, основанные на знаниях, имеют определенные преимущества перед человеком-экспертом:

- у них нет предубеждений и они не делают поспешных выводов;
- эти системы работают систематизировано, рассматривая все детали, часто выбирая наилучшую альтернативу из всех возможных;
- база знаний может быть очень и очень большой; будучи введены в машину один раз, знания сохраняются навсегда; человек же имеет ограниченную базу знаний, и если данные долгое время не используются, то они забываются и навсегда теряются;

- системы, основанные на знаниях, по своей природе устойчивы к "помехам"; в то время, как эксперт пользуется побочными знаниями и легко поддается влиянию внешних факторов, которые непосредственно не связаны с решаемой задачей.
- базы знаний не обременены сведениями из других областей и менее подвержены "шумам";
- ЭС-системы не заменяют специалиста, а являются инструментом в его руках.

Разумеется, имеется ряд предметных областей и прикладных задач, где разработка или использование ЭС не всегда обосновано. В табл. 1.2 приведены сравнительные критерии, по наличию которых можно судить о целесообразности применения экспертных систем. В целом ЭС является не подменой, а разумным дополнением традиционным математическим задачам, решаемым обычным путем формальных преобразований, процедурного анализа или численными методами.

Таблица 1. 2

Критерии применимости экспертных систем при решении прикладных задач

Применение ЭС обосновано	Применение ЭС не обосновано
Не могут быть построены строгие алгоритмы или процедуры, но существуют эвристические методы решения.	Имеются эффективные алгоритмические методы.
Есть эксперты, которые способны решить задачу.	Отсутствуют эксперты или их число недостаточно.
По своему характеру задачи относятся к области диагностики, интерпретации или прогнозирования.	Задачи носят вычислительный характер.
Доступные данные "зашумлены".	Известны точные факты и строгие процедуры.
Задачи решаются методом формальных рассуждений.	Задачи решаются процедурными методами, с помощью аналогии или интуитивно.
Знания статичны (неизменны).	Знания динамичны (меняются со временем).

В качестве классического примера экспертной системы экологического профиля можно привести систему PLANT/cd, предсказывающую потери зерна из-за черной совки [Уотермен, 1989]. Эта ЭС реализует прогноз состояния конкретного агроучастка по результатам обследования. При этом используются такие показатели, как количество попавших в ловушку бабочек, прополка поля, возрастной спектр личинок, состояние почвы, сорт зерновой культуры и проч.

Из примеров отечественных экспертных систем в области биоиндикации можно привести любопытный проект, осуществленный в Интернет Ярославским областным центром дистанционного обучения школьников [Биоиндикация природных..., URL]. Если зайти на сайт www-windows-1251.edu.yar.ru/russian/misc/eco_page/bioind, то можно самостоятельно без каких-нибудь финансовых затрат выполнить качественный анализ состояния воды по гидробиологической пробе (автор – школьник Сергей Юров). Для этого необходимо просто ввести данные о встречаемости по 24 группам водных организмов – см. рис. 1.6 - и получить описание типа и характеристик прогнозируемого водоема.

1.4. Концепции нормативов и критических нагрузок

Анализ значимости экологических воздействий проводится с целью совокупной оценки "качества среды", предметом которой являются:

- *в экологическом смысле* – вся экосистема региона, состоящая из иерархии соподчиненных биологических компонентов (сообществ), способных сохранять устойчивость путем адаптации к внешним факторам и обеспечивать утилизацию веществ, поступающих извне;
- *в прикладном смысле* – характеристики ресурсов, обеспечивающие их использование в тех или иных практических целях.

Определенная таким образом цель подразумевает наложение граничных условий (нормативов) как на само воздействие, так и на факторы среды, отражающие и воздействие, и отклики экосистем.

Качественный анализ состояния воды

Выберите те типы животных, которые встречаются в исследуемом водоеме
Для того, чтобы получить описание и изображение животного, щелкните кнопкой мыши на его названии

<p>1. <u>Личинки мух-львинок (крыски)</u> <input type="radio"/> Есть <input checked="" type="radio"/> Нет <input type="radio"/> Неизвестно</p> <p>2. <u>Малощетинковые черви (олигохеты)</u> <input type="radio"/> Есть <input checked="" type="radio"/> Нет <input type="radio"/> Неизвестно</p> <p>3. <u>Планарии</u> <input type="radio"/> Есть <input checked="" type="radio"/> Нет <input type="radio"/> Неизвестно</p> <p>4. <u>Личинки комаров-звонцов (мотыль)</u> <input type="radio"/> Есть <input checked="" type="radio"/> Нет <input type="radio"/> Неизвестно</p> <p>5. <u>Личинки кровососущих комаров</u> <input checked="" type="radio"/> Есть <input type="radio"/> Нет <input type="radio"/> Неизвестно</p>	<h2 style="text-align: center; color: green;">Вода умеренно чистая</h2> <p>Бета-мезосапробная зона:</p> <ul style="list-style-type: none"> • нет нестойких органических веществ, произошла полная минерализация. • Сапрофитов - тысячи клеток в 1 мл, и резко увеличивается их количество в период отмирания растений. • Содержание кислорода и углекислоты колеблется в зависимости от времени суток: днем избыток кислорода, дефицит углекислоты; ночью - наоборот. • Ил желтый, идут окислительные процессы, много детрита. • Много организмов с автотрофным питанием, наблюдается цветение воды, так как сильно развит фитопланктон. • Встречаются <div style="margin-left: 20px;">диатомовые водоросли <i>Melosira vaians</i>, <i>Diatoma</i>, <i>Navicula</i>, зеленые водоросли <i>Cosmarium</i>, <i>Botrytis</i>, <i>Spirogira crassa</i>, <i>Cladophora</i>;</div> много протококковых водорослей. • Впервые появляется роголистник <i>Ceratophyllum demersum</i>. • Много корненожек, солнечников, червей, моллюсков, личинок хирономид. • Встречаются ракообразные и рыбы, т.е. много разных видов, но численность и биомасса их невелика
---	---

Рис. 1.6. Образец экспертной системы биоиндикации водоемов по гидробиологическим показателям для обучения школьников

Принцип антропоцентризма верен и в отношении истории развития нормирования: значительно ранее прочих были установлены нормативы приемлемых для человека условий среды (прежде всего, производственной). Тем самым было положено начало работам в области санитарно-гигиенического нормирования. Однако человек – не самый чувствительный из биологических видов и принцип "Защищен человек – защищены и экосистемы", вообще говоря, неверен.

Экологическое нормирование является ключевой проблемой в формировании экологической безопасности. Более чем два десятилетия назад в России был поставлен вопрос о необходимости определения допустимых экологических нагрузок и адекватных ограничений (нормирования) существующих антропогенных воздействий с учетом всей совокупности возможного вредного воздействия многих факторов и природной специфики объектов [Израэль, 1984]. В Законе "Об охране окружающей среды", в числе прочих, предписывается обоснование и использование в практике двух типов нормативов [Федеральный закон..., 2002, ст. 21, 22, 27]:

- нормативов качества окружающей среды – «устанавливаются для оценки состояния окружающей среды в целях сохранения естественных экологических систем, генетического фонда растений, животных и других организмов»;
- нормативов допустимого воздействия на окружающую среду (в т.ч. нормативов допустимой антропогенной нагрузки) – «устанавливаются для субъектов хозяйственной и иной деятельности в целях оценки и регулирования воздействия всех стационарных, передвижных и иных источников воздействия на окружающую среду, расположенных в пределах конкретных территорий и (или) акваторий».

Экологическое нормирование предполагает учет так называемой предельно допустимой нагрузки на экосистему. Допустимой считается такая нагрузка, «под воздействием которой откло-

нение от нормального состояния системы не превышает естественных изменений и, следовательно, не вызывает нежелательных последствий у живых организмов и не ведет к ухудшению качества среды» [Израэль, 1984]. Практически идентичное определение дается А.П. Левичем [1994] для обозначения экологически допустимых уровней воздействия (ЭДУ), которые «в отличие от ПДК являются не потенциальными причинами экологического неблагополучия, а непосредственными его симптомами» [Булгаков с соавт., 1995]. Допустимой считается любая нагрузка, не превышающая предельной (т.е. нормативной), которая, в свою очередь, равна критической нагрузке, умноженной на коэффициент запаса (в зависимости от степени "доверия" и потенциальной возможности кумулятивного действия этот коэффициент обычно варьируется от 0.2 до 0.5).

К сожалению, как слишком часто случается в нашей жизни, написать закон или дать основополагающее определение оказывается значительно проще, чем разработать методику измерения частных показателей, закрепленных в законе. Например, кто может решиться хотя бы на, казалось бы, несложное определение, что такое «нормальное состояние экосистемы» и каков у нее «диапазон естественных изменений»? Поэтому, к настоящему времени известны лишь некоторые попытки обоснования "экологических ПДК" [Лукьяненко, 1992, 1996] для растений суши и для сообществ водоемов рыбохозяйственного назначения.

Экологическое нормирование не является подменой санитарно-гигиеническому нормированию, а, в определенном смысле, дополняет его, ужесточая применяемые стандарты. Например, экологическая индикация может дать сведения о степени и характере загрязнения, распределении загрязнения в водоеме, возможном состоянии водной экосистемы в сезонном масштабе. Из этого следует, что вода, качество которой согласно экологическому контролю признано неудовлетворительным, вряд ли может использоваться для питьевых или хозяйственных целей, но экологически доброкачественная вода не всегда может быть признана пригодной с точки зрения здравоохранения [Беляев, 1993]. В последнем случае необходимы специфические микробиологические, токсикологические и химические тесты.

В мировой практике концепция критических нагрузок получила широкое развитие как необходимое руководство по рациональному ограничению антропогенных воздействий [Моисеенко, 1995, 1998]. На рабочем совещании ООН понятие «критическая нагрузка» было определено как «количественная оценка воздействия одного или нескольких загрязняющих веществ, ниже которой не происходит существенного вредного воздействия на специфические чувствительные элементы окружающей среды в соответствии с современными знаниями» [Critical loads..., 1988]. С учетом известных проблем кумуляции небольших воздействий и развитию хронических (отложенных) последствий величина критической нагрузки по В.Н. Башкину [1999] может быть охарактеризована как «максимальное поступление загрязняющих веществ, которое не вызывает необратимых вредных изменений в структуре и функциях экосистем в течение длительного (50-100 лет) периода».

Мем № 6: *«Но мир! Но жизнь! Ведь человек дорос
Чтоб знать ответ на все свои загадки.
Что значит знать? Вот, друг мой, в чем вопрос,
На этот счет у нас не все в порядке.»*
И.В. Гете, "Фауст"

Несмотря на глобальную аттрактивность ⁶ концепции критических нагрузок, количественная оценка их величин до сих пор связана с целым рядом неопределенностей. Прежде всего это относится к самим основополагающим понятиям: например, до сих пор не вполне ясно, где обнаружить "специфические чувствительные элементы", что считать за "необратимые вредные изменения" (за 50-100 лет таковые могут произойти не только с природными компонентами, но и с самим человечеством) и, наконец, что есть «экологическая норма» ⁷ [Тихонов, Шитиков, 1984а]. В частности, неверно подчеркивать "максимальность" критической нагрузки, поскольку многие категории действующих факторов (например, тепловое воздействие) имеют и минимальный порог кри-

⁶ Привлекательность (от лат. *attraho* – притягиваю к себе).

⁷ Наш вариант трактовки – *размах стохастических колебаний показателей жизнедеятельности компонентов экосистем, которые не выходят за пределы приспособительных реакций по поддержанию гомеостаза.*

тичности. Еще большие методологические сложности вызывает количественное выражение этих понятий в конкретных условиях моделирования или оценки критических уровней при экологическом нормировании.

Рекомендуемый порядок действий и инструментарий, используемый при оценке порога критического действия, например, практически одновременно документировали в своих работах процитированные выше В.Н. Башкин и Т.И. Моисеенко (см. табл. 1.3). Работы других авторов по этой проблеме практически не отличаются от приводимых тезисов ни сущностью, ни глубиной, ни лексиконом.

Таблица 1.3

Методологический подход к определению экологически критических нагрузок

По В.Н. Башкину [1999]	По Т.И. Моисеенко [1998]
<ol style="list-style-type: none"> 1. Идентификация вредного воздействия (выбор стрессоров и рецепторов, определение существующей нагрузки и критериев состояния экосистемы) 2. Учет параметров вредного действия (необходимые параметры и стороны вредного воздействия, выявление временной динамики процессов и их направленности) 3. Экологическая оценка путей воздействия 4. Характеристика риска (оценка вероятности, частоты и серьезности воздействий в пространственном и временном аспекте, их сравнение с существующими нагрузками) 5. Управление риском (разработка эколого-экономических оптимизационных моделей при локальном и трансграничном загрязнении) 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Выявление всех неблагоприятных процессов в водной среде (как прямых, так и вторичных) и обоснование химических критериев качества вод (комплексная факторизация воздействий с учетом суммарного, синергетического, или антагонистического взаимодействия всех компонентов) 2. Диагностика состояния экосистемы и обоснование наиболее информативных биологических критериев, объективно отражающих состояние экосистемы (численных значений, разграничивающих “норму и патологию” и определяющих порог необратимых изменений) 3. Определение критических уровней многофакторного загрязнения вод на основе дозозависимых зависимостей между качеством водной среды (по химическим критериям) и состоянием организмов, популяций и сообществ (по биологическим критериям)

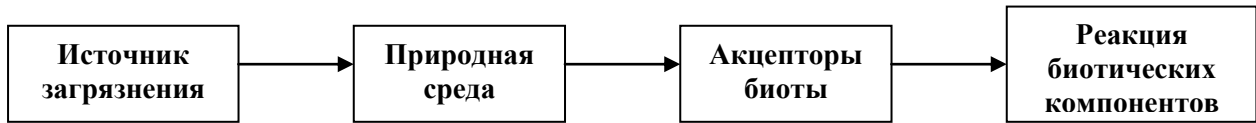
Как следует из этапов табл. 1.3, оценка критичности воздействий предполагает комплексное исследование изучаемого объекта и выявление двух основных интегральных составляющих в поведении экосистемы: фактора антропогенной нагрузки на окружающую среду и отклика, определяющего функциональную устойчивость, продуктивность и разнообразие биотических элементов.

Антропогенная нагрузка А на экосистемы складывается из большого числа факторов различной природы и происхождения, основными из которых являются:

- выброс в окружающую среду загрязняющих веществ промышленного или хозяйственно-бытового происхождения;
- энергетическое и радиологическое загрязнение;
- техногенная и сельскохозяйственная детериорация ландшафтов;
- рекреационная нагрузка;
- изъятие из природной среды необходимых ресурсных компонентов и т.д.

Проблема оценки *совокупной* антропогенной нагрузки заключается, с одной стороны, в том, как измерить интенсивность составляющих факторов, поскольку средства экологического мониторинга в нашей стране весьма ограничены, а статистическая отчетность страдает неполнотой и недостоверностью. С другой стороны, даже если предположить, что вся эта исходная информация имеется, практически нереально построение строго формализованных обобщенных критериев комплексной антропогенной нагрузки *А*, адекватно соизмеряющих степень влияния отдельных

факторов с учетом их синергизма, поскольку неизвестны математические выражения переходных функций в последовательности:



Функциональная оценка отклика S экосистемы на антропогенное воздействие связана, как правило, с понятиями гомеостаза и стабильности, отражающими свойство природных комплексов сохранять относительное постоянство своих характеристик при возмущающих воздействиях. Это относится, в основном, к метаболически активным элементам ландшафтов – биологическим компонентам биогеоценозов. Существует множество определений и теорий устойчивости популяций, оперирующие с различными функциональными (скорость метаболизма, продуктивность, скорость обновления состава) и структурными (видовой состав, численность, биомасса, трофическая организация) параметрами. В зависимости от интенсивности антропогенной нагрузки A в пределах возможностей адаптации и свойств внутренней кинетики экосистемы все ее гомеостатические параметры могут более или менее согласованно изменяться, образуя экологическую амплитуду адаптационных колебаний биоценоза.

Свидетельством критичности нагрузки является возникновение «длительного тренда за пределами естественного колебательного режима» [Логофет, Свирежев, 1983]. К сожалению, разнообразие терминологии и математических моделей гораздо богаче возможностей их практического применения для оценки пороговых реакций реальных экосистем по отношению к антропогенным воздействиям. Причины этому – те же, что и при конструировании критерия A :

- невозможность проведения массового, длительного и крупномасштабного мониторинга биоиндикационных компонентов окружающей среды;
- методологические трудности в конструировании обобщенного интегрального критерия отклика экосистемы S , который адекватно оценивал бы вероятность "отказа чувствительных элементов окружающей среды" и отвечал очевидным требованиям результативности, массовости, детерминированности и непротиворечивости.

Предположим, наконец, что найден способ измерения антропогенной нагрузки A и отклика экосистемы S . Однако последующий ответ на вопрос о том, экосистему с каким значением S следует считать вышедшей за границы биологической нормы и, соответственно, какое значение A принять за "критическое", отнюдь не кажется тривиальным. В этом плане интересны работы С.А. Патина [1979], Г.Д. Замолотчикова [1993] и Г.Т. Фрумина [2000], в различных модификациях использующих математико-статистический подход для определения порогов экологической толерантности. Этот метод состоит в определении пороговых значений на основе естественных колебаний воздействующих факторов среды или параметров, присущих экологическому объекту, с помощью анализа распределений вероятностей.

Одна из таких методик определения критических точек основана на предположении, что критерий нормального состояния экосистемы – нормальный закон распределения ее переменных [Федоров, 1977б; Гродзинский, 1988]. В этом случае максимальные и минимальные критические значения ($x_{кр}^{max}$ и $x_{кр}^{min}$) находятся из соотношения:

$$\Phi\left(\frac{x_{кр}^{max} - x_{кр}^{min}}{\sigma_x}\right) = \frac{1 - p(\alpha)}{2}, \quad (1.1)$$

где Φ – функция нормированного нормального распределения, σ_x – среднеквадратическое отклонение, $p(\alpha)$ – вероятность соответствия нормальному закону (обычно p предлагается принять равным 0.8, 0.9, 0.95 или 0.99 в зависимости от цели исследования и того ущерба, который может быть причинен системе в случае совершения "ошибки I рода").

Для малого числа наблюдений критические значения могут быть определены следующим образом:

$$x_{кр}^{max} = X + k \sigma_x, \quad x_{кр}^{min} = X - k \sigma_x, \quad (1.2)$$

где k – толерантный множитель, используемый в математической теории надежности, X – среднее значение параметра [Воробейник с соавт., 1994].

Каждый из компонентов среды x , по мнению Г.Т. Фрумина [2000], должен иметь свой биологически допустимый (толерантный) для гидробионтов диапазон концентраций в воде, в пределах которого организмы, их сообщества и популяции располагают возможностями оптимальной реализации своих физиологических, экологических и других функций.

Мем № 7: «Смысл статистической нормы состоит в том, что исследователи условились применять некоторый, вполне конкретный период существования системы за эталон ее нормального функционирования. Обоснованность статистической нормы полностью упирается в обоснованность выбора этого периода» В.Д. Федоров с соавт. [1982].

Проблемы использования математико-статистических методов нормирования сводятся к следующему:

- отсутствие каких-либо априорных свидетельств о законе распределения показателя (в частности, о близости к нормальному гауссовскому закону распределения);
- необходимость формирования достаточно репрезентативной выборки наблюдений (для получения экологически допустимых уровней при двух классах – благополучный и неблагополучный – требуется по оценкам экспертов не менее 20 измерений);
- неопределенность понятия «*эталон нормального функционирования экосистемы*» (см. мем № 7).

Существует два других распространенных подхода для предварительной оценки порогового значения фактора при известном отклике:

- выполняется серия измерений (A , S) на условно "чистом" объекте и параллельная серия наблюдений на тестируемом объекте; если при этом зафиксированы статистически значимые отличия S в "опыте" и "контроле", то тестируемый объект считается вышедшим за пределы нормативной стабильности, а нагрузка A – превысившей критическую;
- на одной и той же тестируемой системе (например, на русле реки с разным характером нагрузки, или при наличии долговременных наблюдений) выполняется серия измерений (A , S) и строится традиционная функция Ψ "воздействие - эффект":

$$S = \Psi (A);$$

если система отвечает модели кинетики 1-го порядка, то эта кривая имеет S-образную форму и ярко выраженную точку перегиба, которой соответствует критическая нагрузка $A_{крит}$.

Например, с использованием последнего подхода в рамках Федеральной целевой программы России "Возрождение Волги" коллективом Института экологии Волжского бассейна РАН была выполнена оценка критической антропогенной нагрузки на малые реки бассейна Средней Волги. Интенсивность антропогенной нагрузки на различных участках рек рассчитывалась по "Методике оценки антропогенной нагрузки на малые реки Московской области" [Методика оценки..., 1997], которая учитывала как точечное поступление техногенных веществ со сточными водами, так и загрязнение рек от рассредоточенных источников (смыв с селитебных площадей, сельскохозяйственных полей, животноводческих ферм и пастбищ, рекреационное использование и др.). В качестве исходных данных служили материалы статистической отчетности 2ТП-водхоз (объем сточных вод, количество загрязняющих веществ в них) и сводки "Средволгогипроводхоз" (количество вносимых на поля удобрений, средняя урожайность сельскохозяйственных культур, посевные площади, поголовье домашнего скота). Обобщенная антропогенная нагрузка A рассчитывалась с использованием системы балльных оценок, являющихся составной частью методики.

Для практического решения вопросов, связанных с оценкой экокритичности водных объектов, нами использовался интегральный индекс экологического состояния ИИЭС [Зинченко с соавт., 2000], подробно описанный далее в главе 4 ($S = 1/ИИЭС$). Его расчет выполнялся на основе данных гидрохимического мониторинга и показателей видового обилия донных организмов, полученных в результате экспедиционных наблюдений. Пары значений $\{A, S\}$ были вычислены для опорных створов вдоль течения водотоков и критические значения антропогенной нагрузки находились из характера этого распределения. На рис. 1.7 показана зависимость между антропогенной нагрузкой A и обобщенным критерием отклика экосистемы S для створов р. Чапаевка. Полу-

ченная кривая по форме и по своему смыслу является типичной функцией "воздействие - эффект" с характерной точкой перегиба. Критичным уровнем антропогенных нагрузок можно считать нагрузки, приходящиеся на участок в районе г. Чапаевска (4) и равные 18 баллов по шкале [Методические указания..., 1997].

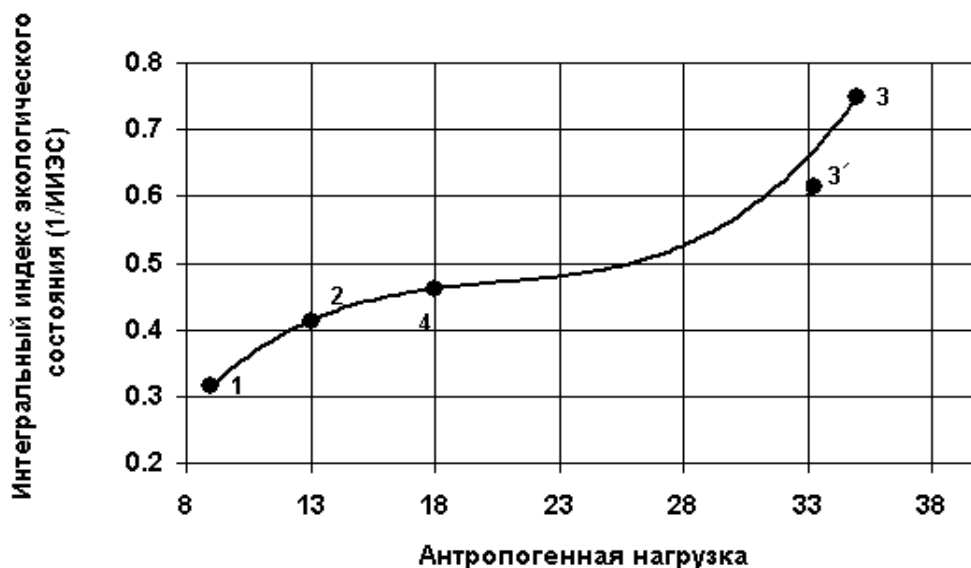


Рис 1.7. Зависимость между антропогенной нагрузкой A и интегральным индексом экологического состояния $S = 1/\text{ИИЭС}$ (на примере р. Чапаевка)

Нетрудно прийти к выводу, что в реальных практических исследованиях нельзя ожидать ни длительного мониторинга экосистемы, ни возможностей активного эксперимента с нею, ни предпосылок применения строгого математического аппарата к обработке динамики многомерных наблюдений. Поэтому наиболее реалистичным вариантом оценки критичности воздействий является метод экспресс-оценок, когда некоторый эксперт (либо коллектив экспертов) на основе ограниченного набора данных и некоторых выбранных им натуральных или расчетных показателей определяет зоны благополучия, кризиса или бедствия. При известном опыте и информированности экспертов такой подход может дать определенные результаты и необходимую в рамках поставленной задачи достоверность экологической оценки.

1.5. Общий подход к оценке комбинированного действия факторов

Имеющаяся неопределенность относительно четко установленных причинно-следственных связей типа "воздействие-эффект" объясняется, в первую очередь, многокомпонентным характером реальных потоков загрязнений, в связи с чем выявить в количественном плане реальный характер влияния индивидуальных ингредиентов оказывается затруднительным. Например, промышленные сточные воды могут содержать как токсичные вещества, так и вещества, способствующие росту и популяционному развитию отдельных групп водных организмов, в результате чего, отклик экосистемы становится прямо противоположным прогнозируемому.

Проблемы оценки комбинированного действия факторов очевидны. Без сомнения, можно с использованием несложного математического аппарата рассчитать эффект совместного действия n факторов:

$$y = a_0 + a_1x_1 + \dots + a_nx_n + a_{11}x_1^2 + a_{12}x_1x_2 + \dots + a_{1n}x_1x_n + a_{22}x_2^2 + a_{23}x_2x_3 + \dots, \quad (1.3)$$

но для этого требуется, как минимум, матрица коэффициентов парного взаимодействия a_{ij} факторов x_i и x_j .

Для практической оценки синергизма факторов в этих условиях традиционен путь комплексования тем или иным способом параметров функционирования экосистемы в один или несколько индексов, играющих роль интегрального критерия (формализованного показателя,

обобщающего более широкие группы показателей и привносящего новый информационный аспект в описание объекта). Интегральный показатель качества среды, с содержательной точки зрения, должен адекватно отражать комплексный фактор воздействия с учетом суммарного, синергетического или антагонистического взаимодействия всех компонентов. С формальных позиций выбранный критерий должен отвечать следующим основным требованиям:

- *адекватность*, т.е. его значение должно в полной мере соответствовать процессам в реальной экосистеме;
- *массовость*, т.е. он должен быть работоспособен на широком множестве примеров;
- *результативность*, т.е. он должен вычисляться с использованием неспецифических (т.е. традиционных для широкого мониторинга) исходных данных и доступных методов обработки;
- *детерминированность*, т.е. его описание не подлежит неоднозначному толкованию.

Ряд специалистов [Новиков с соавт., 1987] считает, что конструирование комплексных показателей должно осуществляться в соответствии с *принципами квалиметрии* [Азгальдов, Райхман, 1973; Азгальдов, 1994] – науки об оценке качества. Квалиметрия в некоторых сферах науки и техники достаточно хорошо зарекомендовала себя и стала прочной методологической основой систем сертификации качества (например, в соответствии с международными стандартами ИСО серии 9000 или 14000). Согласно положениям квалиметрии, разработка обобщенных оценок качества осуществляется, как правило, с использованием механизмов экспертного оценивания.

Процедура *многокритериального экспертного оценивания* (МЭО) традиционно применяется экспертами при решении ряда технических, экономических, социологических, военных и других задач, когда механизм принятия решений и сама цель оптимизации являются плохо формализуемыми. Используемый в процедуре МЭО итерационный метод Дельфы (от названия древнегреческого города, известного своим оракулом) представляет собой «ряд последовательно осуществляемых процедур, направленных на формирование группового мнения экспертов о проблемах, по которым ощущается недостаток информации» [Бешелев, Гурович, 1980]. При этом под «экспертом» может пониматься как конкретное лицо, компетентное в рассматриваемой области, так и любая расчетная методика, автомат или компьютерная программа, предоставляющая ответы на поставленные вопросы в виде числа.

В основу метода положены следующие предпосылки:

- имеется некоторый коллектив из M экспертов (экспертный совет), перед которым ставится задача оценить качество тестируемого объекта;
- эксперты составляют набор из W *частных критериев качества* (ЧКК), которые на основе апостериорной информации позволяют оценить в заданной численной шкале отдельные свойства изучаемого объекта, влияющие на комплексную оценку качества;
- после вычисления значений ЧКК эксперты по установленной процедуре формируют массив *экспертных оценок* (ЭО), численно ранжируя как долевой вклад каждого ЧКК и/или его относительную важность, так и уровень компетентности каждого эксперта;
- массивы ЧКК и ЭО подвергаются статистической обработке и последовательной корректировке с целью получения конечного экспертного прогноза.

Рассмотрим кратко общую математическую постановку и описание алгоритма многокритериального экспертного оценивания, подробно выполненные Н.А.Цейтлиным [URL].

Пусть для обработки представлены следующие исходные данные:

- $a_{iv} (i = \overline{1, M}; v = \overline{1, W})$ - частные критерии оценки качества экосистемы (ЧКК), представляющие собой непосредственные результаты мониторинга природной среды или некоторые расчетные индексы от измеренных показателей, сформированные i -м экспертом; M - количество экспертов; W - количество ЧКК;
- $P_{ij} (i, j \in \overline{1, M})$ - экспертные оценки (ЭО) уровня компетентности экспертов, данные i -тым экспертом j -му, где P_{ii} - самооценки ($i = \overline{1, M}$);
- $b_{iv} (i = \overline{1, M}; v = \overline{1, W})$ - ЭО важности ЧКК, данные i -тым экспертом v - му ЧКК.

Экспертные оценки $a_{iv}, P_{ij}, b_{iv} \in (\lambda^-, \lambda^+)$ измеряются в баллах, причем λ^- - минимальная ценность или ее отсутствие; λ^+ - максимальная ценность. Заданный диапазон и количество града-

ций шкалы баллов не оказывают принципиального влияния на результат прогноза, но удобно, если она является единой для всех оценок: можно принять, например, $\lambda^- = 0$, а $\lambda^+ = 6$ баллов.

Необходимо рассчитать обобщенный критерий качества, для чего выполняются вычисления по следующей схеме:

1. Определяется величина P_j - средневзвешенная статистическая оценка (СВ СО) уровня компетентности j -го эксперта. Поскольку она же является весовым множителем, то используется рекуррентная формула

$$\bar{P}_j^{(m+1)} = \sum_{i=1}^M \bar{P}_i^{(m)} P_{ij} / \sum_{i=1}^M \bar{P}_j^{(m)}, \quad (1.4)$$

где $m = 0, 1, 2, \dots$ - номер приближения; в нулевом приближении ($m = 0$) принимается $P_j^{(0)} = 1$ ($j = \overline{1, M}$). Цикл завершается, если $\max_j |\bar{P}_j^{(m+1)} - \bar{P}_j^{(m)}| < \varepsilon_P$, где ε_P - заранее заданное малое число ($\varepsilon_P \approx 0,1$).

2. Вычисляется средняя для всех экспертов СВ СО важности каждого v -го ЧКК:

$$\bar{b}_v = \sum_{j=1}^M P_j b_{vj} / \sum_{j=1}^M P_j, \quad v = \overline{1, W}; \quad (1.5)$$

и средневзвешенные значения самих частных критериев качества:

$$\bar{a}_v = \sum_{j=1}^M P_j a_{vj} / \sum_{j=1}^M P_j, \quad v = \overline{1, W}; \quad (1.6)$$

3. Обобщенная средневзвешенная статистическая оценка качества по всему множеству используемых критериев рассчитывается по формуле:

$$\bar{a} = \sum_{v=1}^W \bar{b}_v \bar{a}_v / \sum_{v=1}^W \bar{b}_v. \quad (1.7)$$

Полученные средневзвешенные величины также измеряются в баллах и принимают значения на интервалах: $\bar{P}_j, \bar{b}_v, \bar{a}_v, \bar{a} \in (\lambda^-, \lambda^+)$.

Поскольку строгого оптимального решения поставленной задачи не существует [Меркурьев, Молдавский, 1979], считается, что средневзвешенные статистические оценки (1.5 – 1.7) в наибольшей степени отвечают интуитивному представлению о простом и справедливом обобщении. Однако опыт дельфийского метода показывает, что пассивные или некомпетентные эксперты стремятся дать оценки важности ЧКК, близкие к средним. В этом случае представленная статистическая оценка центра распределения ЭО будет в значительной мере сглаживать крайние оценки, что несправедливо по отношению к активным или компетентным экспертам, взявшим на себя смелость нетривиального решения. Таким образом, использование СВ СО можно рассматривать просто как "договор" экспертов о некотором варианте обобщения ЭО.

На практике часто применяются упрощенные версии дельфийского метода, связанные с конкретными особенностями решения задачи, наличием эмпирических данных об оцениваемом объекте или численным составом экспертов, например:

- 1) «Много экспертов - один критерий». Уровни компетентности экспертов считаются одинаковыми, т.е. $P_j = 1$ ($j = \overline{1, M}$); каждый j -й эксперт сразу дает оценку единственного ЧКК a_j ($j = \overline{1, M}$). Тогда обобщение результатов МЭО сводится к расчету среднего по всем экспертам значения критерия качества $\bar{a} = \sum_{i=1}^M a_i / M$. Такая процедура широко известна по оцениванию спортивных соревнований по гимнастике или работе жюри КВН.
- 2) «Много критериев - один эксперт». Имеется вектор рассчитанных экспертом частных критериев качества \bar{a}_v , $v = \overline{1, W}$ и вектор экспертных оценок \bar{b}_v , $v = \overline{1, W}$, которые учитывают важность каждого v -го ЧКК. Средневзвешенная статистическая оценка обобщенного критерия получается прямой подстановкой \bar{a}_v и \bar{b}_v в формулу (1.7). По существу, с использованием этой методики МЭО рассчитываются и индексы сапробности (см. раздел 4.4), и различные "интегральные критерии" [Балушкина, 1997; Зинченко с соавт., 2000] и многие другие "индексы".

С применением описанных расчетных схем многокритериального экспертного оценивания или их модификаций может быть сформировано целое семейство обобщенных индексов, оце-

нивающих степень совместного влияния совокупности антропогенных факторов на устойчивость и биоразнообразие экосистем.

Рассмотрим теперь общие механизмы суммации многофакторных однонаправленных воздействий. Пусть есть индикаторный показатель, в естественных условиях принимающий значение "нормы" X_0 . Пусть измерены эффекты от действия фактора A , фактора B и совместного действия обеих факторов:

$$\mathcal{E}_A = X_A - X_0; \quad \mathcal{E}_B = X_B - X_0; \quad \mathcal{E}_{AB} = X_{AB} - X_0.$$

Тогда величины $\mathcal{E}_A \cdot K_{AB}$ и $\mathcal{E}_B \cdot K_{AB}$ можно условно считать частями совместного эффекта, приходящегося на долю факторов A и B в отдельности:

$$\mathcal{E}_{AB} = \mathcal{E}_A K_{AB} + \mathcal{E}_B K_{AB},$$

где $K_{AB} = \mathcal{E}_{AB} / (\mathcal{E}_A + \mathcal{E}_B)$ – коэффициент совместного действия факторов A и B .

Аналогично для трех факторов:

$$\mathcal{E}_{ABC} = \mathcal{E}_A K_{AB} K_{AC} + \mathcal{E}_B K_{AB} K_{BC} + \mathcal{E}_C K_{AC} K_{BC}.$$

Если предположить, что $K_{AB} = K_{AC} = K_{BC} = K$, тогда

$$\mathcal{E}_n = K^{(n-1)} \sum \mathcal{E}_i. \quad (1.8)$$

Из формулы (1.8) видно, что результат совместного действия нескольких факторов имеет вид преимущественно нелинейной комбинации индивидуальных воздействий и, в общем случае, сводится к пяти возможным механизмам:

- сенсбилизация (феномен взаимного усиления), когда результат действия нескольких факторов превышает суммарное действие этих факторов ($K_{ij} > 1$);
- простая полная суммация ($K_{ij} = 1$); $\mathcal{E}_n = \sum \mathcal{E}_i$;
- неполная суммация ($K_{ij} < 1$); $\mathcal{E}_n < \sum \mathcal{E}_i$; $\mathcal{E}_n > \max \{ \mathcal{E}_i \}$;
- независимое действие, когда совместный результат определяется величиной лимитирующего фактора ($K_{ij} < 1$); $\mathcal{E}_n = \max \{ \mathcal{E}_i \}$;
- компенсация, связанная с феноменом взаимного ослабления действия факторов, когда суммарный эффект меньше лимитирующего показателя ($K_{ij} < 1$); $\mathcal{E}_n < \max \{ \mathcal{E}_i \}$.

В настоящее время, только для поверхностных вод суши известно свыше 20 методов комплексной оценки загрязненности. Большинство из них используют формулу полной суммации, соответствующую достаточно пессимистической оценке и широко распространенную в водной токсикологии (см. главу 2). Менее пессимистическую и, на наш взгляд, более реалистическую оценку доставляет неполная суммация, основанная на предположении, что эффективность действия совокупности факторов несколько меньше, чем сумма эффектов всех факторов, но несколько больше эффекта независимого действия каждого фактора в отдельности. Примером такого критерия является комплексный показатель загрязнения атмосферного воздуха: $\mathcal{E}_n = \sqrt{\sum_i \mathcal{E}_i^2}$, предложенный

М.А. Пинигиным [1985а, б] и являющийся аналогом расстояния в евклидовом пространстве. Методики, основанные на суммации, работоспособны только при наличии строго фиксированного набора контролируемых показателей. Достаточно неопределенности в измерении хотя бы одного из них (например, на одном из объектов отсутствуют измерения по аммонийному азоту), как система оценок становится несопоставимой.

Выделение лимитирующего фактора вредности $\mathcal{E}_n = \max \{ \mathcal{E}_i \}$ также широко используется при разработке гигиенической классификации водоемов по степени их загрязнения. В главе 3 будет показано [Фрумин, Баркан, 1997] использование функции желательности Харрингтона, которая определяется как среднегеометрическое частных показателей:

$$\mathcal{E}_n = 1 / \left(e^{-\mathcal{E}_1} \cdot e^{-\mathcal{E}_2} \cdot \dots \cdot e^{-\mathcal{E}_n} \right)^{1/n}.$$

При использовании этих методов большое внимание должно быть уделено алгоритму нормирования данных и оценке статистической "эластичности" анализируемых показателей, поскольку возникает угроза искусственной привязки комплексного критерия к одному из факторов, по которому условия нормировки были выбраны излишне жестко.

За рамками приведенных формул и примеров остался самый популярный в среде "природоохранных чиновников" механизм, который можно было бы назвать «псевдокомпенсацией», вычисляемый как среднее значение действующих факторов:

$$\bar{X}_n = \sum \bar{X}_i / n \quad (1.9)$$

Неопределенность и бессмысленность этого выражения очевидны и могут быть проиллюстрированы классическим примером: отчет о средней по больнице температуре тела пациентов (~37°C) по всем ее отделениям от тифозного (~ 42°C) до дистрофичного (~ 33°C). Тем печальнее, что выражение (1.9) на протяжении десятилетий использовалось в множестве методик Минприроды и Минздрава (ИЗВ – см. главу 3, предельно допустимых сбросов ПДС [Методика расчета..., 1990], оценки ущерба [Временная типовая..., 1986] и др.) при суммации многокомпонентных нагрузок, в результате чего адекватность сконструированного критерия оценки антропогенного фактора чаще всего оказывалась сомнительной. В "болоте" усреднения факторов может быть бесследно утоплен любой всплеск данных, сигнализирующий о возможной экологической опасности. Действительно, залповый сброс в водный объект какого-нибудь токсиканта (например, фенола) может привести к губельным для всей биоты концентрациям этого ингредиента, хотя по отчету, использующему механизм "псевдокомпенсации", этот эффект будет выглядеть существенно заниженным или даже субкритическим, будучи "разбавлен" несколькими десятками показателей по другим ингредиентам с небольшими значениями относительных концентраций.

Очевидно, что любые формулы суммации справедливы, если суммируемые значения изоэффективны, т.е. приведены к единой шкале размерностей и ценностей. Для выполнения этой процедуры имеется целый набор методов "нормирования и взвешивания" (Rating and Weighting Technique [Ноулер и др., 1989]), из которых можно выделить следующие группы.

1. **Нормирование по статистикам**, когда вариационный ряд каждого отобранного показателя нормируется с использованием выборочных статистических характеристик – минимума ($\min X_i$), максимума ($\max X_i$), среднего (X_{cp}) или дисперсии (S_x):

- на интервале $\{ 0 \div 1 \}$ $Y_i = (\max X_i - X_i) / (\max X_i - \min X_i)$;
- на интервале $\{ -1 \div 1 \}$ $Y_i = (X_i - A) / B$, где $A = (\max X_i + \min X_i) / 2$,
 $B = (\max X_i - \min X_i) / 2$;
- как доля от среднего $Y_i = X_i / X_{cp}$;
- как доля от дисперсии $Y_i = (X_i - X_{cp})^2 / S_x$.

2. **Перевод в дискретное пространство** – преобразование непрерывных значений показателей в выбранную систему фиксированных значений – *баллов*. Для этого все пространство допустимых значений фактора разбивают на диапазоны, в соответствии с которыми ведут суммирование величин по шкале баллов. Определение числа групп и выделение границ диапазонов для каждой группы может происходить как вручную в соответствии с опытом и пристрастиями классифицирующего субъекта, так и с использованием оптимизирующих алгоритмов, оценивающих полимодальность распределения исходных значений показателя, потери количества информации от агрегирования градаций, функции «заселенности» интервалов и др. (см. главу 6).

3. **Нормирование по шкале стандарта** может осуществляться, например, при соотношении наблюдаемой концентрации загрязняющего вещества с ПДК по данному параметру или с фоновым значением этого параметра: $Y_i = X_i / \text{ПДК}_i$.

Как было описано выше, уже проранжированным показателям могут быть присвоены некоторые *весовые коэффициенты*, экспертно оценивающих важность частных критериев. Например, может быть решено, что в связи с особенностями гидрологического режима и частыми заморными явлениями, снижение концентрации кислорода в воде данного водоема – существенно более значимый и весомый аспект, чем, например, повышение минерализации. Соответственно, концентрация кислорода в воде может получить вес «3», а минерализация – вес «1». На этом же этапе нормированные показатели могут дополнительно умножаться на коэффициенты усиления эффектов действия *i*-го фактора при вхождении его в "синергетические" группы.

1.6. Информационные системы экологического мониторинга

Региональные эколого-информационные системы

Действующая система экологического мониторинга, выполняемого как научными учреждениями, так и федеральными контролирующими органами, малоэффективна не только по причине низкой технической оснащенности, но и, в значительной мере, в силу игнорирования современных методов управления данными и комплексной математической обработки результатов многомерных наблюдений. Остается невостребованным и с каждым годом теряется богатейший материал по гидрохимии природных водных систем, накопленный в течение десятилетий региональными службами Госкомгидромета. Очевидно, что кроме традиционных малоинформативных сводок о доле показателей, превышающих ПДК, эти данные могли бы с успехом использоваться для построения как локальных моделей сезонной и многолетней динамики водоемов, так и обобщенных моделей рационального эколого-экономического развития территориальных комплексов.

Построение любой модели экосистемы начинается, как правило, с организации оперативного и непротиворечивого доступа к массивам первичных данных экспедиционных исследований.

Полная компьютерная система, предназначенная для поддержки аналитической деятельности любого проекта (финансового, социального, экологического) должна состоять из следующих семи ступеней функционального анализа данных [Бершадский с соавт., 1999]:

- *склеивание* данных в кучи (heaping) с использованием средств, которые обеспечивают хранение разнородной информации, ведение идентификационных справочников и сортировку сведений на три кучки: "ценную кучку" (valuable hill), "рабочую кучку" (work hill) и "навозную кучку, в которой может быть найдена жемчужина" (dung hill);
- *складирование* данных (data warehousing, DWH) и их маркирование, удобное для описания и извлечения различных семантических группировок; результат DWH представляется в виде многомерного куба, каждая точка внутри которого соответствует набору семантически однородных элементарных объектов;
- *совмещение*, комбинирование данных (combining) – создание многомерного пространства, где каждая координата соответствует элементу набора или точке куба DWH, отображенной на линейно–упорядоченные градуированные оси (только в этом пространстве могут быть установлены отношения взаимосвязи и проведен анализ на основе метрической близости);
- *компьютерная томография* или визуальный многомерный анализ (visual multidimensional analysis) – позволяет конструировать двух- и трехмерные визуальные образы (паттерны) сложных взаимосвязей между рядами данных, наблюдать динамику образования и развитие аномалий;
- *разведывательный анализ* данных (data mining) – "просеивание" информации с целью нахождения в ней особенностей и аномалий, заданных описанием шаблонов или пороговых значений;
- *восстановление зависимостей* (forecasting) по эмпирическим выборкам – математическая обработка многомерных наблюдений (статистический и прецедентный анализ, оценка тренда временных рядов и проч.);
- *принятие решений*, планирование и управление (deciding - computer aided engineering) – отображается специальной сетью «ресурсы – потоки – события», представленной в разделе 1.3.

Определим *эколого-информационную систему (ЭИС)* как региональную автоматизированную экспертную систему по экологии и природоохранной деятельности, которая включает всю располагаемую совокупность данных мониторинга и состоит из трех основных компонентов:

- системы управления базами данных (*СУБД*), обеспечивающей хранение и оперативную выборку необходимой информации (этапы "склеивания, складирования и совмещения данных");
- геоинформационной системы (*ГИС*), преобразующей информацию о территории в виде набора предметных слоев на электронной карте местности и осуществляющей пространственную экстраполяцию расчетных показателей ("компьютерная томография");
- пакета прикладных программ (*ППП*), включающего библиотеку математических методов, синтезирующих набор решающих правил (коллектив предикторов) для оценки качества экосистемы и анализа причинно-следственных связей этой оценки с факторами среды ("разведывательный анализ и восстановление зависимостей").

Приведенное нами выделение подсистем ЭИС основано на традиционной классификации компонентов программного обеспечения, разрабатываемого как российскими, так и ведущими мировыми производителями. Современные тенденции развития компьютерной технологии делают

нерациональными трудозатраты каждого конкретного пользователя на разработку собственных версий СУБД, ГИС или ППП, поскольку на рынке программного обеспечения существуют многочисленные варианты соответствующих пакетов и инструментальных сред, различающихся только функциональностью, техникой внутренней реализации и стоимостью. Некоторые названия таких программных компонентов приведены ниже:

- системы управления базами данных: MS Access (в составе всемирно распространенного пакета Office), MS Visual FoxPro, Paradox, Clarion, MS SQL Server, Oracle, SyBase и т.д.;
- геоинформационные системы: ArcInfo, MapInfo, Ингео, Manifold System, ObjectLand, GeoGraph, Карта-2000 и многие другие (основные сведения о ГИС можно получить, например, в книге С.В. Шайтуры [1998], а также на страницах Интернет "ГИС-Ассоциация" – <http://www.gisa.ru> или "Где купить ГИС и данные для них" – http://giscenter.icc.ru/digest/gis_n_data.html);
- пакеты статистических программ: Statistica, Statgraphics, SPSS, SAS, Minitab, Systat, Stadia, САНИ, Мезозавр и т.д. (обзор рынка и сравнительный анализ возможностей выполнены, например, Д.С. Сильвестровым [1988], С.А. Айвазяном и В.С. Степановым [1997, URL] и др.).

Большинство перечисленных продуктов имеют внутренние языки программирования и инструментальные средства визуализации информации, импорта/экспорта данных, поэтому технология создания ЭИС сводится к выбору наиболее подходящих программных продуктов, их приобретению и последующей адаптации с целью создания действительно интегрированной системы.

На сегодняшний день одной из самых трудно решаемых проблем при разработке интеллектуальных приложений, подобных ЭИС, является формализация предметной области в виде N-мерной информационной модели. По определению, любая модель ограничена, т.к. отбрасываются незначительные детали и выделяется суть. Именно тут и проявляется первая из проблем – оценить что важно для решения поставленной задачи, а что нет?

Согласно терминологии, принятой в теории информатики, база данных – это «идентифицируемая совокупность взаимосвязанных данных, предназначенных для многоцелевого использования» [ГОСТ 14.413-80]. По теории реляционных баз данных имеется обширная литература, как изданная традиционным "бумажным способом" [Дейт, 1998; Пушников, 1999 и др.], так и представленная на страницах Интернет (например, on-line библиотека Центра Информационных Технологий – <http://www.citforum.ru>). Применительно к региональным ЭИС, под базой данных будем понимать реализованную с помощью технических средств динамическую информационную модель территории, отражающую пространственно-временную структуру, состояние и взаимосвязи между отдельными элементами моделируемой экосистемы. Разрабатываемый в Институте экологии Волжского бассейна РАН пространственно-распределенный банк экологических и экономических данных [Моисеевкова, Шитиков, 1989; База эколого-экономических..., 1991; Rozenberg, Shitikov, 1993; Розенберг с соавт., 1995; Rozenberg, 1995] включает в себя следующую иерархию баз, образно интерпретируемую как "экологическая матрешка":

- комплексную базу данных, охватывающую территорию 24 областей и автономных республик Волжского бассейна (более 90% территории);
- локальные базы по территориям Самарской, Ульяновской, Саратовской и других областей;
- частные базы данных, описывающие либо отдельные регионы (например, г. Тольятти и прилегающую территорию Ставропольского района), либо специализированные ресурсно-тематические блоки (например, динамику гидрологических характеристик Куйбышевского водохранилища).

Естественно, что при создании таких ансамблей баз данных ключевое место уделяется процессам агрегирования информации в ходе ее прохождения от максимально детализованных баз нижнего уровня к комплексным базам высшего уровня. Одной из типичных баз нижнего уровня является специализированная база гидробиологических данных региона (ограниченного в этом случае малыми реками Самарской области), которую мы рассмотрим в качестве примера [Экологическое состояние..., 1997; Зинченко, Шитиков, 1999].

Состав и структура гидробиологической базы данных

Разработанная информационная система предназначена для ведения и оперативной выборки гидробиологических, гидрохимических и гидрологических данных, необходимых для комплексного анализа структурных деформаций, проходящих в изучаемой экосистеме под влиянием

антропогенных воздействий, и сравнительной оценки роли гидробионтов в самоочистительных процессах водотоков. База данных объединяет гидробиологические наблюдения, проведенные на 34 малых реках разного типа и уровня антропогенной нагрузки, расположенных в степной и лесостепной зонах Самарской области (см. схему на рис.1.8).

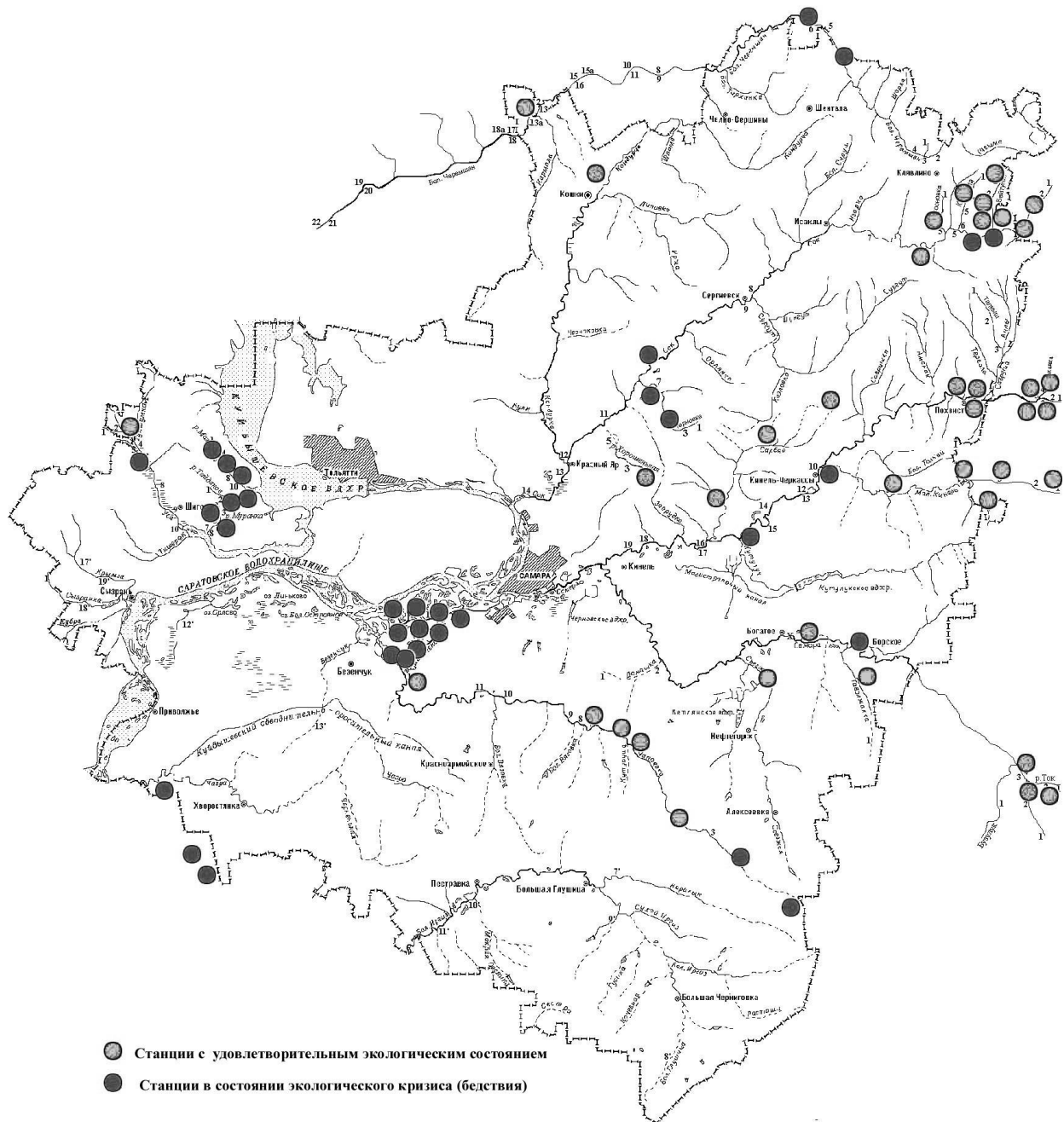


Рис. 1.8. Схема малых рек Самарской области (показаны только станции наблюдений с достоверно оцененной экологической ситуацией)

Почти все современные СУБД основаны на реляционной (relational) модели управления базами данных, которая использует следующую терминологию:

- *отношение* (relation) – информация об объектах одного типа, например, о биологических видах, точках взятия пробы или графиках экспедиций (в реляционных базах данных отношения обычно хранятся в виде таблиц);
- *атрибут* (attribute) – определенная часть информации о некотором объекте, например, даты экспедиций или численности гидробионтов (атрибут обычно хранится в виде столбца или поля таблицы);

- *связь* (relationship) – способ, которым информация в одной таблице связана с информацией в другой таблице (например, у точек отбора проб с конкретными измерениями тип связи "один-ко-многим", т.к. в одной точке можно сделать много проб, но любая проба соотносится только с одной точкой измерения);
- *объединение* (join) – процесс объединения таблиц на основе совпадающих значений специально выделенных ключей-идентификаторов (например, информация о гидробиологических пробах может быть объединена с гидрохимическими данными по порядковому номеру экспедиции и дате измерения).

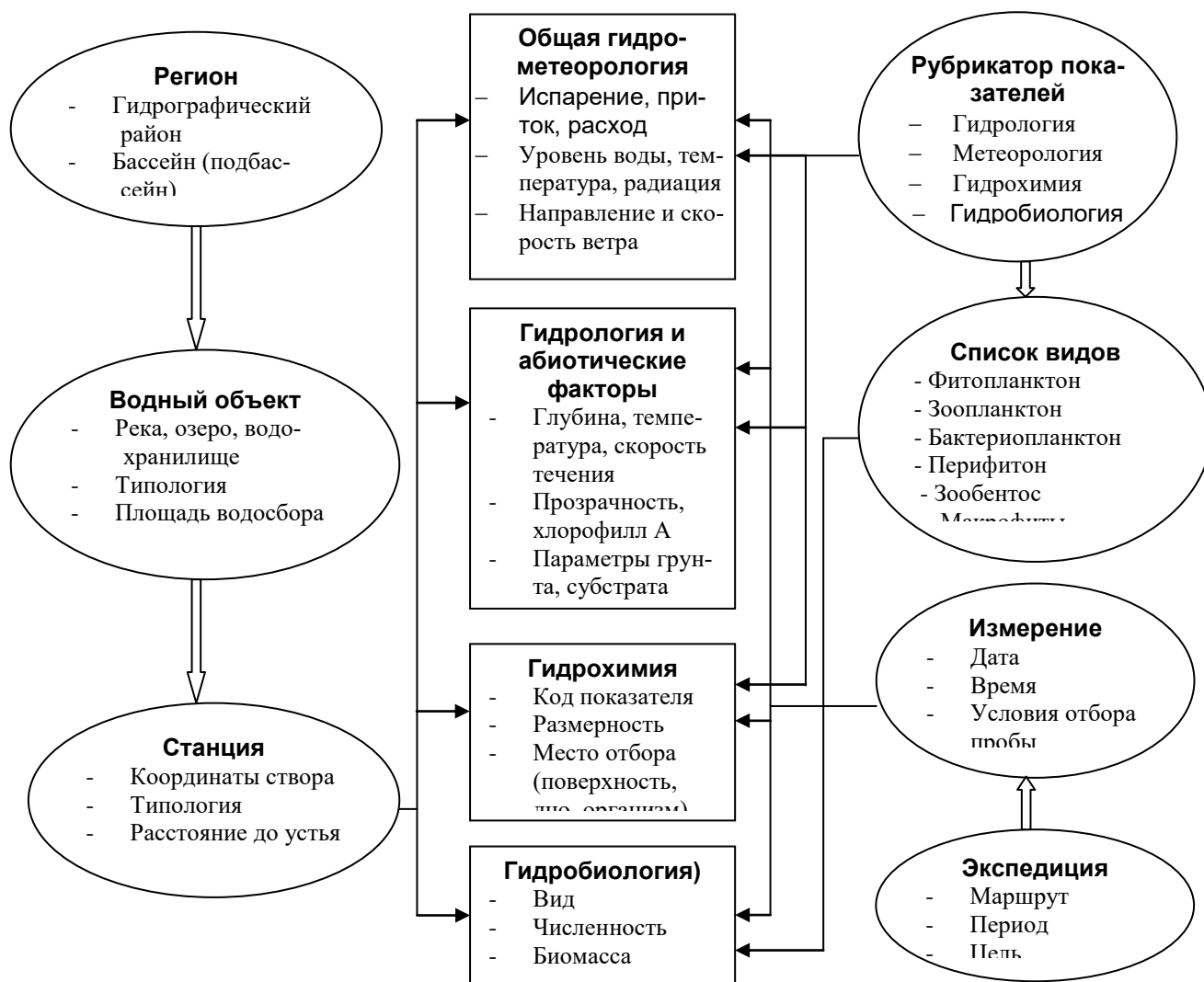
Рассматриваемая база гидробиологических данных представляет собой совокупность реляционных таблиц в формате СУБД (MS Access 97), где каждое отдельно взятое наблюдение (гидрохимический показатель или параметр обилия каждого вида в конкретной гидробиологической пробе) информационно связано со спецификацией водоема, координатами и характеристиками точки отбора проб (*географический аспект*), а также датой проведения экспедиции (*временной аспект*).

Обобщенная информационная модель базы данных, представленная на рис 1.9, состоит из двух типов таблиц: таблиц-справочников условно-постоянного назначения, необходимых для точной рубрикации хранимых показателей (изображены овальными элементами), и информационных таблиц с первичными результатами наблюдений в период экспедиционных исследований (изображены прямоугольниками).

Рис. 1.9. Информационная модель специализированной базы гидробиологических данных по Самарской области

Для каждой пары таблицы устанавливался определенный тип отношений и технология реализации связи в виде первичных и вторичных ключей. Во всех случаях использовался тип связи "один-ко-многим", ориентированный на рис. 1.9 по направлению стрелки. Например, для каждого *водного объекта* (в частности, реки) определяется некоторое подмножество "дочерних элементов" – *станций*, соответствующих пунктам отбора экспедиционных проб или постоянно действующих постам ГМО, которые не могут принадлежать никакому другому "родительскому" объекту. В тоже время, каждая река принадлежит одному "родителю" – *региону*, объединяющему некоторое подмножество рек.

Таблицы содержательной части базы, включающие измеренные метеорологические, гидрологические гидрохимические и гидробиологические данные, кроме самого значения показателя содержат ссылки на записи справочных таблиц *Станция*, *Измерение* и *Рубрикатор показателей* (для гидробиологических данных – *Список видов*). В частности, раздел данных по макрозообентосу, который является предметом дальнейшего рассмотрения, включает данные мониторинга по 571 пробе, взятой на 247 станциях за период с 1987 по 2001 гг. Информационные описания гидробио-



логических объектов в точках наблюдения формируются из значений численности и биомассы 580 видов, принадлежащих к различным таксономическим группам зообентоса. Аналогичной является структура данных о представленности других биотических сообществ: фитопланктона, бактерий, зоопланктона, рыб и т.д.

На рис. 1.10 приведен пример представления гидробиологического блока данных на видеограмме информационной системы, сформированной по конкретному запросу пользователя: на экран дисплея выводится видовой состав, численность и биомасса зообентоса по результатам отбора одной из проб на р. Чапаевка.

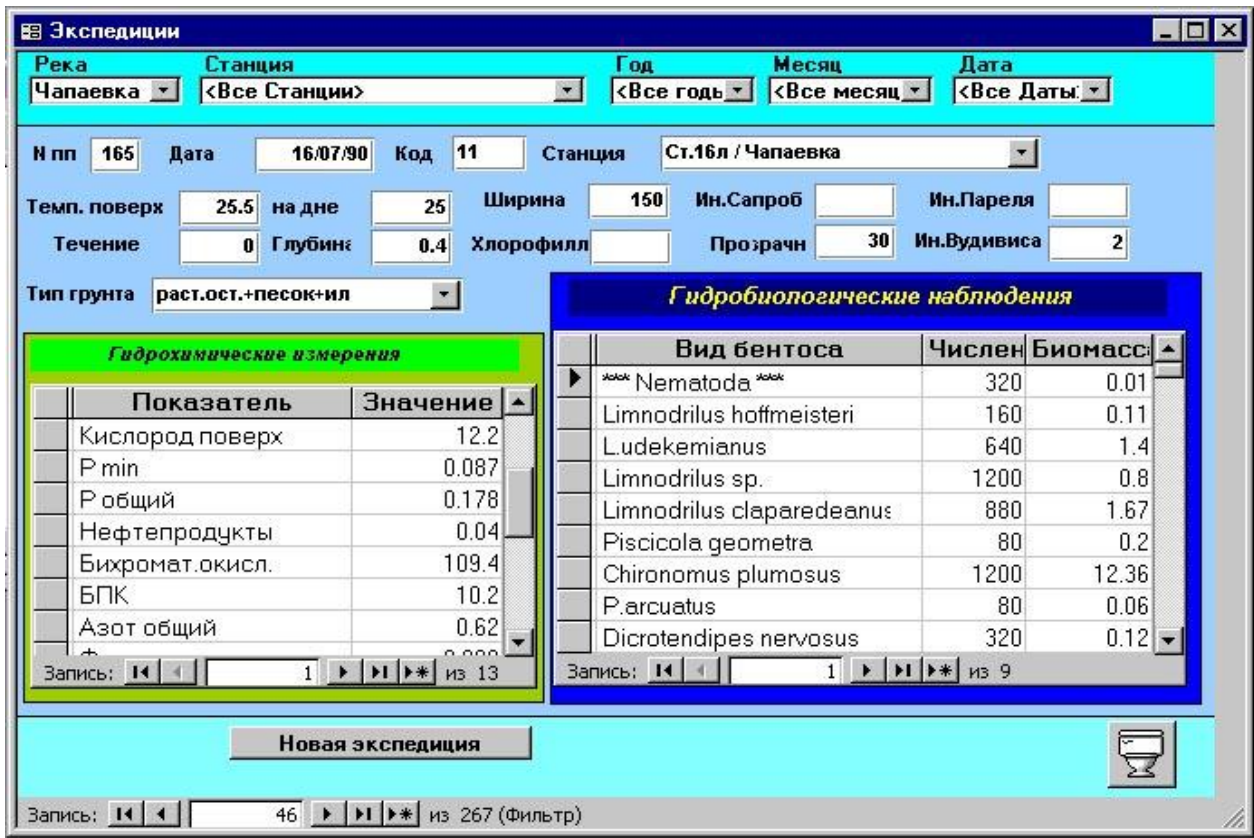


Рис. 1.10. Электронная форма фрагмента базы данных по одному наблюдению

Совокупности количественных гидробиологических показателей, определенных для каждого измерения, ставится в соответствие некоторое множество гидрометеорологических, гидрологических и гидрохимических данных, сопряженных по точке и времени взятия пробы. Приведем основные фрагменты рубрикатора по этим разделам:

- *общие и суммарные гидрохимические показатели:* минерализация, общая жесткость, водородный показатель (рН), окислительно-восстановительный потенциал (еН), взвешенные вещества, сухой остаток, растворенный кислород, окисляемость перманганатная и бихроматная (ХПК), биохимическое потребление кислорода (БПК_п, БПК₅), сумма ионов;
- *концентрации неорганических веществ:* азот нитритный, азот нитратный, азот аммонийный, сумма минерального азота, фосфор общий, фосфаты минеральные, сульфаты, сульфиты, сероводород и сульфиды, хлориды, активный хлор, кальций, магний, цинк, железо, медь, никель, ртуть, свинец, хром, кадмий, кобальт, марганец, мышьяк, олово, свинец;
- *концентрации органических веществ:* нефтепродукты, фенолы, пестициды, формальдегид, углеводы, синтетические поверхностно-активные вещества (СПАВ), смолистые вещества, хлорированные фенолы и бифенилы, α-гексахлорциклогексан;
- *сопряженные гидрологические и гидрофизические показатели:* скорость течения, глубина водоема в месте отбора пробы, температура воды в придонном слое, электропроводность воды, органолептические наблюдения (запах, мутность, цветность, прозрачность);
- *общие гидрометеорологические и гидрологические показатели:* испарение зеркала водоема, сток с плотины, уровень воды в водоеме (среднемесячный, максимальный и минимальный за период), приход воды по руслу, суммарный расход воды, температура воды на метеопосту, температура атмосферного воздуха, суммарная радиация, направление ветра, его скорость и повторяемость.

Для работы с базой данных разработано программное обеспечение, реализующее традиционные в таких случаях функции:

- загрузка данных в базу, их верификация и корректировка;

- многоаспектный поиск и формирование в режиме диалога подмножества показателей по имеющимся рубрикационным полям;
- получение расчетных таблиц оценки структурных характеристик и составляющих энергетического баланса для изучаемых групп гидробионтов;
- графическое отображение на экране дисплея диаграммы пространственного распределения каждого показателя базы по створам русла водотока;
- получение новых (интегральных) показателей путем линейной комбинации подмножества других показателей, имеющихся в базе, либо по иным расчетным формулам;
- математическая обработка показателей базы с целью экологического районирования водохозяйственной системы, выявления участков водотоков, подверженных наибольшему антропогенному воздействию, оценки биотического и гидрохимического состояния природных водоемов.

Оперативная аналитическая обработка данных

Выборка показателей базы данных, предназначенная для математической или аналитической обработки почти всегда представляет собой прямоугольную таблицу. Если значения измеряемых переменных располагать в столбцах, то число таких столбцов может достигать нескольких сотен – по числу переменных. Каждая строка в такой матрице будет содержать измеренные значения упомянутых переменных в одной пробе, отобранной в определенный момент времени в определенном месте. Понятно, что число таких строк может также измеряться сотнями. Иначе говоря, исходные данные, полученные по программе мониторинга, представляют собой матрицу размерности $m \times n$, где m – число строк, n – число столбцов, и размерность эта весьма велика (см. рис. 1.11).

Идентификатор наблюдения			Гидрология	Гидрохимия	Гидробиология		
Реки	Станции	Даты экспедиции			Группа 1	Группа n
34 реки	247 станций	571 проб наблюдений	12 показателей	18 показателей	43 группы		
			580 Видов (N и B)				
Всего матрица наблюдений: 571 × 1200							

Рис. 1.11. Схема представления информации по разделу базы данных "Зообентос" в виде матрицы

Как было отмечено выше, созданию баз данных сопутствует разработка приложений и технологий, которые, в извечной борьбе математиков с "проклятием размерности", обеспечивают возможность манипулирования и анализа многомерной информации, т.е. то, что объединяется в настоящее время термином «Оперативная аналитическая обработка данных» (англ. – OnLine Analytical Processing или **OLAP**-технология). Анализируемая информация представляется в виде многомерных гиперкубов, где измерениями служат показатели исследуемого объекта, а в ячейках содержатся агрегированные данные (см. рис. 1.12).

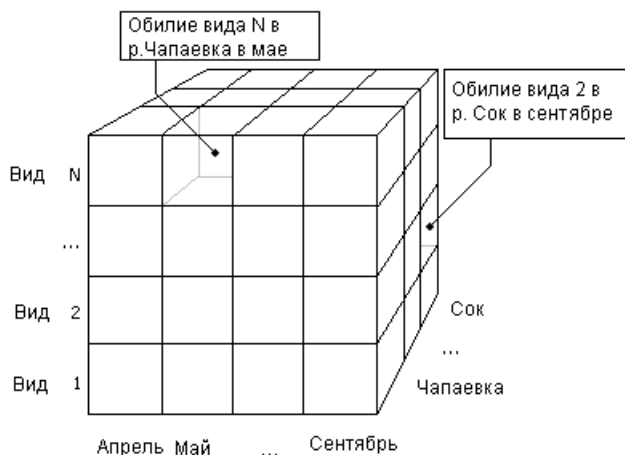


Рис. 1.12. Представление данных об обилии видов в OLAP-кубе в разрезе рек и с разбивкой по месяцам

Очевидно, что некорректные исходные данные приводят к некорректным выводам. Поэтому важнейшим этапом анализа данных является их комплексная

предварительная обработка: сглаживание, удаление шумов, редактирование аномальных значений, заполнение пропусков и многое другое. При этом используются алгоритмы робастной фильтрации, спектрального и вейвлет-анализа, последовательной рекуррентной фильтрации, статистического анализа. Если при этом каждое поле анализируемого набора обрабатывается независимо от остальных, то такая предобработка получила название парциальной. Более широкая трактовка термина "препроцессинг" соответствует разведывательному анализу данных, в рамках которого осуществляется отбор информативных признаков и понижение размерности входных данных путем устранения незначимых факторов. Описание конкретных алгоритмов, используемых для этих целей, и примеры их использования представлены в части 3 настоящей книги.

На пути к межрегиональным информационным системам

Дальнейшее развитие информационных и Интернет-технологий неизбежно приведет к работам по созданию федеральных и всемирных систем, обеспечивающих доступ заинтересованных лиц и организаций к данным мониторинга окружающей среды любого уровня детализации. Более того, такие работы уже активно ведутся. В этой связи представляет безусловный интерес для широкого круга практических работников и научной общественности информационная система "ЭКОЛОГИЯ ПРЕСНЫХ ВОД РОССИИ" (<http://www.ecograde.bio.msu.ru/index.htm>), разработанная на кафедре общей экологии Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова (руководители проекта В.Н. Максимов, В.А. Абакумов, А.П. Левич и Н.Г. Булгаков).

Информационная система включает в себя следующий набор данных:

- качество пресных вод по гидробиологическим показателям (индексы сапробности для фитопланктона, зоопланктона и перифитона; биотический и олигохетный индексы для зообентоса; классы качества вод);
- экологические группировки гидробионтов и их функциональные характеристики (фитопланктон, зоопланктон, бактериопланктон, перифитон, зообентоса, макрофиты, пигментный состав микроводорослей);
- физико-химические характеристики водной среды (гидрохимические показатели, загрязняющие вещества, гидрологические параметры, температура воды).

В версии информационной системы за 2000 г. представлены:

- база данных качества пресных вод по гидробиологическим показателям за 1976-95 гг. по Азовскому, Каспийскому, Карскому, Баренцеву, Восточно-Сибирскому и Тихоокеанскому гидрографическим районам (около 13 700 записей, относящихся к 60 бассейнам и подбассейнам, 400 водным объектам и 3000 створам наблюдений);
- база первичных гидробиологических данных о месте, дате и условиях отбора проб, таксономической принадлежности, численностях, биомассах, числе видов всех экологических групп гидробионтов, а также о пигментном составе по Азовскому (1978-87, 1991 и 1994 гг.), Каспийскому (1976, 1979-82, 1988-89, 1992 и 1995 гг.) и Карскому (1995 и 1996 гг.) гидрографическим районам (64 913 записей о 1 273 видах гидробионтов из 10 бассейнов и подбассейнов, 46 водных объектов и 250 створов наблюдения);
- база физико-химических данных о текущих, среднегодовых и экстремальных значениях примерно 80 характеристик, включающих гидрохимию, концентрации загрязняющих веществ, а также расходы и температуру воды, по Баренцеву, Азовскому, Каспийскому, Карскому, Восточно-Сибирскому и Тихоокеанскому гидрографическим районам за 1975-98 гг. (около 7 849 записей из примерно 200 водных объектов и 500 створов наблюдения).

Данные сопровождаются подробным набором картосхем с точной идентификацией точек отбора проб и маршрутов измерений.

В определенном смысле, "классикой жанра" являются работы по созданию гидробиологической информационной системы оз. Байкал, осуществляемые, начиная с 70-х годов, Иркутским государственным университетом совместно с институтами СО РАН [Кожова, Павлов, 1985; Методология оценки..., 2000]. Разработанная база данных характеризуется продуманной организацией компьютерной обработки результатов режимных наблюдений фитоценозов и зоопланктонных сообществ на протяжении длительного периода времени (динамические ряды более 50 лет). Гидробиологические измерения сочетаются в базе с данными наблюдений развитой системы гидрохимического мониторинга, охватывающей широкий диапазон ингредиентов и характеризующейся высоким уровнем точности. Композиционная целостность и репрезентативность базы данных яви-

лись основой для математического моделирования сезонной динамики экосистемы и процессов массопереноса в озере [Меншуткин с соавт., 1978, 1981; Приемы прогнозирования..., 1985].

1.7. Примеры использования ГИС-технологий в экологии

Мем № 8: *«В основе районирования лежит представление о том, что географическая оболочка состоит из качественно различающихся частей, относительно стабильных в течение некоторого периода времени. Это объективно существующее явление называется пространственной географической дифференциацией»* А.И. Баканов [1990].

Развитие визуальной интерпретации многомерных данных и ГИС-технологий связано, в частности, с тем, что человеку с его ограниченным трехмерным пространственным воображением сложно, а в большинстве случаев невозможно, анализировать и давать обобщенные оценки многомерным объектам.

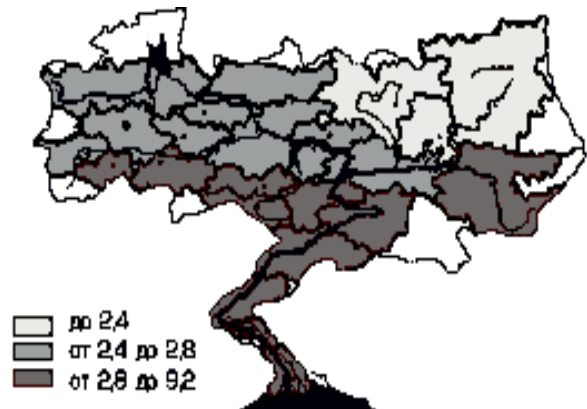
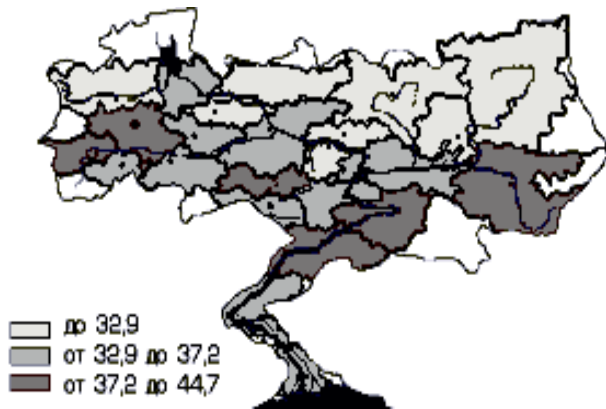
Одним из первых опытов комплексного анализа пространственно распределенной информации явились поэтапные работы Института экологии Волжского бассейна РАН на примере данных о состоянии экосистем г. Тольятти, Самарской области и всего Волжского бассейна, выполняемые с 1989 г. [Моисеенкова, Шитиков, 1989; Розенберг с соавт., 1991, 1995, 2000; Розенберг, Краснощеков, 1996; Краснощеков, Розенберг, 1999 и др.].

Эколого-экономическая информация по Волжскому бассейну, представленная на Интернет-странице <http://www.ecology.samara.ru/docs/docs-1/volga.asp>, собиралась в виде различного рода карт распределения тех или иных параметров (рабочие масштабы - 1:2 500 000 и 1:4 000 000). "Масштаб" компьютерных карт, примерно, равен 1:10 000 000. Вся территория Волжского бассейна была разделена на 210 квадратов, каждый площадью около 6.5 тыс. км² (примерно 80x80 км). Всего ЭИС "REGION-VOLGABAS" содержала 509 предметных слоев карты, из которых 85 составили обобщенные показатели.

Пространственно распределенная информация ЭИС "REGION-VOLGABAS" охватывала следующий рубрикатор природных компонент:

- климат территории Волжского бассейна (особенности распределения температуры воздуха и количества осадков, а также ветрового режима);
- географо-геологическое описание (орография, дочетвертичный и четвертичный периоды развития региона, основные черты тектоники) и геохимическая обстановка;
- почвы и ландшафты Волжского бассейна, наличие особо охраняемых природных территорий;
- лесные ресурсы и распределение естественной растительности;
- животный мир Волжского бассейна (видовое распределение и фаунистические комплексы наземных позвоночных и птиц);
- население (демографическая ситуация в Волжском бассейне и степень урбанизации территории).
- гидрология и гидрохимическое качество вод р. Волги и ее водохранилищ;
- гидробиоценозы и их компоненты (фитопланктон, зообентос, водяные клещи, инфузории, микроскопические водные грибы, рыбные запасы бассейна Волги);
- оценки качества воды и степени эвтрофикации Волжских водохранилищ по видам биоиндикаторам.

Перечисленные данные позволили подробно проанализировать распределение по территории региона природно-климатических факторов, ландшафтной изменчивости и биологических ресурсов (см. [Розенберг, Краснощеков, 1996]). В качестве примера на рис. 1.13 показано территориальное распределение видового разнообразия основных групп животных, которое положительно коррелирует с климатическими особенностями, ландшафтным разнообразием и географическим расположением каждой области.

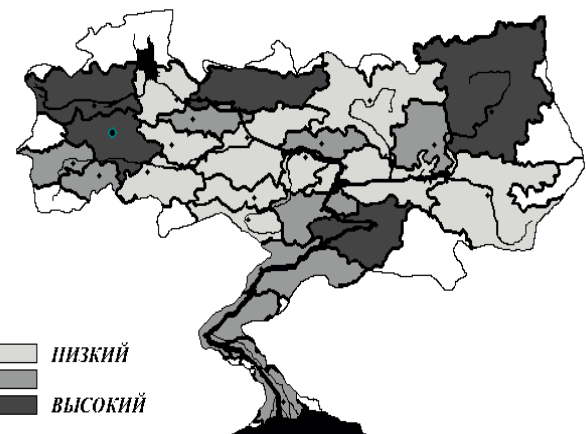


б) Видовое разнообразие пресмыкающихся

а) Видовое разнообразие млекопитающих



в) Комплексный выброс загрязняющих веществ на ед. площади



г) Обобщенный показатель смертности детей до 1 года

Рис. 1.13. Распределение некоторых показателей эколого-информационной системы "REGION-VOLGABAS" по территории Волжского бассейна

Обширные рубрики накопленных данных детально описывали распределение по территории техногенной нагрузки и антропогенных воздействий, в том числе:

- загрязнение воздушного и водного бассейна;
- распределение отходов производства и коммунального хозяйства (включая особо опасные вещества для состояния экосистем и здоровья человека);
- радиационная обстановка, места техногенных аварий и природных катастроф;
- транспортная и рекреационная нагрузка;
- сельскохозяйственная нагрузка (включая распределение по территории бассейна минеральных удобрений, распаханности территории, животноводческой и пестицидной нагрузок).

Состояние здоровья населения, как критерий оценки качества среды, в рамках ЭИС "REGION-VOLGABAS" включало следующие параметры:

- общая заболеваемость взрослого населения (смертность, естественный прирост населения, оценки заболеваемости от "экологически обусловленных" нозологий);
- здоровье матери и ребенка (рождаемость, смертность детей до года, общая заболеваемость детей, в том числе, от "экологически обусловленных" нозологий);

- инфекционные и паразитарные болезни, частота злокачественных новообразований;
- общее состояние системы здравоохранения.

Некоторые примеры пространственного распределения по территории региона обобщенных показателей антропогенного воздействия и здоровья населения представлены на рис. 1.13.

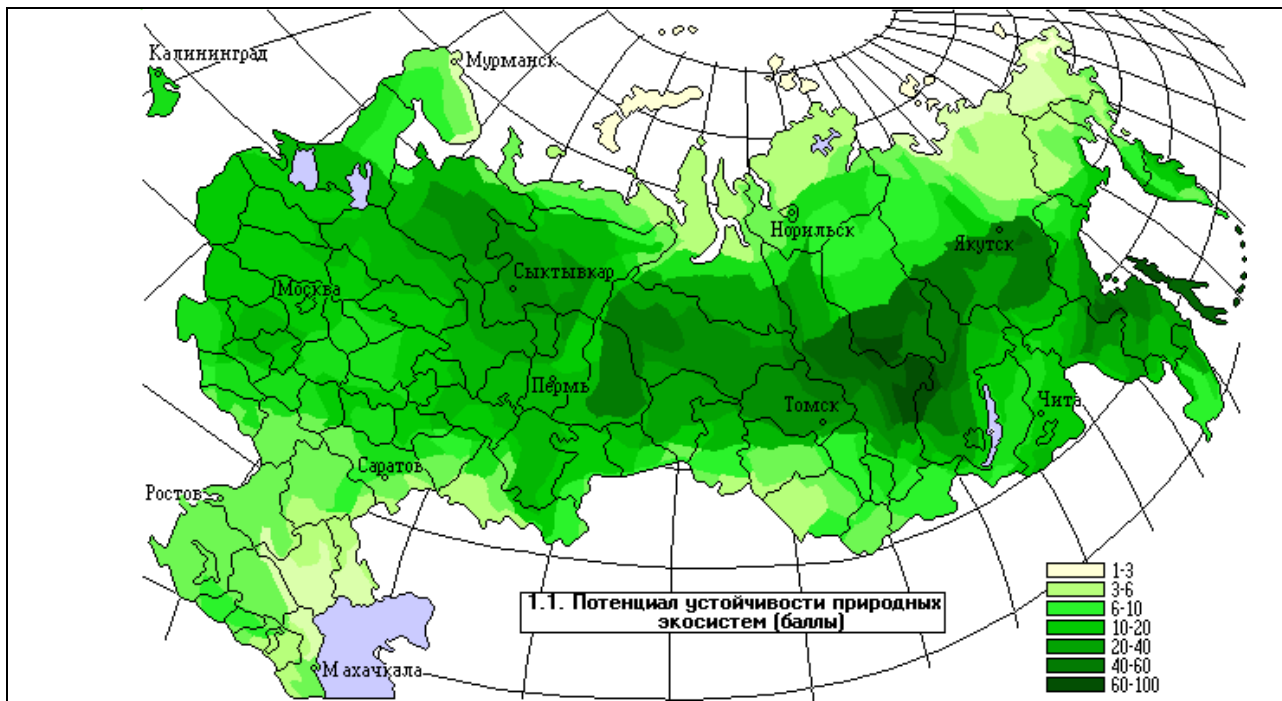
В составе программного обеспечения "REGION-VOLGABAS" была разработана процедура генерации обобщенных критериев в виде линейной комбинации исходных показателей, предварительно преобразованных в дискретную форму. Для математической обработки данных, хранящихся в ЭИС, кроме общепринятых методов многомерного статистического анализа (регрессионный анализ, различные алгоритмы обработки временных рядов, кластерный анализ и т.д.), использовались алгоритмы построения прогнозирующих моделей по методу самоорганизации (метод группового учета аргументов, эволюционное моделирование). Была разработана эвристическая процедура "модельного штурма" [Брусиловский, Розенберг, 1983; Розенберг с соавт., 1994а], реализующая синтез модели-гибрида из частных моделей-предикторов⁸.

Наличие перечисленных данных и алгоритмов их обработки дало возможность решать задачи комплексного анализа состояния экосистем региона, оценивать характер совокупной антропогенной нагрузки, с помощью модельных "сценариев" осуществлять прогноз развития экологической обстановки и на этой основе предложить ряд рекомендаций по направлениям устойчивого эколого-экономического развития и социально-экологической реабилитации территорий [Розенберг с соавт., 1994б; Розенберг, Краснощекоев, 1996]. Работы по Самарской области и программе «Возрождение Волги» были отмечены первой премией Минэкологии СССР в 1991 г.

Другим уникальным для России примером анализа картографической информации практически по тому же набору показателей, что и описанная выше ЭИС, является сайт В. Артюхова *Practical Science – Популярная наука* (www.sci.aha.ru). Группа ученых в рамках проекта ГЭФ "Биоразнообразие" и при идеологическом участии Ю.А. Урманцева, предоставила для свободного доступа более 65 Мб полезной информации научно-прикладного характера – справочники, карты, базы данных, программы, анализ, обзоры, в том числе:

- Web-Атлас "Россия как система" – взгляд на Россию с теоретических позиций, содержащий более 100 сюжетов, 100 карт и диаграмм;
- Web-Атлас "Окружающая среда и здоровье народа России", в котором рассматриваются, в первую очередь, комплексные факторы и причины, определяющие здоровье нации (около 200 сюжетов, более 400 карт и диаграмм);
- "Россия в цифрах" – интерактивная он-лайновая база данных со свежими и полными статистическими материалами для всех регионов России (28 рубрикационных разделов содержат 4320 рядов);
- сервер "BioDat" – крупнейший информационный сервер по живой природе, содержащий документы, учебники, базы данных, картографию и предоставляющий коллективную работу в сети;
- проект "Живая природа и биоразнообразие России" – оригинальный массив информационных ресурсов, посвященный состоянию живой природы и множеству влияющих факторов (более 240 сюжетов, 320 карт и диаграмм).

⁸ *Предиктор* – математическая модель, т.е. некоторое уравнение, приближенно описывающее динамический ряд, с помощью которого строится прогноз [Приемы прогнозирования..., 1985].



а) Распределение потенциала устойчивости экосистем по территории России



б) Распределение антропогенных воздействий на экосистемы по территории России

Рис. 1.14. Распределение некоторых показателей устойчивости экосистем по территории России, полученное в он-лайн-ово́й картографической системе (www.sci.aha.ru)

На сайте имеется картографический генератор DataGraf.Net, являющийся уникальной он-лайн-ово́й картографической системой, позволяющей любому заинтересованному пользователю "на лету" построить собственную карту по любому набору показателей из вышеперечисленных предметных областей (всего каждый желающий может построить до 97650 карт).

Например, для карты, характеризующей интегральный потенциал самоорганизации и устойчивости природных экосистем (рис. 1.14а), может быть использован комплекс следующих пяти показателей, характеризующих массу, продуктивность и структурное биоразнообразие фитоценозов:

- запас живой фитомассы и ее годовая продукция (тонн/га) из книги "Состояние биологических ресурсов и биоразнообразия России и ближнего зарубежья (1988-1993 гг.)" [1994];
- антропогенная трансформация естественного растительного покрова (%) и оценки сбалансированности экосистем по структуре накопления живого органического вещества. и структуре видовых комплексов из книги "Атлас биологического разнообразия лесов Европейской России и сопредельных территорий" 1996 г.

Аналогичным образом может осуществляться районирование России по степени антропогенной нагрузки – см. рис. 1.14б, где приведен обобщенный показатель потребления различных видов топлива и энергии (тонн условного топлива в год) по материалам топливно-энергетического баланса за 1995 г.

Карты на авторском сайте, приведенные нами в качестве примеров, подробным образом комментируются.

Множество слоев графических отображений в пространстве исходных переменных, как правило, не бывает информативным. Картографическая визуализация позволяет анализировать многомерные данные с помощью их преобразования в пространство низкой размерности с сохранением существенных для исследования структурных особенностей информации. На рис. 1.13-1.14 приведены примеры конструирования новых обобщенных показателей на основе простого суммирования баллов. Как будет показано в главе 7, свойствами наименьшего искажения геометрической структуры исходных данных обладают подпространства, основанные на первых 2-3-х главных компонентах и полученные, в частности, линейными методами факторного анализа.

С использованием таких статистических методов снижения размерности был выполнен комплекс работ по исследованию и прогнозированию сложной медико-экологической ситуации, сложившейся в условиях радиационного и техногенного загрязнения районов Украины, пострадавших в результате Чернобыльской катастрофы [Сердюккая, Каменева, 2000]. Например, на рис. 1.15 показаны варианты двухмерной и трехмерной визуализации распределения по территории Житомирской области фактора внутреннего радиационного загрязнения, основанного на 8 индивидуальных показателях (плотность выпадения радионуклидов на почву, их содержание в молоке, картофеле, индивидуальные дозы облучения и т.д.)

Интересен опыт геоинформационной поддержки системы биологического мониторинга городской территории, внедренной лабораторией биоиндикации Калужского ГПУ им. К.Э. Циолковского. Для этой цели разработаны оригинальные алгоритмы и методы площадной оценки и районирования территорий на основе картографической программы MapInfo Professional 4.5, относящейся к классу профессиональных ГИС. Информация формируется в виде различных вариантов карт экологической обстановки: а) подробная информация по каждой точке территории; б) районирование для укрупненных управленческих решений; в) оценка деформаций от конкретных источников воздействия [Стрельцов с соавт., 1995; Шестакова с соавт, 1998].

Алгоритмы, встроенные в ГИС, выполняют интерполяцию значений отображаемого показателя по узлам сети с использованием различных математических методов (решение систем линейных уравнений, алгоритм сведения треугольников, метод обратного расстояния и т.д.), в результате чего формируется визуальное отображение фактора в виде изолиний или трехмерных поверхностей распределения. Послойное наложение оригинального расчетного слоя изолиний на слой картографических объектов (дорожную и речную сеть, лесные массивы, постройки) позволяет получить более информативное и наглядное распределение изучаемого показателя по территории местности (см. рис.1.16). Подробную информацию читатель может получить на сайте Интернет <http://kspu.kaluga.ru/biomon>.

Обобщенные индексы загрязнения

Житомирская область (Лугинский, Народичский, Овручский и Олевский районы)

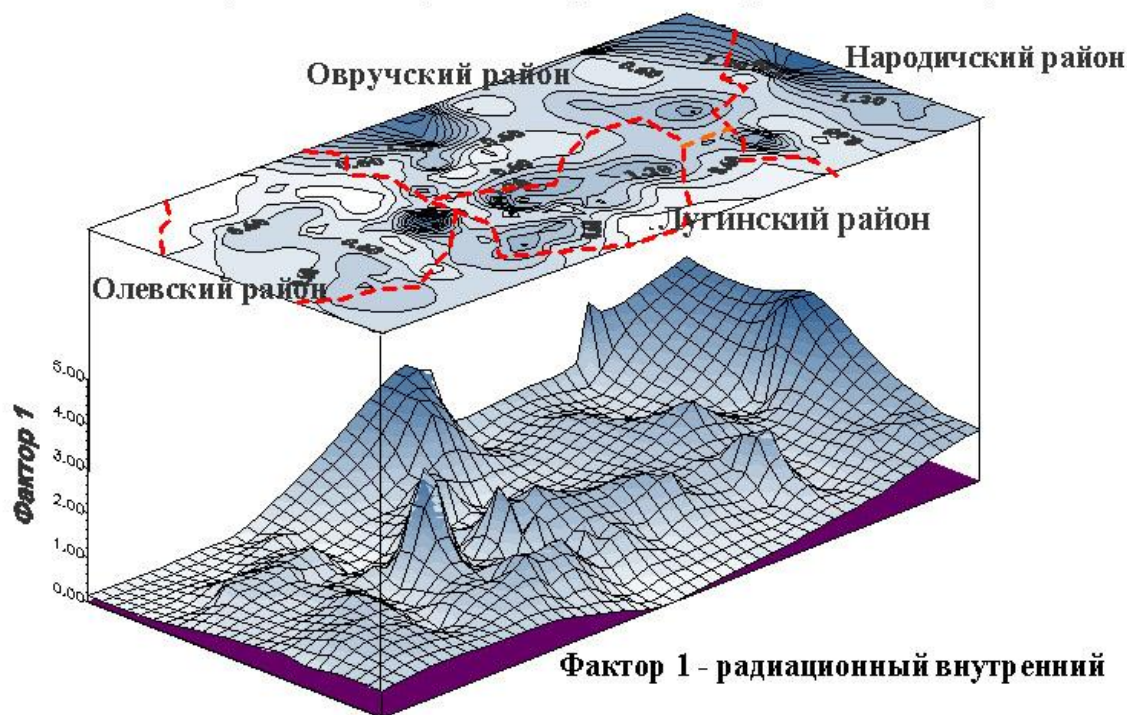


Рис. 1.15. Фрагмент двухмерной и трехмерной моделей распределения фактора радиации по территории в зоне аварии на ЧАЭС [Сердюцкая, Каменева, 2000]

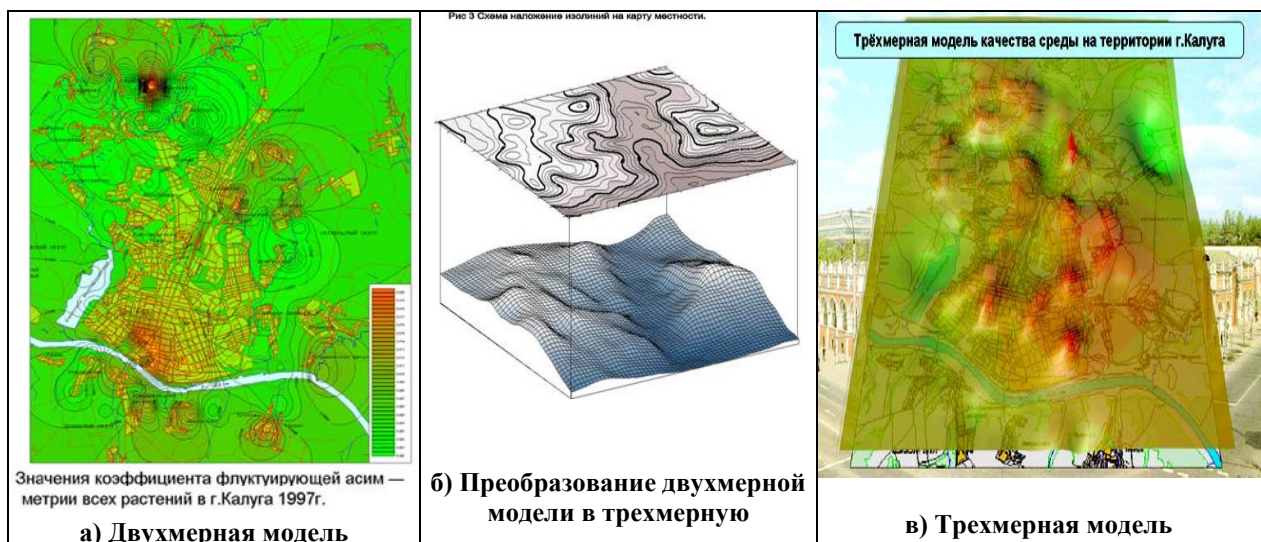


Рис. 1.16. Распределение экологических показателей по территории города – двухмерная и трехмерная модели [по материалам лаборатории биоиндикации Калужского ГПУ им. К.Э. Циолковского]

Детальный анализ концепций и перспектив использования картографо-геоинформационного обеспечения для устойчивого развития территорий можно найти, например, в книге В.С. Пикунова и Д.А. Цапука [1999].

Безусловный интерес может также вызвать опыт оценки территории и поверхностных водоемов с использованием данных аэрокосмического мониторинга [Красовский, без года].

Глава 2. Методы математического моделирования экологических систем

2.1. Основные понятия системной экологии

Мем № 9: «Любая единица (биосистема), включающая все совместно функционирующие организмы (биотическое сообщество) на данном участке и взаимодействующая с физической средой таким образом, что поток энергии создает четко определенные биотические структуры и круговорот вещества между живой и неживой частями, представляет собой экологическую систему, или экосистему... Экосистемы представляют собой открытые системы, поэтому важной составной частью концепции является среда на входе и среда на выходе» Ю. Одум [1986].

Изданная в 1971 г. и переведенная на русский язык в 1975 г. книга Ю. Одума "Основы экологии" стала первой монографической работой, в которой системный подход был поставлен "во главу угла" экологии. Его сущность в концентрированной форме сводится к двум тезисам:

- экологическая система представляет собой "преобразователь" вещества и энергии (см. рис. 2.1), причем для каждого ее компонента могут быть рассчитаны составляющие материально-энергетического баланса;
- живые организмы и их абиотическое (неживое) окружение неразделимо связаны друг с другом и находятся в постоянном взаимодействии с целью поддержания гомеостаза⁹.

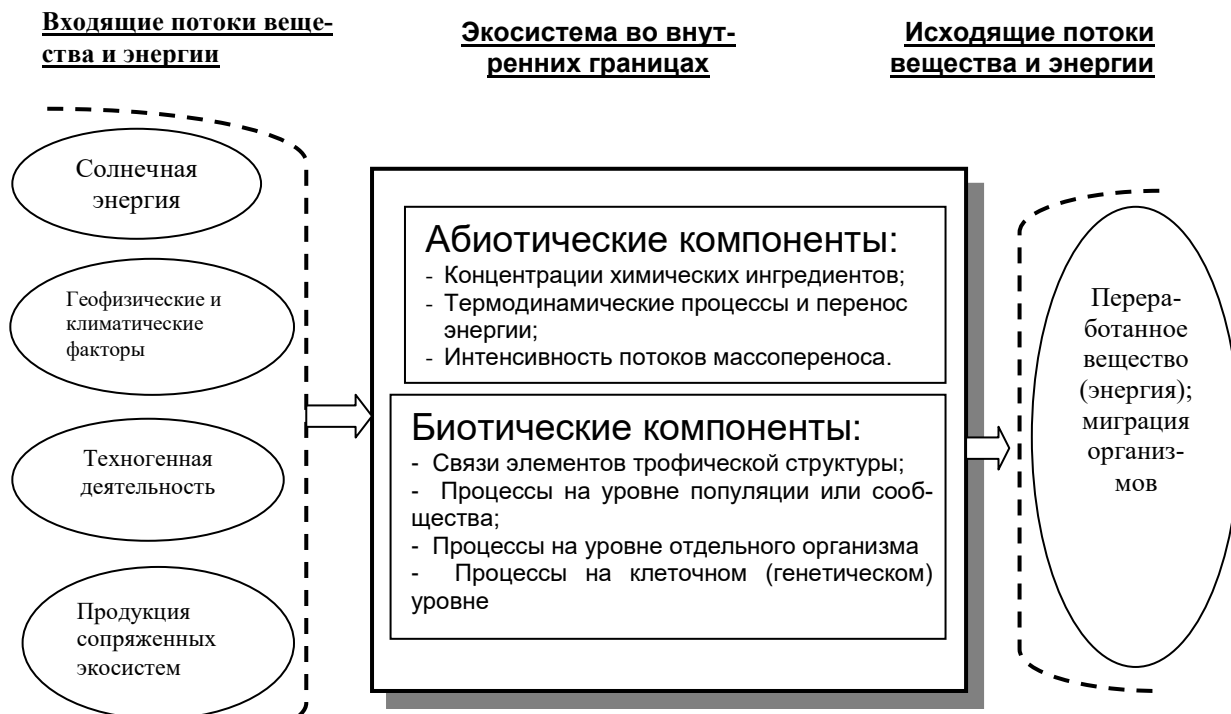


Рис. 2.1. Взаимосвязь компонентов экосистемы с окружающей средой

⁹ Гомеостаз, гомеостазис (от греч. *hómoios* – подобный, одинаковый и *stásis* – состояние, неподвижность) – относительное динамическое постоянство состава и свойств внутренней среды и устойчивость основных физиологических функций организма человека, животных... [БСЭ, URL]

После этого появился еще ряд крупных работ, в которых подробно обсуждались различные аспекты системной экологии (например, [Куркин, 1976; Федоров, Гильманов, 1980; Джефферс, 1981; Флейшман, 1982]). Библиография по этой проблеме достаточно велика. Подробное описание теоретических конструкций и ретроспективный анализ развития концептуальных представлений системного подхода в общей экологии можно найти и в работах одного из соавторов настоящей монографии [Розенберг, 1984; Розенберг с соавт., 1999].



Стефан Альфред ФОРБС
(S. A. Forbes, 1844-1930)

первым предложил рассматривать озеро как единую экосистему, микрокосм

Детальный анализ понятийных особенностей и методологических проблем применения системного подхода для изучения структур водных экосистем дан, например, в статье А.И. Баканова [2000б].

Сейчас общепринято считать, что "главной парадигмой экологии следует признать концепцию экосистемы" [Федоров, 1977а], откуда и вытекает признание необходимости системного подхода [Василевич, 1969; Хайлов, 1970; Миркин, 1984]. Во всяком случае, ранее существовавшие подходы, в том числе и трофико-динамический, в значительной мере себя исчерпали, что привело в конечном итоге к осознанию учеными кризисного состояния экологии как науки [Старобогатов, 1970; Федоров, 1977а; Розенберг, 1988, 1991; Розенберг, Смелянский, 1997]. К сожалению, к настоящему времени трудно привести примеры всестороннего и плодотворного анализа водных экосистем с позиций системного анализа. В дальнейших разделах нами будут приведены ссылки на редкие работы, где трудоемкое применение отдельных элементов математического моделирования способствовало успешному решению иногда достаточно узкой проблемы. Большинство исследователей просто оперирует "системной терминологией" для обоснования методологической позиции, заменяя традиционные термины и понятия на новые, более "научные", что часто вызывает негативную реакцию и чувство разочарования у специалистов. Например, Б.М. Миркин и Л.Г. Наумова [1998] считают, что «...понятие "системный подход" сегодня изрядно затаскано и стало обыденным научным клише, которое уже приносит скорее вред, чем пользу».

Но так ли уж виноват в этом сам "системный подход"?

Мем № 10: «Источником недопонимания обычно являются три фактора:

- 1) недостаточная структуризация информации и недостаток априорных знаний;
- 2) наличие помех, случайных или умышленных;
- 3) различие в критериях оценки фактов у лиц, вступающих в информационный контакт, иначе говоря, отсутствие единого категорийного аппарата (*idioma universal* – стандартного языка)» В.В. Дружинин и Д.С. Конторов [1976].

Вообще говоря, системный подход не является строго методологической концепцией, что отмечал еще А.А. Ляпунов [1980]: он выполняет эвристические функции, ориентируя конкретные экологические исследования в двух основных направлениях. Во-первых, его содержательные принципы позволяют фиксировать недостаточность старых, традиционных методов изучения экосистем для постановки и решения новых задач их целостного восприятия или исследования. Во-вторых, понятия и принципы конструктивного системного подхода, изложенные далее, помогают привнести в практику новый стиль научного мышления, а также приемы и методы исследований, ориентированные на раскрытие сущности процессов трансформации энергии, передачи вещества и информации в экосистемах. Прямое отождествление системно-аналитических принципов с методами кибернетики или с математическим моделированием является слишком узкой их трактовкой, хотя в виде идеологически-концептуальной основы системный подход одинаково важен и для экологии и для самой математики, как: «упорядоченная и логическая организация данных и информации в виде моделей» [Джефферс, 1981].

Центральным понятием системологии является понятие «системы». Существует более тысячи ее определений [Урманцев, 1978], и, не углубляясь в терминологические изыски, примем следующее рабочее определение: *система – совокупность элементов со связями между ними, подчиняющимися соответствующим законам композиции*. К этому можно добавить, что каждый из элементов системы внутри себя считается неделимым, а с внешним миром система взаимодействует как единое целое.

Другое важнейшее понятие – «сложность системы» может быть оценена на двух уровнях:

- сложность на "структурном уровне", которая определяется числом элементов системы и связей между ними (морфологическая сложность);

- сложность на "поведенческом уровне" – набор реакций системы на внешние возмущения или степень эволюционной динамики (функциональная сложность).

Определить, что такое "сложная система" на структурном уровне не представляется реалистичным, хотя большинство биологов интуитивно убеждены, что все экосистемы имеют морфологически сложное строение. Б.С. Флейшман [1978, 1982] предложил пять *принципов усложняющегося поведения систем*, представленных на схеме и позволяющих оценить функциональную сложность:



Сложность поведения систем *первого уровня* определяется только *законами сохранения* в рамках вещественно-энергетического баланса (такие системы изучает классическая физика). Особенностью систем *второго уровня* является появление обратных связей; определяющим для них становится принцип *гомеостаза*, что и задает более сложное их поведение (функционирование таких систем изучает кибернетика). Еще более сложным поведением обладают системы *третьего уровня*, у которых появляется способность "принимать решение", т.е. осуществлять некоторый выбор из ряда вариантов поведения ("стимул – реакция"). Так, Н.П. Наумов [1963] показал, что возможен опосредованный через среду обитания обмен опытом между особями, поколениями одного вида и разными видами, т.е., по существу, обмен информацией. Системы *четвертого уровня* выделяются по наличию достаточно мощной памяти (например, генетической) и способности осуществлять перспективную активность или проявлять опережающую реакцию ("реакция – стимул") на возможное изменение ситуации – *эффект преадаптации* (см., например, [Кулагин, 1980]). Наконец, *пятый уровень* сложности объединяет системы, связанные поведением интеллектуальных партнеров, предугадывающих многоходовые возможные действия друг друга. Этот тип поведения имеет отношение, в основном, к социальным аспектам взаимодействия "Человек – Природа" (хотя на практике встречается лишь в партиях хороших шахматистов).

Наконец, все свойства сложных систем делятся на *простые* (аддитивные; например, биомасса некоторого сообщества) и *сложные* (неаддитивные; например, устойчивость экосистемы).

Описание любой сложной системы состоит из трех компонентов: морфологической, функциональной и информационной [Дружинин, Конторов, 1976].

Морфологическое описание должно давать полное представление о строении системы и представляет собой четверку конечных множеств:

$$S_m = \{ \Sigma, V, \sigma, K \},$$

где $\Sigma = \{ \Sigma_i \}$ – множество элементов и их свойств; $V = \{ V_i \}$ – множество связей; σ – структура; K – композиция. Морфологическое описание, как правило, иерархично, причем уровень детализации (глубина описания) зависит от задачи, поставленной исследователем.

Под *элементом* понимается подсистема, внутри которой морфологическое описание уже не проникает. Элементный состав может содержать однотипные (гомогенные системы) и разнотипные (гетерогенные системы) элементы. Однотипность не означает полной идентичности и определяет только близость основных свойств. Важным признаком морфологии является природа элементов, где можно отметить *вещественные*, *энергетические* и *информационные* элементы. Применять, однако, к естественным элементам емкий термин «назначение» следует с определенной осторожностью, т.к. многое зависит от позиции наблюдателя. Рассматривая биоэнергетические процессы, эколог будет вполне прав, утверждая, что популяция несет энергетическую функцию в системе; в то же время является большим искушением принять генетически обособленный вид за информационный элемент некоторой сверхсистемы.

Традиционно выделяют *прямые*, *обратные* и *нейтральные связи*. Первые из них предназначены для передачи вещества, энергии, информации и их комбинаций от одного элемента к другому в соответствии с последовательностью выполняемых функций и пропускной способностью канала передачи. Обратные связи реализуют функции управления или адаптации (поддержание гомеостаза) и носят, как правило, информационный характер.

Структурные свойства систем определяются характером и устойчивостью отношений между элементами. По характеру отношений между элементами структуры делятся на *многосвязные* и *иерархические*. Очень трудно найти примеры сложных иерархических систем – все они имеют, как правило, сетевую организацию, когда один и тот же элемент структуры может входить (в зависимости от точки зрения или по опре-

делению) в несколько подсистем более высокого уровня. Например, один и тот же вид организмов в зависимости от условий может трактоваться как "хищный" или "нехищный". Различают также *детерминированные*, *стохастические* и *хаотические структуры*. Детерминизм, как и индетерминизм, имеет свою иерархию совершенства. Например, типично вероятностные структуры экосистем на нижнем уровне (особь, группа организмов) претерпевают чисто случайные изменения, но на более высоких уровнях эти изменения становятся целенаправленными за счет естественного отбора и эволюции.

Композиционные свойства систем определяются способом объединения элементов в функциональные группы и соотношением этих групп. Различают следующие группы элементов и подсистем:

- *эффекторные* – способные преобразовывать воздействия и воздействовать веществом и энергией на другие подсистемы (например, техногенные компоненты экосистем);
- *рецепторные* – способные преобразовывать внешние воздействия в информационные сигналы, передавать и переносить информацию (биоиндикаторные компоненты);
- *рефлективные* – способные воспроизводить внутри себя процессы на информационном уровне (изменяющие компоненты).

Морфологическое описание входит составной частью в тезаурус системы – совокупность полезной внутренней информации системы о себе, которая определяет ее способность распознавать ситуацию и управлять собой. Для полноты картины остановимся на формальных определениях основных объектов морфологической структуры экологических систем, которые мы будем использовать в последующем изложении [Бигон с соавт., 1989].

Поскольку анализ гидробиологических процессов на уровне отдельной особи выходит за рамки рассматриваемых нами экосистем, характеристики индивидуальных организмов не включаются в морфологическое описание, хотя *особь* может быть определена как первый уровень иерархии.

Вторым уровнем экосистемы является *группа (когорта) I* – множество особей, параметры состояния которых одинаковы или находятся в некоторых заданных пределах. Например, множество особей, находящихся на одинаковой стадии развития, образуют N_i стадийные группы. По иному определяющему признаку могут быть скомплектованы весовые группы, возрастные группы и т.д. Состояние группы $I_i \in P$ определяется ее мгновенной численностью и статистической функцией распределения всех регистрируемых показателей функционирования отдельных организмов [Меншуткин, 1971].

Третий уровень иерархии экосистемы составляет *популяцию P* – множество особей или групп особей, обладающих свойством самовоспроизведения и способностью совместно адаптивно реагировать на изменение внешней среды [Шварц, 1971]. Большинство характеристик и свойств группы особей можно перенести и на популяцию. Так появляется понятие о численности популяции N , как суммы показателей по всем возрастным группам, составляющим популяцию, а также среднем возрасте \bar{t} и среднем весе особи \bar{W} , которые рассчитываются, например, как средневзвешенные значения по обычным статистическим формулам.

С экологической точки зрения популяция представляет собой "биохорологическую единицу" [Шварц, 1971] вида. *Биологический вид* – это система географически или экологически викарирующих (замещающих) популяций [Тимофеев-Ресовский с соавт., 1973]. Видовой принцип в настоящее время господствует в исследованиях структуры сообществ, между тем такой подход ряд исследователей считают явно односторонним [Чернов, 1971], отмечая недостаточность разбиения живых компонентов экосистемы только по генетическому (таксономическому) признаку. Не углубляясь в эту дискуссию, будем считать, что вид – не более чем "системологический префикс" (метка), используемый для предметной идентификации других экосистемных объектов: особи, группы особей или популяции.

Множество популяций, характерных сходными кормовыми связями, образует *трофический уровень*. Такие "простые свойства", как численность или биомасса, выраженные в абсолютных значениях, уже не вполне корректны в качестве объективных интегральных характеристик трофического уровня, поскольку сильно зависят от видового состава, формируемого не столько экотопом, сколько самим исследователем, исходя из его субъективных убеждений. В качестве оцениваемых параметров трофического уровня используются некоторые "модельные" биоэнергетические характеристики, описывающие трофический уровень в соизмеримых единицах энергии (или информации), о чем пойдет речь в главе 4.

Мем № 11: «сообщество – это система организмов, живущих совместно и объединенных взаимными отношениями друг с другом и со средой обитания. Сообщество и его среда, рассматриваемые как функциональная система, ...называются экосистемой» Р. Уиттекер [1980].

Концепция трофических уровней позволила рассматривать процессы потребления, продуцирования и деструкции в сообществах во всей их взаимосвязи. Однако застывшая детерминированность трофических цепей не свойственна реальным экосистемам. Во многих случаях особи одного и того же вида на разных стадиях развития или при изменении внешних условий могут легко переходить с одной пищи на другую, а также менять тип и способ питания. Более строгое представление о трофических взаимодействиях дает односвязная трофическая сеть, т.е. более разветвленная по сравнению с трофическими уровнями система трофических связей, имеющая следующий формализм [Меншуткин, 1971]. Пусть на множестве популяций (или групп особей) задан граф трофических связей $\Gamma(P)$, где два любых узла могут быть связаны ребром, направленным от хищника к жертве. Каждому ребру поставлена в соответствие трофическая ценность j -й жертвы по отношению к i -му хищнику как априорная вероятность ее поедания этим хищником. Тогда под *биотическими сообществами* (или *биоценозами*) B можно понимать связанные компоненты этого графа – фрагменты узлов сети, внутренне неразделимые, но изолированные друг от друга на некотором статистическом уровне значимости. Иными словами, биоценоз признается как условно однородная часть континуума (основное требование к сообществу – однородность его строения, чаще всего оцениваемая "на глаз").

Пусть для произвольного биотического сообщества B , состоящего из множества организмов и их популяций P_i , имеют место следующие условия:

- сообщество развивается в выбранном пространственно-временном континууме – некотором "ящике" произвольных, но априори установленных размеров S ,
- область пространства S наполнено некоторыми техно-геофизическими ресурсами E , причем предполагается существование некоторой функциональной взаимосвязи между абиотическими E и биотическими B составляющими;
- биотические компоненты B (напрямую или через посредство внутрисистемных абиотических факторов) функционально связаны потоком вещества и энергии R с некоторой окружающей средой – "глобальным источником и приемником";
- сообщество B способно к самоорганизации, т.е. менять свое поведение и структуру, адаптируясь к изменениям внешних воздействий.

Тогда множество популяций биотического сообщества, составляющих изолированный фрагмент трофической сети, вместе с замкнутыми циклами биогенных элементов и компонентами неживой природы образуют *экосистему* [Розенберг с соавт., 1999]:

$$(B \cap E) \in S \rightarrow R.$$

Из данного определения следует, что экосистема в отличие от сообщества обязательно включает в себя автотрофные элементы, т.к. в противном случае невозможно получение замкнутых биогеохимических циклов.

Функциональное описание. Сложная система, как правило, многофункциональна. Функции любой системы можно распределить по возрастающим рангам, примерно следующим образом:

- пассивное существование (материал для других систем);
- обслуживание системы более высокого порядка;
- противостояние другим системам или среде (выживание);
- поглощение других систем и среды (экспансия);
- преобразование других систем и среды.

Функциональное описание системы, как и морфологическое описание, как правило, иерархично. Для каждого элемента, частной подсистемы и всей системы в целом функциональность задается набором параметров морфологического описания X (включая воздействия извне), числовым функционалом Y , оценивающим качество системы, и некоторым математическим оператором детерминированного или стохастического преобразования Ψ , определяющим зависимость между состоянием входа X и состоянием выхода Y :

$$Y = \Psi(X). \quad (2.1)$$

Как видно из приведенной выше схемы принципов усложняющегося поведения, функция отклика Y подсистемы верхнего уровня зависит от функций, описывающих внутренние процессы подчиненных подсистем.

Из общей теории моделирования физических систем принято выделять пять групп параметров с точки зрения способа их использования в моделях:



Раймонд Лаурел ЛИНДЕМАН
(R.L. Lindeman, 1915-1942)

автор всего шести публикаций, определивших трофико-динамическое направление исследований в экологии

гии

1. *входные параметры* – $V = (v_1, v_2, \dots, v_k)$, – значения которых могут быть измерены, но возможность воздействия на них отсутствует (применительно к моделям экосистем, к таковым можно отнести солнечную активность, глобальные климатические явления, неуправляемую хозяйственную деятельность человека и т.д.);
2. *управляющие параметры* – $U = (u_1, u_2, \dots, u_r)$, – с помощью которых можно оказывать прямое воздействие в соответствии с теми или иными требованиями, что позволяет управлять системой (к ним можно отнести ряд целенаправленных мероприятий по охране и восстановлению природной среды);
3. *возмущающие (стохастические) воздействия* – $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_1)$, – значения которых случайным образом меняются с течением времени и которые недоступны для измерения, создавая дисперсию неучтенных условий или шум;
4. *параметры состояния* – $X = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ – множество внутренних параметров, мгновенные значения которых определяются текущим режимом функционирования экосистемы и, в конечном итоге, являются результатом суммарного воздействия входных, управляющих и возмущающих факторов, а также взаимного влияния других внутрисистемных компонентов;
5. *выходные (целевые или результирующие) параметры* – $Y = (y_1, y_2, \dots, y_m)$ – некоторые специально выделенные параметры состояния (либо некоторые функции от них), которые являются предметом изучения (моделирования, оптимизации) и которые используются в качестве критерия "благополучия" всей экосистемы.

По отношению к экосистеме входные и управляющие параметры являются внешними, что подчеркивает независимость их значений от процессов внутри нее. Возмущающие факторы при этом могут иметь как внешнюю, так и внутреннюю природу.

Предполагая, что параметры экосистемы связаны некоторыми функциональными отношениями, которые в синтезируемой модели выражаются набором уравнений Ψ различной математической природы (алгебраические, логические, дифференциальные, конечно-разностные, матричные, статистические и пр.), выражение (2.1) можно записать как:

$$Y = \Psi(X, U, V) + \xi . \quad (2.2)$$

Любая экосистема представляет собой динамический объект, поэтому уравнение статической модели (2.2) должно быть дополнено множеством моментов времени T , для которых измерены мгновенные значения переменных. Поскольку экосистемы относятся также к объектам с распределенными параметрами, компоненты которых могут меняться не только во времени, но и в пространстве S , то общее уравнение модели экосистемы приобретает вид:

$$Y = \Psi(X, U, V, T, S) + \xi . \quad (2.3)$$

В отличие от физических систем, где основной задачей является оптимизация вектора результирующих параметров Y путем подбора управляющих воздействий, исследование экосистем заключается, прежде всего, в количественной параметризации фундаментального в биологии понятия «норма» Y_0 и оценки диапазона допустимых значений входных параметров, при которых отклик экосистемы не выходит за пределы гибких адаптационных колебаний $Y = Y_0 \pm \Delta Y$.

Несмотря на бесконечное разнообразие возможных систем и их функций, характер зависимости Ψ в (2.3) бывает довольно типичным, независимо от физического содержания системы. Например, часто эта зависимость включает три области, характерные для логистической (сигмоидальной) кривой: слабой связи (малой чувствительности к внешним влияниям), сильной связи и области насыщения, свидетельствующей, возможно, о кризисных изменениях. Ряд примеров сложных многокомпонентных (многовидовых) экологических моделей представлено в литературных источниках [Смит, 1970; Даддингтон, 1972; Динамическая теория., 1974].

Информационное описание также должно давать представление об организации системы. При этом сам термин «информация» имеет несколько значений:

- в биологии – совокупность биохимически закодированных сигналов, передающихся от одного живого объекта к другому (от родителей к потомкам) или от одних клеток другим в процессе развития особи;
- в математике, кибернетике – количественная мера устранения энтропии (неопределенности) или мера организации системы.

Если трактовать информацию как меру упорядоченности системы, то ее количество будет соответствовать неэнтропии, выражающей потенциальную меру предсказуемости будущего системы (или оценку возможности экстраполяции ее состояния). Чтобы экосистема действовала и взаимодействовала со средой, она должна потреблять информацию из среды и сообщать информацию среде. Этот процесс называется *информационным метаболизмом*, который совместно с вещественным и материальным метаболизмом образует полный метаболизм.

Не считая вправе дальше развивать эту интересную тему, которая заслуживает неторопливого и подробного изложения, мы отсылаем заинтересованного читателя к литературным источникам по методам анализа теоретико-информационных моделей [Арманд, 1975; Пузаченко, Скулкин, 1981; Коломыц, 2000], информационным полям популяций животного мира [Наумов, 1977; Мозговой с соавт., 1988; Розенберг с

соавт., 1999], а также к соответствующему разделу книги А.Ф. Алимова [2000], где он найдет и концептуальное описание информационного метаболизма в водных экосистемах, и необходимую библиографию.

Из представленной описательной части систем легко выводятся основные принципы системологии [Флейшман и др., 1982; Розенберг, 1984; Розенберг с соавт., 1999]:

1. *принцип эмерджентности* [Реймерс, 1990], важную роль которого в экологии особо подчеркивает Ю. Одум [1986]: «...принцип не сводимости свойств целого к сумме свойств его частей должен служить первой рабочей заповедью экологов»;
2. *принцип иерархической организации* (или *принцип интегративных уровней*; Одум, 1975);
3. *принцип несовместимости* Л. Заде [1974]: чем глубже анализируется реальная сложная система, тем менее определенны наши суждения о ее поведении;
4. *принцип контринтуитивного поведения* Дж. Форрестера (1977, 1978): дать удовлетворительный прогноз поведения сложной системы на достаточно большом промежутке времени, опираясь только на собственный опыт и интуицию, практически невозможно.

Принцип эмерджентности соответствует нелинейной многоуровневой структуре функционального описания, где свойства целого являются, безусловно, не суммой, а сложной, но принципиально идентифицируемой функцией от свойств элементов дочерних уровней. Принцип иерархической организации непосредственно вытекает из особенностей морфологического описания (как было показано выше, этот принцип не вполне верен для сложных систем, которым более свойственна сетевая организация). Что касается принципов несовместимости и контринтуитивного поведения, то они, являясь, по сути, развитием тезиса Сократа в поэтической формулировке Омара Хайяма «*Мне известно, что мне ничего не известно: вот последняя тайна открытая мной*», отражают вероятностную (стохастическую) природу оператора преобразования Ψ в выражениях (2.1-2.3).

В заключение можно предложить читателям третье по счету определение экосистемы, навеянное воспоминаниями о марксистско-ленинской философии эпохи молодости авторов: «*Экосистема есть отображение в сознании исследователя тех свойств объективной реальности, которые нужны ему для решения поставленной задачи*». Исходя из этого определения, становится беспредметным тезис о различии простых и сложных свойств экосистем [Розенберг, 1984]: уровень сложности системы, как синтезируемой некоторой композиции элементов и их связей, является не вещью в себе, а априори задается исследователем, основываясь на характере стоящей перед ним задачи (и, можно продолжить, располагаемых исходных данных, собственной эрудиции и квалификации). Например, Б.Я. Виленкин [1978] приводит следующую иерархию понятий экосистем по степени их сложности:

- наиболее простая модель – уже упомянутая экосистема по Одуму, где многовидовое сообщество рассматривается как единый объект с целостными, принципиально измеряемыми "безразмерными" характеристиками (биомасса, продуктивность, потоки вещества и энергии);
- каскадная модель трофических уровней, где вся система подразделяется на относительно обособленные уровни с немногими параметрами в каждом;
- модели многокомпонентных экосистем, описанные на популяционном (видовом) уровне и предназначенные для изучения структурных изменений биоценозов;
- наиболее сложные модели, учитывающие пространственную, временную, генетическую и иную дифференциацию отдельных популяций или их групп.

Однако, если иметь в виду не чисто количественную сложность, выраженную размерностью матриц исходных данных, а концептуальную или композиционную сложность модели, то адресность оценок Б.Я. Виленкина достаточно сомнительна. Весь процесс построения экосистемы (т.е. отображения объективной реальности) видится как последовательное агрегирование понятий, переход из рыхлого высокоразмерного пространства исходных переменных в осязаемое пространство обобщенных факторов или "индексов", сложность которых адекватна поставленной задаче.

2.2. Экосистема как объект математического моделирования

Сложность и стохастичность

Любая гидробиологическая система представляет собой сложный, большой, слабо детерминированный и эволюционирующий объект исследования. Экосистемы в значительной мере соответствуют подходу, развиваемому школой И. Пригожина [Пригожин, Стенгерс, 1986], согласно которому в развитии любой системы чередуются периоды, в течение которых ее состояние может быть характеризовано то как "в основном детерминированное", то как "в основном случайное", когда дальнейшее поведение становится в высокой степени неопределенным. Эту гипотезу можно распространить и на пространственную координату, в связи с чем некоторые участки поверхности могут восприниматься исследователем как нестационарные или "неправильные". Поэтому, вообще говоря, признаки, наблюдаемые нами в экосистеме, связаны с описываемой ими

сущностью статистически, принимая во внимание, что детерминистская связь является частным случаем статистической, т.е. связью с вероятностью равной 1.

Специфика биологии как науки заключается в том, что она имеет дело с наиболее сложными объектами живой природы. Ж. Моно в своей книге "Необходимость и случайность" утверждает, что «биологические явления нужно описывать не в терминах необходимости, а в терминах случайности». Но беда биологии состоит вовсе не в переходе на язык вероятностных представлений: здесь нет еще ничего страшного, в чем убеждает пример физики. Неприятный сюрприз, как писал В.В. Налимов [1979], состоит в том, что, признав случайной природу изменчивости, мы, к своему большому удивлению, лишены возможности использовать привычный вероятностный подход. Ведь статистическое описание возможно, когда по результатам наблюдений, сделанным над малой выборкой, удастся получить некоторое представление о поведении всей возможной последовательности явлений. А, в случае с биологической изменчивостью, наблюдения над краткой последовательностью событий не позволяют высказать каких-либо суждений о дальнейшем поведении системы. Усредненные характеристики, в отличие от физики и других "точных наук", имеют слишком общее и условное значение, поскольку важны отдельные явления во всем их индивидуальном проявлении (вне зависимости от того, какова вероятность их появления). Ситуация в биологии, увиденная глазами математика, такова. На некотором поле элементарных событий с весьма малой вероятностью заданы некоторые существенные по своим последствиям события. Если одно из них реализуется, то сразу же возникает другое поле событий с иным распределением вероятностей. Отсюда ясно, что некие маловероятные явления могут дать толчок к другим явлениям, развивающимся теперь уже на новом поле событий. *Сложность биологического мира такова, что он не может быть описан короче, чем с помощью прямой записи всех наблюдаемых явлений.* По меткому выражению украинского кибернетика А.Г. Ивахненко, «*Лучшей моделью кошки будет другая кошка.*»

Но так ли безнадежна ситуация, когда компактное описание биологических систем, охватывающее всю сложность их поведения, оказывается невозможным. Развивая теорию И. Пригожина о диссипативных структурах, В.П. Казначеев и Е.А. Спириин [1991] выдвинули гипотезу о сосуществовании и взаимодействии двух форм пространственно-временной организации живого вещества. Первую форму они определили как поток, характеризуемый устойчивой неравновесностью и эволюционирующий в сторону большей равновесности. Вторая форма предполагает реализацию состояния неустойчивой равновесности в отдельных элементах общего потока. При этом некоторые компоненты могут находиться в критических (переходных) состояниях, когда самое незначительное воздействие может вызывать весьма существенное изменение – бифуркацию [Свирижев, 1987; Арнольд, 1990].

Важнейшая гносеологическая особенность биологических систем состоит в том, что происходящие в них явления идут как бы на двух уровнях. Один – "поверхностный", когда явления протекают в некоторых установившихся или медленно эволюционирующих внешних условиях (по Н.Н. Моисееву [1990] – "дарвинский" процесс, обусловленный медленным накоплением новых количественных особенностей), другой – "глубинный", организменный, клеточный или генно-молекулярный, который включается в действие, когда резко изменяются условия существования экосистемы (квазидарвинский или бифуркационный процесс). Например, события, протекающие в изучаемом водном объекте, при спокойном режиме его существования могут быть, на некотором приемлемом уровне адекватности, описаны в сжатой форме с помощью системы дифференциальных уравнений. Составляющими этих уравнений являются, предположим, скорости, с которыми одни биологические виды поедают другие. Но, когда условия существования в этом водном объекте резко изменяются, модель, описывающая трофические явления на поверхностном (схематическом) уровне, оказывается бесполезной.

Таким образом, можно выделить два принципиально различных механизма, определяющих динамику экосистемы: *адаптационный* и *бифуркационный*. Зная характеристики среды, можно со значительной точностью прогнозировать тенденции в изменении параметров системы, функционирующей по адаптационному механизму: экосистема будет двигаться по некоторой траектории внутри ограниченного коридора в направлении вектора стабилизации. Однако существует некоторое критическое значение внешнего воздействия, приводящее к качественному изменению организации системы: порождается множество путей дальнейшего развития, выбор которых непредсказуем и зависит от сочетания случайных обстоятельств и флуктуаций внешней среды в момент бифуркационного перехода.

Дискретность и непрерывность биосферы

Достаточным и конструктивным может быть определение основной задачи экологии как *задачи о распространении и обилии организмов* [Andrewartha, Birch, 1954]. К этому сводятся почти все операции по упорядочиванию гидробиологических объектов и математическому моделированию экологических сообществ разного масштаба и структуры. Однако до сих пор отсутствуют строгие определения таких основополагающих терминов, как «популяция», «сообщество», «обилие» и «биоразнообразие», понятийная размытость которых особенно проявляется на фоне углубления представлений об экосистеме, как пространственно-временном континууме.



Джордж Эвелин ХАТЧИНСОН
(G.E. Hutchinson, 1903 - 1991)

гидробиолог, лимнолог и эколог, развивший экосистемные представления; предложил современное понятие «экологической ниши»

Интересен в этом плане взгляд на биосферу испанского исследователя Р. Маргалефа [1992], как на «латерально неоднородную пленку», которую можно описать в виде мозаики столбиков, каждый из которых "работает" как элементарная единица с вертикальной полярностью. Поперечный размер каждого такого столбика задан всей "организацией" (?) системы и может варьироваться от практически безразмерной точки отбора пробы до обширных территорий. Образ маргалефских столбиков приводит к мысли, что «биосфера скорее дискретна, чем непрерывна». В стационарных условиях между соседними единицами-столбиками происходит обмен потоками вещества и энергии, который может быть симметричным, несимметричным или в форме нерегулярных флуктуаций. Все претензии описать биоценозы как функционально ограниченные части биосферы связаны с попытками установить некоторые границы там, где обмен между смежными компонентами приближается к нулю, т.е. каждое подмножество столбиков изолировано от других системой вертикальных перегородок. Однако в реальных экосистемах наблюдается, чаще всего, интенсивный горизонтальный обмен, не допускающий функционального разделения частей, прилегающих друг к другу. Это приводит к мысли, что «биосфера скорее непрерывна, чем дискретна». Нетрудно увидеть здесь аналогию с корпускулярно-волновыми свойствами материи, вполне доказанными теоретической квантовой механикой.

Аналогичные представления могут быть распространены с биосферы вообще на любое подмножество видов или конкретную

популяцию. Имея в виду «обилие» i -го биологического вида, можно говорить лишь о том, что в каждой точке пространства с координатами $\{x, y\}$ в каждый момент времени t существует вероятность p_i того, что численность вида N_i превысит некоторое наперед заданное число N_0 . Исходя из теоретико-вероятностных представлений, вся территория Земли характеризуется функцией распределения плотности этой вероятности, причем для любой точки значение p_i может быть весьма мало, но никогда не обращается в нуль. Например, можно говорить о вероятности $p = 10^{-23}$ нахождения мухи цеце в ноябре над фонтаном перед Большим театром, принимая во внимание гипотетическую возможность ее бегства из кармана заезжего энтомолога...

В этом смысле важнейшее значение имеет набор целесообразных соглашений о пространственно-временных рамках интерпретации результатов экологических наблюдений. Иными словами, гидробиологические пробы не являются нечто вроде измерения температуры в хорошо перемешанной среде – концепция горизонтальной гомогенности водоема справедлива лишь для весьма небольших озер. Сейчас уже не вызывает сомнения пространственная неоднородность плотности популяций гидробионтов и в изучении характера этой неоднородности достигнуты интересные и важные результаты. Например, еще полвека назад В.С. Ивлев [1954] показал, что при различных возмущающих воздействиях происходят закономерные изменения "статистики ансамблей" зообентоса, т.е. неупорядоченное случайное размещение населения дна водоема может меняться на строго равномерное или пятнистое. К сожалению, до сих пор отсутствуют рекомендации, на какой пространственно-временной интервал следует распространять результаты конкретного гидробиологического наблюдения и каков должен быть механизм их суммации. Остается обычной практика, когда в явных случаях гетерогенности вместо одной пробы берут несколько и пользуются средними величинами. Дальнейшие манипуляции с такими "средними" следует, вероятно, рассматривать достаточно скептически, поскольку совсем неясно, имеют ли какой-либо смысл такие осреднения по пространству [Виленкин, 1978].

Еще больше неопределенности возникает при попытках оценить такой общественно значимый фактор как «биоразнообразие». До сих пор отсутствует однозначное определение, что это такое и в каких единицах его следует измерять. Ю. Одум [1986], обсуждая общие концепции биологического разнообразия, со ссылкой на Р. Уиттекера [1980] дает несколько своеобразное определение – «сообщества различаются по числу и "значимости" (предпочтительнее измерять значимость продукцией видов – количеством органического вещества, произведенного на единицу площади или объема в единицу времени) входящих в них видов». Основные законы экологического разнообразия (или биоценотические принципы) были сформулированы в 1939 г. А. Тинеманом (A.Thienemann):

- чем разнообразнее условия существования в пределах биотопов (больше размерность экологической ниши), тем больше число видов в данном биоценозе;
- чем больше отклоняются от нормы (оптимума) условия существования в пределах биотопа, тем беднее видами становится биоценоз и тем больше особей будет иметь каждый из "оставшихся" видов (этот принцип Ю.И. Чернов [1975] называет *правилом компенсации*).



Август ТИНЕМАН
(A. Thienemann, 1882-1960)

гидробиолог и лимнолог, сформулировал «биотические принципы», ввел понятие «продукция»

Здесь очевидно явное концептуальное противоречие. С одной стороны, согласно второму принципу Тинемана, число особей и число видов связаны обратной зависимостью, что позволяет сделать вывод о том, что биоразнообразие никак не связано с продукционными характеристиками экосистемы, либо имеет с ними отрицательную корреляцию. С другой стороны, биоразнообразие по Уиттекеру тем больше, чем выше "значимость" (т.е. продуктивность) видов.

Биоценотические принципы Тинемана имеют вероятностный характер и подтверждаются статистически только на некотором, хотя и достаточно большом подмножестве примеров. В частности, Ю. Одум [1986] приводит пример обратной закономерности, когда строго направленный или умеренный стресс при наличии сильного доминирования вызывают увеличение, а не уменьшение разнообразия (обработка инсектицидами участков просяного поля в Джорджии, США). Х.А.Хокс [1977] утверждает, что в случае загрязнения водной среды органическими веществами и эвтрофирования биоценотические принципы вообще спорны, поскольку при увеличении трофности разнообразие многих таксонов увеличивается.

Для того, чтобы разнообразие внутри одного местообитания не путать с разнообразием ландшафта или региона, который содержит "смесь" местообитаний, Р. Уиттекер [Whittaker, 1960; цит. по: Миркин, Наумова, 1998] предложил различать следующие типы разнообразия:

- *альфа-разнообразие* (разнообразие внутри сообщества, разнообразие "в узком смысле" – видовое богатство, измеряемое числом видов на единицу площади или объема, и соотношение показателей участия видов в сложении сообщества, измеряемое выравненностью видов [англ. evenness of equitability]);
- *бета-разнообразие* (разнообразие между сообществами, измеряемое скоростью изменения видового состава вдоль градиентов среды; бета-разнообразие может быть измерено числом синтаксонов одного ранга [субассоциации, ассоциации и пр.] или величиной *полусмена* [англ. half change, HC] – отрезка градиента среды, вдоль которого меняется половина видового состава сообщества; таким образом, полная смена видового состава соответствует 2HC)¹⁰;
- *гамма-разнообразие* (разнообразие биомов, разнообразие "в широком смысле" – объединение альфа- и бета-разнообразия; простейшим показателем гамма-разнообразия будет конкретная флора или фауна, список видов в пределах ландшафта или водного бассейна).

Приведенная классификация имеет, в значительной мере, умозрительный характер, поскольку в гидробиологии зачастую отсутствуют строгие (в первую очередь, математические) методы оценки границ между сообществами, биоценозами, водоемами, бассейнами и более крупными региональными образованиями.

Взаимосвязь экосистемы со средой и пределы толерантности воздействий

Вся история становления экологии свидетельствует о важности и постоянном интересе исследователей к оценке воздействия среды на биоценотические компоненты экосистем. Среди стрессоров окружающей среды Р. Шуберт [1986] выделяет три группы:

- биотические факторы среды (паразитизм, инвазии, хищничество, конкуренция);
- природно-климатические факторы (солнечная активность, водность, температурный режим, ветер, давление)
- антропогенные стрессоры (химическое загрязнение, радиационное излучение, рассеяние тепловой энергии, шум, рекреация и проч.)

Для антропогенных стрессоров принято использование термина «загрязнение» – введение в окружающую среду материалов или энергии, которые могут нанести ущерб жизненно важным ресурсам или экологическим системам, или вызвать нарушения при их использовании [Manahan, 1994]. Более точным нам представляется определение, данное Н.Ф. Реймерсом [1990]: «*Загрязнение* – *привнесение в среду или возник-*

¹⁰ Так и осталась непонятным, в чем же измеряется разнообразие: в отрезках "градиента среды" (граммах, градусах, метрах...) или количестве синузид? Яркий представитель мемов "чевенгуровского" типа!

новение в ней новых, обычно не характерных для нее физических, химических, информационных или биологических агентов или превышение в рассматриваемое время естественного среднемноголетнего уровня (в пределах его крайних колебаний) концентрации перечисленных агентов в среде, нередко приводящее к негативным последствиям». Здесь подчеркивается тот факт, что, в большинстве случаев, загрязнение связано не с синтезом новых химических веществ (по крайней мере, на уровне химических элементов), а с их перемещению из одной точки пространства в другую. Например, концентрация меди в почве в районах ее промышленных месторождений может значительно превышать установленные нормативы, однако, будучи, перемещенным в другое место, медный колчедан сразу начинает приобретать статус "загрязнение".

К приведенным определениям следует добавить несколько уточнений:

- действие большинства загрязняющих факторов, зависит от уровня воздействия, а в некотором диапазоне "доз" эти действия не только безвредны, но и жизненно необходимы как для всей системы, так и для отдельных ее компонентов (например, такие микроэлементы как Cu, Cd, Ni и др.);
- должен быть подчеркнут обязательно "экосистемный" характер ущерба, поскольку нельзя назвать "загрязнением" негативное действие фактора на некоторые не ключевые подсистемы при общем позитивном характере влияния на остальные опорные узлы;
- само по себе действие фактора может проявляться не прямо, а опосредовано через другие факторы (например, обогащение водных экосистем биогенными элементами приводит к экстенсивному росту растительности, которая является субстратом, убежищем и пищей для прочих организмов; однако, параллельно этому начинаются негативные процессы, характерные для эвтрофных условий: замутненность воды, дефицит солнечной энергии и растворенного кислорода и проч.)

Совокупность закономерно связанных факторов среды, воздействующих на компоненты биоценоза, называют *комплексным градиентом* (англ. complex gradient). При этом сформулированы следующие основные положения факториальной экологии [см., например, Розенберг с соавт, 1999]:

- «жизнедеятельность организма зависит от того ресурса, количество которого минимально» (закон минимума Либиха);
- «стресс организма зависит от того фактора, вредное действие которого максимально» (закон лимитирующего фактора Шелфорда);
- «любой фактор имеет экологический минимум и экологический максимум», диапазон между которыми называется «пределами толерантности»;
- организмы могут иметь широкий диапазон толерантности в отношении одного фактора и узкий в отношении другого, причем организмы с широким диапазоном толерантности ко всем факторам наиболее распространены;
- при постоянных субкритичных нагрузках фактора пределы толерантности у организмов могут расширяться под действием эффекта адаптации (хотя иногда проявляется и эффект обратного свойства);
- действие одного фактора может сильно расширять или, наоборот, сужать пределы толерантности другого фактора (закон взаимодействия факторов).

Действие произвольного фактора среды X на любой экологический показатель Y , который принимается за оценку качества всей экосистемы, традиционно описывается некоторым подмножеством математических формул, из которых наиболее популярны следующие зависимости (см. примеры на рис. 2.2):

- *линейная зависимость* – наиболее удобная для расчетов и интерпретации, к которой исследователи стремятся свести каждую найденную закономерность, но, к сожалению, чрезвычайно редко встречающаяся в реальном мире;
- *экспоненциальная зависимость*, на которой основана большая часть фундаментальных законов теоретической физики, поскольку она "по совместительству" является классическим уравнением кинетики 1-го порядка;
- *логистическая (сигмоидальная) зависимость*, которую можно считать усложненной моделью кинетики первого порядка для наиболее правдоподобного описания процессов биотрансформации и перемещения чужеродных веществ в экосистемах;
- *релаксационно-колебательная зависимость*, когда действующий фактор носит залповый характер (например, периодически повторяющихся импульсов);
- *степенная зависимость* $Y = a_0 X^k$;
- *полиномиальная зависимость* $Y = a_0 + a_1 X + a_2 X^2 + a_3 X^3 + \dots + a_n X^n$, обеспечивающая качественную интерполяцию широкого набора различных экстремальных и полимодальных зависимостей.

Например, реакция экосистемы на действие фактора по логистической модели (правее диапазона толерантности) состоит из четырех последовательных фаз:

- а) *фазы активного сопротивления* всей системы за счет внутренних ресурсов,
- б) *фазы экспоненциального "выбивания"* слабых звеньев, когда ресурс, поддерживающий устойчивость экосистемы, исчерпывается,

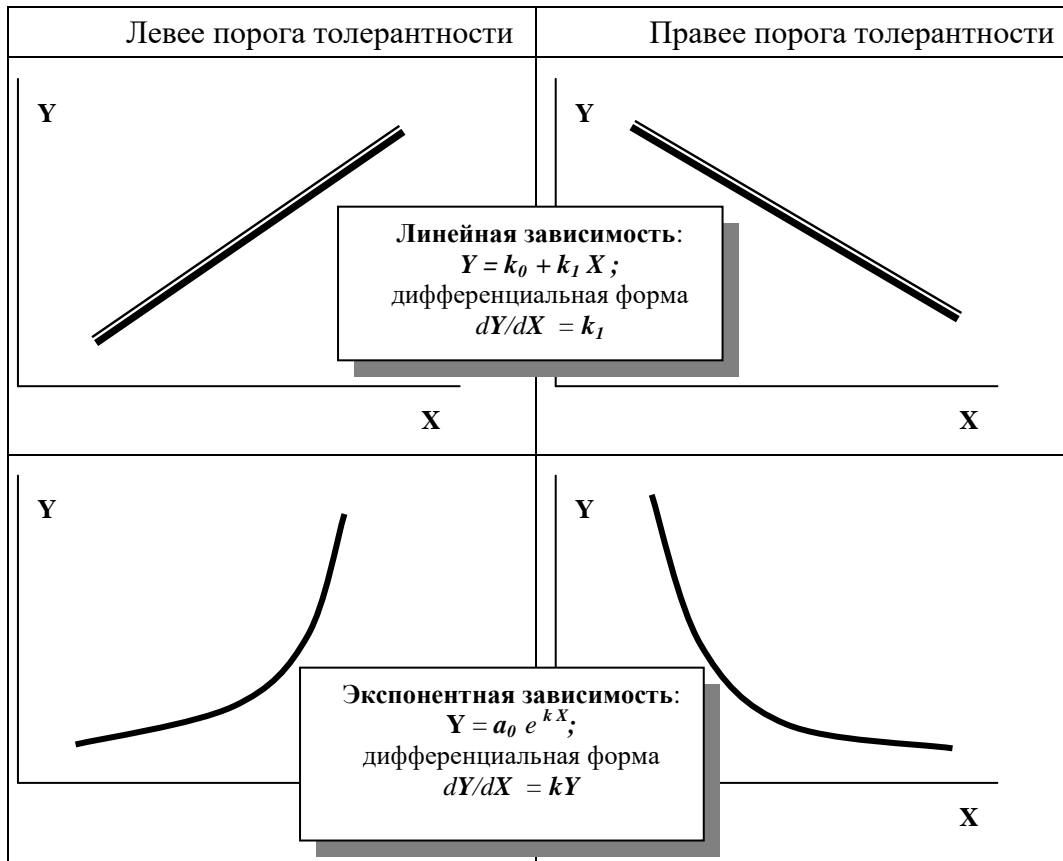
- в) фазы роста адапционных процессов в системе, противодействующих влиянию фактора,
 г) и, наконец, фазы стабилизации, когда "выжившие" компоненты экосистемы воспринимают установившийся уровень фактора в пределах своего диапазона толерантности.

Несмотря на огромное количество имеющейся литературы о влиянии тех или иных поллютантов на особенности жизненных циклов биологических объектов, как отмечал Д.М. Розенберг [Rosenberg, 1993], «выявленные закономерности основываются, как правило, на косвенных показателях, а не на процедурах, которые предполагают тщательную проверку той или иной гипотезы». Еще в меньшей мере изучается динамика реакций объекта на воздействие, которая может меняться как во времени, так и в процессе развития экосистемы вследствие "запуска" механизмов адаптации, кумуляции и гибкого восстановления.

Анализ совокупного действия факторов связан, в первую очередь, с именами Э. Митчерлиха [E. Mitscherlich; работы 1909-28 гг.] и Б. Бауле [B. Baule; работа 1918 г.; Реймерс, 1990]. Последний предложил обобщение решения уравнения кинетики 1-го порядка для n факторов воздействия под именем уравнения Митчерлиха–Бауле:

$$Y = A_n \prod_{i=1}^n (1 - e^{-C_i X_i}) .$$

К сожалению, авторам известны лишь крайне немногочисленные работы по расчету конкретных значений A_n и C_i для синергических наборов реальных факторов, относящихся к элементам питания зерновых культур в почвах [Василевич, 1983].



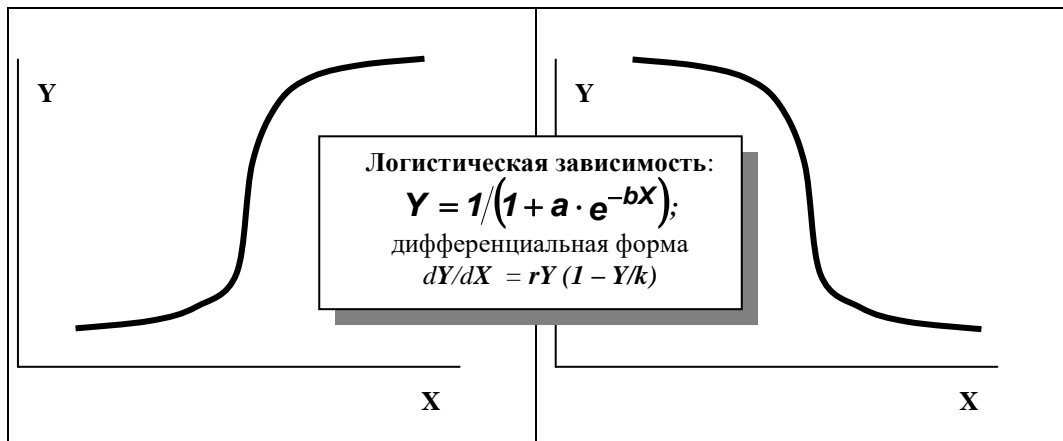


Рис. 2.2. Некоторые формы зависимостей реакции экосистем (Y) на воздействующие факторы среды (X)

Структурные компоненты описания экосистем

Мем № 12: «Как правило, экологическое исследование начинается с получения пробы в природной обстановке. Цель исследования понять, почему здесь найдены данные виды, представленные данным количеством особей, что было раньше и что будет потом. Количество видов чаще всего имеет порядок 10^2 , т.е. видов слишком много, чтобы рассматривать все возможные взаимодействия, и слишком мало, чтобы иметь дело со средними характеристиками ансамбля. Фактически, все распространенные подходы к решению задачи о многовидовой системе связаны с попытками **изменения размерности описания** этой системы» Б.Я. Виленкин [1978].

Последствия воздействия факторов среды на сообщества гидробионтов связаны, в первую очередь, с изменениями в экологической структуре.

Видовой принцип в настоящее время господствует в изучении структуры сообществ, между тем ряд исследователей считают такой подход явно односторонним [Баканов, 2000б]. В последнее время часто высказываются предположения о том, что вид как таковой по отношению к структуре животного населения – случайный компонент [Чернов, 1971] и является, скорее, понятием филогенетическим (зоологическим или ботаническим), а не экологическим. В.Д. Федоров и Т.Г. Гильманов [1980] отмечали, что понятие функциональной (трофической) группировки более важно для понимания целостных свойств экосистемы, чем понятие популяции, которая может быть настолько гетерогенной, что ее трудно безоговорочно причислить к одной из таких группировок. Д.Н. Кашкаров [1933] полагал, что не видовой состав, а преобладание и соотношение тех или иных жизненных форм характеризуют сообщество. Иногда однотипные сообщества могут не иметь общих видов, а разнотипные дают высокие значения индексов видового сходства. А.А. Малиновский [1970] считал, что основное в системе – не тождественность элементов, а наличие определенных связей. В системе может происходить полная замена элементов, но она сохраняется при условии сохранения преемственности между элементами и типами связи.

Многие исследователи, отмечая недостаточность разбиения живых компонентов экосферы только по систематическому признаку, понимают под элементами классификационной системы не только популяции, но и трофические уровни, жизненные формы и т.п. Например, Д.И. Берман и Б.Я. Виленкин [1975] считают, что желательная концепция о сообществе должна включать некоторое число разбиений, соответствующее принципам организации любого сообщества, а не видовой принадлежности организмов.

К сожалению, структурно-классификационные процессы ограничились самой приятной и малоответственной стороной научного творчества – придумыванием терминов. С.И. Левушкин [1976] считает, что генетически тождественные популяции составляют вид, экологически тождественные – *биоморфу*, т.е. экологический аналог вида. А.И. Баканов [2000б] и Г. Хитвол [Heatwale, 1979] считают более удобным термин *экон*, который можно рассматривать как элементарную экологическую единицу, включающую группу организмов, использующих одни и те же ресурсы одинаковым образом и играющих одинаковую роль в экосистеме, т.е. занимающих близкие или сильно перекрывающиеся экологические ниши. Указанный термин близок к понятию *экобиоморфы*, но более дифференцирован. Основой единицей классификации объектов в видовом пространстве фитоценологи традиционно считают *ассоциацию*, под которой понимают некоторую статистически устойчивую комбинацию видов, сбалансированную по своим трофическим связям и обитающую приблизительно в одинаковых условиях среды. По различным принципам и в зависимости от цели ис-

следования выделяют такие компоненты экосистемы, как *ярусы, синузии, консорции, трофические уровни, ценоячейки, ценокванты, таксоценозы, эргоцены, номоценозы, гильдии, клики, лохосы, фаланги, ассамблеи* и т.д. [Миркин, 1985; Миркин с соавт., 1989; Миркин, Наумова, 1998]

После того, как теоретико-терминологическая основа заложена, актуальным представляется следующий этап – научиться "отличать одно от другого", а именно, разработать систему результативных формальных правил, по которым можно было бы надежно идентифицировать такие понятия, как «жизненная форма», «роль», «ассоциация» или «экологическая ниша» и проч., используя только данные подсчета конкретных особей в реальных гидробиологических пробах.

В рамках настоящей работы мы рассматривали вид как основную и неделимую элементарную единицу любых классификационных конструкций более высокого уровня. Это, в первую очередь, определяется отработанной столетиями методикой объективного определения видовой принадлежности особей, в то время, как укомплектовать, например, синузию из конкретных особей, найденных в пробе, удастся далеко не многим. Это, разумеется, не отрицает возможности сформировывать из *видов-кирпичиков* конкретного биоценоза сколь угодно сложные субъективные иерархические построения, основанные на разнообразных концептуальных структурах (половой, фонетической, социальной, энергетической, трофической, доминирования и проч.; по А.П. Левичу [1980]).

При построении конкретных математических конструкций, в зависимости от целей и задач расчетов иногда предпочтительнее сформировать признаковое пространство не на основе видов, а на более высоком таксономическом уровне – трибы, подсемейства, семейства и т.д. На наш взгляд продуктивно использование системы двух параллельных градаций – по таксономической принадлежности и трофическому уровню. Например, по результатам 15-летних экспедиционных исследований малых рек Самарской области было встречено 280 видов семейства Chironomidae, которые относятся к 5 подсемействам и двум трибам. С другой стороны, каждый вид по основным особенностям питания можно отнести к одной из 5 трофических групп, пренебрегая не всегда очевидными случаями, когда в разных биоценозах один и тот же вид будет играть разную роль. Тогда трофико-таксономическая классификация второго уровня, вслед за видовой, будет состоять из 20 групп (Diamesinae – «Хищники хвататели», Diamesinae – «Фитодетритофаги собиратели», Orthoclaadiinae – «Хищники хвататели», Orthoclaadiinae – «Всеядные собиратели» и т.д.).

Мем № 13: «*Экосистема – удобная, но довольно условная формализация для достаточной произвольно выделенной, например, представленной в пробе, смеси видов*» Р. Маргалей [Margalef, 1968].

Завершая обзор теоретических конструкций системной экологии и не подвергая сомнению сам факт реальности существования экосистем как некоторого многоуровневого преобразователя вещества и энергии, остановимся на чисто гносеологическом аспекте – что доступно исследователю для получения некоторой целостной картины того объекта, который он изучает? Оказывается, что реальное приборное измерение многих постулируемых параметров экосистем, в первую очередь, конкретных параметров материально-энергетических (тем более, информационных) потоков между ее элементами, на современном этапе развития науки и техники представляется невозможным. Обычно контролю или непосредственному измерению доступны только некоторый ограниченный набор факторов, имеющих часто весьма косвенное отношение к сущности изучаемого явления.

Например, с некоторой вероятностью ошибки можно установить следующие показатели:

- объем ввоза и расщепления по территории водосбора фосфорных удобрений (например, по путевым листам автотранспорта);
- концентрацию ионов фосфора в воде водоема методами химического анализа;
- численность и биомассу организмов зообентоса (при этом часто отборы проб не являются совместными и ведутся для разных точек водоема в разные моменты времени).

Однако при синтезе модели эвтрофирования экосистемы исследователя интересуют более обобщенные параметры, такие как фосфорная нагрузка на водоем или роль бентосных организмов в элиминации фосфора из донных отложений. Эти и множество других определяющих параметров экосистемы рассчитываются исследователем на основе его собственных модельных представлений о процессе или явлении и являются, по своей сути, *вероятностными*. Причем эта вероятностность определяется уже не погрешностью измерительного прибора, которую можно хотя бы теоретически точно оценить, а адекватностью используемой модели (уравнения, критерия, коэффициента), т.е. степенью приближенности уравнения модели, описывающего процесс, к явлениям, происходящим в реальной природе. Оценка такой адекватности представляет собой наиболее ответственный и трудно формализуемый этап математического моделирования [Розенберг, 1989] и принципиально не может не зависеть от условий, в которые поставлен исследователь, его образа мышления, математической эрудиции и, наконец, его доброй воли.

Следовательно, любая экосистема, описанная на бумаге, – это, не более, чем *субъективное* (и, хочется использовать модный термин, *виртуальное*) отображение наших представлений о реальном мире. Единственным реальным компонентом этого описания являются множество первичных данных, полученных с по-

мощью микроскопа, аналитического прибора и проч., которые всегда точны (если не принимать во внимание погрешность измерений), объективны и не требуют никаких доказательств необходимости своего существования.

Мы акцентируем внимание на этом аспекте потому, что в дальнейшем изложении собираемся в ряде конкретных случаев задаваться вопросом о прагматической целесообразности того или иного модельного компонента (уравнения, критерия, коэффициента). Применение различных индексов в действующих методиках биологического мониторинга представляется нам обоснованным только в тех редких случаях, когда они позволяют реально учесть в анализе новые информационные аспекты, не содержащиеся в явном виде в исходном пространстве признаков (например, использовать ретроспективный опыт и функциональные закономерности, выявленные исследователями на водоемах других регионов). В большинстве случаев для разрешения традиционных задач гидробиологии достаточна элементарная статистическая обработка первичных исходных данных.

2.3. Информационное описание экосистем: показатели, «индексы» и шкалы их измерения

"Систематика" экологических показателей

Статистическая постановка задачи экологического мониторинга предполагает, что наблюдается некоторое множество экологических состояний. Оно может содержать как различные состояния одного объекта, так и состояния разных объектов, соизмеримых между собой в количественном отношении.

Для количественной характеристики объектов или явлений в теории информационных систем (см. раздел 1.6) употребляется понятие особого рода – «показатель». Он обычно состоит из численного выражения и набора качественных реквизитов, определяющих конкретные условия, способ, место и время проведения измерения.

Для описания наземных экосистем предложен набор, включающий свыше 80 различных показателей [Исаков с соавт., 1986], но и он неполон и не всегда применим к водным экосистемам, для которых нужно разрабатывать свою систему показателей. В предыдущей главе мы достаточно подробно описали состав показателей нашей гидробиологической базы данных. Чтобы окончательно определиться со взглядами гидробиологов по поводу того, какие показатели должны включаться в модель, приведем с незначительными сокращениями выдержку из статьи А.И. Баканова [20006].

«Различные показатели можно классифицировать по разным основаниям:

- *показатели измеряемые (численность, биомасса...) и расчетные (продукция, агрегированность...);*
- *показатели простые (характеризующие объект с одной стороны), комбинированные (характеризующие объект с разных сторон) и комплексные (включающие соответствующие характеристики нескольких компонентов экосистемы);*
- *показатели отдельных компонентов и системные показатели, отражающие целостные свойства экосистемы;*
- *показатели структурные и функциональные;*
- *показатели статические и динамические;*
- *показатели, которые могут быть выражены производной по времени (характеризуют скорость каких-либо изменений), и показатели, выражающиеся интегралом во времени (характеризуют итог какого-либо процесса) [Федоров с соавт., 1980].*

Целостные свойства экосистем могут характеризовать следующие показатели:

- *степень автономности (включенность в систему высшего ранга);*
- *целостность (автономность элементов системы), сюда же примыкают: организованность, упорядоченность, жесткость, степень централизации, эмерджентность, суммативность;*
- *неидентичность (важно при прогнозировании по аналогии);*
- *насыщенность (связана с экологической емкостью);*
- *структурность (количество подсистем, уровней, блоков...);*
- *разнообразие и вариабельность элементов;*
- *пространственное разнообразие (в том числе степень сконденсированности);*
- *сложность, стабильность, устойчивость, живучесть, надежность, чувствительность;*
- *степень вещественной, энергетической и информационной открытости;*
- *пропускная способность;*
- *временные характеристики: наличие тренда, период и амплитуда колебаний, время задержки, степень консервативности, собственный период колебаний, время возвращения в исходное состояние, скорость и ускорение сукцессии, зрелость, быстроедействие;*
- *лабильность (соотношение устойчивости структуры и подвижности функций);*
- *степень оптимальности (эффективности) функционирования, в том числе для конкретных видов использования;*

- степень адаптированности, прогнозируемости и управляемости;
- степень "нормальности" или "патологичности";
- показатели, характеризующие взаимодействие экосистемы и человеческого общества (антропогенная нагрузка, самоочищающая способность, продуктивность, рекреационные возможности и т.д.).

Помимо разработки количественных показателей необходимо указать возможность их содержательной интерпретации, область применения, методiku оценки систематических и случайных ошибок, охарактеризовать устойчивость показателей к ошибкам в исходных данных и к малым возмущающим воздействиям, к отклонению статистического распределения от нормального.»

Мы привели столь обширную цитату не без прагматического смысла – иначе нам пришлось бы самим, в целях полноты изложения, придумывать некий похожий классификатор¹¹. Несмотря на некоторую схематичность и эклектичность, достоинство приведенного списка заключается в исчерпывающей полноте, хотя нам трудно представить, как на современном этапе можно вычислить большинство перечисленных целостных характеристик экосистем. Поэтому ограничимся в своих последующих расчетах и аналитических выводах признаками, непосредственно основанными на показателях *обилия видов* (вслед за В.И. Василевичем [1969], под обилием мы понимаем *любую меру*, характеризующую массовость вида на данном участке, что соответствует английскому аналогу quantity of species).

В состав объектно-характеристических матриц, участвующих в математической обработке, мы будем включать не только непосредственные значения численности N (экз/м²) и биомассы B (г/м²), традиционно используемые для оценки состояния видовых популяций в пробах зообентоса, но и некоторый набор обобщенных показателей – "индексов", подробно описанных в главах 3 и 4. Отношение к таким расчетным показателям вряд ли можно назвать однозначным.

В настоящее время только для мониторинга пресноводных водоемов по зообентосу применяется свыше 60 методик оценки экосистем [Баканов, 2000а], использующих расчетные индексы и их различные функциональные комбинации, которые объявляются основанием для классификации состояний "патология-норма". Это вряд ли можно назвать разумной тенденцией. Поверхностно-эмпирический характер некоторых индексов поражает иногда своей чисто человеческой нелогичностью или бессмысленностью математической интерпретации и оставляет огромное поле для вопросов «Почему так?», остающихся, как правило, без ответа. Именно этот "смысловой произвол" вызывает некоторое негативное отношение к такого рода упражнениям.

В частности, каждый из индексов, выделяя ту или иную особенность биотического сообщества, недоучитывает другие, в результате чего возникает естественный феномен несовпадения в оценках качества экосистем по различным показателям. Чтобы преодолеть трудности в трактовке такой ситуации, ряд уважаемых исследователей предлагают методы вычисления еще более обобщенных показателей, используя, чаще всего, простое усреднение пронормированных значений. Новый индекс, как правило, несколько не лучше составляющих его родительских индексов, за исключением того, что он уже никакой физической сути явлений не отражает и надежно нивелирует все статистические всплески исходных данных, сигнализирующие о возможной экологической опасности (см. раздел 1.5).

Другим приемом "индексотворчества" является деление одного показателя на другой (например, концентраций меди в воде и в донных отложениях или численностей двух разных групп хирономид). При использовании таких индексов забывается, что частное от деления не содержит никакой информации об абсолютных значениях составляющих показателей и один и тот же коэффициент донной аккумуляции может быть как при катастрофических концентрациях меди, так и при незначительных ее следах.

Вместе с тем, индексы могут оказаться весьма эффективными, будучи включенными, наряду с натуральными показателями, в многофакторные модели прогнозирования, поскольку отражают новую дополнительную информационную сущность объекта, в явном виде не содержащуюся в исходных данных. Более того, весь смысл математической обработки многомерных таблиц наблюдений заключается, в сущности, в той же "индексологии" – в редукции данных или понижении размерности признакового пространства типа "объект-признак". В регрессионном анализе многочисленные взаимозависимые наблюдаемые переменных сводят к одной переменной (отклику), в факторном анализе – к 2-3 обобщенным ненаблюдаемым главным компонентам, в кластерном анализе – к объединению объектов в некоторые подмножества и т.д. Принципиально весовые оценки и обобщающие формулы, "на глазок" записанные экспертом, ничем не отличаются от рассчитанных коэффициентов математических моделей, а, при игнорировании исходных предпосылок моделирования, могут значительно превосходить последние в адекватности. Поэтому применение в действующих методиках биологического мониторинга или математических моделях подмножества индексов, вносящих новую информационную сущность (например, индекс Шеннона) или являющихся квалифицированным экспертным обобщением (например, индекс Вудивисса), представляется вполне обоснованным.

Впрочем, «что такое хорошо и что такое плохо» – весьма субъективное понятие и каждый исследователь отстаивает свою "шкалу ценностей". Например, видовое обилие зообентоса отражают сразу два не

¹¹ «Самое целесообразное, – как говаривал Н.В. Тимофеев-Ресовский, – не писать того, что все равно лучше напишут немцы...», т.е. библиографию и историю вопроса [Шноль, 2001].

всегда симбатных показателя: численность экземпляров N и биомасса B . Это не всегда удобно, поскольку приходится либо проводить два параллельных расчета, либо делать конкретный выбор, преодолевая муки ослы Буридана, и учитывать лишь одну сторону явления. Поэтому понятно стремление исследователей заменить отдельные показатели обилия одной комплексной величиной. Такими свойствами, в частности, обладает индекс плотности населения $(N*B)^{0.5}$, приведенный под таким названием в словаре И.И. Дедю [1990] и использованный в разное время исследователями-геоботаниками (В.М. Понятовская и И.В. Сырокомская в 1960 г., Т. Фрей в 1965 г. и др.; цит. по: [Василевич, 1969]) Как показали расчеты, приводимые нами в части 3, индекс вполне адекватно отражает биоценотическое значение вида в сообществах зообентоса с точки зрения соотношения обилий, а распределение его прологарифмированных значений достаточно близко к нормальному. В свою очередь, такие экологи как Т.А. Работнов, В.С. Ипатов, А. Ламберт и Б. Дейл (см. также [Василевич, 1969]), весьма категоричны в своем мнении, оценивая подобные индексы как лишённые теоретических оснований и представляющие лишь псевдонаучную форму приведения данных. В.И. Василевич, например, пишет: «Нельзя складывать или умножать признаки, количественно выраженные в разных единицах измерения. Кроме того, в результате математических манипуляций с исходными величинами мы должны получить величины, имеющие реальный смысл. Но что мы получим, умножив, например, встречаемость на вес? Вряд ли эта величина говорит нам о каких-то действительных свойствах ценопопуляции».

Шкалы экологических данных и особенности их обработки

Под *информационной структурой* экологического объекта будем понимать определенное представление о внутренней организации и геометрической конфигурации рядов данных. Формальные представления о многомерных структурах, изучаемых в прикладной статистике, изложены в фундаментальной монографии [Айвазян с соавт., 1989]. Задачи, связанные с упорядочением и структуризацией данных, можно объединить в рамках теории фундаментальных триад, или именованных множествах М.С. Бургина [1997; цит. по: Сердюцкая, Каменева, 2000].

Как было показано выше, в качестве "сырья" для математической обработки мы можем использовать как результаты натуральных наблюдений, так и экспертные оценки, имеющие различные диапазоны, характер распределений и форму представления численных значений. Данные, полученные при измерении одного показателя, можно рассматривать как отдельные значения шкалы I . Следовательно, m -мерный объект будет представлен m такими шкалами I_1, I_2, \dots, I_m , соединяя в себе m различных свойств. К примеру, I_1 может быть шкалой для измерения температуры водной среды, I_2 – шкалой для определения ее прозрачности, I_3 – соответствовать численности некоторого вида гидробионтов. Для решения задач математической статистики и распознавания образов необходимо предварительно построить некоторое более или менее универсальное отображение данных, содержащее возможности для обобщения отдельных измерений и совмещения разнородных шкал.

Как только мы абстрагируемся от реальных биологических объектов и заменяем их m -местными наборами чисел, так сразу попадаем в область действия законов теории измерений [Пфанцаль, 1976; Орлов, 1978, 1980], регламентирующих нашу свободу в обращении с этими наборами. В большинстве случаев существует бесконечное множество способов измерения одного и того же признака: длину можно измерить в метрах, дюймах, локтях и т.д., температуру – по Цельсию, Реомюру, Кельвину. Преобразования, с помощью которых осуществляется переход от одной частной шкалы к значениям этого признака в других частных шкалах, называются допустимыми. Например, для перехода от значений температуры в шкале Фаренгейта к значениям по Цельсию нужно использовать следующее допустимое преобразование: умножить все значения на 5/9 и вычесть 160/9.

В биологических исследованиях наиболее распространены следующие типы шкал [Хованов, 1982; Айвазян с соавт., 1983; Котов, 1985; Котов, Терентьева, 1989]:

- *Шкала наименований* (номинальная или классификационная) – шкала для измерения качественных признаков (например, формы клеток: 1 – круглая, 2 – овальная, 3 – палочковидная и т.д.) Для этой шкалы возможны только взаимно однозначные преобразования: $\varphi(x) = \varphi(y)$ только тогда, когда $x = y$.
- *Порядковая шкала*, где возможны строго монотонно возрастающие преобразования: $\varphi(x) > \varphi(y)$ только тогда, когда $x > y$. Порядковым шкалам соответствуют любые "балльные" оценки (например, класс качества вод по Драчеву или биотический индекс Вудивисса).
- *Интервальная шкала*, допускающая положительные линейные преобразования: $\varphi(x) = ax + b$ ($a > 0$). Классические примеры интервальных шкал со "странно" определенным нулем – температура по Цельсию, календарное время и т.п.
- *Шкала отношений*, допускающая преобразования подобия: $\varphi(x) = ax$ ($a > 0$). В шкалах отношений измеряются, например, концентрации химических ингредиентов, биомассу и проч.
- *Абсолютная шкала*, где допустимы тождественные преобразования: $\varphi(x) = x$. В абсолютных шкалах измеряется количество предметов, например, численности особей данного вида.

В зависимости от того, в каких шкалах измерены данные, репрезентативная теория измерений, основные понятия и применения которой рассматриваются в обзорах [Стивенс, 1960; Орлов, URLa,б], опреде-

ляет круг возможных арифметических операций над этими числами. Например, имея отметки учащихся как один из видов экспертного оценивания, вряд ли кто-либо будет утверждать, что знания отличника равны сумме знаний двоечника и троечника (хотя $5 = 2 + 3$), в то время как в экологических методиках подобные операции в интервальных шкалах – не редкость.

Традиционным для сравнительного анализа двух совокупностей является самое простое – сравнение по средним значениям. А как вычислять средние? Ф. Мостеллер и Дж. Тьюки [1982] проводят анализ различные видов средних величин: среднее арифметическое, медиана, мода, среднее геометрическое, среднее гармоническое, среднее квадратическое, бивес-оценки (см. также [Розенберг с соавт., 1994а]). Обобщением нескольких из перечисленных является среднее по А.Н. Колмогорову [1985]. Для чисел X_1, X_2, \dots, X_n среднее по Колмогорову вычисляется по формуле:

$$G\{(F(X_1) + F(X_2) + \dots + F(X_n))/n\}, \quad (2.4)$$

где F – строго монотонная функция, G – функция, обратная к F .

Если $F(x) = x$, то среднее по Колмогорову (2.4) – это среднее арифметическое, если $F(x) = \ln x$, то среднее геометрическое, если $F(x) = 1/x$, то среднее гармоническое, и т.д. Медиану и моду нельзя представить в виде средних по Колмогорову.

Общее понятие среднего (по Коши) таково: средней величиной является любая функция $f(X_1, X_2, \dots, X_n)$, такая, что при всех возможных значениях аргументов значение этой функции не меньше, чем минимальное из чисел X_1, X_2, \dots, X_n , и не больше, чем максимальное из этих чисел. При допустимом преобразовании шкалы значение средней величины, очевидно, меняется. Но выводы о том, для какой совокупности среднее больше, а для какой – меньше, в соответствии с требованием инвариантности выводов не должны меняться.

Сформулируем математическую задачу поиска вида средних величин, результат сравнения которых устойчив относительно допустимых преобразований шкалы [Орлов, URL6]. Пусть для любых двух совокупностей наблюдений справедливо соотношение средних по Коши:

$$f(Y_1, Y_2, \dots, Y_n) < f(Z_1, Z_2, \dots, Z_n).$$

Тогда для устойчивости результата сравнения средних необходимо, чтобы для любого допустимого преобразования g из группы допустимых преобразований соответствующей шкалы было справедливо также неравенство

$$f(g(Y_1), g(Y_2), \dots, g(Y_n)) < f(g(Z_1), g(Z_2), \dots, g(Z_n)),$$

т.е. среднее преобразованных значений из первой совокупности также было меньше среднего преобразованных значений для второй совокупности.

Приведем численный пример, показывающий некорректность использования среднего арифметического $f(X_1, X_2) = (X_1 + X_2)/2$ в порядковой шкале. Пусть $Y_1 = 1, Y_2 = 11, Z_1 = 6, Z_2 = 8$. Тогда $f(Y_1, Y_2) = 6$, что меньше, чем $f(Z_1, Z_2) = 7$. Пусть строго возрастающее преобразование g таково, что $g(1) = 1, g(6) = 6, g(8) = 8, g(11) = 99$. Тогда $f(g(Y_1), g(Y_2)) = 50$, что больше, чем $f(g(Z_1), g(Z_2)) = 7$. В результате преобразования шкалы упорядоченность средних изменилась.

С помощью математической теории измерений, дающей основу для разработки, изучения и применения конкретных методов расчета, удастся описать вид допустимых средних в основных шкалах:

- из всех средних по Коши в порядковой шкале в качестве средних можно использовать только члены вариационного ряда (порядковые статистики), в частности, медиану, но не среднее арифметическое, среднее геометрическое и т.д.;
- в шкале интервалов из всех средних по Колмогорову можно применять только среднее арифметическое;
- в шкале отношений из всех средних по Колмогорову устойчивыми относительно сравнения являются только степенные средние и среднее геометрическое.

Другим обстоятельством, влияющим на результат сравнения средних двух выборок, является характер распределения данных. Приведем без купюр фрагмент из статей А.А. Любищева [1969а,б], которые можно назвать апологией здравого смысла в статистике:

«Но разве так трудно точно вычислить среднее значение? Конечно, можно сложить показания всех проб и разделить на число всех проб, и мы получим среднее арифметическое значение, но только ценность этого результата будет часто незначительна. Например, мы сравниваем число вредителей на двух участках – обработанном инсектицидами и контрольном – для выяснения эффективности мероприятия. Дает ли простое сравнение средних арифметических из проб на обоих участках надежное указание на то, на каком участке изучаемого нами насекомого больше? Не всегда. Возьмем простой придуманный пример. На двух участках взято по четыре пробы, и количество насекомых в каждой пробе оказалось:

Пробы	1	2	3	4	Всего	Среднее арифметическое	Среднее геометрическое
Участок 1	4	3	4	5	16	4,0	3,94

Участок 2	2	1	2	15	20	5,0	2,78
-----------	---	---	---	----	----	-----	------

Если верить среднеарифметическому, то на втором участке насекомых больше. Но если выберем другую среднюю – среднюю геометрическую (перемножим все четыре цифры и извлечем из произведения корень 4-й степени), то получаем обратный результат: насекомых больше на первом участке. Какой же вывод правильный? Разве средняя арифметическая не естественное выражение реальной действительности? Далеко не всегда. Перенос результата проб на весь участок правомерен лишь в том случае, если в самих взятых пробах мы обнаруживаем отражение определенного закона изменчивости. Если же изменчивость показывает ненормальные особенности, то и вывод будет ненадежен. И вот, рассматривая цифры, мы видим, что колебания учетов на первом участке очень незначительны, следовательно, мы вправе ожидать, что размах этих колебаний в первом приближении отображает изменчивость численности насекомых на всем участке. Что касается второго участка, то здесь – явная неоднородность: три пробы с малым числом насекомых и одна с чрезвычайно большим, что мы имеем право приписать какому-то непредвиденному обстоятельству: или ошибке в учете, или случайному скоплению насекомых, т. е. таким факторам, которые сильно обесценивают значение средней арифметической.

Почему же помогает введение средней геометрической? Потому что средняя геометрическая отображает среднюю арифметическую от логарифмов первоначальных чисел, а при этом сильно снижается влияние на среднюю резких крайних уклонений. Это проверено на большом материале английского энтомолога Вильямса, собиравшего в течение восьми лет при помощи автоматических ловушек насекомых на Ротамстедской станции. Поэтому сейчас для оценки учетов численности чрезвычайно широко применяют различные преобразования: замену чисел логарифмами или эквивалентными баллами и проч.»

Приведем еще один пример исчисления средних, с учетом цели определения средней тенденции, хорошо известный в математической статистике (см., например, [Розенберг с соавт., 1993, с. 24]). На скамейке сидят пять человек. Двое из них – бродяги, имущество которых оценивается в 25 центов у каждого, третий – рабочий с доходом в \$2000, четвертый владеет \$15 000, а пятый и вовсе миллионер с доходом в \$5 000 000. Таким образом, мода равна 25 центам и характеризует 40% выборки, медиана равна 2000, средняя геометрическая – примерно, 280, а средняя арифметическая – 1 003 400,1 доллара. Если взять за основу моду, то актив этих соседей на скамейке должен быть оценен в 1-1,5 доллара (что обидно для всех, кроме бродяг); остальные оценки выглядят еще хуже. Таким образом, очевидно, что не существует средней меры для характеристики этой странной группы.

Наиболее часто в биологических исследованиях используется шкала отношений, в которой измеряются так называемые количественные признаки. Эта традиция идет, вероятно, из физики, где считается, что переход от количественных шкал к *порядковым* сопровождается существенной потерей информации. Для биологии с ее иным масштабом ошибок измерений подобное утверждение является скорее предрассудком, нежели научно обоснованным убеждением. На наш взгляд, в биологическую практику следует шире внедрять порядковые шкалы, которые не предъявляют ограничивающих требований к точности измерения, законам распределения и являются более "помехоустойчивыми". С математической точки зрения "балльные" оценки ничем принципиально не отличаются от "числовых", разве что математическая техника работы с ними значительно проще [Constandse-Westermann, 1972]. Но в силу укоренившихся традиций в биологических исследованиях значительно чаще безосновательно вычисляют среднее, дисперсию, эксцесс, нежели медиану. Во многом такое нежелательное положение вещей объясняется просто недостаточным методическим распространением математического аппарата, позволяющего обрабатывать результаты измерений по частным шкалам порядка и некоторым лагом в динамике исторического развития статистики и биологии. Впрочем, это мнение нельзя рассматривать как догму, поскольку очень многое зависит как от характера решаемой задачи, так и от особенностей обрабатываемых данных.

2.4. Математические модели в экологии

Мем № 14: «Современная биология заимствует богатый инструментарий у точных наук, который включает математические методы и современные информационные технологии...» Г.Г. Винберг [19796].

Природа и математическое мышление

Идеологической основой технологической цивилизации является *Научная Идеология*, или *Сциентизм* (англ. Science). Она основана на вере в существование небольшого числа точно формулируемых законов природы, на основе которых все в природе предсказуемо и манипулируемо. Природа рассматривается

как гигантская машина, которой можно управлять, если известен принцип ее функционирования. Эта научная идеология, как заметил еще Э. Мах, часто играет роль религии технологической цивилизации.

Основная догма научной идеологии – это вера в математизацию. Она (догма) утверждает, что всё (или, по крайней мере, всё существенное) в природе может быть измерено, превращено в числа или другие математические объекты, и что путем совершения над ними различных математических манипуляций можно предсказать и подчинить своей воле все явления природы и общества. Эта вера содержится уже в призыве Г. Галилея: *"Измерить все, что измеримо, и сделать измеримым то, что неизмеримо"*. Э. Кант говорил, что каждая область сознания является наукой настолько, насколько в ней содержится математики. А. Пуанкаре писал, что окончательная, идеальная фаза развития любой научной концепции – это ее математизация. В некотором смысле можно сказать, что мы живем в математической цивилизации – и, может быть, умираем вместе с нею [приведены выдержки из доклада российского математика академика И.Р. Шафаревича, URL].

Основная особенность математики, очень существенная для научной идеологии, – это ее способность трансформировать решение глубоких проблем в стандартизированные логические схемы. На вопрос о том, что же такое познание мира, Бурбаки предлагают такой ответ: *«это возможность компактной записи наблюдаемых явлений, ибо компактная запись – как раз и есть то, что дает нам возможность предсказывать и управлять»*. Любопытно, что компактная запись наблюдаемых явлений в науке рассматривается как теория даже тогда, когда с ней не связано никакого теоретизирования. Теория – это, по сути дела, такое логическое построение, которое позволяет описать явление существенно короче, чем это удастся делать при непосредственном наблюдении [Налимов, 1979]. Пример: периодическая система Д.И. Менделеева, будучи компактной записью необозримого ранее многообразия явлений в неорганической химии, сразу же стала рассматриваться как некий весьма существенный вклад в теорию химии, хотя в момент появления этой таблицы с ней не связывалась вообще какая-либо теоретизация.

Более 100 лет назад известный в то время биолог В.В. Пашутин [1885; цит. по: Леонов, URLa], писал: *«Обобщающие полеты ума в сфере патологических явлений совершенно необходимы, так как запас детальных фактов в настоящее время очень велик и получает характер, за недостатком обобщений, тяготеющего ума балласта, с которым едва может справиться наша память»*. Как видим, уже тогда ведущие российские ученые понимали, что возрастание массы необобщенных фактов приводит к тому, что они постепенно превращаются в балласт.

Не так давно исполнилось 50 лет печально известной августовской сессии ВАСХНИЛ, которая завершилась запретом генетики. Однако вместе с генетикой из биологии усилиями Т.Д. Лысенко была изгнана и статистика. Выступая с заключительным словом на этой сессии, Лысенко сказал, что теория вероятностей и статистика нужны только менделистам-морганистам, а "мичуринской биологии" эти науки не нужны. *«Все так называемые законы менделизма-морганизма построены исключительно на идее случайности. ...Не будучи в состоянии вскрыть закономерности живой природы, морганисты вынуждены прибегать к теории вероятности и, не понимая конкретного содержания биологических процессов, превращают биологическую науку в голую статистику. Недаром же зарубежные статистики - Гальтон, Пирсон, а теперь Фишер и Райт - также считаются основоположниками менделизма-морганизма... Изживая из нашей науки менделизм-морганизм-вейсманнизм, мы тем самым изгоняем случайность из биологической науки. Нам необходимо твердо запомнить, что **наука – враг случайностей**»*. Эта фраза Лысенко на долгие годы стала одной из методологических заповедей биологии. Ученым, которые отваживались применять статистику в своих биологических исследованиях, ВАК даже отказывал в ученой степени [Леонов, URLb]. Учитывая, что в эти же годы вместе с генетикой запрещенной наукой стала и кибернетика, можно понять, какой деформации подверглась методология экспериментальной биологии и экологии. Несколько исправить положение удалось только в результате подвижнической деятельности и теоретических работ таких известных ученых, как В.И. Вернадский, А.Н. Колмогоров, А.Л. Чижевский, А.А. Любищев, В.В. Налимов и др. (см. [Боголюбов, 2002]).

Нынешние сложности в развитии биологии связаны именно с трудностями компактного описания того громадного материала, который легко накапливается в результате наблюдений, но чрезвычайно трудно систематизируется. Когда известного французского ученого П.С. Лапласа спрашивали, зачем он предлагает допустить в Академию наук медиков, зная, что медицина – не наука, он отвечал: *«Затем, чтобы они общались с учеными»*. Первой удачной попыткой на этом пути была классификация К. Линнея: многообразие наблюдаемых фактов было сведено к некоторой системе. Эволюционная теория Ч. Дарвина – еще одна попытка компактного представления все тех же данных, но теперь уже в их историческом развитии. Но со времен Дарвина и до наших дней в биологии больше не рождалось подобных всеобъемлющих компактных теоретических построений, обладающих такой же разъяснительной силой, как, скажем, записи соотношений в теоретической физике. Представления о биогенетическом коде, самое большое открытие в биологии последнего времени, – это, собственно, расшифровка самого языка, но вовсе не того, как что-то новое

пишется на этом языке. Исследования в области биологии и экологии долгие годы ограничивались качественным описанием объектов и процессов, количественные же оценки их характеристик сводились лишь к констатации "увеличения" или "уменьшения" средних значений отдельных признаков [Налимов, 1979].

В целом, состояние российской "количественной" экологии разными исследователями оценивается неоднозначно: одним она представляется бурно развивающейся наукой, другим – направлением, находящимся в состоянии концептуального кризиса. В этой связи представляется интересным привести результаты непредвзятого анализа на основе формальных наукометрических методов содержания статей, публикуемых в экологических журналах [Будилова с соавт., 1995]. Материалом для анализа послужили статьи англоязычного журнала "ECOLOGY" и русскоязычного журнала "ЭКОЛОГИЯ" за 1991-92 гг., где подсчитывались индивидуальные и совместные частоты встречаемости в этих публикациях экологических и математических терминов.

Выявлены два основных направления исследований: экосистемное и популяционное. Показано, что при изучении растительных сообществ чаще используется экосистемный подход, а сообществ наземных животных и птиц – популяционный. Сообщества водных организмов служат объектом для обоих подходов. К математическим ключевым словам были отнесены названия статистических характеристик, методов преобразования и обработки данных, пакетов прикладных программ. Удалось выделить шесть смысловых групп математических терминов:

- I. стандартные статистические методы;
- II. многомерные методы (множественная регрессия и многофакторный дисперсионный анализ);
- III. отклонение от нормальности, непараметрические методы;
- IV. таблицы сопряженности и множественные сравнения;
- V. марковские случайные процессы;
- VI. дифференциальные уравнения.

Группы II и III характеризуют более продвинутые (сложные) методы по сравнению с группой I. Группу III характеризуют методы, в которых, в отличие от базовых, не выполняется предположение о нормальности данных, а в группе II представлены многофакторные методы. Группы IV характеризуется акцентом на дискретную природу факторов. Наконец, группы V и VI связаны с построением динамических моделей – вероятностных и детерминистских. Численность их оказалась неожиданно малой. Это тем более удивительно, что наиболее частыми ключевыми словами экологического направления были «конкуренция» и «динамика», казалось бы, требующие этих методов (см. табл. 2.1).

Таблица 2.1

Частота применения групп математических методов I-VI в статьях, относящихся к экологическим тематическим направлениям (в % от числа статей каждого направления)

Журнал, экологическая тематика		Число статей	Математические методы, %					
			I	II	III	IV	V	VI
Жур-нал "ECO-LOGY"	Наземные животные	116	90	73	43	19	3	3
	Птицы	10	100	80	40	10	0	0
	Водные сообщества	19	95	74	42	21	0	0
	Растения	101	94	72	38	17	1	2
Журнал "ЭКОЛОГИЯ"		104	69	13	0	0	0	0

По сравнению с журналом "ECOLOGY", математические методы в статьях из журнала "ЭКОЛОГИЯ" используются менее интенсивно как в количественном отношении, так и по разнообразию методов. Например, в 139 статьях из журнала "ЭКОЛОГИЯ" за 1991 г. термин «регрессия» встретился 16 раз, «дисперсионный анализ» – 8 раз (в то время как термин «среднее» встретился 62 раза). Для отечественных публикаций велика доля описательных и обзорных сообщений, не содержащих вообще упоминания статистических терминов ("ЭКОЛОГИЯ" – 24%, "ECOLOGY" – 4%).

Общие понятия и принципы

Последнее десятилетие много говорится о кризисе в представлениях об экологическом мире, причём весьма радикальной ревизии подвергаются почти все фундаментальные эвристики [Розенберг и соавт. 1999]. Г.С. Розенберг и И.Э. Смелянский [1997] так формулируют основные тенденции в изменении миропонимания:

1. пришло понимание субъективности образа экологического мира;

2. экологический мир перестал быть понятным и объяснимым;
3. пространство перестало быть простым;
4. время также перестало быть простым;
5. экологический мир стал динамическим.

Это делает вполне корректным употребление в отношении биологических наук таких понятий Т.Куна [1977], как "научная революция", "смена парадигм"¹² и т.д. По-видимому, можно заключить, что этот процесс сейчас находится на стадии "экстраординации" и еще далек от завершения.

Моделирование – это один из важнейших методов научного познания, с помощью которого создается модель (условный образ) объекта исследования. Сущность его заключается в том, что взаимосвязь исследуемых явлений и факторов передается в форме конкретных математических уравнений.

Процесс построения математической модели включает в себя следующие типовые этапы:

- формулирование целей моделирования;
- качественный анализ экосистемы, исходя из этих целей;
- формулировку законов и правдоподобных гипотез относительно структуры экосистемы, механизмов ее поведения в целом или отдельных частей (при самоорганизации эти законы "находит" компьютер);
- идентификацию модели (определение ее параметров);
- верификацию модели (проверку ее работоспособности и оценку степени адекватности реальной экосистеме);
- исследование модели (анализ устойчивости ее решений, чувствительности к изменениям параметров и пр.) и эксперимент с ней.

В условиях смены парадигм экологического мира здесь ярко проявляется:

- *принцип несоответствия точности и сложности*, который предложил Л. Заде [1974] и который формулируется следующим образом: понятия "точности" и "сложности" при прогнозировании структуры и поведения экосистем связаны обратной зависимостью – чем глубже анализируется реальная экосистема, тем менее определенны наши суждения о ее поведении.

Можно упомянуть еще несколько принципов, "воодушевляющих" математиков и системологов [Флейшман, 1982; Брусиловский, 1985; Розенберг с соавт., 1999]:

- *«для объяснения и предсказания структуры и (или) поведения сложной системы возможно построение нескольких моделей, имеющих одинаковое право на существование»* или **принцип множественности моделей В.В. Налимова** [1971];
- ни в одной из них нельзя учесть наиболее значимые факторы (*принцип omnipotentности факторов*);
- в конечном итоге экологическая система ведет себя совсем не так, как предсказывает модель (*принцип контринтуитивного поведения сложных систем Дж. Форрестера*).

Если вспомнить еще об уникальности экосистем, невозможности их редукции, сложности проведения системных экспериментов, значительной погрешности и малочисленности измерений многих экологических параметров, неполноте наших знаний о механизмах функционирования экосистем, то становятся понятны сомнения ряда специалистов относительно возможностей экологического прогнозирования, в частности, и экологического моделирования, вообще [Брусиловский, 1985, 1987]. В.В. Налимов [1979] писал, что можно «... как блестящие идеи, так и научные нелепости одинаковым образом облечь во впечатляющий мундир формул и теорем... Наряду с математизацией знаний происходит и математизация глупостей; язык математики, как ни странно, оказывается пригодным для выполнения любой из этих задач». Однако, при правильном применении, математический подход не отличается существенно от подхода, основанного на "традиционном здравом смысле". Математические методы просто более точны и в них используются более четкие формулировки и более широкий набор понятий. В конечном счете, они должны быть совместимы с обычными словесными рассуждениями, хотя, вероятно, идут дальше их.

В тех случаях, когда установлено постоянное и удовлетворительно точное согласие между математической моделью и опытом, такая модель приобретает практическую ценность. Эта ценность может быть достаточно велика, вне зависимости от того, представляет ли сама модель чисто математический интерес. Итак, сформулируем еще один принцип математического моделирования в экологии: **модель должна иметь конкретные цели**. Условно такие цели можно подразделить на три основных группы:

- 1) компактное описание наблюдений;
- 2) анализ наблюдений (*объяснение явлений*);
- 3) предсказание на основе наблюдений (*прогнозирование*).

¹² Парадигма (греч. Paradeigma) – пример, образец.

Нередко бывает так, что одну и ту же модель можно воспринимать сразу в трех "ипостасях", т.е. используя ее и для описания, и для анализа, и для предсказания. К примеру, логистической регрессией мы *описываем* параметры генеральной совокупности, но одновременно мы и *анализируем* взаимосвязи в этой совокупности, результат же логистической регрессии мы применяем для *предсказания*. Показано [Розенберг с соавт., 1999], что для сложных свойств сложных систем нельзя ожидать аналогичного успеха: одна модель (один закон) будет не в состоянии одновременно удовлетворительно выполнять как объяснительную, так и предсказательную функцию (принцип *разделения функций описания и прогнозирования*). Для объяснения необходимы простые модели, и здесь, по меткому выражению У.Р. Эшби [1966], «...в будущем теоретик систем должен стать экспертом по упрощению». Что касается экологического прогнозирования, то «*сложность модели для сложных объектов принципиально необходима*» [Ивахненко с соавт., 1980].

Несовместимость "простоты" модели и точности решения задачи проявляется в высказывании академика А.А. Самарского [1979]: «... исследователь постоянно находится между *Сциллой усложненности и Харибдой недостоверности*. С одной стороны, построенная им модель должна быть простой в математическом отношении, чтобы ее можно было исследовать имеющимися средствами. С другой стороны, в результате всех упрощений она не должна утратить и "рациональное зерно", существо проблемы». В этом высказывании заложен самый важный, на наш взгляд, принцип математического моделирования – любая модель должна иметь *оптимальную сложность*, необходимую и достаточную для решения поставленной задачи, – который восходит своими корнями к "бритве Оккама"¹³.

Принцип одномерности конечного решения

Смысл моделирования заключается в получении некоторого решения, в общем случае – многомерного. Пусть, например, $\{X\}$ – множество решений, которое может быть получено с помощью модели, а x – некоторое определенное решение, принадлежащее этому множеству: $x \in X$. Тогда считается, что для всех x может быть задана функция: $q(x)$, которая называется критерием (критерием качества, целевой функцией, функцией предпочтения, функцией полезности и т.п.), обладающая тем свойством, что если решение x_1 предпочтительнее x_2 , то:

$$q(x_1) > q(x_2).$$

При этом выбор сводится к отысканию решения с наибольшим значением критериальной функции. Например, наиболее популярным критерием в статистике является степень отклонения расчетных значений от эмпирических данных, которая оценивается *методом наименьших квадратов*.

Однако, на практике использование лишь одного критерия для сравнения степени предпочтительности решений оказывается неоправданным упрощением, т.к. сложный характер экосистем приводит к необходимости оценивать их не по одному, а по многим критериям, которые могут иметь различную природу и качественно отличаться друг от друга. Например, при разработке модели оценки "качества" водоема сравнение идет одновременно по многим группам критериев: гидрологическим, гидрохимическим, экологическим по различным группам гидробионтов, геологическим, экономическим, социальным, эргономическим и др. В то же время, рискуем предположить, что, какова бы не была сложность моделируемой системы, конечное решение всегда можно (и должно) найти в виде некоторого значения на предварительно обозначенной шкале одного целевого критерия – в этом и состоит *принцип одномерности конечного решения*.

Мем № 15: «*Правда всегда одна, – так говорил фараон;*

Он был очень умен и за это его прозвали Тутанхамон»

[гр. «Наутилус Помпилиус», песня «Тутанхамон», альбом «Титаник»].

Действительно, визит врача всегда должен завершаться конкретным выводом: здоров или болен пациент (а еще лучше – "болен на 36%"). Длинные рассуждения о сложной динамике многочисленных физиологических показателей и этиологии сопутствующих признаков воспринимаются как бесплодное умствование, хотя должны быть зафиксированы и, при необходимости, проанализированы.

¹³ Принцип "бритвы Оккама" был сформулирован в XIV веке английским философом Уильямом Оккамом в следующем виде: *frustra fit plura, quod fieri potest pauciora* – частностей должно быть не больше, чем их необходимо.

Принцип одномерности конечного решения тесно связан с *принципом рекуррентного объяснения* [Флейшман, 1982; Розенберг с соавт., 1999], который отражает иерархическую организацию моделей экосистем: свойства и решения, получаемые для подсистем каждого уровня, выводятся (объясняются), исходя из постулируемых свойств элементов нижестоящего уровня иерархии. Например, для моделирования свойств экосистемы (биоценоза) используются свойства и связи популяций, для вывода свойств популяций – свойства и связи отдельных особей и т.д. Необходимо только помнить, что любая иерархия имеет один и только один корень.

Многокритериальные задачи не имеют однозначного общего решения. Поэтому предлагается много способов придать многокритериальной задаче частный вид, допускающий единственное общее решение. Эти методы связаны, как правило, с условной максимизацией или сведением многокритериальной задачи к однокритериальной путем ввода суперкритерия.

Введем, например, суперкритерий $q_0(x)$, как скалярную функцию векторного аргумента в пространстве решений:

$$q_0(x) = q_0(q_1(x), q_2(x), \dots, q_n(x)).$$

Суперкритерий позволяет упорядочить частные решения по величине q_0 , выделив тем самым наилучшие из них (в смысле этого критерия). Вид функции q_0 определяется тем, как конкретно мы представляем себе вклад каждого критерия в суперкритерий. Обычно используют аддитивные и мультипликативные функции:

$$x^* = \arg \max_{x \in X} (q_0(q_1(x), q_2(x), \dots, q_n(x))).$$

Естественно, что для разных способов эти решения являются в общем случае различными. Поэтому едва ли не главное в решении многокритериальной задачи – обоснование данного вида ее постановки, которое делается чаще всего неформальными экспертными методами [Литвак, 1982; Сидельников, 1990].

Альтернативой единственному обобщенному показателю является математический аппарат типа многокритериальной оптимизации – множества Парето и т.д. (см., например, [Подиновский, Ногин, 1982]).

О возможных классификациях моделей

Вопросам экологического моделирования (в первую очередь, математического) посвящена обширная литература [Свирижев, Логофет, 1978; Федоров, Гильманов, 1980; Флейшман, 1982; Розенберг, 1984; Базыкин, 1985; Абросов, Боголюбов, 1986; Розенберг с соавт., 1994]. Однако составить строгую единую классификацию математических моделей, различающихся по назначению, используемой информации, технологии конструирования и т.п., принципиально невозможно, хотя версий таких классификаций существует достаточно много [Беляев и др., 1979; Флейшман и др., 1982; Розенберг, 1984].

В.В.Налимов [1971] делит математические модели в биологии на два класса – *теоретические (априорные)* и *описательные (апостериорные)*. П.М. Брусиловский [1985] видит математическую экологию как мультипарадигматическую науку с четырьмя симбиотическими парадигмами: *вербальной, функциональной, эскизной и имитационной*. Можно перечислить и другие основания для классификации моделей:

- природа моделируемого объекта (наземные, водные, глобальные экосистемы) и уровень его детализации (клетка, организм, популяция и т.д.);
- используемый логический метод: дедукция (от общего к частному) или индукция (от частных, отдельных факторов к обобщающим);
- статический подход или анализ динамики временных рядов (последний, в свою очередь, может быть ретроспективным или носить прогнозный характер);
- используемая математическая парадигма (детерминированная и стохастическая).

Наконец, по целям исследования, технологии построения, характеру используемой информации и просто для удобства последующего изложения все методы математического моделирования можно разделить на четыре класса:

- аналитические (априорные);
- имитационные (априорно-апостериорные) модели;
- эмпирико-статистические (апостериорные) модели;
- модели, в которых в той или иной форме представлены идеи искусственного интеллекта (самоорганизация, эволюция, нейросетевые конструкции и т.д.).

2.5. Аналитические и имитационные модели

Аналитические модели (англ. analytical models) – один из классов математического моделирования, широко используемый в экологии. При построении таких моделей исследователь сознательно отказывается от детального описания экосистемы, оставляя лишь наиболее существенные, с его точки зрения, компоненты

и связи между ними, и использует достаточно малое число правдоподобных гипотез о характере взаимодействия компонентов и структуры экосистемы. Аналитические модели служат, в основном, целям выявления, математического описания, анализа и объяснения свойств или наблюдаемых феноменов, присущих максимально широкому кругу экосистем. Так, например, широко известная модель конкуренции Лотки–Вольтерра позволяет указать условия взаимного сосуществования видов в рамках различных сообществ.

Одной из основных задач системной динамики является оценка устойчивости экосистем и описание качественных перестроек их поведения под воздействием внешних факторов. Наиболее адекватным математическим аппаратом построения и анализа таких аналитических моделей служит качественная теория дифференциальных уравнений [Эрроусмит, Плейс, 1986] и теория бифуркаций [Свирижев, Логофет, 1978; Свирижев, 1987]. Особую роль играют стохастические модели потенциальной эффективности экосистем Б.С. Флейшмана [1982, 1986].

При моделировании экосистем возникает также необходимость в исследовании диссипативных структур, энтропийных характеристик и процессов самоорганизации. А.Дж. Вильсоном [1978] излагается общая теория энтропийных моделей многокомпонентных экосистем, где взаимодействия на микроуровне описываются статистикой Больцмана. Г. Шустер [1988] приводит примеры моделей динамики популяций в открытых системах, полученные на основе теории стохастического поведения динамических диссипативных структур. Работа Дж. Николаса [1989] относится к области синергетики и исследует процессы самоорганизации открытых иерархических экосистем в ходе диссипации новой информации.

В качестве примера аналитической модели гидробиологических процессов "цветения водохранилищ" укажем на работы С.В. Крестина и Г.С. Розенберга [1996, 2002], где в рамках взаимодействий систем конкуренции видов и "хищник - жертва" дано возможное объяснение феномена всплеск численности синезеленых водорослей и более сложного процесса "волны цветения" по профилю водохранилища.

Имитационные модели (англ. simulation models) – один из основных классов математического моделирования. Целью построения имитаций является максимальное приближение модели к конкретному (чаще всего уникальному) экологическому объекту и достижение максимальной точности его описания. Имитационные модели претендуют на выполнение как объяснительных, так и прогнозных функций, хотя выполнение первых для больших и сложных имитаций проблематично (для удачных имитационных моделей можно говорить лишь о косвенном подтверждении непротиворечивости положенных в их основу гипотез).

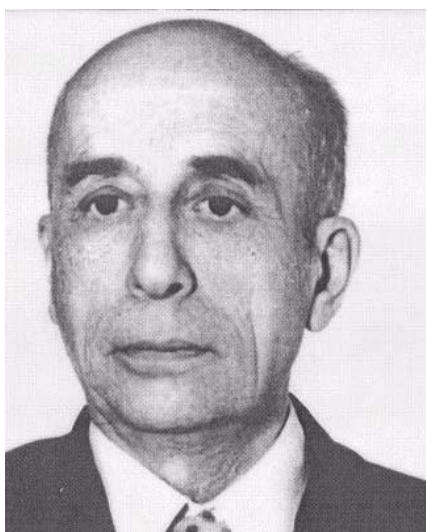
Имитационные модели реализуются на ЭВМ с использованием блочного принципа, позволяющего всю моделируемую систему разбить на ряд подсистем, связанных между собой незначительным числом обобщенных взаимодействий и допускающих самостоятельное моделирование с использованием своего собственного математического аппарата (в частности, для подсистем, механизм функционирования которых неизвестен, возможно построение регрессионных или самоорганизующихся моделей). Такой подход позволяет также достаточно просто конструировать, путем замены отдельных блоков, новые имитационные модели. Если имитационные модели реализуются без блочного принципа, можно говорить о *квазиимитационном* моделировании. Имитации, в которых все коэффициенты определены по результатам экспериментов над конкретной экосистемой, называются *портретными* моделями (цитата из В.В. Налимова [1971]: «поражают иной раз так называемые "портретные модели", в которых не заключено какое-либо большое содержание, а просто на языке математики записывается то, что с одинаковым успехом можно было бы выразить и на обычном языке. Ясно, что такие модели вызывают только раздражение у представителей конкретных областей знаний. Что нового, например, получила биология от того, что часть ее представлений была переформулирована в терминах теории информации?»)

Методы построения имитационных моделей чаще всего основываются на классических принципах системной динамики Дж. Форрестера [1978] (см. также Гильманов, 1978; Крапивин с соавт., 1982). Создание имитационных моделей сопряжено с большими затратами. Так, модель ELM (злаковниковой экосистемы, используемой под пастбище) строилась 7 лет с годовым бюджетом программы в 1,5 млн. долл. около 100 научными сотрудниками из более 30 научных учреждений США, Австралии и Канады [цит. по: Розенберг., 1984].

Построение имитационной модели может служить организующим началом любого серьезного экологического исследования. Хотя частная экосистема реки или озера и является элементарной ячейкой биосферы, ее математическая модель описывается системами уравнений того же порядка сложности, что и вся биосфера в целом, поскольку требует учета такого же большого количества переменных и параметров, описывающих функционирование отдельных подсистем и элементов (только на ином масштабном уровне). Поэтому исследователи ищут разумный компромисс: при составлении моделей многие параметры берутся агрегировано, допускаются разного рода аппроксимации и гипотезы, многие коэффициенты принимаются "по аналогии" с другими объектами и т.д. Поскольку среди допущений и предположений трудно выбрать наилучшее, снижается точность и познавательная ценность моделей, а, следовательно, их практическая применимость.

В настоящее время можно отметить два направления развития имитационного моделирования, где предлагаются достаточно конструктивные методы компенсации априорной неопределенности, проистекаю-

щей от нестационарного и стохастического характера экологических систем. Первое направление оформилось в виде методики решения задач идентификации и верификации как последовательного процесса определения и уточнения численных значений коэффициентов модели



Георгий Георгиевич ВИНБЕРГ
(1905-1987)

крупный специалист в области гидробиологии и продуктивности экосистем

деления и уточнения численных значений коэффициентов модели [Георгиевский, 1982; Сердюцкая, 1984]. Второе направление связано со стратегией поиска скрытых закономерностей моделируемой системы и интеграции их в модель [Лапко с соавт., 1999].

Приведем краткий обзор развития моделей этого класса, воспользовавшись материалами Л.Я. Ащепковой [1978].

Попытки моделирования динамики популяций предпринимаются давно. *Модель конкуренции* (уравнения Лотки–Вольтера, 1925-26 гг.) – классический пример аналитической модели, позволяющей объяснить и проанализировать возможные исходы межвидовой конкуренции. Однако, если модели типа "хищник–жертва" в частных случаях обнаруживали совпадение с данными натуральных наблюдений, то значительно хуже обстояло дело с взаимодействием организмов и окружающей среды. Сначала появились частные модели взаимодействия биоты с такими отдельными факторами, как солнечная радиация, температура [Крогиус с соавт., 1969], потом – модели взаимодействия организмов с абстрактными "ресурсами" [Абросов с соавт., 1982; Абросов, Боголюбов, 1986].

На примере модели динамики планктона Северного моря, Дж. Стил [Steele, 1974], используя простые представления о трофических цепях, описал модели комбинирования различных гипотез о пищевом поведении, оставляя минимум внимания особенностям пространственного распределения организмов. Дж. Дюбо

[Dubois, 1975] для того же Северного моря фокусировал внимание на причинах формирования пространственной неоднородности, учитывая два фактора: трофические отношения между фито- и зоопланктоном и скорость перемещения потоков воды в процессе диффузии.

Одной из первых математических моделей водных экосистем, в основе которых лежал энергетический принцип, была модель, созданная Г.Г. Винбергом и С.А. Анисимовым [1966]. Уравнения модели для живых компонент записывались в следующем виде:

$$\frac{db_i}{dt} = c_i - u_i - q_i - m_i - \sum_j \lambda_{ij} c_j ,$$

где t – время в сутках; b_i – биомасса; c_i – суточный рацион по В.С. Ивлеву [1955] или первичная продукция; u_i – неусвоенная пища; q_i – траты на обмен; m_i – суточная величина отмирания; λ_{ij} – доля i -го компонента в питании j -го; i, j – группы водорослей, зоопланктонов, рыб и бактерий.

В.В. Меншуткин и А.А. Умнов [1970] развили идеи Г.Г. Винберга, введя в рассмотрение цикл биогенных элементов. Модель экосистемы в каждый момент времени определялась следующим набором переменных: концентрации фито- и зоопланктона, рыб-планктофагов, бактерий и растворенного в воде органического вещества, а внешними факторами явились солнечная энергия, кислородно-углекислотный обмен с атмосферой и поступление аллохтонных веществ. Выходными параметрами модели были вылов рыбы, отложение в ил и вынос органических и неорганических ингредиентов, а также рассеянная энергия как результат трат на обмен.

Первые модели Винберга–Анисимова и Меншуткина–Умнова рассматривали экосистему в ее стационарном состоянии при постоянстве температуры среды и без учета сезонной динамики. Переменный характер внешней среды был учтен А.А. Умновым в модели озерной пелагической системы [1972], а впоследствии – для небольшой экосистемы участка Днепра [1973]. В последней модели, записанной в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений, автор самым подробным образом отразил процессы питания, отмирания, метаболизма роста и т.д. Например, уравнение для биомассы фитопланктона db_f в каждый час времени dt имело вид:

$$db_f / dt = P - R_1 - R_2 - R_3 - R_4 - R_5 ,$$

где:

– P – процесс фотосинтеза; $P = \xi \cdot \mu \cdot b_{chl} \cdot \beta$; μ – степень удовлетворения потребности фитопланктона в биогенных элементах; $\mu = v_p / v_h = \Phi / \chi$; v_p – реальная скорость потребления биогенов единицей биомассы фитопланктона; $v_h = \beta a$ – необходимая для нормального развития скорость потребления биогенов; b_{chl} – концентрация хлорофилла; β – удельная скорость роста фитопланктона при концентрации

биогенов, обеспечивающих нормальное развитие; $\beta = r_{t_0} \left(1 - e^{-\frac{I}{\tau_i + \tau_b b_f}} \right)$; $r_{t_0} = r_o T^{o^E} + \eta$; I – ин-

тенсивность освещения; $T^o(t)$ – температура воды в течение суток; $v_m' = \alpha b_n$ – максимально возможная скорость извлечения биогенов единицей биомассы фитопланктона; b_n – концентрация биогенов; $\chi = v_h / v_m$ – степень потребности фитопланктона в биогенах;

– R_1 – выедание фильтраторами; $R_1 = \psi b_f (1 - e^{-\chi m})$; $\chi_m = c / c_m$; c – рацион фильтраторов; c_m – максимальный рацион;

– R_2 – дыхание; $R_2 = k_f(t) b_f (1 - e^{-\frac{b_x}{r q f}})$; b_x – концентрация кислорода, растворенного в воде;

– R_3 – отмирание из-за недостатка биогенов; $R_3 = s_1 b_f (1 - \mu)$;

– R_4 – отмирание из-за недостатка кислорода; $R_4 = s_2 b_f e^{-\frac{b_x}{r q f}}$;

– R_5 – отмирание из-за неблагоприятных температурных условий; $R_5 = r b_f \frac{\Delta^n}{1 + \Delta^n}$;

$\Delta = \frac{T_0 - (T^* + T_*)/2}{(T^* + T_*)/2}$ – относительное отклонение температуры от центра "оптимального" диапазона

температур $[T^*, T_*]$. Остальные параметры уравнения – постоянные коэффициенты.

В дальнейшем модели этой школы развивались в направлении более глубокого описания жизненных процессов, а именно, их зависимости от условий среды и учету пространственных распределений в экосистеме, отражающих как их вертикальную, так и горизонтальную неоднородность. Подробные результаты и развитие формализованных представлений на примерах моделирования устья р. Невы и некоторых озер Северо-Запада России изложены авторами в публикациях [Умнов, 1996; Алимов с соавт., 1996а].

Значительный опыт создания имитационной модели водоема большой сложности был накоплен в процессе создания портретной модели экосистемы Азовского моря, подробное изложение которой выходит за рамки нашей книги [Сурков с соавт., 1977; Домбровский, 1977; Горстко, Эпштейн, 1978].

В качестве примера математической модели, где традиционный имитационный подход сочетается с визуальной интерпретацией результатов в виде фазового портрета экосистемы в плоскости двух обобщенных факторов, можно отметить модель круговорота азота в Куйбышевском водохранилище, разработанную в лаборатории "Экологического анализа и прогноза" Института проблем моделирования в энергетике им. Г.Е. Пухова Украины [Сердюцкая, Каменева, 2000]. Поскольку это – один из немногих известных авторам опыт имитационного моделирования экосистем на территории Волжского бассейна, мы, с любезного согласия зав. лабораторией Л.Ф. Сердюцкой, приводим в Приложении 1 расширенное описание выполненной работы. Еще одна квазиимитационная модель трансформации азота в Куйбышевском водохранилище, разработанная в ИЭВБ РАН, приведена в Приложении 2.

2.6. Эмпирико-статистические модели

Мем № 16: «Мы имеем по крайней мере одно весьма серьезное преимущество – владеем вероятностным мышлением» А.Н. Колмогоров [цит. по: Леонов, URLв].

Сущность, определения, классификация

Эмпирико-статистические модели объединяют в себе практически все биометрические методы первичной обработки экспериментальной информации. Основная цель построения этих моделей состоит в следующем:

- упорядочение или агрегирование экологической информации;
- поиск, количественная оценка и содержательная интерпретация причинно-следственных отношений между переменными экосистемы;
- оценка достоверности и продуктивности различных гипотез о взаимном влиянии наблюдаемых явлений и воздействующих факторов;

- идентификация параметров расчетных уравнений различного назначения.

Часто эмпирико-статистические модели являются "сырьем" и обоснованием подходов к построению моделей других типов (в первую очередь, имитационных).

Важным методологическим вопросом является определение *характера зависимости* между факторами и результативными показателями: функциональная она или стохастическая, прямая или обратная, прямолинейная или криволинейная и т.д. Здесь используются теоретико-статистические критерии, практический опыт, а также способы сравнения параллельных и динамических рядов, аналитических группировок исходной информации, графические методы и др.

Детерминированный анализ представляет собой методику исследования влияния факторов, связь которых с результативным показателем носит явно выраженный функциональный характер, т.е. когда результативный показатель представляется в виде произведения, частного или алгебраической суммы исходных факторов. Многочисленными примерами детерминированного подхода являются методики расчета различных гидрохимических и гидробиологических индексов, приведенных в части 2. В этих случаях исследователь сам берет на себя ответственность в том, что:

- причинно-следственная связь между изучаемыми явлениями действительно существует;
- эта связь носит именно постулируемый функциональный характер (аддитивный, мультипликативный, кратный или смешанный с заранее подобранными коэффициентами, отражающими субъективный опыт разработчика).

Стохастический анализ представляет собой обширный класс методов, опирающихся на теоретико-вероятностные представления, теоремы, критерии и методы параметрической и непараметрической статистики.

Исходный объект в любой системе обработки данных – это эмпирический ряд наблюдений или выборка. Выборки, описывающие явления и процессы в экосистеме, находятся во взаимосвязи, взаимозависимости и обусловленности. При этом каждое явление можно рассматривать и как причину, и как следствие. Одни выборки могут быть непосредственно связаны между собой, образуя подмножества сопряженных данных, другие могут соотноситься друг с другом косвенно.

Согласно классификации статистических методов, принятой в [Прикладная статистика..., 1987; Орлов, URLa,б], прикладная статистика делится на следующие четыре области:

- статистика (числовых) случайных величин;
- многомерный статистический анализ;
- статистика временных рядов и случайных процессов;
- статистика объектов нечисловой природы.

В вероятностной теории статистики *выборка* – это совокупность независимых одинаково распределенных случайных элементов. Природа этих элементов может быть различной. В классической математической статистике (той, что обычно преподают студентам) элементы выборки – это числа. Многомерный статистический анализ оперирует с векторами и матрицами данных. В нечисловой статистике элементы выборки – это объекты нечисловой природы, которые нельзя складывать и умножать на числа (другими словами, объекты нечисловой природы лежат в пространствах, не имеющих формальной векторной структуры).

Следует оговориться, что не существует какой-либо однозначной классификации эмпирико-статистических методов. Например, широкий пласт методов кластерного анализа, распознавания образов, анализа экспертных оценок и др., подробно описанных в части 3, занимают промежуточное положение: используя некоторые теоремы классической теории вероятностей, они имеют принципиально детерминированные механизмы поиска и основаны на эвристических алгоритмах. В связи с этим, говоря в дальнейшем о «статистике», мы будем понимать ее в широком смысле, в полном соответствии с приведенными ниже цитатами ¹⁴ :

- «*Статистика – это бюджет вещей*» [Наполеон Бонапарт, цит. по: Las Gases, "Memorial de Sainte-Helene", 1835];
- «*Существует три вида лжи – невинная ложь, наглая ложь и статистика*» [Марк Твен];
- «*Математическая статистика – это ветвь теории вероятностей. В ней рассматриваются задачи, связанные с оперативными характеристиками правил индуктивного поведения, основанных на случайных экспериментах*» [Ю. Нейман, 1968];
- «*Статистика – это математическая теория того, как узнать нечто о мире через опыт*» [У. Томпсон, W. Thompson, "The Future of Statistics"];
- «*Статистика – это искусство уточнять то, что является неизвестным*» [Д. Хуфф, D. Huff, "How to Lie with Statistics"];
- «*Статистика – это часть запутанной и переплетенной сети, связывающей математику, научную философию и другие отрасли наук...*» [Дж. Тьюки, J. Tukey];

¹⁴ Используется обширная "Коллекция высказываний о термине «статистика»" на сайте <http://www.biometrika.tomsk.ru/lib/collect.htm>

- «Маркс и Энгельс стали, таким образом, основателями принципиально новой социалистической статистики... Данные пролетарской статистики применяются для ведения классовой борьбы и укрепления международного движения за мир путем разоблачения махинаций империалистов» [А. Киндельбергер, A. Kindelberger, "Wie arbeitet die Statistik?"];
- «Я думаю, было вообще большой ошибкой изобрести термин "математическая статистика". Этот крупный промах привел к возникновению большого числа трудностей» [Дж. Бокс, G. Vox].

Несмотря на неопределенность в трактовке самого термина «статистика», мировой научной общественностью предпринимаются последовательные шаги по унификации конкретных методик статистического анализа. Например, в 1978 г. редакторы нескольких ведущих медицинских и биологических журналов собрались в Ванкувере (Канада), где и сделали первую попытку выработать технические требования к схемам представления результатов статистической обработки в рукописях, направляемых в редактируемые ими журналы. В настоящее время "Единые требования к рукописям", подготовленные Ванкуверской группой, становятся международным стандартом в статистике и действенным механизмом в стремлении повысить доказательность и надежность публикуемых сообщений.

В.П. Леонов, редактор электронного журнала БИОМЕТРИКА (www.biometrika.tomsk.ru); взял на себя труд перевести требования Ванкуверской группы, дополнив их рекомендациями ведущих российских статистиков и собственным опытом. Мы приводим без сокращений эту достаточно обширную таблицу, любезно предоставленную В.П. Леоновым, еще и потому, что она является своеобразным расширенным "классификатором" статистических методов и критериев.

Таблица 2.2

Схемы представления результатов статистической обработки для различных критериев и методов анализа

№ п/п	Метод проверки гипотез или статистический критерий	Содержание рекомендуемого описания.
1	Проверка гипотез о законе распределения	Наименование закона распределения, на соответствие которому производится проверка. Название статистического критерия, с помощью которого производится проверка гипотез, полученная величина данного критерия и отвечающее ему значение достигнутого уровня значимости.
2	Проверка равенства двух законов распределения вероятностей	Сформулировать причины проверки данной гипотезы, указать статистический критерий для проверки, привести его значение и достигнутый уровень значимости. Сделать вывод о том, какая из гипотез принимается и какой из этого следует вывод применительно к целям исследования.
3	Проверка нормальности распределения вероятностей	Сформулировать причины проверки данной гипотезы, указать статистический критерий для проверки, привести его значение и достигнутый уровень значимости. Сделать вывод о том, какая из гипотез принимается, и какой из этого следует вывод, применительно к целям исследования. Желательно привести график распределения на «вероятностной бумаге».
4	Критерий Колмогорова-Смирнова	Указать, какой именно из семейства критериев использовался в конкретном случае и цель его применения (сформулировать проверяемые гипотезы). Привести значение критерия и достигнутый уровень значимости. По результатам проверки сформулировать вывод относительно выдвигаемых гипотез.
5	Уровень значимости "p ="	Обязательное указание, к какому конкретному статистическому критерию относится данное значение уровня значимости. Не употреблять выражения вида «p < ...» или «p > ...».
6	Оценка дескриптивных статистик	Объем выборки (подгрупп), среднее, стандартное отклонение, ошибка среднего. При сравнении вариабельности двух и более признаков - коэффициент вариации. Обязательно сообщить, использовались ли методы оценки аномальных наблюдений (выбросов) и если – да, то какие. Сообщить, применялись ли методы робастного оценивания (Пуанкаре, Винзора, Хубера и т.д.)
7	Проверка гипотез о равенстве дисперсий с помощью F- критерия Фишера	Предварительно провести проверку имеющегося ограничения на использование F критерия Фишера. Вычислить значение критерия и достигнутого уровня значимости. Сделать вывод о том, какая из конкурирующих гипотез принимается, дать интерпретацию этого результата.
8	Проверка гипотез о равенстве дисперсий с помо-	Сформулировать проверяемую гипотезу о равенстве нескольких дисперсий и указать используемый для этого статистический критерий. Вычислить значение критерия и достигнутого уровня значимости. Сделать вывод о том, какая из конкурирующих гипотез

	щью критериев Кохрэна, Барглета и др.	принимается, дать интерпретацию этого результата. При использовании критерия Барглета обязательно привести результаты проверки нормальности во всех сравниваемых группах.
9	F-критерий Фишера	Сообщить, для проверки каких именно статистических гипотез использовался данный критерий, степени свободы для него и достигнутый уровень значимости.
10	Сравнение двух выборок с помощью критерия знаков	Дать описание природы количественного и группирующего признаков. Сообщить объемы наблюдений в сравниваемых группах. Сформулировать гипотезу, которая проверяется с помощью данного критерия. Привести вычисленное значение z-критерия и величину достигнутого уровня значимости. Результат проверки гипотезы интерпретировать.
11	Проверка гипотез о равенстве средних критерием Стьюдента	Привести объемы выборок, результаты проверки нормальности распределения (оно должно быть нормальным) и равенства генеральных дисперсий (они должны быть равны), значение t-критерия Стьюдента и значение достигнутого уровня значимости « $p = \dots$ ».
12	t-критерий Стьюдента при проверке иных гипотез	При проверке иных статистических гипотез (например, значимости коэффициентов корреляции или коэффициентов регрессии и т.п.) в пакетах программ могут не выводиться значения самого t-критерия Стьюдента, а только отвечающий ему уровень значимости. Поэтому можно ограничиться только уровнем значимости « $p = \dots$ ».
13	Критерий Манна-Уитни	Привести величину критерия и достигнутый уровень значимости. Привести значения средних величин сравниваемых групп.
14	Сравнение двух групп с помощью критерия серий Вальда-Вольфовица	Сформулировать гипотезу, проверяемую с помощью данного критерия. Привести значение критерия и достигнутый уровень значимости для него. Обязательно указать объем выборки, по которой проводилась проверка гипотез.
15	Сравнение двух выборок с помощью критерия Ван дер Вардена.	Сформулировать гипотезу, проверяемую с помощью данного критерия. Привести значение критерия и достигнутый уровень значимости для него. Обязательно указать объем выборки, по которой проводилась проверка гипотез.
16	U-критерий Вилкоксона, X-критерий Ван-дер-Вардена	Привести величину критерия и достигнутый уровень значимости. Привести значения средних величин сравниваемых групп.
17	Последовательный анализ Вальда	Привести аргументы в пользу выбранного метода анализа. Сформулировать проверяемые гипотезы. Привести значения статистических критериев и объемов наблюдения на момент окончания анализа. Указать, какая из конкурирующих гипотез была принята.
18	Дисперсионный анализ Краскала-Валлиса	Дать определение сравниваемых групп, указать количественную переменную, пояснить мотив выбора непараметрического ДА. Привести значение H-статистики Краскала-Валлиса, достигнутый уровень значимости. В случае отклонения нулевой гипотезы желательно провести множественные сравнения, результаты которых обсудить.
19	Дисперсионный анализ	Сообщить, был ли данный анализ параметрическим (по Фишеру), или же непараметрическим. В первом случае сообщить результаты проверки нормальности для всех (NB!) сравниваемых между собой групп, а также результаты сравнения генеральных дисперсий для этих групп (дисперсии должны быть равны). Сообщить, проверялась ли модель с фиксированными эффектами (модель 1-го типа), случайными факторами (модель 2-го типа), или же это была смешанная модель. Привести значение критерия Фишера, степени свободы и достигнутый уровень значимости. Для однофакторного дисперсионного анализа желательно сообщить и значение коэффициента детерминации. Для однофакторной модели с числом уровней более 2, после отклонения нулевой гипотезы провести множественные сравнения, используя линейные (или нелинейные) контрасты; результаты обсудить. Для многофакторного анализа привести и обсудить как значимые, так и не значимые эффекты взаимодействия.
20	Множественные контрасты в дисперсионном анализе	Сообщить, какой вид контрастов (линейные, нелинейные) использовались и их название (Шеффе, Дункана, Бонферрони и т.д.). Для обсуждаемых результатов контрастов привести полученные оценки (значения критерия и достигнутого уровня значимости). Желательно привести средние значения для сравниваемых групп.
21	Ковариационный анализ	Указать количественный признак, группирующий признак и ковариаты. Указать, являются ли ковариаты переменными или фиксированными. В случае влияния ковариат на межгрупповой фактор привести скорректированные средние.

22	Проверка гипотез о векторах с помощью λ -критерия Уилкса	Сформулировать проверяемые гипотезы, описать количественные признаки и группирующий признак. Сообщить результаты проверки гипотез нормальности в сравниваемых группах, а также результат проверки гипотезы о равенстве ковариационных матриц. Привести вычисленное значение λ -статистики, либо функций от этой статистики с величиной достигнутого уровня значимости. Дать интерпретацию принятой гипотезы.
23	Дискриминантный анализ	Дать описание дискриминируемых групп, их число и набор количественных переменных. Привести результаты проверки предположений для сравниваемых групп. Сообщить алгоритм оценки дискриминантных функций. Привести коэффициенты дискриминантных функций и канонических осей, обсудить их структуру, а также привести графики рассеяния в канонических осях. Привести таблицу классификации с использованием дискриминантных функций. При необходимости обсудить причины неправильной переклассификации отдельных наблюдений.
24	Оценка парных коэффициентов корреляции	Указать какой коэффициент корреляции оценивается (Пирсона, Спирмена, Кендала и т.д.). Для корреляции Пирсона обязательно сказать о результатах проверки нормальности для обоих признаков, привести значение коэффициента корреляции и значение достигнутого уровня значимости для него.
25	Оценка частных коэффициентов корреляции	Пояснить необходимость вычисления парциальных коэффициентов корреляции. Записать пару признаков, для которых вычисляется данный коэффициент и перечень элиминированных признаков. После вычисления парциального коэффициента провести проверку его значимости, сравнить его величину с парным коэффициентом, дать интерпретацию имеющегося различия.
26	Проверка гипотез о равенстве коэффициентов корреляции	Укажите, для какой пары признаков будет проводиться проверка гипотезы о равенстве коэффициентов корреляции, и сформулируйте саму гипотезу. В частности, сообщите вид сравниваемых коэффициентов корреляции, для какого количества коэффициентов проверяется гипотеза, и что представляют собой субпопуляции, в которых проведена оценка этих коэффициентов.
27	Коэффициент непараметрической корреляции γ	Обосновать выбор данной статистики. Указать пару признаков, для которых производится оценка корреляции. Привести значение γ -статистики и величину достигнутого уровня значимости. Интерпретировать полученный результат.
28	Коэффициент непараметрической корреляции τ -Кендалла.	Обосновать выбор данной статистики. Указать пару признаков, для которых производится оценка корреляции. Привести значение статистики Тау-Кендалла и величину достигнутого уровня значимости. Интерпретировать полученный результат.
29	W -коэффициент конкордации Кендалла	Сформулировать проверяемую гипотезу, дав описание анализируемых объектов и признаков. Привести вычисленное значение W -коэффициента, значение достигнутого уровня значимости и интерпретацию принятой гипотезы.
30	Ранговая корреляция Спирмена	Обосновать выбор данной статистики. Указать пару признаков, для которых производится оценка корреляции. Привести значение статистики Спирмена и величину достигнутого уровня значимости. Интерпретировать полученный результат.
31	Анализ таблиц сопряженности	Сообщить смысл отдельных градаций (уровней) анализируемых признаков. Уточнить, как вычислялся критерий Пирсона (классический метод, максимального правдоподобия, с поправкой Йейтса и т.д.), привести значение критерия, число степеней свободы, достигнутый уровень значимости, а также наиболее адекватный показатель интенсивности связи признаков. Желательно обсудить вклады отдельных клеток таблицы в статистику Пирсона.
32	Проверка гипотез для нескольких частотных таблиц с помощью Q -критерия Кохрена	Сформулировать проверяемую гипотезу, дав описание каждой из частотных таблиц. Привести вычисленное значение Q -статистики и достигнутый уровень значимости. Интерпретировать принятую статистическую гипотезу.
33	Методы теории планирования экспериментов	Привести цель планирования экспериментов, аргументы в пользу выбранного плана, его матрицу. Привести таблицы с оценками параметров полученных зависимостей, результаты проверки предположений, а также критерии согласия полученной модели и реальных наблюдений. В случае проведения процедуры оптимизации описать алгоритм оптимизации, привести графики в канонических осях.

34	Множественный регрессионный анализ	Сообщить о том, какой именно анализ использовался (линейный, нелинейный, методом наименьших квадратов либо какой-то иной). Сообщить об используемом алгоритме оценки коэффициентов регрессии (принудительное включение предикторов, пошаговый отбор, наличие/отсутствие свободного члена, метод всех регрессий, максимального значения коэффициента детерминации и т.д.). Привести результаты проверки нормальности остатков, некоррелированности и гомоскедастичности. Привести значения размерных и безразмерных коэффициентов регрессии и результаты проверки их значимости. Обсудить соотношения безразмерных коэффициентов регрессии. Привести результаты проверки адекватности всего уравнения в целом (дисперсионный анализ). Привести значения множественного коэффициента корреляции и коэффициента детерминации.
35	Анализ канонических корреляций	Сформулировать гипотезу, которую предполагается проверить данным методом. Перечислить состав каждого множества признаков. Привести оценки параметров выбранного канонического уравнения, а также значение коэффициента канонической корреляции и результат проверки его значимости. Привести график распределения объектов в осях канонических переменных. Дать интерпретацию имеющейся связи между двумя множествами.
36	Нелинейный регрессионный анализ	Сообщить о том, какой именно алгоритм оценки коэффициентов регрессии использовался. Привести результаты проверки адекватности всего уравнения в целом (дисперсионный анализ).
37	Оценка аллометрических уравнений	На вербальном уровне описать модель связи между исследуемыми признаками. Записать в явном виде искомое аллометрическое уравнение. Указать метод оценки параметров уравнения, в частности, используются ли линеаризация, или же оценка производится иными методами. Если последнее, то указать какими. Привести значения оценок параметров и проверить их значимость. Привести график фактических и расчетных значений зависимой переменной. Обсудить полученное уравнение.
38	Нелинейные преобразования переменных	Сформулировать цель применения нелинейных преобразований. Явно указать используемое преобразование. Если есть особые точки в преобразовании, уточнить, как поступали с наблюдениями в этом случае. Прокомментировать, была ли достигнута поставленная цель с помощью этого преобразования. Если использовались параметрические преобразования типа Бокса-Кокса или Бокса-Тидвелла, указать метод оценки искомых параметров преобразований, и результаты его использования.
39	Анализ таблиц дожития и оценка уравнений кривых выживаемости	Указать выбранную модель выживаемости - модель пропорционального риска Кокса, экспоненциальная регрессия, нормальная и логнормальная регрессия, стратифицированный анализ, метод множительных оценок Каплана-Мейера и т.д. Привести таблицы оценок параметров и результатов проверки значимости полученных уравнений, а также графики с функциями выживаемости. В случае сравнения выживаемости двух групп привести используемый критерий (Гехана – Вилкоксона, F-критерий Кокса, критерий Кокса-Мантеля, логранговый критерий, критерий Вилкоксона-Пето и т.д.)
40	Оценка кривых "Доза-Эффект"	Привести выражение нелинейного уравнения регрессии, для которого производится оценка зависимости "Доза-Эффект". Сообщить, в каких единицах обозначается доза и эффект. Указать метод оценки параметров уравнения (метод наименьших квадратов, функция потерь, метод взвешенных наименьших квадратов, метод максимума правдоподобия, максимум правдоподобия и логит/пробит модели и т.д.). Привести характеристики пригодности модели, объясненную долю дисперсии, критерий согласия, график наблюдаемых и предсказанных значений и т.д.
41	Критерий Пирсона на хи-квадрат	Сообщить, как вычислялся критерий Пирсона (классический метод, максимального правдоподобия, с поправкой Йэйтса и т.д.), привести значения критерия, степеней свободы, достигнутого уровня значимости. Для таблиц сопряженности привести наиболее адекватный показатель интенсивности связи признаков.
42	Анализ главных компонент	Сообщить на основе какой именно матрицы (ковариационной или корреляционной) выполнялся данный анализ. Указать каким методом производился отбор используемых главных компонент из всех возможных компонент. Обсудить структуру отобранных компонент и дать их интерпретацию.
43	Факторный анализ	Сообщить об алгоритме выделения факторов из корреляционной матрицы (главные компоненты, использование общностей, метода максимального правдоподобия, центроидный или метод главных осей) а также об алгоритме вращения осей. Отметить, являются ли факторы после вращения ортогональными или использовался алгоритм косоугольного вращения. Привести аргументацию выделения необходимого количества факторов, их структуру, дать интерпретацию генеральных, общих и характерных факторов. При-

		вести данные об информативности выделенных факторов. Желательно привести графику распределения собственных значений и распределение нагрузок признаков в осях факторов, а также результаты проверки значимости собственных значений.
44	Анализ соответствий	Сообщить, является ли данный анализ парным или множественным. Перечислить признаки, используемые в данном анализе, в случае множественного анализа указать группирующий признак. Привести значение статистики Пирсона и достигнутый уровень значимости для нее. Привести таблицу координат строк и столбцов в новых осях. По результатам анализа привести график распределения анализируемых признаков в осях новых координат, выделив при этом градации группирующего признака, обсудив взаимное расположение точек на данном графике. Привести показатели качества отображения, относительную инерцию и величину косинус-квадрат.
45	Кластерный анализ	Сообщить с какой целью использовался кластерный анализ, в частности, сформулировать некоторые гипотезы, которые предполагалось проверить с помощью этого вида анализа. Уточнить, что являлось объектом кластеризации (наблюдения или признаки), указать используемую метрику и алгоритм кластеризации (иерархический КА, метод k-средних, метод поиска сгущений и т.д.). Обязательно указать используемый функционал качества кластеризации. Привести результаты кластеризации, которые могут иметь разную природу в зависимости от алгоритма кластеризации. Весьма желательно привести графические результаты кластеризации. Обсудить соответствие результатов кластерного анализа и сформулированных выше гипотез. Указать пути дальнейшего использования результатов кластерного анализа.
46	Многомерное шкалирование	Сформулировать гипотезу, для проверки которой был использован метод многомерного шкалирования. Укажите используемый метод шкалирования (метрический или неметрический). Перечислить используемые в процедуре шкалирования переменные, указать искомую размерность отображения объектов, привести аргументацию выбора количества осей, показатели качества отображения (стресс, диаграмму Шепарда). Дайте интерпретацию полученных результатов, сопровождая ее графиком распределения объектов в осях новых шкал.
47	Анализ временных рядов	Указать, был ли весь ряд эквидистантным, а также какой из алгоритмов анализа использовался. Если производилось сглаживание ряда, указать алгоритм сглаживания. Идентифицировать модель временного ряда. Если производилась оценка тренда – привести результаты такой оценки; то же самое для сезонности. При оценке функции автокорреляции привести ее график и оценки значимости коэффициентов. При использовании модели АРПСС (Бокса и Дженкинса) привести оценки параметров модели а также указать алгоритм оценки (квазиьютоновский максимизации правдоподобия, приближенный метод максимального правдоподобия МакЛеода и Сейлза, приближенный метод максимального правдоподобия с итерациями назад, точный метод максимального правдоподобия по Меларду и т.д. При использовании одномерного анализа Фурье, кросс-спектрального анализа либо быстрого преобразования Фурье привести их результаты в виде оценок параметров и графиков (периодограммы, спектральные плотности и т.д.).
48	Оценка отношения шансов	Описать, каким образом организовывались перекрестные исследования, какой смысл имели отдельные уровни признаков, между которыми изучалась связь. Привести оценку отношения шансов, и дать его словесную интерпретацию. Привести стандартную ошибку оценки отношения шансов, которая дает представление о его точности. Желательно также привести величину относительного риска, а также рассмотреть возможность использования логарифма отношения шансов и логистической модели. Используя соответствующий статистический критерий провести проверку значимости отношения шансов.
49	Проверка гипотез о равенстве относительных частот	Пояснить целесообразность проверки сформулированной гипотезы, сообщить выборочные значения относительных частот, записать проверяемую гипотезу, указав число пропорций. Пояснить какой метод использовался для проверки этой гипотезы. В зависимости от количества и вида признаков, идентифицирующих разные пропорции, эти методы могут отличаться.
50	Построение доверительного интервала для относительной частоты	Сообщить, для какого показателя получена оценка относительной частоты и для чего необходимо построение доверительного интервала. Указать величину доверительной вероятности. Учтявая, что существуют разные методы оценки доверительного интервала для относительной частоты, указать метод построения доверительного интервала.
51	Логистическая регрессия с биномиальной или	Указать название и градации зависимой переменной, а также число предикторов, предлагаемых для включения в уравнение. Если предикторов немного, перечислить их, если же достаточно много (порядка нескольких десятков), описать их в виде отдельных групп

	мультиномиальной переменной отклика	признаков. Сообщить число наблюдений по каждой градации зависимого признака, метод оценки параметров уравнения, коэффициенты логистического уравнения и отношения шансов, критерии согласия фактических и предсказанных состояний объектов по градациям зависимой переменной. Желательно для наиболее интересных результатов записать в явной форме уравнение логистической регрессии.
52	Лог-линейный анализ	Сформулировать гипотезу, которую предполагается проверить с помощью логлинейного анализа. Указать зависимую переменную и предикторы, а также алгоритм построения зависимости (принудительное включение признаков, автоматический поиск оптимального подмножества, использование эффектов взаимодействия и т.п.). Указать, для каких именно комбинаций признаков имелись в наличии структурные нули. Привести для конечного варианта значение статистики Пирсона и указать, как она вычислялась (классический метод или метод максимального правдоподобия). Обсудить имеющиеся маргинальные и частные связи. Привести график наблюдаемых и расчетных частот. При необходимости привести значение критерия Мантеля-Ханзеля.

Задачи о выборках: анализ распределений, сравнение, поиск зависимостей

Анализ каждой произвольной выборки, представляющей собой совокупность независимых, одинаково распределенных случайных измерений, начинается с расчета описательных статистик эмпирического ряда: средних, дисперсии, основных моментов высшего порядка, медианы, моды, стандартного отклонения, ошибки среднего и др. Расчету элементарных статистик посвящено огромное множество литературы [Урбах, 1963; Смирнов, Дунин-Барковский, 1965; Крамер, 1975; Гнеденко, 1988; Калинина, Панкин, 2001; Ю. Прохоров, 2002], что избавляет нас от необходимости углубляться в эту тему. Рядом авторов [Браунли, 1977; Айвазян с соавт., 1983; Зайцев, 1984] предлагаются также специальные критерии, предназначенные для оценки показателей вариации, точности опыта, репрезентативности и случайности выборок и т.д. Можно привести также некоторые ссылки на источники, где статистические методы рассматриваются в контексте использования популярных пакетов прикладных программ [Тюрин, Макаров, 1995; Боровиков, 2001; Алексахин с соавт., 2002] или в виде руководства к использованию офисного табличного процессора Excel [Лапач с соавт., 2000].

Особое место в анализе выборок занимает проверка соответствия характера эмпирического распределения какому-нибудь заданному закону распределения [Кендалл, Стьюарт, 1966; Гмурман, 1972; Джонсон, Лион, 1980, 1981]. Это связано с тем, что вид функции распределения часто постулируется как одно из важнейших предположений применения большинства статистических методов.

Разработанную в первой трети XX в. теорию называют *параметрической статистикой* [Плошко, Елисеева, 1990; Орлов, URL6], поскольку ее основной объект изучения – это выборки из распределений, описываемых одним или небольшим числом параметров. Наиболее общим является семейство кривых Пирсона, задаваемых четырьмя параметрами [Елисеева, Юзбашев, 1995; Вентцель, 1999]. Как правило, нельзя указать каких-либо веских причин, по которым конкретное распределение результатов экологических наблюдений должно входить в то или иное параметрическое семейство. В подавляющем большинстве реальных ситуаций таких предположений сделать нельзя, но, тем не менее, приближение реального распределения с помощью кривых из семейства Пирсона или его подсемейств часто не является чисто формальной операцией. Закономерности расчета описательных статистик в зависимости от распределения эмпирического ряда хорошо известны: если вероятностная модель основана на нормальном распределении, то расчет математического ожидания предусматривает суммирование независимых случайных величин; если же модель приближается к логарифмически нормальному распределению, то итог естественно описывать как произведение таких величин и т.д.

В первой же трети XX в., одновременно с параметрической статистикой, в работах Ч.Спирмена и М.Кендалла появились первые *непараметрические методы*, основанные на коэффициентах ранговой корреляции, носящих ныне имена этих статистиков [Кендалл, 1975; Рунион, 1982; Холлендер, Вулф, 1983]. Но непараметрика, не делающая нереалистических предположений о том, что функции распределения результатов наблюдений принадлежат тем или иным параметрическим семействам распределений, стала заметной частью статистики лишь со второй трети XX в. В 30-е годы появились работы А.Н. Колмогорова и Н.В. Смирнова, предложивших и изучивших статистические критерии, носящие в настоящее время их имена и основанные на использовании так называемого эмпирического процесса – разности между эмпирической и теоретической функциями распределения [Большев, Смирнов, 1968; Гублер, Генкин, 1973].

Во второй половине XX в. развитие непараметрической статистики пошло быстрыми темпами, в чем большую роль сыграли работы Ф. Вилкоксона и его школы [Гаек, Шидак, 1971]. К настоящему времени с помощью непараметрических методов можно решать практически тот же круг статистических задач, что и с помощью параметрических [Никитин, 1995]. Все большую роль играют непараметрические оценки плотно-

сти вероятности, непараметрические методы регрессии и распознавания образов (дискриминантного анализа).

Тем не менее, параметрические методы всё еще популярнее непараметрических, хотя неоднократно публиковались обзоры [Налимов, 1960; Максимов с соавт., 1999], свидетельствующие о том, что распределения реально наблюдаемых случайных величин (в частности, биологических данных) в подавляющем большинстве случаев отличны от нормальных (гауссовских). Теоретики продолжают строить и изучать статистические модели, основанные на гауссовости, а практики – применять подобные методы и модели («ищут под фонарем, а не там, где потеряли»). Однако полностью игнорировать классические методы не менее вредно, чем переоценивать их. Поэтому целесообразно использовать одновременно оба подхода – и параметрические методы, и непараметрическую статистику. Такая рекомендация находится в согласии с концепцией математической устойчивости [Орлов, 1979], рекомендующей использовать различные методы для обработки одних и тех же данных с целью выделить выводы, получаемые одновременно при всех методах.

Любая выборка экологических данных является принципиально неоднородной, поскольку измерения могут осуществляться в различные временные периоды, разных пространственных точках водоема, с использованием различных инструментальных методов и т.д. В связи с этим, важным этапом математической обработки является дисперсионный анализ, с помощью которого оценивается, имеют ли место статистические различия между отдельными подмножествами данных и можно ли считать их принадлежащими одной генеральной совокупности [Плохинский, 1970; Лисенков, 1979; Джонсон, Лион, 1980, 1981, Любичев, 1986]. Если каждому измерению поставлен в соответствие один признак (фактор), определяющий условия его реализации, то говорят об однофакторном дисперсионном анализе. Если таких группобразующих факторов больше одного, то выполняется многофакторный дисперсионный анализ [Плохинский, 1982; Афифи, Эйзен, 1982].

Если выборка состоит из двух рядов сопряженных наблюдений, измеренных в идентичных условиях, то решается задача регрессионного анализа, т.е. один эмпирический ряд объявляется результивным показателем или «откликом» Y , а другой – независимой варьируемой переменной X или «фактором»¹⁵. Теория и практика одномерного регрессионного анализа также представлена многочисленными литературными источниками [Хальд, 1956; Андерсен, 1963; Себер, 1980; Дрейпер, Смит, 1986; Дюк, 1997].

Мем № 17: «Те биологические системы, которые не смогли охватить громадный диапазон жизненно значимых воздействий среды, попросту вымерли, не выдержав борьбы за существование. На их могилах можно было бы написать: "Они были слишком линейны для этого мира". Но такая же судьба ожидает и математические модели, не учитывающие этой важной особенности жизни» А.М. Молчанов [1975].

Основной задачей регрессионного анализа является идентификация вида функциональной зависимости $Y \approx f(X)$, восстанавливаемой по эмпирическим данным. Реальный мир в подавляющем большинстве случаев объективно нелинеен (нелинеен, например, даже закон Ома, если в нем учесть температурную зависимость). В ряде случаев вид аппроксимирующего уравнения заранее предполагается из некоторых теоретических соображений. Если этого нет, то, исходя из принципа множественности моделей В.В. Налимова, одному и тому же конечному результату будет соответствовать значительное множество вариантов расчетных формул. Возникает традиционная ситуация пребывания исследователя «между Сциллой усложненности и Харибдой недостоверности», когда необходим выбор регрессионного уравнения оптимальной сложности.

Нелогично описывать уравнением прямой или другими простыми алгебраическими функциями динамику рядов биологических показателей, характеризующихся "горбами", перегибами и прочими нестационарными атрибутами. В этом случае неоптимальность модели связана с ее недоопределенностью, когда сложность структуры аппроксимирующей функции недостаточна для отображения сложности изучаемого процесса. Еще раз напомним слова А.Г. Ивахненко о том, что сложность модели для сложных объектов принципиально необходима.

Другим возможным источником неоптимальности является переопределенность структуры выбранной модели: через n точек всегда можно провести бесконечное множество кривых с нулевой ошибкой (например, с помощью полиномов степени выше n), но это исключает какую-либо содержательную интерпретацию полученной зависимости. До сих пор во многих научных работах авторы постулируют некоторую функцию лишь на том основании, что она весьма близко прошла через их экспериментальные точки [Фукс, 1975; Айвазян с соавт., 1985]. Такие доказательства "правильности" теорий нельзя принимать серьезно, так как за пределами эмпирического материала такая модель может вести себя достаточно "причудливым" образом, что поставит под сомнение возможность получения надежного прогноза и достоверной связи между факторами. «Переусложнение модели так же вредно, как и ее недоусложнение» [Ивахненко, 1982].

¹⁵ Дисперсионный анализ может быть интерпретирован как частный случай регрессионного анализа, если представить группобразующий фактор как переменную X , измеренную в порядковой шкале или шкале наименований.

Сущность нахождения модели оптимальной сложности заключается в ее поэтапной структурной идентификации, т.е. одновременном определении оптимальной структуры и оценки параметров модели. Например, можно предложить следующий порядок подгонки моделей:

- строится модель простой линейной регрессии и оценивается его адекватность, поскольку линейная форма модели в целом является более предпочтительной;
- если уравнение прямой выглядит неудовлетворительным, то рассматривается семейство простых алгебраических функций;
- в случае наличия многовершинности или периодичности данных, ищут аппроксимацию в классе полиномов, сплайнов или алгоритмов МГУА (подробнее об этом классе функций можно прочитать в нашей предыдущей книге [Розенберг с соавт., 1994]).

Более строгие методы проверки гипотезы о линейности связаны с анализом выборочных корреляционных отношений на основе методов интервальной математики.

Таблицы сопряженности и интервальная математика

Математический аппарат, осуществляющий анализ таблиц сопряженности, используется в тех случаях, когда данные, в которых измерены показатели Y и X , представлены в шкале наименований или порядковой шкале. В этих случаях любые статистические методы, основанные на параметрических распределениях, оказываются неприменимыми и анализ таблиц сопряженности [Елисеева, Рукавишников, 1977; Аптон, 1982; Енюков, 1986; Флейс, 1989] оказывается практически единственным надежным видом обработки (хотя существуют, например, специальные методы регрессии типа логит- и пробит-анализа или нейросетевой анализ).

Среди различных статистических методов изучения биологической вариабельности анализ частот считается наиболее распространенным и адекватным. Достаточно напомнить, что именно анализу частот современная биология обязана открытием гена (Г. Мендель, Т. Морган). Популярность этого подхода оказалась настолько велика, что разработаны методики его адаптации к количественным признакам, которые заключаются в разбиении области существования переменной на интервалы и подсчете вероятностей появления значения признака в каждом из этих интервалов. Таким образом, можно получить надежную и непротиворечивую оценку степени и характера влияния фактора на зависимую переменную, хотя, в отличие от регрессионного анализа, конкретный расчет уравнения связи $Y \approx f(X)$ здесь не достигается.

Как отмечалось выше, при анализе эмпирического материала часто оказывается, что средняя арифметическая и коэффициент корреляции – плохие количественные характеристики гидробиологических данных, где часто не подтверждается гипотеза о нормальности распределения. Возникают ситуации, когда средние арифметические биологических признаков статистически неразличимы, хотя на самом деле выборки этих значений имеют существенные отличия. Коэффициенты корреляции Пирсона и уравнения регрессии могут свидетельствовать о взаимосвязи, которой на самом деле нет или, наоборот, не в состоянии выявить связь, когда она есть. Одним из альтернативных методов обработки, обеспечивающих более надежные и устойчивые оценки, явились специальные приемы и алгоритмы [Гублер, 1978; Хьюбер, 1984], также основанные на анализе частот или интервальных средних.

В главе 6, наряду с критериями оценки связей в таблицах сопряженности, описывается несколько внешне непохожих подходов к статистической обработке данных, объединенных одной общей идеей интервальной математики: анализ корреляционных отношений, прямой градиентный анализ, метод сравнения выборок, основанный на использовании информационной меры Кульбака и детерминационный анализ. С точки зрения математической статистики такой подход наименее требователен к распределению данных и основывается лишь на предпосылке независимости наблюдений.

Задачи о классификациях: отношения сходства и порядка многомерных объектов

От выборок, являвшихся предметом предыдущего изложения и представляющих вариационные ряды (векторы) отдельных показателей, перейдем к моделям многомерного пространства (матрицам наблюдений). Введем первоначально такие понятия, как «объект» и «признак». Под «объектами» (от лат. *objectum*) будем подразумевать конкретные предметы исследования, в первую очередь, те точки наблюдений $i = 1, 2, \dots, n$, где были взяты гидробиологические пробы. «Признак» X_{ij} (синонимы – свойство, переменная, характеристика; англ. *variable* – переменная) – представляет собой конкретное свойство j объекта i , $j = 1, 2, \dots, m$, которое может быть выражено в шкале произвольного характера.

Цель статистического моделирования в гидробиологии часто сводится к классификации: на некотором подмножестве выборок ищутся новые ассоциативные или группирующие отношения, связывающие объекты (кластерный анализ) или показатели (факторный анализ).

Как отмечалось выше, операции по упорядочиванию гидробиологических объектов и математическому моделированию экологических сообществ разного масштаба и структуры осуществляются на фоне углубления понятия об экосистеме, как пространственно-временном континууме. Вопрос о соотношении

непрерывности и дискретности экосистем не может быть решен без уточнения понятия "однородный", т.к. абсолютной однородности видовой структуры быть не может и вероятность точного повторения пространственного рисунка из одних и тех же видов приближается к нулю. Однако, если измерять однородность реальными рамками масштаба принятых в гидробиологии таксономических единиц, то повторение одних и тех же более или менее сцепленных замещающих друг друга видов не является редкостью.

В любой научной деятельности классификация является одной из фундаментальных составляющих, без которой невозможны построение и проверка научных гипотез и теорий. В качестве метода типологического анализа наиболее широко в настоящее время используется *кластерный анализ* – это обобщенное название достаточно большого набора алгоритмов, используемых при создании классификации. Сам термин «кластерный анализ» впервые был предложен Р. Трионом [Tuyon, 1939], а слово "cluster" переводится с английского языка как "гроздь, кисть, пучок, группа" (по этой причине первое время этот вид анализа называли "гроздевым анализом"). К настоящему времени эта область математики переживает бум популярности: по приблизительным оценкам специалистов число публикаций по кластерному анализу и его приложениям в различных областях знания удваивается каждые три года.

Первые работы, в которых упоминались кластерные методы, появились достаточно давно. Польский антрополог К. Чекановский в 1911 г. предложил стратегию "структурной классификации", основанную на фундаментальной идее кластерного анализа – выделении компактных групп объектов. В начале прошлого века отечественный биометр П.В. Терентьев [1925; цит. по: 1959] разработал так называемый "метод корреляционных плеяд", предназначенный для группировки коррелирующих признаков. Этот метод дал толчок развитию методов группировки с помощью графов. В начале 50-х годов появились публикации Р. Люиса, Е. Фикса и Дж. Ходжеса по иерархическим алгоритмам кластерного анализа и работы Р. Розенблатта по распознающему устройству (перцептрон), положившие начало развитию теории "распознавания образов без учителя".

Теоретическим введением в использование методов кластеризации в биологии явилась книга "Принципы численной таксономии", опубликованная двумя биологами – Р. Сокэлом и П. Снитом [Sokal, Sneath, 1963]. Авторы этой книги исходили из того, что для создания эффективных биологических классификаций процедура кластеризации должна обеспечивать использование всевозможных показателей, характеризующих исследуемые экосистемы, производить оценку степени сходства между отдельными организмами и обеспечивать размещение схожих объектов в одну и ту же группу. При этом сформированные группы должны быть достаточно "локальны", т.е. сходство объектов (организмов) внутри групп должно превосходить сходство групп между собой. Последующий анализ выделенных группировок, по мнению авторов, может выяснить, отвечают ли эти группы разным биологическим видам. Иными словами, Сокэл и Снит предполагали, что выявление структуры распределения объектов в группы помогает установить процесс образования этих структур. А различие и сходство организмов разных кластеров (групп) могут служить базой для осмысления происшедшего эволюционного процесса и выяснения его механизма.

Определение кластерного анализа дано, например, в последнем издании "Статистического словаря" [1989]: *«Кластерный анализ – совокупность математических методов, предназначенных для формирования относительно "отдаленных" друг от друга групп "близких" между собой объектов по информации о расстояниях или связях (мерах близости) между ними. По смыслу аналогичен терминам: автоматическая классификация, разбиение, группировка, таксономия, распознавание образов без учителя».*

Задача выделения групп однородных гидробиологических объектов в общем виде достаточно сложна. Под кластером обычно понимается группа объектов [Дидэ, 1985], обладающих свойством метрической близости ("сходности"): плотность объектов внутри кластера больше, чем вне его. Однако данное определение не является строгим (строгого определения не существует вообще): можно лишь вербально описать кластер, указав некоторые его характерные свойства, допускающие субъективное толкование. Не представляет труда интуитивно верно разделить совокупность компактных и дискретных групп, характеризующихся малыми расстояниями между членами одной группы и большими расстояниями между членами разных групп. Но такие случаи в гидробиологической практике достаточно редки; чаще всего сообщества гидробионтов образуют непрерывный и стохастически варьлируемый континуум без сколько-нибудь резких границ между биоценозами.

Другой проблемой кластерного анализа является его собственная методологическая "рыхлость", выраженная в отсутствие единого подхода и стратегии. Всегда приходится сознавать, что полученный при использовании кластерного анализа результат является одним из возможных, причем отсутствуют строгие математические методы его сравнения с аналогичными результатами, полученными с применением других комбинаций метрик, алгоритмов объединения и т.д. Поэтому убедить самому и убедить своих оппонентов, что данный результат является оптимальным, воз-

можно лишь в тех редких случаях, когда найденная классификация не только что-то "объясняет", но имеет и предсказывающую способность [Леонов, URLv]. Любой класс, ассоциация, кластер, полученный по технологии "без учителя" и состоящий из некоторого подмножества реальных объектов – всегда некоторая умозрительная теоретическая конструкция, которую принципиально невозможно точно измерить, а, следовательно, оценить качество предсказания или, хотя бы, сформулировать критерии, позволяющие надежно предпочесть одну полученную классификацию другой. Некорректность любых утверждений о том, например, что метод ближайшей связи с использованием меры сходства по формуле Т. Сьёренсена приводит к "лучшей" классификации, чем, предположим, алгоритм П. Макнаутона-Смита на основе взвешенной евклидовой дистанции, стали очевидными с появлением в 1931 г. знаменитой теоремы К. Гёделя [Нагель, Ньюмен, 1970]. Если не прибегать к точной математической формулировке, суть этой теоремы состоит в том, что всякая формальная логическая теория часто содержит такие утверждения, которые нельзя ни доказать, ни опровергнуть внутренними средствами этой теории. Такие доказательства возможны только с помощью *внешнего дополнения* или средствами более мощной логической теории. Их в случае кластерного анализа заменяет только человеческий опыт и интуиция, которые, к сожалению, всегда субъективны.

Абсолютное большинство методов кластеризации [Дюран, Оделл, 1980; Классификация и кластер., 1980; Мандель, 1988] основывается на анализе квадратной и симметричной относительно главной диагонали матрицы коэффициентов сходства (расстояния, сопряженности, корреляции и т.д.). При определении корреляции между признаками сравнивается распределение двух каких-либо видов в определенной серии наблюдений и оценивается, насколько тесно совпадают эти распределения. Определение корреляции между объектами представляет обратную задачу: сравниваются две точки отбора проб и оценивается, насколько тесно совпадает набор их признаков. В кластерном анализе всегда подчеркивалась принципиальная равноправность обоих этих методов, причем вычисление матрицы коэффициентов корреляции размерностью $m \times m$ между признаками обозначалась как **R**-техника, а вычисление корреляции между объектами (матрица $n \times n$) – как **Q**-техника.

Наиболее часто используются иерархические классификации [Айвазян с соавт., 1974; Жамбю, 1988], которые могут быть представлены в двух основных формах – *дерева* (фиг. А рис. 2.3) и *вложенного множества* (фиг. В). Дерево представляет собой специальный вид направленного графа – структуры, состоящей из узлов, связанных дугами. Дерево иерархической классификации обладает следующими свойствами:

- имеется один и только один корень (иногда в полном противоречии с ботаникой его называют вершиной);
- всегда имеется путь от корня до любого другого узла в дереве;
- каждый узел, кроме корня, имеет одного и только одного родителя (т.е. граф не должен иметь циклов и петель) и произвольное число потомков;
- узлы дерева, которые не имеют потомков, называются листьями и они соответствуют исходному множеству классифицируемых объектов.

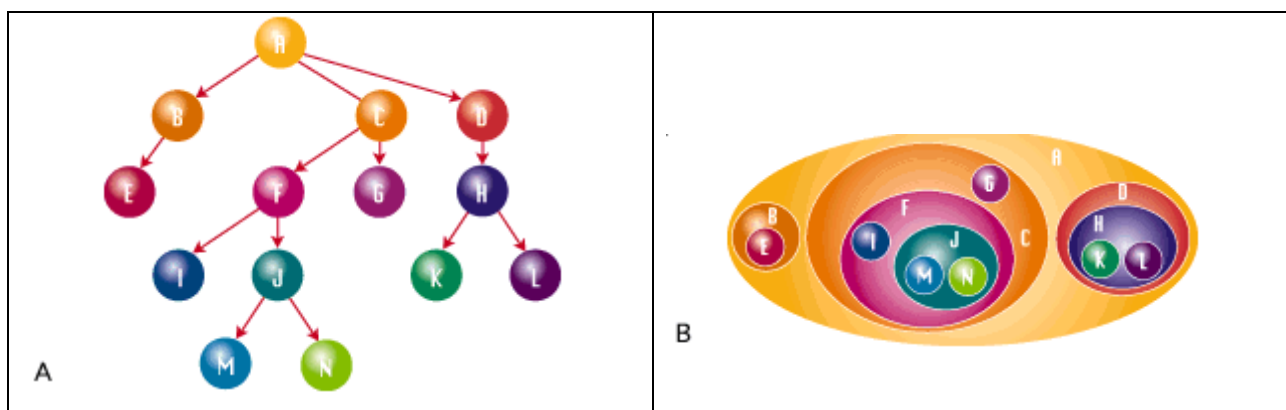


Рис. 2.3. Методы представления результатов классификации (А – дерево, В – вложенное множество)

Визуализация дерева разбиений осуществляется в виде двух специальных графиков:

- *дендрограммы*, где пары объектов соединяются в соответствии с уровнем связи, отложенным по оси ординат,

- дендрита – графа максимального корреляционного пути, где изображение объектов на плоскости произвольно, а ребра соответствуют максимальному значению из всех связей каждого объекта с другими.

В справочнике И.П. Гайдышева [2001] показано, что дендрограмма, и дендрит – визуальное отображение одной и той же сущности: по графу легко может быть построена дендрограмма и наоборот.

Многомерный подход основан на предположении, что существует возможность лаконичного объяснения природы анализируемой многокомпонентной структуры [Браверман, Мучник, 1983; Александров, Горский, 1983; Верхаген с соавт., 1985]. Это означает, что есть небольшое число определяющих факторов, с помощью которых могут быть достаточно точно описаны как наблюдаемые характеристики анализируемых состояний, так и характер связей между ними [Ким с соавт., 1989]. Иногда эти факторы могут оказаться в явном виде среди исследуемых признаков, но чаще всего оказываются латентными или скрытыми. Сжатое (редуцированное) представление исходных данных в виде матрицы F с меньшим числом переменных p ($m > p$) без существенной потери информации, содержащейся в исходной матрице X , является сущностью таких важнейших методов снижения размерности, как факторный анализ, многомерное шкалирование, метод главных компонент, целенаправленное проецирование [Ватанабе, 1969; Харман, 1972; Дубров, 1978; Терехина, 1986; Краскел, 1986; Дэйвисон, 1988; Ципилева, 1989]. Эти методы применяются при решении следующих задач:

- редукция данных или понижение размерности признакового пространства типа "объект-признак" за счет сведения многочисленных взаимозависимых наблюдаемых переменных к некоторым обобщенным ненаблюдаемым факторам;
- преобразование исходных переменных к более удобному для визуализации виду и классификация объектов на основе сжатого признакового пространства;
- создание структурной теории исследования объектов и интерпретация косвенных факторов, не поддающихся непосредственному измерению.

С общетеоретических позиций кластерный анализ также является своеобразным методом снижения размерности, выполняемый в пространстве объектов. Определены [Попечителей, Романов, 1985] основные требования, которые являются определяющими для выбора метода снижения размерности: взаимная некоррелированность, наименьшие искажения структуры моделируемых данных, наибольшая надежность правильного разбиения исходной выборки на естественные группы и т.д.

2.7. Оценка качества водных экосистем по многомерным эмпирическим данным

Мем № 18: «Каковыми бы сложными не были состав элементов, структура взаимосвязей или материально-энергетические процессы в реальной экосистеме, все они, в конечном итоге, сводятся для наблюдателя всего к двум показателям: численности и биомассе особей отдельных видов, измеренных в пространственно-временном аспекте. Роль гидробиолога состоит в том, чтобы по этим двум показателям восстановить всю сложность реального мира, используя свой опыт и "арсенал" математических формул»

[Авторы настоящей книги; предлагается впервые].

Общая постановка задачи

Несмотря на то, что в нашей стране нет общепринятой системы оценки качества вод по гидробиологическим показателям [Винберг, 1979а], основной задачей классической гидробиологии остается таксация водоемов по степени загрязнения. Основные принципы такой оценки в конечном итоге сводятся к следующим формальным аксиоматическим предпосылкам, без выполнения которых эта задача не имеет смысла.

1. Пусть "качество вод" – некоторая внешняя характеристика водоема, оценивающая возможность его использования в тех или иных практических целях, которая может быть представлена шкалой некоторого непрерывного или дискретного показателя Y . Предположим, что заранее установлены сущность и способ измерения (расчета) этого критерия. Для определенности предположим, что величина Y возрастает с уменьшением качества вод.
2. Структурные и функциональные характеристики водных биоценозов являются важными индикаторами "качества вод", иными словами, предполагается некоторая статистически значимая стохастическая связь между величиной Y и некоторой совокупностью гидробиологических измерений.
3. Структура биоценоза может быть достаточно адекватно описана двумя классами переменных: показателями обилия в пространстве видов X_{ai} ($i = 1, 2, \dots, n_i$) и некоторым множеством n_u обобщенных индексов X_{uj} ($j = 1, 2, \dots, n_u$), которые являются в конечном итоге функциями того же обилия – численности и биомассы.

4. Состоятельная и эффективная оценка показателя "качества вод" Y может быть рассчитана с использованием следующей модели, использующей оба класса переменных (для сокращения формы записи приводится ее линейная интерпретация):

$$Y = \beta - \left(\sum_{i=1}^{n_s} \lambda_{vi} x_{vi} + \sum_{j=1}^{n_u} \lambda_{uj} x_{uj} \right), \quad (2.5)$$

где: λ_{vi} и λ_{uj} – найденные коэффициенты статистической модели, β – свободный член.

Величины λ_{vi} при неизвестных X_{vi} в уравнении (2.5) играют роль "индикаторных валентностей": большие положительные значения связаны с чувствительными видами-индикаторами воды высокого качества, отрицательные значения (< 0) – с видами, характерными для загрязненных водоемов, а коэффициенты, близкие к нулю – с эврибионтными видами, не являющимися индикаторами.

Подмножество обобщенных индексов X_{ij} может включать любые, в том числе, такие общепризнанные показатели как информационный индекс Шеннона, биотический индекс Вудивисса, составляющие функционально-энергетического баланса, сапробиологические показатели, коэффициенты, основанные на учете индикаторных групп гидробионтов (олигохет, хирономид и др.). Единственным критерием для включения индекса в модель является его предполагаемая информативность, т.е. возможность учесть при анализе данных новые информационные аспекты, не содержащиеся в явном виде в исходном пространстве видов, а также использовать в конкретных случаях анализа весь ретроспективный опыт и закономерности, выявленные исследователями на водоемах других регионов. В частности, в подмножество обобщенных индексов могут входить абсолютные или относительные показатели обилия отдельных трофико-таксономических групп (см. главу 4).

Статистическое моделирование, всегда основанное на апостериорной информации, предполагает наличие обучающей выборки: таблицы с эмпирическими данными, где каждой k -й строке $\{x_1, \dots, x_i, \dots, x_n\}$ поставлено в соответствие строго определенное значение показателя качества y_k . Если этот показатель измерен в непрерывных шкалах, то решается задача *множественной регрессии*. Если y_k имеет смысл *класса качества* и представлен шкалой наименований или порядковой шкалой, то решается задача *распознавания образов*. В этом случае обучающая последовательность представляет собой таблицу, разбитую на L непересекающихся подмножеств строк, причем любому из L классов принадлежит не менее одного объекта. Содержательный смысл задаваемой системы классификации $\{y_1, y_2, \dots, y_L\}$ не имеет никакого значения для последующего изложения и может быть вполне произвольным (например: любые градации сапробности, токсобности, классов качества вод, типов водоемов, природно-климатических зон и т.д.) Можно упомянуть особый случай представления класса качества y_k в бинарной (альтернативной) шкале измерения, когда используются лишь две градации, например, "плохое качество / хорошее качество".

С точки зрения общих концепций классификации и прогнозирования, каких-либо четких отличий между регрессионным анализом и распознаванием образов нет. Приведем, в частности, обобщенную формулировку задач статистики для таблицы наблюдений X , с предельной ясностью сделанную Г.С. Лбовым [1981], который выделил четыре классические постановки:

- распознавание образов (предсказание для объекта значения некоторого его целевого признака, выраженного в шкале наименований);
- регрессия (предсказание значения числового признака для объекта);
- динамическое прогнозирование значения числового признака объекта, использующее временные изменения значений этого же признака (анализ временных рядов);
- автоматическая группировка объектов (кластерный анализ).

Каждая из перечисленных постановок сводится, в сущности, к единой задаче *заполнения пропусков* в таблице данных. При автоматической группировке объектов в таблицу добавляется новый столбец, содержащий информацию о разбиении всего множества объектов на группы схожих. Для иных постановок прогнозируются неизвестные значения признаков у тех объектов, где имеется пропущенная информация (т.е. смысл задачи заполнения пропусков является эквивалентной классическому восстановлению неизвестных функциональных зависимостей по априори неполной таблице экспериментальных данных).

Процедуры многомерного статистического анализа сводятся к идентификации математических моделей, отражающих состояние объекта. *Идентификация* – это:

- процесс восстановления функции условного математического ожидания моделируемой функции объекта Y на основе ее предполагаемой стохастической связи с набором признаков (для задачи множественной регрессии);
- формирование решающих правил или сравнение образа объекта с набором образов, уже имеющихся в системе идентификации (для задачи распознавания образов).

Задача идентификации уравнений регрессии в прикладном смысле сводится к расчету и последующему анализу модели (2.5), т.е. выбору комплекса информативных переменных, наилучшим образом объясняющим существующие закономерности (*структурная идентификация*), подбору оптимальных коэффициентов уравнения или частных выражений для составляющих компонент (*численная и функциональная идентификация*).

Любая гидробиологическая среда представляет собой большой, сложный, слабо детерминированный и эволюционирующий объект исследования. Поэтому, как показывает практика, предположения о линейности аппроксимирующей функции (2.5), как правило, лишены оснований. Теория самоорганизации моделей показывает, что огромное большинство процессов в природе может быть описано, например, в виде полиномов высокой степени, являющихся частным случаем обобщенного полинома Колмогорова–Габор [Габор, 1972; Ивахненко с соавт., 1976]:

$$y = a_0 + \sum_{i=1}^n a_i x_i + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_i a_j x_i x_j + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n a_i a_j a_k x_i x_j x_k + \dots \quad (2.6)$$

Число членов полного полинома равно C_{m+q}^q , где m – число переменных, q – степень полинома, и уже при $n=q=7$ достигает 3600. Поэтому основная задача моделирования сложных систем с использованием регрессионных уравнений заключается в том, чтобы исключить в полиноме (2.6) подмножество "лишних" неинформативных коэффициентов и сохранить необходимое и достаточное сочетание "объясняющих членов". Сложность синтезированной модели будет оптимальной, если необходимая адекватность обеспечивается при минимальном количестве составляющих ее элементов [Эшби, 1959].

Для реализации этих условий необходим набор алгоритмов и методов построения различных эмпирических моделей прогнозирования (2.5), который бы удовлетворял следующим условиям:

- достаточная высокая вычислительная эффективность, позволяющая получить работоспособные модели при разумных ресурсных издержках;
- отсутствие определяющих ограничений на функцию распределения данных;
- обеспечение возможности обработки разнотипных экспериментальных данных (без сведения всех признаков к одной шкале) и инвариантность к допустимым преобразованиям шкал признаков;
- робастность и технологичность при наличии пропусков в таблице, а также в случае, если число измеренных признаков n значительно превышает число объектов m ;
- простота получения результата и инвариантность к конкретной проблемной области.

В этих условиях методы традиционной параметрической статистики не всегда могут быть работоспособны, поскольку требуют либо ощутимого объема исходных данных, либо некоторых предположений о виде функций распределения. Определенную альтернативу им составляют алгоритмы распознавания образов.

Методы распознавания образов

Как отмечалось выше, реальные гидробиологические объекты отличаются друг от друга какими-либо свойствами, но в то же время, многие из них обладают и некоторой общностью, что позволяет объединять объекты в классы. В математической литературе часто используется тождественное «классу» понятие «образа» и многие задачи классификации объединены под названием "проблемы распознавания образов". Наиболее удачно смысл этого термина сформулирован Н.Г. Загоруйко [1972]: «Под образом будем понимать наименование области в пространстве признаков, в которой отображается множество объектов или явлений реального мира».

Понятие «образа» может быть в разной степени абстрактным по отношению к изучаемым предметам и явлениям. Например, в объективной реальности не существует "экосистемы вообще", а существуют только отдельные измерения, наделенные некоторыми общими свойствами и объединенные исследователем в некоторый образ "экосистема". В нашем случае "экосистемой" можно назвать и некоторую небольшую географическую общность точек наблюдения (створ, станция), и произвольный участок реки, и отдельную реку или некоторую их совокупность, и весь Волжский бассейн в целом. В рамках тех формально-логических определений "экосистемы", которые существуют в настоящее время, корректность перечисленных утверждений нельзя ни доказать, ни опровергнуть (что вытекает из теоремы о "неполноте" К. Гёделя).

В рассматриваемом случае классы эквивалентности с той или иной степенью обоснованности задаются самим исследователем, т.е. рассматривается задача "распознавания с учителем", что отличает ее от описанного выше кластерного анализа. При этом выделяемые самостоятельные единицы ("экземпляры") образов группируются на основе некоторых содержательных представлений или используется внешняя дополнительная информация о сходстве и различии объектов в контексте решаемой задачи (например, постулируются образ буквы «А», границы реки Сок или в отдельный "грязный" класс выделяются измерения с $БПК_5 > 3$).

Предтечей математических методов распознавания образов явился дискриминантный анализ, предложенный в 1936 г. Р. Фишером (R. Fisher), – классическая ветвь биометрии, которая уже более 60 лет нахо-

дит применение в самых разных областях биологической систематики и медицинской диагностики [Урбах, 1964; Дуда, Харт, 1978; Кравцов, Милютин, 1981; Айвазян с соавт., 1989; Ким с соавт., 1989]. Этот вид анализа обобщает несколько тесно связанных статистических процедур, относящихся к подмножеству линейных методов, поскольку модель классификации линейна относительно дискриминантных функций и напоминает множественную линейную регрессию. С другой стороны, основная идея дискриминантного анализа заключается в том, чтобы определить, отличаются ли совокупности по среднему значению линейной комбинации исходных переменных, и затем использовать эту комбинацию, чтобы предсказать для новых членов их принадлежность к той или иной группе. Поставленная таким образом задача о дискриминантной функции может быть сформулирована как задача многомерного дисперсионного анализа (MANOVA).

Множество алгоритмов распознавания образов, при всей их несхожести, методически основаны на одной предпосылке – гипотезе компактности [Айвазян с соавт., 1989; Кольцов, 1989], т.е. «в используемом пространстве признаков измерения, принадлежащие одному и тому же классу, близки между собой, а измерения, принадлежащие разным классам хорошо разделены друг от друга». Существуют разные версии классификации алгоритмов распознавания, предлагаемые Ю.Л. Барабашем с соавторами [1967], Л.Т. Кузиным [1979], П. Уинстоном [1980], В.И. Васильевым [1983], А.Л. Гореликом и В.А. Скрипкиным [1984], Я.З. Цыпкиным [1984] и др. Например, в работах Е.В. Луценко [1996, 2002] используется типология методов распознавания образов на основе двух основных способов представления знаний:

- интенциональное представление – в виде схемы связей между признаками;
- экстенциональное представление – с помощью описаний конкретных объектов.

Обобщенные выводы из этого детального обзора методов распознавания мы представили в табл. 2.3, хотя не во всем согласны с излишне категоричными мнениями автора о недостатках анализируемых алгоритмов.

Обзор методов автоматической классификации применительно к проблемам геоботаники был выполнен также одним из соавторов книги [Розенберг, 1977].

Методы, основанные на оценках плотностей распределения значений признаков, заимствованы из классической теории статистических решений [Кендалл, Сьюарт, 1973], в которой объекты исследования рассматриваются как реализации многомерной случайной величины, распределенной в пространстве признаков по какому-либо закону [Афффи, Эйзен, 1982; Горелик, Скрипкин, 1984]. Эта группа методов использует ту или иную интерпретацию формулы условных вероятностей Т. Байеса (Т. Bayes) и имеет прямое отношение к методам дискриминантного анализа.

В группе *методов, основанных на предположениях о классе решающих функций*, считается известным общий вид уравнения разделяющей поверхности и задан функционал качества разбиения [Аркадьев, Браверман, 1971; Дуда, Харт, 1978; Кольцов, 1989]. Самыми распространенными являются представления решающих функций в виде линейных и обобщенных нелинейных полиномов, что позволяет говорить об аналогии этих методов с частными реализациями регрессионного анализа. Функционал качества решающего правила обычно связывают с ошибкой классификации. Наиболее эффективными методами этой группы являются алгоритм построения оптимальной разделяющей гиперплоскости – "обобщенного портрета" [Вапник, Червоненкис, 1974] и разделение классов потенциальными функциями [Айзерман с соавт., 1970; Ту, Гонсалес, 1978].

Логические методы распознавания образов базируются на аппарате булевой алгебры логики и позволяют оперировать информацией, заключенной не только в отдельных признаках, но и в сочетаниях значений признаков [Горелик с соавт., 1985]. В главе 8 будут представлены результаты использования наиболее распространенного алгоритма этой группы – "Кора" [Бонгард, 1967; Вайнцвайг, 1973], формирующего систему логических решающих правил в виде конъюнкций элементарных событий.

Лингвистические методы распознавания образов основаны на использовании специальных грамматик (т.е. правил построения объектов из "атомарных" элементов), порождающих языки, с помощью которых может описываться совокупность свойств распознаваемых объектов [Фу, 1977; Борисов с соавт., 1982; Горелик с соавт., 1985]. Синтаксические анализаторы, которые представляют полное описание объекта в виде дерева грамматического разбора, устанавливают его синтаксическую правильность, а именно, может ли фиксированная грамматика, описывающая некоторый класс, породить имеющееся описание объекта. В противном случае, объект либо отклоняется, либо подвергается анализу с помощью других грамматик, описывающих другие классы объектов.

В *экстенциональных методах*, в отличие от *интенционального направления*, каждому изучаемому объекту в большей или меньшей мере придается самостоятельное диагностическое значение. Объекты в указанной группе методов играют роль *диагностических прецедентов*, при этом роль каждого из них может меняться в самых широких пределах: от главной до весьма косвенного участия в процессе классификации. По

своей сути экстенциональные методы рассматривают измерения как целостные феномены, каждый из которых индивидуален и имеет особенную диагностическую ценность, что определяет высокую эффективность этих методов для "чистого" прогноза. Однако задача восстановления *закономерностей поведения объектов и интерпретации связей между варьируемыми переменными* (т.е. функция объяснения) является для них трудно формализуемой.

Таблица 2.3

Классификация методов распознавания образов; области их применения, наличие ограничений и недостатков [Луценко, 1996]

Классификация методов распознавания		Область применения	Ограничения (недостатки)
Методы, основанные на операциях с признаками (интенциональные методы)	Методы, основанные на оценках плотностей распределения значений признаков	Задачи с известным распределением (как правило, нормальным), необходимость набора большой статистики.	Необходимость перебора всей обучающей выборки при распознавании, высокая чувствительность к репрезентативности обучающей выборки и артефактам.
	Методы, основанные на предположениях о классе решающих функций	Классы должны быть хорошо разделяемыми, система признаков - ортонормированной	Должен быть заранее известен вид решающей функции. Невозможность учета новых знаний о корреляциях между признаками.
	Логические методы	Задачи небольшой размерности пространства признаков.	При отборе логических решающих правил (конъюнкций) необходим полный перебор. Высокая вычислительная трудоемкость.
	Лингвистические (структурные) методы	Задачи небольшой размерности пространства признаков.	Задача восстановления (определения) грамматики по некоторому множеству высказываний (описаний объектов), является трудно формализуемой.
Методы, основанные на операциях с объектами (экстенциональные методы)	Метод сравнения с прототипом	Задачи небольшой размерности пространства признаков.	Высокая зависимость результатов классификации от меры расстояния (метрики).
	Метод <i>k</i> -ближайших соседей	Задачи небольшой размерности по количеству классов и признаков.	Высокая зависимость результатов классификации от меры расстояния (метрики). Необходимость полного перебора обучающей выборки при распознавании. Вычислительная трудоемкость.
	Алгоритмы вычисления оценок (голосования) АВО	Задачи небольшой размерности по количеству классов и признаков.	Зависимость результатов классификации от меры расстояния (метрики). Необходимость полного перебора обучающей выборки при распознавании. Высокая техническая сложность метода.
	Коллективы решающих правил	Задачи небольшой размерности по количеству классов и признаков.	Очень высокая техническая сложность метода, теоретические проблемы, как при определении областей компетенции частных методов, так и в самих частных методах.

Основными операциями в распознавании образов с помощью методов второй группы являются операции определения сходства и различия объектов. Дальнейшее разделение экстенциональных методов на подклассы основано на различии в количестве диагностических прецедентов, которые используются для процесса решения: от одного в каждом распознаваемом классе (*метод сравнения с прототипом*) до полного объема выборки (*алгоритмы АВО* Ю.И. Журавлева [1978, Журавлев, Никифоров, 1971]). В частности, при классификации неизвестного объекта по *методу k-ближайших соседей* [Гренандер, 1979, 1981, 1983] находится заданное число (*k*) геометрически ближайших к нему в пространстве признаков других объектов с уже известной принадлежностью к распознаваемым классам. Дальнейшее решение принимается, например, с помощью простого подсчета голосов.

Так как различные алгоритмы распознавания проявляют себя по-разному на одной и той же выборке объектов, то закономерно встает вопрос о синтетическом решающем правиле, адаптивно использующем сильные стороны этих алгоритмов [Растрингин, Эренштейн, 1981; Брусиловский, Розенберг, 1983; Брусиловский, 1987; Розенберг с соавт., 1994]. В коллективах решающих правил применяется двухуровневая схема распознавания. На первом уровне работают частные алгоритмы распознавания, результаты которых объединяются на втором уровне в блоке синтеза. Наиболее распространенные способы такого объединения основаны на выделении "областей компетентности", для которых доказана успешность работы какого-либо частного алгоритма распознавания.

Наряду с формальными методами распознавания образов полное и адекватное развитие в различных областях получили различные *эвристические алгоритмы* классификации и прогнозирования. Этот подход основывается на трудно формализуемых знаниях и интуиции исследователя, который сам определяет, какую информацию и каким образом нужно использовать для достижения требуемого эффекта распознавания. Примерами таких "авторских" методов являются процедура автоматической классификации геоботанических описаний [Розенберг, 1984] и алгоритм расчета индикаторных валентностей, представленный в главе 8.

Выбор методов многомерного анализа и особенности их реализации

Не только отклик Y модели (2.5), но и варьируемые переменные X_{6i} , X_{ij} могут быть измерены в различных шкалах: количественной, порядковой или бинарной (альтернативной). В зависимости от размерности признакового пространства и шкал представления данных, могут быть использованы различные математические методы обработки многомерных наблюдений, каждый из которых имеет свою область и особенности применения. В рамках настоящей монографии мы были не в состоянии детально описать и выполнить расчеты для всех многочисленных алгоритмов параметрической статистики и распознавания образов, поэтому в главе 8 ограничились некоторым "джентльменским" набором, руководствуясь при отборе соображениями популярности, доступности и личными симпатиями. Область применения каждого из использованных методов для различных шкал переменных представлена в табл. 2.4.

Таблица 2.4

Условия применения некоторых математических методов обработки многомерных наблюдений

Наименование метода или алгоритма	Шкала измерения отклика Y			Использование обобщенных индексов	Шкала измерения обилия видов		
	Количественная	Порядковая	Альтернативная		Количественная	Порядковая	Альтернативная
1. Множественный регрессионный анализ	⊕			$n_u > 0$			
2. Логистическая регрессия и упорядоченный пробит-анализ		⊕	⊕	$n_u > 0$			
3. Линейный дискриминантный анализ		⊕	⊕	$n_u > 0$			
4. Алгоритм вычисления индикаторных валентностей		⊕	⊕	$n_u = 0$	⊕	⊕	⊕
5. Построение разделяющей гиперплоскости (метод обобщенного портрета)			⊕	$n_u = 0$		⊕	⊕
6. Алгоритмы алгебры логики (метод «Кора»)			⊕	$n_u = 0$			⊕

При использовании параметрических методов статистики, представленных в табл. 2.4 пунктами 1-3, надежность получаемых результатов может в значительной мере зависеть от характера распределения исходных переменных. При анализе моделей часто используются такие предположения, как равенство дисперсионных матриц, равенство условных вероятностей событий в пределах класса и априорных вероятностей наблюдения классов, равенство функций потерь и т.д. Размерность признакового пространства практически не должна превышать 250-300, иначе могут возникнуть трудности вычислительного характера при матричных преобразованиях.

Как убедительно свидетельствует работа В.Н. Максимова с соавт. [1999], применение методов математической статистики, основанных на стандартном анализе дисперсий и ковариаций, оказывается малоэффективным для оценки причинно-следственных связей в пространстве гидробиологических переменных,

которые представляют собой сильно разреженные матрицы большой размерности, заполненные в основном нулями. Поскольку основная часть таксономических групп зообентоса встречается всего в нескольких пробах из ста, нельзя говорить о сколько-нибудь приблизительной нормальности распределения обилия видов: признаковое пространство очень обширно, плохо обусловлено и скорее дискретно, чем непрерывно.

В связи с этим, применение классических параметрических методов 1-3 для обработки таблиц наблюдений в пространстве видов оказалось невозможным и, в качестве переменных моделей, использовались обобщенные индексы или показатели обилия таксонов, объединяющих группы видов. При использовании эвристических и непараметрических методов моделирования 4-6, которые не предъявляют жестких требований к таким свойствам исходных выборок, как нормальность распределения переменных, однородность дисперсий и т.п., имеется возможность детализации признакового пространства до уровня показателей обилия отдельных видов.

2.8. Методы и модели искусственного интеллекта

Мем № 19: *«Обладея возможностью запоминать и взаимосвязывать огромное число каузальных сил, компьютер может нам помочь справляться с проблемами на гораздо более глубоком, чем обычно уровне. Он может просеивать громадные массивы данных, чтобы отыскать едва уловимые образцы, помочь собрать разрозненные "крупички информации" в большое по объему и значению целое... Можно ожидать, что компьютеры углубят всю культуру суждения о причинности, усиливая наше понимание взаимосвязанности вещей, помогая нам синтезировать значимое "целое" из вихря кружащихся вокруг нас разрозненных данных»*

Э. Тоффлер ["Третья волна", цит. по: Леонов, URL].

Развитие концепции искусственного интеллекта

Современные исследователи экономики, истории, философии и геополитики признают уже как свершившийся факт начало эры "Третьей волны", концепция которой описана и сформулирована в известной книге американского футуролога Э. Тоффлера. *Третья волна* – зарождение цивилизации, в которой доминирующим ресурсом развития становятся Информация и Знание. В этой связи наступает переосмысление наших взглядов на компьютеры и информационные технологии [Райс, 1998, Смолл, 1997].

Однако и сами традиционные компьютерные технологии в предшествующее десятилетие столкнулись с лавинообразным ростом информации, которую не в состоянии обработать. На первый план выдвинулись трудно формализуемые проблемы и задачи, оперирующие с нечеткими множествами [Заде, 1974; Орловский, 1981; Масалович, 1995, URL]. Необходимость бесконечно создавать терабайты программного обеспечения вылилась в "творческий" кризис, выход из которого связан с переходом на качественно новый информационно-технологический уровень, который могут обеспечить только системы искусственного интеллекта [Нильсон, 1973, Хант, 1978; Уинстон, 1980; Лорьер, 1991]. Поэтому дальнейшее развитие средств компьютеризации во всем мире проходит под знаком программы "Вычисления в Реальном мире" (*Real World Computing – RWC*), инициированной Японией в 1992 г. [Горбань с соавт., 1998]. В ней речь идет прежде всего о том, чтобы дать вычислительным и управляющим системам возможность самостоятельно, без помощи "переводчика"-человека воспринимать сигналы внешнего мира и воздействовать на него. Авторы программы огромную роль – до 30-40% ее содержания – отводят развитию систем искусственного интеллекта, исследованию естественных и созданию искусственных нейросетевых систем.

Искусственный интеллект ИИ (artificial intelligence) обычно трактуется как свойство автоматических систем брать на себя отдельные функции мыслительной способности человека, например, выбирать и принимать оптимальные решения на основе ранее полученного опыта и рационального анализа внешних воздействий [Сотник, URL]. Речь идет, в первую очередь, о системах, в основу которых положены принципы обучения, самоорганизации и эволюции при минимальном участии человека, но привлечении его в качестве учителя и партнёра, гармоничного элемента человеко-машинной системы.

Естественно, что попытки создать ИИ на базе компьютеров начались на заре развития компьютерной техники. Тогда господствовала компьютерная парадигма, ключевыми тезисами которой утверждалось, что машина Тьюринга является теоретической моделью мозга, а компьютер – реализацией универсальной машины и любой информационный процесс может быть воспроизведён на компьютере. Такая парадигма была доминирующей долгое время, принесла много интересных результатов, но главной задачи – построения ИИ в смысле моделирования мышления человека, так и не достигла. Компьютерная парадигма создания ИИ, потерпевшая крах в связи с неправильным набором ключевых предпосылок, логично трансформировалась в нейроинформатику, развивающую некомпьютер-

ный подход к моделированию интеллектуальных процессов. Человеческий мозг, оперирующий с нерасчленённой информацией, оказался значительно сложнее машины Тьюринга. Каждая человеческая мысль имеет свой контекст, вне которого она бессмысленна, знания хранятся в форме образов, которые характеризуются нечёткостью, размытостью, система образов слабо чувствительна к противоречиям. Система хранения знаний человека характеризуется высокой надёжностью вследствие распределённого хранения знаний, а оперирование с информацией характеризуется большой глубиной и высоким параллелизмом.

Переработка информации в любых интеллектуальных системах основывается на использовании фундаментального процесса – обучения. Образы обладают характерными объективными свойствами в том смысле, что разные распознающие системы, обучающиеся на различном материале наблюдений, большей частью одинаково и независимо друг от друга классифицируют одни и те же объекты. Именно эта объективность образов позволяет людям всего мира понимать друг друга. *Обучением* обычно называют процесс выработки в некоторой системе специфической реакции на группы внешних идентичных сигналов путем многократного воздействия на распознающую систему сигналов внешней корректировки. Механизм генерации этой корректировки, которая чаще всего имеет смысл *поощрения* и *наказания*, практически полностью определяет алгоритм обучения. Самообучение отличается от обучения тем, что здесь дополнительная информация о верности реакции системе не сообщается.

Мы рассмотрели в предыдущем разделе два основных принципа обучения распознаванию образов – *геометрический*, основанный на построении разделяющих поверхностей в пространстве образов, и *структурный (лингвистический)*, основанный на выделении базовых структурных признаков и отношений между ними. Однако, например, концепции построения нейронных сетей, нелинейных по своей природе, предоставляют качественно более мощные методы моделирования процесса распознавания, позволяющие воспроизводить чрезвычайно сложные зависимости.

Интеллектуальные информационные системы могут использовать "библиотеки" самых различных методов и алгоритмов, реализующих разные подходы к процессам обучения, самоорганизации и эволюции при синтезе систем ИИ. Поскольку к настоящему времени нет ни обобщающей теории искусственного интеллекта, ни работающего образца полнофункциональной ИИ-модели, то нельзя сказать, какой из этих подходов является правильным, а какой ошибочным: скорее всего они способны гармонично дополнять друг друга.

Искусственный интеллект реализуется с использованием четырех подходов (с трудом удержимся, чтобы не произнести модное «парадигм»): логического, эволюционного, имитационного и структурного. Все эти четыре направления развиваются параллельно, часто взаимно переплетаясь.

Логический подход

Основой для логического подхода служит булева алгебра и ее логические операторы (в первую очередь, знакомый всем оператор ИF ["если"]). Свое дальнейшее развитие булева алгебра получила в виде исчисления предикатов, в котором она расширена за счет введения предметных символов, отношений между ними, кванторов существования и всеобщности. Практически каждая система ИИ, построенная на логическом принципе, представляет собой машину доказательства теорем. При этом исходные данные хранятся в базе данных в виде аксиом, а правила логического вывода – как отношения между ними.

Для большинства логических методов характерна большая трудоемкость, поскольку во время поиска доказательства возможен полный перебор вариантов. Поэтому данный подход требует эффективной реализации вычислительного процесса, и хорошая работа обычно гарантируется при сравнительно небольшом размере базы данных. Примером практической реализации логических методов являются деревья решений [Breiman et al., 1984; Loh, Shih, 1997; Деревья классификации..., URL], которые реализуют в концентрированном виде процесс "обучения" или синтеза решающего правила.

Добиться большей выразительности логическому подходу позволяет такое сравнительно новое направление, как нечеткая логика. После основополагающих работ Л. Заде [Zadeh, 1965; Заде, 1974, 1976] термин *fuzzy* (англ. *нечеткий, размытый*) стал ключевым словом. В отличие от традиционной математики, требующей на каждом шаге моделирования точных и однозначных формулировок закономерностей, нечеткая логика предлагает совершенно иной уровень мышления, благодаря которому творческий процесс моделирования происходит на более высоком уровне абстракции, при котором постулируется лишь минимальный

набор закономерностей. Например, правдивость логического высказывания может принимать в нечетких системах, кроме обычных "да / нет" (1 / 0), еще и промежуточные значения: "не знаю" (0.5), "пациент скорее жив, чем мертв" (0.75), "пациент скорее мертв, чем жив" (0.25) и т.д. Данный подход больше похож на мышление человека, который редко отвечает на вопросы только «да» или «нет». Теоретические основы и прикладные аспекты интеллектуальных систем оценивания и прогнозирования в условиях неопределенности, основанные на теории нечетких множеств, подробно изложены в литературных источниках [Аверкин с соавт., 1986; Борисов с соавт., 1989; Нетрадиционные модели..., 1991; Васильев, Ильясов, 1995].

Методы самоорганизации и эволюционный подход

Под термином «самоорганизация» понимается «процесс самопроизвольного (спонтанного) увеличения порядка, или организации в системе, состоящей из многих элементов, происходящий под действием внешней среды» [Ивахненко с соавт., 1976].

Принципы самоорганизации были предметом исследования многих выдающихся ученых: Дж. фон Неймана, Н. Винера, У.Р. Эшби и др. Большой вклад в развитие этого направления внесли работы украинских кибернетиков под руководством А.Г. Ивахненко [Ивахненко, 1969, 1975, 1982; Ивахненко, Лапа, 1971; Ивахненко, Юрачковский, 1987], разработавших целый класс адаптивных самоорганизующихся моделей (англ. selforganisation models), который можно было бы назвать "интеллектуальным обобщением" эмпирико-статистических методов.

Можно отметить следующие принципы самоорганизации математических моделей:

- принцип **неокончателных решений** (предложен Д. Габором [1972] и заключается в необходимости сохранения достаточной "свободы выбора" нескольких лучших решений на каждом шаге самоорганизации),
- принцип **внешнего дополнения** (базируется на теореме К. Геделя [Нагель, Ньюмен, 1970] и заключается в том, что только внешние критерии, основанные на новой информации, позволяют синтезировать истинную модель объекта, скрытую в зашумленных экспериментальных данных);
- принцип **массовой селекции** (предложен А.Г. Ивахненко и указывает наиболее целесообразный путь постепенного усложнения самоорганизующейся модели, с тем чтобы критерий ее качества проходил через свой минимум).

Для возникновения самоорганизации необходимо иметь исходную структуру, механизм случайных ее мутаций и критерии отбора, благодаря которому мутация оценивается с точки зрения полезности для улучшения качества системы. Т.е. при построении этих систем ИИ исследователь задает только исходную организацию и список переменных, а также критерии качества, формализующие цель оптимизации, и правила, по которым модель может изменяться (самоорганизовываться или эволюционировать). Причем сама модель может принадлежать самым различным типам: линейная или нелинейная регрессия, набор логических правил или любая другая модель.

Можно выделить следующие подклассы самоорганизующихся моделей [Справочник по типовым..., 1980]:

- модели, реализующие полиномиальные алгоритмы, обобщением которых явился *метод группового учета аргументов (МГУА)*;
- модели, основанные на вероятностных методах самоорганизации и грамматике конечных стохастических автоматов;
- исследование структуры сложной системы и решение задач восстановления уравнений (физических законов), описывающих разомкнутый объект по небольшому количеству экспериментальных точек.

Принцип массовой селекции, используемый в алгоритмах МГУА, как и многие другие идеи кибернетики, заимствует действующие природные механизмы и схематически повторяет агротехнические методы селекции растений или животных, например:

- высевается некоторое количество семян и, в результате опыления, образуются сложные наследственные комбинации;
- селекционеры выбирают некоторую часть растений, у которых интересующее их свойство выражено больше всего (эвристический критерий);
- семена этих растений собирают и снова высевают для образования новых, еще более сложных комбинаций;
- через несколько поколений селекция останавливается, и ее результат является оптимальным;
- если чрезмерно продолжать селекцию, то наступит «инцухт» — вырождение растений (т.е. существует оптимальное число поколений и оптимальное количество семян, отбираемых в каждом из них).

Алгоритм МГУА воспроизводит схему массовой селекции [Ивахненко, 1975], показанной на рис. 2.4, и включает генераторы усложняющихся из ряда в ряд комбинаций и критерии порогового самоотбора лучших из них.

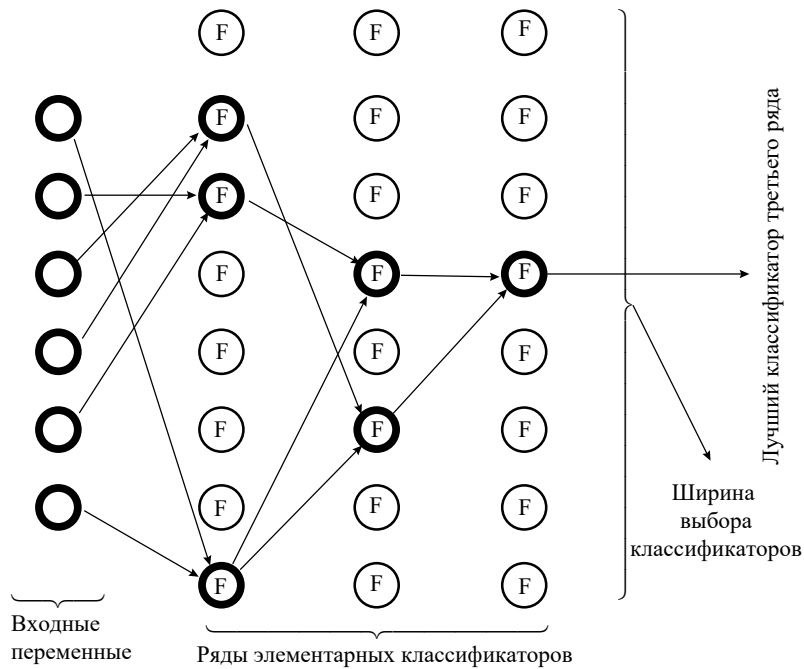


Рис. 2.4. Алгоритм МГУА как эквивалент массовой селекции

Так называемое «полное» описание объекта

$$Y = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_m),$$

где f — некоторая функция типа (2.6) заменяется несколькими рядами «частных» описаний:

1-ряд селекции: $y_1 = \varphi(x_1, x_2), y_2 = \varphi(x_1, x_3), \dots, y_s = \varphi(x_{m-1}, x_m),$

2-ряд селекции: $z_1 = \varphi(y_1, y_2), z_2 = \varphi(y_1, y_3), \dots, z_p = \varphi(y_{s-1}, y_s),$ где $s = C_n^2, p = C_s^2$ и т.д.

Входные аргументы и промежуточные переменные сопрягаются попарно, и сложность комбинаций на каждом ряду обработки информации возрастает (как при массовой селекции), пока не будет получена единственная модель оптимальной сложности. Поскольку каждое частное описание является функцией только двух аргументов, его коэффициенты легко определить по данным обучающей последовательности при малом числе узлов интерполяции [Васильев с соавт., 1989].

Из ряда в ряд селекции пропускается только некоторое количество самых регулярных переменных, степень регулярности которых оценивается по специальным критериям [Розенберг с соавт., 1994]. Ряды селекции наращиваются до тех пор, пока регулярность повышается. Как только достигнут минимум ошибки, селекцию, во избежание «инцухта», следует остановить. Практически рекомендуется остановить селекцию даже несколько раньше достижения полного минимума, как только ошибка начинает падать слишком медленно. Это приводит к более простым и более достоверным уравнениям.

По своим принципам инвариантного отображения среды многорядные алгоритмы МГУА чрезвычайно близки идеям нейросетевого моделирования, в частности, многослойному перцептрону Ф. Розенблатта.

Самоорганизующиеся модели служат, в основном, для прогнозирования поведения и структуры экосистем, так как по самой логике их построения участие исследователя в этом процессе сведено к минимуму. Можно привести ряд конкретных примеров использования алгоритмов МГУА: для долгосрочных прогнозов экологической системы оз. Байкал [Ивахненко с соавт., 1980], моделирования геоботанических описаний [Розенберг, 1981, 1984]; системы «хищник-жертва» [Брусилковский, Розенберг, 1981а,б], прироста деревьев [Розенберг, Феклистов, 1982], прогнозирования токсикологических показателей поллютантов [Шитиков с соавт., 1986], оценки динамики численности сообществ зоопланктона [Розенберг с соавт., 1994а].

В математической кибернетике различают два вида итеративных процессов развития систем [Ивахненко с соавт., 1976]:

- *адаптация*, при которой экстремум (цель движения системы) остается постоянной;
- *эволюция*, при которой движение сопровождается изменением и положения экстремума.

Если самоорганизация связана только с адаптивными механизмами подстройки реакций системы (например, изменением значений весовых коэффициентов), то понятие *эволюции* связано с возможностью *эффектора* (термин, введенный С. Лемом [1968]) изменять свою собственную структуру, т.е. количество элементов, направленность и интенсивность связей, настраивая их оптимальным образом относительно по-

ставленных задач в каждый конкретный момент времени. В процессе эволюции в условиях сложной и меняющейся среды эффектор способен приобрести принципиально новые качества, выйти на следующую ступень развития [Гаазе-Рапопорт, Поспелов, 1987]. Например, в процессе биологической эволюции возникли чрезвычайно сложные и вместе с тем удивительно продуктивно функционирующие живые организмы.

Эволюционное моделирование [Фогель с соавт., 1969; Букатова, 1979; Букатова с соавт., 1991] представляет собой существенно универсальный способ построения прогнозов макросостояний системы в условиях, когда полностью отсутствует апостериорная информация, а априорные данные задают лишь предысторию этих состояний. Общая схема алгоритма эволюции выглядит следующим образом:

- задается исходная организация системы (в эволюционном моделировании в этом качестве может фигурировать, например, конечный детерминированный автомат Мили; см. [Растрингин, Марков, 1976; Букатова, 1979]);
- проводят случайные "мутации", т.е. изменяют случайным образом текущий конечный автомат;
- отбирают для дальнейшего "развития" ту организацию (тот автомат), которая является "лучшей" в смысле некоторого критерия, например, максимальной точности предсказания последовательности значений макросостояний экосистемы.

Критерий качества модели в этом случае мало чем отличается, например, от минимума среднеквадратической ошибки на обучающей последовательности метода наименьших квадратов (со всеми вытекающими отсюда недостатками). Однако, в отличие от адаптации, в эволюционном программировании структура решающего устройства мало меняется при переходе от одной мутации к другой, т.е. не происходит перераспределения вероятностей, которые бы закрепляли мутации, приведшие к успеху на предыдущем шаге. Поиск оптимальной структуры происходит в большей степени случайным и нецеленаправленным, что затягивает процесс поиска, но обеспечивает наилучшее приспособление к конкретным изменяющимся условиям.

Одним из первых возможность применения эволюционного моделирования для целей экологического прогнозирования использовал В.Ф. Крапивин [1978]. В дальнейшем, эти подходы применялись для прогнозирования величины прироста деревьев [Розенберг, Феклистов, 1982; Розенберг, 1984] и состояний байкальского планктона [Брусиловский, 1987]. Идея эволюции нашла свое выражение в разработке моделей временных рядов экологических переменных с использованием трехэтапного эволюционного предсказывающего алгоритма [Розенберг с соавт., 1994] и автоматов Мили для многосимвольных целочисленных временных рядов [Морозов, 2000]. В этих работах использовался конечный автомат Мили со структурой, описывающей некоторый набор состояний автомата и совокупность связей между ними. Автомат в ходе эволюционного процесса "мутировал" в соответствии с некоторым набором заданных правил преобразования входных символов в выходные.

В последнее десятилетие наблюдается повышенный интерес к наиболее "биологизированным" моделям эволюции с использованием генетического алгоритма, который можно считать "интеллектуальной" формой метода проб и ошибок. *Генетический алгоритм* [Goldberg, 1989; Скурихин, 1995; Васильев, Ильясов, 1999], позаимствованный у природных аналогов, является наиболее элегантным представителем эволюционных методов и представляет собой мощное поисковое средство, эффективное в различных проблемных областях и основанное на трех компонентах:

- генетической памяти, сконцентрированной в "хромосомах";
- воспроизведения, осуществляемого при помощи операторов кроссинговера и мутации;
- селекции продуктивных решений методами оптимизации многоэкстремальных функций.

Еще один широко используемый подход к построению систем ИИ – *имитационный* [Емельянов, Ясиновский, 1998]. Данный подход является классическим для кибернетики с одним из ее базовых понятий – "черным ящиком" – устройством, информация о внутренней структуре и содержании которого отсутствует полностью, но известны спецификации входных и выходных сигналов. Объект, поведение которого имитируется, как раз и представляет собой такой "черный ящик". Нам не важно, что у него и у модели внутри и как он функционирует, главное, чтобы наша модель в аналогичных ситуациях вела себя точно так же. Таким образом, здесь, после обучения и самоорганизации, моделируется еще одно свойство человека – способность копировать то, что делают другие, не вдаваясь в подробности, зачем это нужно. Основным недостатком имитационного подхода также является низкая информационная способность большинства моделей, построенных с его помощью.

Структурный подход и нейросетевое моделирование

Под *структурным подходом* подразумеваются попытки построения систем ИИ путем моделирования структуры человеческого мозга. В последние десять лет впечатляет феномен взрыва интереса к структурным методам самоорганизации – *нейросетевому моделированию*, которое успешно применяется в самых различных областях – бизнесе, медицине, технике, геологии, физике, т.е. везде, где нужно решать задачи прогнозирования, классификации или управления [Горбань, 1990, 1998а,б; Уоссермен, 1992; Васильев с со-

авт., 1997]. Описаны и широко распространяются нейросетевые расширения к популярным пакетам прикладных программ [Горбань, Россиев, 1996; Дьяконов, Круглов, 2001; Нейронные сети., 2001], что делает процесс проектирования интеллектуальных систем доступным любой домохозяйке с персональным компьютером. К сожалению, известные авторам сведения об использовании нейронных сетей в российской экологии весьма скудны и ограничиваются моделированием лесорастительных свойств ландшафтных зон [Царегородцев, Погребная, 1998] и авторским вариантом моделирования гидроэкологических систем [Шитиков с соавт., 2002].

Способность нейронной сети к обучению впервые была исследована Дж. Маккалоком и У. Питтом, когда в 1943 г. вышла их работа "Логическое исчисление идей, относящихся к нервной деятельности". В ней была представлена модель нейрона и сформулированы принципы построения искусственных нейронных сетей.

Крупный толчок развитию нейрокибернетики дал американский нейрофизиолог Ф. Розенблатт, предложивший в 1962 г. свою модель нейронной сети – персептрон [Розенблатт, 1965; Минский, Пейперт, 1971]. Воспринятый первоначально с большим энтузиазмом, персептрон вскоре подвергся интенсивным нападкам со стороны крупных научных авторитетов. И, хотя подробный анализ их аргументов показывает, что они оспаривали не совсем тот персептрон, который предлагал Розенблатт, крупные исследования по нейронным сетям были свернуты почти на 10 лет. И когда в журнале "Успехи физических наук" стали появляться статьи, связанные с фазовыми переходами в нейронных системах, корректоры упорно исправляли в этих статьях слово «нейрон» на слово «нейтрон».

Значительную роль в общем подъеме интереса к нейропроблемам сыграла теория, предложенная Дж. Хопфилдом [Hopfield, 1982]. Она буквально заворожала на продолжительное время физиков-теоретиков. И хотя с точки зрения нейро-теоретиков и технологов эта теория мало что дала, возбужденные ей аналогии и каскады головокружительных вычислений доставили немало эстетических радостей адептам науки. Более того, по аллитерации «нейрон»-«нейтрон» возникло модное в ту пору сочетание "нейронная бомба" и нейросетевые исследования стали финансироваться в рамках исследовательских программ всех родов войск США. Не исключено, что на вооружении каких-то стран уже имеются нейронные снаряды-камикадзе, чей нейросетевой "интеллект" направлен на уничтожение каких-то конкретных целей...

Другой важный класс нейронных систем был введен в рассмотрение финном Т. Кохоненом [1982]. У этого класса красивое название: "самоорганизующиеся отображения состояний, сохраняющие топологию сенсорного пространства". Теория Кохонена активно использует *теорию адаптивных систем*, которую развивал на протяжении многих лет академик РАН Я.З. Цыпкин [1968, 1984].

Весьма популярна сейчас во всем мире оценка возможностей обучающихся систем, в частности, нейронных сетей, основанная на *теории размерности*, созданной в 1966 г. советскими математиками В.Н. Вапником и А.Я. Червоненкисом [1974]. Еще один класс нейроподобных моделей представляют сети с обратным распространением ошибок, в развитии современных модификаций которых ведущую роль сыграл проф. А.Н. Горбань и возглавляемая им красноярская школа нейроинформатики (см. ссылки в начале подраздела). Большую научную и популяризаторскую работу проводит Российская ассоциация нейроинформатики под руководством президента В.Л. Дунина-Барковского.

В основе всего нейросетевого подхода лежит идея построения вычислительного устройства из большого числа параллельно работающих простых элементов – формальных нейронов. Эти нейроны функционируют независимо друг от друга и связаны между собой однонаправленными каналами передачи информации. Ядром нейросетевых представлений является идея о том, что каждый отдельный нейрон можно моделировать довольно простыми функциями, а вся сложность мозга, гибкость его функционирования и другие важнейшие качества определяются связями между нейронами. Предельным выражением этой точки зрения может служить лозунг: "*структура связей – все, свойства элементов – ничто*".

Нейронные сети (НС) – очень мощный метод моделирования, позволяющий воспроизводить чрезвычайно сложные зависимости, *нелинейные* по своей природе. Как правило, нейронная сеть используется тогда, когда неизвестны предположения о виде связей между входами и выходами (хотя, конечно, от пользователя требуется какой-то набор эвристических знаний о том, как следует отбирать и подготавливать данные, выбирать нужную архитектуру сети и интерпретировать результаты).

На вход нейронной сети подаются представительные данные и запускается *алгоритм обучения*, который автоматически анализирует структуру данных и генерирует зависимость между входом и выходом. Для обучения НС применяются алгоритмы двух типов: управляемое ("обучение с учителем") и неуправляемое ("без учителя").

Простейшая сеть имеет структуру многослойного персептрона с прямой передачей сигнала (см. рис. 2.5), которая характеризуется наиболее устойчивым поведением. Входной слой служит для ввода значений исходных переменных, затем последовательно отрабатывают нейроны промежуточных и выходного слоев. Каждый из скрытых и выходных нейронов, как правило, соединен со всеми элементами предыдущего слоя (для большинства вариантов сети полная система связей является предпочтительной). В узлах сети активный нейрон вычисляет свое *значение активации*, беря взвешенную сумму выходов элементов предыдущего слоя и вычитая из нее пороговое значение. Затем значение активации преобразуется с помощью функции

активации (или передаточной функции), и в результате получается выход нейрона. После того, как вся сеть отработает, выходные значения элементов последнего слоя принимаются за выход всей сети в целом.

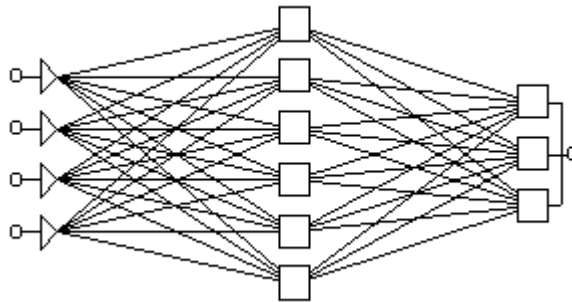


Рис. 2.5. Пример нейронной сети – трехслойного персептрона с прямым распространением информации

Наряду с моделью многослойного персептрона, позднее возникли и другие модели нейронных сетей, различающихся по строению отдельных нейронов, по топологии связей между ними и по алгоритмам обучения. Среди наиболее известных сейчас вариантов можно назвать НС с обратным распространением ошибки, основанные на радиальных базисных функциях, обобщенно-регрессионные сети, НС Хопфилда и Хэмминга, самоорганизующиеся карты Кохонена, стохастические нейронные сети и т.д. Существуют работы по *рекуррентным сетям* (т.е. содержащим обратные связи, ведущие назад от более дальних к более ближним нейронам), которые могут иметь очень сложную динамику поведения. Начинают эффективно использоваться самоорганизующиеся (растущие или эволюционирующие) нейронные сети, которые во многих случаях оказываются более предпочтительными, чем традиционные полносвязные НС [Головки, 1999].

Для моделей, построенных по мотивам человеческого мозга, характерны как легкое распараллеливание алгоритмов и связанная с этим высокая производительность, так и не слишком большая выразительность представленных результатов, не способствующая извлечению новых знаний о моделируемой среде. Попытаться в явном виде (например, в виде полинома 2.6) представить результаты нейросетевого моделирования – довольно неблагоприятная задача. Поэтому основной удел этих моделей, являющихся своеобразной "вещью в себе", – прогнозирование.

Важным условием применения НС, как и любых статистических методов, является объективно существующая связь между известными входными значениями и неизвестным откликом. Эта связь может носить случайный характер, искажена шумом, но она должна существовать. Известный афоризм «*garbage in, garbage out*» («*мусор на входе – мусор на выходе*») нигде не справедлив в такой степени, как при использовании методов нейросетевого моделирования. Это объясняется, во-первых, тем, что итерационные алгоритмы направленного перебора комбинаций параметров нейросети оказываются весьма эффективными и очень быстрыми лишь при хорошем качестве исходных данных. Однако, если это условие не соблюдается, число итераций быстро растет и вычислительная сложность оказывается сопоставимой с экспоненциальной сложностью алгоритмов полного перебора возможных состояний. Во-вторых, сеть склонна обучаться прежде всего тому, чему проще всего обучиться, а, в условиях сильной неопределенности и зашумленности признаков, это – прежде всего артефакты и явления "ложной корреляции".

Отбор информативных переменных в традиционной регрессии и таксономии осуществляют путем «взвешивания» признаков с использованием различных статистических критериев и пошаговых процедур, основанных, в той или иной форме, на анализе коэффициентов частных корреляций или ковариаций. Для этих целей используют различные секвенциальные (последовательные) процедуры, не всегда приводящие к результату, достаточно близкому к оптимальному. Эффективный автоматизированный подход к выбору значимых входных переменных может быть реализован с использованием генетического алгоритма. В связи с этим, в общей схеме статистического моделирования методами ИИ рекомендуется [Нейронные сети..., 2001] последовательное выполнение двух разных процедур:

- с помощью эволюционных методов в бинарном пространстве признаков ищется такая минимальная комбинация переменных, которая обеспечивает незначительную потерю информации в исходных данных,
- полученная на предыдущем этапе минимизированная матрица данных подается на вход нейронной сети для обучения.

Мы подробно рассмотрим несколько алгоритмов искусственного интеллекта и версий нейронных сетей при изложении главы 9, где приведем примеры их использования в гидробиологии.

«Лев состоит из съеденных им баранов». Это древнеримское изречение вспоминает С.П.Сотник [URL], проведя сравнительный анализ моделей МГУА и НС на примерах различной сложности. На задачах, близких к линейным, МГУА дает прекрасные результаты и оказывается точнее нейронных сетей. Однако при переходе к нелинейным задачам МГУА уже не имеет такого явного преимущества. Это отнюдь не означает, что нейронные сети плохи, а МГУА – хорош (или наоборот). «Они – всего лишь "животные" с различным, хотя и существенно пересекающимся "ареалом обитания"».

На основании проведенного сравнения представляется, что искусственные нейронные модели будут более эффективны при выполнении следующих условий:

- моделируемый объект очень сложен;
- моделируемый объект существенно нелинеен;
- для моделирования "участков" объекта, имеющих несложное математическое описание, предпочтительно использование частных моделей (например, построенных с помощью алгоритмов типа МГУА).

Выбор наиболее адекватного метода обработки данных – одновременно и кропотливый труд, и искусство, основанное на парадоксах и опыте «ошибок трудных». Авторы надеются, что помочь этому могут материалы, представленные в части 3.

ЧАСТЬ 2. КРИТЕРИИ ОЦЕНКИ КАЧЕСТВА ВОДНЫХ ЭКОСИСТЕМ

Глава 3. Факторы и критерии оценки качества вод пресноводных водоемов

Сущность проблемы нормирования качества вод (основные термины и понятия)

Основания систем классификации водоемов

Критериями оценки качества (quality criterion) является любая совокупность количественных показателей, характеризующих свойства изучаемых объектов и используемых для их классифицирования или ранжирования. Оценка качества пресноводных водоемов [Каминский, 1982; Комплексные оценки..., 1984; Кимстач, 1993] осуществляется по трем основным аспектам, включающим следующие комплексы показателей:

- факторы, связанные с физико-географическим и гидрологическим описанием водоема, как целостного природного или водохозяйственного объекта;
- контролируемые показатели состава и свойств водной среды, дающие формализованную оценку качества воды и ее соответствия действующим нормативам;
- совокупность критериев, оценивающих специфику структурно-функциональной организации сообществ гидробионтов и динамику развития водных биоценозов.

Гидрографическое описание водоема включает в себя большое количество показателей, оценивающих место расположения, ландшафтные, природно-климатические и геолого-морфологические особенности, топологию русла или котловины дна, гидродинамику водных и ветровых потоков, характеристику водоохранной зоны, эстетическое восприятие, стадии рекреационной дигрессии, условия и интенсивность поступления в водоем загрязняющих веществ от точечных и распределенных источников, схему и условия водопользования и др. Основы классификации водных объектов по комплексу этих показателей широко представлены в литературных источниках [Муравейский, 1948; Богословский, 1960; Шукин, 1964; Хатчинсон, 1969; Логвиненко, 1974; Леме, 1976; Китаев, 1978, 1984; Драбкова, Сорокин, 1979; Авакян с соавт., 1987; Баканов, 1990; Исаченко 1991; Теоретические вопросы..., 1993] и регламентируются государственными стандартами [ГОСТ 17.1.1.02-77, ГОСТ 17.1.5.02-80 и ГОСТ 17.1.1.03-86].

Темой настоящей главы являются **критерии качества воды** (water quality criterion) – «характеристики состава и свойств воды, определяющие пригодность ее для конкретных видов водопользования» [ГОСТ 17.1.1.01-77]. Поскольку за последние 30 лет законодательное мировоззрение потеряло сугубо антропоцентрическую направленность, современное понимание нормативов качества окружающей среды связывается также с «обеспечением устойчивого функционирования **естественных экологических систем** и предотвращением их деградации» [Федеральный закон..., 2002, статьи 25-26; выделено нами]. Качество воды в такой расширенной трактовке является главенствующим фактором абиотической среды, определяющим устойчивость развития и степень деградации отдельных гидробиологических компонентов экологической системы, о чем подробно пойдет речь в следующей главе.

Сам по себе химический состав воды является основанием для большого количества различных систем классификации водоемов, учитывающих, как правило, степень минерализации и соленость. Так, в соответствии с ГОСТ 13273-73 "Воды минеральные, питьевые лечебные и лечебно-столовые", водоемы с содержанием природных солей до 1 г/л относят к пресным водам, от 2 до 5 г/л – к минерализованным, а от 10 до 35 г/л – к высокоминерализованным. Согласно Венецианской системы [Алекин, 1970], все природные воды подразделяются на пресные (соленость до 0,5‰), миксогалинные, или солоноватые (0,5–30‰), олигогалинные (0,5–4‰), мезогалинные (5–18‰), полигалинные (18–30‰), эугалинные или морские (30–40‰), гипергалинные или пересоленные (более 40‰). Похожее градации выделяет и так называемая «обобщенная эколого-санитарная классификация качества поверхностных вод суши» [Романенко с соавт., 1990]. Существует ряд систем классификации природных вод по преобладанию в ионном составе вод одного или нескольких компонентов. Например, классификация С.А. Шукарева [1934] основана на делении вод по шести главным ионам (Na^+ , Mg^{2+} , Cl^- , Ca^{2+} , SO_4^{2-} , HCO_3^-), причем с использованием всех

возможных комбинаций трех катионов с тремя анионами можно получить 49 классов природных вод. Наиболее часто применяется в настоящее время классификация природных вод О.А. Алекина [1946], по которой все воды делятся на 3 класса по анионам с 3 группами по катионам. Однако, все перечисленные подходы к типизации воды водоемов отражают чисто гидрохимические аспекты и никак не учитывают влияния факторов минерального состава на биотические компоненты экосистем.

При определении степени экологического неблагополучия водоемов оценивается два основных фактора:

- **опасное для здоровья людей снижение качества питьевой воды и санитарно-эпидемиологического загрязнения водных объектов рекреационного назначения (т.е. фактор изменения среды обитания человека);**
- **создание угрозы деградации или нарушения функций воспроизводства основных биотических компонентов естественных экологических систем водоемов (т.е. "общезкологический" фактор изменения природной среды).**

Как экологическое, так и санитарно-гигиеническое нормирование основаны на знании негативных эффектов, являющихся результатом биохимического воздействия разнообразных факторов на отдельные рецепторы, физиологические системы живых организмов или их популяции. Одним из важных понятий в токсикологии и медико-биологическом нормировании является понятие «*вредного вещества*». В специальной литературе принято называть *вредными* все вещества, воздействие которых на биологические системы может привести к отрицательным последствиям как в результате однократного действия, «так и в отдаленные сроки жизни настоящего и последующих поколений» [ГОСТ 12.1.007-76]. Исходя из известного тезиса Парацельса¹⁶ «*Ничто не лишено ядовитости*», все *ксенобиотики* (чужеродные для живых организмов или искусственно синтезированные химические соединения) изначально рассматриваются как вредные вещества.

Определение порога критического действия

Установление нормативов качества окружающей среды основывается на концепции критичности (пороговости) воздействий. **Порог вредного действия** – это минимальная доза вещества, при воздействии которой в биореципиенте возникают изменения, выходящие за пределы физиологических и приспособительных реакций, или появляется скрытая (т.е. временно компенсированная) патология [Трахтенберг с соавт., 1991]. Таким образом, пороговая доза вещества или критическое воздействие вообще вызывает в биологическом объекте (в экологическом аспекте – популяции особей) отклик, который не может быть скомпенсирован за счет гомеостатических механизмов поддержания внутреннего равновесия реакций живого организма (или биоценоза).

Поскольку моделирование реакции *E* любой сложной системы на нестационарное возмущающее воздействие *C*, представляет собой нетривиальную задачу [Баевский, 1979], то оценка величины критического воздействия в реальных условиях экотоксикологического нормирования связана с целым рядом методологических проблем, часть из которых приведена ниже.

1. Химическое загрязнение, как объект изучения представляет собой нестационарный динамический ряд, т.е. вариационную последовательность разовых концентраций, характеризующую изменение уровней воздействия во времени и в пространстве. Например, экспериментальные данные по трансформации большинства ксенобиотиков в природных водах свидетельствует о том, что деструкция загрязнений в малых концентрациях подчиняется чаще всего кинетике реакций первого порядка и аппроксимируется ниспадающей экспоненциальной кривой [Каплин, 1973].
2. Сам порог вредного действия *E* представляет собой величину, дифференцированную по времени экспозиции ксенобиотика [Рашевски, 1966; Проблема пороговости..., 1979; Соловьев с соавт., 1980; Васюкович, 1983]. Например, Б.М. Штабский [1986] приводит одну из возможных простейших зависимостей времени *t* наступления эффекта (при *E = const*) от уровня концентрации или дозы *C* вещества в виде:

$$\lg t = -k \lg C + \lg a, \quad (3.1)$$

¹⁶ Парацельс (Paracelsus, он же Филипп Теофаст Бомбаст фон Гогенгейм, 1493-1541) – врач и основоположник *ятрохимии* – направления в медицине, рассматривающего все болезни как результат нарушения химического равновесия.

где k и a – коэффициенты уравнения регрессии. В общем случае, при $t \rightarrow \infty$ нижним пределом эффективных концентраций (доз) является *порог хронического действия* Lim_{ch} , т.е. предполагается, что уровни воздействия ниже Lim_{ch} вообще не вызывают изменений, поддающихся регистрации, безотносительно к длительности воздействия вещества. При $t \rightarrow 0$ концентрация C определяет *порог однократного (острого) действия* Lim_0 , который, как правило, превышает Lim_{ch} . Последовательность изоэффективных концентраций между Lim_0 и Lim_{ch} представляет собой набор критических нагрузок при суточной, недельной, месячной и иной экспозиции воздействия.

3. В широком диапазоне сверхпороговых воздействий развитие во времени процесса патологических изменений имеет нестационарный фазовый характер, так что уравнение (3.1) может служить адекватной моделью только в пределах первой доадаптационной фазы. Через некоторое время организм или экосистема вступает в стадию компенсации, которая может поддерживаться неограниченно долго. В течение данной фазы, ранее выявленные патологические сдвиги либо вовсе исчезают ("истинная адаптация"), либо накапливаются на подпороговом уровне [Питровски, 1976], в результате чего возможен бифуркационный взрыв. Например, при некотором достаточно высоком уровне концентраций биогенных веществ в биоценозах развиваются процессы эвтрофикации, конечный результат которых не всегда бывает однозначным.
4. Разница между порогами однократного и хронического действия ($Lim_0 - Lim_{ch}$) отражает сложный процесс материальной и функциональной кумуляции, зависящий от многих факторов: вида воздействия, динамики изменения возмущений, природы реципиента и проч. [Лазарев, 1938; Рашевски, 1966; Покровский, 1979; Новиков, Фурсова, 1987]. В простейшем варианте количественная оценка эффекта кумуляции может быть выполнена с использованием приближенных индексов [Lim et al., 1961; Каган, Станкевич, 1964; Штабский, Каган, 1974; Гелашвили с соавт., 1998]. В более общем плане интенсивность накопления негативных функциональных изменений в условиях нестационарных воздействий определяется кинетикой двух конкурирующих процессов: скоростью развития патологических эффектов и скоростью восстановительной адаптации организма или экосистемы [Тихонов, Шитиков, 1984а, 1987; Штабский, 1986; Новиков с соавт., 2001].

Оценку величины порогового воздействия выполняют, как правило, с использованием традиционных методов математической статистики [Саноцкий, Уланова, 1975; Каган, 1978], для чего сравнивают между собой параметры распределения показателей отклика, измеренные при различных уровнях воздействия (в том числе, на контрольных объектах с нулевым ксенобиотическим фактором). Если установлено математическое ожидание M для генеральной совокупности регистрируемого показателя, то по t -распределению Стьюдента можно косвенно судить о вероятности α_3 , с которой анализируемая выборка, имеющая эмпирическую оценку M_3 , будет принадлежать к множеству, характеризующему параметром M . Нулевую гипотезу $H_0: m - m_3 = 0$ о равенстве параметров теоретической (m) и изучаемой (m_3) совокупностей отклоняют, как маловероятную, на уровне значимости $\alpha_{кр}$, если $\alpha_3 < \alpha_{кр}$. На этой основе предлагаются различные конкретные методики и вероятностные шкалы для разных по природе откликов — показателей организма или экосистемы, характеризующих эффект действия ксенобиотика по полученной в эксперименте аналоговой или частотной величине M_3 .

Две основных концепции нормирования (иметь выраженный эффект и для уменьшения ошибки использовать больший охват величин, характеризующих норму) объединил И.В. Саноцкий [1993], предложив относить к порогу вредного действия изменения не только статистически значимые (α , $\leq 5\%$), но и выходящие за пределы нормы или физиологических колебаний ($\pm 3\sigma$) показателя. Поскольку вероятность гиподиагностики в ряде случаев применения схемы Саноцкого была признана неприемлемо большой, И.М. Трахтенберг [1998; Трахтенберг с соавт., 1991] предложил при оценке вызванных в организме изменений выбирать критические уровни значимости $\alpha_{кр}$ с учетом цели и ответственности исследования, специфичности показателей к изучаемому воздействию, степени их вариабельности. Рекомендовано повысить $\alpha_{кр}$ с 5 до 10% для наиболее специфичных показателей, и принять его равным 10, 5 и 1 % соответственно для жестких, пластичных и высокопластичных показателей. Детальный анализ этих концепций и основных методологических ошибок по установлению критических концентраций вредных веществ с помощью математической статистики был выполнен И.Д. Ташкером [1991; URL].

Общую зависимость величины отклика от уровней воздействия характеризует S-образная кривая, точки перелома которой указывают на резкие качественные изменения, а линейный участок – описывает нормальное функционирование адаптационных систем. В разных диапазонах варьирования фактора информативны различные показатели. Наборам кривых, представляющих разные показатели жизнедеятельности, можно поставить в соответствие сводную S-образную кривую зависимости доза-эффект, вершина которой соответствует смерти. На этой кривой Т. Хэтч [1973] выделил 3 точки, соответствующие начальному проявлению негативного фактора (*A*), минимальному физиологическому нарушению, которое предшествует стрессовым изменениям (*B*), максимальным уровням воздействия, при которых реакции не отклоняются от нормы (*C*). Допустимые уровни воздействия, по мнению Т. Хэтча, устанавливали в бывшем СССР по точке *C* (начальные отклонения от нормы), а в США — по точке *B* (начальные проявления патологии).

Кривые Хэтча и аналогичные графики других авторов позволяют обобщить большой материал в виде математических моделей, в которых состояния биологического объекта и уровни воздействия факторов будут фиксированы или охарактеризованы точечными и интервальными оценками. Дифференциация смежных областей окажется тем точнее, чем большей будет разность между центральными значениями дифференцируемых градаций $D = m_1 - m_2$. Величины параметров могут быть ориентированы на конкретные популяции или на условный организм (как, например, это сделано в справочнике [Человек. Медико-биологические..., 1977]). Последний способ особенно полезен для выражения разности близких состояний, четко определяемой лишь в лабораторных условиях. Тем более, что при сравнении совокупностей параметр *D* может быть единственным в формулировке статистической гипотезы.

Понятие предельно допустимой концентрации

Предельно допустимая концентрация (ПДК) – «максимальное количество вредного вещества в единице объёма (воздуха, воды или др. жидкостей) или веса (например, пищевых продуктов), которое при ежедневном воздействии в течение неограниченно продолжительного времени не вызывает в организме каких-либо патологических отклонений, а также неблагоприятных наследственных изменений у потомства. Для установления ПДК используют расчётные методы, результаты биологических экспериментов, а также материалы динамических наблюдений за состоянием здоровья лиц, подвергшихся воздействию вредных веществ» [Популярная медицинская..., 1988]. Основой для обоснования ПДК является некоторое множество *n* порогов хронического действия *Lim_{ch}ⁱ*, оцененных для различных видов *i* биологических объектов (подопытные животные, рыбы, зеленые насаждения) и разных путей транспортировки вещества к рецепторам живого организма:

$$\text{ПДК} = \min (\text{Lim}_{ch\ i}) / K_3, \quad \forall i = 1, 2, \dots, n, \quad (3.2)$$

где *K₃* – коэффициент запаса, учитывающий видовую чувствительность, реальную опасность интоксикации, кумулятивные свойства вещества, вероятность канцерогенного или иного специфического действия, возможность отдаленных последствий на генетическом уровне и т.д. Очевидно, что при $n \rightarrow \infty$, ПДК $\rightarrow 0$, т.е. «всегда можно найти такую специфическую лошадь, которую убьет капля никотина».

В реальных условиях многокомпонентного загрязнения окружающей среды возникает проблема учета различных синергических эффектов: *комбинированного* (одновременное или последовательное действие нескольких веществ при одном и том же пути поступления), *комплексного* (поступления одного вредного вещества в организм различными путями и с различными средами — с воздухом, водой, пищей, через кожные покровы) и *сочетанного* воздействия всего многообразия физических, химических и биологических факторов окружающей среды [Кустов с соавт., 1975; Пинигин, 2001]. ПДК представляют собой принципиально индивидуальные стандарты, регламентирующие изолированное действие нормируемого вредного агента и не предполагающие количественной корректировки в случае совместного присутствия нескольких компонентов. На уровне нормативов представлены достаточно ограниченные перечни веществ, обладающих эффектом суммации при их одновременном содержании в атмосферном воздухе. Экспериментальный метод анализа комбинированного действия смеси веществ с постоянным соотношением компонентов предложен Б.М. Штабским и Ю.С. Каганом [1974]; алгоритм реализации этого метода на основе автоматизированной процедуры планирования эксперимента описан Д.Б. Гелашвили с соавторами [1998].

Санитарно-гигиенические и экологические нормативы определяют качество окружающей среды по отношению к здоровью человека и состоянию экосистем, но не указывают на источник

воздействия и не регулируют его деятельность. Требования, предъявляемые собственно к источникам воздействия, отражают *научно-технические нормативы*. К научно-техническим нормативам относятся нормативы предельно допустимых выбросов и сбросов вредных веществ (ПДВ и ПДС), а также технологические, строительные, градостроительные нормы и правила, содержащие требования по охране окружающей природной среды. В основу установления научно-технических нормативов положен следующий принцип: при условии соблюдения этих нормативов предприятиями региона содержание любой примеси в воде, воздухе и почве должно удовлетворять требованиям санитарно-гигиенического нормирования.

Санитарно-гигиенический подход к нормированию качества вод

Содержание химических веществ в окружающей среде начали контролировать еще в 1925 г., когда определили первые значения ПДК для воздушной среды рабочей зоны. В 1949 г. впервые были установлены некоторые ПДК для атмосферного воздуха, а в 1950 г. – для воды. Современное санитарно-гигиеническое нормирование охватывает все среды, включая почву, продукты питания и т.д., а также различные пути поступления вредных веществ в организм.

Нормативы, ограничивающие вредное воздействие, устанавливаются и утверждаются специально уполномоченными государственными органами в области охраны окружающей природной среды, санитарно-эпидемиологического надзора и совершенствуются по мере развития науки и техники с учетом международных стандартов [Методы определения..., 1970; Основы общей..., 1976; Новиков с соавт., 1990; Фомин, 1995; Предельно допустимые..., 1998; Федеральный закон..., 2002]. Существует большое количество справочников, содержащих подробную и исчерпывающую информацию о ПДК и токсикологических показателях различных химических веществ [Беспамятнов, Кротов, 1985; Дмитриев с соавт., 1991; Сборник санитарно-гигиенических..., 1991; Беляев, 1993; Майстренко с соавт., 1996; Перечень рыбохозяйственных..., 1999; Гусева с соавт., 2000]. "Российский регистр потенциально опасных химических и биологических веществ" Минздрава РФ (адрес в Интернет <http://www.regchem.msk.ru>) распространяет АИПС "Опасные вещества" – базу данных по опасным химическим и биологическим веществам, содержащую данные о 2350 зарегистрированных в РПОХВ веществах (химическая номенклатура, физико-химические характеристики, параметры токсикометрии, оценку специфических и отдаленных эффектов, показатели экологической безопасности, гигиенические и экологические нормативы, библиографические данные). В базу данных, наряду с исчерпывающей отечественной информацией, включены сведения из ведущих зарубежных баз данных опасных веществ, в том числе международного регистра потенциально токсичных веществ.

Под санитарно-гигиеническими показателями *качества воды* понимаются характеристики ее состава и свойств, определяющие пригодность воды для использования человеком или в качестве среды для обитания некоторых видов фауны (в первую очередь, промысловых рыб). В целях контроля за качеством воды российским законодательством, Минздравом и Госкомсанэпиднадзором Российской Федерации были разработаны и приняты основополагающие документы [Водный кодекс..., 1995; СанПиН 2.1.4.1074-01; СанПиН 2.1.5.980-00; Правила охраны..., 1991; Методические указания..., 1976, 1984, 1986, 1998], которые устанавливают порядок обоснования нормативов, санитарные требования и значения ПДК для воды с учетом рекомендаций World Health Organization (Всемирной Организации Здравоохранения – ВОЗ [Guidelines for..., 1983, 1984]). В частности, СанПиН 2.1.4.1074-01 нормирует содержание вредных химических веществ, наиболее часто встречающихся в природных водах, а также поступающих в источники водоснабжения в результате хозяйственной деятельности человека, определяет органолептические и некоторые физико-химические параметры питьевой воды. Здесь необходимо отметить, что вопреки бытующему мнению об отсталости нашей нормативной базы, по большинству параметров российский СанПиН удовлетворяет рекомендациям ВОЗ и не уступает зарубежным стандартам, а в некоторых позициях их даже превосходит (см. таблицу 3.1). К сожалению, утвержденные еще во времена СССР нормативы всегда были весьма жесткими, но редко соблюдались на практике.

Таблица 3.1

Предельно допустимые концентрации (мг/л) содержания основных веществ в воде водоемов, принятые в России и рекомендованные международными организациями

Химические вещества и показатели качества воды	ВОЗ	ЕС	Россия			
			Источник	Норматив	ЛПВ	Класс опасности
Алюминий (Al)	0.2	0.2	СанПиН	0.5	сан.-токс. токс.	2
			ВНИРО	0.04		4
Азот аммонийный (NH ₄ ⁺)	1.5	0.5	СанПиН	2.0	сан.-токс. токс.	3
			ВНИРО	0.39		4
Аммиак (NH ₃)	1.5	0.5	СанПиН	2.0	сан.-токс. токс.	3
			ВНИРО	0.05		4
Бензпирен	0.7	0.01	СанПиН	0.005	сан.-токс.	1
БПК _{полн}			ВНИРО	3	общие требо- вания	
Водородный показатель pH		6.5–8.5	СанПиН	6.5 – 9	общие требования	
			ВНИРО	6.5 – 8.5		
Гексахлорциклоцексан	0.02	0.002	СанПиН	0.02	сан.-токс. токс.	2
			ВНИРО	0.00001		1
ДДТ	0.0002		СанПиН	0.0002	сан.-токс. токс.	1
			ВНИРО	0.00001		
Железо общее	0.3	0.2	СанПиН	0.3	орган. токс.	4
			ВНИРО	0.1		
Железо-ион (Fe ²⁺)			ВНИРО	0.005	токс.	4
Жесткость общая		1.2	СанПиН	7		
Кадмий (Cd ²⁺)	0.003	0.005	СанПиН	0.001	сан.-токс. токс.	2
			ВНИРО	0.005		
Медь (Cu ²⁺)	0.002	0.002	СанПиН	1	орган. токс.	3
			ВНИРО	0.001		
Минерализация общая	1000	1500	СанПиН	1000	общие требования	
			ВНИРО	1000		
Нитрат-анион (NO ₃ ⁻)	50	50	СанПиН	45	орган. сан.-токс.	2
			ВНИРО	40		
Нитрит-анион (NO ₂ ⁻)	3	0.5	СанПиН	3	орган. токс.	2
			ВНИРО	0.08		
Нефтепродукты (раст. и эмульс.)			СанПиН	0.1	орган.	
			ВНИРО	0.05	рыб-хоз.	
Никель (Ni)	0.02	0.02	СанПиН	0.1	сан.-токс. токс.	3
			ВНИРО	0.01		
Окисляемость перманганатная		5	СанПиН	5	общие требо- вания	
Растворенный кислород			ВНИРО	не менее 6	общие требования	
α-Радиоактивность общая, Бк/л	0.1		СанПиН	0.1		
β-Радиоактивность общая, Бк/л	1		СанПиН	1		
Ртуть (Hg)	0.001	0.001	СанПиН	0.0005	сан.-токс. токс.	1
			ВНИРО	0.00001		
Свинец (Pb)	0.01	0.01	СанПиН	0.03	сан.-токс. токс.	2
			ВНИРО	0.006		
Сульфат-анион (SO ₄ ²⁻)	250	250	СанПиН	500	орган. сан.-токс.	4
			ВНИРО	100		
Фосфаты (PO ₄ ³⁻)			ВНИРО	От 0.05 до 0.2	санитар.	4
Фенол			СанПиН	0.001	орган. рыб-хоз.	4
			ВНИРО	0.001		3
Фторид-анион (F ⁻)	1.5	1.5	СанПиН	1.5	сан.-токс. токс.	2
			ВНИРО	0.05		3
Хлорид-анион (Cl ⁻)	250	250	СанПиН	350	орган. сан.-токс.	4
			ВНИРО	300		
Хлор свободный	0.5		СанПиН	0.3	орган. токс.	1
			ВНИРО	0.00001		

Хром (Cr ⁶⁺)	0.05	0.05	СанПиН ВНИРО	0.05 0.02	сан.-токс. токс.	3
Цинк (Zn)	3	5	СанПиН ВНИРО	5 0.01	орган. токс.	3

Использованные условные обозначения: ВОЗ – рекомендуются Всемирной Организацией Здравоохранения при ООН; ЕС – директива Совета Европейского Союза от 3 ноября 1998 г.; СанПиН – ПДК содержания веществ в питьевой воде согласно СанПиН 2.1.4.1074-01; ВНИРО – ПДК для воды объектов, имеющих рыбохозяйственное значение [Перечень рыбохозяйственных..., 1999]; ЛПВ – лимитирующий показатель вредности (см. по тексту).

В соответствии с Санитарными правилами и нормами СанПиН 2.1.4.1074-01 «*питьевая вода должна быть безопасна в эпидемиологическом и радиационном отношении, безвредна по химическому составу и должна иметь благоприятные органолептические свойства*». В ходе обоснования ПДК для каждого вещества предварительно определяется *класс опасности*, который характеризует следующие свойства ксенобиотиков:

- способность к накоплению в организме и кумуляции эффекта вредного действия;
- вероятность вызывать отдаленные последствия (т.е. степень опасности хронического отравления);
- скорость резорбции вещества тканями живого организма (более опасны гидрофильные и липофильные химические соединения, легко проникающие к чувствительным центрам биорецептивов).

Вещества делятся на следующие классы опасности:

- 1 класс - чрезвычайно опасные вещества, для которых проводится полная схема тестирования (острый, подострый, хронический и пожизненный опыты на разных группах животных);
- 2 класс – высоко опасные вещества, изучаемые по развернутой схеме;
- 3 класс – опасные соединения, для которых не ставится хронический эксперимент;
- 4 класс – умеренно опасные вещества, нормируемые по экспрессной схеме.

Экспериментально обосновываются ПДК для водоемов двух классов:

- *Предельно допустимая концентрация в воде водоема хозяйственно-питьевого и культурно-бытового водопользования (ПДК_в)* — это максимальная концентрация вредного вещества в воде, которая не должна оказывать прямого или косвенного влияния на организм человека в течение всей его жизни и на здоровье последующих поколений, и не должна ухудшать гигиенические условия водопользования [СанПиН 2.1.5.980-00];
- *Предельно допустимая концентрация в воде водоема, используемого для рыбохозяйственных целей (ПДК_{вр})* — это концентрация вредного вещества в воде, которая не должна оказывать вредного влияния на популяции рыб, в первую очередь промысловых [Гусев, 1975; Лукьяненко 1983].

ПДК_{вр} представляет собой норматив качества воды водных объектов, используемых для рыбохозяйственных целей; прежде всего, к этой группе относятся водные объекты по сохранению и воспроизводству ценных видов рыб, обладающих высокой чувствительностью к недостатку кислорода. Таким образом, введение ПДК_{вр} можно считать определенным шагом на пути экологического нормирования состояния водной среды, учитывающего не только интересы человеческой деятельности, но и, в некоторой степени, предполагающего ограничение воздействия на гидробионтов (условия, приемлемые для промысловых рыб, как правило, благоприятны и для всего биоценоза). Экспериментально ПДК_{вр} «*устанавливается по наиболее чувствительному звену трофической цепи водоема*» [Перечень рыбохозяйственных..., 1999] и, как правило, существенно меньше, чем ПДК для питьевой воды (см. позиции для хлора и тяжелых металлов в табл. 3.1).

В основе регламентирования концентрации вредных химических соединений в воде лежат следующие основные свойства изучаемых веществ (критерии вредности):

- интенсивность прямого токсического действия ксенобиотика на здоровье человека и водные организмы (*токсикологический* показатель вредности);
- влияние на общий санитарный режим водоема, выражаемый в изменении таких интегральных показателей, как рН, БПК, содержание кислорода, нарушении самоочищения воды, эвтрофикации и т.д. (*санитарный* показатель вредности);

- одновременное действие вещества на организмы и санитарные показатели водоема (*санитарно-токсикологический* показатель вредности);
- способность вещества к образованию пленок и пены на поверхности водоема; изменение цвета воды, появление посторонних привкусов и запахов (*органолептический* показатель вредности);
- изменение товарных качеств промысловых водных организмов, появление в рыбе неприятных привкусов и запахов (*рыбохозяйственный* показатель вредности).

При обосновании ПДК одновременно устанавливается и ЛПВ – *лимитирующий* (или минимальный из всех перечисленных значений) показатель вредности по наиболее чувствительному звену. ЛПВ имеет значение при оценке комбинированного действия смеси веществ. Например, при обнаружении в питьевой воде нескольких химических соединений, относящихся к 1 и 2 классам опасности и нормируемых по одному и тому же признаку вредности, необходимо определить сумму отношений фактических концентраций C каждого из них к величине его ПДК. В результате эта сумма не должна превышать 1 [СанПиН 2.1.5.980-00]:

$$\frac{C_1}{\text{ПДК}_1} + \frac{C_2}{\text{ПДК}_2} + \dots + \frac{C_n}{\text{ПДК}_n} \leq 1 \quad (3.3)$$

Само по себе санитарно-гигиеническое нормирование не предполагает выделение классов качества воды и водоемов, вернее, предполагается только два класса качества: с соблюдением гигиенических нормативов ("*норма*") и с нарушением нормативов ("*патология*"). Такой подход на законодательном уровне нельзя не считать определенным проявлением здравого смысла (предполагается, что водоемов с многократным превышением ПДК как бы не существует). Любопытно, например, что предыдущая редакция санитарных правил [СанПиН 4630-88] предписывает водопользователям при определении приоритета и объема необходимых водоохраных мероприятий руководствоваться гигиенической классификацией водных объектов, представленной в табл. 3.2 и предполагающей разные градации степени сверхнормативного загрязнения. В действующем варианте СанПиН 2.1.5.980-00 такая гигиеническая классификация уже отсутствует.

Таблица 3.2

Гигиеническая классификация водных объектов по степени загрязнения согласно приложения 3 СанПиН 4630-88 (ПДК орг. и ПДК токс. – предельно допустимые концентрации, установленные по органолептическому и токсикологическому признаку соответственно)

Степень загрязнения	Оценочные показатели загрязнения для водных объектов I и II категорий							Индекс загрязнения
	Органолептический		Токсикологический	Санитарный режим		Бактериологический		
	Запах, привкус в баллах	Степень превышения ПДК орг.	Степень превышения ПДК токс.	БПК ₂₀ , мгО/л		Растворенный кислород мг/л	Число лактоположительных кишечных палочек в 1 л	
				I	II			
Допустимая	2	1	1	3	6	4	менее 10 ⁴	0
Умеренная	3	4	3	6	8	3	10 ⁴ –10 ⁵	1
Высокая	4	8	10	8	10	2	10 ⁵ –10 ⁶	2
Чрезвычайно высокая	>4	>8	100	>8	>10	1	более 10 ⁶	3

Значения ПДК используются в качестве нормативной основы в нескольких десятках методик комплексной оценки качества воды, различающихся предназначением, составом и количеством используемых параметров, способом операций с ними и др. (некоторые из них приводятся нами ниже).

Общезкологический подход к нормированию качества вод

Мем № 20: «Необходимо научиться прогнозировать отклик экосистемы в целом на совокупное внешнее воздействие, а не какого-либо ресурсного звена, обуславливающего практический интерес потребителя» В.В. Дмитриев [1994].

Система санитарно-гигиенического нормирования с использованием ПДК длительное время подвергается в целом аргументированной критике, так как давно наметилась тенденция к оценке состояния водных объектов не с точки зрения потребностей конкретного природопользователя, а с точки зрения сохранения структуры и функциональных особенностей всей экосистемы в целом. Систематизация основных претензий к действующей системе ПДК сводится к следующему [Форощук, 1989; Абакумов, Сушня, 1991; Зоммер, 1991; Лукьяненко, 1992, 1996; Воробейник с соавт., 1994; Пых, Малкина-Пых, 1996; Фрумин, 2000]:

1. Концентрация веществ в воде не отражает токсикологическую нагрузку на экосистему, так как не учитывает процессы аккумуляции веществ в биологических объектах и донных отложениях, т.е. не учитывается предыстория, связанная с накоплением в водной среде загрязняющих веществ.
2. Видовая токсикорезистентность водных животных зависит не столько от специфики механизмов действия ядов, сколько от уровня организации организма и от его отношения к общему фону загрязнения, обусловленному соответствующими механизмами адаптации, сформировавшимися в результате длительного эволюционного процесса [Алексеев, 1984а,б].
3. Федеральные ПДК не учитывают специфику функционирования водных экосистем в различных природно-климатических зонах (широтная и вертикальная зональность) и биогеохимических провинциях (естественные геохимические аномалии с различным уровнем содержания природных соединений), а значит, и их токсикорезистентность. Известно, что разные биогеохимические провинции (и отдельные водоемы) отличаются друг от друга по содержанию в поверхностных водах Pb в 2000 раз, Ni – в 1350, Zn – в 500, Cu – в 10 000, Cr – в 17 000 раз [Волков с соавт., 1993, 1996].
4. Не учитываются эффекты синергизма, антагонизма, суммации.
5. Не решена проблема нормы и патологии в водной токсикологии, в частности не принимается во внимание принцип эмерджентности, т.е. качественного своеобразия функционирования и устойчивости биосистем на разных уровнях их организации (от молекулярного до экосистемного).
6. При обосновании ПДК не учитывается разный трофический статус экосистем, сезонные особенности природных факторов, на фоне которых проявляется токсичность загрязняющих веществ.

Перечисленные, а также некоторые другие недостатки санитарно-гигиенического нормирования не отвергают необходимость оценки состояния водных объектов по ПДК, но свидетельствуют о необходимости разработки новых подходов, которые, с разной степенью декларативности, очерчены в работах представленных авторов. Общая концепция прослеживается достаточно отчетливо – основными задачами экологического нормирования и водной токсикологии должны стать [Приемы прогнозирования..., 1985]:

- оценка влияния токсических веществ не только на отдельные организмы, но и на надорганизменные системы (популяции и сообщества), которым свойственны специфические реакции на антропогенные факторы;
- составление приоритетного списка веществ, на которые живые организмы реагируют наиболее активно, с учетом как их количества и степени токсичности, так и трансформации в водной экосистеме.

При этом отмечается, что задачи экологической токсикологии более сложны, чем «классической», поскольку связаны с оценкой токсического влияния на более разнообразный спектр организмов, распространяемый от бактерий до млекопитающих.

Из изложенного можно предположить, что сам по себе **экологический (биоценотический) ПДК**, как нормативная величина, ничем не отличается от санитарно-гигиенического, поскольку определяется по единой формуле 3.2. Достаточно расширить до некоторого разумного предела множество n порогов хронического действия Lim_{ch} за счет включения новых групп биоиндикаторов и учитывать в коэффициенте запаса дополнительную специфику вещества (например, способность аккумуляроваться в донных отложениях). В связи с этим, вряд ли представляется целесообраз-

разным вводить в действие для «экологических» ПДК какие-либо новые терминологические обозначения типа «ЭДУ – экологически допустимых уровней воздействия» [Левич, 1994].

Таким образом, установление "биоценологических" ПДК сводится к определению критических нагрузок поллютантов Lim_{cb} , не вызывающих угнетения конкретных популяций биоценозов, и, в конечном итоге, к уточнению понятий «нормы» и «патологии» для гидробиологических сообществ [Брагинский, 1981]. Поскольку установление экологических нормативов в лабораторных условиях крайне затруднительно, А.С. Константинову [1973, 1981] представляется реальным выполнять нормирование с учетом состояния биоценозов в естественных условиях: «Для этого следует воспользоваться результатами тех грандиозных экспериментов, которые как бы поставлены в природных условиях в результате спуска в водоемы сточных вод различных предприятий». При этом предполагаются следующие исходные предпосылки:

- для каждого нормируемого вещества в качестве тест-объекта выбирается достаточно репрезентативная индикаторная группа гидробионтов, удобная для изучения и обитающая в водоемах с широким диапазоном уровня нормируемого загрязнения;
- выбирается серия водоемов, принадлежащих к разным типам и географическим зонам, в которых исследуемый поллютант является практически единственным или доминирующим;
- строится калибровочная кривая зависимости фактических структурно-функциональных характеристик (видовой состав, численность и биомасса) сообщества, выбранного в качестве биоиндикатора, от различных уровней загрязнения;
- на полученной кривой типа "доза-эффект" выбирается некоторая точка, соответствующая критическому состоянию экосистемы.

Несмотря на внешнюю убедительность представленных предпосылок, можно усомниться в конечной реализуемости описанного А.С. Константиновым механизма экологического нормирования. В качестве конкретных причин этому можно отметить:

- организационные трудности создания федеральной базы гидрохимических и гидробиологических данных;
- сомнительную возможность создания репрезентативной выборки наблюдений, где нормируемый фактор был бы выделен в «чистом» виде и широком диапазоне значений;
- большую дисперсию варьирования гидробиологических показателей под влиянием побочных сезонных, климатических или гидрометеорологических факторов, особенностей отбора проб и т.д., что мешает адекватно идентифицировать статистическую зависимость "доза-эффект" для конкретного нормируемого химического соединения;
- подробно описанные выше (см. раздел 2 главы 1) методологические сложности "назначения" подходящих биоиндикационных групп применительно к исследуемому фактору.

Факторы среды вообще и концентрации загрязняющих веществ в частности, как правило, статистически верно определяют, какие организмы могут жить в данных условиях. Однако принципиальное различие санитарно-гигиенических и экологических подходов к нормированию качества воды заключается, по нашему мнению, не в обсуждавшихся выше механизмах и способах обоснования ПДК (или ЭДУ), а в тех коренных вопросах, на которые должна дать ответ каждая научная методология. Основная задача традиционной водной токсикологии состоит в том, чтобы «для каждого действующего абиотического фактора (или химического вещества) найти такое значение ПДК, при котором контакт с водной средой любого водоема не сопряжен с угрозой для здоровья живого организма». Экологическое же нормирование качества воды на современном этапе решает, в некотором смысле, обратную задачу: «для некоторого конкретного водоема оценивается его биосферный статус или степень уклонения биоценоза от некоторого оптимального состояния; на основании чего делается вывод об интенсивности антропогенных факторов, как возможной причины этого уклонения».

Безусловно, сколько-нибудь строгое количественное определение, насколько "хороша" или "плоха" экосистема в биосферном смысле и где находится ее "экологический оптимум", представляет собой сложную и нетривиальную задачу. Для того, чтобы проследить и уяснить сущность и степень происходящих (и предстоящих) экологических изменений в водных объектах, необходимо иметь:

- некоторый набор адекватных показателей качества экосистем, непротиворечиво вычисляемых на основе гидробиологических измерений, полученных с помощью традиционных технических средств;
- технологию квантования диапазона изменения каждого показателя в соответствии с установленными границами нормы-патологии;
- способ расчета формализованных интегральных количественных оценок, позволяющий учитывать комплексное влияние всего многообразия составляющих экологических факторов.

Предметный анализ таких "биоценотических" показателей и методов их расчета представлен в последующих главах.

В литературных источниках можно найти обширный материал по разработанным системам классификации пресноводных водоемов, имеющим разную степень "законодательной" силы и использующим различные комплексы гидрохимических и гидробиологических показателей. Существующий подход к квантованию и выделению граничных значений числовых признаков, используемых для группировки водных объектов по классам качества, чаще всего достаточно произволен и основывается на опыте исследователя. Традиционно выбирается некоторая шкала с числом градаций в пределах "магических" чисел от 3 до 7, например: "Очень чисто" – "Чисто" – "Не очень чисто" – "Не очень грязно" – "Грязно" – "Ну, очень грязно" – "Катастрофически грязно". В дальнейшем, с использованием интуиции и квалификации разработчика, литературных данных, полученных "в начале прошлого века на одной английской реке", или общих соображений здравого смысла, каждой градации назначается конкретный диапазон значений из некоторого списка потенциально пригодных для этого показателей.

Федеральный закон "Об охране природы" [2002] в главе VIII для оценки зон экологического бедствия и зон чрезвычайных ситуаций предписывает использовать соответствующий документ Минприроды РФ [Критерии оценки., 1992], в котором экологическая обстановка классифицируется по возрастанию степени неблагополучия следующим образом:

1. относительно удовлетворительная;
2. напряженная;
3. критическая;
4. кризисная (или зона чрезвычайной экологической ситуации);
5. катастрофическая (или зона экологического бедствия).

Документ четко структурирует два раздела критериев оценки степени неблагополучия:

1. Критерии, оценивающие изменение среды обитания человека и состояние здоровья населения.
2. Критерии, оценивающие изменение природной среды.

Например, в разделе 1 оценка степени загрязнения питьевой воды и водоисточников питьевого и рекреационного назначения выполняется на основании трех групп критериев, оценивающих:

- санитарно-эпидемиологическую опасность воды с учетом количества кишечных палочек, патогенных бактерий и показателя вирусного загрязнения;
- санитарно-токсикологическую опасность загрязнения питьевой воды химическими веществами (см. таб. 3.3);
- санитарно-гигиеническую опасность загрязнения водоисточников возбудителями паразитарных болезней и микозов человека

Обобщенное заключение о степени санитарно-гигиенического неблагополучия может быть сделано на основании стабильного сохранения негативных значений *нескольких* основных показателей в течение достаточно длительного периода (не менее одного года). Однако, в случае загрязнения водоисточников и питьевой воды патогенными микроорганизмами или возбудителями паразитарных заболеваний, а также особо токсичными веществами, заключение о неблагополучии может быть сделано на основании одного критерия.

Таблица 3.3

Критерии санитарно-гигиенической оценки опасности загрязнения питьевой воды и источников питьевого водоснабжения химическими веществами

№№ п/п	Показатели	Параметры		
		Экологическое бедствие	Чрезвычайная экологическая ситуация	Относительно удовлетворительная ситуация
1.	Основные показатели			
1.1	Содержание токсических веществ первого класса опасности (чрезвычайно опасные вещества: бериллий, ртуть, бенз- α -пирен, линдан, диоксин, дихлорэтилен, диэтилртуть, галлий, тетраэтилсвинец, тетраэтилолово, трихлорбифенил, (в долях ПДК)	> 3	2-3	В пределах гигиенических нормативов (ПДК)
1.2	Содержание токсичных веществ второго класса опасности (высокоопасные вещества: алюминий, барий, бор, кадмий, молибден, мышьяк, нитриты, свинец, селен, стронций, цианиды (в долях ПДК)	>10	5-10	В пределах гигиенических нормативов (ПДК)
2.	Дополнительные показатели			
2.1	Содержание токсичных веществ третьего и четвертого классов опасности (опасные и умеренно опасные вещества: аммоний, никель, нитраты, хром, медь, марганец, цинк, фенолы, нефтепродукты, фосфаты (в долях ПДК)	>15	10-15	В пределах гигиенических нормативов (ПДК)
2.2.	<i>Физико-химические свойства:</i>			
2.2.1	pH	< 4	4-5,2	"-"
2.2.2	БПК полн., мг O ₂ /л	> 10	8-10	"-"
2.2.3	ХПК, мг O ₂ /л	> 80	60-80	"-"
2.2.4	Растворенный кислород, мг/л	< 1	1-2	> 4
2.3	<i>Органолептические характеристики:</i>			
2.3.1	Запах и привкус, баллы	5	3-4	не более 1 – 2
2.3.2	Плавающие примеси (пленки, пятна масляные и др.)	пленка темной окраски, занимающая до 2/3 обзорной площади	яркие полосы или пятна тусклой окраски	Отсутствуют

Выявление зон чрезвычайной экологической ситуации и экологического бедствия по разделу 2 с учетом изменения природной среды поверхностных водоемов осуществляется отдельно по химическим и биологическим показателям, приведенным соответственно в таблицах 3.4 и 3.5.

Таблица 3.4

Критерии оценки степени химического загрязнения поверхностных вод

№№ п/п	Показатели	Параметры		
		Экологическое бедствие	Чрезвычайная экологическая ситуация	Относительно удовлетворительная ситуация
1.	Основные показатели			
1.1	Химические вещества, доли ПДК			
1.1.1	1-2 класс опасности	более 10	5-10	1
1.1.2	3-4 класс опасности	более 100	50-100	1
1.2.	Показатель химического загрязнения (ПХЗ-10)			
1.2.1	1-2 класс опасности	более 80	35-80	1
1.2.2	3-4 класс опасности	более 500	500	10
2.	<i>Дополнительные показатели</i>			
2.1.	Запах, привкус в баллах	более 4	3-4	2
2.2.	Плавающие примеси: нефть и нефтепродукты	пленка темной окраски, занимающая 2/3 обозримой площади	яркие полосы или тусклая окраска пятен	Отсутствуют
2.3.	Реакция среды, рН	5,0-5,6	5,7-6,5	более 7
2.4.	Химическое потребление кислорода ХПК (антропогенная составляющая к фону), мгО ₂ /л	20-30	10-20	
2.5.	Растворенный кислород, % насыщения	10-20	20-50	Более 80
2.6.	Биогенные вещества :			
2.6.1	нитриты (NO ₂), доли ПДК	более 10	более 5	менее 1
2.6.2	нитраты (NO ₃), доли ПДК	более 20	более 10	менее 1
2.6.3	соли аммония (NH ₄), доли ПДК	более 10	более 5	менее 1
2.6.4	фосфаты (PO ₄), мг/л	более 0,6	0,3-0,6	менее 0,05
2.7.	Минерализация, мг/л, (превышение регионального уровня)	3-5	2-3	региональный уровень
2.8.	Коэффициент донной аккумуляции (КДА)	более 10 ⁴	10 ³ -10 ⁴	10
2.9.	Коэффициент накопления в гидробионтах (Кн)	более 10 ⁵	10 ⁴ -10 ⁵	10

В качестве основных гидрохимических показателей оценки состояния поверхностных вод были выбраны, в первую очередь, токсичные, приоритетные загрязняющие вещества, в том числе обладающие кумулятивными свойствами накапливаться в органах и тканях гидробионтов. Для совокупной оценки опасных уровней загрязнения водных объектов при выделении зон чрезвычайной экологической ситуации и экологического бедствия предлагается использовать формализованный суммарный показатель химического загрязнения ПХЗ-10 (см. раздел 3.5). Предполагается, что этот показатель особенно важен для территорий, где загрязнение химическими веществами наблюдается сразу по нескольким веществам, каждый из которых многократно превышает допустимый уровень ПДК. В дополнительные показатели включены некоторые общепринятые физико-химические параметры, дающие общее представление о составе и качестве вод. Для характеристики процессов, происходящих в водных объектах, приводятся также коэффициенты, учитывающие способность загрязняющих веществ накапливаться в донных отложениях (КДА) и гидробионтах (Кн).

Коэффициент донной аккумуляции (КДА) определяется как отношение концентрации веществ (документ не определяет, каких именно) в донных отложениях $C_{до}$ к концентрации тех же веществ в воде $C_{вода}$:

$$КДА = C_{до} / C_{вода}$$

Коэффициент накопления в гидробионтах (Кн) определяется как отношение концентрации веществ в гидробионтах $C_{гидробионт}$ к концентрации тех же веществ в воде $C_{вода}$:

$$КДА = C_{гидробионт} / C_{вода}$$

(документ также не определяет, каких веществ и в каких именно гидробионтах, что предопределяет большое варьирование сравниваемых данных).

Таблица 3.5

Критерии оценки состояния пресноводных экосистем

№№ п/п	Показатели	Параметры		
		Экологическое бедствие	Чрезвычайная экологическая ситуация	Относительно удовлетворительная ситуация
1.	Основные показатели			
1.1.	Фитопланктон	отсутствие водорослей или единичные экз. видов	пленка сине-зеленых, пряди нитчатых водорослей, отдельные представители других групп водорослей	естественное развитие фитопланктона
1.2.	Концентрация хлорофилла "а", мкг/л	более 50	30-50	менее 10
1.3.	Среднелетняя биомасса фитопланктона, мг/л	более 100	50-100	менее 10
1.4.	Фитомасса нитчатых водорослей, кг/м ²	более 3,0	2,6-3,0	менее 2,0
1.5.	Зоопланктон	единичные экземпляры панцирных коловраток, их зимние яйца	резкое снижение численности и разнообразия панцирных коловраток, единичные экз. низших ракообразных	естественное развитие зоопланктона
1.6.	Зообентос	присутствие только некоторых видов червей, не требовательных к кислороду (тубицид)	резкое сокращение численности и разнообразия донных животных, присутствие тубицид (олигохет) и таниподин (хириноид)	естественное развитие зообентоса на региональном уровне
1.7.	Биотический индекс по Вудивиссу, баллы	менее 1	1-2	более 6
1.8.	Олигохетный индекс, отношение числен. олигохет к числен. всего зообентоса, %	более 100	100-86	менее 50
1.9.	Хириноидный индекс по Балушкиной	более 9,0	6,5-9,0	менее 6,5
1.10.	Ихтиофауна	исчезновение ценных и редких видов рыб; отсутствие запасов промысловых рыб	резкое снижение доли ценных и редких видов рыб; резкое снижение запасов промысловых рыб	сохранение естественного состояния ихтиофауны; величина вылова, не нарушает естественного воспроизводства рыб
1.11.	Заболеваемость рыб, связанная с хроническим токсикозом (миопатия, язвенная болезнь и тд.), % от годового улова	более 50	50	отсутствие признаков

1.12.	Интегральный показатель качества вод: биотестирование на ракообразных (дафнии и цериодафнии),.	не проявляется	не проявляется	в неразбавленной воде летальное действие отсутствует
	гибель 50% и более рачков в течении 96 и 48 часов соответственно	при кратности разбавления в 100 и более раз	при кратности разбавления от 50 до 100 раз	"-
	<i>Дополнительные показатели:</i>			
2.1.	Количество сапрофитных бактерий, кл/мл	более 1.10	5.10 -1.10	5.10 -1.10
2.2.	Общее количество бактерий, кл/мл	более 1.10	5.10 -1.10	менее 3.10
2.3.	Индекс сапробности планктона по Пантле и Буку (в модификации Сладечека)	более 4	4-3	1,5-2,5
2.4.	Олигохетный индекс по Цанеру, тыс.экз./кв.м			
	тубифициды	более 50,0	50,0-10.0	0,1
	лимнодрилусы	более 100,0	100,0-50,0	0,1
2.5	Олигохетный индекс по Пареле	более 0,8	0,5-0,8	менее 0,5

При формировании критериев экокризисности водных экосистем по гидробиологическим показателям, приведенным в табл. 3.5, сделана попытка характеристики состояния и развития всех экологических групп водного сообщества. При выделении рассматриваемых зон благополучия используются основные показатели по бактериопланктону, фитопланктону, зоопланктону, зообентосу и ихтиофауне, принятые на основании данных региональной службы гидробиологического контроля и характеризующие степень экологической деградации пресноводных экосистем. Кроме того, для определения степени токсичности вод введен интегральный показатель – биотест на низших ракообразных. Соответствующий уровень токсичности водной массы должен наблюдаться во все основные фазы гидрологического цикла.

Параметры показателей, предложенных для выделения зон, предписывается рассматривать с учетом региональных особенностей, категории и трофического статуса водоема (водотока). Они должны наблюдаться на данной территории постоянно на протяжении достаточно длительного времени с минимальным периодом не менее 3 лет.

В контексте документа [Критерии оценки..., 1992] предусмотрена разработка специализированной экспертной системы для информационной поддержки Государственной экологической экспертизы, которая рассматривает полученную с мест документацию и информацию, подготовленную на ЭВМ при помощи программы "Формализация и обработка первичных данных". Основной функцией экспертной системы является упорядочение и классификация территорий по степени экологического неблагополучия на основе принятых заявок при помощи математических методов, в том числе алгоритмов многокритериального выбора и алгоритмов анализа прецедентов [Шакин, 1976,1991].

Подходы к созданию многофакторных систем классификации водоемов

Основной задачей как санитарно-гигиенического, так и экологического нормирования является оценка класса качества водоема по всему комплексу информативных показателей. Важность этой проблемы особенно проявляется в условиях резко возросшей многокомпонентности загрязнения окружающей среды, когда основным вредным фактором становится не сверхнормативная концентрация традиционных поллютантов, а сложный "букет" синтезированных в последние десятилетия бытовых продуктов – моющих средств, добавок и т.д.. Например, в токсикологии [Жолдакова с соавт., 1998; Красовский, Егорова, 2000] описан *синдром множественной химической чувствительности* (Multiple Chemical Sensitivity MCS), возникающий в результате комбинированного воздействия нескольких химических соединений в концентрациях, значительно меньших порогов их

вредности и проявляющийся в полиморфной клинической картине (нарушение адаптации, потеря иммунитета и проч.)

В разделе 1.5 подробно обсуждались математические аспекты оценки комбинированного воздействия n факторов и приведена формула (1.3) для расчета совместного эффекта на основе матрицы коэффициентов парного взаимодействия a_{ij} индивидуальных эффектов i и j . Однако, если принять во внимание, что к настоящему времени в воде водоемов пронормировано свыше 1000 веществ, а стоимость разработки ПДК по одному веществу составляет около 50 тыс. долларов, то любые попытки оценить в ходе эксперимента коэффициенты комбинированного действия различных пар веществ выльются в астрономические трудовые и стоимостные затраты. А уравнение для линейного и парного взаимодействия можно дописать справа, добавив коэффициенты тройного и множественного взаимодействия. Поэтому при учете комбинированного действия нескольких факторов приходится руководствоваться "простыми" умозаключениями, основанными на накопленном опыте и здравом смысле.

Замечание. Квалифицированный обзор существующих методов комплексной оценки качества воды выполнен Ю.В. Новиковым с соавторами [1987] и в последующем изложении ссылки на работы, отмеченные «Н», можно найти в списке литературы к этой статье. Основные положения обзора, иллюстрированные гидрохимическими примерами, могут быть без труда распространены и на гидробиологические показатели произвольной этиологии.

Поскольку к различным группам объектов оценивания могут быть предъявлены неодинаковые требования, то при разработке комплексного показателя необходимо предварительное разделение водоемов на группы: по виду водопользования, почвенно-климатическому региону, степени природной минерализации, особенностям гидрологического режима и проч. [Хелмер, 1976^H; Жукинский с соавт., 1978; Смирнова с соавт., 1979^H; Le Foil, Lesouef, 1981^H]

Следующий этап заключается в том, чтобы определить, какие показатели должны быть использованы для оценки качества воды. По этой проблеме в литературе имеется множество предложений [Гурарий, Шайн, 1974^H; Статистика..., 1981^H; Методические..., 1983^H], которые для удобства рассуждения разделим на три группы:

- использование всех показателей, для которых установлены ПДК [Valiquette et al., 1981^H; Новиков с соавт., 1984^H];
- применение небольшого числа нормируемых показателей (от 4 до 10-12) [Фридланд, Рублева, 1958^H; Chin, Goh, 1981^H; Караушев с соавт., 1981^H; Львович, 1982^H];
- учет некоторых нормируемых показателей, а также соединений, которые могут образоваться в результате химических и биохимических превращений [Богородицкий, 1981^H, Методические..., 1981^H; Bianchi, Piwano, 1981^H].

Идеальным вариантом было бы использование предложений первой группы, но это невыполнимо в реальных условиях. Наиболее многочисленны в литературе предложения второй группы. Их авторы справедливо указывают на невозможность в реальных условиях проводить наблюдения за сотнями потенциально загрязняющих веществ. Но какие показатели выбрать для обязательного наблюдения и как быть с остальными?

Почти все авторы с небольшими вариациями сходятся на следующей группе: взвешенные вещества, растворенный кислород, биохимическое потребление кислорода (БПК), рН, коли-индекс, NH_4^+ , NO_3^- , хлориды, сульфаты. В различных работах [Пичахчи, 1979^H; Le Foil, Lesouef, 1981^H] по-разному дополняется этот список, но в целом круг обязательных ограничивается 20—25 показателями. Предложения о комплексной оценке качества воды на основе такого сокращения списка (или какого-либо из его расширенных вариантов) базируются на использовании одного из двух принципов:

- *приоритетности* [Helmer, 1981^H; Сватков, 1982^H] и
- *репрезентативности* [Лозанский с соавт., 1979^H; Chin, Goh, 1981^H; Белогулов, 1981^H].

Принцип приоритетности предполагает выделение небольшого числа обязательных показателей, а остальные делятся на группы первого приоритета, второго и т. д. Их нужно исследовать тем реже, чем выше номер их приоритета. Удобство принципа приоритетности в том, что на любом пункте гидрохимического контроля и на любом водоеме данные, необходимые для оценки качества воды, собираются систематически и единообразно. Однако в каждом случае могут преобладать региональные факторы, обуславливающие возможность специфического загрязнения, и то-

гда оценка качества воды, рассчитанная лишь по приоритетным показателям, фактически не будет отражать действительность.

Принцип введения репрезентативных показателей [Караушев с соавт., 1981^H; Львович, 1982^H] состоит в разделении загрязняющих веществ на две группы: репрезентативные и фоновые, первые из которых определяют часто и систематически, а вторые — относительно редко. В число репрезентативных специально отбираются загрязнения, концентрации по которым, исходя из местных условий, могут значительно превышать ПДК. В качестве фона рассматриваются вещества "обязательной" группы (их может быть 15-20). Например, для водоемов в зоне влияния целлюлозно-бумажного производства в число репрезентативных следует включать сернистые и органические соединения, показатели потребления кислорода ХПК и БПК.

Что касается предложений третьей группы, то аргументы в их пользу сводятся к необходимости не только оценки санитарного состояния водоема в данный момент, но и прогнозирования его изменения, а это зависит от того, какие именно вещества и химические соединения образуются и накапливаются в донных отложениях (или самой воде, если речь идет о подземных водах [Амбразене 1979^H; Богородицкий, 1981^H]). Авторы этой концепции указывают на важность учета при оценке качества воды таких медленно превращающихся веществ, как соединения нитратов и нитритов [La Contaminazione, 1980^H; Красовский с соавт., 1982^H], мышьяка, ртути, кадмия, свинца, металл- и хлорорганических соединений.

Большинство исследователей при расчете комплексных показателей переводят данные отдельных измерений в безразмерные единицы — баллы [Гурарий, Шайн, 1974^H; Белогуров, 1981^H]. При этом основное требование состоит в том, чтобы оценка результирующих изменений качества объекта была бы "изоэффективна" как при использовании натуральных, так и балльных показателей [Новиков с соавт., 1984^H]. Поясним это важное требование.

Предположим, что каждое загрязняющее вещество вызывает некоторый эффект вредного действия в биотических элементах среды, куда оно внесено. Этот эффект может иметь интегральный (снижение биоразнообразия экосистемы в единицах индекса Шеннона, увеличение запаха воды в баллах и проч.) или частный экофизиологический характер (гибель особей индикаторного вида гидробионтов, снижение гемоглобина в крови и т.п.). Численное выражение этого эффекта свяжем с некоторым унифицированным показателем качества воды W , выраженном в безразмерных единицах (баллах), а аддитивный вклад каждого i -го фактора (химического ингредиента) в эту суммарную оценку примем равным δ_i . Допустим, что концентрация вещества X в водоеме изменилась от C_{x1} до C_{x2} . В другой раз при постоянстве концентрации X изменилась концентрация вещества Y от C_{y1} до C_{y2} . Если при этом изменения качества воды ΔW были одинаковы, то значениям C_{x1} , C_{x2} , C_{y1} , C_{y2} должны соответствовать такие балльные оценки δ_{x1} , δ_{x2} , δ_{y1} , δ_{y2} , чтобы соблюдалось равенство:

$$\Delta W = \delta_{x2} - \delta_{x1} = \delta_{y2} - \delta_{y1} \quad (3.4)$$

При разработке комплексных показателей очень трудно уверенно определить равенство изменений качества исследуемого объекта ΔW при изменениях различных единичных показателей.

Традиционным способом определения балльных оценок является применение формулы:

$\delta_i = \frac{C_i}{\text{ПДК}_i}$, где C_i и ПДК_{*i*} — концентрация и ПДК *i*-го вещества в воде. Соответственно, комплексная оценка качества рассчитывается по формуле:

$$W = \sum_i \frac{C_i}{\text{ПДК}_i}, \quad (3.5)$$

где суммирование выполняется по показателям, имеющим общий характер комбинаторного действия (например, имеет одинаковый лимитирующий признак вредности ЛПВ, как это сделано в 3.3).

Но можно ли считать, что найденные таким способом δ_i удовлетворяют требованию изоэффективности? Несложный анализ формулы (3.4) свидетельствует о том, что *балльные оценки* *взаимоадекватны* только при выполнении четырех условий:

- вклады должны отражать *однонаправленный* характер вредного действия, что автоматически должно исключить из списка анализируемых показателей концентрацию растворенного кислорода и рН;

- опорные значения нормирующих величин в знаменателе *изоэффективны*, что далеко не так, поскольку при обосновании ПДК используется достаточно широко варьируемый для различных веществ коэффициент запаса, оказывающий тем большее влияние на вклады, чем меньше величина ПДК;
- зависимость "концентрация вещества – эффект вредного действия" имеет *линейный* характер, что далеко не так, о чем убедительно свидетельствуют все работы по токсикокинетике;
- тангенс угла наклона уравнения прямой "концентрация – эффект" должен быть *одинаков* (в том, что это далеко не так, можно убедиться, обратив внимание на табл. 3.5: экологическое бедствие квалифицируется при трехкратном превышении ПДК для класса особо опасных веществ и при 20-кратном превышении нитрит-ионов).

Безусловно, можно ожидать, что в некоторых небольших пределах концентраций одинаковые δ_i могут соответствовать приблизительно одинаковому эффекту. Однако во всех случаях актуален вопрос о допустимом диапазоне использования балльных оценок, поскольку мы почти ничего не знаем о том, в каких пределах изменение активности линейно пропорционально изменению концентрации токсичного вещества, т. е. в каких пределах можно пользоваться формулой (3.5). Определенный вклад в решение этих проблем может внести статистический анализ таких важнейших характеристик показателя, как вариабельность его значений и широта диапазона толерантности (выявление статистической и физиологической "эластичности" фактора).

Как было уже отмечено нами выше, значительную трудность при определении баллов и выборе формулы для расчета комплексной оценки представляет учет взаимодействия различных веществ при их воздействии на биотические сообщества [Черкинский, 1957^H]. Если характер такого взаимодействия установлен, то введение поправок в способ расчета баллов не представляет трудностей за счет введения *коэффициентов потенцирования* a_{ij} :

$$W = \sum_i \frac{C_i}{\text{ПДК}_i} + \sum_i a_{ij} \frac{C_i \cdot C_j}{\text{ПДК}_i \cdot \text{ПДК}_j}, \quad (3.6)$$

однако учет взаимодействия многих веществ грозит настолько усложнить запись формулы, что ей практически нельзя будет пользоваться.

Во многих работах, например, методике расчета гидрoхимического индекса загрязнения воды ИЗВ [Временные методические..., 1986], принято вместо формулы суммации (3.5) использовать среднее значение вклада, разделив итоговую величину на количество используемых слагаемых. Если оставаться на концепции аддитивности вклада отдельных ингредиентов в общий эффект вредного действия, то такую математическую операцию следует считать грубой ошибкой (см. подробное обоснование в разделе 1.5). Иными словами, если мы ожидаем в результате расчетов получить, например, общее снижение индекса биоразнообразия при одновременном и независимом действии n поллютантов, то, разделив результат на n , получим что-то вроде "частного снижения биоразнообразия при действии одного вещества средней эффективности", что не соответствует ни здравому смыслу, ни цели вычислений. Если же при конструировании комплексного показателя W никаких предположений об изоэффективности и механизме суммации не делается и к нему относятся просто как к некоторому "числу", используемому для сравнения различных вариантов или точек измерения, то, безусловно, операция усреднения приобретает некоторую аргументацию. В любом случае, при сравнении различных водоемов и точек гидрoхимического контроля при использовании таких критериев желательнее использовать строго сопоставимый список и число слагаемых показателей.

В некоторых работах [Лозанский с соавт., 1979^H; Белогуров, 1981^H] поднят вопрос о том, каким образом присваивать балльные оценки корреляционно связанным показателям. При этом предлагают, например, для сильной связи ($r > 0,9$) ввести в расчетный алгоритм только один из показателей и отбросить другой, а для связи средней силы ($0,5 < r \leq 0,9$) – ввести в алгоритм некоторую линейную функцию концентраций обоих веществ. По нашему мнению, статистическая связь между значениями двух или более показателей в воде не имеет никакого отношения к комплексной оценке качества. Важен характер совместного действия на биотические элементы, т. е. взаимодействие веществ, которое не зависит от того, насколько синхронно изменяются их концентрации. Представляется правильным учитывать статистически связанные показатели при оценке качества как независимые.

Иную роль играют такие показатели, как ХПК, БПК, рН, которые, не будучи сами по себе вредными действующими факторами, в то же время интегрально характеризуют эффект воздействия сразу

нескольких загрязняющих веществ. В силу этого обнаруживается и статистическая связь каждого из интегральных показателей с несколькими другими. Нетрудно определить балльные оценки для показателей этого типа, поскольку для каждого из них установлены нормативные уровни. Но не совершаем ли мы ошибку, суммируя их балльные оценки с оценками других единичных показателей? Ведь сам по себе интегральный показатель, например ХПК, не является вредным фактором. Ю.В. Новиков с соавт. [1987] считают, что если интегральный показатель характеризует биологическое действие группы загрязняющих веществ, то его надо использовать вместо этой группы (подобно тому, как коли-индекс используют вместо целой группы эпидемиологических показателей). Но если в комплексной оценке уже учтен каждый из единичных показателей загрязнения, то соответствующий интегральный показатель применять не следует.

Неясен также способ учета в комплексной оценке качества воды такого интегрального показателя, как БПК. Он показывает темп использования кислорода бактериями на окисление азота, выделяющегося при разрушении органических веществ. Поэтому по значениям БПК обычно интегрально судят о наличии в воде различных органических загрязняющих веществ. Однако существуют неорганические вещества (хлор, мышьяк, некоторые металлы), угнетающие жизнедеятельность бактерий, и, следовательно, в присутствии этих веществ БПК будет снижено, хотя уровень загрязнений органическими веществами и был высоким.

Существует довольно много предложений об использовании для назначения баллов экспертных оценок или "коэффициентов весомости" [Bora, 1980^H; Bianchi, Piwano, 1981^H]. Представляется, что, несмотря на всю эффективность экспертных методов, возможность их применения именно в данной задаче сомнительна. Эксперты дают оценку в баллах, но соответствуют ли эти оценки действительному биологическому эффекту веществ? В литературе пока нет доказательств такого соответствия (впрочем, никто не показал и обратного).

Основным видом расчетного алгоритма, используемым в системном анализе, является иерархическая структурная схема. Это означает, что ряд показателей первого (нижнего) уровня объединены с помощью некоторого математического выражения или логического условия в показатель второго уровня, эти показатели – в показатель третьего уровня и т.д. Все показатели второго и последующего уровней называют комплексными.

При оценке качества воды иерархия выглядит так: показатели первого уровня объединены в три группы в соответствии со своим лимитирующим показателем вредности (ЛПВ), а получаемые комплексы оценки $W_{орг}$ (органолептическая), $W_{ст}$ (санитарно-токсикологическая) и $W_{ос}$ (общесанитарная) трансформируются в общий комплексный показатель W путем суммирования: $W = \sum W_i = W_{орг} + W_{ст} + W_{ос}$, либо путем перемножения $W = \prod W_i$. Выбирая способ обобщения, необходимо обеспечить выполнение требования (3.4): численно одинаковым изменениям $W_{орг}$, $W_{ст}$ и $W_{ос}$ должны соответствовать одинаковые по воздействию на организм изменения качества воды. Но как сопоставить по влиянию на организм изменение органолептических свойств с изменением, допустим, токсичности?

В работах [Хелмер, 1976^H; Parker, 1982^H] обращается внимание на то, что при вычислении W по ограниченному набору заранее выбранных показателей нужно учесть и возможные отклонения от ПДК и других показателей. В.И. Гурарий и А.С. Шайн [1974^H] предлагают использовать формулу (3.5) для расчета комплексной оценки по основной группе выбранных показателей и ввести "штрафную функцию", снижающую оценку качества воды при превышении ПДК теми или иными прочими показателями. Таким образом:

$$W = (\sum m_i \delta_i) \prod \varphi(C_i) \quad (3.7)$$

где m_i и δ_i – весовые и балльные оценки показателей основной группы; $\varphi(C_i)$ – "штрафная функция", зависящая от концентраций веществ, не вошедших в основную группу. Основная идея этих авторов, состоящая в строгом учете загрязнения, создаваемого небольшим числом основных веществ, и в интегрированной оценке влияния большого числа прочих веществ, представляется заслуживающей живейшего внимания, если будет найден путь формализации расчета оценок и штрафных функций.

Строгий отбор списка учитываемых ингредиентов особенно актуален при расчете научно-технических нормативов выбросов и сбросов вредных веществ (ПДВ и ПДС), экономического ущерба и штрафных санкций от сбросов и т.д., которые оперируют не со значениями концентраций, а с массой поллютанта g_i в т (кг), поступившего в природную среду залпом или за отчетный

промежуток времени. При этом рассчитывается так называемая "условно приведенная масса" G_{yc} по формуле, аналогичной (3.5):

$$G_{yc} = \sum_i \frac{g_i}{\text{ПДК}_i} \quad (3.8)$$

Рассмотрим парадоксы этой формулы на конкретном примере. При оценке поступления загрязняющих веществ со сточными водами г. Чапаевска в р. Чапаевка, в течение 1994 г. по статистической отчетности (форма 2ТП-водхоз) был установлен суммарный сброс 20 784 т загрязняющих веществ 16 наименований (минеральные соли, биогенные элементы, органические вещества, тяжелые металлы), в том числе, 0,05 т (или 0,00024% от общей массы) хлорорганических пестицидов. После пересчета массы сброса в "условные тонны" на пестициды стало приходиться 5000 у.т. из общей приведенной массы 5618 у.т. (или около 90%). Мы не склонны недооценивать опасность пестицидов, но, в сравнении с другими компонентами, 50 кг гексахлорциклогексана, распределившись в водоеме, вряд ли могли внести такой ощутимый вклад в токсико-гигиеническую обстановку реки. Более того, этот компонент могли просто-напросто "забыть" включить в форму 2ТП-водхоз, тогда приведенная масса загрязнений сразу уменьшилась бы почти в 10 раз (с 5618 до 618 тыс. тонн). Принцип аддитивности работоспособен, когда список слагаемых компонентов строго определен без всяких пропусков и не предусматривается включение в расчет никаких дополнительных компонентов.

Методики оценки качества водоемов по комплексу гидрохимических показателей

Гидрохимический индекс загрязнения воды (ИЗВ)

ИЗВ установлен Госкомгидрометом СССР [Временные методические..., 1986] и относится к категории показателей, наиболее часто используемых для оценки качества водных объектов (впрочем, необходимость его применения не подтверждается ни одним из опубликованных позже официальных нормативных документов). Этот индекс является типичным аддитивным коэффициентом и представляет собой среднюю долю превышения ПДК по строго лимитированному числу индивидуальных ингредиентов:

$$\text{ИЗВ} = \frac{1}{n} * \sum_{i=1}^n \frac{C_i}{\text{ПДК}_i}, \quad (3.9)$$

где: C_i – концентрация компонента (в ряде случаев – значение физико-химического параметра); n – число показателей, используемых для расчета индекса, $n = 6$; ПДК_i – установленная величина норматива для соответствующего типа водного объекта.

При расчете индекса загрязнения вод для всего множества нормируемых компонентов, включая водородный показатель рН, биологическое потребление кислорода БПК₅ и содержание растворенного кислорода, находят отношения $C_i / \text{ПДК}_i$ фактических концентраций к ПДК и полученный список сортируют. ИЗВ рассчитывают строго по шести показателям, имеющим наибольшие значения приведенных концентраций, независимо от того превышают они ПДК или нет.

При расчете ИЗВ для составляющих $C_i / \text{ПДК}_i$ по неоднозначно нормируемым компонентам применяется ряд следующих условий:

- для биологического потребления кислорода БПК₅ (ПДК – не более 3 мг О₂/дм³ для водоемов хозяйственно-питьевого водопользования и не более 6 мг О₂/дм³ для водоемов хозяйственно-бытового и культурного водопользования) устанавливаются специальные значения нормативов, зависящие от самого значения БПК₅:

<u>Показатель БПК₅ (мгО₂/л)</u>	<u>Значение норматива (ПДК)</u>
Менее 3	3
От 3 до 15	2
Свыше 15	1

- *концентрация растворенного кислорода* нормируется с точностью до наоборот: его содержание в пробе не должно быть ниже 4 мг/дм^3 , поэтому для каждого диапазона концентраций компонента устанавливаются специальные значения слагаемых $C_i/\text{ПДК}_i$:

<u>Концентрация (мгО₂/л)</u>	<u>Значение слагаемого $C_i / \text{ПДК}_i$</u>
Более или равно 6	6
Менее 6 до 5	12
Менее 5 до 4	20
Менее 4 до 3	30
Менее 3 до 2	40
Менее 2 до 1	50
Менее 1	60

- для *водородного показателя рН* действующие нормативы для воды водоемов различного назначения регламентируют диапазон допустимых значений в интервале от 6,5 до 8,5, поэтому для каждого сверхнормативного значения рН, выходящего за границы этого диапазона, устанавливаются специальные значения слагаемых $C_i / \text{ПДК}_i$:

<u>Значения рН ниже диапазона нормы (< 6.5)</u>	<u>Значения рН выше диапазона нормы (> 8.5)</u>	<u>Значение слагаемого $C_i / \text{ПДК}_i$</u>
Менее 6.5 до 6	Свыше 8.5 до 9	2
Менее 3 до 5	Свыше 9 до 9.5	5
Менее 5	Свыше 9.5	20

Вызывает недоумение требование методики: «При равенстве величин $C_i / \text{ПДК}_i$ предпочтение дается веществам, имеющим токсикологический признак вредности», поскольку результат расчета ИЗВ никак не зависит от того, какие ингредиенты попали в отбираемую "шестерку".

В зависимости от величины ИЗВ участки водных объектов подразделяют на классы (табл. 3.6). Устанавливается требование, чтобы индексы загрязнения воды сравнивались для водных объектов одной биогеохимической провинции и сходного типа, для одного и того же водотока (по течению, во времени, и так далее), а также с учетом фактической водности текущего года.

Таблица 3.6.

Классы качества вод в зависимости от значения индекса загрязнения воды

Воды	Значения ИЗВ	Классы качества вод
Очень чистые	до 0,2	I
Чистые	0,2–1,0	II
Умеренно загрязненные	1,0–2,0	III
Загрязненные	2,0–4,0	IV
Грязные	4,0–6,0	V
Очень грязные	6,0–10,0	VI
Чрезвычайно грязные	>10,0	VII

Показатель химического загрязнения воды (ПХЗ-10)

Суммарный показатель химического загрязнения вод, названный авторами [Критерии оценки..., 1992] "формализованным", рассчитывается по десяти соединениям, максимально превышающим ПДК с использованием знакомой (см. 3.5) неприятной формулы суммирования воздействий:

$$\text{ПХЗ-10} = (C_1/\text{ПДК}_1 + C_2/\text{ПДК}_2 + \dots + C_{10}/\text{ПДК}_{10}),$$

где ПДК_i – рыбохозяйственные нормативы; C_i – концентрация химических веществ в воде.

При определении ПХЗ-10 для химических веществ, по которым "относительно удовлетворительный" уровень загрязнения вод определяется как их "отсутствие", отношение $C/\text{ПДК}$ условно принимается равным 1.

Для установления ПХЗ-10 рекомендуется проводить анализ воды по максимально возможному числу показателей. Настораживает своей категоричностью следующее требование авторов методики: «ПХЗ-10 рассчитывается только при выявлении зон чрезвычайной экологической ситуации и зон экологического бедствия». Здесь налицо явная нелогичность – для того, чтобы получить право

рассчитать ПХЗ-10, нужно иметь мнение о чрезвычайности ситуации, а для того, чтобы удостовериться в этой чрезвычайности, нужно рассчитать ПХЗ-10...

Комбинаторный индекс загрязненности

В гидрохимической практике используется и несколько измененный, по сравнению с ИЗВ, метод интегральной оценки качества воды, по совокупности находящихся в ней загрязняющих веществ и частоты их обнаружения [Васильева с соавт., 1998]. В этом методе для каждого ингредиента на основе фактических концентраций рассчитывают баллы *кратности превышения ПДК_{ср}* – K_i , *попоявляемости случаев превышения* H_i , а также *общий оценочный балл* – V_i :

$$K_i = C_i / \text{ПДК}_i$$

$$H_i = N_{\text{ПДК}_i} / N_i$$

$$V_i = K_i \cdot H_i,$$

где C_i – концентрация в воде i -го ингредиента; ПДК_i – предельно допустимая концентрация i -го ингредиента для водоемов рыбохозяйственного назначения; $N_{\text{ПДК}_i}$ – число случаев превышения ПДК по i -му ингредиенту; N_i – общее число измерений i -го ингредиента.

Ингредиенты, для которых величина общего оценочного балла больше или равна единицы, выделяются как лимитирующие показатели загрязненности (ЛПЗ). Комбинаторный индекс загрязненности рассчитывается как сумма общих оценочных баллов всех учитываемых ингредиентов. По величине комбинаторного индекса загрязненности устанавливается класс загрязненности воды.

Методика НИИ гигиены им. Ф.Ф. Эрисмана

Для определения степени загрязнения [Новиков с соавт., 1987] используются четыре критерия вредности, по каждому из которых сформирована определенная группа веществ и специфических показателей качества воды:

- критерий санитарного режима (W_c), где учитывается растворенный кислород, БПК₅, ХПК и специфические загрязнения, нормируемые по влиянию на санитарный режим;
- критерий органолептических свойств (W_ϕ), где учитывается запах, взвешенные вещества, ХПК и специфические загрязнения, нормируемые по органолептическому признаку вредности;
- критерий, учитывающий опасность санитарно-токсикологического загрязнения (W_{cm}), где учитывается ХПК и специфические загрязнения, нормируемые по санитарно-токсикологическому признаку;
- эпидемиологический критерий (W_s), учитывающий опасность микробного загрязнения.

Одни и те же показатели могут входить одновременно в несколько групп. Комплексная оценка вычисляется отдельно для каждого *лимитирующего признака вредности* (ЛПВ) W_c , W_ϕ , W_{cm} и W_s по традиционной формуле "псевдокомпенсации":

$$W = 1 + \frac{\sum_{i=1}^n (\delta_i - 1)}{n}, \quad \delta_i = C_i / N_i,$$

где W – комплексная оценка уровня загрязнения воды по данному ЛПВ, n – число показателей, используемых в расчете; N_i – нормативное значение единичного показателя (чаще всего $N_i = \text{ПДК}_i$).

Если $\delta_i < 1$, т.е. концентрация менее нормативной, то принимается $\delta_i = 1$.

По особым формулам рассчитываются вклады для содержания растворенного кислорода и взвешенных веществ. Растворенный кислород нормируется по нижнему уровню значения, т.е. его содержание должно быть меньше 4 мг/л, поэтому при $C_i < 4$ для него принято

$$\delta_i = 1 + 10(N_i - C_i) / N_i.$$

Для взвешенных веществ также предложены специальные формулы, учитывающие требования "Правил охраны поверхностных вод от загрязнения сточными водами" [1991].

Поскольку сами по себе рассчитанные показатели ни о чем не говорят, к формулам прилагается также традиционная классификационная таблица диапазонов значений комплексных оценок W (см. таб. 3.7).

Таблица 3.7

Степень загрязнения водоемов в зависимости от значений комплексных показателей W , рассчитанных по лимитирующим признакам вредности

Уровень загрязнения	Критерий загрязнения по величинам комплексных оценок			
	Органолептический (W_{ϕ})	Санитарный режим (W_c)	Санитарно-токсикологический (W_{cm})	Эпидемиологический (W_e)
Допустимый	1	1	1	1
Умеренный	1,0 – 1,5	1,0 – 3,0	1,0 – 3,0	1,0 – 10,0
Высокий	1,5 – 2,0	3,0 – 6,0	3,0 – 10,0	10,0 – 100,0
Чрезвычайно высокий	> 2,0	> 6,0	> 10,0	> 100,0

Метод классификации качества вод по В.П. Емельяновой.

Весьма оригинальное предложение содержится в работах В.П. Емельяновой с соавт. [1979, 1980], которые предлагают вообще обойтись без вычисления баллов по отдельным показателям. Комплексная оценка загрязнения воды определяется как относительное число показателей, превышающих тот или иной уровень концентрации: ПДК, 10•ПДК, 30•ПДК и т. д. Предложенный способ обобщения сразу избавляет от всех проблем, связанных с определением балльных оценок. Правда, при этом не учитывается различие биологического воздействия веществ. В целом же способ очень прост и может оказаться эффективным.

Экотоксикологический критерий по Т.И. Моисеенко [1995]

Степень загрязнения токсическими веществами оценивается традиционной суммой превышений концентрации соответствующих элементов (C_i) к их предельно допустимым концентрациям (ПДК $_i$):

$$X_{токс} = \sum C_i / \text{ПДК}_i$$

Особым образом оценивается группа следующих показателей: сульфат-ионов, содержания взвешенных веществ и общей минерализации, по которым кратность превышения концентраций относится не к ПДК, а к максимальным фоновым значениям:

$$X_{\phi-x} = \sum (C_i / C_{\text{фон.макс}} - 1) .$$

Для оценки эвтрофирования вводится специальный показатель эвтрофикации

$$X_{эвт} = K \cdot (C_{\text{фос}} / C_{\text{фон.фос}} - 1) ,$$

где $C_{\text{фос}}$ и $C_{\text{фон.фос}}$ – анализируемые и фоновые значения концентраций минерального фосфора, K – дополнительный коэффициент, зависящий от оценки состояния водоема (для мезотрофных водоемов $K = 2$, а для эвтрофных $K = 3$).

Общий индекс загрязнения определяется по вполне ожидаемой формуле:

$$X_{\text{сум}} = X_{\text{токс}} + X_{\phi-x} + X_{\text{эвт}} .$$

Комплексная оценка загрязненности вод по Г.Т. Фрумину и Л.В. Баркану [1997]

Для каждого ингредиента рассчитывается частная функция желательности Харрингтона по формуле: $d_i = e^{-e^{P_i}}$. Показателем степени этой функции является безразмерная величина P_i , рассчитываемая с помощью выражения

$$P_i = b_0 + b_1 \cdot C_i / \text{ПДК}_i ,$$

где C_i и ПДК_i – наблюдаемая и предельно допустимая концентрации i -го ингредиента, b_0 и b_1 – специально рассчитанные коэффициенты, зависящие от типа ингредиента и класса качества воды (sic! – для того, чтобы рассчитать оценку класса качества нужно знать класс качества?).

Обобщенная функция Харрингтона D определяется как среднегеометрическое частных показателей желательности

$$D = (d_1 d_2 d_3 \dots d_n)^{1/n} .$$

К описанию метода прилагается традиционная табличка, разъясняющая, как следует понимать рассчитанное значение обобщенного показателя D :

<u>Класс качества воды</u>	<u>Интервал варьирования обобщенного показателя <i>D</i></u>
Очень чистая	0,99
Чистая	0,99 – 0,80
Умеренно загрязненная	0,80 – 0,63
Загрязненная	0,63 – 0,37
Грязная	0,37 – 0,20
Очень грязная	0,20 – 0,01

Согласно принципу мажоритарности средних, среднегеометрическая по численному значению меньше, чем среднеарифметическая, поэтому описанный подход дает более жесткую оценку качества воды, чем, например, традиционно используемый в системе Роскомгидромета индекс загрязненности вод ИЗВ.

Методики комбинированных оценок качества воды с использованием гидрохимических и гидробиологических показателей

Большинство методик, использующих совокупность гидрохимических и гидробиологических факторов, оперируют с термином *класс вод*, под которым понимается ранговая «оценка состояния качества вод, определяемая комплексом нормативных величин показателей, связанных с функционированием водных экосистем и требованиями водопользователей» [Жукинский с соавт., 1978]. Ранги качества в этих классификациях основываются уже не на интуитивно понятных и экспериментально доказуемых понятиях *вредности* (синонимы: *токсичности* или *опасности*), используемых в санитарно-гигиенических исследованиях, а на гораздо более расплывчатом и неоднозначно идентифицируемом понятии «чистоты – загрязненности» воды.

Ранее, в разделе 1 мы использовали термин «загрязнение» как привнесение в среду новых, *не характерных* для нее агентов физического, химического или биологического происхождения в количествах, приводящих к негативным последствиям. Если относить эти негативные последствия исключительно к человеку, как это делает санитарно-гигиеническая доктрина, то тогда понятие *загрязнение* вполне понимаемо и измеряемо. При общеэкологическом подходе мы неизбежно должны предварительно расклассифицировать все организмы (в частности, гидробионтов) на три условные группы:

- организмы, "любезные человеку", которые необходимо охранять, и по биотическому потенциалу которых мы оцениваем позитивное качество вод;
- организмы, "вредные" или мешающие человеческой деятельности, численность или биоразнообразие которых мы воспринимаем как негативный фактор качества (некоторые сами по себе являются загрязняющим фактором, например, кишечные палочки или сине-зеленые водоросли);
- "нейтральные" организмы, существование которых не является оценкой качества.

После этого классификацию водоемов с учетом "загрязнения", как негативного фактора, необходимо осуществлять, имея в виду только самого человека и объекты первой группы.

Следует отметить, что при гидробиологических исследованиях в понятие «загрязнение» по большей части вкладывается не факт наличия или превышения концентраций веществ-ксенобиотиков, а банальное соотношение двух конкурирующих абиотических факторов: "концентрация органических веществ естественного (в основном, детритного) характера" и "концентрация растворенного кислорода". Именно на этом основана классическая классификация водоемов по зонам сапробности. Количественно это может выражаться, например, в соотношении скоростей химической реакции (кМоль/час) деструкции органического вещества по двум разным механизмам: аэробному и анаэробному.

Наконец, сверхнормативное значение ряда показателей может вовсе не являться следствием антропогенного (или даже ксенобиотического) воздействия. С.М. Драчев [1964] приводит такие примеры из наблюдений 50-х годов, когда сброс сточных вод был ничтожен, но такие крупные

реки как Аму-Дарья и Сыр-Дарья содержали большое количество взвеси и сапрофитной микрофлоры, а воды р. Обь в зимний период содержали ничтожное количество кислорода.

Методика разработки обобщенных "химико-биологических" классификаций чрезвычайно проста:

- автором методики устанавливается некоторое количество градаций n качества воды от "самой чистой" до "самой грязной" (число таких градаций в среднем равно 6, поскольку меньше 4 – не солидно, а больше 7 – громоздко для восприятия);
- исходя из литературных данных, личного опыта или пристрастий автора выбирается набор из m показателей (размерность m , как правило, больше шести и может достигать внушительного списка, причем автора редко волнуют проблемы возможности измерения или расчета некоторых показателей¹⁷);
- в каждой клетке полученной таблицы $n \times m$ вписывается некоторый диапазон значений показателя, который, по мнению автора, приличествует каждой градации качества, причем, в большинстве случаев, разработчик не интересуется ни законом статистического распределения показателя, ни математической функцией, аппроксимирующей зависимость "показатель–качество", ни сезонной или региональной изменчивостью фактора.

Естественно, что легкость разработки методик порождает их многочисленность. Приведем некоторые из них, имеющие наиболее широкое распространение, либо приведенные в нормативных документах.

Система классификации качества воды по А.А. Былинкиной и С.М. Драчеву

Эта классификация явилась первой [Былинкина с соавт., 1962; Драчев, 1964] и наиболее совершенной разработкой в этом направлении, заложившей основы широко распространенной шестибальной шкалы классификации водоемов. Методика рекомендована для отраслевого использования на постах гидробиологического контроля [Руководство по методам..., 1983]. Оценка качества воды осуществляется с использованием следующих показателей:

- химические показатели состояния водоемов (табл. 3.8);
- бактериологические и гидробиологические показатели (табл. 3.9);
- показатели состояния водоемов по физическим и органолептическим свойствам (табл. 3.10).

Таблица 3.8

Химические показатели состояния водоемов

Степень загрязнения	Растворенный кислород			БПК ₅ , в мг/л	Окисляемость, в мг/л O ₂	Аммонийный азот, в мг/л	Токсичные вещества в долях ПДК	Радиоактивность общая в долях норматива
	в мг/л		% насыщения					
	Лето	Зима						
Очень чистые	9	14—13	95	0.5—1.0	1	0.05	0	0.1
Чистые	8	12—11	80	1.1—1.9	2	0.1	0.1—0.9	0.1
Умеренно загрязненные	7—6	10—9	70	2.0—2.9	3	0.2—0.3	1.0—5.9	1.0
Загрязненные	5—4	5—4	60	3.0—3.9	4	0.4—1.0	6.0—10.9	10
Грязные	3—2	5—1—0	30	4.0—10.0	5—15	1.1—3.0	11.0—20.0	100
Очень грязные	0	0	0	>10	>15	>3	>20	1000

Примечание: Окисляемость относится к рекам с цветностью воды не более 30°

Как отмечают авторы [Былинкина с соавт., 1962], «для составления карты загрязнения множественность показателей представляет затруднения, особенно в том случае, когда по значению многих показателей река может быть отнесена к различным классам. Указанное затруднение может быть обойдено путем выделения главных показателей. Важно, чтобы число этих показателей было невелико, и чтобы они были представлены в тех случаях, когда обследование проведено по схеме краткого анализа».

¹⁷ Трудно ожидать, например, массовых и корректных расчетов индекса самоочищения водоема – отношения энергий ассимиляции к тратам на обмен по биотическому балансу, который включен в систему классификации О.П. Окснюк с соавторами [1993].

Таблица 3.9

Бактериологические и гидробиологические показатели

Степень загрязнения	Бактериологические			Яйца гель- минтов , в 1 м ³	Санитарно-гидробиологические	
	Кишечная палочка (титр)	Сапрофит- ные микро- организмы, в 1 мл	Пря- мой счет		Сапробность	Биологиче- ский пока- затель за- грязнения
Очень чистые	10—100	a·10	10 ⁵	Нет	Ксеносапробная	0—5
Чистые	10—1	a·100	10 ⁶	Нет	Олигосапробная	6—10
Умеренно загрязненные	1—0.05	a·1000	10 ⁶	1—3	β-Мезосапробная	11—20
Загрязненные	0.05—0.005	a·10000	10 ⁷	10	α-Мезосапробная	21—60
Грязные	0.005— 0.001	a·100000	10 ⁷	500	Полисапробная	61—99
Очень грязные	<0.001	a·1000000	10 ⁸	1000	Полисапробная	100

Примечание: Биологический показатель загрязнения (БПЗ) или индекс Хорасавы, принятый в международном стандарте качества питьевой воды (1958 г.), представляет собой отношение количества одноклеточных организмов, не содержащих хлорофилла (*B*), к общему количеству организмов, включая содержащие хлорофилл (*A*), выраженное в % [Руководство по методам..., 1983]: $БПЗ = 100 \cdot B / (A + B)$

Таблица 3.10

Показатели состояния водоемов по физическим и органолептическим свойствам

Степень загрязнения	Взвешен- ные веще- ства мг/л	Прозрачность		Запах, в баллах	Нефть		рН
		по Секки, в м	по Снел- лену, в см		в бал- лах	в мг/л	
Очень чистые	1—3	>2	>30	1	0	0.00	6.5—8.0
Чистые	4—10	2—1	30-20	2	1	0.1-0.2	6.5—8.5
Умеренно загрязненные	11—19	1—0.3	19—3.0	3	2	0.3	6.0—9.0
Загрязненные	20—50	0.3—0.1	2.0—1.0	4	3	1	5—6, 9—10
Грязные	51—100	0.1—0.02	<1.0—0.5	5	4	2	5—6, 9—10
Очень грязные	>100	<0.02	< 0.5	5	5	5	2—4, 11—13

В качестве главных показателей рекомендуется взять пять следующих: титр кишечной палочки, запах, БПК₅, азот аммонийный и внешний вид водоема у места взятия проб (по степени загрязнения нефтью). Весьма важным показателем санитарного состояния водоемов является также содержание токсических веществ, в том числе, радиоактивных. «В качестве показателя степени загрязнения водоемов по содержанию токсических веществ можно принять отношение количества токсических веществ, найденных аналитически, к допустимым концентрациям, согласно существующим нормативам. В отношении содержания радиоактивных веществ показателем может быть взята суммарная β-активность, поскольку в отношении данного определения имеется наибольшее количество аналитических материалов» [Драчев, 1964].

Каждому из показателей, перечисленных в таблицах, авторами придается приоритет – цифровое значение, соответствующее важности и значимости данного фактора. Если по различным показателям классификация водоема выполняется неоднозначно, то необходимо рассчитать общий показатель загрязнения путем усреднения числовых значений условных приоритетов. Коэффициенты для подсчета общего показателя и группировка водоемов по сумме признаков приведены в табл. 3.11.

Система коэффициентов для выведения общего значения показателя

Наименование показателя	Степень загрязнения					
	Очень чистые	Чистые	Умеренно загрязненные	Загрязненные	Грязные	Очень грязные
Азот аммонийный	0	1	3	6	12	15
БПК ₅ и токсические вещества	0	1	5	8	12	15
Радиоактивность общая	0	1	3	5	15	25
Титр кишечной палочки	0	2	4	10	15	30
Запах	0	1	2	8	10	20
Внешний вид	0	1	2	6	8	10
Средне-суммарный коэффициент загрязнения	0—1	2	3—4	5—7	8—10	>10

Оценка состояния и правила таксации рыбохозяйственных водных объектов [ГОСТ 17.1.2.04–77]

Это единственный документ, на уровне стандарта определяющий систему подробной оценки водных объектов по следующим показателям:

- качество воды и донных отложений;
- гидрологический режим;
- флора и фауна, с выделением групп промысловых организмов.

Качество воды в соответствии с ГОСТ характеризуется следующими показателями:

- соленостью, жесткостью и водородным показателем (рН);
- трофо-сапробностью;
- содержанием вредных веществ.

Документ достаточно подробно регламентирует классификацию по ионно-солевому составу (зоны галобности), жесткости и водородному показателю.

Что понимается под "трофо-сапробностью", ГОСТ так и не разъясняет, однако приводит таблицу оценки качества воды по *трофо-сапробным показателям*, которые на деле оказываются обычными гидрохимическими показателями (см. табл. 3.12). В качестве дополнительных показателей для оценки классов сапробности рекомендовано употреблять также показатели бактериофлоры водных объектов.

Стандартом рекомендовано оценивать «соответствие содержания в воде органических веществ сапробного загрязнения и природных органических веществ» по индексу, вычисляемому как долю биологически окисляемого вещества (по БПК₅) к общей концентрации органических веществ (по перманганатной окисляемости) – табл. 3.13. Это дает основания предположить, что в ГОСТе под *сапробным* понимается "нежесткое" (т.е. биологически расщепляемое) органическое загрязнение антропогенного происхождения.

Согласно ГОСТ «*влияние трофо-сапробности на флору и фауну следует оценивать по отношению групп организмов к сапробности водной среды*», для чего дается справочная таблица, в которой каждой группе водных организмов (от простейших до ихтиофауны) поставлены в соответствие классы сапробности, в которых преобладают эти таксономические группы. Фрагмент справочника, относящийся к некоторым группам бентосных и планктонных организмов, приведен нами в табл. 3.14.

Таблица 3.12

Классификация водоемов по ГОСТ 17.1.2.04–77

Наименование показателей	Чистые воды		Загрязненные воды		Грязные воды	
	Классы сапробности					
	Ксеносапробность (кс)	Олигосапробность (о)	β -мезосапробность (бм)	α -мезосапробность (ам)	Полисапробность (п)	Гиперсапробность (гп)
Трофо-сапробные показатели						
Растворенный кислород, % насыщения	95 - 100	80 - 110	60 - 125	30 - 150	0 - 200	0
Прозрачность воды по диску Секки, м, не менее	3.0	2.0	1.0	0.5	0.1	Менее 0.1
БПК ₅ , мгО ₂ /л	0.0 – 0.5	0.6 – 1.0	1.1 – 2.0	2.1 – 3.0	3.1 – 10.0	Более 10
БПК ₂₀ , мгО ₂ /л	0.0 – 1.0	1.1 – 2.0	2.1 – 3.0	3.1 – 4.0	4.1 – 15.0	Более 15
Перманганатная окисляемость по Кубелю, мгО ₂ /л	0.0 – 7.0	7.1 – 10.0	10.1 – 20.0	20.1 – 40.0	40.1 – 80.0	Более 80
Аммоний солевой, мг/л	0.0 – 0.05	0.06 – 0.1	0.11 – 0.5	0.51 – 1.0	1.01 – 3.0	Более 3
Нитраты, мг/л	0.05 – 5.0	5.1 – 10.0	10.1 – 40.0	40.1 – 80.0	80.1 – 150.0	Более 150
Нитриты, мг/л	0.0 – 0.001	0.002 – 0.04	0.05 – 0.08	0.09 – 1.5	1.6 – 3.0	Более 3
Фосфаты, мг/л	До 0.005	0.006 – 0.03	0.04 – 0.1	0.11 – 0.3	0.31 – 0.6	Более 0.6
Сероводород, мг/л	0.0	0.0	0.0	0.0	До 0.1	Более 0.1
Показатели бактериофлоры						
Общий счет микроорганизмов, млн. кл/мл	До 0.5	0.5 – 1.0	1.1 – 3.0	3.1 – 5.0	5.1 – 10.0	Более 10
Сапрофиты, тыс. кл/мл	До 0.5	0.5 – 5.0	5.1 – 10.0	10.1 – 50.0	50.1 – 100.0	Более 100
Индекс: (Общий счет / сапрофиты)	Более 10 ³	Более 10 ³	10 ³ – 10 ²	Менее 10 ²	Менее 10 ²	Менее 10 ²

Таблица 3.13

Сравнительная характеристика органических веществ сапробного загрязнения по отношению БПК₅ к перманганатной окисляемости

Загрязняющее органическое вещество	БПК ₅ /перманганатная окисляемость (%)
Природное	До 10
Слабое сапробное загрязнение	11 – 20
Сильное сапробное загрязнение	21 – 40
Неочищенные сточные воды	Более 41

Таблица 3.14

**Отношение групп организмов к сапробности водной среды по
ГОСТ 17.1.2.04–77**

Таксономическая группа	Классы сапробности, в которых преобладают таксономические группы	
	значительное число видов	Незначительное число видов
Инфузории		
- ресничные	ам – п	о, бм
- сосущие	о – ам	о, п
Губки	Бм	
Кишечнополостные (гидра, кордиллофора)	Бм	
Черви:		
- ресничные	Кс	бм
- олигохеты	кс – бм	
исключение:		
- тубифициды и люмбрициды	ам – п	
- пиявки	бм – ам	
- нематоды	ам – п (при массовом развитии)	бм
Коловратки <i>Bdelloidea</i>	ам – п	
Мшанки	о – бм	
Моллюски:		
- брюхоногие	о – бм	кс, ам
- двустворчатые	о – бм	ам
Ракообразные копеподы:		
- каланоиды	о – бм	кс
- циклопиды	бм – ам	о, кс
- ветвистоусые	о – бм	кс, ам
- равноногие (водяной ослик)	ам	бм
- бокоплав	кс – о	бм
- речные раки	о	
- водяные клещи	бм – ам	кс, о
Насекомые:		
- поденки	кс, о, бм	
- ручейники	кс, о, бм	
двукрылые		
- хирономиды	о, бм	кс, ам
- род хирономус	ам	бм, п

Примечание: в таблице использовались следующие обозначения классов качества вод – ксеносапробный (кс), олигосапробный (о), β–мезосапробный (бм), α–мезосапробный (ам), полисапробный (п), гиперсапробный (гп)

ГОСТ вводит также такое понятие как «токсобность» и предписывает «*влияние токсичных веществ на флору и фауну оценивать по наличию в водном объекте видов различной токсобности*». Фрагмент справочника, относящийся к зоопланктону и зообентосу, приведен в табл. 3.15.

Согласно приведенной таблице, воды относятся к тому классу токсобности, если не нарушаются воспроизводство, продуктивность и качество таксономических групп, которые являются индикаторами оцениваемого класса токсобности, а также всех групп, расположенных в столбцах справа.

Все показатели, перечисленные в ГОСТе, делятся на две группы: обязательные и дополнительные. Однако, по какому механизму проводить совокупную обработку показателей, документ не определяет: «*при оценке загрязненности водоема учитывают данные по флоре и фауне и наилучшие значения химических показателей*».

Таблица 3.15

Распределение организмов по токсобности (ГОСТ 17.1.2.04–77)

Экологическая	Таксономическая	Олиготоксобы	β -мезотоксобы	α -мезотоксобы	Политоксобы
Зоопланктон	Остракоды		Все виды	Все виды	
	Водные клещи			Все виды	Все виды
	Кладоцера	Дафниды, сидиды, хищные, кладоцера	Хидориды, босминида		
	Веслоногие		Каланоиды	Циклопоиды	
	Коловратки		Все, кроме α -мезотоксобо- в	Бделлаиды	
	Инфузории			Подвижные формы	Подвижные формы
	Бесцветные жгутиковые			Все виды	Все виды
Зообентос	Ракообразные	Гаммариды, мизиды, корофииды, речной рак	Изопода		
	Харпактициды		Все виды	Все виды	
	Моллюски		Двустворчатые	Брюхоногие	
	Водные насекомые	Поденки	Поденки, стрекозы, ручейники	Хирономиды, жуки, клопы, мокрецы, кулициды	
	Черви		Олигохеты	Олигохеты, кроме политоксобо- в, пиявки, планарии	Тубифициды, люмбрициды, нематоды

Комплексная экологическая классификация качества поверхностных вод суши

Одной из первых попыток создания глобальных классификаций, построенных по экосистемному принципу, когда в классификационный рубрикатор включаются как гидрофизические и гидрохимические показатели (абиотическая составляющая), так и характеристики гидробионтов (биологическая составляющая экосистем), стала разработка Института гидробиологии АН УССР [Жукинский с соавт., 1978, 1981; Оксийок с соавт., 1993]. Как отмечают разработчики, «чтобы проследить и уяснить сущность и степень происходящих экологических изменений водных экосистем, необходимо иметь единую достаточно репрезентативную классификацию качества воды, охватывающую большинство компонентов водной экосистемы».

Схема общей иерархии показателей (строк) и градаций (столбцов) разработанной системы классификации представлена в таблице 3.16. В сущности, авторы предложили не единую классификацию, а три самостоятельных классификации: единую пятиклассно–девятиразрядную классификацию **С** для трех групп "экологических" показателей и две классификации **А** и **В** по минеральному составу воды, не совместимые ни с первой, ни друг с другом.

Классификационная система в полном объеме с диапазонами значений показателей представлена в "коллекции" таблиц 3.17.

Классификация вод по солевому составу, как указано разработчиками, соответствует так называемой "Венецианской системе" [Алекин, 1970], а классификация по ионному составу дана по системе О.А. Алекина [1946]. Создается впечатление, что перечисленные классификации добавлены к основной исключительно для общей убедительности и выглядят несколько чужеродными.

Схема комплексной экологической классификации
по О.П. Оксюк и В.Н. Жукинскому

Показатели		Градации качества		Тип
Группа	Подгруппа	Класс	Разряд	
Солевой состав	Степень минерализации (солесность)	Пресные	гипогалинные	А
			олигалинные	
		Солоноватые	мезогалинные	
		полигалинные		
		Солёные	эугалинные	
			ультрагалинные	
	Ионный состав по О.А. Алекину [1946]: Ca ²⁺ , Mg ²⁺ , Na ⁺	Гидрокарбонатные		В
		Сульфатные		
		Хлоридные		
Эколого-санитарная (трофосапробиологическая)	Гидрофизические		Предельно чистая	Предельно чистая
	Биотрофные и гидрохимические			
	Гидробиологические		Чистая	Очень чистая
	Бактериологические			Вполне чистая
	Биоиндикация сапробности		Удовлетворительной чистоты	Достаточно чистая
	Трофность			Слабо загрязненная
Экологотоксикологическая	Содержание токсичных веществ	неорганические	Загрязненная	Умеренно загрязненная
		органические		Сильно загрязненная
	Токсичность по биотестам			Грязная
Вездесущие радионуклиды		Предельно грязная		
Коррозионные радионуклиды				
Осколки деления				

Основная классификация качества воды по остальным трем группам показателей основана на девяти разрядах, которые агрегируются в пять классов, что, как уверяют разработчики, "более привычно и близко к европейским стандартам" [Унифицированные методы..., 1977].

Введение столь запутанной эколого-санитарной классификации качества вод из двух параллельных систем градаций (из пяти классов и из девяти разрядов) разработчики обосновывают тем, что в условиях огромного многообразия вод оценки по пяти- и шестиразрядным системам недостаточны для детальной характеристики и назрела потребность в дробном подразделении вод по более узким градациям качества (см. ниже *наши комментарии*).

Чтобы окончательно утвердить "привычный" нам параллелизм, разработчики приводят в своих классификационных таблицах еще три дополнительных системы градаций качества вод:

- для группы показателей "Содержание токсических веществ" – "Уровни (классы) токсического загрязнения воды – УТЗ" с 6 градациями от I до VI;
- для радиозекологических показателей – "Уровни (классы) радиоактивного загрязнения воды – УРЗ" с теми же градациями;
- для биотестирования на дафниях – "Уровни (классы) токсичности воды" с двумя классами и 5 разрядами (см. табл. 3.17).

Таблица 3.17

Комплексная экологическая классификация качества поверхностных вод суши

А. По степени минерализации

Показатели	Пресные воды				Солоноватые воды				Соленые воды	
	гипогалинные (гг)		олигогалинные (ог)		мезогалинные (мг)		полигалинные (пг)	Эугалинные (эг)	ультрагалинные (у)	
	<i>β</i>	<i>α</i>	<i>β</i>	<i>α</i>	<i>β</i>	<i>α</i>				
Соленость, г/л (%)	< 0,10	0,10-0,50	0,51-0,75	0,76-1,00	1,01-5,00	5,01-18,00	18,01-30,00	30,01-40,00	> 40,00	

В. По ионному составу

Классы	Гидрокарбонатные (С)			Сульфатные (S)				Хлоридные (Cl)								
	Ca	Mg	Na	Ca	Mg	Na	Ca	Mg	Na							
Группы	I	II	III	I	II	III	II	III	IV	II	III	IV	I	II	III	
Типы	I	II	III	I	II	III	II	III	IV	I	II	III	IV	I	II	III

С-1. По эколого-санитарным (трофо-сапробиологическим) показателям

Показатели	Классы качества воды									
	1 — предельно чистая	2 — чистая			3 — удовлетворительной чистоты			4 — загрязненная		5 — грязная
	Разряды качества вод									
	предельно чистая	очень чистая	вполне чистая	достаточно чистая	слабо загрязненная	умеренно загрязненная	сильно загрязненная	весьма грязная	предельно грязная	
	1	2а	2б	3а	3б	4а	4б	5а	5б	
Гидрофизические										
Взвешенные вещества, мг/л	< 5	5-9	10-14	15-20	21-30	31-50	51-100	101-300	>300	
Прозрачность, м	> 3,00	0,75-3,00	0,55-0,70	0,45-0,50	0,35-0,40	0,25-0,30	0,15-0,20	0,05-0,10	<0,05	
Цветность по Pt-Co	< 10	10-20	21-30	31-40	41-50	51-60	61-80	81-100	>100	
Трофические / Гидрохимические										
PH	7,0	6,5-6,9	6,1-6,4	5,9-6,0	5,7-5,8	5,5-5,6	5,3-5,4	4,0-5,2	<4,0	
		7,1-7,5	7,6-7,9	8,0-8,1	8,2-8,3	8,4-8,5	8,6-8,7	8,8-9,5	>9,5	
NH ₄ ⁺ , мгN/л	< 0,05	0,05-0,10	0,11-0,20	0,21-0,30	0,31-0,50	0,51-1,00	1,01-2,50	2,51-5,00	>5,00	
NO ₂ ⁻ , мг N/л	0	0,001-0,002	0,003-0,005	0,006-0,010	0,011-0,020	0,021-0,050	0,051-0,100	0,101-0,300	> 0,300	
NO ₃ ⁻ , мг N/л	<0,05	0,05-0,20	0,21-0,30	0,31-0,50	0,51-0,70	0,71-1,00	1,01-2,50	2,51-4,00	>4,00	
N _{общ} , мг N/л	<0,30	0,30-0,50	0,51-0,70	0,71-1,00	1,01-1,50	1,51-2,00	2,01-5,00	5,01-10,00	> 10,00	
PO ₄ ³⁻ , мг P/л	< 0,005	0,005-0,015	0,016-0,030	0,031-0,050	0,051-0,100	0,101-0,200	0,201-0,300	0,301-0,600	>0,600	
P _{общ} , мг P/л	< 0,010	0,010-0,030	0,031-0,050	0,051-0,100	0,101-0,200	0,201-0,300	0,301-0,500	0,501-1,00	> 1 00	
O ₂ , % насыщения	100	96-99	91-95	81-90	71-80	61-70	41-60	20-40	< 20	
		101-105	106-110	111-120	121-130	131-140	141-150	151-160	> 160	

Продолжение таблицы 3.17.

0	1	2а	2б	3а	3б	4а	4б	5а	5б
Перманганатная окисляемость, мг О/л	< 2,0	2,1-4,0	4,1-6,0	6,1-8,0	8,1-10,0	10,1-15,0	15,1-20,0	20,1-25,0	>25,0
Бихроматная окисляемость, мг О/л	<8	8-12	13-18	19-25	26-30	31-40	41-60	61-80	>80
БПК ₅ , мгО/л	<0,4	0,4-0,7	0,8-1,2	1,3-1,6	1,7-2,1	2,2-4,0	4,1-7,0	7,1-10,0	> 10,0
Гидробиологические									
Биомасса фитопланктона, мг/л	<0,1	0,1-0,5	0,6-1,0	1,1-2,0	2,1-5,0	5,1-10,0	10,1-50,0	50,1-100,0	> 100,0
Хлорофилл <i>a</i> , мкг/л	<5	5-10	11-15	16-20	21-40	41-75	76-150	151-250	>250
Первичная продукция фитопланктона, г О/м ² сут	<0,5	0,5-0,9	1,0-1,5	1,6-2,0	2,1-5,0	5,1-7,5	7,6-10,0	10,1-12,0	> 12,0
Индекс самоочищения-самозагрязнения, (A/R)	1,0	1,0	0,9 1,1	0,8 1,2	0,7 1,3-1,5	0,6 1,6-2,0	0,5 2,1-2,2	0,2-0,4 2,6-5,0	<0,2 >5,0
Бактериологические									
Численность бактериопланктона, млн.кл/мл	<0,3	0,3-0,5	0,6-1,5	1,6-2,5	2,6-5,0	5,1-7,0	7,1-10,0	10,1-20,0	>20,0
Численность сапрофитных бактерий, тыс.кл/мл	<0,1	0,1-0,5	0,6-1,0	1,1-3,0	3,1-5,0	5,1-7,0	7,1-10,0	10,1-100,0	> 100,0
Численность бактерий группы кишечной палочки, тыс. кл/л	< 0,003	0,003-0,5	0,6-2,0	2,1-6,0	6,1-10,0	11,0-50,0	51,0-100,0	101,0-1000,0	> 1000,0
Биоиндикация сапробности									
Индекс сапробности	<0,5	0,5-1,0	1,1-1,5	1,6-2,0	2,1-2,5	2,6-3,0	3,1-3,5	3,6-4,0	> 4,0
Зоны сапробности	Ксеносапробная	Олигосапробная		β–Мезосапробная		α–Мезосапробная		Полисапробная	
Разряды сапробности	Ксеносапробная	β–Олигосапробная	α–Олигосапробная	β–Мезосапробная	β–Мезосапробная	α–Мезосапробная	α–Мезосапробная	β–Полисапробная	α–Полисапробная
Категории трофности	Олиготрофная		Мезотрофная		Евтрофная		Политрофная	Гипертрофная	
Разряды трофности	Олиготрофная	Олиго-мезотрофная	Мезотрофная	Мезо-евтрофная	Евтрофная	Ев-политрофная	Политрофная	Поли-гипертрофная	Гипертрофная

С-2. По эколого-токсикологическим показателям

С-2.1. По содержанию токсических веществ, кг/л

Токсические вещества	Уровни (классы) токсического загрязнения воды (УТЗ)					
	I — незагрязненная	II — слабо загрязненная	III — умеренно загрязненная	IV — сильно загрязненная	V — весьма загрязненная	VI — предельно грязная
	Классы качества воды					
	3 — удовлетворительной чистоты			4 — загрязненная		5 — грязная
	Разряды качества воды					
	достаточно чистая	слабо загрязненная	умеренно загрязненная	сильно загрязненная	весьма грязная	предельно грязная
3а	3б	4а	4б	5а	5б	
Неорганические						
Ртуть	< 0,1	0,1-0,5	0,6-1,0	1,1-2,5	2,6-5,0	>5,0
Кадмий	< 0,1	0,1-0,5	0,6-1,0	1,1-2,5	2,6-5,0	>5,0
Медь	< 1	1-5	6-10	11-25	26-50	>50
Цинк	< 5	5-10	11-30	31-75	76-150	>150
Свинец	< 2	2-5	6-10	11-25	26-50	>50
Хром (общ.)	< 2	2-5	6-10	11-25	26-50	>50
Никель	< 2	2-10	11-20	21-50	51-100	>100
Мышьяк	< 0,5	0,5-1,0	1,1-2,0	2,1-5,0	5,1-10,0	> 10,0
Сурьма	< 0,1	0,1-0,5	0,6-1,0	1,1-2,5	2,6-5,0	>5,0
Железо	< 50	50-500	501-1000	1001-2500	2501-5000	>5000
Марганец	< 50	50-250	251-500	501-1250	1251-2500	>2500
Кобальт	< 1	1-5	6-10	11-25	26-50	>50
Фториды	< 100	100-200	201-500	501-1000	1001-3000	>3000
Цианиды	0	0	< 10	10-25	26-50	>50
Органические						
Нефть и нефтепродукты	0	<5	5-50	51-100	101 - 500	> 500
Фенолы (летучие)	0	следы	< 1	1-10	11-50	>50
СПАВ	0	<50	50-100	101-250	251-500	>500
Хлорорганические пестициды	0	0	0	0	<0,001	>0,01
Фосфорорганические пестициды	0	0	< 3	3-10	11-20	>20

С-2.2. По уровню токсичности (на основании результатов биотестирования на дафниях, цериодафниях)

Критерии токсичности	Уровни (классы) токсичности воды									
	Зона нетоксичных и слаботоксичных вод (природные воды)					Зона токсичных вод (сточные и приравняемые к ним воды)				
	1 - нетоксичная			II – Слаботоксичная (хронотоксичная)		III - остротоксичная	IV – высоко-токсичная	V – чрезвычайно токсичная		
	Классы качества воды									
	1 — предельно чистая	2 — чистая		3 — удовлетворительной чистоты		4 — загрязненная		5 — грязная		
	Разряды качества вод									
	предельно чистая	очень чистая	вполне чистая	достаточно чистая	слабо загрязненная	умеренно загрязненная	сильно загрязненная	весьма грязная	предельно грязная	
	1	2а	2б	3а	3б	4а	4б	5а	5б	
Острый токсический эффект (смертность)	Отсутствие			Смертность менее 10 % в 48-часовом опыте		Отсутствие. Смертность менее 10 % в 48-часовом опыте		Смертность 50 % и более в 48-часовом опыте	Смертность 50 % и более в 24-часовом опыте	Смертность 100 % в течении менее 1 ч.
Поведенческие реакции	Не нарушены					Нарушены: иммобилизация, изменение характера движения, вращение вокруг своей оси		Реакции, предшествующие гибели (абортирование яиц, судорожные движения, вращение вокруг своей оси, иммобилизация)		
Хронический токсический эффект	Отсутствие в 30-суточном опыте (в отстоянной или отфильтрованной воде)					Выражен отчетливо				

С-3. По радиоэкологическим показателям (по содержанию радионуклидов — Ки/л * 10¹⁰)

Радионуклиды	Уровни (классы) радиоактивного загрязнения воды)					
	I — незагрязненная	II — слабо загрязненная	III — умеренно загрязненная	IV — сильно загрязненная	V — весьма загрязненная	VI — предельно грязная
	Классы качества воды					
	3 — удовлетворительной чистоты		4 — загрязненная		5 — грязная	
	Разряды качества воды					
достаточно чистая	слабо загрязненная	умеренно загрязненная	сильно загрязненная	весьма грязная	предельно грязная	
3а	3б	4а	4б	5а	5б	
Вездесущие						
⁹⁰ Sr	< 0,0062	0,0062 – 0,03	0,031 - 0,4	0,41-0,89	0,9-4,0	>4,0
¹³⁷ Cs	< 0,0012	0,0012 – 0,05	0,051-1,5	1,6-15,0	16,0-150,0	>150,0
Коррозионные						
⁵¹ Cr	0	< 4,0	4,0- 1500	1600 - 3300	3400 - 15000	> 15000
⁵⁴ Mn	0	<4,0	4,0- 120	130 - 270	380 - 1200	> 1200
⁵⁵ Fe	0	<5,0	5,0- 160	170 - 290	300 - 1000	> 1000
⁵⁹ Fe	0	< 0,3	0,3- 11,0	12,0 – 71,0	72 - 530	> 530
⁵⁸ Co	0	<30,0	30,0- 900			> 900
⁶⁰ Co	0	< 0,1	0,1- 3,5	3,6 – 43,0	44 - 350	> 350
⁶⁵ Zn	0	< 0,3	0,3- 10,0	11,0 - 120	130 - 1000	> 1000
Осколки деления						
⁸⁹ Sr	0	<1,0	1,0- 12,0	13,0 – 27,0	27 - 120	> 120
⁹⁵ Zn	0	<2,0	2,0- 62,0	63,0 - 140	150 - 620	> 620
⁹⁵ Nb	0	<3,0	3,0- 96,0	97,0 - 210	220 - 960	> 960
¹⁰³ Ru	0	<30,0	30- 800			> 800
¹⁰⁶ Ru	0	<4,0	40,0- 12,0			> 120
¹²⁵ Sb	0	<3,0	3,0- 30,0	31,0 – 58,0	58,0 - 220	> 220
¹³¹ I	0	<0,7	0,7- 10,0			> 10
¹³⁴ Cs	0	<0,03	0,03- 1,7			> 1,7
¹⁴¹ Ce	0	<3,0	3,0- 88,0	88,0 - 200	210 - 880	> 890
¹⁴⁴ Ce	0	<4,0	4,0- 120,0			> 120

Наши комментарии

- Тезис В.Н Жукинского и О.П. Оксьюк о необходимости точных оценок качества вод решается, на наш взгляд, вполне банально – переходом от системы целочисленных градаций к непрерывной шкале качества с дробными значениями любой точности. При этом совершенно неважно, будет ли эта шкала 9-разрядной, 5-разрядной или от 0 до 1 (перешли же в фигурном катании и Клубе Веселых и Находчивых с появлением на сцене компьютера к дробным оценкам типа 4,56 и никто не считал это неудобным).
- Переход к непрерывным шкалам сделает ненужным громоздкую запись классификации показателей в виде последовательности диапазонов вроде {цинк: <5 ; 5-10; 11-30}. Например, ни нам, ни "нашему компьютеру" до сих пор не ясно, что в приведенном случае делать, если концентрация цинка составит 10,5 мкг/л ?
- Нам представляется удобнее, точнее и компактнее выразить зависимость категории качества вод от величины каждого показателя в виде уравнения регрессии. Приведем ниже некоторые примеры такого представления. Поскольку имеющиеся данные из таблиц 3.17 имеют преимущественно нелинейный характер (см. рис. 3.1), мы не ставили своей целью выбор наилучших аппроксимирующих кривых (это представляет собой отдельную математическую проблему и должно основываться на более репрезентативных выборках).

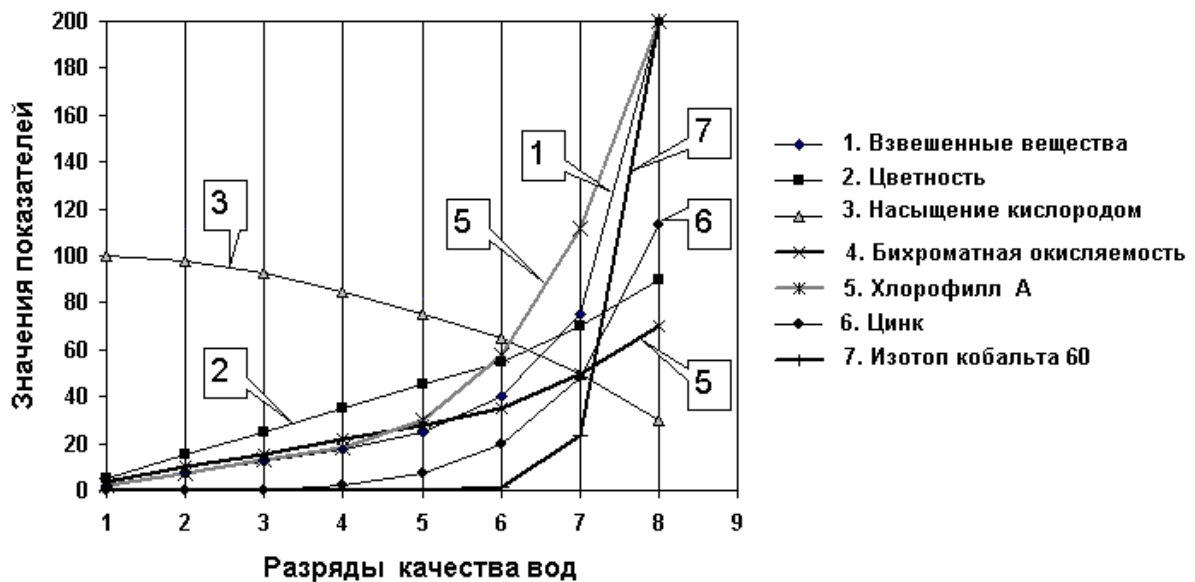


Рис 3.1. Зависимость значений некоторых показателей от разряда качества вод

По предварительным расчетам можно предложить следующие уравнения зависимостей оценки качества вод (y) в диапазоне от 0 до 9 от величины отдельных показателей (x):

- в классе линейных зависимостей – для цветности по шкале Pt-Co $y = 0.0851x + 0.884$ ($R^2 = 0.983$);
- в классе полиномиальных зависимостей – для насыщения кислородом (%) $y = -0.0011x^2 + 0.0572x + 7.2$ ($R^2 = 0.989$);
- в классе логарифмических зависимостей – для содержания взвешенных веществ (мг/л) $y = 1.77\ln(x) - 0.995$ ($R^2 = 0.970$);
хлорофилла "а" (мкг/л) $y = 1.685 \ln(x) - 0.947$ ($R^2 = 0.987$);
цинка (мкг/л) $y = 1.052\ln(x) + 2.95$ ($R^2 = 0.997$).

Качество аппроксимации можно оценить по значению коэффициента детерминации R^2 , показывающему, какая часть вариации y связана с вариацией факторного показателя x . Если подставим, например, в последнее уравнение значение концентрации цинка 10.5 мкг/л, то получим значение разряда качества вод 5.42, что находится как раз посередине между "центрами тяжести" разрядов 5 (3б) и 6 (4а) и весьма точно совпадает с диапазонами, декларируемыми О.П. Оксьюк с соавт.

Остановимся кратко на аргументации разработчиков относительно включаемых гидробиологических показателей, наиболее интересных нам по тематике:

Биомасса фитопланктона. Структурный гидробиологический показатель; при величинах $5,0 \text{ г/м}^3$ фитопланктон способствует самоочищению вод; более высокие значения характерны для массового развития фитопланктона ("цветения" воды), последствиями которого является ухудшение санитарно-биологического состояния и качества вод.

Фитомасса нитчатых водорослей. Дает представление о реальной и потенциальной возможности ухудшения качества вод, так как разложение фитомассы нитчатых водорослей является причиной загрязнения вод органическими веществами, повышения численности бактерий [Оксиюк с соавт., 1978]. Оценивается по величинам для всей площади, на которой развиваются эти водоросли.

Валовая продукция фитопланктона. Функциональный гидробиологический показатель, характеризующий интенсивность новообразования органического вещества за счет фотосинтетической активности водорослей в освещенной толще воды. Выражается величиной молекулярного кислорода, выделяющегося за сутки при образовании суммарного количества органического вещества в столбе воды под 1 м^2 . Валовая продукция фитопланктона позволяет сравнивать уровень трофности однотипных водоемов и водотоков и оценивать их потенциальную способность к самозагрязнению путем автохтонного образования органического вещества на основе использования запаса биогенных элементов. Низкие величины первичной валовой продукции характеризуют малопродуктивные олиготрофные водоемы, как правило, с хорошим качеством воды, а высокие величины – высокопродуктивные, эвтрофные и политрофные водоемы с высоким уровнем биологического самозагрязнения в результате "цветения" воды [Винберг, 1960].

Индекс самоочищения - самозагрязнения (A/R). Отношение валовой продукции к суммарной деструкции планктона за сутки является функциональным гидробиологическим показателем. Низкие значения индекса (менее 1) свидетельствуют о превышении потребления кислорода над его продуцированием, в результате чего создается неблагоприятный для переработки загрязнений кислородный режим. Значения выше 1 характеризуют интенсивно идущие процессы окисления органического вещества. Вместе с тем при регулярном превышении продукции над деструкцией ($A/R > 1$) происходит биологическое загрязнение за счет первично продуцированного остаточного органического вещества.

Остановимся теперь на самом важном аспекте методики – проблеме получения обобщенного результата. Однако предоставим слово О.П. Оксиюк с соавт. [1993]. «Величины разрядов и классов качества вод по разным показателям не сопряжены между собой, а в некоторых случаях и не могут быть сопряжены, постольку эмпирические значения величин показателей качества вод могут распределяться в различных разрядах и классах их чистоты (загрязненности). Наиболее сложный случай, если эмпирические данные распределяются не в разрядах одного класса или соседних разрядах двух разных классов, а в отдельных 3–5 разрядах разных 2–3 классов, т. е. разброс данных отражает некоторую эврисапробность или эвритрофность соответствующих показателей качества вод. В таком случае качество вод относится к широкому диапазону градаций с подчеркиванием доминирующих. Например, вода разрядов 2б–4а от вполне чистой до весьма грязной, преимущественно загрязненная, α -мезосапробной зоны» (выделено нами). После всех этих обобщений разработчиков остаются открытыми следующие вопросы:

- можно ли обсуждаемую методику в полной мере назвать "комплексной", если она дает частные оценки по каждому из 66 индивидуальных показателей, без какой-либо попытки их обобщить?
- поскольку является возможным случаем, когда эмпирические показатели могут с равной вероятностью разложиться по всем 9 разрядам, будет ли иметь практический смысл полученная оценка, и какую градацию следует считать здесь доминирующей?
- т.к. *эврисапробность* – способность гидробионтов ассимилировать органическое вещество в средах с различной его концентрацией, а *эвритрофность* – способность потреблять органическое вещество разного происхождения, то какое отношение к этим терминам имеет разброс показателей типа мышьяка, ^{90}Sr или даже кишечной палочки?

Наконец, таблицы 3.17 не свободны от чисто механических ошибок, например:

- в разделе С-2.2 по показателю "Острый токсический эффект" для градаций 3б-4а вместо "Отсутствие Смертность менее 10% в 48-часовом опыте" должна стоять, видимо, "Смертность более 10% в 48-часовом опыте";

- между градациями показателей в соседних рядах есть необъяснимые пропуски (см. строки с ^{54}Mn и ^{106}Ru раздела С-3);
- там же – изотопа ^{95}Zn в природе не существует.

Классификация экосистем по уровням токсической загрязненности (УТЗ)

Л.П. Брагинский [1975, 1985] справедливо полагает, что для обоснования полноценного эколого-токсикологического мониторинга речь должна идти не о качестве воды, только как *водной массы*, а об оценке *уровня токсической загрязненности (УТЗ)* всей водной экосистемы в целом, с учетом ее подразделения на три взаимосвязанных подсистемы: водной массы, донных отложений и гидробионтов. Общий уровень загрязненности водоема определяется тремя взаимно обусловленными процессами:

- масштабами и составом поступающих в него загрязнений;
- взаимодействием воды и донных отложений;
- миграцией и трансформацией токсикантов в сообществах водоема, включая процессы самоочищения и накопления в гидробионтах.

Донные отложения и гидробионты как концентраторы стойких токсикантов до сих пор недостаточно учитываются ни в правилах регламентации загрязнений, ни при экологическом мониторинге водных объектов. В то же время исследовательские материалы убедительно указывают на то, что градиент концентраций тяжелых металлов, нефтепродуктов, хлорорганических пестицидов между водными массами и донными отложениями может составлять 1:100 – 1:1000 и более, что обусловлено как седиментацией взвесей, на которых концентрируются токсические компоненты, так и прямой сорбцией этих компонентов из водных масс иловыми отложениями. Некоторые весьма распространенные токсиканты (в частности, хлорорганические пестициды), накапливаются и перераспределяются в трофических цепях, причем в высших звеньях (хищные рыбы, рыбаодные птицы) их концентрации могут превышать исходные значения в водной массе на пять-шесть порядков или, иначе говоря, *коэффициенты накопления (КН)* могут выражаться величинами порядка 10^4 - 10^6 [Брагинский с соавт., 1979]. Возникает парадоксальная ситуация: при "чистой" по всем показателям воде, уровень токсической загрязненности всей экосистемы может быть достаточно высоким, что определяет реальную опасность вредных последствий в ходе народно-хозяйственного использования водоема [Бейм с соавт., 1984].

Таким образом, систему УТЗ Л.П. Брагинский рассматривает как совокупность количественных показателей, характеризующих степень загрязненности воды, донных отложений и гидробионтов данного водоема токсическими веществами. В соответствии с традиционными принципами гидробиологической классификации им вычленяются следующие уровни токсической загрязненности водных экосистем: олиготоксичные, α - и β -мезотоксичные и политоксичные водоемы. Предлагаемые количественные характеристики каждого уровня токсического загрязнения (класса) представлены в табл. 3.18.

Основой для формирования классификационных диапазонов явились:

- для водного субстрата – рыбохозяйственные ПДК, опирающиеся на результаты токсикологических исследований гидробионтов;
- для донных отложений – фактически обнаруживаемые величины концентраций тех или иных токсикантов, известные из литературных источников или собственных исследований (т.е. без какой-нибудь реальной оценки вредного действия этого фактора);
- для депонирующих органов гидробионтов – отношение концентрации в субстрате к концентрации в воде (что само по себе, на наш взгляд, ошибочно с методологической точки зрения, поскольку такие отношения без абсолютных значений концентраций мало о чем говорят).

Для совокупности токсикантов в воде, к которым отнесены все тяжелые металлы, кроме меди, предлагается формула суммации концентраций, нормированных на ПДК. Полученный обобщенный показатель назван *критерием ЛПВ* (по всей вероятности, имелся в виду лимитирующий показатель вредности):

$$\text{ЛПВ} = \sum_i \frac{C_i}{\text{ПДК}_i}$$

Таблица 3.18

Основные показатели уровня токсической загрязненности водных экосистем

Ингредиенты токсичности	Субстрат или показатель	Единицы измерения	Олиготоксичность	Мезотоксичность		Политоксичность	Гипертоксичность
				β	α		
Нефть и нефтепродукты	Вода Донные отложения Нефтяные пленки (слики)	Доли ПДК Мг/кг -	0 (следы) Менее 1 Отсутствуют	Менее ПДК Менее 10 Единичные	1 — 2 ПДК Менее 100 Много	>2 ПДК Более 100 Сплошные пленки -	>10 пдк Более 1000 Сплошные ирридирующие пленки
СПАВ	Вода	Доли ПДК	Менее ПДК	Равно ПДК	1 – 2 ПДК	>2 ПДК	>10 ПДК
Фенолы	Вода	Доли ПДК	Менее ПДК	Равно ПДК	1 – 2 ПДК	>2 ПДК	>10 ПДК
Ртуть	Вода Градиент вода-дно	Доли ПДК Отношение	Менее ПДК 1 : 10	Равно ПДК 1 : 100	1 – 2 ПДК 1 : 100—1 : 1000	>2 ПДК 1 : 1000—1 : 10000	>10 ПДК >1 : 10000
Медь	Вода Градиент вода-дно	Доли ПДК Отношение	Менее ПДК 1 : 10	Равно ПДК 1 : 100	1 – 2 ПДК 1 : 100—1 : 1000	>2 ПДК 1 : 1000—1 : 10000	>10 ПДК >1 : 10000
Тяжелые металлы (сумма)	Вода Градиент вода-дно	ЛПВ Отношение	Менее 1 1 : 10	Около 1 1 : 100	> 1 1 : 100—1 : 1000	> 2 1 : 1000—1 : 10000	> 5 – 10 1 : 10000
ФОС	Вода	Доли ПДК	Отсутствуют	Менее ПДК	1 – 2 ПДК	>2 ПДК	>10 ПДК
Хлорорганические пестициды	Вода	Мкг/л	$10^{-2} - 10^{-3}$	0.01 – 0.1	0.1 - 1	1 - 10	>10
	Донные отложения	Мкг/кг	Менее 10	10 - 100	100 - 1000	1000 - 10000	> 10000
	Градиент вода-дно	Отношение	1 : 10 - 1 : 50	1 : 100	1 : 100—1 : 1000	1 : 1000—1 : 10000	>1 : 10000
	Накопление в биоте: – в беспозвоночных	Коэффициент степенного отношения к содержанию в воде	10 – 100	100	100	-	-
	– в рыбах-бентофагах		100	100 – 1000	1000	-	-
– в хищных рыбах	1000		1000	10000	100000	-	
– в рыбоядных птицах	10000		10000	10000	1000000	-	
Биотестирование на дафниях	Гибель тест-культуры за период экспозиции	Доля погибших животных	Не выше 10%	Менее 50% в течение 96 час	Менее 50% в течение 48 час	Свыше 50% в течение 24 часов	100% в течении 1-2 часов
	Поведенческие реакции	-	Нарушение репродуктивного цикла, эмбрионального развития, линьки и пр.	Слабо выраженные поведенческие реакции	Вращение, нарушение координации движений, иммобилизация		
Гидробиологические показатели	Индекс удельного биотического развития фитопланктона	Значение	> 4	1 - 4	1	0 - 1	0
	Тип биоценоза или состав населения	-	Многовидовой состав со стабильными доминантами	Трансформированный биоценоз (доминируют виды, не характерные для олиготоксичной зоны)	Деградированный биоценоз с сохранением наиболее устойчивых форм	Предельно ограниченный видовой состав из наиболее устойчивых форм	Безжизненная зона
Биопродукционные показатели	Первичная продукция (A) и деструкция (R)	Отношение A/R	> 1	0 - 1	≈ 0	A ≈ 0 , R ≈ 0	A = 0, R = 0

При определенной дискуссионности и недостаточной полноте предложенных Л.П. Брагинским конкретных численных выражений классификационной системы, концептуальная часть в качестве рабочей гипотезы заслуживает всяческого уважения и внимания. Представляет также интерес выполненное сопоставление различных схем классификации (см. табл. 3.19), хотя это сравнение было осуществлено скорее на "фонетическом" уровне, нежели со строгих формальных позиций.

Таблица 3.19

Сравнительная схема классификации токсичных и сапробных загрязнений

Класс (балл)	Сапробность	Токсобность	Качество воды [Жукинский с соавт., 1981]	Качество воды [Руководство по методам..., 1983]	Токсичность веществ для рыб [Лукьяненко, 1983]	Уровень токсического загрязнения [Брагинский, 1985]
0	Катаробность	Нет обозначения	Предельно чистая	Очень чистая	Нетоксичные	Нетоксичность
I	Олигосапробность	Олиготоксобность	Чистая	Чистая	Очень слабо токсичная	Олиготоксичность
II	β -мезосапробность	β -мезотоксобность	Удовлетворительной чистоты	Умеренно загрязненная	Слабо токсичные	β -мезотоксичность
III	α -мезосапробность	α -мезотоксобность	Загрязненная	Загрязненная	Умеренно токсичные	α -мезотоксичность
IV	Полисапробность	Политоксобность	Грязная	Грязная	Сильно токсичные	Политоксичность
V	Гиперсапробность	Гипертоксобность	Весьма (предельно) грязная	Очень грязная	Высокотоксичные	Гипертоксичность

Приведенный обзор систем классификации водоемов позволяет сделать вывод об отсутствии к настоящему времени единой, достаточно полной и сбалансированной комплексной методики оценки качества воды, удовлетворяющей требованиям экологов и токсикологов, основанной на современных методах формализации, лишенной профессионального субъективизма используемых критериев, технологичной для широкого использования и принятой на достаточно авторитетном законодательном уровне.

Оценка качества воды с использованием α -метода проверки статистических гипотез 18

Методики, описанные в предыдущих разделах, основаны на предположении, что заранее известны точные (т.е. истинные) значения C_1, C_2, \dots, C_n концентраций вредных веществ в воде изучаемого водоема. В реальных условиях исследователь имеет дело с некоторой эмпирической выборкой значений $C_j, j = \overline{1, n}$, из стохастического временного ряда наблюдений, имеющего принципиально вероятностную природу вследствие нестационарного воздействия антропогенных факторов и погрешности измерений.

Пусть $(C_1, C_2, \dots, C_n)^T$ - случайный вектор концентраций примесей в воде, элементы которого независимы и измеряются со случайными погрешностями. Концентрация каждого j -го компонента ($j = \overline{1, n}$) имеет нормальный закон распределения с математическим ожиданием $M\{C_j\}$ и дисперсией $D\{C_j\}$.

¹⁸ Раздел подготовлен в соавторстве с д-ром Натаном Цейтлиным (Геттинген, Германия) и на основе материалов его книги "Из опыта аналитического статистика" [Цейтлин, URL].

Предположим, что мы располагаем представительными выборками $(C_{ij})_{i=1}^{N_j}$ объемом по N_j значений результатов параллельных измерений концентрации вредных веществ, что позволяет получить оценки параметров - математических ожиданий $\bar{C}_j \rightarrow \mathbf{M}\{C_j\}$ и среднеквадратических отклонений $S_j \rightarrow (\mathbf{D}\{C_j\})^{0.5}$ для распределений соответствующих случайных величин C_j :

$$\bar{C}_j = \sum_{i=1}^{N_j} C_{ij} / N_j, \quad S_j = \left[\sum_{i=1}^{N_j} (C_{ij} - \bar{C}_j)^2 / f_j \right]^{0.5}, \quad (3.10)$$

где $f_j = N_j - 1$ - число степеней свободы величины S_j ($j = \overline{1, n}$).

Рассмотрим возможные подходы к комплексной оценке качества воды. Согласно СанПиН 2.1.5.980-00 «при обнаружении в воде химических веществ с одинаковыми лимитирующими признаками вредности, сумма отношений обнаруженных концентраций к их ПДК:

$$\mu = \frac{C_1}{\text{ПДК}_1} + \frac{C_2}{\text{ПДК}_2} + \dots + \frac{C_n}{\text{ПДК}_n} \quad (3.11)$$

не должна быть более единицы». Использование формулы (3.11) предполагает две оценки качества воды - «безвредная» (при $\mu < 1$) и «вредная» (при $\mu > 1$).

Поскольку концентрации загрязняющих компонентов C_i представляют собой случайные величины, то и критерии качества воды на их основе также носят вероятностный характер. Следовательно, для оценки качества воды необходимо воспользоваться теорией проверки статистических гипотез [Леман, 1964].

Статистическая оценка математического ожидания показателя μ загрязнения воды примесями может быть вычислена по формуле (3.11), куда вместо параметров C_j подставляются их соответствующие оценки \bar{C}_j :

$$m = \sum_{j=1}^n \bar{C}_j / \text{ПДК}_j \rightarrow \mu, \quad (3.12)$$

а ПДК каждой примеси являются действительными (неслучайными) числами.

Оценка S_m^2 дисперсии $\mathbf{D}\{\mu\}$ и дисперсия S_μ^2 ошибки оценки m показателя качества μ выражаются формулами

$$S_m^2 = \sum_{j=1}^n S_j^2 / \text{ПДК}_j^2 \rightarrow \sigma_\mu^2 = \mathbf{D}\{\mu\} \quad \text{и} \quad S_\mu^2 = \sum_{j=1}^n S_j^2 / \text{ПДК}_j^2 \cdot N_j. \quad (3.13)$$

Формально задача ставится следующим образом. Необходимо оценить качество воды путем проверки двух гипотез $H_A: \mu < 1$ (безвредная) против $H_B: \mu > 1$ (вредная), для чего воспользуемся последовательностью действий, определяемой теорией [Леман, 1964] и практикой [Цейтлин, 1984] проверки статистических гипотез.

1. В качестве *статистической характеристики* гипотезы выбирается распределение Стьюдента t_f с f степенями свободы при малых значениях f ($1 \leq f \leq 25$) и нормированное нормальное распределение Z при больших значениях f ($f > 25$).

2. В качестве *нулевой H_0 гипотезы* формулируется то предположение, ошибочное отклонение которого дает наибольший ущерб. Например, с точки зрения экосистемы водоема ошибочное отклонение гипотезы H_B , когда она верна, приводит к более тяжелым последствиям, чем ошибочное отклонение H_A , когда она верна. Исходя из этого, формулируем

$$H_0 = H_B: \mu \geq 1 \text{ против альтернативы } H_1 = H_A: \mu < 1. \quad (3.15)$$

3. Задаются критические значения *уровня значимости* α_k из рекомендованных в работе [Цейтлин, 1984] интервалов: $0,3 \leq \alpha_k \leq 1$, когда ответственность за выводы предельно малая, $0,1 \leq \alpha_k < 0,3$ - малая; $0,03 \leq \alpha_k < 0,1$ - обычная; $0,001 < \alpha_k < 0,03$ - большая; $0 < \alpha_k < 0,001$ - предельно большая.

4. Выполняются необходимые эксперименты, имеющие цель получить представительные выборки $(C_{ij})_{i=1}^{N_j}$ объемом по N_j значений величин C_j ($i = \overline{1, n}$) результатов параллельных измерений концентрации загрязняющих веществ.

5. Вычисляется оценка $\bar{\alpha}$ уровня значимости α (α - вероятность ошибочного отклонения проверяемой гипотезы H_0 , если она верна):

$$\bar{\alpha} = 0.5 - 0.5 \cdot [1 - e^{-0.6118 \cdot Z_{\alpha}^2}]^{0.5}, \quad (3.16)$$

где $Z_{\alpha} = L \cdot [L^2 - 2t_{f,\alpha} \cdot (f + 3)]^{0.5}$, $L = f + 1.5 \cdot t_{f,\alpha} + 3$; $t_{f,\alpha}$ - верхний α -предел распределения Стьюдента ($t_{f,\alpha} > 1$) с f степенями свободы, число которых может быть определено по формуле Уэлча [Браунли, 1977]:

$$f = S_m^4 / \sum_{j=1}^n S_j^4 / \text{ПДК}_j^4 \cdot f_j. \quad (3.17)$$

Если рассматривается гипотеза $H_0 = H_B$, то значения $t_{f,\alpha}$ вычисляются как

$$t_{f,\alpha} = (1 - \bar{\mu}) / S_{\bar{\mu}}. \quad (3.18)$$

6. Принимается решения о проверяемой гипотезе. Условия отклонения нулевой гипотезы $\bar{\alpha} \leq \alpha_k$. Если же $\bar{\alpha} > \alpha_k$, то гипотезу H_0 не отклоняют.

Формулировка нулевой гипотезы H_0 в виде (3.15) отражает точку зрения «Водопользователя» (ВП), т.е. населения, использующего воду в хозяйственных или питьевых целях, а также сообществ гидробионтов, населяющих водоем, активистов движения «Green Peace» и проч. С позиций ВП ошибочное отклонение гипотезы о плохом качестве воды может привести к тяжелым последствиям для экосистемы и здоровья человека и, с учетом этого риска, критическое значение α_k выбирается из большого или предельно большого уровня ответственности, например, $\alpha_{кВП} = 0.01$.

Однако, представляется целесообразным учесть и экономические интересы «Водоочистителя» (ВО) – организации, ответственной за очистку сбрасываемых в водоем сточных вод до нормативного качества, а также другого производителя, лимитирующего свою хозяйственную деятельность в соответствии с требованиями водоохраных органов. Для ВО ошибочное отклонение гипотезы о чистоте воды (H_A), когда она верна, приводит к более тяжким экономическим последствиям, чем ошибочное отклонение H_B , если она справедлива (см. табл. 3.20). Поэтому ВО формулирует нулевую гипотезу следующим образом:

$$H_0 = H_A: \mu \leq 1 \text{ против } H_1 = H_B: \mu > 1, \quad (3.19)$$

а верхний α -предел распределения Стьюдента вычисляется по формуле:

$$t_{f,\alpha} = (\bar{\mu} - 1) / S_{\bar{\mu}}. \quad (3.20)$$

Для принятия решения о проверяемой гипотезе для ВО могут быть выбраны более "мягкие" уровни ответственности за выводы, например, при критических значениях $\alpha_{кВО} = 0.1$.

Области ($0 < \bar{\alpha} \leq \alpha_{кi}$) ($i \in [\text{ВО}; \text{ВП}]$) отклонения нулевой гипотезы называются критическими. Их взаимно однозначное отображение на область значений показателя μ загрязнения водоема происходит по-разному, в зависимости от сформулированных нулевой и альтернативной гипотез, отражающих интересы субъектов с различной точкой зрения (см. рис. 3.2.).

Для ВО критической областью является ($\mu: \mu_{кВО} < \mu < \infty$); для ВП - это ($\mu: 0 < \mu < \mu_{кВП}$). Поскольку уравнение (3.16) легко выразить явно относительно $t_{f,\alpha}$, то критические значения меры μ можно найти [Дубницкий, Цейтлин, 1999], подставив в формулы (3.18) и (3.20) критические значения уровней значимости $\alpha_{кВО}$ и $\alpha_{кВП}$ соответственно, и решая их относительно $\bar{\alpha}$:

$$\mu_{кВО} = 1 + t_{f,\alpha} S_{\bar{\mu}}; \quad \alpha = \alpha_{кВО}; \quad (3.21)$$

$$\mu_{кВП} = 1 - t_{f,\alpha} S_{\bar{\mu}}; \quad \alpha = \alpha_{кВП}. \quad (3.22)$$

На рис. 3.2 представлены функции распределения оценки $\bar{\mu}$ величины μ в предположении о справедливости гипотезы H_0 , сформулированной с точки зрения «Водоочистителя» $F(\mu)$ и «Водопользователя» $P(\bar{\mu} < \mu)$. Очевидно, что $P(\mu) = 1 - F(\mu)$.

Распределение результатов решений при проверке гипотез о соответствии качества воды установленным нормам

Предполагается	Позиция лица, принимающего решение (ЛПР)	Результат решения в зависимости от истинности гипотезы	
		$H_A: \mu < 1$ (безвредная вода)	$H_B: \mu > 1$ (вредная вода)
Отклонить $H_B: \mu > 1$ (вода безвредная)	Станция очистки воды (ВО)	Верно: получает плату за безвредную воду	Ошибка: получает плату за безвредную воду, хотя она вредная
	Потребитель воды (ВП)	Верно: платит за безвредную воду	Ошибка: платит за безвредную воду, но отравляется вредной водой
Отклонить $H_A: \mu < 1$ (вода вредная)	Станция очистки воды (ВО)	Ошибка: лишние затраты на очистку или (и) штраф	Верно: необходимы затраты на очистку или (и) штраф
	Потребитель воды (ВП)	Ошибка: лишние затраты, вызванные ограничением потребления воды	Верно: необходимы затраты, вызванные ограничением потребления воды

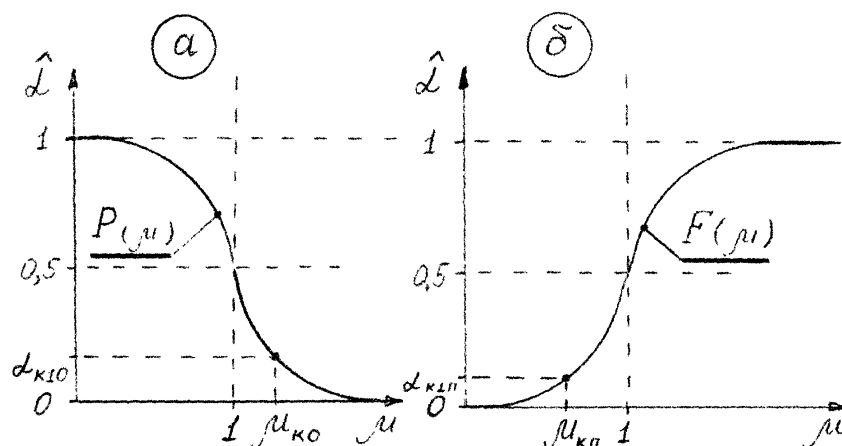


Рис. 3.2. Отображение критических областей оценки уровня значимости $\bar{\alpha}$ ($0 < \bar{\alpha} \leq \alpha_{ki}$) показателя качества воды μ для лиц, принимающих решения в интересах «Водоочистителя» (а) и «Водопользователя» (б)

Среди множества решений о качестве воды существует область ($\mu_{kvп} < \bar{\mu} < \mu_{kvo}$), в которой могут встретиться спорные решения, т.е. «Водоочиститель» оценивает качество воды как *безвредное*, а «Водопользователь» – как *вредное*. Один из способов разрешения такого "спора" заключается в увеличении объемов N_j выборок: согласно формуле (3.13) среднее квадратичное отклонение S_{μ} новой оценки μ с ростом N_j уменьшается; а спорная область при неизменных α_{kvo} и $\alpha_{kvп}$ сужается. Менее трудоемким способом выхода из спорной области может быть пересмотр обоими субъектами критических уровней значимости α_{ki} : при их увеличении принимается меньший уровень ответственности за выводы (чем больше α_{ki} , тем значения $t_{f,\alpha}$ в формулах (3.21) и (3.22) меньше). Изложенный подход формализации задачи остается, в основном, без изменений и при других способах комплексной оценки качества воды, описанных в разделе 3.4. В алгоритм необходимо лишь внести коррективы, учитывающие особенности расчетной формулы выбранного показателя, отличного от (3.11). Например, примем более мягкие условия нормирования качества: вода считается "чистой", если каждая из анализируемых примесей C_j , $j = \overline{1, n}$, не более нормируемой величины ПДК_j то есть, для всех j справедливо $C_j / \text{ПДК}_j < 1$. Тогда исходные гипотезы примут вид: H_A : $C_j < \text{ПДК}_j$ (безвредная) против H_B : $C_j > \text{ПДК}_j$ (вредная).

Глава 4. Критерии оценки качества вод по данным гидробиологического анализа

4.1 Современные концепции биомониторинга водных экосистем

Мем № 21: «Гидробиологический анализ, будучи важнейшим элементом системы наблюдений за уровнем загрязнения поверхностных вод и донных отложений, включает в себя:

- определение совокупного эффекта комбинированного воздействия загрязняющих веществ на водные биоценозы;
- определение экологического состояния водных объектов и установление экологических последствий их загрязнений;
- определение направления изменения водных биоценозов в условиях загрязнения природной среды;
- оценку качества поверхностных вод и донных отложений как среды обитания организмов, населяющих водоемы и водотоки;
- оценку трофических свойств воды;
- установление возникновения вторичного загрязнения и его источников, а в ряде случаев специфического химического состава воды»

В.А. Абакумов [Руководство по гидробиологическому..., 1992].

Экологические особенности водных биоценозов¹⁹

Экологическая гидробиология (гидроэкология) как наука «изучает население гидросферы во взаимосвязи с окружающей средой и биологические явления в водоемах, возникающие в результате взаимодействия различных живых компонентов друг с другом и с неживой природой» [Константинов, 1979]. Развитие теории водных экологических систем осуществляется на трех неразрывно связанных между собой уровнях проблематики и научно-системной интеграции [Одум, 1986; Розенберг с соавт., 1999]:

- **аутэкологии**, изучающей проблемы физиологических аспектов жизнедеятельности гидробионтов на изменчивом уровне (интенсивность метаболизма, закономерности питания, экскреция биогенных элементов, рост массы тела и проч.);
- **демэкологии**, связанной с изучением динамики популяций и явлениями их взаимодействия (конкуренции, доминирования, регулирования численности и т.д.);
- **синэкологии** или экологии сообществ, исследующей специфику надорганизменных форм жизни – популяций и биоценозов, обладающих определенной структурой, функциями и характером взаимодействия с окружающей средой.

А.С. Константинов [1979] выделяет следующие конкретные практические задачи гидробиологии:

- повышение продуктивности водоемов и получение из них наибольшего количества биологического сырья в результате промысла водных организмов (*продукционная* гидробиология);
- аналитический контроль качества водоемов и поиск мер обеспечения людей чистой водой (*санитарная* гидробиология [Телитченко, Кокин, 1968]);
- адаптивное управление и разработка стратегии комплексного использования водоемов и их охраны от возможных негативных последствий.

¹⁹ В рамках последующего изложения будем употреблять термины «экосистема» и «гидробиоценоз» («биогидроценоз») как близкие синонимы [Tansley, 1935; Сукачев, 1960; Мордохай-Болтовской, 1974], но будем помнить, что биоценоз имеет более четкие геоморфологические или гидрофизические границы. Термин «экосистема», который можно отнести к объекту любого ранга – от отдельной точки отбора пробы до всего Мирового океана, – менее строгий и более универсальный, а, следовательно, более удобный в общетеоретических рассуждениях.

Можно согласиться с С.М. Голубковым [2000], что «*гидробиология континентальных водоемов в последние десятилетия переживает пору расцвета*», однако к имеющимся реальным достижениям по всем основным поставленным задачам трудно отнестись с тем же оптимизмом, что и 30 лет назад.

Целью последующего изложения в свете представленной терминологии является рассмотрение методов и конструкций синэкологии для решения задач санитарной гидробиологии.

Сообщества водных организмов по своим условиям обитания и структурно-функциональным характеристикам имеют ряд ключевых особенностей по сравнению с наземными биогеоценозами [Мордухай-Болтовской, 1974; Методика изучения..., 1975], которые в основном заключаются в следующем:

1. Гидробионты, окруженные водой, подвергаются значительно меньшим колебаниям температуры (обычно в пределах от 2 до 40°), чем обитатели биогеоценозов. Однако для них имеет большое значение содержания кислорода, который часто бывает в дефиците, а временами может вовсе исчезать. В связи с этим, существующие классификации экосистем учитывают, в первую очередь, содержание кислорода в водоеме.
2. Водные организмы находятся в условиях более слабой освещенности, чем наземные, а расположенные на глубинах водоемов (и в подземных водах) совершенно лишены света и их живые компоненты могут существовать только за счет поступления органических веществ извне. Поэтому в системе гидробиоценозов гораздо сильнее выражена вертикальная дифференциация (стратификация). В связи с вертикальной расчлененностью водной среды типы водных сообществ выделяются по совершенно иному принципу, чем типы биогеоценозов. Последние в большинстве случаев, как указывает В.Н. Сукачев [1966], совпадают с границами растительных ассоциаций на поверхности земли, в то время как типы гидробиоценозов различаются главным образом по их положению в пространстве. Например, различают следующие "жизненные формы" [Дуплаков, 1933; Зернов, 1949; Зенкевич, 1951; Константинов, 1979]:
 - *планктон* (planktos – парящий) и *нектон* (nektos – плавающий) – население пелагиали, проводящее жизнь во взвешенном состоянии и активно передвигающееся в толще воды;
 - *бентос* (bentos – глубина) – организмы, живущие на дне водоемов или в грунте;
 - *перифитон* (peri – вокруг, phyton – растение) – гидробионты, поселяющиеся на плотных субстратах и приспособленные к обитанию на границе раздела между субстратом и водой.
3. Организмы в водоемах биохимически и осмотически более тесно связаны с окружающей их средой и зависят от содержания в ней растворимых веществ. Благодаря значительно большей, чем у воздуха, плотности воды, многие водные организмы пребывают в свободно плавающем или парящем состоянии, поскольку вода содержит пространственно-распределенный источник пищи в виде взвешенной массы органических веществ и микробов. Вода одновременно создает возможность биохимических связей между сообществами гидробионтов за счет выделения многими организмами в воду кислорода, углекислоты и различных продуктов метаболизма. Эти вещества, токсичные, либо, наоборот, стимулирующие другие организмы, образуют как бы сеть, по которой организмы сообщаются косвенно, не вступая друг с другом в прямой контакт.
4. Население гидросферы значительно разнообразнее, чем наземное, хотя во внутренних водоемах состав флоры и фауны сильно обеднен по сравнению с морями из-за выпадения многих групп. Основную массу первичных продуцентов составляют взвешенные в воде микроскопические водоросли, в то время как на суше - это почти исключительно крупные растения, с корнями в почве. Несмотря на чрезвычайно мелкие размеры планктонных водорослей, они обладают весьма высоким темпом размножения и могут давать очень высокую первичную продукцию, за счет которой развивается местами богатейшее животное население.
5. В горизонтальном направлении водные сообщества, как и биогеоценозы, также неоднородны. Биотопы определяются преимущественно физическими свойствами среды и группируются по экологическим зонам, на которые делятся водоемы: например, в озерах бенталь подразделяется на литораль (прибрежная зона), сублитораль (до нижней границы распространения высших растений), профундаль. Внутри каждой зоны может быть выделено по несколько биотопов и соответствующих им биоценозов (например, на разных грунтах).
6. Гидробиоценозы, как и наземные экосистемы (в первую очередь, фитоценозы), обладают хорошо выраженной изменчивостью во времени. Сезонная (годовая, суточная или иная циклическая) динамика, вызванная изменениями температуры, наблюдается как в ценозах высшей вод-

ной растительности, отмирающей с наступлением осени, так и в планктонных сообществах, состоящих из видов с кратким жизненным циклом. В меньшей мере выражены сезонные изменения в бентосе, остающемся в крупных водоемах на зиму в почти полном составе и количестве, хотя в некоторые периоды его гетеротопные группы (насекомые) покидают водоем.

7. Межгодовые (или многолетние) изменения в водоемах выражены не менее, если не более ярко, чем в биогеоценозах, и, в основном, происходят в результате тех же причин: изменения климатических условий и деятельности человека. В гидробиоценозах постоянно происходят также изменения в соотношении видов и их обилии, причины которых часто не удается установить. Эти ненаправленные изменения колебательного типа называют *флуктуациями*, противопоставляя их *сукцессиям* – изменениям в течение ряда лет, направленным в одну сторону. Сукцессии часто наблюдаются в гидробиоценозах и представляют собой обычно продолжающийся в течение ряда лет процесс постепенного приспособления сообществ гидробионтов к сильно изменившимся абиотическим условиям. Мы наблюдаем их при различных естественных изменениях режима водоемов, а в еще большем масштабе – при возникновении новых водоемов или водохранилищ (на затопляемой, например, вследствие сооружения плотины, долине реки).

Из всего сказанного выше нетрудно предположить, что расчетные методы изучения водных экосистем должны отличаться от методов и алгоритмов количественного анализа наземных биогеоценозов.

Экосистемная индикация изменения качества вод

Факториальная гидробиология основана на изучении эффектов, вызываемых разнообразными типами воздействий среды на живые организмы. Особи каждого вида могут существовать только в определенном пределе изменчивости условий обитания: амплитуда колебаний, как каждого индивидуального фактора среды, так и любой их комбинации должна соответствовать видовой "норме" (или, как синоним, *экологической валентности* вида). Однако, в отличие от дифференцированного нормирования с использованием ПДК, оценивающего эффект вредного действия на уровне индивидуального организма, экологическое нормирование понимается как ограничение антропогенных воздействий рамками возможностей сообщества гидробионтов в целом.

Как для отдельных особей, так и надорганизменных сообществ (популяций и биоценозов), характерна способность адаптироваться к среде, т.е. сохранять свою структурную целостность и функциональную устойчивость в некоторых пределах колебания внешних воздействий. Л.П. Брагинский [1981] считает, что "нормальная" экосистема сохраняет свойство буферности, т.е. обладает определенным потенциалом детоксикации. У водоема в патологическом состоянии эта "буферность" нарушается и подавляется самоочищающая способность, в результате чего продукционные (негэнтропийные) процессы в экосистеме уступают деградиационным (энтропийным). Аналогичных взглядов придерживается А.С. Константинов [1981], очерчивающий желательный биосферный статус водоемов, исходя из *принципа "минимума экстремальности экосистем"*.

Устойчивость метаболизма биоценоза в пределах его адаптационных возможностей поддерживается за счет периодических, сезонных или ответных перестроек его структуры, по существу являющихся теми колебательными процессами, которые служат фундаментальной характеристикой функционирования биологических систем любого структурного уровня. Поэтому представляется важным квалифицированно оценить, какие перестройки структуры и нарушений метаболизма, происходящие на уровне биоценозов и названные *экологическими модификациями* [Абакумов с соавт., 1981; Израэль, Абакумов, 1991; Попченко, 1991], являются потенциально опасными на экосистемном уровне. При этом выделяются следующие инвариантные состояния водных экосистем, соответствующие разным уровням антропогенного загрязнения:

- *фоновое состояние* – возможны перестройки структуры, не ведущие к ее усложнению или упрощению, т.е. не изменяющие общего уровня организации биоценозов (например, смена доминантных видов, изменение видового состава);
- *состояние антропогенного экологического напряжения* – выражается в увеличении разнообразия биоценоза, в частности, в увеличении общего числа видов, в уменьшении энтропии, в усложнении межвидовых отношений, в увеличении пространственно-временной гетерогенности, в усложнении временной структуры и пищевых цепей и т.д.;

- *состояние антропогенного экологического регресса* – характеризуется уменьшением разнообразия и пространственно-временной гетерогенности, увеличением энтропии, упрощением межвидовых отношений, сезонных модуляций, трофических цепей;
- *состояние антропогенного метаболического регресса* – соответствует снижению активности биоценоза по сумме всех процессов утилизации вещества и энергии.

Высказанные надежды [Абакумов, Суценя, 1991] на то, что приведенная классификация состояния водных экосистем, основанная на представлениях об экологических модификациях, возникающих в результате химического, теплового и "биологического" загрязнения антропогенного происхождения, будет способствовать повышению эффективности Гидробиологической службы, до настоящего времени не нашли своего практического воплощения.

Концепция "допустимого качества природной среды" в системе мониторинга состояния водоемов предполагает дифференцированный подход к природным объектам в зависимости от их народнохозяйственного, научного и эстетического значения. При этом для разных категорий водоемов считается необходимым разрабатывать свои предельно допустимые состояния экосистем, которые оцениваются на основе структурно-функционального подхода и с учетом индивидуальных требований к водным объектам: региональным особенностям, морфометрии, проточности и др. [Приемы прогнозирования..., 1985].

Сущность экологического нормирования заключается в разработке критериев, оценивающих степень влияния антропогенных факторов на устойчивость и/или биоразнообразие экосистем. Действительно, сообщества водных организмов, вовлеченные в постоянный круговорот вещества и энергии с окружающей средой, реагируют на изменения ее качества адекватной структурно-функциональной перестройкой, проявляемой в снижении продуктивности, изменении соотношения отдельных видов, появлении новых доминантных видов, изменении сети трофических отношений. Однако, причинно-следственная интерпретация экологических модификаций, которым, как правило, приписывается антропогенный характер, может иметь более сложную природу. В водных экосистемах, подвергающихся комплексному воздействию различных факторов (химическое, термическое, радиационное загрязнение, изменение гидродинамического режима и проч.), могут протекать спонтанные и неоднозначно трактуемые нарушения динамики количественного развития или трансформации видовой структуры, которые на самом деле не имеют никакого отношения к анализируемому фактору. Например, можно отметить следующие механизмы изменения биоразнообразия, не связанные с антропогенным загрязнением:

- эволюция биоценоза в направлении формирования комплекса экологически полифункциональных популяций;
- резкие сезонные колебания (вылет имаго насекомых) или пространственная неоднородность биотопов;
- колебания степени эвтрофирования водоемов, связанные с многолетней природно-климатической динамикой.

В главе 3 отмечалось, что в гидробиологической литературе нет единого мнения по поводу формулировки определения *«качество поверхностных вод»*. Еще большие трудности вызывает идентификация стрессов экосистем – любые критерии *«качества экологического состояния»* многие авторы признают относительными и субъективными. С философских позиций это вполне закономерно:

Мем № 22: *«...качество вообще есть тождественная с бытием непосредственная определенность»* Г. Гегель [1974].

Иными словами, полным отображением собственного качества может быть только сам объект. Поскольку любая формальная оценка (как абстрактная модель) есть перечисление немногих выделенных свойств объекта, наиболее существенных для решения субъектом некоторой задачи, то *«поиск оптимума качества экосистемы должен вестись в терминах элементов конечной цели»* [Гладышев, 1999]. Имея под собой такую диалектическую основу, большинство определений, связанных с проблемами экологического нормирования, по-прежнему носят характер терминологических изысканий, а общепринятых, точных и адекватных методик гидробиологической оценки качества воды, применимых на практике, не существует до настоящего времени.

Общие подходы в разработке немногочисленных количественных методов гидробиологического контроля базируются на следующих двух принципах и представлениях [Федоров, 1974; Абакумов, 1987]:

- **функциональное** (балансовое или продукционно-энергетическое) направление, изучающее продукционный метаболизм вещества и энергии в водоемах,
- **структурное** (популяционное) направление, оценивающее целостность структуры экосистемы и ее отдельных компонентов на всех уровнях.

Продукционно-энергетическое направление в общем случае основано на следующих концепциях (см. раздел 2.5 и Приложения 1-2):

- рассматривается экосистема идеального замкнутого водоема, которая условно делится на *n* блоков, называемых, например, "трофическими уровнями" и нумеруемых следующим порядком: 1 – продуценты, 2 – фитофаги, 3 – хищники первого порядка и т.д. (названия и уровень детализации этих блоков достаточно произвольны и зависят от многих субъективных факторов);
- назначаются связи между выделенными блоками (трофические связи между трофическими уровнями), которым ставятся в соответствие разного рода математические уравнения (дифференциальные, конечно-разностные, статистические), выведенные авторами на основе некоторых исходных предположений и призванные дать конкретное количественное выражение потокам вещества и энергии между связываемыми блоками;
- блоки, связи между ними и системы уравнений образуют модель функционирования водного биоценоза, которая может быть решена относительно данных гидробиологических исследований конкретных водоемов.

Концепция трофических уровней использования вещества и энергии, при всей своей определенной схематичности и условности, дает возможность получить количественное представление о соотношении биомасс, продукций, пищевых потребностей и участия в органической деструкции каждой из групп-утилизаторов, что может быть представлено в виде биотического баланса. Разумеется, оценка экологического состояния водной системы по функциональным параметрам целиком зависит от тщательности детализации и адекватности разработанных моделей, объективности при интерпретации результатов и требует наличия квалифицированных специалистов в области системной аналитики.

Популяционный подход, напротив, основывается на простых "индексах", с помощью которых оценивают видовое богатство и биоразнообразие водных сообществ и делаются выводы о вероятности наличия "экологических модификаций".

Гидробиологические данные и расчетные индексы: попытки обобщений

Обилие видов живых существ, населяющих водоем, сложность их взаимодействия, как между собой, так и с окружающей средой, послужили причиной создания многочисленных вариантов методов оценки состояния природных вод. Большинство этих методов основано на оценке совокупности показателей (см. раздел 2.3): числа видов, численностей и биомасс популяций, населяющих водоём (то, что "проще" и что умеем измерять...), и рассчитанных различных соотношений между ними. Показатели можно разделить на:

- *простые*, непосредственно характеризующие какой-либо индивидуальный компонент экосистемы (например, численность, биомасса, или число видов в сообществе);
- *комбинированные*, отражающие компоненты с разных сторон (например, видовое разнообразие учитывает как число видов, так и распределение их обилия);
- *комплексные*, использующие сразу несколько компонентов экосистемы (например, продукция, самоочищающая способность, устойчивость).

Комбинированные и комплексные показатели принято обобщенно называть «**индексами**».

Если используемые индексы адекватно отражают высокую чувствительность некоторых сообществ реагировать на воздействие поступающих в водоем загрязняющих веществ, то они позволяют достаточно надежно выявлять изменения, происходящие в экосистеме водоема, не замеченные за долгое время другими методами. В частности, индексы, основанные на планктонных организмах, из-за короткой продолжительности жизни последних пригодны для оперативной оценки обстановки, поскольку могут быстро реагировать на поступление в водоем токсичных веществ. Индексы, основанные на бентосных организмах, из-за большей продолжительности жизни представителей бентоса могут отражать экологическое состояние за более длительный интервал времени, как бы интегрируя условия существования.

Как уже подчеркивалось неоднократно, к сожалению, до настоящего времени отсутствуют как общепринятое и сколько-нибудь математически строгое определение «экологического состоя-

ния водоема», так и обобщенный перечень контрольных показателей, необходимых для идентификации этого состояния. До сих пор не удается также прийти к единому мнению относительно допустимых интервалов изменения самых общепринятых индексов. Такое положение вызвано не только недостаточной изученностью механизма функционирования природных экосистем, но и противоречивостью, неоднозначностью целей у различных пользователей природных ресурсов водоемов.

Исходя из *принципа приоритета первичных данных*, основным результатом гидробиологического мониторинга являются три основных показателя:

- *плотность видов* S – оценка числа видов (видового разнообразия), характерная для данной точки экосистемы;
- *плотность организмов* N – численность особей каждого вида, приходящаяся на единицу размера экосистемы (m^3 , m^2 , m);
- *плотность биомассы* B – масса особей каждого вида, приходящаяся на пространственную единицу экосистемы.

Каждый из перечисленных показателей или их различные комбинации являются основой для построения многих теорий, критериев и методов оценок качества некоторой гидробиологической субстанции (либо водоемов в смысле их утилитарного водохозяйственного предназначения, либо сообществ водных организмов с целью сохранения биоразнообразия и "экологической производительности", либо и того, и другого, и чего-нибудь третьего). Значительная часть индексов и способов их использования представлена в руководствах Госкомгидромета [Руководство по методам..., 1982; Руководство по гидробиологическому..., 1992], подготовленных коллективом авторов под редакцией В.А. Абакумова, однако, эти данные недостаточно полны и критичны.

Последний отечественный обзор методов биологического мониторинга выполнен почти 30 лет назад А.В. Макрушиным [1974а,б] и стал библиографической редкостью. Новый квалифицированный критический обзор был сделан А.И. Бакановым [2000а], который цитирует свыше 60 методов мониторинга, включающих различные характеристики зообентоса, но вследствие ограниченности объема этой статьи им не приводится самая важная деталь – математический аппарат, используемый при расчете тех или иных индексов, а также сведения о результатах его применения.

В настоящее время в мировой практике отсутствует сколько-нибудь формализованная классификация индексов и критериев, рекомендуемых для решения конкретных задач гидробиологического мониторинга. В зависимости от рассматриваемых групп гидробионтов или применяемого математического аппарата А.В. Макрушин условно делит эти методики на 3 группы и 9 подгрупп, а А.И. Баканов – на 17 групп (см. табл. 4.1). Данные разбиения нельзя считать в полной мере классификацией методов, поскольку *«они выполнены по разным основаниям, и являются лишь группировкой, используемой для удобства последующего изложения»* [Баканов, 2000].

Проблема интерпретации значений индексов часто бывает очень сложна и может привести к существенным ошибкам. Большинство индексов имеет эмпирическое происхождение (один из авторов называет такой подход «индексологией» [Розенберг с соавт., 1999]). Допустим, исследователь установил, что при различных уровнях загрязнения индекс достигает определенных величин, и на основании этого строится шкала для оценки загрязнений. Но обратное утверждение не всегда верно, т.е. определенное значение индекса не обязательно свидетельствует о наличии именно такого уровня загрязнений, который наблюдался при построении шкалы. Например, низкая величина индекса может быть вызвана специфическими метеорологическим или физико-химическими условиями. Форма зависимости величин индексов от степени загрязнения обычно бывает нелинейной (например, видовое разнообразие достигает минимальных величин как в очень чистых, так и в очень загрязненных водах).

Многие исследователи подчеркивают, что при описании состояния водоемов нужно предоставлять, по возможности, "абсолютные" исходные данные, т.е. естественный натуральный материал, не заменяя его только "относительными" данными, зашифрованными в виде индексов ²⁰.

²⁰ Кстати, одной из сильных сторон флористико-социологического подхода к классификации растительности (метод Браун-Бланке) является требование обязательной публикации (или депонирования) фитоценологических таблиц (исходных материалов) для утверждения валидности выделенных синтаксонов.

Группировка методик оценки результатов гидробиологического мониторинга

Разбиение по А.В. Макрушину [1974]	Разбиение по А.И. Баканову [2000]
<p>I. На основе показательных организмов</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Система Кольвитца - Марссона и ее модификации 2. Другие классификационные системы видов-индикаторов: <ul style="list-style-type: none"> - по характеру питания - по соотношению крупных таксонов - по устойчивости видов к загрязнению <p>II. По видовому разнообразию</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Индексы видового разнообразия 2. Индексы сходства населения 3. Индексы, основанные на теории информации <p>III. На основе показательных организмов и по видовому разнообразию</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Система Бекка и Бика 2. Система Вудивисса и ее модификации 3. Система Патрик 4. Система Хаттера 	<ol style="list-style-type: none"> 1) Обилие организмов; 2) Статистическое распределение организмов; 3) Соотношение численность/биомасса; 4) Число видов и удельное видовое богатство; 5) Характер доминирования, ранговые распределения; 6) Соотношение крупных таксонов и экологических групп; 7) Пространственное распределение организмов (агрегированность, глубина проникновения в грунт), характеристики дрефта; 8) Трофическая структура; 9) Морфологические изменения; 10) Функциональные (в том числе продукционные) характеристики; 11) Системы сапробности, токсобности и сапротоксбности; 12) Биотические индексы; 13) Обобщенная функция желательности; 14) Корреляционные связи, методы теории графов; 15) Многомерные методы сравнения структуры сообществ; 16) Комбинации вышеприведенных методов; 17) Комплексные методы, включающие зообентос как один из компонентов.

Такой вывод, в частности, делает О.М. Кожова [1977] из анализа материалов совместных исследований советских и английских специалистов, которые сравнивали качество вод на двух участках: на р. Дов, где вода высокого питьевого качества, и р. Эревош, где участок резко загрязнен. В этом примере не выявили закономерного изменения качества вод такие расчетные индексы, как показатели сапробности по Пантле-Букку на водорослях, показатели видового разнообразия Маргалефа, Менхиника, Одума, Кантлора и Корникера, критерии доминирования Симпсона, общего биоразнообразия Шеннона, показатель выравненности, индекс доминирования [Кожова с соавт., 1979]. В то же время каждый из этих участков характеризовался преобладанием разных доминантных видов: соответственно *Cocconeis placentula* и *Synedra ulna*, на что квалифицированный гидробиолог непременно бы обратил внимание, рассмотрев конкретные данные по составу сообществ и численности популяций.

Не опровергая тезис о приоритете и уникальной ценности первичных данных, мы не собираемся укреплять читателя в ложном убеждении о ненужности индексов вообще. Вспомним хотя бы излишне парадоксальную фразу Блеза Паскаля «*В науке ровно столько науки, сколько в ней математики*». Этот максимализм не лишен внутреннего смысла: например, для того, чтобы выявить вышеприведенные виды-доминанты О.М. Кожовой с соавт. [1979] неизбежно пришлось провести некоторый математический анализ (хотя бы посчитать средние...), т.е. сознательно, или подсознательно использовать еще один индекс, который в этой ситуации оказался вполне работоспособным.

Как уже обсуждалось ранее в разделе 2.3, применение оценочных или обобщающих индексов в действующих методиках биологического мониторинга представляется обоснованным. Это определяется *a priori* значительно более сложным компонентным составом экосистем по сравнению, например, со шкалой гидрохимических показателей, разными типами устойчивости живых организмов к влиянию внешних факторов, сложной функциональной обусловленностью структурных составляющих биотических сообществ, вызванных разными типами взаимодействия популяций и т.д. Каждый из таких показателей, как информационный индекс Шеннона, биотический индекс Вудивисса, сапробиологические показатели, индексы, основанные на учете различных групп гидробионотов (олигохетный индекс Пареле, индекс Гуднайта и Уитлея и др.), позволяют

учесть при математическом анализе данных новые информационные аспекты, не содержащиеся в явном виде в исходном пространстве признаков, а также использовать в конкретных случаях анализа весь ретроспективный опыт и функциональные закономерности, выявленные исследователями на водоемах других регионов.

Замечание. В последующих разделах настоящей главы литературные ссылки, помеченные верхним индексом «М», можно найти в обзорах А.В. Макрушина [1974а,б], а индексом «Б», – в обзоре А.И. Баканова [2000а].

4.2. Оценка качества экосистемы по соотношению показателей обилия

Индексы, использующие абсолютные показатели обилия

Абсолютные показатели обилия отдельных групп организмов могут изменяться при антропогенном воздействии, следовательно, в определенной степени отражать его величину. Например, замечено, что олигохеты, обычно немногочисленные в донных биоценозах, в местах спуска бытовых стоков часто развиваются в огромных количествах. Поэтому многими гидробиологами массовое развитие олигохет (во многих случаях без более точного определения) расценивается как показатель загрязнения.

С. Райт [Wright, 1955^М], Дж. Карр и М. Хилтонен [Carr, Hiltonen, 1965^М] и другие исследователи, работавшие на оз. Мичиган, используют следующие плотности олигохет для оценки уровня загрязнения:

- слабое загрязнение – 100-999 экз./м² ;
- среднее загрязнение – 1000-5000 экз./м²;
- тяжелое загрязнение – более 5000 экз./м².

В дальнейшем Г. Вашингтон [Washington, 1984^Б] уточнил, что сильное загрязнение характеризуется плотностью олигохет свыше 10 тыс. экз./м².

Р. Уорвик [Warwick, 1986^Б] предложил так называемый ЛДС-метод (abundance / biomass comparison), т.е. сравнение изменений численности и биомассы на графиках кривых доминирования. При отображении на одном графике кумулятивных значений относительной численности и биомассы Уорвик предположил, что при нормальных условиях обитания кривая доминирования биомассы идет выше кривой доминирования численности. При умеренном стрессе (независимо от его причины) эти кривые приблизительно совпадают, а при сильном – кривая биомассы идет ниже кривой численности. В дальнейшем для замены графической информации цифровой Дж. МакМанус и Д. Паули [McManus, Pauly, 1990^Б] предложили вычислять специальные индексы. Небольшой и противоречивый опыт использования этого метода не позволяет пока однозначно решить вопрос об условиях его применимости.

Индексы, использующие характер питания организмов

Антропогенное воздействие может изменить условия питания в водоеме, что приводит к реорганизации трофической структуры сообщества, количественные сдвиги в которой могут быть чутким индикатором этого воздействия. А.Ф. Алимовым и Н.П. Финогеновой [1976] доказано, что под влиянием загрязнения трофическая структура бентоса обычно упрощается, формируются более простые сообщества, играющие большую роль в самоочищении водоема: уменьшается доля животных с фильтрационным типом питания и увеличивается доля детритофагов-глотателей, изменяется влияние хищных животных и т.д. В.Ф. Шуйский [1987^Б] также отмечает, что при органическом удобрении озер возрастает доля животных со специализированным типом питания, увеличивается доля фитодетритофагов, уменьшается доля хищников. Для оценки подобного рода изменений А. Гамильтоном и Г. Хэррингтоном [Hamilton, Herrington, 1968^Б] предложен *индекс трофических условий*, рассчитываемый по соотношению в сообществе различных трофических групп. Из прочих индексов можно отметить следующие:

- *индекс Н.М. Кабанова* [1960^М] – равный отношению продуцентов к консументам, увеличивающийся по мере самоочищения водоема;
- *индекс загрязнения i по И. Габриелю* [Gabriel, 1946^М] – соотношение числа видов продуцентов (P – водорослей) к сумме числа видов редуцентов (R – бактерий) и консументов (C – цилиат):

$$i = \frac{2P}{R+C} ;$$

- индекс *A. Ветцеля* [Wetzel, 1969^M], который предложил в формулу И. Габриеля подставлять значения биомассы, т.к. не всегда возможно использовать количество видов, ввиду сложной диагностики отдельных групп гидробионтов;
- в формуле *индекса относительного обилия продуцентов* (ООП), аналогичного индексу Габриеля, для перифитона используют сумму индивидуальных баллов обилия [Руководство по гидробиологическому..., 1992];
- *индекс загрязнения по Дж. Хорасаве* [Horasawa, 1956^M] рассчитывается по формуле $i = \frac{B}{A+B}$, где *A* – организмы, содержащие хлорофилл, *B* – организмы, у которых хлорофилл отсутствует (простейшие); индекс предложен С.М. Драчевым [1964] наряду с другими гидробиологическими показателями для классификации степени загрязненности поверхностных вод (см. раздел 3.6);

Р. Вурман [Wuhrmann, 1956^M] предложил систему оценки санитарного состояния водоема, исходным пунктом которой является изменение соотношения автотрофов (водорослей) и гетеротрофов (сферотилиуса и других бактерий) по мере самоочищения воды. Им выделено 16 ступеней загрязнения, для каждой из которых приведены характерные растительные сообщества. Обоснованность системы Вурмана несколько снижается тем, что некоторые автотрофные организмы могут питаться гетеротрофно [Fjerdingstad, 1964^M].

Индексы, использующие соотношение крупных таксонов

К.Г. Гуднайт и Л.С. Уитлей [Goodnight, Whitley, 1961^{BM}] о санитарном состоянии реки судят по соотношению численности олигохет и других обитателей дна (т.е. численности всего бентоса, включая олигохет) – *индекс Гуднайта и Уитлея*. Ими использовались следующие оценки:

- река в хорошем состоянии – олигохет менее 60% от общего числа всех донных организмов,
- в сомнительном состоянии – 60%-80%,
- сильно загрязнена – более 80%.

Р. Цанер [R. Zahner, 1964^M] классическим индикатором органического загрязнения считает численность тубифицид и на примере Боденского озера разработал таблицу зависимости класса чистоты от обилия *Tubifex tubifex*, *Limnodrillus* sp. и их соотношения.

Э.А. Пареле совместно с О.Л. Качаловой [Гидробиологический режим..., 1981] в рамках разработки метода оценки загрязнения водотоков Латвии предложили два олигохетных индекса (*индекс Пареле*):

$$D_1 = \frac{\{\text{численность олигохет}\}}{\{\text{численность бентоса}\}} \quad \text{и} \quad D_2 = \frac{\{\text{численность тубифицид}\}}{\{\text{численность олигохет}\}} \quad (4.1)$$

и связали их градации (табл. 4.2) с зонами сапробности и классами качества воды – см. раздел 3.6 [Драчев, 1964] (с точностью до процентов D_1 – индекс Гуднайта и Уитлея). Коэффициент D_1 предложен для оценки быстро текущих рек с хорошей аэрацией, где развивается разнообразная донная фауна; коэффициент D_2 рекомендован для медленно текущих рек с неудовлетворительным кислородным режимом, где донная фауна однообразна и состоит почти полностью из олигохет.

Таблица 4.2

Взаимосвязь индекса Пареле с классами качества воды и зонами сапробности

Индекс Пареле D_1	Зона сапробности	Класс качества вод по С.М. Драчеву [1964]
0.01 – 0.16	Олигосапробная	Чистая
0.17 – 0.33	Олиго- β - мезосапробная	Условно чистая
0.34 – 0.50	β- мезосапробная	Слабо загрязненная
0.51 – 0.67	β - α - мезосапробная	Загрязненная
0.68 – 0.84	α- мезосапробная	Грязная
0.85 – 1.00	Полисапробная	Очень грязная

Для оценки состояния внутренних вод Европейского Севера В.И. Попченко [1987] предложил *информационный индекс сапробности олигохет*:

$$I_s = \frac{N_t + N_h + N_f}{N_o},$$

где N_t – средняя численность *Tubifex tubifex*; N_h – средняя численность *Limnodrillus hoffmeisteri*; N_f – средняя численность *Spirosperma ferox*; N_o – средняя численность всех олигохет в биотопе. Значения характеризуют загрязненность следующим образом: сильно загрязненные воды (0.9 – 1.0); загрязненные воды (0.5 – 0.89); слабо загрязненные воды (0.3 – 0.49); чистые и относительно чистые воды (меньше 0.3).

В то же время, доля олигохет является индикатором далеко не всех видов загрязнения. Так, обилие членистоногих при отсутствии олигохет может указывать на наличие ионов тяжелых металлов, тогда как обратная картина может свидетельствовать о наличии инсектицидов [Brinhuret, 1966; Aston, 1973^M].

В ряде методов используются данные об отдельных группах ракообразных [Hawkes, Davies, 1971^B; Кожова с соавт., 1979^B] и различных таксонов мейобентосных животных [Цалолихин, 1976^B; Курашов, 1980^B; Гурвич, Машина, 1988^B; Шевцова, 1988^B].

Не осталась без внимания исследователей и такая признанная группа биоиндикаторов загрязнения воды, как личинки и куколки хирономид. Индексы, основанные на учете личинок водных насекомых, более других подвержены ошибкам за счет особенностей сезонной динамики гидробионтов. Во время массового дружного вылета имаго насекомых из водоема величины этих индексов резко изменяются вне зависимости от степени загрязнения, поэтому соответствующие методики желательно применять только к пробам, собранным в одну и ту же фазу жизненного цикла насекомых.

Д.Л. Кинг и Р.С. Болл [King, Ball, 1964^M] для оценки санитарного состояния водоёма предложили *индекс загрязнения бытовыми и промышленными стоками*, значение которого

уменьшается при загрязнении:
$$i = \frac{\{\text{вес насекомых}\}}{\{\text{вес олигохет}\}}.$$

При оценке эвтрофирования Куйбышевского водохранилища в многолетнем ряду измерений использовались следующие соотношения [Zinchenko, 1992; Зинченко, Молодых, 1993]:

- суммарная численность хирономид *Chironomus* sp. (N_{Ch}) и *Procladius* sp. (N_{Pr}) к общей численности бентоса (N): $(N_{Ch} + N_{Pr}) / N$;
- численность мирных *Chironomus* sp. (N_{mCh}) и хищных *Procladius* sp. (N_{xPr}): N_{mCh} / N_{xPr} ;
- суммарная численность олигохет (N_o) и хирономид: N_o / N_{Ch} .

Определённое направленное изменение этих показателей интерпретируется как свидетельство интенсивности происходящего процесса эвтрофирования.

Индекс Е.В. Балушкиной [1987] основан на соотношении численности подсемейств хирономид:

$$K = (\alpha_t + 0.5 \alpha_{ch}) / \alpha_o, \quad (4.2)$$

где α_t , α_{ch} и α_o – смещенные относительные численности отдельных групп хирономид: соответственно, Tanypodinae (α_t), Chironomidae (α_{ch}), Orthocladiinae и Diamesinae (α_o); $\alpha = N + 10$, где N – относительная численность особей всех видов данного подсемейства в процентах от общей численности особей всех хирономид. Предлагается следующая связь индекса Балушкиной, который может варьироваться в диапазоне от 0.136 до 11.5, с градациями качества вод по Былинкиной-Драчеву (см: раздел 3.6):

<u>Индекс Балушкиной K</u>	<u>Класс качества вод</u>
0.136 – 1.08	Чистая
1.08 – 6.50	Умеренно загрязненная
6.50 – 9.0	Загрязненная
9.00 – 11.5	Грязная

Проблематику индексов этой группы лучше всего выразила автор одного из них – Е.В. Балушкина: «Основной недостаток индекса Гуднайта и Уитлея – его слабая чувствительность

вследствие полного пренебрежения к особенностям видового состава олигохет, существенно меняющемуся в зависимости от степени загрязнения. Лабильную фракцию олигохет составляют в основном виды рода *Nais*, чутко реагирующие на изменение концентрации органического вещества в воде, но не меняющие показателей своего обилия при загрязнении другими токсическими ингредиентами» [Балушкина, Финогенова, 1999].

Действительно, далеко не все виды малощетинковых червей могут рассматриваться как показатели загрязнения. Массовое развитие олигохет, наблюдаемое на загрязненных участках, происходит за счет одного-двух видов (обычно *Tubifex tubifex* и *Limnodrilus hoffmeisteri*) и сопровождается гибелью остальных видов. Поэтому показателем наличия загрязнения является не общая численность олигохет, или любой иной группы гидробионтов, а наличие доминантов, причем разнообразная фауна является показателем чистоты воды. В водоёмах с высокой концентрацией токсических веществ наблюдается отсутствие индикаторных групп, как, впрочем, и других организмов [Экологическое состояние..., 1997].

4.3. Оценка качества экосистемы по индексам видового разнообразия

Гипотезы, используемые для оценки биоразнообразия

Популяционная и видовая плотность сообществ гидробионтов может меняться во времени в зависимости от изменений факторов среды. Это может происходить как в ходе эволюционных процессов, протекающих в течение длительного времени, так и при антропогенном эвтрофировании и загрязнении водоемов, когда процессы изменения структуры экосистем протекают с большими скоростями. Сокращается число видов, возрастает доминирование отдельных видов, для которых характерны более короткие жизненные циклы, проявляется раннее наступление половозрелости, увеличение биомассы и продукции. Ю. Одум [1986] отмечает, что при эвтрофировании и загрязнении водоемов преимущества получают эврибионтные виды с *r*-стратегией; в то время как в олиготрофных условиях незагрязненных водоемов, где разнообразие высокое и доминирование менее резко выражено, напротив, большее значение приобретают стенобионтные виды с длительными циклами развития и *K*-стратегией.

Видовое разнообразие складывается из двух компонентов [Одум, 1986]:

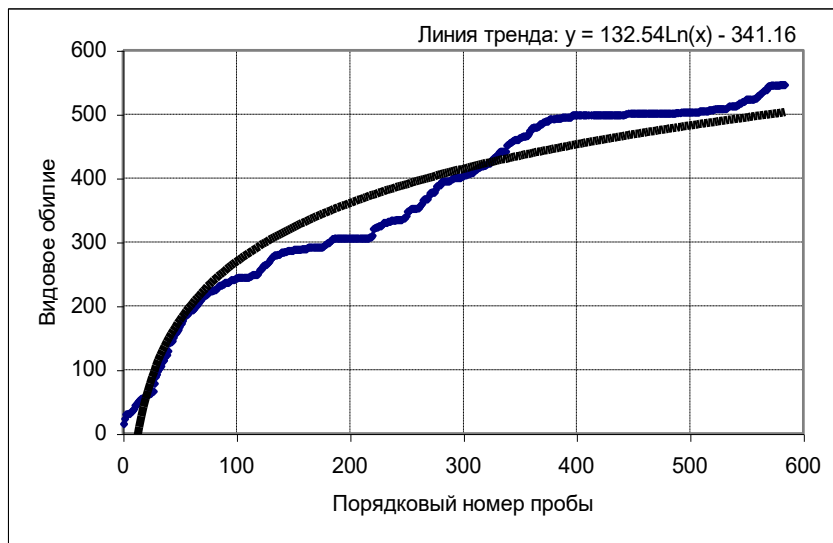
- *видового богатства*, или *плотности видов*, которое характеризуется общим числом имеющихся видов;
- *выравненности*, основанной на относительном обилии или другом показателе значимости вида и положении его в структуре доминирования.

Вряд ли следует слишком буквально понимать термин «имеющиеся виды» без соответствующего уточнения. «Точечные разнообразия, т.е. разнообразия проб, – писал Р. Маргалеф [1992], – взятых в точке, почти всегда бессмысленны... Так как организация, выраженная через разнообразие, развертывается в пространстве, измерения не имеют большого смысла, если они не представлены в виде спектра: разнообразие как функция пространства» (можно добавить, "и времени"). Пусть в каждой точке территории ("столбике" по Р. Маргалефу) для каждого вида определена вероятность его возможного появления (такая вероятность может быть существенно мала, но никогда не превращается в нуль). Тогда под *видовым богатством* можно понимать количество видов, вероятность появления которых в окрестностях *r* данной точки больше *a priori* заданного числа ϵ (ϵ – параметр отбора). Естественно, видовое богатство растет с увеличением *r* (см. рис. 4.1), однако этот рост асимптотически стремится к некоторому порогу насыщения, характерному для каждого региона.

Таким образом, один из главных компонентов биоразнообразия – видовое богатство или плотность видов – это просто общее число видов, которое в сравнительных целях иногда выражается как отношение числа видов к площади или числа видов к числу особей. Так, например, Р. Маргалеф [Margalef, 1958^{BM}], исходя из того, что число видов пропорционально логарифму изученной площади [Gleason, 1922^{M1}], и считая, что общее число особей пропорционально площади, предложил в качестве меры биоразнообразия *индекс видового богатства Маргалефа*:

$$d = (s - 1) / \ln N, \quad (4.3)$$

где *s* – число видов, *N* – число особей.



Общее видовое обилие
33 рек региона – 546 видов

Среднее видовое обилие
территориальных единиц:

- для реки – 52 вида (от 6 до 274)
- для створа – 22 вида (от 1 до 97)
- для пробы – 11 видов (от 1 до 41)

Рис. 4.1. "Открываемость" видов зообентоса по мере развития экспедиционных исследований малых рек Самарской области в 1991-2001 гг. (номер пробы выстроен в хронологическом порядке)

Е.Ф. Менхиникк [Menhinick, 1964^{БМ}] рассчитывал видовое богатство полевых насекомых по несколько другой формуле, используя в знаменателе функцию квадратного корня (*индекс Менхиникка*):

$$d_M = (s - 1) / (N)^{1/2} .$$

Виды, входящие в состав биоценоза, очень сильно различаются по своей значимости. Традиционно принято выделение следующей иерархии видов: *руководящие* (или "*доминантные*") виды; за ними следует группа "*субдоминантов*"; остальные же виды считаются *второстепенными*, среди которых отмечают *случайные* или *редкие*. Значение отдельных видов должно определяться тем, какую роль играют они в функционировании экосистемы или в продукционном процессе. Но при исследованиях водных сообществ установить истинную функциональную роль видов нелегко, если об их значении судить только по обилию, т.е. численности и биомассе.

При этом для анализа биоразнообразия и степени доминантности в разных ситуациях используют два традиционных подхода:

- сравнения, основанные на формах кривых относительного обилия или доминирования – разнообразия;
- сравнения, основанные на индексах разнообразия, представляющих собой отношения или другие математические выражения зависимости между числом видов и их значимостью.

Наилучший способ представить оба компонента разнообразия (т.е. богатство и выравнивание) – построить график, где по оси ординат в логарифмическом масштабе отложено число особей, биомасса или иной рассматриваемый показатель, а по оси *x* – ранжированная последовательность видов от наиболее до наименее обильного (см. рис. 4.2).

Полученная в 1965 г. кривая названа Р. Уиттекером [1980] «*кривой доминирования - разнообразия*», а Э. Пианкой [Pianka, 1978^Б] – «*кривой значимости видов*». Чем выше кривая и чем более она "уплощена", тем больше при данном числе видов их разнообразие. Считается, по форме этой кривой можно не только оценить видовую выравниваемость популяций, но и функциональную роль отдельных видов, их статус и биотический потенциал, т.е. все то, что достаточно расплывчато именуется «экологической нишей». Так, для кривых на рис. 4.2 предлагается следующее толкование (*S* – число видов в пробе):

- *прямая I* – каждый последующий вид занимает ровно половину доступного пространства ниши, что соответствует *гипотезе "перехвата" экологических ниш* или *геометрическому ряду И. Мотомуры* [I.Motomura] :

$$n(k) = n_1 * C_k^{(k-1)} ,$$

где $n(k)$ – значимость вида k в ряду от $k = 1$ (наиболее значимый вид) до $k = S$,
 $C_k^{(k-1)} = n(i) / n(i - 1)$;

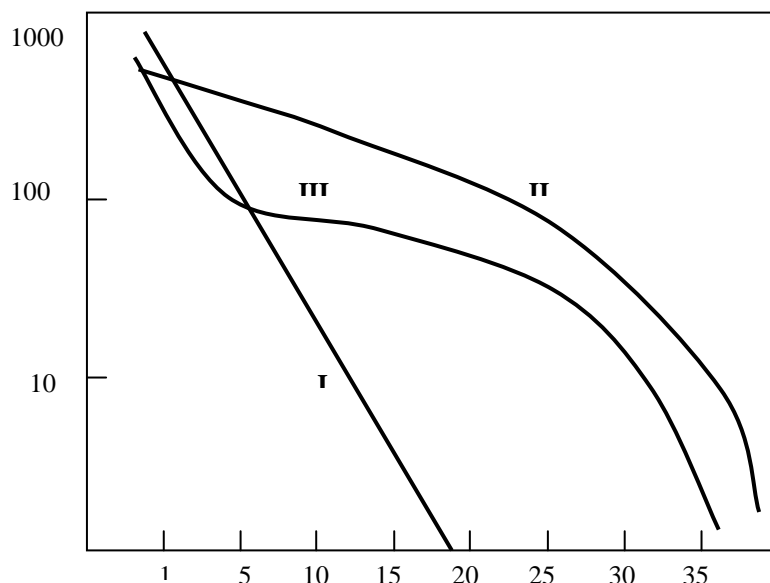


Рис.4.2. Форма кривых доминирования-разнообразия

- кривая II – ниши не перекрываются и их величина случайна; основывается на гипотезе случайных границ между экологическими нишами или модели "разломанного стержня" Р. Мак-Артура [MacArthur, 1957] :

$$n(k) = (N/S) * \sum_{i=1}^k [1 / (S - i + 1)] ,$$

где $N = \sum n(i)$ – сумма значимостей всех видов, $n(k)$ – значимость вида k в ряду от $i = 1$ (наименее значимый вид) до $i = S$ (наиболее значимый вид);

- кривая III – ниши многомерны и перекрываются, что соответствует гипотезе Ф. Престона [Preston, 1948^M] о логнормальном распределении оценок значимости отдельных видов в соответствии с формулами :

$$S = \sum S_r = S_0 * (\pi / a)^{0.5} ; \quad S_r = S_0 * \exp[-(aR)^2] ,$$

где S_r – число видов в октаве, удаленной на R октав от модального интервала, содержащего S_0 видов; $a \cong 0,2$ – постоянная, связанная со стандартным отклонением данного распределения.

Гипотеза Ф. Престона порождает большое семейство S-образных кривых и соответствует промежуточной ситуации между I и II, наиболее широко распространенной в природе.

Индексы доминирования

Рассмотрим некоторые используемые выражения для индексов, позволяющих выделить виды-доминанты. Например, для природных биоценозов принято использовать индекс доминирования И. Баллога [1958, цит. по: Руководство по гидробиологическому..., 1992]: $D_i = N_i / N_s$, где N_i – число особей i -го вида, N_s – общее число особей в биоценозе. К сожалению, этот идеальный по своей простоте индекс не отражает самого смысла доминирования, поскольку может принимать, например, значение 0.5 как при истинном доминировании, когда при нескольких сотнях видов один вид выражен половиной численности, так и в случае двух особей двух видов.

Другая формула индекса доминирования (или доминантности) предложена А. Ковнацки [Kownacki, 1971^M] на основе "коэффициента обилия" В.Ф. Паляя [1961] (индекс доминирования Паляя - Ковнацки):

$$D_i = 100 \cdot p_i \cdot N_i / N_s, \quad (4.4)$$

где p_i – встречаемость; $p_i = m_i / M$, m_i – число проб, в которых был найден вид i , M – общее число проб, N_i – число особей i -го вида, N_s – общее число особей в биоценозе. Для характеристики видового комплекса предлагается выделять доминанты в пределах $10 < D_i < 100$, субдоминанты – в пределах $1 < D_i < 10$, субдоминанты первого порядка – в пределах $0.1 < D_i < 1$ и второстепенные члены – $0.01 < D_i < 0.1$.

Отнесение входящих в состав биоценоза видов к доминантным группам только по их числовому обилию, как отмечал В.Ф. Ласточкин [1930, цит. по: Методика изучения..., 1975], было бы неправильным, так как более мелкие формы, как правило, наиболее многочисленны и всегда будут оказываться руководящими. Ряд исследователей [Руководство по гидробиологическому..., 1992] предлагают пользоваться для этого биомассой, т.е. весом на единицу площади дна, характеризующим массу живого органического вещества, которую образует вид, подставляя ее значения B_i и B_s в формулу (4.4) того же индекса доминирования по В.Ф. Палию и А. Ковнацкому:

$$D_i = 100 \cdot p_i \cdot B_i / B_s.$$

Но нетрудно увидеть, что вариационный размах натуральных значений биомассы (колеблющейся, в зависимости от размера животных, в сотни тысяч раз – от 1 мг до десятков и сотен грамм на 1 м^2) так же велик, как и для численности, в результате чего ранжирование видов по биомассе приводит к тому, что некоторые животные, например, моллюски, всегда будут иметь высокий приоритет, даже если на организменном уровне встречаются редко.

Целенаправленные функциональные преобразования над значениями численности или биомассы в отдельности (например, логарифмирование или извлечение квадратного корня) могут несколько улучшить общую картину соотношения доминирования, поскольку модифицируют характер статистического распределения, приближая его к нормальному. Например, для рассматриваемой задачи Ф.Д. Мордухай-Болтовским [Методика изучения..., 1975] предложена более работоспособная форма индекса доминирования:

$$D_i = p_i \sqrt{B_i / B_s},$$

где $p_i = m_i / M$ – встречаемость вида i , m_i – число проб, в которых был найден вид, M – общее число проб, B_i / B_s – удельная биомасса вида.

Еще один интересный вариант видится нам в использовании различных функциональных комбинаций из трех основополагающих показателей (встречаемость, численность, биомасса), что дает возможность получить целый класс индексов, часть из которых в рамках поставленной задачи могут оказаться состоятельными, несмещенными и эффективными оценками изучаемого явления. Примером такого обобщенного показателя является индекс плотности населения $\sqrt{N_i B_i}$, приведенный в энциклопедическом словаре И.И. Дедю [1990] без указания первоисточника и широко использованный нами в математических расчетах части 3. Например, использование плотности населения в формуле (4.4)

$$D_i = 100 \cdot p_i \cdot \sqrt{N_i B_i} / \sqrt{N_s B_s} \quad (4.5)$$

дает возможность выполнить ранжирование видов по доминантности с учетом обоих факторов – численности и биомассы.

Индексы доминантности, основанные на вероятности p_i , дают возможность ранжировать виды в пределах изучаемого объекта: сравнивать разные водоемы с использованием D_i можно только в том достаточно редком случае, когда количество измерений M на каждом из них примерно одинаково [Тодераш, 1984].

Энтропийный подход к оценке биоразнообразия

Степень сложности биологических систем может рассматриваться также в аспекте эквивалентности компонентов видовой структуры. При этом под разнообразием (однородностью, выравниваемостью) обычно понимают то свойство [Левич, 1980], которое отличает, например, сообщество из 12 особей трех видов с распределением (4, 4, 4) от сообщества (10, 1, 1). Стремление представить характер такого распределения, заданного большим набором численностей, в компактном виде одним числом приводит к обобщенным индексам, форма выражения которых традиционно связывается с мерами количества информации.

Сделаем предварительно краткий экскурс в основные понятия теории информации.

Рассмотрим два независимых опыта α и β , таких что любые сведения об исходе одного опыта никак не меняют вероятностей исхода другого. Пусть опыт α имеет r равновероятных исходов, а опыт β – l исходов. Рассмотрим сложный опыт $\alpha\beta$, состоящий в одновременном выполнении обоих опытов. *Степень неопределенности* $h(\alpha\beta)$ опыта $\alpha\beta$ равна сумме неопределенностей опытов α и β и, в соответствии с точкой зрения американского инженера-связиста Р. Хартли [Hartley, 1928, цит. по: А.М. Яглом, И.М. Яглом, 1973], может быть выражена следующим логарифмическим уравнением:

$$h(\alpha\beta) = h(\alpha) + h(\beta) = \log(r) + \log(l).$$

К. Шеннон [Shannon, 1947, рус. пер. 1963], развивая идеи Хартли, определил *энтропию* опыта H , как среднее значение неопределенности отдельных исходов:

- для случая двух опытов

$$H(\alpha\beta) = -(1/r) \log(1/r) - (1/l) \log(1/l)$$

- или в общем случае произвольного опыта с k исходами, имеющими вероятности P_1, P_2, \dots, P_k

$$H = - \sum_{i=1}^k P_i \cdot \log_2 P_i \quad (4.6)$$

Энтропия (или неопределенность исхода) равна нулю, если вероятность одного из событий равна 1, и принимает максимальное значение в случае равновероятных исходов. Действительно, если известно, что в водоеме присутствует только один вид гидробионтов, то какая-либо неопределенность по его извлечению отсутствует (т.е. $H = 0$). Неопределенность в предсказании результата отлова резко возрастает, если мы имеем в водоеме k видов с одинаковой численностью. Важным для биологии свойством энтропии является то, что значительным числом исходов, суммарная вероятность которых мала, при подсчете энтропии можно пренебречь.

Энтропию H , как меру неопределенности, нельзя отождествлять с *информацией* I (как, например, напряженность электрического поля нельзя отождествлять с разностью потенциалов). Но количество информации об опыте β , содержащейся в опыте α , равно

$$I(\alpha, \beta) = H(\beta) - H_\alpha(\beta), \quad (4.7)$$

где $H_\alpha(\beta)$ – условная энтропия опыта β после выполнения опыта α (т.е. снижение неопределенности β в результате выполнения α).



Клод Элвуд ШЕННОН
(C.E. Shannon, 1916 - 2001)
"отец" математической теории информации

Для дальнейшего изложения приведем также известную из школьной комбинаторики формулу для числа перестановок из предметов k различных типов, общее число которых $N = n_1 + n_2 + \dots + n_k$ (авторство формулы маячит в глубине XVII в. между Б. Паскалем и Я. Бернулли):

$$P(n_1, n_2, \dots, n_k) = \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_k!} \quad (4.8)$$

Опуская математические доказательства, приводимые А.М. Ягломом и И.М. Ягломом [1973], запишем равенство, в котором H – энтропия:

$$\frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_k!} \cong 2^{HN} \quad (4.9)$$

Трудно определить научный приоритет использования формулы (4.6) применительно к экосистемам. По сведениям И.И. Дедю [1990], Р. Мак-Артур уже в 1955 г. для оценки степени структурированности биоценозов использовал общее уравнение энтропии произвольной системы, опубликованное К. Шенноном в 1947 г. В 1957 г. Р. Маргалеф постулировал теоретическую концепцию, согласно которой разнообразие соответствует неопределенности (т.е. эн-

тропии) при случайном выборе видов из сообщества [Макрушин, 1974а]. В результате этих работ большое распространение и повсеместное признание получил индекс Шеннона H , иногда называемый *информационным индексом разнообразия К.Шеннона – У. Уивера*.

При расчете энтропии H по Шеннону считается, что каждая проба – случайная выборка из сообщества, а соотношение видов в пробе отражает их реальное соотношение в природе. В качестве оценок вероятностей независимых событий p_i для формулы (4.6) могут быть использованы следующие апостериорные отношения:

- *удельная численность* i -го вида, как частное от деления его численности N_i на общую численность всех видов, взятых для анализа: $p_i = N_i / \sum N_i$;
- *удельная биомасса* i -го вида, как частное от деления его биомассы B_i на общую биомассу всех видов в пробе: $p_i = B_i / \sum B_i$.

Чуть позже Р. Маргалеф [Margalef, 1958], ссылаясь на формулу Л. Больцмана для энтропии изолированных термодинамических систем, предложил другое выражение для индекса разнообразия:

$$H = \frac{1}{N} 1.443 \cdot \ln \frac{N!}{n_1! + n_2! + \dots + n_N!}, \quad (4.10)$$

где $N!$ – факториальная величина всех исследуемых видов, $n_i!$ – факториал от числа особей каждого вида. Сопоставляя формулы (4.6) и (4.9), нетрудно увидеть, что (4.10) – просто иная форма расчета энтропии по Шеннону, не нашедшая, впрочем, широкого применения, поскольку, например, факториал от 34 составляет 3×10^{38} и является последним факториалом, вычисляемым на современном компьютере без использования специальных приемов.

Использование индекса Шеннона H в экологии связано с рядом его действительных и мнимых свойств, которые нам представляется интересным обсудить:

1. *«Разнообразие в индексе Шеннона трактуется как приходящееся на одну особь количество информации, заключенное в распределениях по видам, особям, или энергии по трофическим связям»* [MacArthur, 1955; цит. по: Одум, 1986]. Как уже было рассмотрено выше, энтропия H отражает лишь один единственный аспект – *степень выравненности вероятностей* независимых событий (т.е. степень неопределенности встретить какой-либо вид). Сама по себе используемая оценка вероятности $p_i = N_i / \sum N_i$ полностью исключает учет в H каких-либо данных об абсолютном количестве организмов, либо их биомассе. Одинаковые значения p_i получаются как при больших (2000/10000), так и при малых (2/10) численностях особей, поэтому в интерпретациях индекса можно говорить только об *относительном* характере распределения информационных связей, вещества и энергии по отдельным таксонам, не затрагивая особь. И, наконец, сама по себе концепция *независимости* событий, заложенная в оценке энтропии, не предполагает оценку каких-либо структурных взаимодействий между таксонами, тем более трофических связей между ними.
2. *«Индекс Шеннона является мерой информации, содержащейся в экологической системе, подобно количеству информации в последовательности битовых сигналов в каналах связи»* [Маргалеф, 1992]. Аналогия с каналами связи, где каждый очередной бит уменьшает неопределенность H передаваемого сообщения и одновременно увеличивает количество принятой информации I , достаточно поверхностна, ибо никому еще не удалось разложить данные об экосистеме в последовательность *взаимообусловленных* квантов информации. К тому же, энтропия H не вполне тождественна информации, а, с сугубо гносеологических позиций, является ее антиподом. И, наконец, информация о внутренней организации экосистемы, объективно присутствующая в структурах организмов, потоках между этими структурами, петлях обратной связи и проч., далеко не сводится только к разнообразию (тем более, к популяционной эквивалентности). Поэтому этот индекс, как заметил А.Ф. Алимов [2000], *«скорее всего несет информационную нагрузку для исследователей, но не для экосистемы»*.
3. *«Индекс Шеннона суммирует большое количество информации о численности и видовом составе организмов, учитывая число видов и степень их доминирования»* [Алимов, 2000]. *«Существенным достоинством индекса разнообразия является его полная независимость от биоценотического сходства сравниваемых сообществ и возможность оценки степени разнообразия каждого ценоза в отдельности»* [Баканов, 2000а]. Действительно, существует прямая функциональная связь между H и числом видов в сообществе S – см. рис. 4.3. Если видовой

состав относительно невелик ($S < 30$), то на величину H преимущественно влияет значение количества видов, нежели характер эквитабельности числа особей. С увеличением $S > 60$ влияние числа видов на величину H существенно ослабевает. Параллельная зависимость индекса Шеннона от двух факторов биоразнообразия (видовой плотности и выравненности) является одновременно его достоинством и недостатком. Достоинство заключается в "комплексности" индекса, а недостаток – в том, что невозможно оценить по предъявленному значению, какой из этих двух факторов превалирует. Из сказанного вытекает практическое требование к корректности сравнения индексов Шеннона для различных биоценозов: размерность видового пространства сравниваемых структурных комплексов должно быть примерно одинаковой. Избежать этого можно, используя не все виды, найденные в пробе, а только некоторый "стандарт" из 10-15 преобладающих видов, составляющих приблизительно 90% общей численности или биомассы, так как именно они в конечном итоге определяют структуру и продуктивность сообщества [Баканов, 2000а].

Для элиминации влияния числа видов S Э. Пиелу [Pielou, 1966^M, 1975] предложила индекс выравненности экологических сообществ Пиелу:

$$H' = H / H_{max} = H / \log_2 (1/S),$$

который зависит только от равномерности распределения обилия по таксонам, поскольку представляет собой степень уклонения энтропии H от ее максимального значения $H_{max} = \log_2 (1/S)$ – см. кривую 1 на рис. 4.3.

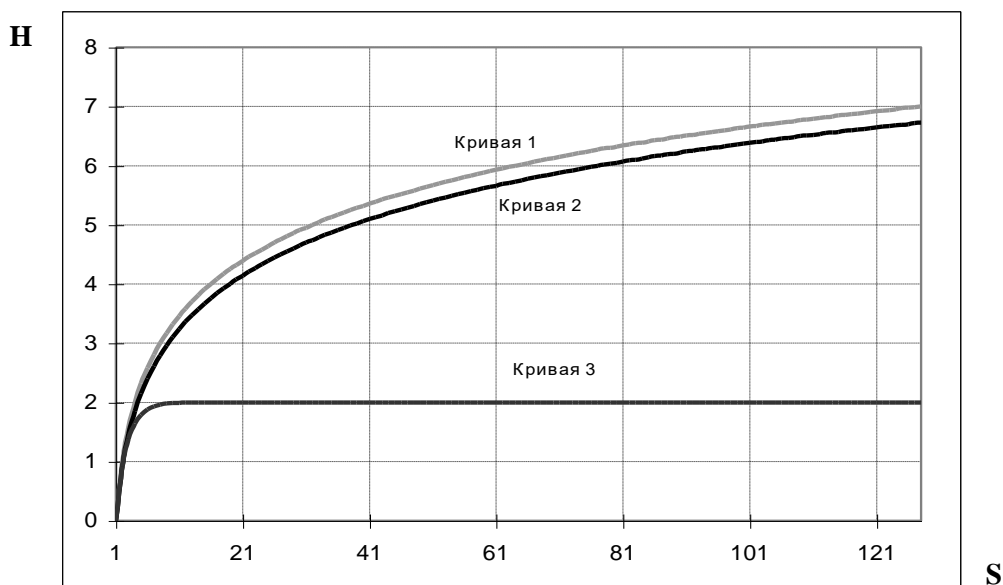


Рис. 4.3. Зависимость индекса Шеннона H от числа видов S (кривая 1 – график максимально возможных значений индекса - равномерное распределение численности по таксонам $\{1, 1, 1, 1 \dots\}$; кривая 2 – умеренное доминирование – заселенность таксонов в арифметической прогрессии $\{1, 2, 3, 4, \dots\}$; кривая 3 – сильное доминирование – заселенность таксонов в геометрической прогрессии $\{1, 2, 4, 8, \dots\}$)

4. «При вычислении индекса лучше оперировать не численностью видов, а биомассой, так как она полнее отражает разнообразие функциональных связей в общей энергетике сообщества. ...Главный недостаток индекса – малая чувствительность к редким видам» [Гиляров, 1969]. Понятия «лучше» или «хуже» являются в данном случае трудно формализуемой эвристической оценкой и полностью зависят от гипотезы биоразнообразия, принимаемой исследователем при расчете выравниваемых вероятностей p_i : будь то число особей, их масса или любая другая функция от тех или иных показателей. Можно предложить, например, следующую формулу для расчета $p_i = (N_i \cdot B_i)^{1/2} / \sum (N_i \cdot B_i)^{1/2}$, где $(N_i \cdot B_i)^{1/2}$ – индекс плотности населения [Дедю, 1990], которая будет гармонично сочетать оба фактора обилия. Для выделения редких видов, можно использовать любую, предварительно разработанную шкалу весовых коэффициентов α_i и рас-

считывать вероятности с учетом значимости отдельных таксонов $p_i = \alpha_i N_i / \sum \alpha_i N_i$. Возможны и иные конструкции оценок выравнивания.

5. «Значения этого индекса тесно связаны со многими другими показателями экосистем: а) соотношениями стено- и эврибионтных видов, пищевых потребностей хищных и нехищных животных в сообществах, б) содержанием органических веществ в воде и некоторыми другими абиотическими факторами, с) значениями биотического индекса Вудивисса, отражающего степень загрязнения вод, д) биомассой организмов и через нее с продуктивностью популяций» [Алимов, 2000]. Не подвергая сомнению конкретные выведенные статистические закономерности, следует только подчеркнуть их вероятностный характер. Поскольку экосистемы представляют собой типичные "размытые" множества, особое внимание должно уделяться всестороннему анализу значимости рассчитанных корреляций. В частности, вывод, сделанный А.М. Гиляровым [1969] об обратной зависимости индекса Шеннона от биомассы по отношению к планктонным сообществам справедлив не для всех типов водоемов и, тем более, не всегда применим к другим типам гидробионтов. Так, данные о низкой значимости статистической связи H с биомассой, продукцией и ассимиляцией опубликованы нами, например, для донных сообществ малых рек Среднего Поволжья [Экологическое состояние..., 1997].
6. «Достоинством индекса Шеннона является независимость от какого-либо гипотетического распределения» [Гиляров, 1969]. «Индекс почти не зависит от величины пробы и характеризуется нормальным распределением; это обстоятельство позволяет использовать обычные статистические методы для проверки значимости различий между средним» [Одум, 1986]. Энтропия H зависит только (!) от "величины пробы": числа анализируемых видов N и вероятностей p_i (а через них – от характера распределения численностей или биомасс видов). В главе 5 будет показано, что логарифмирование любых исходных гидробиологических показателей (B и N , в частности), почти всегда существенно приближает характер распределения результирующих значений к нормальному гауссовскому закону.
7. «Аналогия энтропийной функции с информационным индексом разнообразия поверхностна, поскольку в биологическом смысле однородность может трактоваться и как "порядок", и как "беспорядок"» [Свирижев, Логофет, 1978]. «Следует искать не абсолютный, а условный максимум как однородности, так и разнообразия, соответствующий устойчивому развитию экосистем. При этом биологически осмысленным ограничением может быть, например, баланс сохранения субстратно-энергетических факторов, потребляемых сообществом» [Левич, 1980]. Действительно, гипотеза о максимуме биоразнообразия в результате выравнивания плотностей популяций не соответствует представлениям о способе существования реальных экосистем: трудно представить себе устойчивое сообщество организмов, в котором каждый вид представлен одинаковой численностью или биомассой. В сообществах гидробионтов в результате эволюции образовались некоторые устоявшиеся соотношения численностей отдельных таксонов; например: в малых реках Самарской области на 1 особь Coleoptera в среднем обычно приходится 2 экз. Hemiptera, 3 экз. Bivalvia, 4 экз. Ephemeroptera, 8 экз. Chironomidae, 14 экз. Nematoda и 25 экз. Oligochaeta. Соотношения биомассы варьируется еще в большей степени: {1 : 3 : 10 : 50 : 400 : 2500 : 5000} для Coleoptera, Chironomidae, Oligochaeta, Bivalvia, Gastropoda, Unionidae и Dreissenidae, соответственно. Безусловно, под влиянием тех или иных факторов эти соотношения могут существенно меняться, но их объективная составляющая во многом определяется экологией, аллометрическими характеристиками особей отдельных видов, трофическими связями и проч. В любом случае, соотношении показателей обилия этих групп {1 : 1: ... : 1 : 1}, оптимальное в смысле индекса Шеннона, для любого гидробиолога означает не оптимум биоразнообразия экосистемы, а признак экологической катастрофы...
8. «Внутреннее разнообразие экологической системы зависит не только от числа видов, входящих в ее состав, но и от того, насколько эти виды полифункциональны. При расчете индексов разнообразия популяции, принципиально отличающиеся по степени своей экологической полифункциональности, полностью приравниваются друг к другу, как если бы они приносили одинаковый вклад во внутреннее разнообразие» [Абакумов, 1987]. Предельная ясность формулировки освобождает нас от дальнейших комментариев.

9. «Как бoльцмановская энтропия в статистической физике, так и информационная энтропия в теории информации имеют смысл лишь для ансамблей из слабо взаимодействующих частиц или каких-либо других объектов. Введение энтропийной меры для таких множеств вполне обосновано. Но как только мы имеем дело с системами, элементы которых сильно взаимодействуют между собой, энтропийная мера уже неудовлетворительна. А биологические сообщества, где конкурентные взаимоотношения наиболее сильно проявляются вблизи положения равновесия и вся структура которых в основном определяется не характеристиками присущими собственно виду, а характеристиками межвидовых взаимоотношений, представляют собой именно системы с сильными взаимодействиями» [Свирижев, 1976]. "Прозрачность" и этого высказывания также не требует комментариев.

Очень простой метод оценки разнообразия предложен Р. Макинтошем [McIntoch, 1973; цит. по: Миркин и др., 1989] (индекс разнообразия Макинтоша):

$$H_M = \frac{S}{\left\{ \sum_{i=1}^S n_i^2 \right\}^{1/2}},$$

где n_i – оценка значимости каждого вида i (численность или биомасса), S – общее число видов. Возведение в квадрат значимости вида, естественно, "дает преимущество" в оценке разнообразия доминирующим видам (еще раз подчеркнем, что этот индекс является прекрасной иллюстрацией «индексологии» – почему не в кубе? не в пятой степени? и вообще, какое отношение имеет среднеквадратическая численность к биоразнообразию?..).

Другой подход к оценке разнообразия основан на подсчете количества возможных связей между внутренними элементами экосистемы, обеспечивающих ее единство и функционирование. Эти связи имеют смысл числа степеней свободы внутривидовых и межвидовых взаимодействий. В качестве меры связности может быть использован индекс разнообразия К. Гайни - Е. Симпсона [C.Gini, 1912^M; Simpson, 1949; Миркин и др., 1989], больше известный как индекс Симпсона, который имеет вид:

$$C = \sum (n_i / N)^2 \quad \text{или} \quad C = \sum \left[\frac{n_i(n_i - 1)}{N(N - 1)} \right], \quad (4.11)$$

где n_i – оценка значимости каждого вида (численность или биомасса), N – сумма оценок значимостей. Поскольку при возведении в квадрат малых отношений n_i / N получаются очень малые величины, индекс Симпсона тем больше, чем сильнее доминирование одного или нескольких видов. Глубинный смысл индекса Симпсона выясняется, если принять во внимание, что знаменатель $N(N-1)/2$ означает число возможных пар особей независимо от их принадлежности к определенному таксону, а числитель $n(n-1)/2$ – число возможных пар особей одного таксона [Алимов, 2000].

Р. Фишер с соавторами [Fischer et al., 1943^M] нашел, что логарифмический ряд хорошо передает распределение видов по их численности, и предложил функцию α как меру разнообразия:

$$\alpha_m = (\ln N_m - \ln N_1) / m$$

где N_m – численность вида m в ряду видов, ранжированных по численности, N_1 – численность первого вида с наивысшей численностью, m – порядковый номер вида в ряду 1, 2, 3, ..., m .

Другим выражением для значимости вида n_r в ряду от наименее значимого ($i = 1$) к наиболее значимому ($i = S$) является формула Р. МакАртура [MacArthur, 1957]:

$$n_r = N * \frac{\sum_{i=1}^r (1/s - i + 1)}{s},$$

где N – сумма некоторых показателей обилия, по которым сравниваются виды, S – число видов.

А. Корбет и К. Вильямс [Corbet, Williams, 1973; цит. по: Василевич, 1972] предложили уравнение, связывающее число видов S с числом видов в биоценозе:

$$S = \alpha * \log(1 + N / \alpha),$$

где \log – Неперов логарифм, а параметр α предлагается как показатель разнообразия. Значение α возрастает по мере увеличения доли редких видов (с небольшой плотностью) в общем видовом пространстве биоценоза.

М. Хилл с соавт. [Hill et al., 1975] для оценки биоразнообразия предложил семейство средних степенных кривых, где S – число видов, p_i – оценки вероятности:

$$R(a) = \left[\sum_{i=1}^S p_i^a \right]^{1/(1-a)}. \quad (4.12)$$

Легко показать [Розенберг с соавт., 1999], что при разных значениях параметра a формулы (4.12) можно получить целый спектр индексов разнообразия, что свидетельствует об их "генетическом" родстве. Так, $R(0) = S$, $R(1) = f(H)$ – экспоненциальная версия индекса Шеннона, $R(2) = 1 / C$, где C – индекс Симпсона и т.д.

4.4. Классификация водоемов и биоценозов по сапробности

Показатели сапробности и методы их идентификации

Система сапробности – эта та часть гидроэкологии, которая претендует на быструю и емкую оценку типа водоема в зависимости от соотношения обилий отдельных видов индикаторных организмов. Изначально в используемую классификационную терминологию был заложен определенный понятийный дуализм. С одной стороны – это *классификация организмов* по их сопротивляемости загрязнению (органической нагрузке, недостатку кислорода, присутствию соединений сероводорода), поскольку:

сапробность (от греч. *sapros* — гнилой) – «это комплекс физиологических свойств данного организма, обуславливающий его способность развиваться в воде с тем или иным содержанием органических веществ, с той или иной степенью загрязнения» [БСЭ, URL].

С другой стороны, – *классификация водоемов* по сапробности прямого отношения к той или иной "физиологической способности отдельных видов организмов" не имеет – это типичное районирование водоемов по соотношению двух конкурирующих абиотических факторов: "концентрации органических веществ естественного (в основном, детритного) характера" и "концентрации растворенного кислорода". Поскольку у нас нет данных, что в основание этой классификации были положены какие-то количественные показатели (например, соотношение скоростей деструкции органического вещества, кМоль/час, по двум механизмам: аэробному и анаэробному), то эту классификацию следует считать *феноменологической*, т.е. основанной на некотором словесном описании. Основные признаки такой классификации по 4 классическим зонам сапробности, предложенным Р. Кольквитцем и М. Марссоном [Kolkwitz, Marsson, 1902; Долгов, Никитинский, 1927], приведены в табл. 4.3.

Сам по себе (несколько пенитенциарный) термин «зона» возник из того обстоятельства, что в одном и том же водоеме могут быть участки (зоны) с разной сапробностью. Чаще всего это является естественным свойством водоема, не связанным с антропогенным воздействием. Например, в прибрежной зоне у топких берегов обычно располагается α -мезосапробная зона – здесь активно идут естественные процессы старения водоема, связанные с его зарастанием. Пробы воды, взятые с наиболее глубоких участков, дают нередко характерную полисапробную картину. Весь же водоем в целом с учетом характеристики разных жизненных форм, по субъективному мнению эксперта-гидробиолога, может быть охарактеризован, как переходный от β - к α -мезосапробному типу (впрочем, другой, не менее квалифицированный гидробиолог может сделать несовпадающую оценку). Таково свойство любых феноменологических классификаций: давать характеристики некоторому целому объекту, пользуясь только свойствами отдельных его частей (с этих позиций, например, окрас серой мыши совпадает со среднестатистическим окрасом черно-белой зебры).

Другим термином, связанным с системой сапробности, является «ступень», выведенная из феномена процессов самоочищения, являющихся неотъемлемой частью материально-энергетического баланса. Органические вещества, попадающие в водоем, разлагаются (преимущественно бактериями) на воду, углекислоту и минеральные составные части, служащие, в конце концов, питательными веществами для организмов более высокого порядка.

Таблица 4.3

Основные феноменологические признаки зон сапробности

Зона	Баланс кислорода и органического вещества	Преобладающие виды гидробионтов
Олигосапробная зона	<ul style="list-style-type: none"> - Практически чистые водоемы: цветения не бывает, содержание кислорода и углекислоты не колеблется. - На дне мало детрита, автотрофных организмов и бентосных животных (червей, моллюсков, личинок хирономид). 	<p>Встречаются водоросли <i>Melosira itallica</i>, <i>Draparnaldia glomerata</i> и <i>Draparnaldia plumosa</i>, колловратка <i>Notholka longispina</i>, ветвистоусые рачки <i>Daphnia longispina</i> и <i>Bythotrephes longimanus</i>, личинки поденок, веснянок, рыбы стерлядь, голяян, форель.</p>
β-мезосапробная зона	<ul style="list-style-type: none"> - Содержание кислорода и углекислоты колеблется в зависимости от времени суток: днем избыток кислорода, дефицит углекислоты; ночью – наоборот. - Нет нестойких органических веществ, произошла полная минерализация. 	<ul style="list-style-type: none"> - Много организмов с автотрофным питанием, высокое биоразнообразие, но численность и биомасса невелика. - Наблюдается цветение воды, так как сильно развит фитопланктон. Сапрофитов - тысячи клеток в 1 мл, и резко увеличивается их количество в период от-

	<ul style="list-style-type: none"> - Ил желтый, идут окислительные процессы, много детрита. 	<ul style="list-style-type: none"> мириания растений. - Встречаются: диатомовые водоросли <i>Melosira varians</i>, <i>Diatoma</i>, <i>Navicula</i>; зеленые <i>Cosmarium</i>, <i>Botrytis</i>, <i>Spirogira crassa</i>, <i>Cladophora</i>; много протококковых водорослей. Впервые появляется роголистник <i>Ceratophyllum demersum</i>. Много корненожек, солнечников, червей, моллюсков, личинок хирономид, появляются мшанки. Встречаются ракообразные и рыбы.
α-мезо-сапробная зона	<ul style="list-style-type: none"> - Протекают окислительно – восстановительные процессы, начинается аэробный распад органических веществ, образуется аммиак, углекислота; - Кислорода мало, но сероводорода и метана нет. - БПК₅ составляет десятки миллиграмм в литре. - Железо находится в окисной и закисной формах. - Ил серого цвета и в нем содержатся организмы, приспособленные к недостатку кислорода и высокому содержанию углекислоты. 	<ul style="list-style-type: none"> - Преобладают растительные организмы с гетеротрофным и миксотрофным питанием. - Количество сапрофитных бактерий определяется десятками и сотнями тысяч в 1 мл. - Отдельные организмы развиваются в массе: бактериальные зооглеи, нитчатые бактерии, грибы, из водорослей – осциллятории, стигеоклонии, хламидомонасы, эвглены. - Встречаются в массе сидячие инфузории (<i>Carchesium</i>), коловратки (<i>Brachionus</i>), много окрашенных и бесцветных жгутиковых. В илах много тубифицид (олигохеты) и личинок хирономид.
Поли-сапробная зона	<ul style="list-style-type: none"> - Дефицит кислорода: он поступает в поверхностный слой только за счет атмосферной аэрации и полностью расходуется на окисление. - В воде содержится значительное количество нестойких органических веществ и продуктов их анаэробного распада, в основном, белкового происхождения, а также сероводород и метан. - Процессы фотосинтеза угнетены. На дне кислорода нет, много детрита, идут восстановительные процессы, железо присутствует в форме FeS, ил черный с запахом H₂S. 	<ul style="list-style-type: none"> - Очень много сапрофитной микрофлоры. - Хорошо развиты гетеротрофные организмы: нитчатые бактерии (<i>Sphaerotilus</i>), серные бактерии (<i>Beggiatoa</i>, <i>Thiothrix</i>), бактериальные зооглеи (<i>Zoogloea ramigera</i>), простейшие - инфузории (<i>Paramecium putrinum</i>, <i>Vorticella putrina</i>), бесцветные жгутиковые, олигохеты <i>Tubifex tubifex</i>, водоросль <i>Polytoma uvella</i>.

Примечание: греч. *oligos* – немногий, *mesos* – средний, *poly* – многий.

Фазы процесса самоочищения следуют в проточной воде во времени и в пространстве друг за другом, характеризуясь различным составом биоценозов, через последовательные ступени от анаэробного гниения полисапробной зоны к первоначальной чистоте олигосапробной зоны. Между ними α–мезасапробность выражает нарастание аэробных механизмов деструкции, а β–мезасапробность – завершение этого процесса, свидетельствуя о минерализации.

Для каждой зоны сапробности можно выделить тесно связанное с ней подмножество видов гидробионтов, которые считаются ее индикаторами. Именно это обстоятельство породило иллюзию того, что в основании сапробиологической классификации водоемов лежат именно "биологические" факторы, а не механизмы деструкции органического вещества. Считается [Абакумов с соавт., 1981], что именно по соотношению индикаторных организмов достигается более быстрая, точная и дешевая классификация водоема, по сравнению, например, с методами химического анализа. На практике же, чаще всего, применяется обратный подход: зоны сапробности оцениваются на основании опыта исследователя или с использованием инструментальных методов контроля, а найденные индикаторные виды лишь иллюстративно подтверждают уже сделанный вывод.

Как отмечалось в разделе 3.6, О.П. Оксуюк и В.Н. Жукинский в своих классификационных таблицах (табл. 3.17) соотнесли две шкалы: сапробности и трофности. Если под сапробностью понимается интенсивность органического *распада*, то трофность означает интенсивность органического *синтеза*. В природе оба процесса – органический синтез и распад – существуют параллельно и состоят друг с другом в многократном взаимодействии, что позволяет говорить об аналогии ступеней сапробности и трофики: "олигосапробность – олиготрофия", "β-мезосапробность – мезотрофия", "α–мезасапробность – эвтрофия" и "полисапробность – гипертрофия". Эта аналогия привлекательна тем, что создает предпосылку к устранению одной из классификаций, как ненужного дублирующего звена. В худших конкурентных условиях находится система сапробности, как

основанная на весьма "размытых" разделяющих факторах, когда как классификация по трофике жестко связана с концентрациями биогенных элементов. В то же время, ряд исследователей подчеркивает неполное совпадение форм трофики и сапробности, особенно в мезосапробных зонах и для непроточных водоемов.

Система Кольквитца–Марссона была разработана применительно к условиям загрязнения вод средней Европы в начале века. В настоящее время характер и степень загрязнения водоемов изменились, в основном за счет интенсификации антропогенного воздействия. Это явилось причиной расширения "классической" классификации в двух основных направлениях:

- появление новых зон "чище" олигосапробной и "грязнее" полисапробной;
- выделение дополнительных зон на принципиально новой классификационной основе.

Наиболее широкая ревизия "классической" системы была выполнена В. Сладечком [Sládeček, 1965, 1967^M], который включил в классификацию абиотические зоны, а внутри полисапробной выделил три зоны – изосапробную (преобладание цилиат над флагеллятами), метасапробную (преобладание флагеллят над цилиатами) и гиперсапробную (отсутствие простейших при развитии бактерий и грибов). Наконец, была сделана методологически решительная попытка [Sládeček, 1969^M] сравнения некоторых бактериологических и химических показателей с отдельными ступенями сапробности и предложена общая "биологическая" схема качества вод (табл. 4.4).

К системе Сладечека, в силу того, что некоторые выделенные им зоны "не поддаются биологической характеристике", наблюдается весьма критическое отношение (особенно в немецкоязычных странах): *«Самым решительным возражением против номенклатуры, представленной Сладечком, является то, что она представляет систему, которая является биологической только потому, что включает ступени "старой" системы сапробности Кольквитца и Марссона»* [Kaspers, 1977^M]. На наш взгляд, это отношение – не более чем проявление "терминологической войны", вызванной большим понятийным люфтом слова «сапробность», не вполне осторожно использованного В. Сладечком в своей, в целом достаточно полной и убедительной, хотя и не во всем аккуратной классификации.

Все системы сапробности учитывают фактически только нетоксичные органические загрязнения, которые влияют на организмы в первую очередь через изменение кислородного режима. Для учета влияния токсических органических и неорганических соединений делаются попытки разработать шкалы токсобности и затем объединить их со шкалами сапробности в единую шкалу сапротоксобности, причем существуют противоположные мнения о возможности такого объединения.

В.А. Алексеев [1984б] отмечает наличие единой неспецифической реакции организмов в филогенезе на любое внешнее воздействие и считает предложенную им шкалу макробеспозвоночных индикаторов универсальной не только для различных видов антропогенного загрязнения вод, но и для всего комплекса повреждающих факторов в целом. По мнению Л.П. Брагинского [1981], *«...сейчас можно в общем виде утверждать, что токсобность гидробионтов в целом соответствует их сапробности и что виды, устойчивые к органическому загрязнению, в целом устойчивы и к загрязнениям токсическим».*

Таблица 4.4

Ориентировочное сравнение некоторых бактериологических и химических показателей с отдельными ступенями сапробности по В. Сладечку [1967^M, 1969^M]

Категория вод	Степень сапробности	Индекс сапробности	Психрофильные бактерии, в мл	Кол-во бактерий	Концентрация, в мг/л			Специфические вещества и показатели
					БПК ₅	O ₂	H ₂ S	
Катаробная	Катаробность		< 5·10 ²		0	Разное	0	Остаточный хлор
Лимносапробная	Ксеносапробность	0 – 0.5	10 ³	10 ⁴	1	> 8	0	
	Олигосапробность	0.51 – 1.5	10 ⁴	5·10 ⁴	2.5	> 6	0	

	β-мезоса-пробность	1.51 – 2.5	5·10 ⁴	10 ⁵	5	> 4	0	
	α-мезоса-пробность	2.51 – 3.5	25·10 ⁴	10 ⁶	10	> 2	0	
	Полиса-пробность	3.51 – 4.5	2·10 ⁶	3·10 ⁷	50	> 0.5	Следы	Eh < 200 mV
Эуса-пробная	Изосапробность	4.51 – 5.5	10 ⁷	3·10 ⁹	400	Следы	< 1	Eh от 50 mV до 200 mV
	Метаса-пробность	5.51 – 6.5	10 ⁸	10 ¹⁰	700	0	< 100	Eh < 50 mV
	Гиперса-пробность	6.51 – 7.5	10 ⁹	10 ⁶	2000	0	< 10	Птомаины
	Ультраса-пробность	7.51 – 8.5	10	0	120000	0	0	
Транс-сапробная	Антиса-пробность		0		0	Разное	0	Токсические вещества
	Радиоса-пробность		Разное		Разное	Разное	0	Радиоактивные вещества
	Криптоса-пробность		Разное		Разное	Разное	0	Физические факторы

В 1947 г. для вод, загрязненных токсическими стоками, был предложен термин «антисапробная зона» [Z. Cygus^M]. В 1973 г. Л.А. Лесниковым было выделено 4 зоны: олиго-, α-мезо-, β-мезо- и политоксичная. Эта система противопоставляет загрязняющие вещества, имеющие аналогию по их действию в природе (органические вещества, биогенные соли, хлориды и сульфаты щелочных и щелочноземельных металлов), веществам, в природе не встречающимся. В 1985 г. те же зоны берет за основу в своей классификации Л.П. Брагинский (см. раздел 3.6).

В.И. Жадиным [1964] было предложено экспериментально обосновать и параллельно использовать сразу три шкалы индикаторных организмов: «Если для сапробных организмов, характерна реакция на гниющие органические вещества, то появление в воде токсических веществ (минеральных или органических ингредиентов) создает обстановку отравления организмов, не имеющих себе аналогов при органических источниках загрязнения... Поэтому необходимо принять и теоретически обосновать три шкалы степеней загрязнения и соответственно три шкалы показателей загрязнения: 1) шкалу сапробности (по Р. Кольквитцу и М. Марссону), 2) токсобности... и 3) сапротоксобности... Под токсобностью, – указывал далее Жадин, – мы понимаем свойство организмов существовать в водах, содержащих то или иное количество токсических веществ минеральной или органической природы, и способных использовать часть этих веществ себе в пищу или сорбировать на своей поверхности или внутри тела. В зависимости от степени загрязнения водоема токсичными веществами можно различать зоны токсобности: политоксобную, мезотоксобную и олиготоксобную, заселяемые организмами, выносящими соответственно сильную, среднюю и слабую степени токсического загрязнения водоема... В основу деления организмов по степени токсобности должны быть положены экспериментальные и полевые исследования в области водной токсикологии» (подчеркнуто нами).

Наиболее широко в России применяется система сапротоксобности, разработанная для водоемов и водотоков Кольского Севера В.А. Яковлевым [1984, 1988, 1998]. Она учитывает характер загрязнений, вносимых разнопрофильными (в первую очередь, горнодобывающими) предприятиями региона. Составлен список видов-индикаторов сапротоксобности и отдельно список видов-индикаторов закисления водоемов [Яковлев, 1984, 1988]. Индикаторное значение видов устанавливалось, с одной стороны, на основе индикации сапробности (т.е. органического загрязнения), с другой стороны – на высокой чувствительности отдельных видов животных к различного рода токсическим веществам. Предложенные методы рекомендованы и нашли свое широкое применение на водоемах Северо-Запада России как самостоятельно, так и в составе интегрального показателя Е.В. Балущкиной [1997].

Поиск новых форм классификаций водоемов, либо расширение классической системы имеют под собой серьезное фактологическое основание – в условиях смешанного загрязнения применение систем сапробности чрезвычайно затруднено в связи с изменением индикаторной значимости отдельных видов в присутствии токсических веществ. Однако, специфическую и, во многом, обоснованную негативную реакцию, типа "Причем же тут сапробность?" вызывают использованные новообразованные словоформы «токсобность» и «сапротоксобность».

Во-первых, гидрохимические показатели с большим трудом соотносимы с комплексными биологическими реакциями, т.к. химический анализ все же исследует *свойства воды*, в то время, как сапробиологический анализ характеризует *водоем в целом*. На структуру и функциональные внутрисистемные связи водного сообщества влияют не только (вернее, не столько) химические параметры, сколько физико-географические особенности водоема, не описываемые ни прямо, ни косвенно результатами химического анализа. В частности, вслед за В. Сладечком, многие авторы приводили результаты своего "тарирования" зон сапробности относительно предельных значений химических и бактериологических показателей. Проведенный анализ показал, что граничные значения зон в версиях различных авторов по некоторым компонентам могут отличаться в десятки раз [Брагинский, 1985].

Во-вторых, как было показано в главе 3, не существует "токсичности вообще" (а следовательно, и "токсобности вообще"), а существуют сотни и тысячи химических веществ, попадающих в природные водоемы и обладающих различным и глубоко специфическим механизмом вредного действия на живые организмы. Это отмечал еще Ю. Одум [1975], когда формулировал положения, дополняющие принцип Либиха – Шелфорда: *«организмы могут иметь широкий диапазон толерантности в отношении одного фактора и узкий в отношении другого»*. Имеются многочисленные полевые и экспериментальные доказательства того, что даже простейшие организмы, устойчивые к одному виду загрязнения или фактору среды, не обязательно будут устойчивыми по отношению к другим факторам [Хокс, 1977^b]. Большинство исследователей полагает, что индикаторные организмы не могут быть одинаково чувствительными ко всем типам загрязнения: биогенными веществами, нефтепродуктами, тяжелыми металлами, детергентами, пестицидами и т.п. [Washington, 1984^b]. Л.П. Брагинский [1985] приходит к выводу, что *«принципиальные различия между "обычным" органическим загрязнением и токсическим не позволяют строить систему классификации токсичных вод как простой аналог системы сапробности, основанный на учете способности организмов существовать в токсичной среде, поскольку в такой среде большинство гидробионтов вымирает. Видов, предпочитающих токсические среды (особенно при загрязнении ксенобиотиками), в отличие от сапробных, в природе не существует»*. Таким образом, речь может идти только об определенной степени резистентности отдельных видов к отдельным типам токсиантов.

В-третьих, даже в условиях четырех зон для выяснения вопроса, какая сапробная валентность подходит отдельным видам, никаких точных ориентиров не существует. Иногда один и тот же вид животных разными авторами характеризуется в диапазоне от олиго- до полисапробного [Полищук с соавт., 1984^b]. Выделение же зон, аналогичных сапробным, по каждому отдельному химическому компоненту (а в идеале – и для различных комбинаций ингредиентов) приведет к тому, что систем классификации будет никак не меньше, чем самих гидробиологов. В конечном итоге, все больше сторонников окажется у другого крайнего мнения: *"Тут вообще нет никакой системы"*.

И, наконец, апологией здравого смысла можно считать фразу *«Претензия на точность находится в вопиющем противоречии с основами, а именно, с точностью видового диагноза, количественным учетом наличности и экологической классификацией принятых для вычисления индикаторных видов»* [Kaspers, 1977^M].

Оценка зон сапробности по показательным организмам.

Р. Кольквитц и М. Марссон были не только пионерами в создании системы показательных организмов для оценки степени сапробности вод, но и дали списки видов-индикаторов, характерных для каждой из зон [Kolkwitz, Marsson, 1908^M, 1909^M]. В дальнейшем, в течении всего XX-го века, накапливалась библиография, расширяющая и уточняющая таблицы видовых коэффициентов сапробности.

Г.И. Долгов и Я.Я. Никитинский [1926^M, 1927], обобщив опыт отечественных и зарубежных исследователей, внесли некоторые изменения в списки Кольквитца–Марссона. Эти списки в

сокращенном виде приводят также В.И. Жадин и А.Г. Родина [1950^М]. Х. Либман [Liebmann, 1951^М, 1962^М] провёл ревизию системы Кольквитца–Марссона и опубликовал перечень показательных видов с описанием экологических условий, в которых эти виды встречаются.

В имеющейся библиографии видное место занимает основополагающая работа В. Сладечека [1973], содержащая наиболее полный список, включающий около 2000 видов и обобщивший результаты исследований С. Обра [Obr, 1956^М], Х. Диттмара [Dittmar, 1959^М], М. Зелинки, П. Марвана и Ф. Кубичека [Zelinka et al., 1959^М; Zelinka, Marvan, 1961^М; Zelinka, Sladecsek, 1964^М], А. Сладечковой [Sladeczkova, Sladecsek, 1966^М], А.Н. Смирновой [1965^М], Г. Бикка и С. Кунце [Bick, Kunze, 1971^М] и других исследователей. Варианты списков видов-индикаторов даны в сборниках, изданных в ГДР и СЭВ [Ausgewalte, 1972^М; Унифицированные методы..., 1977], указателе А.В. Макрушина [1974] и др. Дополнения и видоизменения систем индикаторов сапробности вод предлагаются в работах Л.А. Кутиковой [1976], В.Н. Никулиной [1976], Т.В. Хлебович [1976], Н.П. Финогеновой [1976], А.Г. Охапкина и Г.В. Кузьмина [1978], Е.В. Пастуховой [1978], П.А. Цимдиня [1979], И.К. Тодераша [1984], Е.В. Балуткиной [1987].

Результаты биологического анализа, представленные в форме списков индикаторов, всегда, в большем или меньшем количестве, содержат виды, относимые к разным зонам сапробности, что осложняет однозначную оценку качества вод. Для преодоления этого затруднения предложены методы, позволяющие оценить среднюю сапробность биоценоза и облегчающие понимание результатов биологического анализа.

Мем № 23: *«Следует отметить и то, что индексы сапробности описывают степень загрязнения среды лишь в качественных категориях. Правда, внешне индексы выглядят количественными характеристиками, но это достигается лишь путем обозначения качественных состояний условными величинами, которые трудно интерпретируются при математическом моделировании»* А.С. Константинов [1981].

Графо-аналитический метод Г. Кнеппе

Метод представления результатов биологического анализа в графической форме предложил Г. Кнепп [Knorr, 1954^М, 1955^М]. Количество встреченных в пробе особой видов-индикаторов системы Кольквитца–Марссона оценивается Г. Кнеппом по семибалльной системе: 1 - единично, 2 - мало, 3 - от мало до средне, 4 - средне, 5 - от средне до много, 6 - много и 7 - массово. Раздельно подсчитываются суммы баллов олиго-, β -мезо-, α -мезо- и полисапробных видов. Найденные суммы откладываются на вертикальной оси, причем суммы баллов олиго- и β -мезосапробов принимаются за положительные, а α -мезо- и полисапробов – за отрицательные величины. На горизонтальной оси откладывается расстояние между станциями. В результате соединения соответствующих точек прямыми линиями получается фигура (см. рис. 4.4), состоящая из 4 частей, которая показывает для каждого створа обследованной реки соотношение видов-индикаторов.

На графике легко может быть получена кривая "среднего балла", соединяющая точки, соответствующие центрам тяжести фрагментов фигуры и показывающая, по мнению Кнеппа, к какой ступени сапробности следует отнести тот или иной участок реки. Согласно *принципу псевдокомпенсации* (см. раздел 1.5) средний балл по Кнеппу с большой вероятностью гарантирует отнесение практически любой реки к одной из двух мезосапробных зон.

Рис.4.4. Пример диаграммы Г. Кнеппе – биологический разрез качества



воды р. Майн в июле 1954 г.

Г. Кнепп рекомендует для углубленного анализа изменения качества воды по участкам водоемов использовать графики двух индексов, выражающих относительную долю видов индикаторов, причисляемых к двум смежным зонам сапробности:

- *Индекс относительной чистоты* = $100 \Sigma (o + \beta) / \Sigma (o + \beta + \alpha + p)$;
- *Индекс относительной загрязненности* = $100 \Sigma (\alpha + p) / \Sigma (o + \beta + \alpha + p)$,

где o , β , α , p – баллы встречаемости олиго-, β-мезо-, α-мезо- и полисапробных видов.

Система координат С. Головина [Golowin, 1968^M]

Этот метод основан на векторном способе нахождения средней сапробности обследуемой пробы с помощью специальной диаграммы, условно названной автором «системой координат» (см. рис. 4.5). Диаграмма представляет собой полуокружность, на которой каждой зоне сапробности отводится сектор размером $\pi/4$ (негласно предполагается, что разные зоны сапробности равны между собой). При этом диапазоны угловых координат и биссектрисы секторов для каждой зоны сапробности имеют следующие значения:

<u>Зона сапробности</u>	<u>Угол сектора</u>	<u>Угол биссектрисы</u>
Полисапробная зона	От 0 до $\pi/4$	$\pi/8$
α-мезосапробная зона	От $\pi/4$ до $\pi/2$	$3/8\pi$
β-мезосапробная зона	От $\pi/2$ до $3/4\pi$	$5/8\pi$
Олигосапробная зона	От $3/4\pi$ до π	$7/8\pi$

По методу Головина абсолютное количество особей видов-индикаторов разных зон сапробности, найденное в 1 л воды, наносится на биссектрису соответствующего сектора таким образом, чтобы длины всех векторов были бы пропорциональны численностям каждого класса. Полученные на осях сапробностей отрезки складываются по правилу сложения векторов и находится угол наклона ϕ среднего вектора S_{res} , показывающий, к какой ступени сапробности следует отнести данную пробу.

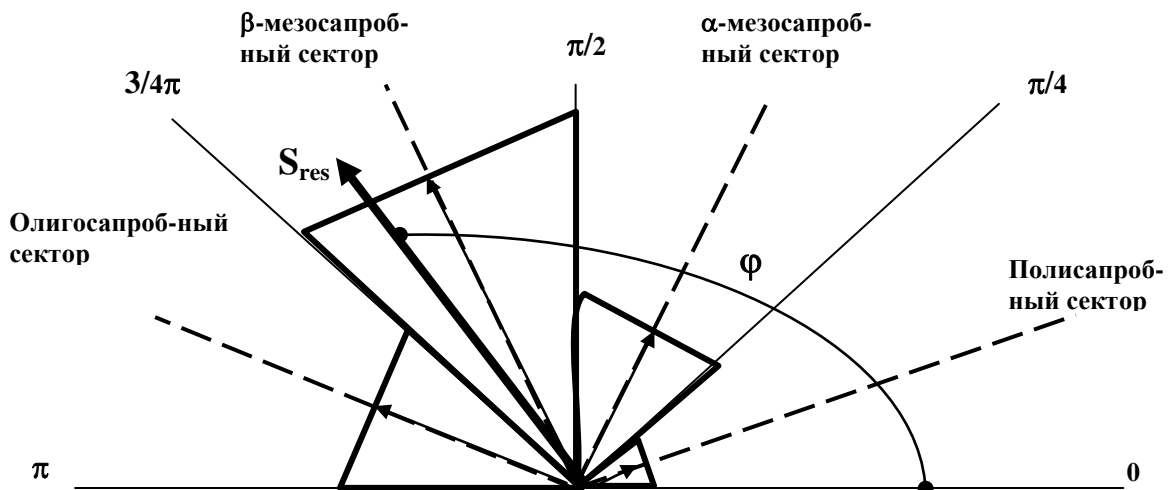


Рис. 4.5. Графическое изображение "системы координат" осей и границ сапробного спектра по С. Головину

Само по себе графическое сложение векторов путем соотношения площадей равнобедренных треугольников, относящихся к разным ступеням сапробности, представляет собой достаточно кропотливую работу, для проведения которой С. Головин приводит специальную расчетную таблицу.

Наш комментарий. Эту работу можно вполне облегчить, если воспользоваться аналитическим выражением для сложения векторов, известным из начального курса высшей математики, которое легко преобразуется к следующей простой формуле:

$$\operatorname{tg}(\varphi) = \frac{(h_p + h_o) \cdot \sin(\pi/8) + (h_\beta + h_\alpha) \cdot \cos(\pi/8)}{(h_p - h_o) \cdot \cos(\pi/8) + (h_\beta + h_\alpha) \cdot \sin(\pi/8)}, \quad (4.13)$$

где $h_p, h_\beta, h_\alpha, h_o$ – численности организмов соответствующих зон сапробности. Для примера, представленного на рис. 4.5, при $h_p = 14, h_\beta = 34, h_\alpha = 70, h_o = 45$ имеем:

$$\operatorname{tg}(\varphi) = \frac{(14 + 45) \cdot 0.383 + (34 + 70) \cdot 0.924}{(14 - 45) \cdot 0.924 + (34 - 70) \cdot 0.383} = -2.798$$

Отсюда $\varphi = 0.61\pi = 110^\circ$, что согласно приведенным выше диапазонам соответствует β -мезосапробной зоне.

В. Сладечек видоизменил метод С. Головина применительно к своей биологической схеме качества вод, представленной в табл. 4.4, в результате чего 180° делятся не на 4, а на 9 ступеней сапробности.

Индекс сапробности по Р. Пантле и Г. Букку [Pantle, BUCK, 1955^M; Pantle, 1956^M].

Для количественной оценки способности гидробионта обитать в воде с тем или иным содержанием органических веществ было введено некоторое условное численное значение – *индикаторная значимость* s_i (иной термин – *индивидуальный индекс сапробности i-го вида*). Выражаясь менее образно, Р. Пантле и Г. Букк, основываясь на обширных к тому времени списках показательных видов по сапробности, предложили заменить греческий термин на соответствующее число: $s_i = \{1 \text{ для олигосапробов, } 2 \text{ для } \beta\text{-мезосапробов, } 3 \text{ для } \alpha\text{-мезосапробов, } 4 \text{ для полисапробов}\}$.

Тогда для каждой произвольной гидробиологической пробы по всем видам, встретившимся в справочниках, можно вычислить средневзвешенный индекс сапробности, характеризующий степень загрязнения в точке измерения:

$$S = \frac{\sum_{i=1}^N (s_i \cdot h_i)}{\sum_{i=1}^N h_i}, \quad (4.14)$$

где N – число выбранных видов-индикаторов; h_i – относительная численность i -го вида.

Зона сапробности для биоценоза оценивается по S так же, как s_i – числом от 1 до 4 с округлением до ближайшего значения.

Для статистической достоверности результатов необходимо, чтобы в пробе содержалось не менее двенадцати индикаторных организмов с общим числом особей не менее тридцати.

В. Сладечек, расширивший систему Кольквитца–Марссона, предложил несколько изменить значение индекса для зон сапробности и принять его значения для наиболее загрязненных (эусапробных) вод от 4.51 до 8.5, а для чистых, ксеносапробных вод от 0 до 0.5 (см. табл. 4.4).

Неоднозначны взгляды различных авторов на оценку показателя обилия h_i :

- Р. Пантле и Г. Букк предложили следующие относительные градации – { 1 – случайные находки, 3 – частая встречаемость, 5 – массовое развитие };
- В. Сладечек в своей модификации метода прибегает к более дробной детализации – { 1 – очень редко, 2 – редко, 3 – нередко, 5 – часто, 7 – очень часто, 9 – массовое развитие };
- Н.А. Дзюбан и С.П. Кузнецова [1981] считают, что наименьшие искажения будут, если включить в формулу (4.14) вместо относительных баллов h фактическое количество особей.

Наши комментарии. Очевидно, что с методологической точки зрения все три рассмотренных метода (Кнеппе, Головина и Пантле-Букка) используют совершенно идентичный подход: выбирается некоторый "экватор", а именно – граничная линия между β - и α -мезосапробными зонами, после чего рассчитывается, насколько далеко "сапробный центр тяжести" тестируемого биоценоза отстоит от этого "экватора". Различия лишь в условиях нормировки и численном выражении для точки граничного отсчета: для Г. Кнеппе – это 0, С. Головина – $\pi/2$, Р. Пантле и Г. Букка – 2.5. Можно утверждать, что при сравнительном анализе все три метода дадут совершенно идентичные результаты. Важно другое – ни один из этих методов не дает несмещенную оценку принадлежности изучаемого водоема к классам сапробности, а только меру расстояния "сапробного центра тяжести" от граничной черты. В результате этого при расчетах сапробности водоемов наиболее часто встречаются мезосапробные зоны.

Модификация расчета индекса сапробности М. Зелинкой и П. Марваном

Многие виды-индикаторы встречаются в водах двух или даже трех ступеней или зон сапробности, что является причиной неопределенности при установлении средней сапробности биоценоза. Чтобы уточнить результаты биологического анализа, М. Зелинка и П. Марван [Zelinka, Marvan, 1961^M, 1966^M] ввели понятие вектора *сапробных валентностей* вида, который показывает, в какой мере вид характерен для той или иной ступени сапробности. Сапробные валентности теоретически совпадают с оценками *распределения вероятности* встречаемости вида в каждом из индицируемых классов и выражаются одной или несколькими цифрами, сумма которых для вида равна 10. Например, вид *Baëtis gemellus* (см. табл. 4.5) характерен для двух ступеней сапробности, но в большей степени для ксеносапробной ступени. Сапробные валентности обосновываются авторами на основании многолетней регистрации сборов, сравнения их с химическими анализами и с литературными данными, хотя конкретный математический алгоритм их расчета не был нами установлен (по-видимому, он носит субъективный характер).

Чтобы подчеркнуть роль (*дискриминирующую важность*) отдельных видов при оценке степени загрязнения, Зелинка и Марван вводят шкалу индикаторного веса J , который оценивается для каждого вида в баллах от 1 до 5. Индикаторные веса J_i предлагается вычислять, ориентируясь на характер распределения сапробных валентностей по классам. Например, индикаторный вес $J = 5$ присваивается хорошим индикаторам, если все 10 баллов сапробной валентности распределены в одной зоне сапробности. Если валентности равномерно распределяются по классам, то такие виды считаются индифферентными или плохими индикаторами и получают небольшой балл.

Пусть $\kappa = \{1, 2, \dots, n\}$ – множество классов сапробности, $i = \{1, 2, \dots, m\}$ – множество индикаторных видов. Если для каждого вида определены значения коэффициентов a_{ik} (сапробные ва-

лентности), J_i (индикаторные веса), а для произвольной гидробиологической пробы измерены значения количества видов h_i , то можно предположить, что средневзвешенная сапробная валентность сообщества A_k , рассчитанная как

$$A_k = \frac{\sum_i a_{ik} \cdot h_i \cdot J_i}{\sum_i h_i \cdot J_i}, \quad (4.15)$$

является эффективной и несмещенной оценкой принадлежности пробы к k -му классу (см. табл. 4.5).

Таблица 4.5

Извлечение из описки индикаторов сапробности М. Зелинка и П. Марвана (закрашено) и пример расчета средневзвешенных сапробных валентностей

Наименования индикаторных видов	Сапробные валентности по классам (зонам) a_{ik}					Индикаторный вес J_i	Количество особей h_i
	Ксеносапробная	Олигосапробная	β -мезосапробная	α -мезосапробная	Полисапробная		
Подёнки							
<i>Ameletus inopinatus</i>	10					5	69
<i>Baëtis gemellus</i>	7	3				3	31
<i>Baëtis pinnatus</i>	1	4	4	1		1	30
<i>Baëtis rodani</i>	3	3	3	1		1	42
<i>Ephemera danica</i>	1	4	4	1		1	8
Суммы $\sum a_{ik} h_i J_i$	4265	557	278	80			
Сумма $\sum h_i J_i$						518	
Средневзвешенные сапробные валентности A_k	8.23	1.08	0.54	0.15			

При подстановке в формулу (4.15) показатель относительной численности индикаторных видов h_i может быть выражен в абсолютном числе экземпляров, относительных уровнях обилия в баллах или в процентных отношениях.

Метод Зелинки и Марвана явился серьезным методологическим шагом вперед по сравнению с обезличенным и явно деформированным в сторону "экватора" "сапробным центром тяжести" в интерпретации Р. Пантле и Г. Букка. Вектор значений $A = \{A_x, A_o, A_\beta, A_\alpha, A_p\}$ следует понимать как картину сапробных условий в сообществе. Положение наивысшего значения в этом ряду определяет, какую степень сапробности водоема характеризует изучаемое сообщество. Соседние величины позволяют судить о том, в какую сторону возможны отклонения.

Представленный метод является наиболее усовершенствованной модификацией системы Кольквитца и Марссона, в результате чего стало общепринятым приводить списки индикаторов сапробности с указанием сапробных валентностей и индикаторного веса видов. Однако считается, что возможность широкого применения метода ограничена тем, что сапробные валентности и индикаторный вес могут быть различны в разных районах, а сами по себе цифры, характеризующие сапробные валентности недостаточно надежны.

Вряд ли такая аргументация логична, поскольку предметом метода является сам метод (т.е. техника расчетов), а не готовые таблицы индикаторных видов, полученные 40 лет назад на реках Средней Европы. Без сомнения, при изменении пространственно-временного аспекта эти таблицы претерпевают серьезные модификации: появляются новые виды-индикаторы, либо коренным образом изменяется индикаторная роль уже имеющихся видов. Поэтому понятно стремление исследователей-гидробиологов, накопивших значительный массив экспедиционных данных, провести самостоятельные расчеты индикаторных валентностей с учетом региональных особенностей гидробионтов, характера загрязнений и типологии водоемов. Как продлевается эта работа,

описано, например, П.Я. Цимьдином [Гидробиологический, 1981]. Им предложена формула вычисления сапробных валентностей для произвольного вида с использованием его численности N и встречаемости D_i в основных зонах сапробности ($o-p$):

$$a_{ik} = \frac{N_k \cdot D_{ik}}{\sum_{k=p}^o N_k \cdot D_{ik}} \cdot 10, \quad (4.16)$$

где встречаемость $D_i = m_i / M$; m_i – число проб, в которых был найден вид i ; M – общее число проб.

Модификация индекса сапробности по Дж. Ротшейну

Дж. Ротшейн [Rotschein, 1959^M], предложил формулу, отличающуюся от механизма расчета средневзвешенной сапробности по Р. Пантле и Г. Букку, тремя следующими особенностями:

- при расчете слагаемых индекса учитываются сапробные валентности и индикаторный вес показательных организмов по М. Зелинке и П. Марвану;
- рассчитываются средневзвешенные валентности $\Sigma P_i = \Sigma a_{ik} h_i J_i$ для отдельных ступеней сапробности и в формулу Пантле–Букку подставляются не все виды показательных организмов, а только те, которые относятся к ступени с наибольшей ΣP_i и к двум соседним к ней

$$S = (S_1 \Sigma P_1 + S_2 \Sigma P_2 + S_3 \Sigma P_3) / (\Sigma P_1 + \Sigma P_2 + \Sigma P_3), \quad (4.17)$$

где ΣP_2 является наивысшей из частных сумм ΣP_i ;

- нормировка и оценка индексов идет (по непонятным мотивам) не в диапазоне от 1 до 4, а от 10 до 90.

В этой модификации индекса сапробности прослеживается вполне здравая идея, которая в математической статистике трактуется как «отбраковка выбросов», позволяющая не учитывать при оценке некоего глобального среднего очевидные артефакты, порожденные случайностью.

Индекс сапроботоксности по В.А. Яковлеву [1984, 1988]

Этот индекс математически ничем не отличается от средневзвешенного индекса сапробности по Пантле–Букку:

$$S_i = (\Sigma s_{ii} n_i) / \Sigma n_i, \quad (4.18)$$

где n_i – количество особей i -го индикаторного вида, s_{ii} – индекс сапроботоксности вида, равный 1.0 – 1.5 в олигосапротоксной зоне, 1.5 – 2.5 в β -мезосапротоксной зоне, 2.5 – 3.5 в α -мезосапротоксной зоне и 3.5 – 4 – в полисапротоксной зоне.

Принципиальные отличия концепции сапроботоксности лишь в том, какой набор гидрохимических показателей является основанием для деления водоемов на четыре класса: по В.А.Яковлеву следует учитывать не только БПК₅ и содержание кислорода, но и широкий набор неорганических поллютантов.

Модификация индекса сапробности по М.В. Чертопруду [2002]

Автор для предварительной классификации водоемов вообще отказался от каких-либо гидрохимических показателей и использовал такой естественный и доступный параметр антропогенной нагрузки, как плотность населения в бассейне водотока. При населенности водосбора до 10 чел/м² считалось, что водоем относится к ксеносапробной зоне, от 10 до 30 – к олиго-, от 30 до 50 – к β -мезо-, от 50 до 200 – к α -мезо- и свыше 200 чел/км² – к полисапробной зоне.

Поскольку М.В. Чертопруд счел, что определение организмов до вида слишком трудоемко и часто малоэффективно для решения проблем биоиндикации вод, он использует для своей системы таксоны показательных организмов рангом выше видового (преимущественно на уровне семейств и, как минимум, родов; в частности, в качестве индикаторов им были выбраны 44 таксона зообентоса – сообщества насекомых, моллюсков, пиявок, ракообразных, олигохет и т.д.) Используя данные биомониторинга на 245 малых реках центра Европейской России, для каждого из выделенных таксонов определены сапробность s_i и мера разброса по шкале загрязненности (индикаторный вес J_i в четырех балльной шкале). Формула для определения индекса сапробности i -го таксона имела вид:

$$s_i = \sum_k s_k \cdot V_{ik} / \sum_k V_{ik}, \quad (4.19)$$

где S_k – коэффициент сапробности k -го класса загрязненности водотока, V_{ik} – встречаемость i -го таксона в этом классе загрязненности.

Наконец, вместо показателя обилия h_i в формулу Пантле–Букка М.В. Чертопруд включил индикаторный вес таксона J_i :

$$S = \sum_i s_i J_i / \sum_i J_i, \quad (4.20)$$

где s_i – сапробность каждого найденного в пробе индикаторного организма (от 0 до 4). Предложенная модификация метода, по свидетельству автора, оказалась более адекватной на располагаемой обучающей выборке, чем выполненные параллельно расчеты с использованием "классических" индексов сапробности Пантле-Букка в модификации Сладечека.

4.5. Оценка качества экосистемы по соотношению количества видов, устойчивых и неустойчивых к загрязнению

Соотношение количества видов, по-разному относящихся к загрязнению, неоднократно использовалось в качестве показателя качества воды. При усилении загрязнения, как правило, уменьшается обилие стенобионтных и олигосапробных видов животных, в результате чего возрастает относительная доля эврибионтных и сапробионтных видов. О.М. Кожова [1986] разделила виды гидробионтов на четыре группы: 1 – чувствительные и устойчивые, 2 – чувствительные и неустойчивые, 3 – нечувствительные и неустойчивые, 4 – нечувствительные и устойчивые. Группа 1 – лучшие индикаторы загрязнения; при усилении загрязнения виды группы 2 обычно мигрируют (при наличии соответствующей способности), а группы 3 – погибают. При дальнейшем загрязнении начинают доминировать представители группы 4.

Для оценки изменения биоразнообразия под влиянием загрязнений Дж. Кернсом с соавт. [Cairns et al., 1968^B, 1971^M] предложен простой индекс последовательного сравнения (SCI). Для его расчета не нужно определять организмы до вида, а достаточно лишь улавливать их различие по форме, окраске и величине.

К. Вуртц [Wurts, 1955^M], работавший на реках в шт. Филадельфия (США), предложил систему оценки степени загрязнения, основанную на разделении организмов на четыре группы: **B** – зарывающиеся, **S** – прикрепленные к субстрату, **F** – медленно плавающие, кормящиеся у дна и **P** – активно плавающие, пелагические. Результаты обследования каждой станции изображаются в виде гистограммы из 8 колонок. Вверх от основной линии откладывается процент видов, не устойчивых к загрязнению, ниже – процент устойчивых от общего числа найденных на станции видов. На чистых станциях обычно наблюдается следующее соотношение групп по Вуртцу: **B** – 5%, **S** – 40%, **F** – 45% и **P** – 10%, причем, доля устойчивых видов должна быть менее 50%. Истолкование результатов гистограмм, когда указанные Вуртцем процентные соотношения не соблюдаются, очень субъективно.

Т. Ватанабе [Watanabe, 1962^M] для расчёта индекса загрязнения использует соотношение видов диатомей, которые автор считает в разной мере устойчивыми к загрязнению:

$$i = \frac{2A + B - 2C}{A + B - C} \cdot 100, \quad \text{где } A - \text{число видов, устойчивых к загрязнению, } B - \text{безразличных}$$

и C – встречающихся только в загрязненных водах.

Нам представляется целесообразным отнести к этой группе критериев и так называемые биотические индексы, предложенные В. Бекком [V. Beck], Т. Биком [T. Beak], Ф. Вудивиссом [F. Woodiwiss], Т. Грэхемом [T. Graham] и Р. Патрик [R. Patrick], хотя А.В. Макрушин [1974] полагает, что они являются соединением двух других систем оценок: по показательным организмам и по видовому разнообразию.

Оценка степени загрязнения с использованием биотических индексов зависит от числа встреченных на станции видов. При этом организмы, неустойчивые к загрязнению, влияют на ито-

говую оценку сильнее, чем устойчивые виды. В связи с этим, окончательный результат зависит от видового разнообразия и от того, какие виды это разнообразие создают.

Первым из широко применяемых систем оценки загрязнения пресных вод по биотическим индексам был метод В. Бекка [Beck, 1955^{МВ}], который выделил 39 видов многоклеточных беспозвоночных, являющихся индикаторами загрязнения, и все организмы разделил на две группы:

- выносящие только очень слабое загрязнение;
- способные переносить анаэробные условия.

Им предложена формула для нахождения биотического индекса, характеризующего степень загрязнения водоема органическим веществом (*индекс Бекка*):

$$I = 2(n \text{ видов 1 группы}) + (n \text{ видов 2 группы}).$$

При сильном загрязнении, когда индикаторных организмов на станции не обнаружено, индекс равен нулю, а при среднем загрязнении – варьирует от 1 до 6. В чистой реке с однообразными условиями и медленным течением индекс может принимать значение от 4 до 9, достигая своего максимального значения в наиболее чистых водах – 40.

Увеличение числа групп привело Т. Бика [Beak, 1959^В, 1964^В] к разработке двух индексов – озерного и речного. При этом гидрофауна делится на три группы:

- виды очень устойчивые к загрязнению и встречающиеся на загрязненных участках в массовых количествах;
- виды, встречающиеся как на загрязненных, так и на чистых участках, но не образующие больших скоплений;
- виды неустойчивые к загрязнению.

Незагрязненная станция должна иметь полный набор представителей трех групп, обычных для данного типа местообитания, и оценивается суммой трех баллов $1 + 2 + 3 = 6$. По мере развития загрязнения происходит исчезновение отдельных видов, при этом сумма оценочных баллов снижается, достигая в минимуме 0.

Наиболее известен *индекс р. Трент* (и расширенный индекс р. Трент), в отечественной литературе чаще называемый *индексом Ф. Вудивисса* [Woodiwiss, 1964^В, Вудивисс, 1977]. Изучая влияние загрязнения на бентос р. Трент (Англия), Вудивисс обратил внимание на то, что по мере увеличения интенсивности загрязнения вначале из состава донной фауны выпадают наиболее чувствительные группы животных – веснянки, затем поденки, ручейники и т.д. В конце концов, остаются только олигохеты и личинки красного мотыля, исчезающие только при очень сильном загрязнении. На этом основании он разбил возможные степени загрязнения на 10 классов и построил таблицу для определения этих классов по наличию или отсутствию отдельных групп гидробионтов с учетом общего количества таких групп на изучаемом участке.

Под термином «группа», используемом в табл. 4.6, подразумевается результат, к которому приходят при определении систематического положения водных организмов без рассмотрения деталей строения. Группы составляют следующие организмы: часто встречающиеся и легко определяемые виды плоских червей, пиявок, водных клещей, жуков, ракообразных, личинок веснянок, подёнок, двукрылых, *Baetis rodani* (подёнка), *Chironornus thummi* (мотыль). Кроме них в понятие «группа» входят ручейники, хирономиды и симулииды, определяемые до семейства, и сетчатокрылые, определяемые до вида. Как и в системах Б. Бекка и Т. Бика, здесь величина индекса зависит от видового разнообразия (числа присутствующих "групп") и состава населения. Например, если на станции обнаружено 2-5 "групп", но среди них есть личинки веснянок, то индекс равен 6-7. Если при таком же количестве "групп" население ограничено тубифицидами и хирономидами, то индекс Вудивисса равен 2. Большая ценность метода заключается в сравнительной легкости идентификации указанных групп, что может делать и не специалист-систематик.

Многие исследователи, такие как Г. Хаукс [Hawkes, 1964^М], Ч. Уилбер [1969^М], Г.Г. Винберг [1979б], сравнивая разные системы мониторинга по зообентосу, пришли к выводу, что метод Ф. Вудивисса заслуживает большего внимания, чем остальные, и считают его "классическим". Но опыт применения его в нашей стране и за рубежом показал, что, будучи разработан для малых рек Англии, он применим далеко не ко всем типам водоемов; в частности, он дает неудовлетворительные результаты на крупных равнинных водохранилищах. По мнению Е.В. Балушкиной [1987], «к недостаткам метода можно отнести недостаточную корреляцию группы с численностью входящих в нее животных, вследствие чего завышается значение очень малочисленных групп». К

сходному мнению на основе анализа большого экспериментального материала приходит и М.В. Чертопруд [2002].

Таблица 4.6

Классификация биологических проб по Ф. Вудивиссу [1964^M]

	Группы организмов	Присутствие или отсутствие вида	Биотический индекс при общем количестве присутствующих "групп"				
			0-1	2-5	6-10	11-15	> 15
Чистая вода ↓ Часто наблюдаемая последовательность исчезновения организмов из биоценозов по мере увеличения степени загрязнения ↓ Грязная вода	Личинки веснянок	Больше одного вида		7	8	9	10
		Только один вид		6	7	8	9
	Личинки поденок, включая <i>Baetis rodani</i>	Больше одного вида		6	7	8	9
		Только один вид		5	6	7	8
	Личинки ручейников и/или <i>Baetis rodani</i>	Больше одного вида		5	6	7	8
		Только один вид	4	4	5	6	7
	Гаммарус	Все вышеназванные виды отсутствуют	3	4	5	6	7
	Азеллус	Все вышеназванные виды отсутствуют	2	3	4	5	6
Тубифициды и/или красные личинки хирономид	Все вышеназванные виды отсутствуют	1	2	3	4		
Виды, нетребовательные к кислороду (<i>Eristalis tenax</i>)	Все вышеназванные виды отсутствуют	0	1	2			

В.А. Яковлев [1988] для оценки загрязнений водоемов Кольского полуострова предложил свою модификацию табл. 4.6, включив туда такие признанные биоиндикаторы, как мелкие личинки хирономид (*Orthocladiinae* и *Tanytarsini*) и некоторые другие таксоны. Наши исследования, проведенные на малых реках Самарской области, свидетельствуют о целесообразности включения в состав "групп" моллюсков (*Dreissena polymorpha*) и *Pisidium inflatum*.

Сделано много и других более или менее успешных попыток модифицировать биотический индекс применительно к конкретным водоемам разных стран [Andersen et al., 1984^F; De Pauw, Vanhooren, 1984^B; Lang et al., 1984^B; Булгаков, 1989; Barton, Metcalfe-Smith, 1992^B]. В вариантах этого индекса по Т. Грэхему [Graham, 1965^M] и по Дж. Чандлеру [Chandler, 1970^M] предусматриваются элементы стандартизации процедуры сбора материала, отсутствие которой было одним из недостатков метода Вудивисса.

Ж. Верньо и Г. Тюфери [Verneaux, Tuffery, 1967^M] при инспектировании рек Франции использовали модификацию биотического индекса, основанного на видовом составе макрозообентоса, в котором выделили семь характерных для разных степеней загрязнения "систематических групп", или таксонов. Список принятых систематических единиц зависел от физико-географических особенностей водоема (рыбохозяйственная категория реки, ее ширина, экологическая зона, высота над уровнем моря, геология водосбора и т.д.). Биотический индекс J рассчитывался раздельно для участков с высокой (J_L) и малой скоростью (J_c) течения. Оценка степени загрязнения проводилась как по натуральному значению индекса J , так и с учетом разности $\Delta J = (J_L - J_c)$.

К этой группе методов можно отнести значительно реже используемые "биотические баллы" (или "биотические очки") Дж. Чандлера [Chandler, 1970^{Mb}], "осредненные биотические баллы" [Balloch et al., 1974^B], методику П.М. Хаттера [Chutter, 1972^B], систему баллов Департамента окружающей среды Великобритании [Хокс с соавт., 1981^B] и ряд сходных разработок других исследователей [Тарасов, 1993; Armitage et al., 1983^B; Hilsenhoff, 1977^B; Perret, 1975^B].

Расчет величин девяти биотических индексов, полученных на одном и том же полевом материале, показал наличие между ними достоверной сильной положительной корреляции, равной 0,76-0,99 [Rico et al., 1992^B].

По мнению В. Сладечека [Sladeček, 1973], биотические индексы оценки загрязнения по Вудивиссу и другим авторам не вносят ничего принципиально нового в биологический анализ качества вод по сравнений с системой Кольквитца–Марссона и ее модификациями. С этим мнением Сладечека можно согласиться, так как в биотических системах для оценки степени загрязнения видовое разнообразие используется в крайне усеченном виде. В частности, метод М. Зелинки и П. Марвана использует для расчетов все биоразнообразие организмов, определенных до уровня видов, в то время как биотические индексы оперируют с более крупными таксономическими группами.

Р. Патрик [Patrick, 1949^M, 1950^M, Patrick, Stawbridge, 1963^M], долгое время детально изучавшая фауну и флору ряда рек США, считает, что оценка качества воды должна быть основана на детальном изучении видового состава всех 7 выделенных ею групп водных организмов:

- сине-зеленые и некоторые зеленые водоросли и коловратки;
- олигохеты, пиявки и легочные моллюски;
- простейшие;
- диатомовые, красные и большинство зеленых водорослей;
- коловратки, не включенные в 1 группу, двустворчатые и переднежаберные моллюски, черви-триклады;
- насекомые и ракообразные;
- рыбы.

Ею применяется градация качества вод по 4 степеням загрязнения, или нарушения "биодинамического баланса", причем оценка делается на основе сравнения двух распределений общего числа видов по выделенным группам организмов: тестируемая гистограмма сравнивается с некоторым "эталонном", за который принято аналогичное распределение на 9 незагрязненных станциях по результатам ее собственных наблюдений. К сожалению, вместо того, чтобы использовать традиционные статистические критерии сравнения распределений двух выборок (например, λ -критерий Колмогорова-Смирнова), Патрик приводит путанный и не всегда однозначный "алгоритм" оценки, типа «*Загрязненные станции – на которых виды 6 и 7 групп либо отсутствуют, а количество видов 1 и 2 групп – 50% или больше, либо виды 6 и 7 групп присутствуют, но в количестве менее 50%, а количество видов 1 и 2 групп может быть 100% или больше*».

Если оценивать исследования Р. Патрика и ее сотрудников с точки зрения применимости метода оценки уровня загрязнения широким кругом практических работников, то, вероятно, можно согласиться с достаточно многочисленной критикой в ее адрес. Однако общие концепции по выяснению закономерностей, которые определяют реакцию водных экосистем на загрязнения, глубину, тщательность и детальность этих исследований вряд ли можно переоценить.

В.Н. Максимов [1980] предложил использовать для оценки качества вод метод "функции желательности" [Адлер с соавт., 1976]. Для этого сопоставляются частотные распределения рангов [Левич, 1980] численностей индикаторного вида на "чистых" и "грязных" участках водоема. По каждому виду характерным ранговым диапазоном на наиболее чистых участках приписывается некоторое число ("частная желательность") от 0.8 до 1, а на самых грязных – от 0 до 0.2. Затем для каждого пункта наблюдений по известному обилию обитающих на нем видов гидробионтов может быть рассчитана обобщенная функция желательности, равная средней геометрической из частных желательностей. Эта функция будет характеризовать положение данного пункта среди всех прочих изученных пунктов. Описанный подход с успехом применила также Г.В. Голубева [1985] на малых реках Ярославской области.

4.6. Интегральные критерии: оценка качества экосистем по нескольким показателям

В предыдущих главах мы неоднократно обсуждали подходы к оценке состояния изучаемого объекта по всему комплексу измеренных и расчетных показателей. Вследствие принципиальной сложности экосистем, эта проблема в гидробиологии особенно актуальна, поскольку, желая учесть все множество тенденций и явлений, исследователи стремятся использовать не один, а несколько (иногда 7-8) частных критериев из тех, что были описаны выше.

Классы качества воды по гидробиологическим и микробиологическим показателям в нашей стране определяются "Правилами контроля качества воды водосливов и водотоков" [ГОСТ 17.1.3.07–82], которые регламентируют содержание программ контроля гидрологических, гидрохимических и гидробиологических показателей, периодичность контроля, а также назначение и расположение пунктов отбора проб (см. табл. 4.7).

Таблица 4.7

*Классификация качества воды водоемов и водотоков по гидробиологическим
и микробиологическим показателям*

Класс качества воды	Степень загрязненности воды	Гидробиологические показатели			Микробиологические показатели			Гидрохимический индекс загрязнения воды (ИЗВ)	Градации по В.А. Яковлеву [1988] индекса видового разнообразия Шеннона
		По фитопланктону, зоопланктону, перифитону	По зообентосу		Общее количество бактерий, 10^6 кл/см ³ (кл/мл)	Количество сапрофитных бактерий, 10^3 кл/см ³ (кл/мл)	Отношение общего количества бактерий к количеству сапрофитных бактерий, 10^3 кл/см ³ (кл/мл)		
		Индекс сапробности по Пантле и Букку (в модификации Сладечека)	Отношение общей численности олигохет к общей численности донных организмов, %	Биотический индекс по Вудивиссу, баллы					
I	Очень чистые	Менее 1.00	1 - 20	10	Менее 0.5	Менее 0.5	Более 10^3	Менее 0.3	>2
II	Чистые	1.00 – 1.50	21 - 35	7 - 9	0.5 – 1.0	0.5 – 5.0		0.3 – 1.0	>2
III	Умеренно загрязненные	1.51 – 2.50	36 - 50	5 - 6	1.1 – 3.0	5.1 – 10.0	$10^3 - 10^2$	1.0 – 2.5	>2
IV	Загрязненные	2.51 – 3.50	51 - 65	4	3.1 – 5.0	10.1 – 50.0	Менее 10^2	2.5 – 4.0	1.0 – 2.0
V	Грязные	3.51 – 4.00	66 - 85	2 - 3	5.1 – 10.0	50.1 – 100.0		4.0 – 6.0	0 – 1.0
VI	Очень грязные	Более 4.00	86 – 100 или макробентос отсутствует	0 - 1	Более 10.0	Более 100.0		6.0 – 10.0	0

Примечание. Допускается оценивать класс качества воды и как промежуточный между вторым и третьим (II - III), третьим и четвертым (III - IV), четвертым и пятым (IV – V).

Согласно этому документу, степень загрязненности воды оценивается с учетом индекса сапробности по Пантле и Букку в модификации Сладчека, олигохетного индекса Гуднайта–Уитлея и Пареле, биотического индекса Вудивисса и традиционного набора микробиологических показателей (столбец со значениями ИЗВ [Временные методические..., 1986] добавлен нами для обобщения). Эта таблица также приведена в специальном руководстве [Руководство по методам..., 1983], обязательном для гидробиологических постов наблюдения.

В.А. Яковлев [1988], применительно к поверхностным водам Кольского Севера, в аналогичную таблицу добавляет оценку зоны сапроботоксности в соответствии с разработанным им индексом, индекс Шеннона (см. табл. 4.7), степень токсичности по данным биотестирования и описывает для каждого класса доминирующий комплекс организмов.

С градациями класса качества вод, в принципе, можно связать неограниченное количество показателей и расчетных критериев. Если все они дают одинаковую картину (что бывает редко), то уверенность в правильности оценки возрастает. Однако каждый из индексов, выделяя ту или иную особенность биотического сообщества, недоучитывает другие, в результате чего возникает естественный феномен несовпадения в оценках качества экосистем по различным показателям. Чтобы преодолеть трудности в трактовке такой ситуации, ряд исследователей [Балушкина, 1997, 2002; Баканов, 1999] предлагают методы вычисления обобщенных показателей, которые основаны на том, что выбранные исходные показатели нормируются в некоторой единой шкале, после чего суммируются. При этом появляется еще один индекс (интегральный показатель **IP**, комбинированный индекс состояния сообщества – КИСС и т.п.), который делает попытку обобщить и представить одним числом все множество процессов и факторов развития экосистемы.

Нельзя отрицать вполне доказанной работоспособности обобщенных индексов для экспресс-анализа (правда, при четком понимании конкретных условий, при которых тот или иной индекс наиболее эффективен), а также в тех случаях, когда сравниваемые экосистемы имеют ощутимые различия в уровне антропогенного воздействия. Но эти методы перестают быть адекватными, если ставится задача детального анализа структурных изменений в биоценозах на видовом уровне.

К сожалению, иногда недостаточно взвешенный подход к проблеме "индексологии" и излишняя вера в то, что истину можно найти, вычислив среднее из 4-5 показателей, еще более удаляет нас от физической природы явлений, поскольку такое усреднение сглаживает все статистические всплески исходных данных, сигнализирующие о возможных экокризисных ситуациях. Проблема усугубляется тем, что индексы, выступающие в качестве слагаемых, как правило, сами по себе далеко не всегда адекватно отражают то явление, которое им приписывается, и слишком чувствительны к действию посторонних факторов, не связанных с загрязнением. При их усреднении равновероятными являются предположения, как о взаимной компенсации ошибок, так и об их взаимном усилении.

Интегральный показатель по Е.В. Балушкиной [1997] разработан и используется для оценки состояния экосистем водоемов, подверженных смешанному органическому и токсическому загрязнению. Прошел широкое тестирование в системе Ладожское озеро - р. Нева - восточная часть Финского залива [Балушкина с соавт., 1996]. Интегральный показатель **IP** рассчитывается по формуле:

$$IP = K_1 * S_t + K_2 * OI + K_3 * K_{ch} + K_4 / BI, \quad (4.21)$$

где S_t – индекс сапротоксности В.А. Яковлева ($K_1 = 25$); OI – олигохетный индекс Гуднайта и Уитлея, равный отношению численности олигохет к суммарной численности зообентоса в процентах ($K_2 = 1$); K_{ch} – хирономидный индекс Балушкиной ($K_3 = 8.7$); $1 / BI$ – величина, обратная биотическому индексу Вудивисса ($K_4 \cong 100$).

Основная идея автора – подобрать такие линейные множители $K_1 - K_4$ для всех обобщаемых индексов, чтобы они варьировались на соизмеряемом интервале от некоторого минимального значения до 100, после чего сложить преобразованные значения. Поскольку функциональность значений индекса Вудивисса имеет обратный характер по сравнению с остальными индексами, для его преобразования использовалась обратная величина²¹ – $1 / BI$. Диапазоны изменения значений

²¹ На наш взгляд, целесообразнее использовать отношение $1/(BI + 1)$ или, еще лучше, линейную функцию $(10 - BI)$, принимая во внимание вероятность нулевого значения индекса Вудивисса.

используемых показателей соотнесены с градациями качества вод по А.А. Былинкиной с соавт. [1962] и С.М. Драчеву [1964] (см. табл. 4.8).

Таблица 4.8

*Границы классов качества вод по показателям зообентоса S_t , OI , K_{ch} , BI и интегральному показателю IP (обозначения по тексту; * отмечены значения, полученные нами по пропорции)*

Индекс сапротоксности Яковлева		Олигохетный индекс OI	Хирономидный индекс Балушкиной		Биотический индекс Вудивисса		Интегральный показатель IP	Класс качества вод по Былинкиной и Драчеву
S_t	$K_I * S_t$		K_{ch}	$K_3 * K_{ch}$	BI	K_4 / BI		
1	25	0	0.14	1.22	10	10	36.22	Очень чистые
1.5	37.5	50	1.08	9.4	≈8.9*	20	116.9	Чистые
2.5	62.5	60	6.5	56.5	≈ 7.4*	33.3	212	Умеренно загрязненные
3.5	87.5	80	9	78.26	≈ 5.6*	50	295.76	Загрязненные
4	100	100	11.5	100	0	100	400	Грязные

Можно обратить внимание на то, что предлагаемые граничные значения олигохетного индекса OI не совпадают ни с ГОСТ 17.1.3.07–82 (см. табл. 4.7), ни с градациями качества в понимании Гуднайта и Уитлея, ни с рекомендациями О.Л. Качаловой и Э.А. Пареле (см. раздел 4.2 и таблицу 4.2). Не вполне коррелирует с градациями того же ГОСТ "гиперболическая" функция от индекса Вудивисса $1/BI$. Наконец, в литературе нет доказательств, что зоны сапротоксности по В.А. Яковлеву, классы качества по А.А. Былинкиной и С.М. Драчеву и степени загрязнения воды по ГОСТ 17.1.3.07–82 представляют собой эквивалентные разбиения (впрочем, никто не доказал и обратного). Но такие "мелочи" при синтезе обобщенного показателя принято считать несущественными.

Е.В. Балушкина полагает, что полученный ею интегральный показатель (4.21) включил в себя все лучшие черты родительских индексов и максимально учитывает характеристики донных сообществ: наличие видов-индикаторов сапротоксности, соотношение индикаторных групп животных более высокого таксономического ранга, степень доминирования отдельных групп и структуру сообщества в целом.

Комбинированный индекс состояния сообщества по А.И. Баканову [1997, 1999].

При оценке состояния донных сообществ ряда рек, озер и водохранилищ России для количественной характеристики состояния бентоса автор использовал следующие показатели: численность (N), экз./м²; биомассу (B), г/м²; число видов (S); видовое разнообразие по Шеннону (H), бит/экз.; олигохетный индекс Пареле ($OИП$, %), равный отношению численности олигохеттубифидов к общей численности бентоса, среднюю сапробность ($СС$), рассчитываемую как средневзвешенную сапробность трех первых доминирующих по численности видов бентосных организмов. Для объединения значений перечисленных показателей и замены их одним числом предлагается результирующий показатель – *комбинированный индекс состояния сообщества (КИСС)*; [Баканов, 1997]), находимый по обычной методике расчета интегральных ранговых показателей:

$$КИСС = \left(\sum_{i=1}^k P_i \cdot R_i \right) / \sum_{i=1}^k P_i, \quad (4.22)$$

где R_i – ранг станции по i -му показателю, P_i – "вес" этого показателя, k – число показателей.

Вначале все станции ранжируются по каждому показателю, причем, ранг 1 присваивается максимальным значениям N , B , H и S . Если на нескольких станциях значения какого-либо показателя были одинаковыми, то они характеризовались одним средним рангом. В статье приводятся разные версии итоговой формулы (4.22) (подчеркнем, что в формулы входят не абсолютные значения показателей, а их ранги):

- $KИСС = (2B + N + H + S)/5$, где биомассе придан "вес", равный 2, поскольку с ней связана величина потока энергии, проходящей через сообщество, что чрезвычайно важно для оценки его состояния;
- $KИСС = (2СС + 1.5ОИП + 1.5В + N + H + S)/8$, где считается, что с загрязнением наиболее тесно связана средняя сапробность.

Чем меньше величина **KИСС**, тем лучше состояние сообщества.

Поскольку состояние сообщества зависит как от естественных факторов среды (глубины, грунта, течения и т.п.), так и от наличия, характера и интенсивности загрязнения, дополнительно рассчитывается *комбинированный индекс загрязнения (КИЗ; [Баканов, 1999])*, включающий ранговые значения трех показателей:

$$КИЗ = (СС + ОИП + В)/3 . \quad (4.23)$$

Ранжирование показателей здесь проводится в обратном порядке (от минимальных значений к максимальным)

KИСС и **КИЗ** – относительные индексы, ранжирующие станции по шкале, в которой наилучшее по выбранному набору показателей состояние сообщества характеризуется минимальными значениями индексов, наихудшее – максимальными. Кроме значений, характеризующих величины показателей на конкретной станции, рассчитывают их средние значения для всего набора станций. Варьирование величин индексов на отдельных станциях относительно среднего позволяет судить, хуже или лучше обстоят на них дела по сравнению с общей тенденцией.

Вычисление коэффициента ранговой корреляции по Спирмену между значениями **KИСС** и **КИЗ** показывает, насколько загрязнение влияет на состояние сообществ зообентоса. Если между значениями этих индексов существует достоверная положительная корреляция, то состояние сообществ донных животных в значительной степени определяется наличием загрязнений (в противном случае оно определяется естественными факторами среды).

Индекс экологического состояния по Т.Д. Зинченко и Л.А. Выхристюк [Зинченко с соавт., 2000; Выхристюк с соавт., 2001; Гелашивили с соавт., 2002].

Предложенный способ комплексной оценки речной системы на основе *интегрального индекса экологического состояния* экосистемы – **ИИЭС**, дает возможность оценить суммарный эффект воздействия загрязнения на сообщества гидробионтов и на экосистему в целом.

Основной подход к построению индекса заключается в следующем:

- выделяется некоторое базовое подмножество измеряемых или рассчитываемых показателей гидрохимического (табл. 4.9) и биологического (табл. 4.10) мониторинга;
- каждый показатель делится на диапазоны (с использованием статистических методов или экспертных оценок);
- каждому выделенному диапазону ставится в соответствие оценка в баллах;
- для каждого тестируемого объекта (например, участка реки) индекс определяется как усредненная сумма всех показателей в баллах.

Таблица 4.9

Градации концентраций химических веществ для вычисления балльной оценки

Показатели	Размерность	Баллы			
		1	2	3	4
Пределы изменения концентраций					
Химическое потребление кислорода (XПК)	мг О/л	> 60	31 - 60	20 - 30	< 20
Азот аммонийный N - NH₄	мг /л	> 2.5	0.51 - 2.5	0.20 - 0.5	< 0.20
Азот нитратный N - NO₃	мг /л	> 2.5	0.71 - 2.5	0.30 - 0.70	< 0.30
Азот нитритный N - NO₂	мг /л	> 0.1	0.021 - 0.1	0.005 - 0.02	< 0.005
Фосфаты P - PO₄	мг /л	> 0.3	0.101 - 0.3	0.03 - 0.1	< 0.03
Фенолы	мкг /л	> 10	1 - 10	следы	0

Таблица 4.10

Градации биологических показателей для вычисления балльной оценки

Показатели	Размерность	Баллы			
		1	2	3	4
Пределы изменения показателей					
Численность макрозообентоса N	экз./м ²	0 – 500	501-1000	1001-10000	> 10000
Биомасса B	г/м ²	1 - 5.0	5.1 - 10.0	10.1- 15.0	> 15.0
Количество видов S	экз.	0 – 5	6 - 10	11 - 15	> 15
Индекс видового разнообразия Шеннона H	бит/экз.	0 - 1.0	1.1 - 2.0	2.1 - 3.0	> 3.0
Биотический индекс V	-	0 - 2	2 - 4	4 - 6	>6
Индекс Пареле D	-	0.81 –1.00	0.56 - 0.80	0.30 - 0.55	< 0.30

ИИЭС учитывает обе основные составляющие качества пресноводной экосистемы (*химическую* и *биологическую*), выраженные в относительных единицах (баллах), и рассчитывается как

$$ИИЭС = (\sum B_i + \sum H_i) / (N_b + N_h) , \quad (4.24)$$

где B_i – используемые биологические показатели; H_i – используемые гидрохимические показатели; N_h и N_b – количество показателей каждого класса, включенных в расчет.

При составлении списка гидрохимических показателей в основу формирования балльной системы была взята работа О.П. Оксьюк с соавторами [1993]. Однако достаточно скупой и специфический перечень принятых ими за основу ингредиентов заставляет задуматься, что авторы сильно недооценивают степень влияния минерализации, тяжелых металлов и др., которые традиционно считаются более опасными, чем предлагаемые показатели.

В число отобранных биологических характеристик включены наиболее широко употребляемые показатели, характеризующие состояние донных сообществ. При расширении анализируемых групп организмов за счет, например, зоопланктона, табл. 4.10 может претерпеть естественные количественные и качественные изменения.

Численный пример использования *ИИЭС* для экологического районирования бассейна равнинной р. Чапаевка, представлен в табл. 4.11.

Были экспертно оценены числовые диапазоны *ИИЭС*, соответствующие каждой из зон, определенной нормативными документами [Критерии оценки..., 1992]:

<u>Категория водоема</u>	<u>Диапазон индекса ИИЭС</u>
- Зона экологического бедствия	< 2
- Зона экологического кризиса	2 – 3
- Зона относительного экологического благополучия	> 3

Что касается техники расчета *ИИЭС* в смысле получения некоей усредненной оценки, то вряд ли здесь можно добавить что-то новое к сказанному выше в разделах 1.5 и 3.4. Например, нам представляется, что арифметическая операция усреднения баллов может быть безболезненно заменена их суммой, как это делает Е.В. Балушкина. Все границы диапазонов оценены на основании интуитивного опыта исследователей, без использования каких-либо статистических методов. Тем не менее, авторы впервые в практике оценки качества воды по всем категориям гидрохимических и гидробиологических показателей представили свою классификацию не как механический "сборник" отдельных частных классификаций, а как некоторый обобщенный результат.

Таблица 4.11

Интегральная оценка экологического состояния водоемов на примере р. Чапаевка
(в столбцах таблицы: а – натуральное значение показателя, б – оценка в баллах)

Показатели	Участки реки*											
	I (ст. 1)		I (ст. 2)		II (ст. 3)		III (ст. 4)		III (ст. 5)		IV (ст. 6)	
	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б	а	б
Оценка экологического состояния водоема по гидрохимическим показателям												
Химическое потребление кислорода (ХПК)	43.7	2	36.6	2	39.5	2	143.7	1	83.9	1	51	2
Азот аммонийный $N-NH_4$	0.23	3	0.13	4	0.77	2	2.42	2	0.85	2	0.79	2
Азот нитратный $N-NO_3$	0.27	4	0.25	4	0.33	3	0.70	2	0.31	3	0.46	3
Азот нитритный $N-NO_2$	0.002	4	0.008	3	0.056	2	0.266	1	0.152	1	0.070	2
Фосфаты $P-PO_4$	0.023	4	0.054	2	0.021	4	0.250	2	0.129	2	0.150	2
Фенолы	1	2	0	4	0	4	3	2	3	2	1	2
Сумма баллов	19		19		17		10		11		13	
Средний балл	3.2		3.2		2.8		1,7		1.8		2.2	
Оценка экологического состояния водоема по биологическим показателям												
Численность N , тыс. экз./м ²	16.0	4	6.5	2	0.53	2	0	1	0.16	1	0.92	2
Биомасса B , г/м ²	24.3	4	19.2	4	5.1	2	0	1	0.14	1	6.3	2
Количество видов S	11	3	20	4	6	2	0	1	1	1	6	2
Индекс разнообразия Шеннона H , бит/экз.	1.77	2	2.61	3	1.59	2	0	1	0.1	1	2.14	3
Биотический индекс Вудивисса V	5	3	4 - 5	3	2	1	0	1	0-1	1	3	2
Индекс Пареле D	0.55	3	0.44	3	0.33	3	0	1	0.95	1	0.8	2
Сумма баллов	19		19		12		6		6		13	
Средний балл	3.2		3.2		2.0		1.0		1.0		2.2	
Значение ИИЭС	3.2		3.2		2.4		1.3		1.4		2.2	
Категория водоема	Экологическое благополучие				Экологич. кризис		Экологическое бедствие				Экологич. кризис	

Примечание. *Станции: ст. 1 – верховье реки, ст. 2 – 70 км от истока, ст. 3 – 40 км выше г. Чапаевска, ст. 4 – 1 км ниже г. Чапаевска, ст. 5 – 30 км от устья, ст. 6 – устье р. Чапаевка.

Метод экспертных балльных оценок по П. Шреверсу [Schroever, 1973^M]

Автор, встретившись с необходимостью за короткий срок оценить состояние значительного числа водоемов Дании, применил своеобразный прием, в основу которого заложены общеэкологические представления. П. Шреверс предположил, что ненарушенное развитие экосистем ведет к увеличению их своеобразия, в частности, к увеличению видового разнообразия и стабильности, а последствия антропогенных влияний действуют в обратном направлении. На этой основе по результатам обработки проб фитопланктона, он по четырехбалльной шкале от 1 до 4 оценивал четыре величины: D – разнообразие, U – своеобразие (university), T – уровень трофии, S – уровень сапробности, и четырьмя разными способами рассчитал "биологическую оценку" (biological value) A каждого водоема по формулам:

$$\begin{aligned}
 A_1 &= D \cdot U / T \cdot S ; \\
 A_2 &= (D \cdot U - T \cdot S) / (D \cdot U + T \cdot S) ; \\
 A_3 &= (D + U - T - S) / (D + U + T + S) ; \\
 A_4 &= (D + U - T - S) .
 \end{aligned}$$

Применив свой прием к пробам из 21 водоема Дании, автор пришел к заключению, что, в общем, все четыре способа расчета приводят к сходному расположению водоемов в ряду возрастающих значений "биологической оценки".

4.7. Оценка видового сходства биоценозов

Типы мер сходства

Индексы видового сходства имеют принципиальное отличие от всех ранее рассмотренных индексов тем, что вычисленные значения сравниваются не с некоторой эталонной шкалой "грязности", "разнообразия", сапробности и проч., а определяют взаимную упорядоченность объектов (проб, описаний, видовых списков биоценозов) друг относительно друга.

Существует несколько классификаций методов расчета индексов связи [Sokal, Sneath, 1963; Goodall, 1973; Василевич, 1969; Миркин, Розенберг, 1978; Сёмкин, 1979 и др.]. Так, Р. Сокал и П. Снит различали три типа мер сходства:

- меры *ассоциации*, выражающие различные отношения числа совпадающих признаков к общему их числу, и близкие им коэффициенты *сопряженности* (квантифицированные коэффициенты связи);
- выборочные коэффициенты связи типа *корреляции* (нормированные "косинусные" меры);
- показатели *расстояния* в метрическом пространстве.

Современные исследователи [Гайдышев, 2001] уменьшают это количество типов до двух, полагая ассоциативные меры естественным распространением "косинусных" мер на номинальные шкалы.

Б.М. Миркин с соавторами [1989] выделяют также следующие типы: вероятностные меры, информационные меры и преобразованные показатели. Однако все меры являются в какой-то степени вероятностными (поскольку оценивается вероятность того, что сравниваемые объекты будут идентичными) и представляют собой некоторые алгебраические выражения (или "преобразования" по Миркину).

Выражений для мер близости или расстояния между объектами существует великое множество: уже на начало 70-х годов в своем обзоре Д. Гудол [Goodall, 1973] перечисляет около 40 коэффициентов подобия. Приводить в полном объеме конкретные формулы или хронологию их создания вряд ли целесообразно²², поэтому мы остановимся на некоторых индексах, традиционно употребляемых в геоботанике и гидробиологии (хотя и их набралось немалое количество).

Д. Гудол замечал, что «...выбор лучшего индекса – дело вкуса». Правда, один из авторов [Розенберг, 1984] полагает, что "вкус" должен диктоваться точными знаниями о возможностях того или иного показателя и целями, стоящими перед исследователем. Но...

Мем № 24: «Выбор конкретных коэффициентов зависит в первую очередь от цели исследования. А поскольку формальных правил для выбора целей нет, следовательно, не может быть и формальных правил для выбора подходящей меры сходства» В.Л. Андреев [1979б].

Меры ассоциации

Большинство выражений для индексов сходства основаны на общих положениях теории множеств, которые могут быть интерпретированы в виде диаграммы Венна (см. рис. 4.6). При использовании конкретных выражений для коэффициентов подобия в формулы могут подставляться мощности (число элементов) подмножеств *a*, *b*, *c* и *d*, если исследователи хотят ограничиться альтернативными высказываниями "отсутствие / наличие" вида, либо показатели обилия в абсолютной или интервальной шкале. В первом случае мы будем отождествлять мощность подмножества с ним самим.

²² Вспомним еще раз заповедь Н.В. Тимофеева-Ресовского (см. сноску на с. 65), – не писать того, "что все равно напишут немцы", т.е. библиографию и историю вопроса.

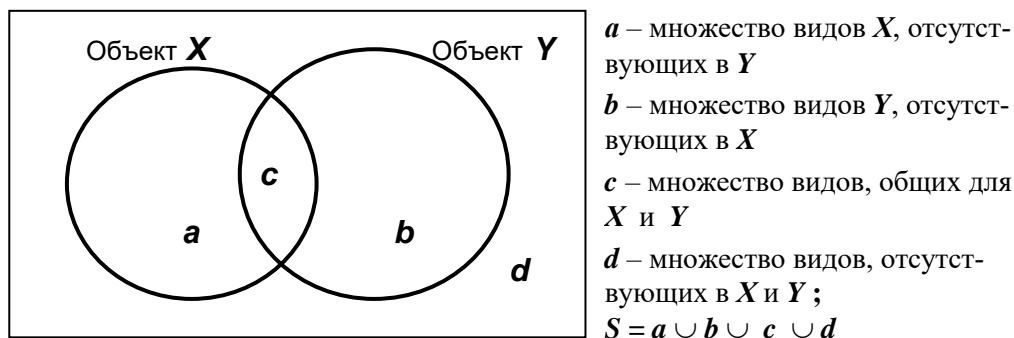


Рис 4.6. Диаграмма интерпретации составляющих подмножеств признакового пространства видов

Первая попытка количественного выражения степени сходства между сообществами принадлежала в 1901 г. швейцарскому исследователю П. Жаккару (P. Jaccard) и коэффициент флористического сходства Жаккара до сих пор широко используется в геоботанике:

$$K_J = c / (a + b - c) . \quad (4.25)$$

Гидробиологи (да и вообще, экологи) чаще применяют формулу коэффициента общности видового состава Т. Сьёрнсена [Sørensen, 1948^M]:

$$K_S = 2c / (a + b) . \quad (4.26)$$

Приведем без комментариев еще несколько подобных формул коэффициентов, оперирующих с мощностями подмножеств [Сёмкин, 1979; Миркин с соавт., 1989; Дедю, 1990]:

- Роджерса и Танимото (он же, Нордхагена): $K_3 = c / (a + b + c) ;$
- Маунтфорда: $K_4 = 2c / (2ab - ac - bc) ;$
- Рао-Рассела: $K_5 = c / (a + b + c + d) ;$
- Дейка: $K_6 = 2c / (a + b + 2c) ;$
- Кульчинского: $K_7 = (a + b) / 2ab ;$
- Экмана: $K_8 = (a + b) / c ;$
- процент несогласия: $K_9 = (a + b) / (a + b + c) .$

В качестве несимметричных мер можно отметить:

- меры включения, оценивающие "банальность" K_{10} и "экзотичность" K_{11} биоценозов [Рябинин, 1993]:

$$K_{10} = c / (a + c) ; \quad K_{11} = c / (b + c) ;$$

- трансформированный коэффициент Дайса [Миркин с соавт., 1972]:

$$K_D = [c - \min(a,b)] / [c + \min(a,b)] .$$

В дальнейшем было сформулировано [Сёмкин, Двойченков, 1973] несколько правил, по которым можно "изобрести" неограниченное количество мер, подобных K_i .

Традиционное для теории измерений хеммингово расстояние (метрика Хемминга), менее других похоже на перечисленные коэффициенты, т.к. оно не является безразмерным и не ограничено сверху числом 1:

$$R_H = (c + d) . \quad (4.27)$$

В ряде работ [Миркин, Розенберг, 1978, 1979] делаются попытки оценить, какие коэффициенты из вышеперечисленных "завышают" или "занижают" сходство между сообществами и каким коэффициентам следует отдать предпочтение в работе. Однако вряд ли имеет смысл проводить сравнительных анализ абсолютных значений коэффициентов, т.к. в данном случае единственным критерием оценки является последовательность агрегирования объектов на основании меры сходства в более крупные таксоны, иерархические деревья и проч.

Несмотря на почти повсеместную традицию использовать для оценки сходства биоценозов меры ассоциативности по Жаккару (4.25), Сьёренсену (4.26) и проч., нам не кажется плодотворной идея без особенной нужды сводить количественную шкалу, в которой измерено подавляющее большинство гидробиологических показателей к информативно более ослабленной номинальной шкале. Слишком много труда гидробиологов вкладывается в подсчет значений численностей гидробионтов, чтобы потом огрублять исходные данные в мере Сьёренсена до статистически сомнительного факта простой встречаемости видов...

Коэффициенты связи

Использование в качестве меры близости объектов косинусов углов между информативными векторами удобно тем, что функция сходства нормируется в шкале от 0 до 1 и не зависит от абсолютных значений переменных. Чтобы избежать разбиения на две дополнительные подгруппы положительно и отрицательно коррелируемых параметров, обычно используют квадраты (или абсолютные значения) косинусов углов. В разделах части 3 нами подробно будут рассмотрены конкретные формулы вычисления мер этого типа для различных шкал представления признаков: коэффициенты корреляции Пирсона, Спирмена и Кендалла, критерий χ^2 и другие меры оценки сопряженности. Ниже рассматриваются некоторые специфические для экологических исследований коэффициенты этого типа.

При подсчете мер сходства показателей обилия, выраженных в абсолютных или относительных значениях видовой численности или биомассы возможно использование *коэффициента К. Чекановского* [Czekanowski, 1911^M]:

$$M_T = \sum_{i=1}^S \min(X_i, Y_i) / (\sum_{i=1}^S X_i + \sum_{i=1}^S Y_i), \quad (4.28),$$

где X_i и Y_i – количественные значения вида i в пробах X и Y , S – общее число видов.

К другим коэффициентам, оценивающим сходство биоценозов по показателям обилия, можно отнести следующие:

- *коэффициент общности удельного обилия*, предложенный А.А. Шорыгиным [1939^M, 1952^M] для сравнения спектра питания рыб, использующий те же обозначения, что и для формулы Чекановского (4.28) (иное название – *коэффициент суммы минимумов* по А.С. Константинову [1969]):

$$M_S = \sum_{i=1}^S \min(X_i / \sum_{i=1}^S X_i, Y_i / \sum_{i=1}^S Y_i); \quad (4.29)$$

- *коэффициент биоценологического сходства Б.А. Вайнштейна* [1976] для оценки комбинированного сходства биоценозов по обилию и видовому составу:

$$K_{комб} = M_S \cdot K_J',$$

где M_S – коэффициент общности удельного обилия, K_J' – коэффициент сходства видового состава [Алехин с соавт., 1925^M], полностью совпадающий с коэффициентом Жаккара (4.25).

Меры расстояния

Наиболее общей формулой для подсчета расстояния в m -мерном признаковом пространстве между объектами X_1 и X_2 является *мера Минковского* [Ким с соавт., 1989]:

$$D_S(X_1, X_2) = \left[\sum_{i=1}^m |x_{1i} - x_{2i}|^p \right]^{1/r}, \quad (4.30)$$

где r и p – параметры, определяемые исследователем, с помощью которых можно прогрессивно увеличить или уменьшить вес, относящийся к переменной i , по которой соответствующие объекты наиболее отличаются. Параметр p ответственен за постепенное взвешивание разностей по отдельным координатам, параметр r определяет прогрессивное взвешивание больших расстояний между объектами.

Мера расстояния по Евклиду получается, если метрике Минковского положить $r = p = 2$, и является, по-видимому, наиболее общим типом расстояния, знакомым всем по школьной теореме Пифагора, – геометрическим расстоянием в многомерном пространстве, которое вычисляется следующим образом:

$$D_E(X_1, X_2) = \left[\sum_{i=1}^m (x_{1i} - x_{2i})^2 \right]^{1/2}. \quad (4.31)$$

Заметим, что евклидово расстояние может быть вычислено как по исходным, так и по стандартизованным данным (например, нормированным на интервале от 0 до 1).

При $r = p = 1$ метрика Минковского дает "расстояние городских кварталов" (*манхэттенское расстояние*), которое является просто суммой разностей по координатам:

$$D_M(X_1, X_2) = \sum_{i=1}^m |x_{1i} - x_{2i}|. \quad (4.32)$$

В большинстве случаев эта мера расстояния приводит к таким же результатам, что и обычное расстояние Евклида. Однако отметим, что для нее влияние отдельных больших разностей (выбросов) уменьшается, так как они не возводятся в квадрат.

При $r = p \rightarrow \infty$ имеем метрику доминирования (она же, *супремум-норма* или *расстояние Чебышева*), которая вычисляется по формуле:

$$D_T(X_1, X_2) = \max |x_{1i} - x_{2i}|. \quad (4.33)$$

Это расстояние может оказаться полезным, когда желают определить два объекта как "различные", если они различаются по какой-либо одной лимитирующей координате (каким-либо одним измерением).

На практике, особенно в медико-биологических исследованиях, часто возникает проблема исследования связи в таблицах данных, измеренных в различных шкалах. Для этой цели был предложен [Gower, Ross, 1969; Ким с соавт., 1989] коэффициент Гауэра, допускающий одновременное использование трех шкал: количественной, порядковой и номинальной:

$$S(X_1, X_2) = \sum_{i=1}^{m_n} K_i + \sum_{i=1}^{m_p} P_i + \sum_{i=1}^{m_x} D_i. \quad (4.34)$$

При этом:

- для номинальных признаков $i = 1, 2, \dots, m_n$ алгоритм подсчета вклада признаков K_i совпадает с подсчетом коэффициента Жаккара;
- вклад P_i порядковых признаков $i = 1, 2, \dots, m_p$ совпадает с хемминговым расстоянием, если последнее мысленно обобщить на ранжированные переменные;
- для количественных признаков $i = 1, 2, \dots, m_x$ $D_i = 1 - |x_{1i} - x_{2i}| / S_i$, где S_i – размах i -го признака, вычисленный по всем объектам.

Одним из важных шагов по упорядочению используемых оценок явилось формулировка понятий «эквивалентности» и «коэквивалентности» мер сходства. Согласно теореме Б.И. Семкина и В.И. Двойченкова [1973], две меры r_1 и r_2 эквивалентны, если они связаны монотонно возрастающей зависимостью φ , т.е. $r_1 = \varphi(r_2)$. Примерами таких функций φ являются:

- линейное преобразование $r_1 = \alpha + \beta \cdot r_2$, позволяющее любой коэффициент сходства умножить, разделить или сложить с некоторым постоянным числом;
- потенциальные функции, удобные для нормировки: $r_1 = \frac{1}{1 + \alpha \cdot r_2^\varepsilon}$; $r_1 = \beta \cdot e^{-\alpha r_2^\varepsilon}$,

где α и β – константы, ε – любое рациональное число.

Понятие эквивалентности мер имеет важное следствие: если две меры эквивалентны, то они приводят к одной и той же последовательности объектов, упорядоченных по их сходству:

близкие объекты остаются близкими и т.д. Например, можно показать, что свойством эквивалентности обладает континуум мер сходства, представленных формулой:

$$K = \frac{2c}{(1+u)(a+b+2c) - 2u \cdot c}, \quad (4.35)$$

где $-1 < u < \infty$, а остальные обозначения приведены на рис. 4.6. Нетрудно заметить, что при $u = 0$ мы имеет хорошо известный коэффициент Сьёренсена (4.26); мера при $u = 1$ численно совпадает с коэффициентом Жаккара (4.25), а при $u = 3$ – с коэффициентом Сокала–Снита и т.д., поэтому споры о том, какой коэффициент лучше, можно считать беспредметными. То же можно сказать и об использовании более "сложных" формул, которые часто создают только иллюзию объективности и точности классификации.

Если бы принцип оценки эквивалентности получил достаточное распространение в количественной гидробиологии лишь только как "санитарно-профилактическое средство", препятствующее изобретению новых эмпирически мало подтвержденных индексов, неустанно появляющихся в различных областях, от этого была бы большая польза: биологическая литература освободилась бы от множества неоправданных манипуляций с числами и ненадежных рекомендаций.

Введенное понятие «эквивалентности» оказывается полезным еще и потому, что приводит к пониманию смысла использования неэквивалентных мер, как наиболее независимых и ценных членов "распознающего коллектива" [Розенберг с соавт., 1994], оценивающего различные свойства анализируемого материала. Если, например, выводы, полученные на основе использования корреляционных мер сходства, совпадут с выводами кластерного анализа на основе евклидовой дистанции, то с уверенностью можно утверждать, что они действительно основаны на исходных данных, а не на методе их извлечения.

4.8. Элементы продукционной гидробиологии

Мем № 25: *«Биологическая структура является открытой нелинейной системой, которая препятствует своему разрушению за счет способности к самоорганизации. Фактически, жизнь есть не что иное, как система по понижению собственной энтропии за счет повышения энтропии окружающей среды. Но расплатой за устойчивость живой материи является ее зависимость от поступления энергии извне, как необходимого условия существования неравновесной биосистемы. Если способность системы к самоподдержанию своей структуры ослабевает, в том числе из-за неадекватного энергетического восполнения, то ее элементы становятся менее организованными и различия между ними постепенно нивелируются»* С.Б. Пашутин [URL].

Научное формирование развернутых представлений о механизмах трофических взаимосвязей и динамике биотического круговорота в водных экосистемах связано с развитием представлений о балансе вещества и энергии в водоеме, основные методологические концепции которых разработаны П. Бойзен-Иенсенем [Boysen-Jensen, 1919], Л.А. Зенкевичем [1934], Г.Г. Винбергом [1936], В.С. Ивлевым [1938], Р. Линдемманом [Lindeman, 1942], А.Ф. Алимовым [1982, 1987, 1988] и др. Существуют многочисленные литературные источники [Шмальгаузен, 1935; Зенкевич, 1951; Ивлев, 1955; Винберг, 1960, 1979а,б; Россолимо, 1964; Хатчинсон, 1969; Бульон, 1983, 1994; Заика, 1983; Гутельмахер, 1986; Алимов, 1989; Голубков, 2000], посвященные теоретическому обоснованию и принципам расчета функционально-энергетических характеристик различных групп водных организмов. В результате структурного анализа и математического моделирования биотических балансов к настоящему времени установлена и количественно выражена генеральная схема материально-энергетических потоков в разных по типу и характеру водных биоценозов. Отсылая заинтересованного читателя к фундаментальным трудам по этой тематике, в настоящем разделе мы ограничимся общей схемой расчета продукционно-деструкционных показателей на примере зообентоса.

Процессы конструктивного и энергетического обмена в водной экосистеме основаны на тесно и закономерно взаимосвязанных механизмах биогеохимического круговорота, подчиняющегося общим законам сохранения материи Лавуазье–Ломоносова. Это дает возможность представить функционирование сообщества гидробионтов на любом организационном уровне (организм, популяция, биоценоз или водоем в целом) в виде балансовой модели: формальных структурных элементов-преобразователей, связанных материальными потоками и осуществляющих трансформацию вещества и энергии. Для каждого блока модели существует два вида потоков:

- *входные потоки* извне (солнечная энергия, аллохтонные вещества, поступающие с площади водосбора, детрит, продукция нижних трофических уровней и т.д.) или поступающие из других блоков модели (перераспределение материи внутри рассматриваемой организационной структуры), образующие ресурсную составляющую;
- *исходящие потоки*, являющиеся результатом биопродукционных процессов внутри блока (синтез продукции, используемой на других трофических уровнях или внутри самой модели для поддержания гомеостаза), либо связанные с диссипацией материи (вынос или деструкция вещества до минеральной формы, рассеяние энергии).

Для корректно сводимого материального баланса необходимы следующие условия:

- все материальные потоки должны быть соизмеримыми, т.е. выражаться в одних и тех же единицах размерности (например, в тоннах, молях или джоулях);
- алгебраическая сумма входящих и исходящих потоков для каждого составляющего блока в отдельности и всей модели в целом должна быть равна нулю.

Биотический баланс может быть выражен в абсолютных значениях (например, для всего водоема в целом), либо пересчитан на единицу наиболее важной ресурсной или итоговой составляющей: 1 джоуль ассимилированной солнечной энергии, 1 м² площади дна или 1 тонну образовавшейся биомассы. В отличие от материальных балансов искусственных технологических процессов, биотический баланс природной экосистемы в принципе не может быть стационарным, поэтому важнейшей его определяющей составляющей является период времени, за который он был составлен.

Структура основных материальных потоков биотического баланса представлена на рис. 4.7, где объем поступления вещества с потребленной пищей (рацион) обозначен как C , количество не усвоенной пищи – F , ассимиляция пищи гидробионтами – A :

$$A = C - F. \quad (4.36)$$

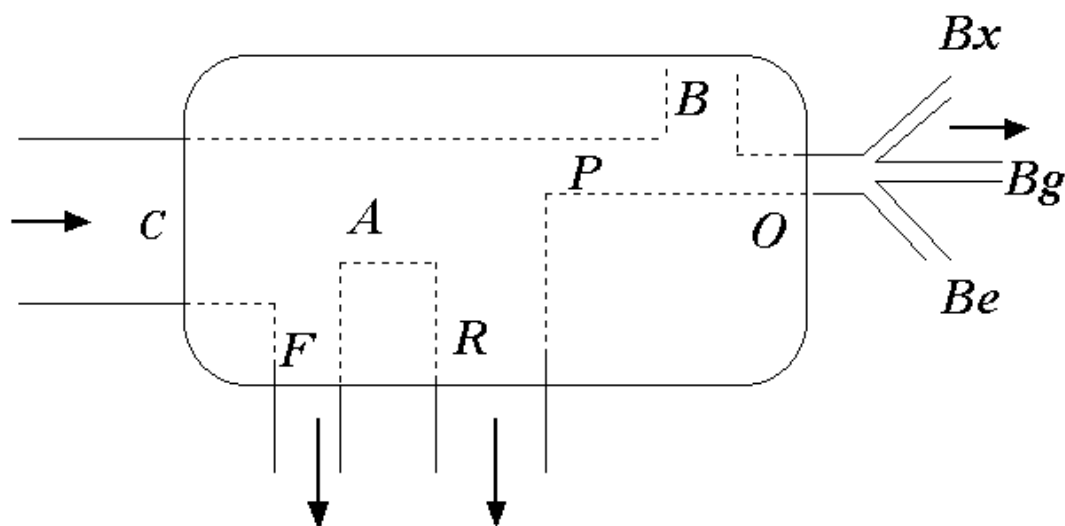


Рис. 4.7. Структура основных потоков обмена веществом и энергией с внешней средой организма или популяции (C – потребление или рацион, A – ассимиляция, F – не усвоенная пища, R – траты на обмен, O – отторгаемая продукция, B_g – половые продукты, B_x – экскреты, B_e – экзувии, B – прирост биомассы)

Обмен веществ, связанный с жизнедеятельностью, сопровождается выполнением внешней и внутренней работы, сжиганием части ассимилированной пищи и, в конечном итоге, преобразованием энергии сгорания в тепловую. Интенсивность этого процесса трат на обмен обозначена как R . Разность между потоками энергии, поступающей в организм с ассимилированной пищей, и потоком рассеиваемой тепловой энергией в результате трат на обмен представляет собой продукционный поток энергии P :

$$P = A - R . \quad (4.37)$$

В терминах энергии процесс продуцирования можно определить как суммарный процесс накопления биомассы B организмами и их популяциями в виде энергосодержащей соматической ткани, а также в виде отторгаемой продукции O , включающей генеративные (половые) продукты B_g , экскреты B_x и другие отчуждаемые продукты роста B_e (экзувии, слизь, метаболиты).

Уровень особи

Рассмотрим вкратце систему понятий, предельно четко сформулированных В.В. Меншуткиным [1971] и используемых для построения биотических балансов популяций и сообществ водных животных. В качестве первичного (неделимого) элемента модели принимается особь, существование которой в каждый момент времени определяется следующими основными компонентами: τ – возраст особи, т.е. время, прошедшее с момента начала самостоятельного развития яйца или икринки; w – масса тела особи; k – калорийность тела особи (положительная переменная, имеющая размерность энергии, отнесенной к единице массы); c – реальный рацион, равный количеству пищи, потребляемой особью в единицу времени. Тогда рост особи – это изменение массы тела в единицу времени:

$$v = \frac{w_{t+\Delta t} - w_t}{\Delta t} = \frac{\Delta w}{\Delta t} . \quad (4.38)$$

Энергия ассимилированной особью пищи в единицу времени (a_I) равна сумме трат на обмен r , изменения энергосодержания тела особи и энтальпии генеративных продуктов:

$$a_I = r + k \frac{\Delta w}{\Delta t} + \lambda w_o k_o , \quad (4.39)$$

где w_o и k_o – масса и калорийность выметанных половых продуктов, λ – количество яиц или икринок, откладываемых особью в единицу времени. Если ввести коэффициент переваривания и усвоения пищи $u = a_I / c$, то закон сохранения энергии применительно к особи приводит к следующему балансовому уравнению

$$uc = r + k \frac{\Delta w}{\Delta t} + \lambda w_o k_o . \quad (4.40)$$

Важным показателем биоэнергетики особи является коэффициент использования ассимилированной энергии на рост (k_2), равный приросту массы тела на единицу массы усвоенной пищи с учетом их калорийности:

$$k_2 = \frac{k \frac{\Delta w}{\Delta t}}{uc} = \frac{k \cdot \Delta w}{r \cdot \Delta t} . \quad (4.41)$$

Коэффициент k_2 , как показали работы В.С. Ивлева, закономерно снижается с увеличением возраста животного, в следствие того, что генеративный (экзувиальный) рост начинает превалировать над соматической составляющей.

По литературным данным [Алимов, Финогонова, 1976] усвояемость пищи u для всех нехищных животных, за исключением олигохет, может быть принята равной 0.6, для олигохет – 0.5, для хищных животных – 0.8. Средние значения калорийности k обычно считают равными 19.2 кДж/г сухого вещества для водорослей и макрофитов, а



Виктор Сергеевич ИВЛЕВ
(1907-1964)
ихтиолог, гидробиолог

для водных животных – 23.01 кДж/г. Естественно, что калорийность организмов будет различаться в зависимости от того, рассчитывается ли она для сухой, сырой массы или органического вещества тела животных. Так энергетический эквивалент сырой массы донных организмов зообентоса варьируется в достаточно широких пределах от 4.18 кДж/г для Oligochaeta до 1.0 кДж/г для Dreissenidae (с раковинной).

В практике биоэнергетических исследований последних десятилетий канонизировано применение степенных уравнений типа

$$Y = a X^k, \quad (4.42)$$

которые, как считают многие авторы (см. [Винберг, 1976]), достаточно хорошо описывают параболические зависимости, постулируемые для расчета большинства компонентов материального баланса особи:

- потребления пищи, прироста размеров или биомассы и интенсивности энергетического обмена как функции веса тела самых различных систематических групп пойкилотермных животных;
- веса тела как функции линейного размера организма;
- калорийности массы тела гидробионтов как функции их возраста.

В частности, траты на обмен у донных животных при нормальных условиях обычно рассчитывают по уравнениям потребления кислорода животными в процессе дыхания в зависимости от массы тела, имеющим вид для:

ракообразных	$q_o = 0.125 \cdot w^{0.759}$ [Сущенко, 1972],
олигохет	$q_o = 0.105 \cdot w^{0.75}$ [Камлюк, 1974],
двустворчатых моллюсков	$q_o = 0.129 \cdot w^{0.895}$ [Алимов, 1975],

где q_o , мгО/ч – скорость обмена при $t = 20^\circ\text{C}$; w , г – масса тела особи. Чтобы перейти к тратам на обмен, выраженным в количестве диссипативной энергии r_o , расходуемой особью на поддержание своей жизнедеятельности, необходимо количество потребленного кислорода q_o умножить на оксикалорийный коэффициент 14.23 Дж/мгО. Ускоряющее влияние температуры среды на различные физиологические процессы, в частности, на интенсивность газообмена пойкилотермных животных, учитывается с использованием температурных поправок $\beta_r(t)$ в уравнении $r = r_o \beta_r(t)$, которые могут быть взяты по “нормальной кривой” Круга [Винберг, 1956, 1983], либо с использо-

ванием коэффициента Вант-Гоффа $\beta_r(t) = 2.25^{\frac{t-20}{10}}$, коэффициента термолабильности Б.М.Медникова и проч.

Наш комментарий: Теоретически обосновывая канонизацию уравнения (4.42), Г.Г. Винберг [1956] и Н.П. Макарова [1975] связывают его с уравнением скорости анаболизма Л. фон Бергаланфи [Bertalanffy, 1964]. Не отрицая известной адекватности параболической зависимости для описания широкого класса процессов биоэнергетики, мы считаем малопродуктивной догмой идею “универсализма” не совсем удобного в точных расчетах степенного уравнения $Y = a X^k$. Можно привести целый ряд иных более удобных математических формул, которые будут описывать те же экспериментальные данные с не меньшей степенью адекватности. Кроме этого, определенной методологической ошибкой статистической обработки [Умнов, 1976] является широко практикуемая линеаризация степенного уравнения путем логарифмирования в уравнение регрессии вида: $\lg Y = \lg a + k \lg x$. Как будет показано ниже в главе 5, коэффициенты этих обоих уравнений, оптимальные относительно суммы квадратов невязок, далеко не идентичны между собой.

Группа особей и популяция

Вторым уровнем системы модельных уравнений материально-энергетического баланса является группа (когорта) – множество особей, параметры состояния которых одинаковы или находятся в некоторых заданных пределах. Например, множество особей, находящихся на одинаковой стадии развития, образуют *стадийные группы*. По иному определяющему признаку могут быть скомплектованы *весовые группы*, *возрастные группы* и т.д. Состояние группы $I_i \in G$ определяется ее мгновенной численностью N_i и статистической функцией распределения всех регистрируемых показателей функционирования отдельных организмов. В большинстве балансов эти

распределения достаточно описывать средними значениями: средний вес \bar{W} , средняя калорийность \bar{K} или средний возраст особи $\bar{\tau}$ в группе.

Суммарный вес особей данной группы составляет ее биомассу:

$$B = \sum_{I_i \in G} w_i = \bar{w} \cdot N \quad (4.43)$$

По аналогичным формулам могут быть рассчитаны: C – суммарный реальный рацион всех особей группы, R – суммарные траты на обмен; U – суммарное количество несъеденной и непереваренной пищи; J – суммарная масса генеративных продуктов и метаболитов. Состав групп всегда нестационарен во времени и определяется динамикой смертности, а также процессами перехода особей из одной группы в другую. Например, изменение численности особей, входящих в стадийную группу G_i , описывается следующим соотношением:

$$N_{t+\Delta t}^{G_i} = (1 - m_i - b_i) N_t^{G_i} + b_{ji} N_t^{G_j} \quad (4.44)$$

где m_i – коэффициент смертности особей, выловленных или съеденных хищниками за период Δt , b_i – коэффициент выбытия особей на следующую стадию, связанный с продолжительностью этапа развития; b_{ji} – коэффициенты поступления особей из других групп.

Третий уровень иерархии баланса составляют популяции – множество особей или групп особей, обладающих свойством самовоспроизведения. Большинство характеристик и свойств группы особей можно перенести и на популяцию. Так появляется понятие о численности популяции N , ее биомассе B и тратах на обмен R , как суммы показателей по всем возрастным группам, составляющим популяцию, а также среднем возрасте $\bar{\tau}$ и среднем весе особи \bar{W} , которые рассчитываются как средневзвешенные значения по обычным статистическим формулам. Однако понятия, связанные с процессом перехода особей из одной группы в другую, не могут иметь смысла для популяции как для системы, замкнутой в отношении операций перехода и размножения. Кроме диссипативных потерь R и метаболитов, материально-энергетический выход из популяции P' осуществляется только через биомассу погибших в единицу времени особей. Отношения размножения популяции заключаются в приросте численности особей в группах, имеющих соответственный стадийно-возрастной статус.

Специфической характеристикой популяции является понятие «продукции». Под *продукцией популяции* понимается количество органического вещества, создаваемого всеми особями популяции в виде прироста массы их тела и выделения половых продуктов за единицу времени [Boysen-Jensen, 1919; Винберг, 1936; Заика, 1983]. В энергетическом выражении продукция определяется как

$$P = \frac{k}{\Delta t} \sum_{i=1}^n \Delta w_i \cdot N_i + k_o \sum_{i=1}^n w_o \lambda_i \cdot N_i \quad (4.45)$$

где Δw_i – прирост массы тела особей i -й группы популяции, независимо от того, остались ли они в живых, или погибли в течение временного шага системы Δt ; n – число групп в популяции. В тех

же терминах энергетический выход популяции можно представить как $P' = k \sum_{i=1}^n w_i m_i \cdot N_i$,

где m_i – коэффициент смертности особей.

Таким образом, популяцию можно определить, как материальный преобразователь, на вход которого подается вещество или энергия в виде пищи, а на выходе образуется органическое вещество иного уровня организации, которое является энергетической базой для популяций других трофических уровней. В стационарном случае, т.е. когда нет изменения биомассы популяции во времени ($\Delta B = 0$), продукция популяции равна ее энергетическому выходу и $P = P'$.

В общем случае энергетический баланс популяции можно записать в виде

$$C - F = R + k \frac{\Delta B}{\Delta t} + k \cdot \bar{w} \cdot M; \quad P = C - R - F; \quad P' = k \cdot \bar{w} \cdot M, \quad (4.46)$$

где C – рацион; F – неусвоенная пища; M – количество особей, выбывших из популяции и использованных в пищу на других трофических уровнях.

Компоненты биотического баланса популяции по сложившейся традиции используются для получения различных коэффициентов, которым зачастую придается особо важный, почти мистический смысл. Наиболее широко цитируемым является показатель интенсивности продукционного процесса («удельная продукция» по В.Е. Заике [1983]) или отношение продукции популяции к ее средней биомассе, называемое также *коэффициентом P/B*:

$$\frac{P}{B} = \frac{\frac{1}{\Delta t} \sum_{i=1}^n \Delta w_i \cdot N_i + k_o \sum_{i=1}^n w_o \lambda_i \cdot N_i}{\sum_{i=1}^n \bar{w}_i \cdot N_i}. \quad (4.47)$$

Численные значения величины продукции, а, следовательно, и коэффициента P/B зависят от выбора единицы времени (суточные, недельные, месячные, годовые и прочие значения P/B). Для сравнения не абсолютной, а относительной интенсивности продукционного процесса иногда относят коэффициент P/B к средней продолжительности жизни особи как к естественному масштабу времени популяции. Однако до сих пор нет единого мнения (может – и не должно быть?) относительно того, какие величины P/B характерны для тех или иных объектов или условий их функционирования.

Другой функциональной характеристикой сообществ организмов является *соотношение Шредингера P/R между продукцией и диссипативной энергией*, рассеиваемой организмами в процессах обмена. А.Ф. Алимовым [1989] было показано, что для широкого класса популяций донных животных это соотношение за год или вегетативный сезон статистически постоянно и составляет 1.45 кДж/м^2 .

Приведенный выше коэффициент k_2 (4.41) для особи сохраняют свой смысл и для популяции:

$$k_2 = \frac{P}{P + R} = \frac{P/B}{P/B + R/B}, \quad (4.48)$$

однако его кумулятивные значения за достаточно большой промежуток времени не соответствуют законам онтогенетического развития отдельных особей, а зависят от динамики размерно-возрастного состава популяций, косвенно определяемой условиями внешней среды (трофические условия, температура и проч.) В любом случае, эффективность продукции, т.е. k_2 популяции, оказывается тем выше, чем больше в популяции доля особей младшего возраста, которым свойственны более высокие величины k_2 . Если принять во внимание постоянство отношения Шредингера ($P/R = 1.45 \text{ кДж/м}^2$ за сезон), то легко показать, что для большинства видов зообентоса среднесезонное значение $k_2 = 0.26$. Это соотношение позволяет оценить приблизительно продукцию популяции за вегетационный сезон по рассчитанным тратам на обмен (так называемый, "физиологический" метод).

Балансы трофических уровней и биоценозов

Множество популяций, характерных сходными кормовыми связями, образует *трофический уровень*. Схематически трофо-динамическое направление в гидробиологии, основные положения которого разработаны Р. Линдеманом [Lindeman, 1942] и Дж. Хатчинсоном [1969] (см. раздел 2.2), сводится к следующему.

Первичное автохтонное органическое вещество образуется на первом трофическом уровне в ходе фотосинтеза зелеными растениями или хемосинтеза бактериями. "Пищей" в данном случае является аккумулированная солнечная энергия и аллохтонные органические вещества, поступающие в водоем извне с площади водосбора. В дальнейшем происходит поэтапная трансформация материи, синтезированной фитопланктонами на первом уровне: на последующих трофиче-

ских звеньях животные высшего уровня используют запас материи нижних уровней для построения своего тела. Каждый из выделенных уровней характеризуется своими компонентами биотического баланса: рационом C , ассимиляцией A , деструкцией или тратами на обмен R , продукцией P и массопереносом с уровня на уровень P' . Принято строго различать (по всей видимости, не из общетеоретических соображений, а из-за различий в технике расчетов) *первичную продукцию*, или продукцию автотрофов, и *вторичную продукцию*, или продукцию консументов-гетеротрофов.

Концепция трофических уровней позволила рассматривать процессы потребления, продуцирования, деструкции в сообществах во всей их взаимосвязи. Однако застывшая детерминированность трофических цепей не свойственна реальным экосистемам. Во многих случаях особи одного и того же вида на разных стадиях развития или при изменении внешних условий могут легко переходить с одной пищи на другую, а также менять тип и способ питания. Более строгое представление о трофических взаимодействиях дает односвязная трофическая сеть, т.е. более разветвленная по сравнению с трофическими уровнями система трофических связей, имеющая следующий формализм.

Пусть на множестве популяций (или групп особей) задан граф трофических связей $\Gamma(S)$, где два любых узла могут быть связаны ребром, направленным от хищника к жертве. Каждому ребру поставлена в соответствие трофическая ценность j -й жертвы по отношению к i -му хищнику как априорная вероятность ее поедания этим хищником. Тогда под *биотическими сообществами* можно понимать связанные компоненты этого графа – фрагменты узлов сети, внутренне неразделимые, но изолированные друг от друга на некотором статистическом уровне значимости. Множество популяций биотического сообщества, составляющих изолированный фрагмент трофической сети, вместе с замкнутыми циклами биогенных элементов и компонентами неживой природы образуют экосистему или биогеоценоз. Из данного определения следует, что экосистема в отличие от сообщества обязательно включает в себя автотрофные элементы, т.к. в противном случае невозможно получение замкнутых биогеохимических циклов.

Определение продукции биоценозов – один из наиболее сложных и неоднозначно трактуемых вопросов продукционной гидробиологии и экологии в целом. С общетеоретических позиций продукция экосистемы (P_e) представляет собой разность между первичной продукцией экосистемы (P_p) и суммарными тратами на обменные процессы у всех гидробионтов системы (R_e) [Алимов, 1987]: $P_e = P_p - R_e$. В тех случаях, когда $R_e > P_p$, существование биотической части экосистемы возможно только за счет поступления органических веществ извне.

Схема биотического баланса водных экосистем, впервые предложенная и составленная Г.Г. Винбергом, обычно трактуется как распределение энергии, аккумулированной в виде первичной продукции, между всеми остальными верхними трофическими уровнями: зоо- и бактериопланктоном, бентосными организмами, рыбами, водными и околотовными животными и человеком. Анализ биотических балансов для разных водоемов позволил выявить ряд общих закономерностей и выводов [Алимов, 1989]. Например:

- суммарная средняя биомасса (кДж/м²) всех гидробионтов, включая водные растения, бактерии, зоопланктон и рыб, возрастает пропорционально увеличению первичной продукции в этих водоемах и не превышает 13% ее годового объема ($B = 0.126 P_p$);
- продукция макроконсументов также возрастает с увеличением первичной продукции и составляет для зоопланктона менее 8 % и для зообентоса от 8 до 13% энергии, аккумулированной в первичной продукции (для рыб – менее 1%).

Мы привели эти цифры, чтобы показать некоторую механистическую условность биотических балансов экосистем, основанных исключительно на энергетике *сгорания* органического вещества (напомним, что калорийность биомассы равна количеству теплоты, выделившейся при ее сжигании до воды и углекислоты). В результате этого, расходная часть (т.е. вторичная продукция) энергетического баланса водоема оказывается существенно меньше приходной части (первичной продукции) – см. табл. 21 [Алимов, 1989]. При этом не учитывается, что при последовательном переходе на более высокие трофические уровни биохимическая материя тела особей приобретает дополнительную ценность, хотя бы по причине эндотермичности процессов синтеза высокоорганизованного белка в процессе роста. Если проиллюстрировать это отвлеченным примером, то вязанка дров и мешок с долларовыми ассигнациями может иметь одинаковую теплотворную способность, но потребительская и энергетическая (в смысле затрат на их изготовление) ценность долларов значительно выше. На наш взгляд, оценивать в балансах продукцию рыб и других

консументов исключительно как "топливо" в терминах *теплоты сгорания* без учета *энергии образования*, затраченной на синтетические биохимические процессы, представляется не вполне корректным.

В научном сообществе к проблеме биотических балансов водных экосистем имеется далеко не однозначное отношение, иллюстрируемое следующим "декларативным мемом":

Мем № 26: «Работы Г.Г. Винберга и А.А. Умнова, на которые ссылается автор, были, прежде всего, вызваны требованиями унификации подходов к обработке и представлению многочисленных данных по продукции, обмену, рационам и другим биоэнергетическим параметрам, накопленных в рамках МБП в различных академических и отраслевых институтах. В те годы действительно господствовало мнение, что "крупноблочные" балансовые модели приблизят нас к управлению потоками энергии в естественных и искусственных (в основном водных) экосистемах. Потребовалось гораздо менее 26 лет, чтобы понять, что даже успешное сведение баланса (правда редко реализуемое) констатирует КПД процессов, но не раскрывает их механизмы. Балансовые модели ставили больше вопросов, чем давали ответов и вынудили отказаться от многих упрощенных схем и представлений. Нисколько не умаляя роль этого подхода в активизации научной мысли, следует признать, что он представляет всё же исторический интерес».

[Из рецензии редакции "Журнала общей биологии", на отклоненную статью В.К. Шитикова, 2002 г.]

На наш взгляд, изучение биопродукционных процессов на "микрокинетическом" уровне (особь и группа особей) отнюдь не является "историческим анахронизмом", а представляет собой одну из основных задач гидробиологии. Что касается "крупноблочных" балансовых моделей, то серьезный и беспристрастный анализ опыта их разработки с доказательной оценкой уровня агрегированности (популяция, трофический уровень или водоем в целом), выше которой любые балансы делаются бессмысленными, еще ждет своего читателя. В любом случае, в пользу "макрокинетических" биотических балансов говорят не декларации, а конкретные практические результаты, позволившие, например, А.Ф. Алимову, Н.М. Мингазовой и другим исследователям дать достаточно детальную оценку состояния экосистем уникальных карстовых водоемов Татарстана [Уникальные экосистемы..., 2001].

Иллюстративный материал

Приведем практический пример расчета составляющих биопродукционного баланса сообщества зообентоса на одной из станций на р. Чапаевка, выполненный по результатам разовых экспедиционных наблюдений и с использованием упрощенной схемы. При отсутствии данных о первичной продукции, популяционной динамике донных организмов и их трофической связи с другими консументами, представленные расчеты являются в значительной мере условными и приближенными. Результаты представим в сводной табл. 4.12 (все энергетические показатели приведены в ккал).

Траты на обмен у каждого i -го вида донных животных рассчитаем по уравнениям потребления кислорода животными в процессе дыхания в зависимости от массы тела по следующей формуле, включающей оксикалорийные и пересчетные коэффициенты:

$$R_i = \frac{81.6 \cdot A_i \cdot N_i \cdot (B_i / N_i)^{K_i}}{1000 \cdot \varepsilon_t} \text{ (ккал/м}^2 \text{сут)},$$

где: N_i и B_i – численность и биомасса рассчитываемого вида гидробионта; A_i и K_i – коэффициенты степенного уравнения энергетического обмена для данной группы животных по вышеприведенным литературным данным, а также по работам Е.В. Балушкиной [1987], С.М. Голубкова [2000] и др.; ε_t – температурная поправка на ускорение обменных процессов по уравнению Вант-

Гоффа $\varepsilon_t = 2.25^{\left(\frac{20-t}{10}\right)}$, t – температура воды в придонном слое в момент отбора пробы.

Продукцию популяций отдельных видов животных рассчитаем по известным из литературы величинам удельной продукции за сутки C_w [Заика, 1983]. Величина C_w равна для олигохет 0.03, личинок хирономид – 0.033, личинок поденок – 0.027, моллюсков сфериид – 0.0044 и др. [Алимов, Финогенова, 1976]. Для дальнейших расчетов используем данные по калорийности (ккал/г) разных групп животных, что позволяет перевести весовые значения составляющих энергобаланса в энергетические: для олигохет – 1.0, хирономид – 0.63, поденок – 0.92, сфериид с раковиной – 0.35, гаммарид – 0.9, вислоккрылок – 0.92 [Алимов с соавт., 1977; Каменев, 1993].

В каждом донном сообществе выделим два трофических уровня – нехищных и хищных животных. Ко вторым отнесем личинок вислоккрылок, хелеид и некоторых видов хирономид (*Ablabesmyia longistyla*, *A. monilis*, *Cryptochironomus* gr. *defectus*, *Procladius choreus*, *Pr. ferrugineus*, *Tanypus punctipennis*).

Суммарную продукцию донных сообществ (P_c) определим в виде суммы продукций нехищных ($P_{нх}$) и хищных (P_x) животных за вычетом рациона хищников (C_x): $P_c = P_{нх} + P_x - C_x$ [Алимов, 1989]. В связи с тем, что основную долю хищников в р. Чапаевка составляют личинки хирономид, которые являются в основном факультативными хищниками, рацион хищных животных для дальнейших расчетов примем равным 30% [Тодераш, 1984]. Тогда уравнение расчета продукции донных сообществ будет иметь следующий вид:

$$P_c = P_{нх} + P_x - 0.30 \cdot P_x .$$

Для каждого вида и таксономической группы рассчитаем также отношение продукции донных сообществ к суммарным тратам на обменные процессы P_c/R , которое рассматривается как коэффициент стабильности или полезного действия донных сообществ на различных участках реки [Алимов, Финогенова, 1976].

Биоразнообразию анализируемых донных сообществ оценим по индексу Шеннона, а характер доминирования отдельных видов – в соответствии с индексом по В.Ф. Палию и А. Ковнацкому.

Полученные результаты по составляющим энергетического баланса донных сообществ могут быть использованы в дальнейшем для количественной оценки их участия в процессах самоочищения водоемов. Калорийность (энергосодержание) органического вещества ОВ в воде рассчитывается по величине бихроматной окисляемости БХО ($\text{гO}_2/\text{м}^3$) для двух вариантов:

$$OB_{min} = K_{ov} \cdot OB \cdot 0.05 \text{ ккал/м}^2 \text{ – в слое воды 5 см над уровнем дна;}$$

$$OB_{max} = K_{ov} \cdot OB \cdot \text{ккал/м}^2 \text{ – в слое 1 м,}$$

где $K_{ov} = 0.67 \cdot 10.6 \cdot 0.5 = 3.551$ ккал/г – пересчетный коэффициент теплотворной способности [Алимов с соавт., 1977].

Итог самоочищающей способности донных организмов оценим как отношение ассимилированной энергии ($A = P + R$) и суточного рациона C нехищных животных зообентоса, к калорийности органического вещества ОВ, распределенного в слое воды 5 см и 1 м над 1 м^2 площади дна. В результате расчетов по данному примеру можно увидеть, что донное сообщество ежесуточно утилизирует свыше 15% чужеродных (ксенобиотических) органических веществ, содержащихся в придонном слое воды, причем около 8% общей массы ОВ расходуется непосредственно на прирост биомассы и обменные процессы. Доля зообентоса в самоочищении реки для слоя воды 1 м существенно меньше, т.к. в средних и верхних слоях водоема ведущая роль в деструкции загрязнений переходит к планктонным организмам и бактериальной микрофлоре, продукция которых нами не учитывалась.

Несмотря на известные допущения при расчете биотического баланса, имеющие место в описанном иллюстративном примере, эта методика позволила нам в свое время обработать несколько сотен проб зообентоса и представить достаточно четкую картину антропогенного загрязнения р. Чапаевка, оценить пространственную динамику функционально-продукционных характеристик сообщества донных организмов и долю его участия в самоочищении реки [Экологическое состояние..., 1997].

Таблица 4.12.

Сводная расчетная таблица гидробиологических данных

Наименование видов	Индекс до-минирования	Численность N, экз/м ²	Биомасса B, г/м ²	Траты на обмен R, кал/сут*м ²	Продукция P, кал/сут*м ²	Ассимиляция A, кал/сут*м ²	Рацион C, кал/с*м ²	Полезность биоценоза, P/R	В слое 5 см		В слое 1 м	
									A/OB %	C/OB %	A/OB %	C/OB %
<i>1. E. acuminata</i>	1.42	200	0.16	0.003	0.0002	0.003	0.005	Нехищ.	0.046	0.077	0.003	0.004
<i>2. E. casertana</i>	1.42	200	0.22	0.004	0.0003	0.004	0.007	Нехищ.	0.062	0.102	0.003	0.006
<i>3. Euglesa fossarina</i>	1.42	200	0.16	0.003	0.0002	0.003	0.005	нехищ.	0.046	0.077	0.003	0.004
Итого Bivalvia ***		600	0.54	0.01	0.001	0.011	0.017	0.062	0.154	0.256	0.009	0.014
<i>Culicoides sp.</i>	1.99	280	0.22	0.004	0.0046	0.009	0.011	хищ.				
<i>1. Chironomus plumosus</i>	1.7	240	0.24	0.006	0.0039	0.01	0.017	нехищ.	0.15	0.25	0.008	0.014
<i>2. Cladopelma gr.lateralis</i>	0.85	120	0.01	0	0.0002	0.001	0.001	нехищ.	0.009	0.015	0	0.001
<i>3. Cladotanytarsus mancus</i>	4.26	600	0.03	0.001	0.0011	0.002	0.004	нехищ.	0.036	0.06	0.002	0.003
<i>4. C. sylvestris</i>	0.28	40	0.01	0	0.0002	0.001	0.001	хищ.				
<i>5. Cryptochironomus gr. defectus</i>	5.97	840	1.06	0.027	0.0212	0.048	0.06	хищ.				
<i>6. P. arcuatus</i>	0.28	40	0.01	0	0.0002	0.001	0.001	нехищ.	0.008	0.013	0	0.001
<i>7. P. nubeculosum</i>	10.5	1480	0.87	0.025	0.0211	0.046	0.077	нехищ.	0.68	1.129	0.038	0.063
<i>8. Polypedium sp.</i>	1.14	160	0.3	0.007	0.0052	0.012	0.02	нехищ.	0.18	0.299	0.01	0.017
<i>9. Procladius choreus</i>	1.99	280	0.28	0.007	0.0061	0.013	0.017	хищ.				
<i>10. P. ferrugineus</i>	1.42	200	0.17	0.005	0.0037	0.008	0.01	хищ.				
<i>11. Paratanytarsus confusus</i>	0.28	40	0.01	0	0.0002	0.001	0.001	нехищ.	0.008	0.013	0	0.001
<i>12. Stictochironomus histrio</i>	0.28	40	0.19	0.004	0.0051	0.009	0.015	нехищ.	0.13	0.216	0.007	0.012
<i>13. T. punctipennis</i>	1.99	280	0.46	0.011	0.0097	0.021	0.026	хищ.				
<i>14. Tanytarsus sp.</i>	0.28	40	0.01	0	0.0003	0.001	0.001	нехищ.	0.009	0.015	0.001	0.001
Нехищники:		2760	1.67	0.045	0.037	0.083	0.137	0.821	1.211	2.01	0.067	0.112
Хищники:		1640	1.98	0.051	0.041	0.091	0.114	0.81				
Итого Chironomidae ***		4400	3.65	0.096	0.044	0.14	0.252	0.458	1.211	2.01	0.067	0.112
<i>Cloeon dipterum</i>	0.28	40	0.03	0.002	0.0006	0.003	0.005	нехищ.	0.042	0.07	0.002	0.004
<i>Valvata sp.</i>	0.57	80	0.03	0.002	0.0005	0.002	0.004	нехищ.	0.034	0.056	0.002	0.003
<i>Sialis lutaria</i>	0.28	40	0.96	0.16	0.0064	0.167	0.208	хищ.				
*** Nematoda ***	3.41	480	0.02	0	0	0	0	нехищ.	0	0	0	0
<i>1. Limnodrilus hoffmeisteri</i>	13.6	1920	2.59	0.139	0.065	0.204	0.409	нехищ.	2.989	5.978	0.166	0.332
<i>2. Limnodrilus sp.</i>	35.2	4960	0.77	0.071	0.0193	0.09	0.181	нехищ.	1.323	2.646	0.073	0.147
<i>3. Ludekemanus</i>	2.27	320	1.6	0.062	0.0402	0.102	0.204	нехищ.	1.495	2.99	0.083	0.166
<i>4. Potamotheix hammoniensis</i>	6.82	960	0.53	0.036	0.0133	0.049	0.098	нехищ.	0.716	1.432	0.04	0.08
Итого Oligochaeta ***		8160	5.49	0.308	0.138	0.446	0.892	0.447	6.523	13.046	0.362	0.725
Всего – нехищники:		12120	7.78	0.368	0.177	0.544	1.055	0.481	7.964	15.438	0.442	0.858
Всего – хищники:		1960	3.16	0.215	0.052	0.267	0.333	0.242				

Всего		14080	10.94	0.582	0.129	0.711	1.389	0.221				
--------------	--	-------	-------	-------	-------	-------	-------	-------	--	--	--	--

Станция: Чапаевка / Ст.04л 1км ниже с. Ореховка. Дата: 24 июля 1990 г. Температура 22.2 °С. Бихроматная окисляемость = 38.5. Глубина = 0.9 м. Калорийность орг. вещества от ОВ(min) = 6.84 до ОВ(max) = 123.04. Число видов: 26. Индекс разнообразия Шеннона = 3.384.

ЧАСТЬ 3. СТАТИСТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ В ГИДРОЭКОЛОГИИ: ЗАДАЧИ И РЕШЕНИЯ

Мем № 27: «Как ни странно, но задачи фитоиндикации, вероятностные по своей природе, до сих пор решаются в основном без использования каких-либо статистических методов» В.И. Василевич [1969].

Эта часть книги посвящена описанию конкретных методов математической статистики, распознавания образов и алгоритмов искусственного интеллекта применительно к анализу результатов гидроэкологического мониторинга.

Деление излагаемого материала на главы выполнено не вполне традиционным образом: не по "генетическому" средству отдельных методов, а в соответствии с общностью постановок конкретных задач гидроэкологии и схемы последующей обработки данных:

- *Глава 5* объединяет различные параметрические и непараметрические методы анализа, когда исследователь располагает одним или двумя вариационными рядами измерений, представленными в количественной шкале;
- *Глава 6* является, в определенном смысле, продолжением главы 5 применительно к данным, измеренным в порядковых шкалах (или сведенным к таковым различными методами "интервальной" математики);
- *Глава 7* объединяет методы статистического анализа "без учителя" и представляет интерес, если исследователь имеет двухмерную таблицу наблюдений, в которой явным образом отсутствует моделируемая величина Y (т.е. "отклик");
- В *главе 8* описаны методы анализа "с учителем", когда исследователь располагает некоторой обучающей выборкой – многомерной матрицей варьируемых переменных и сопряженным с нею вектором измерений моделируемой величины Y ;
- И, наконец, при комплектовании *главы 9* мы включили туда методы, которые по своему смыслу довольно мало отличаются от представленных в главе 8, но характеризуются относительной новизной и не слишком долговечной, на наш взгляд, рекламной меткой «*ИИ*» (искусственный интеллект).

Общее описание и сравнительный обзор всех этих методов выполнен в разделах 4–8 главы 2, где приведена также основная рекомендуемая библиография.

Каждый раздел представляемой части построен по единой стандартной схеме из трех следующих подразделов:

- «**Формулировка задачи**», содержащая общую экологическую и математическую постановку проблемы по принципу описания "мясорубки" (т.е. берем на входе объект «А» и желаем получить на выходе объект «Б»);
- «**Математический лист**» или краткое описание теоретических идей, используемых при построении статистических моделей и оценки их достоверности (в названии этого подраздела мы отдали должное Э.Т. Гофманну, впервые использовавшему *макулатурные листы* в "Житейских воззрениях кота Мурра"; читатель, не интересующийся математической "кухней", может их вполне пропустить, иногда, без большого ущерба для понимания существа дела);
- «**Результаты расчетов**», содержащие более или менее развернутые примеры использования каждого метода на основе единого тестового массива гидробиологических показателей.

Расчеты, иллюстрирующие изложенные методы, были выполнены на основе одного и того же "сквозного" для всех глав набора исходных измерений: данных гидроэкологического мониторинга донных организмов на 40 малых реках, расположенных в степной и лесостепной зонах Среднего Поволжья (см. карту на рис. 1.8). Подробно структура и информационный состав базы данных описан в разделе 1.6.

Выборка, использовавшаяся при построении статистических моделей, характеризовалась следующими основными параметрами:

- количество водных объектов (малых рек Самарской области) – **34**;
- количество станций наблюдений (по выделенным створам рек) – **247**;
- количество гидробиологических проб и сопряженных с ними гидрохимических и гидрологических измерений – **571**;
- диапазон дат измерений – от 10.07.1985 до 31.07.2000 г.;
- сезонный диапазон дат измерений – с 1 мая по 1 ноября;
- количество видов макрозообентоса – **580**;
- количество значений численности и биомассы по видам гидробионтов, полученных в результате обработки всех 571 проб – **5937**;
- количество учитываемых качественных и количественных гидрологических показателей – **12**;
- количество учитываемых гидрохимических показателей – **18**;
- общее количество измерений гидрохимических показателей – **3102**.

На рисунках, в таблицах и уравнениях нами использовались следующие условные обозначения для измеренных и рассчитанных показателей применительно к каждой гидробиологической пробе:

- S – число видов макрозообентоса в пробе;
- N_i – численность i -го вида в пробе, экз/м²;
- N_S – суммарная численность всех видов в пробе;
- B_i – биомасса i -го вида в пробе, мг/м²;
- B_S – суммарная биомасса всех видов в пробе;
- $\sqrt{N_i \cdot B_i}$ или $(N_i \cdot B_i)^{0.5}$ – индекс плотности, рассчитанный для вида в пробе (см. раздел 2.3);
- $(N_S \cdot B_S)^{0.5}$ – индекс плотности всех видов в пробе;
- H – информационный индекс Шеннона (см. раздел 4.3);
- V – биотический индекс Вудивисса (см. раздел 4.5);
- P – олигохетный индекс Гуднайта-Уитлея-Пареле (см. раздел 4.2);
- D – хирономидный индекс Балуткиной (см. раздел 4.2).

Для формирования обучающей выборки, использованной в главах 8 и 9, по каждому из 571 комплексов измерений нами оценивался класс качества воды по шестибальной шкале в соответствии с ГОСТ 17.1.3.07–82. Эта оценка выполнялась на основе гидрохимического индекса загрязнения воды ИЗВ (см. раздел 3.5), если имелся в наличии необходимый набор из 6 показателей, либо по методике Былинкиной и Драчева (см. раздел 3.6), если имеющихся гидрохимических данных было недостаточно.

При выполнении расчетов мы использовали следующие программные продукты:

- пакет прикладных программ для статистических расчетов STATISTICA v5.5A, методически наиболее полный на сегодняшний день, но, вследствие "странной стохастичности" видеointерфейса, далеко не всегда "дружественный" к пользователю (русскоязычные ссылки в Интернет <http://www.statsoft.ru> и <http://www.exponenta.ru/soft/Statist>);
- статистическую программу StatGraphics v5.0 для Windows, менее полную, но более гармоничную и "дружественную";
- программу статистического анализа на основе нейросетей Statistica Neural Networks v1.0;
- превосходную программу статистического анализа Matrix, разработанную А.А. Цыплаковым (Новосибирский госуниверситет) и распространяемую бесплатно на сайте Интернет www.nsu.ru/ef/tsy/ecmr/mtx;
- аналитический пакет Deductor, ориентированный на решение задач многомерного анализа и разработанный российской лабораторией BaseGroup Labs, специализирующейся в области искусственного интеллекта (сайт в Интернет <http://www.basegroup.ru/labs>).

Значительная часть расчетов, реализующих "нестандартные" математические методы и алгоритмы распознавания образов, была выполнена с использованием собственных программных модулей, разработанных авторами и входящих в состав компонентов базы гидробиологических данных по малым рекам Самарской области (СУБД Access 97, алгоритмический язык Visual Basic for Application).

Глава 5. Задачи о выборках: анализ распределений, сравнение, поиск зависимостей

5.1. Задача о законе распределения гидробиологических показателей

Мем № 28: «Случайность существует объективно и не зависит от того, знаем ли мы причины явления или не знаем...» М.М. Розенталь [1952].

Формулировка задачи

Пусть имеется выборка из n значений X_1, X_2, \dots, X_n некоторого измеренного гидробиологического показателя. Необходимо:

- оценить закон вероятностного распределения натуральных величин X ;
- подобрать такое функциональное преобразование $f(X)$ исходных значений X , которое позволило нам принять гипотезу о нормальном характере распределения преобразованных значений.

Эта задача внешне кажется вспомогательной в ряду предлагаемых задач, поскольку само по себе оценивание закона распределения не имеет большого практического смысла. Однако этот подготовительный этап носит обязательный и важный характер для последующего корректного применения большинства методов математической статистики.

Рекомендуемая литература: [Урбах, 1963; Смирнов, Дунин-Барковский, 1963; Кендалл, Стьюарт, 1966; Гмурман, 1972; Крамер, 1975; Закс, 1976; Джонсон, Лион, 1980, 1981; Гнеденко, 1988; Вентцель, 1999; Калинина, Панкин, 2001; С.А. Прохоров, 2001а,б, 2002; Прохоров с соавт., 2003].

Математический лист

Случайная величина и ее характеристики

Одним из центральных понятий теории вероятностей является *случайная величина* – любая количественная характеристика, которая в результате случайного эксперимента может принять одно из некоторого множества значений.

Каждая случайная величина ξ полностью определяется своей функцией распределения:

$$F(x) = F_{\xi}(x) = P(\xi < x), \quad (5.1)$$

где $P(\xi < x)$ – вероятность того, что случайная величина ξ принимает значение, меньшее x . Функция $F(x)$ монотонно возрастает на всей числовой оси, причем $F(-\infty) = 0$, $F(\infty) = 1$. Функция распределения является "паспортом" случайной величины: она содержит всю информация о ξ и поэтому изучение случайной величины заключается в исследовании ее функции распределения, которую часто называют просто *распределением*.

Если функция распределения $F_{\xi}(x)$ непрерывна, то случайная величина ξ называется *непрерывной* случайной величиной. Если функция распределения непрерывной случайной величины дифференцируема, то более наглядное представление о случайной величине дает *плотность вероятности* случайной величины $p_{\xi}(x)$, которая связана с функцией распределения $F_{\xi}(x)$ фор-

мулами

$$F_{\xi} = \int_{-\infty}^x p_{\xi}(t) \cdot dt \quad \text{и} \quad p_{\xi}(x) = \frac{dF_{\xi}(x)}{dx}. \quad (5.2)$$

Отсюда, в частности, следует, что для любой случайной величины: $\int_{-\infty}^{\infty} p_{\xi}(x) \cdot dx = 1$.

При решении практических задач часто требуется найти значение x , при котором функция распределения $F_{\xi}(x)$ случайной величины ξ принимает заданное значение p , т.е. требуется решить уравнение $F_{\xi}(x) = p$. Решения такого уравнения (т.е. соответствующие значения x) в теории вероятностей называются *квантилями*. Квантилью x_p (p -квантилью, квантилью уровня p) слу-

чайной величины ξ , имеющей функцию распределения $F_\xi(x)$, называют решение x_p уравнения $F_\xi(x) = p$, $p \in (0, 1)$. Для некоторых p уравнение $F_\xi(x) = p$ может иметь несколько решений, для некоторых – ни одного. Это означает, что для соответствующей случайной величины некоторые квантили определены неоднозначно, а некоторые квантили не существуют.

Квантили, наиболее часто встречающиеся в практических задачах, имеют свои названия: *медиана* (квантиль уровня 0,5); *нижняя квартиль* (квантиль уровня 0,25); *верхняя квартиль* (квантиль уровня 0,75); *децили* (квантили уровней 0,1, 0,2, ..., 0,9); *процентили* – (квантили уровней 0,01, 0,02, ..., 0,99).

Вероятность того, что значение непрерывной случайной величины $F_\xi(x)$ попадает в интервал (a, b) , равная $P(a < \xi < b) = F_\xi(b) - F_\xi(a)$, вычисляется по формуле:

$$P(a < \xi < b) = \int_a^b p_\xi(x) \cdot dx = F(b) - F(a), \quad (5.3)$$

причем, если $a = -\infty$, то $P(a < \xi < b) = P(\xi < b) = F_\xi(b)$, а если $b = \infty$, то $P(a < \xi < b) = P(a < \xi) = 1 - P(\xi < a) = 1 - F_\xi(a)$.

Наиболее часто применяемыми числовыми характеристиками случайной величины ξ являются начальные и центральные моменты различного порядка. Для непрерывной случайной величины моменты порядка k определяются следующими формулами:

$$\alpha_k = \int_{-\infty}^{\infty} x^k f(x) dx, \mu_k = \int_{-\infty}^{\infty} (x - m_\xi)^k f(x) dx. \quad (5.4)$$

Чаще всего используется первый начальный момент $\alpha_1 = M_\xi$, называемый *математическим ожиданием* случайной величины ξ или центром распределения, и второй центральный момент $\alpha_2 = D_\xi$, называемый *дисперсией*, которая характеризует разброс случайной величины относительно центра распределения. Часто вместо дисперсии используют *среднее квадратичное отклонение* $\sigma_\xi = \sqrt{D_\xi}$.

Основные законы распределения

Перечислим наиболее распространенные распределения непрерывных случайных величин.

- Равномерное распределение. Непрерывная случайная величина x , принимающая значения на отрезке $[a, b]$, распределена равномерно, если ее плотность распределения $p_\xi(x)$, функция распределения $F_\xi(x)$ и моменты M_ξ и D_ξ имеют соответственно вид:

$$p_\xi(x) = \begin{cases} 0, & x \notin [a, b] \\ \frac{1}{b-a}, & x \in [a, b] \end{cases}; \quad F_\xi(x) = \begin{cases} 0, & x \leq a \\ \frac{x-a}{b-a}, & a < x \leq b \\ 1, & x > b \end{cases}; \quad M_\xi = \frac{a+b}{2}; \quad D_\xi = \frac{(b-a)^2}{12}. \quad (5.5)$$

- Нормальное распределение. Случайная величина ξ нормально распределена с параметрами a и σ , $\sigma > 0$, если ее плотность распределения $p_\xi(x)$, функция распределения $F_\xi(x)$ и моменты M_ξ и D_ξ имеют соответственно вид:

$$p_\xi(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-a}{\sigma}\right)^2}; \quad F_\xi(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{z-a}{\sigma}\right)^2} dz; \quad M_\xi = a \text{ и } D_\xi = \sigma^2. \quad (5.6)$$

Нормальное распределение играет исключительно важную роль в теории вероятностей и математической статистике.

- Логнормальное распределение. Случайная величина ξ имеет логарифмическое нормальное (логнормальное) распределение с параметрами a и σ , если случайная величина $\ln x$ имеет нормальное распределение с параметрами $a > 0$ и σ . Функция плотности вероятностей $p_{\xi}(x)$, функция распределения $F_{\xi}(x)$ и моменты M_{ξ} , D_{ξ} логнормального распределения имеют соответственно вид:

$$p_{\xi}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\ln x - \ln a}{2\sigma^2}}; \quad F_{\xi}(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\ln x} e^{-\frac{z - \ln a}{2\sigma^2}} dz; \quad M_{\xi} = a \cdot e^{\frac{\sigma^2}{2}}; \quad D_{\xi} = a^2 \cdot e^{\sigma^2} (e^{\sigma^2} - 1).$$

В ряде областей науки и техники нашли широкое применение такие одномерные распределения непрерывной случайной величины как экспоненциальное распределение, гамма-распределение, распределение Вейбулла и многие другие.

Основным предметом математической статистики является вычисление *статистик* (да простит нас читатель за тавтологию), являющихся критериями для оценки достоверности априорных предположений, гипотез или выводов по существу эмпирических данных: «Статистики – это предписания, по которым из выборки рассчитывается некоторое число – значение статистики для данной выборки» [Закс, 1976].



Вильям ГОССЕТ - "СТЬЮДЕНТ"
(W.S.Hosset - "Student" 1876-1937)
известный английский статистик

Выборочные среднее и дисперсия, отношение дисперсий двух выборок или любые другие функции от выборки могут рассматриваться как статистики²³.

Статистики также являются случайными переменными. Распределения статистик (тест-распределения) лежат в основе критериев, которые построены на этой статистике. Например, В.Госсет, работая на пивоварне Гиннеса и публикуясь под псевдонимом «Стьюдент», в 1908 г. доказал очень полезные свойства распределения отношения разности между выборочным средним и средним значением генеральной совокупности $(\bar{x} - \mu)$ к стандартной ошибке среднего значения генеральной совокупности σ / \sqrt{n} , или *t*-статистики (*распределение Стьюдента*):

$$\frac{\{\text{Ошибка среднего значения}\}}{\{\text{Стандартная ошибка среднего}\}} = \frac{\bar{x} - \mu}{\sigma / \sqrt{n}}. \quad (5.7)$$

Распределение Стьюдента по форме при некоторых условиях приближается к нормальному.

Другими двумя важными распределениями выборочных статистик является χ^2 -распределение и *F*-распределение, широко используемые в последующих разделах для проверки статистических гипотез.

Дадим определения и опишем основные свойства наиболее известных вероятностных распределений для дискретной случайной величины.

- Схема Бернулли и биномиальное распределение. Бернуллиевская модель (по имени Якоба Бернулли (1654–1705) – выдающегося швейцарского математика), является подходящей математической моделью для любого эксперимента с двумя исходами ("успех" - "неуспех"), т.е. простейшего статистического эксперимента.

Случайная величина имеет распределение Бернулли с параметрами p ($0 < p < 1$), если она имеет лишь два значения, обозначаемые обычно 0 и 1, и при этом

$$P\{X = 1\} = p = 1 - P\{X = 0\}$$

В терминах плотности $f(x)$ это можно записать в следующем виде:

$$f(x) = f(x | p) = p^x q^{1-x}, \quad x = \{0, 1\}, \quad q = 1 - p. \quad (5.8)$$

Пусть $\{X_1, \dots, X_n\}$ – бернуллиевская последовательность с параметром p . Тогда сумма $X = X_1 + \dots + X_n$ имеет биномиальное распределение с параметрами n и p :

²³ Статистика – классический пример представления «одним числом» сложного стохастического процесса.

$$P\{X = x\} = f(x | n, p) = C_n^x p^x q^{n-x}, \quad x = 0, 1, \dots, n \quad (5.9)$$

Термин "биномиальное распределение" связан с тем, что вероятности P являются членами

$$\text{известного "бинома Ньютона": } \sum_{x=0}^n C_n^x p^x q^{n-x} = (p+q)^n = 1$$

Таким образом, биномиальная модель $\mathbf{Bi}(n, p)$ описывает распределение числа "успехов" в n испытаниях Бернулли с неизменной вероятностью "успеха" p .

Среднее и дисперсия такой случайной величины есть $M_\xi = n \cdot p$ и $D_\xi = n \cdot p \cdot q$.

- Отрицательное биномиальное распределение. С бесконечной последовательностью испытаний Бернулли $\{X_1, X_2, \dots\}$ связано еще одно важное дискретное распределение, которое обозначается $\mathbf{Bi}(r, p)$ и называется отрицательным биномиальным распределением с параметрами r и p (здесь r – натуральное число). Это есть распределение числа "успехов" (1), предшествующих r -му "неуспеху" (0), и оно задается вероятностями

$$f(x | r, p) = C_{r+x-1}^x p^x q^r, \quad x = 0, 1, 2, \dots \quad (5.10)$$

Заметим, что выражение $f(x | r, p)$ совпадает с x -м членом разложения функции $q^r(1-p)^{-r}$ в ряд по степеням p ; т.е. отрицательного бинома (отсюда происходит и название распределения). Если случайная величина имеет распределение $\mathbf{Bi}(r, p)$, то первые два центральных мо-

мента равны $M_\xi = \frac{r \cdot p}{q}$ и $D_\xi = \frac{r \cdot p}{q^2}$.

В частном случае при $r = 1$ распределение $\mathbf{Bi}(1, p)$ называется *геометрическим*: это есть распределение числа частиц, предшествующих первому нулю в бернуллиевской последовательности:

$$f(x | 1, p) = p^x q, \quad x = 0, 1, 2, \dots \quad (5.11)$$

- Распределение Пуассона. Это одно из важнейших дискретных вероятностных распределений впервые было исследовано в 1837 г. С. Пуассоном (французский математик, механик и физик, 1781–1840 гг.) Распределение Пуассона обычно описывает схему редких событий, происшедших за фиксированный промежуток времени или в фиксированной области пространства, и дает хорошую аппроксимацию биномиального распределения для больших значений n и малых значений p . Случайная величина имеет распределение Пуассона с параметром λ ($\lambda > 0$), ес-

$$\text{ли} \quad P\{X = x\} = f(x | \lambda) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^x}{x!}, \quad x = 0, 1, 2, \dots \quad (5.12)$$

При этом $M_\xi = D_\xi = \lambda$.

Характер основных вероятностных распределений непрерывной и дискретной случайной величины представлены на рис. 5.1.

Проверка закона распределения эмпирического ряда

Обычно закон распределения случайной величины ξ неизвестен и его приближенно определяют (оценивают) опытным путем. С этой целью над величиной ξ проводят ряд независимых испытаний. Вся мыслимая (т.е. бесконечная) совокупность этих измерений называется *генеральной совокупностью*. А каждый конкретный ряд измерений (x_1, x_2, \dots, x_n) называют *простой случайной выборкой*.

Если простую выборку упорядочить по возрастанию, то ее называют *вариационным рядом*. Если для каждого неповторяющегося элемента вариационного ряда x_i указать относительную частоту его появления $p_i^* = \frac{m_i}{n}$, то такой вариационный ряд называют *статистическим рядом распределения случайной величины ξ* . Здесь m_i – число повторений x_i (абсолютная частота появления элемента), а n – общее число измерений, или *объем выборки*.

Имея вариационный ряд, легко построить *эмпирическую* (или статистическую) *функцию распределения* $F_n(x) = \frac{m_x}{n}$, где m_x – число членов вариационного ряда, лежащих левее от x , а

m_x/n – частота попадания выборочного значения левее x . $F_n(x)$ представляет собой ступенчатую неубывающую функцию, заданную на всей числовой оси, со скачками в точках x_i , причем величина скачка равна частоте p_i^* . Заметим, что поскольку сумма абсолютных частот $\sum_{i=1}^n m_i = n$, то

сумма относительных частот $\sum_{i=1}^n p_i^* = 1$.

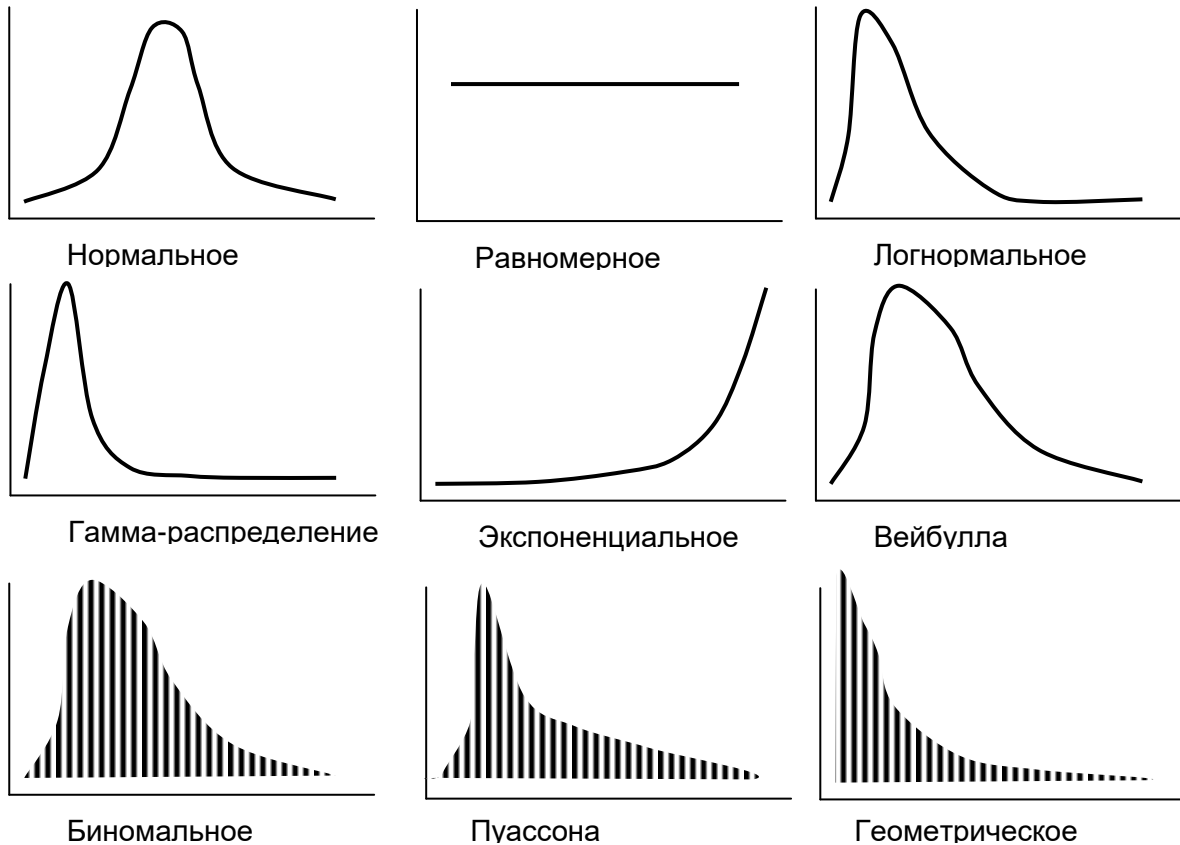


Рис. 5.1. Основные типы вероятностных распределений случайной величины

Согласно центральной теореме математической статистики – теореме Гливенко - Кантелли о равномерной сходимости эмпирической функции распределения к истинной с ростом объема выборки, можно доказать, что $F_n(x) \xrightarrow{P} F(x)$ при $n \rightarrow \infty$. Отсюда ясно, что эмпирическую функцию распределения можно использовать как оценку теоретической функции распределения $F(x)$.

Совокупность разрядов и соответствующих частот статистического ряда геометрически изображают в виде *гистограммы*. По оси абсцисс откладывают интервалы и над каждым интервалом, как на основании, строят прямоугольник, высота которого равна значению плотности распределения для данного интервала $m_i/n \cdot h$. Таким образом, площадь каждого прямоугольника гистограммы равна его частоте, а общая площадь равна единице.

Большинство статистических вычислений сопровождается проверкой некоторых предположений или гипотез об источнике этих данных. Основное проверяемое предположение называется *нулевой гипотезой* и часто формулируется как отсутствие различий, незначительность влияния фактора, равенство нулю значений выборочных характеристик и т.п. Другое проверяемое предположение (не всегда строго противоположенное или обратное первому) называется конкурирующей или альтернативной гипотезой. Причина такого выделения нулевой гипотезы заключается в том,

что она обычно рассматривается как утверждение, несостоятельность которого более бесспорно, чем истинность. Это основано на общем принципе, гласящем, что теория должна быть отвергнута, если есть противоречащий пример, но не обязательно должна быть принята, если такого примера не удалось найти.

Для проверки нулевой гипотезы задается *статистический критерий* (от греч. kriterion - средство для суждения; мерило оценки), согласно которому вычисляется (по заданному правилу или формуле) значение соответствующей статистики и уровень значимости α , который представляет собой вероятность ошибочно отвергнуть нулевую гипотезу тогда, когда она на самом деле верна (так называемая, ошибка 1-го рода).

Технически проверка нулевой гипотезы H_0 «нет статистически значимого различия» сводится к двум возможным операциям:

- выбирается критический уровень значимости $\alpha_{кр}$ из стандартной линейки типа 0,001; 0,01; 0,05 (в медико-биологических исследованиях часто принимают $\alpha_{кр} = 0.05$) и по таблицам находится пороговое значение критерия $K_{пор}$ для этого уровня значимости;
- с использованием программных средств или аппроксимационных формул находят точный уровень значимости α нулевой гипотезы (или p -значение, т.е. вероятность ошибочно отвергнуть гипотезу, когда она верна).

Нулевая гипотеза H_0 не отклоняется, если вычисленное значение статистики критерия $K_{рас}$ не превышает порогового $K_{пор}$ (первый случай), или если вычисленное значение α превышает критический уровень значимости $\alpha_{кр}$ (второй случай). В противном случае нулевая гипотеза отвергается и принимается альтернативная гипотеза H_1 .

При подборе распределений возникает вопрос: а верна ли гипотеза о том, что функция распределения именно $F(x)$, а не какая-либо другая? Выражаясь более точно, не противоречит ли гипотеза о законе распределения $F(x)$ результатам эксперимента? Чтобы ответить на этот вопрос, пользуются *критериями согласия*. Под критерием согласия понимают некоторую величину $\Delta(F_n, F)$, которая отражает количественную меру расхождения гипотетического $F(x)$ и эмпирического $F_n(x)$ распределений. Величину разности между двумя распределениями можно выбрать многими способами и на ее основе имеются различные статистики для проверки интересующей нас гипотезы, например:

$$\text{статистика Колмогорова} \quad \Delta(F_n, F) = D_n = \sup |F_n(x) - F(x)|, \quad (5.13)$$

$$\text{статистика омега-квадрат Мизеса} \quad \Delta(F_n, F) = \omega^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} [F_n(x) - F(x)]^2 dF(x). \quad (5.14)$$

Схема применения критерия согласия следующая. Возьмем $\alpha_{кр}$ из α : ($1 > \alpha > 0$) настолько малым, чтобы осуществление события с вероятностью, не превышающей $\alpha_{кр}$ можно было считать практически невозможным в единичном опыте. Зная закон распределения случайной величины $\Delta = \Delta(F_n, F)$, найдем ее возможное значение Δ_0 из уравнения $P(\Delta > \Delta_0) = \alpha$. По данной выборке вычислим значение критерия согласия $\Delta_1 = \Delta(F_n, F)$. Если окажется, что $\Delta_1 > \Delta_0$, то это значит, что произошло практически невероятное событие. Следовательно, эксперимент опровергает нашу гипотезу, и она отбрасывается. При этом вероятность того, что мы ошибочно отбросили верную гипотезу, не превышает принятый уровень значимости $\alpha_{кр}$ критерия и равна α . Если $\Delta_1 < \Delta_0$, то гипотеза не противоречит эксперименту и должна быть принята.

А.Н. Колмогоров в 1933 г. нашел предельную функцию распределения величины $\lambda = \sqrt{n} D_n$, которую для больших n можно вычислить по формуле:

$$K(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} P(\sqrt{n} D_n < x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} (-1)^k e^{-2k^2 x^2}, x > 0. \quad (5.15)$$

Функцию $K(x)$ стали называть *критерием согласия Колмогорова*²⁴. Чтобы воспользоваться критерием Колмогорова, нужно построить графики гипотетической и выборочной функций распределения, по графикам найти статистику D_n и вычислить величину $\lambda_1 = \sqrt{n} D_n$. Найти вероятность события $\sqrt{n} D_n > \lambda_1$ можно по формуле

$$P(\sqrt{n} D_n > \lambda_1) = 1 - K(\lambda_1) = -2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k e^{-2k^2 \lambda_1^2}. \quad (5.16)$$

Если эта вероятность меньше α , то гипотеза отвергается, если больше, то признается не противоречащей эксперименту.

Предположим теперь, что из некоторых соображений мы можем высказать гипотезу только о виде закона распределения, а параметры, входящие в него, нам неизвестны. В таких случаях часто используют *критерий согласия Пирсона*.

Всю числовую ось разобьем на r непересекающихся разрядов точками $-\infty = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_r = \infty$. Примем гипотезу о функции распределения, а неизвестные параметры, входящие в нее, заменим их оценками. Таким образом, гипотетическая функция распределения $F(x)$ будет полностью известна и можно будет найти вероятности $P_i = F(x_i) - F(x_{i-1})$ попадания случайной величины в i -й разряд. Возьмем статистику

$$t_n = \chi^2 = \sum_{i=1}^r \frac{(m_i - np_i)^2}{np_i}, \quad (5.17)$$

где n – объем выборки, r – число разрядов, m_i – число значений в i -м разряде.

За меру расхождения между гипотетической $F(x)$ и эмпирической $F_n(x)$ функциями распределения примем статистику $t_n = \Delta(F_n, F)$, определенную формулой (5.17). Р. Фишером с использованием метода максимального правдоподобия было доказано, что предельным законом распределения статистики t_n является распределение χ^2 с $r-m-1$ степенями свободы, где m – число параметров, входящих в гипотетическую функцию распределения. Доказано также, что при объеме выборки $n > 30$ с достаточной точностью можно пользоваться предельным законом распределения, если $np_i > 5$.

Схема применения критерия Пирсона следующая. По приведенным выше формулам вычисляют значение статистики $t_n = \Delta_0$ и вероятность

$$p(\Delta > \Delta_0) = \int_{\Delta_0}^{\infty} f(x) dx. \quad (5.18)$$

Если эта вероятность меньше уровня значимости α , то гипотезу следует отбросить.

Специально для проверки нормальности распределения малых выборок, численностью от 3 до 50 вариантов, разработан *W критерий Шапиро и Уилка* (Shapiro–Wilk), основанный на распределении порядковых статистик [Хан, Шапиро, 1969]. Этот критерий при наличии ограниченного объема данных является более мощным для проверки гипотезы нормальности, чем применяемые обычно критерии согласия [Лисенков, 1979].

Вычисления производятся по формулам:

$$W = b^2 / S^2, \quad S^2 = \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2, \quad b = \sum_{j=1}^k a_{n-j+1} (x_{n-j+1} - x_j), \quad (5.19)$$

где x_i – ранжированный ряд, $i = 1, 2, \dots, n$;

$k = n / 2$, если n – четное, или $k = (n - 1) / 2$, если n – нечетное;

a_{n-j+1} – константы ($j = 1, 2, \dots, k$), протабулированные для n от 3 до 50.

²⁴ Затем Н.В. Смирнов исследовал супремум (sup) и инфимум (inf) этого эмпирического процесса, поэтому нередко встречается название "критерий Колмогорова–Смирнова".

P -значение вычисляется по формуле $P = \Phi(z)$, где $\Phi(\cdot)$ – функция стандартного нормального распределения, а величина $z = z(W)$ рассчитывается как $z = \gamma + \eta \ln \frac{W - \varepsilon}{1 - W}$, где греческими буквами обозначены табулированные константы.

Применение критериев согласия связано с определенными теоретическими и вычислительными сложностями. Поэтому для решения вопроса о возможности применения тех или иных параметрических тестов и методов дисперсионного анализа иногда считается удобным использовать группу критериев, которые позволяют оценить отклонение некоторых широко известных характеристик эмпирического ряда от нормального закона распределения. Например, в литературе [Айвазян с соавт., 1983] описан *d-критерий Гири* (Джири, Giri), вычисляемый по формулам:

$$g_1 = \frac{1}{ns^3} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^3 ; \quad b_2 = \frac{1}{ns^4} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^4 ; \quad d = \frac{1}{ns} \sum_{i=1}^n |x_i - \bar{x}|, \quad (5.20)$$

используя выборочную дисперсию s^2 , асимметрию g_1 и эксцесс b_2 .

Результаты расчетов

Распределение численности и биомассы организмов в пробах характеризуется определенными статистическими законами, обусловленными как совокупностью абиотических факторов, так и влиянием внутривидовых, межвидовых и межпопуляционных отношений. Оценку законов распределения гидробиологических показателей осуществим на основе данных из базы по малым рекам Самарской области (см. преамбулу к настоящей части книги). Для этого сформируем выборку из численности N экземпляров отдельных видов зообентоса, приходящихся на 1 м^2 дна водоема, и биомассы B ($\text{г}/\text{м}^2$). Отдельно рассчитаем суммарные численности N_s и биомассы B_s по каждой взятой пробе, а также индекс Шеннона H .

Из полученных выборок сформируем дополнительные выборки на основе некоторого подмножества функциональных преобразований (логарифмирование, возведение в различную степень и т.д.) исходных вариационных рядов [Тьюки, 1981; Шитиков с соавт., 1985; Цейтлин, URL].

Основные описательные статистики по полученным выборкам представлены в табл. 5.1. Гистограммы распределения некоторых показателей приведены на рис. 5.2.

Представленные материалы позволяют сделать следующие выводы:

- выборки гидробиологических показателей, полученных как по отдельным видам, так и суммарных в пределах пробы, в натуральных шкалах измерения имеют очень сильные визуальные отличия от нормального закона распределения (см. фиг. «а» и «д» на рис.5.2); например, в один частотный диапазон 10-интервальной гистограммы попадает от 97.3 до 99.7% измерений;
- средние арифметические значения выборок по этим показателям очень сильно отличаются от моды и медианы; статистические моменты высших порядков (асимметрия и эксцесс) имеют крайне "неблагополучные" значения;
- различные логарифмические или степенные функциональные преобразования натуральных шкал существенно приближают законы распределения исходных выборок к нормальному (остальные фигуры рис.5.2); средние арифметические сближаются с медианами, асимметрия и эксцесс становятся достаточно малыми;
- интересным показателем является "индекс плотности населения" $(N*B)^{1/2}$ [Дедю, 1990], в комбинированной содержательной форме учитывающий оба показателя (численность и биомассу), которые, по мнению ряда авторов, "конкурируют" между собой (что мы подробно обсуждали в разделах 2.3 и 4.3).

Выполним проверку простой статистической гипотезы о нормальном законе распределения представленных выборок с использованием критериев согласия Колмогорова и χ^2 Пирсона, а также критерия эксцесса Гири d . Результаты расчетов для логарифмированных рядов суммарных численностей $\ln(N_s)$ и биомассы $\ln(B_s)$, индекса плотности населения $\ln((N_s*B_s)^{1/2})$ и индекса Шеннона H представлены в таб. 5.2.

Проверка нулевой гипотезы с помощью критериев согласия свидетельствует о том, что предположение о нормальном законе распределения может быть однозначно принято только для рядов $\ln((N_s*B_s)^{1/2})$ и $\ln(N_s)$. В разделе 4.3 было отмечено, что некоторые авторы ставят в заслугу

информационной мере Шеннона именно нормальный характер распределения, что, в принципе, подтверждается и нашими расчетами: эта гипотеза отвергается только критерием χ^2 . Но, как видно из табл. 5.2, простое логарифмирование численностей часто приводит к лучшему результату (сравните на рис. 5.2 фиг. «е» и «ж» с «з»).

Таблица 5.1

Основные описательные статистики по гидробиологическим показателям

Выборки	Минимум	Максимум	Медиана	Среднее	Стандартное отклонение	Асимметрия	Экссесс
Численность по видам зообентоса (N) – 5788 измерений							
N	1	71680	80.00	427.33	1724.90	19.3	617
$N^{1/2}$	1	267.73	8.94	13.57	15.58	4.1	30
$N^{1/3}$	1	41.54	4.308	5.19	3.47	2.34	8.9
$\ln(N)$	0	11.18	4.38	4.43	1.69	0.358	0.051
$\ln(N+1)^{1/2}$	1	3.48	2.31	2.3	.37	-0.177	0.392
Биомасса по видам зообентоса (B) – 5578 измерений							
B	0.01	6000	0.07	11.48	152.59	24.6	749
$B^{1/2}$	0.10	77.46	0.264	0.84	3.2818	12	186
$B^{1/3}$	0.215	18.17	0.412	0.669	1.052	7.69	79.2
$\ln(B)$	-4.6	8.7	-2.66	-2.29	2.160	1.2	2.08
$\ln(B+10)^{1/2}$	2.3	4.3	2.71	2.75	0.37	0.82	0.58
Индекс плотности населения ($N*B$) ^{1/2} - 5573 измерений							
$(N*B)^{1/2}$	0.1	4174	2.47	21.35	136.7	19.4	463
$\ln((N*B)^{1/2})$	-2.3	8.33	0.91	1.12	1.68	0.68	0.23
Суммарная численность N_s и биомасса B_s в пробе – 514 измерений							
N_s	20	216800	2000	5039	11736	12.17	208.2
$\ln(N_s)$	2.93	12.3	7.6	7.47	1.57	-0.303	-1.781
B_s	0.01	12963.7	3.6	137.8	743	11.8	181
$\ln(B_s)$	-4.6	9.5	1.28	1.542	2.39	0.562	.5322
$(N_s*B_s)^{1/2}$	0.63	10608	84.4	380.4	947.6	6.19	49.3230
$\ln(N_s*B_s)^{1/2}$	-0.46	9.3	4.43	4.5	1.78	-0.06	-0.226
Информационный индекс Шеннона H - 507 измерений							
H	0.115	4.193	2.32	2.244	0.796	-0.284	-0.153

Таблица 5.2

Результаты проверки гипотезы о нормальности распределения некоторых функций от численности N_s и биомассы B_s зообентоса с помощью критериев согласия (D_n – статистика Колмогорова, $\lambda = D_n \cdot n^{1/2}$, p_λ – вероятность, соответствующая λ , r – число степеней свободы, χ^2 – критерий Пирсона, $\chi^2_{0.05}$ – критическое значение критерия Пирсона при уровне значимости 0.05, p_χ – вероятность, соответствующая χ^2 , p_d – вероятность, соответствующая критерию эксцесса Гири)

Выборка	D_n	λ	p_λ	r	χ^2	$\chi^2_{0.05}$	p_χ	p_d
$\ln(N_s)$	0.0367	0.833	0.492	8	15.32	15.5	0.053	0.48
$\ln(B_s)$	0.068	1.55	0.017	8	30.15	15.5	0.00019	~0
$(N_s*B_s)^{1/2}$	0.344	7.8	~0	8	1046	15.5	~0	~0
$\ln((N_s*B_s)^{1/2})$	0.0215	0.487	0.989	8	4.64	15.5	0.794	0.219
Индекс Шеннона H	0.0516	1.166	0.134	7	18.01	14.1	0.0119	0.202

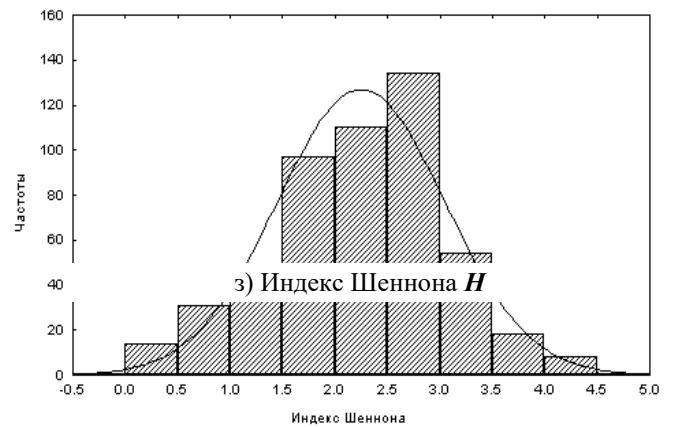
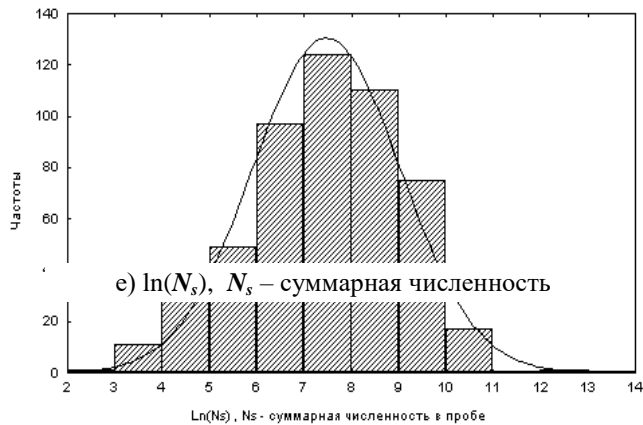
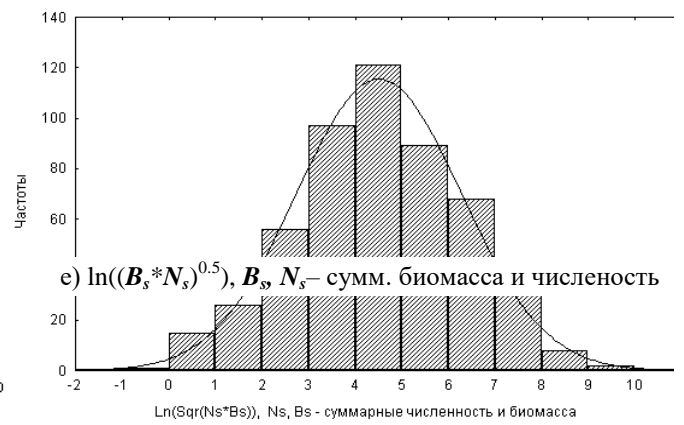
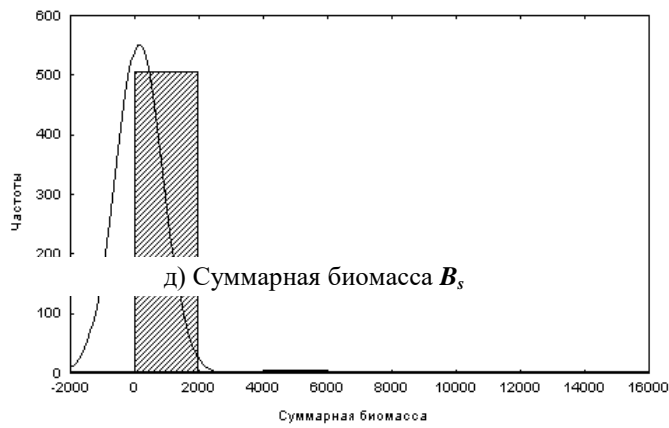
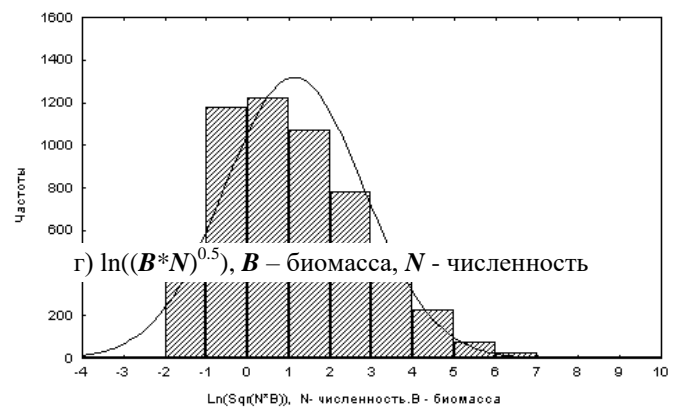
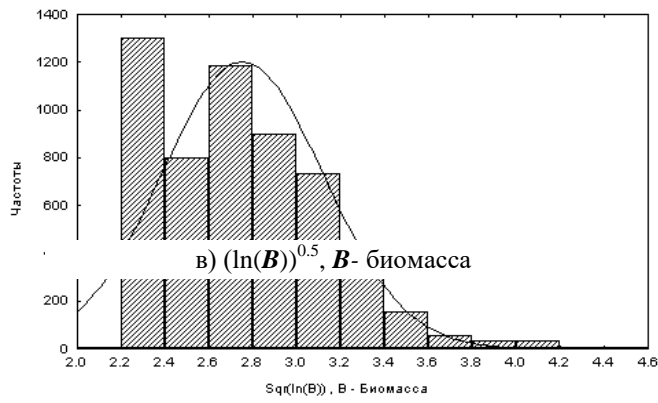
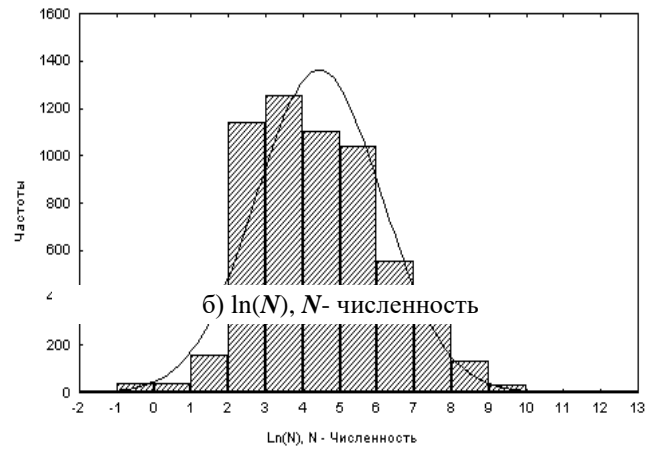
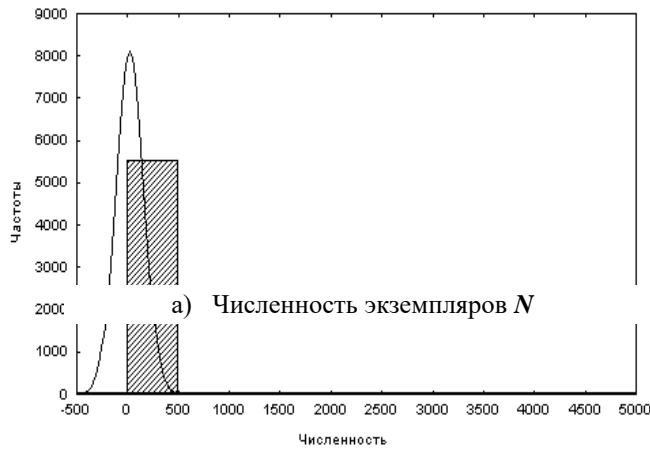


Рис. 5.2. Гистограммы распределения выборок из некоторых гидробиологических показателей и их функциональных преобразований

Для прочих рядов, не приведенных в табл. 5.2, гипотеза нормальности решительно отвергается, хотя тенденцию резкого снижения величин статистики Колмогорова $\lambda = D_n \cdot n^{1/2}$ при функциональном преобразовании численностей и биомассы отдельных видов бентоса легко проследить на рис. 5.3. Можно с большой уверенностью сказать, что эти ряды подчиняются логнормальному распределению: критерий Колмогорова для численности составляет $D_n = 0.0048$, для биомассы $D_n = 0.0098$, что позволяет с высоким уровнем значимости ($p \approx 1$) не отвергать гипотезу о логнормальном законе.

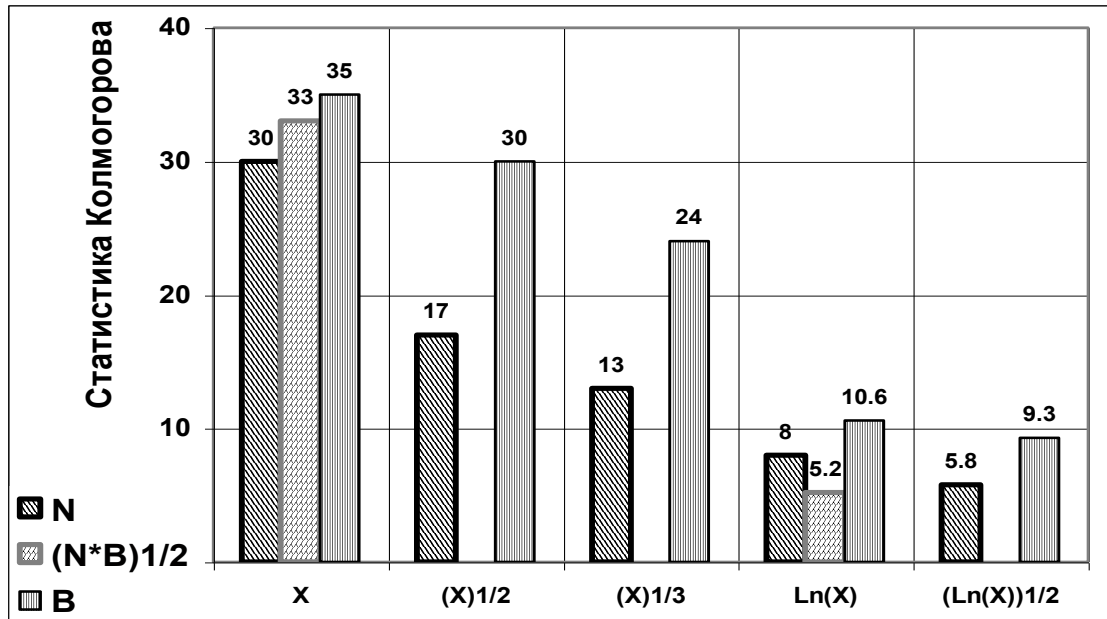


Рис. 5.3. Снижение статистики Колмогорова $D_n \cdot n^{1/2}$ в результате функционального преобразования выборок численности N и биомассы B зообентоса

По литературным данным [Баканов, 2000а] для большинства видов бентосных организмов наиболее характерны отрицательное биномиальное или логнормальное распределения численности и биомассы, а при низком обилии – распределение Пуассона. Выполненные нами расчеты показали, что распределение численности и биомассы большинства видов с высоким уровнем значимости подчиняются логнормальному закону распределения (см. рис. 5.4 фиг. «а»). Проверка нулевой гипотезы при подборе остальных теоретических функций распределения дала однозначно отрицательные результаты. В частности, для численности *Dicrotendipes nervosus* оказалась неудачной попытка аппроксимации геометрическим распределением (см. рис. 5.4 фиг. «б»), в то время, как верна гипотеза о логнормальном распределении (статистика Колмогорова равна 0.029, $p \approx 0.85$).

В некоторых работах [Gray, 1981; Мокеева, Межов, 1986] делаются выводы, о том что, параметры статистических распределений меняются при изменении условий обитания животных. Например, вследствие загрязнения или ином ухудшении условий, асимметрия увеличивается, а кривая распределения имеет несколько пиков, в то время как при улучшении условий обитания кривая имеет более ровный характер, а полимодальность отсутствует.

Нам не удалось ни подтвердить, ни опровергнуть эти суждения, поскольку осталось непонятным, относительно какого закона распределения следует оценивать коэффициент асимметрии, а надежных критериев оценки полимодальности найти не удалось. Действительно, визуально можно обнаружить на гистограммах рис. 5.5 некоторые проявления полимодальности, однако, насколько имеющиеся пики статистически значимы, еще следует доказать, используя механизм проверки гипотез.

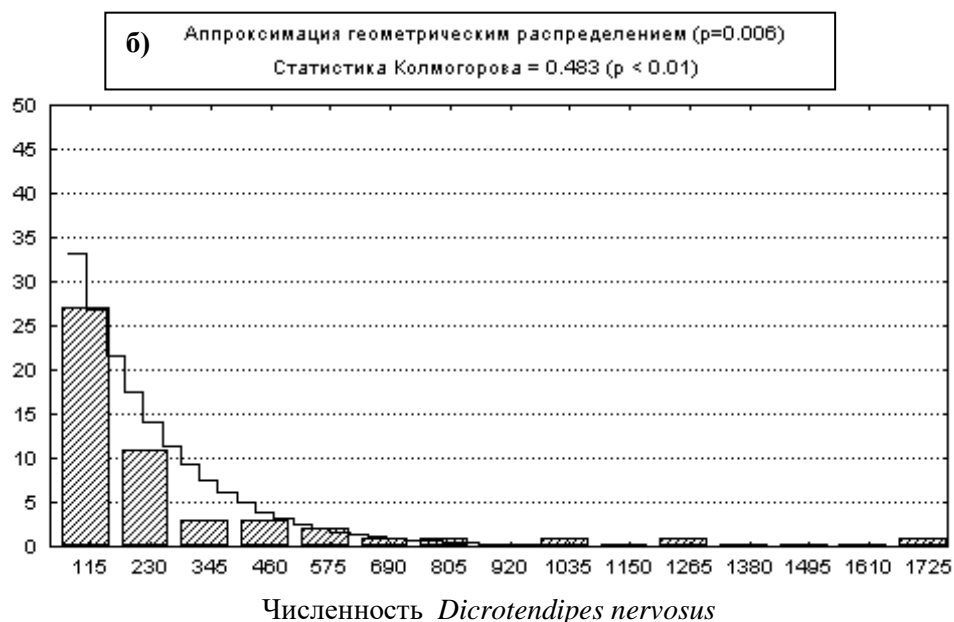
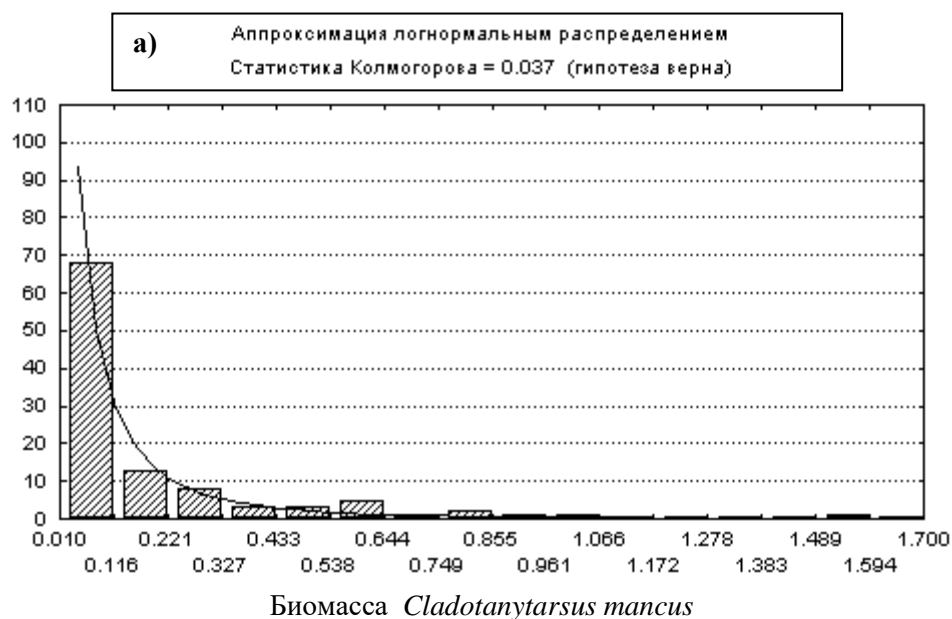


Рис 5.4. Подбор функции распределения показателей обилия некоторых видов бентоса

В то же время, с характером распределения можно, при желании, связать ряд выводов об экологии вида, глубине "экологической ниши" и проч. Например, сравнивая закономерности распределения численностей фиг. «а» и «в» на рис. 5.5, можно усмотреть, что экологический "спектр" *Chironomus plumosus* значительно шире, чем *Procladius olivacea*, что объясняется широкой экологической валентностью первого вида и особенностями биологии хирономид [Зинченко, 2002]. Аналогично, из гистограммы распределения биомассы личинок хирономид можно заметить различия, связанные с особенностями питания хищных *Cryptochironomus* gr. *defectus* («б») и факультативных фитофагов *Procladius ferrugineus* («г»). Впрочем, кое-кому может показаться, что подобные упражнения сильно напоминают "гадания на кофейной гуще".

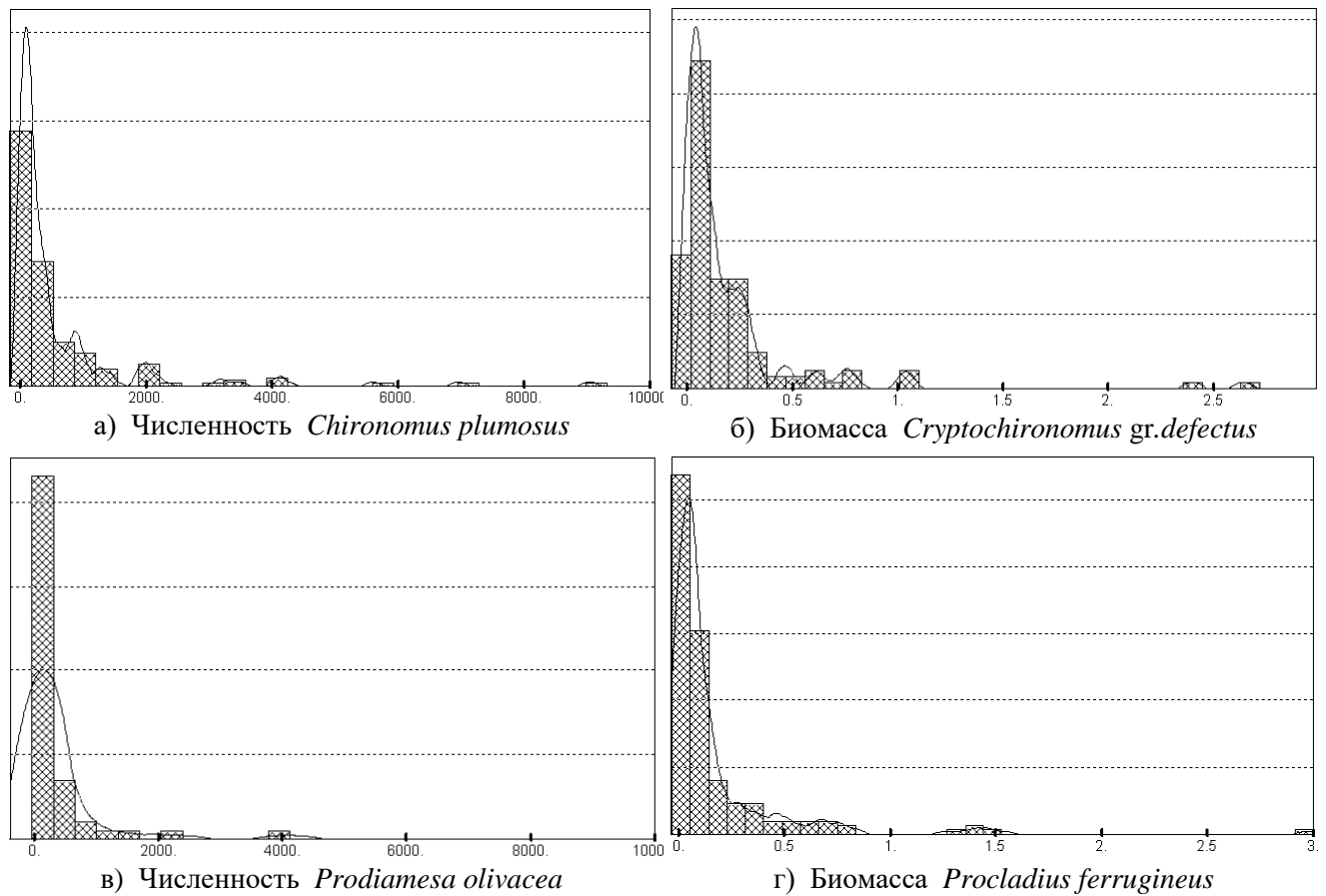


Рис 5.5. Формы кривых распределения обилия некоторых видов бентоса

5.2. Задача об однородности выборок: однофакторный дисперсионный анализ

Формулировка задачи

Пусть имеется выборка из n значений X_1, X_2, \dots, X_n некоторого измеренного количественного гидробиологического показателя, который будем называть *откликом*. Каждому значению отклика поставлен в соответствие некоторый качественный признак (фактор), на основании которого общую выборку можно сгруппировать в частные независимые случайные выборки: если фактор имеет k уровней A_1, A_2, \dots, A_k , то при каждом уровне A_j фактора, $j = 1, \dots, k$, имеется n_j измерений. Необходимо:

- проверить гипотезу о принадлежности всех выборок одной генеральной совокупности, т.е. нельзя ли объяснить расхождение наблюдаемых значений для разных значений фактора случайными обстоятельствами или влиянием неучтенных факторов;
- если нулевая гипотеза отвергается, то оценить степень влияния фактора;
- выделить все пары групп $i-j$, $i = 1, 2, \dots, k$, $j = 1, 2, \dots, k$, $i \neq j$, которые имеют между собой статистически значимые различия.

В рамках этой задачи изучается влияние, которое оказывает на количественный результат измерения тот или иной фактор, который имеет принципиально нечисловую природу и измерен в шкале наименований ("левый берег", "правый берег", "русло"), либо в порядковой шкале (месяцы или годы отбора проб).

Опыт применения статистики показывает, что условия формирования выборочных совокупностей сказываются, в первую очередь, на изменении положения центра распределения изме-

ряемой характеристики на числовой оси – т.е. сдвиг медианы или среднего значения. При больших различиях в условиях отбора проб наряду с дрейфом центра распределения изменяется и его разброс, т.е. дисперсия. Масштаб и форма распределения обычно остаются практически неизменными. Поэтому задача о степени однородности измеренной случайной величины обычно сводится к оценке статистической значимости различия между средними двух (или нескольких) групп.



photo A. Barrington-Brown (c) R. A. Fisher Memorial Trust

Рональд Эйлмер ФИШЕР
(R.A.Fisher 1890-1962)

английский математик и генетик, основоположник современной прикладной статистики

В дисперсионном анализе ANOVA (англ. Analysis of variance), фундаментальная концепция которого была предложена Р. Фишером в 1920 г., процедура сравнения средних основывается на разложении суммы квадратов выборочной вариации. При этом принимается ряд следующих априорных допущений:

- все наблюдения принадлежат некоторому сдвиговому семейству распределений;
- эти распределения внутри каждой группы аппроксимируются нормальной кривой Лапласа – Гаусса (предположение о нормальности распределения);
- дисперсии и ковариации зависимой переменной в разных группах одинаковы (предположение об однородности дисперсий).

Рекомендуемая литература: [Урбах, 1963; Плохинский, 1970, 1982; Закс, 1976; Джонсон, Лион, 1980, 1981; Любищев, 1986; Дрейпер, Смит, 1986, 1987].

Математический лист

Пусть измеряемая величина x есть результат действия фактора A и некоторой случайной составляющей ε , от фактора не зависящей и отражающей внутреннюю изменчивость наблюдений:

$$x = f(A) + \varepsilon .$$

Примем следующие предположения:

- значение отклика x_{ij} можно представить в виде суммы вкладов влияния уровней фактора, т.е. приемлема аддитивная модель:

$$x_{ij} = a_j + \varepsilon_{ij}, \quad i = 1, \dots, n_j , \tag{5.21}$$

где $a_j = f(A_j)$ – неслучайные неизвестные величины, определяющие влияние каждой категории фактора j , $j = 1, 2, \dots, k$. Если влияние фактора отсутствует, то все a_j равны между собой;

- случайная составляющая ε распределена нормально $N(0, \sigma^2)$ с дисперсией σ^2 .

Основное соотношение дисперсионного анализа можно записать как разложение общей или "полной" суммы квадратов отклонений (Q) отдельных наблюдений от общей средней на две составляющие:

$$Q = Q_A + Q_e , \tag{5.22}$$

где Q_A – вариабельность за счет влияния исследуемого фактора или сумма квадратов отклонений "между группами";

Q_e – остаточное рассеивание, обусловленное случайными факторами, или сумма квадратов отклонений "внутри групп".

Долю объясненной суммы квадратов в полной вариации отклика, рекомендованную для биологических исследований Н.А. Плохинским, связывают с *корреляционным отношением Пирсона* (см. далее разделы 5.4 и 7.2):

$$\eta^2_A = Q_A / (Q_A + Q_e). \tag{5.23}$$

Чем ближе значение η^2_A к единице, тем большим принимается влияние группировочного фактора A на результативный признак X . Можно рассчитать корреляционное отношение и для остаточной суммы квадратов

$$\eta^2_e = Q_e / (Q_A + Q_e),$$

тогда очевидно, что $\eta^2_A + \eta^2_e = 1$. Корреляционные отношения иногда использовать проще, чем суммы квадратов, поскольку они нормированы и не зависят от шкалы измерений. Однако они не могут быть использованы для проверки гипотез, поскольку не включают число степеней свободы.

Проверка нулевой гипотезы.

Пусть имеется k выборок объемами n_1, \dots, n_k , $\sum_{j=1}^k n_j = N$. По каждой из выборок методом наибольшего правдоподобия оценим групповые средние a_j и групповые дисперсии σ^2_j :

$$\bar{a}_j = \bar{x}_j \equiv \frac{1}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} x_{ij}, \quad s_j^2 = \frac{1}{n_j} \sum (x_{ij} - \bar{x}_{\cdot j})^2, \quad (5.24)$$

а затем оценим σ^2 по всем выборкам:

$$\sigma^{2*} = \frac{Q_e}{N-k} = \frac{1}{N-k} \sum_{j=1}^k n_j s_j^2 = \frac{1}{N-k} \sum_{j=1}^k \sum_{i=1}^{n_j} (x_{ij} - \bar{x}_{\cdot j})^2. \quad (5.25)$$

Сформулируем гипотезу H об отсутствии влияния фактора A , которая справедлива, если групповые средние равны между собой: $a_1 = a_2 = \dots = a_k$.

Статистика, рассчитанная по формуле (5.25) несмещенно оценивает общую дисперсию σ^2 , независимо от того, верна или нет гипотеза H . Другую оценку для σ^2 построим, используя только значения групповых средних $\hat{a}_1, \hat{a}_2, \dots, \hat{a}_k$:

$$\hat{a} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^k n_j \hat{a}_j, \quad \sigma^{2**} = \frac{Q_A}{k-1} = \frac{1}{k-1} \sum_{j=1}^k n_j (\hat{a}_j - \hat{a})^2. \quad (5.26)$$

Если H верна, то $M\hat{a}_j = a$, $D\hat{a}_j = \sigma^2 / n_j$, для всех $j = 1, 2, \dots, k$.

Из теоремы о совместном распределении оценок среднего и дисперсии нормальной совокупности следует, что статистики $(N-k)\sigma^{2*}$ и $(k-1)\sigma^{2**}$ независимы и распределены как $\sigma^2 \chi^2_{N-k}$ и $\sigma^2 \chi^2_{k-1}$, соответственно, и потому их отношение

$$F_H = \frac{\sigma^{2**}}{\sigma^{2*}} = \frac{\sigma^2 \chi^2_{k-1} / (k-1)}{\sigma^2 \chi^2_{N-k} / (N-k)}, \quad (5.27)$$

если гипотеза H верна, имеет F -распределение Фишера, зависящее только от двух степеней свободы $(k-1)$ и $(N-k)$.

Пусть $F_{крит} = F(1-\alpha; k-1, N-k)$ – квантиль уровня $(1-\alpha)$ F -распределения с $k-1$ и $N-k$ степенями свободы, где α – выбираемый уровень значимости. Если гипотеза H не верна, то σ^{2**} имеет тенденцию к увеличению за счет разброса средних a_j , приводящую к тому, что F_H принимает слишком большое значение, превышающее критическое

$$F_H > F_{крит}. \quad (5.28)$$

В этом случае гипотеза об отсутствии влияния фактора A отклоняется, и следует считать, что среди подмножества внутригрупповых средних a_1, a_2, \dots, a_k имеются хотя бы два не равных между собой.

Если же (5.28) не выполняется, то это означает, что наблюдения не противоречат гипотезе об отсутствии влияния фактора и условие (5.28) может быть записано иначе:

$$P\{F \geq F_H\} < \alpha, \quad (5.29)$$

где F – случайная величина, распределенная по закону Фишера.

Таким образом, влияние фактора признается достоверным, если средняя сумма квадратов отклонений между группами $S^2_A = Q_A/(k-1)$ значимо превышает средние квадраты внутри групп $S^2_e = Q_e/(N-k)$.

Оценка влияния фактора

Если гипотеза H_0 оказалась несовместимой с наблюдениями, есть основания для обобщения значений параметров $a_1, a_2, \dots, a_j, \dots, a_k$, оценками которых являются внутригрупповые средние. Отношение $\frac{\hat{a}_j - a_j}{\sigma^* \sqrt{n_j}}$ подчиняется распределению Стьюдента с $N-k$

степенями свободы, и если $t_{1-\alpha} = t(1-\alpha, N-k)$ – квантиль уровня $(1-\alpha)$ этого распределения, то получаем доверительный интервал для a_j с уровнем доверия $(1-2\alpha)$:

$$\hat{a}_j \pm \frac{\sigma^*}{\sqrt{n_j}} t_{1-\alpha} . \quad (5.30)$$

Для оценки влияния фактора используют ряд состоятельных статистик, предложенных различными авторами:

- сила влияния фактора по Снедекору [Гинзбург, 1969]

$$h_x^2 = \frac{S_A^2 - S_e^2}{S_A^2 + (v-1)S_e^2}; \quad v = \frac{1}{k-1} \left(N - \frac{\sum_{j=1}^k n_j^2}{N} \right); \quad (5.31)$$

- показатель Миллса-Лукомского [Урбах, 1963] $ML = 1 - \frac{Q_e(N-1)}{(Q_e + Q_A)(N-k)}$; (5.32)

- доля дисперсии, объяснимая фактором $\eta = \frac{\frac{k}{N}(S_A^2 - S_e^2)}{S_e^2 + \frac{k}{N}(S_A^2 - S_e^2)}$. (5.33)

Аргументы "за" и "против" использования каждого из этих критериев были проанализированы нами ранее [Розенберг, Долотовский, 1988]. Здесь важно подчеркнуть другое – вычисление значений перечисленных статистик, в отличие от статистики Фишера, не дает ответа на главный вопрос: какой альтернативной гипотезе о влиянии показателя следует отдать предпочтение.

С точки зрения обоснованности применения метода дисперсионного анализа в целом (см. исходные допущения метода), наряду с тестами на нормальность распределения выборок, для оценки эффектов вариации наблюдений на разных уровнях факторов целесообразно использовать критериальные статистики проверки однородности групповых дисперсий, такие как критерии Бартлетта и Кохрена:

- *M-критерий Бартлетта* служит для проверки нулевой гипотезы о равенстве дисперсий нескольких генеральных совокупностей и вычисляется по формулам:

$$M = \frac{\ln 10}{c} \left[(N-k) \ln S^2 - \sum_{i=1}^k (n_i - 1) \ln s_i^2 \right], \quad (5.34)$$

где $c = 1 + \frac{1}{3(k-1)} \left(\sum_{k=1}^k \frac{1}{n_i - 1} - \frac{1}{N-k} \right)$; $S^2 = \frac{1}{N-k} \sum_{i=1}^k (n_i - 1) \cdot s_i^2$;

- *G-критерий Кохрена* используется для тех же целей и вычисляется как

$$G = \frac{\max_{1 \leq i \leq k} s_i^2}{\sum_{i=1}^k s_i^2}, \quad (5.35)$$

где для обеих формул k – число выборок ($k > 2$); n_i – численность i -й выборки, $i = 1, 2, \dots, k$; s_i^2 – выборочная дисперсия i -й выборки.

При больших объемах выборок M -статистика Бартлетта имеет асимптотическое χ^2 распределение с числом степеней свободы $(k - 1)$, а способ расчета критических значений G -статистики Кохрена по аппроксимационным формулам представлен в статистических справочниках. Заметим, однако, что критерии Кохрена и Бартлетта также весьма чувствительны к отклонению от предположения, что нормированные оценки дисперсии у сравниваемых выборок подчиняются распределению χ^2 .

Проверка гипотез о равенстве групповых средних

Если гипотеза H_0 о равенстве средних отклоняется, то следует определить, по каким именно уровням фактора групповые средние значимо различаются. В своем простейшем варианте эта задача сводится к попарному сравнению средних значений двух произвольных выборок.

Процедуру сравнения двух произвольных выборочных средних a_1 и a_2 , основанных на выборках размерностью n_1 и n_2 и имеющих оценки дисперсий s_1^2 и s_2^2 соответственно, выполняют с помощью t -статистики, численно равной нормированной разности групповых средних. Известно, что это распределение близко к t -распределению Стьюдента (5.36) с числом степеней свободы ν , равным округленному до ближайшего целого выражению (5.36а):

$$t = \frac{|a_1 - a_2|}{\sqrt{\frac{s_1^2}{n_1} + \frac{s_2^2}{n_2}}}; \quad (5.36) \quad \nu = \frac{\left(\frac{s_1^2}{n_1} + \frac{s_2^2}{n_2}\right)^2}{\frac{1}{n_1 - 1} \left(\frac{s_1^2}{n_1}\right)^2 + \frac{1}{n_2 - 1} \left(\frac{s_2^2}{n_2}\right)^2}. \quad (5.36a)$$

Если для вычисленной t -статистики выполняется неравенство:

$$t > t_{1-\alpha, \nu}, \quad (5.37)$$

где $t_{1-\alpha, \nu}$ – критическое значение распределения Стьюдента при ν степенях свободы, то нулевая гипотеза о равенстве средних отвергается с уровнем значимости α .

Однако простейший метод попарного сравнения групповых средних по Стьюденту не позволяет указать вероятность, с которой одновременно выполняются несколько неравенств типа (5.37), и поэтому считается неполным. Метод множественных сравнений Г. Шеффе позволяет получать совместные доверительные интервалы для контрастов.

Линейным контрастом L называется любая линейная комбинация выборочных средних a_j с произвольными коэффициентами c_1, c_2, \dots, c_k ,

$$L = \sum_{j=1}^k c_j a_j; \quad \sum_{j=1}^k c_j = 0, \quad (5.38)$$

вычисленная для k независимых выборок с неизвестными, но равными дисперсиями.

Пусть для некоторого контраста L : оценка среднего – $\tilde{L} = \sum_{j=1}^k c_j \hat{a}_j$, а оценка дисперсии – $S_L^2 = \sigma^2 \sum_{j=1}^k \frac{c_j^2}{n_j}$. Зафиксируем произвольное число r контрастов $L^{(1)}, L^{(2)}, \dots, L^{(r)}$. Мож-

но показать, что одновременно для всех $\tilde{L}^{(1)}, \dots, \tilde{L}^{(r)}$ с вероятностью $(1 - \alpha)$ выполняются соотношения:

$$\left| L^{(m)} - \bar{L}^{(m)} \right| < S_L^{(m)} \sqrt{k F(1 - \alpha, k, N - k)} \quad (5.39)$$

$m = 1, \dots, r$

Неравенства (5.39), использующие критические значения F -распределения, позволяют сделать вывод о достоверности одновременного влияния любых интересующих нас комбинаций уровней факторов.

Вычисления статистики критерия Шеффе при проверке нулевой гипотезы $L = L_0$ производятся по следующей формуле:

$$t_S = \frac{\left| \sum_{i=1}^k c_i a_i - L_0 \right|}{\sqrt{M \sum_{i=1}^k \frac{c_i^2}{n_i}}}, \quad \text{где } M = \frac{1}{N - k} \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^{n_i} (x_{ij} - a_i)^2 \text{ — средний квадратичный остаток,}$$

N — общая численность, k — число выборок ($k > 2$); n_i — численность i -й выборки, $i = 1, 2, \dots, k$; a_i — среднее i -й выборки. Уровень значимости вычисляется на основе функции плотности F -распределения с параметрами $(k - 1)$ и N .

Гипотезы о простых линейных контрастах могут быть также проверены с помощью двух других методов: с использованием критерия множественных сравнений Дункана t_D и критерия достоверно значимой разности Тьюки t_T , которые по своим предпосылкам применения и технике вычислений очень похожи на методику Шеффе. Вычисления этих критериев проводят по следующим формулам при тех же обозначениях, что и t_S :

$$t_D = \frac{\left| \sum_{i=1}^k c_i a_i - L_0 \right|}{\sqrt{\frac{M}{2} \sum_{i=1}^k \frac{c_i^2}{n_i}}}; \quad t_T = \frac{\left| \sum_{i=1}^k c_i a_i - L_0 \right|}{0.5 \sum_{i=1}^k |c_i| \sqrt{M}} \sqrt{m} \quad (5.40)$$

а для нахождения p -значений критериев Дункана и Тьюки сформированы таблицы распределений "студентизированного размаха".

Формирование однородных групп средних значений возможно также с использованием LSD -критерия. Для этого упорядочивают k средних значений выборочных групп по их возрастанию и проверяют, больше ли разность Δ между соседними величинами, чем наименьшая значимая разность (least significant difference, LSD):

$$LSD_{(a,b)} = t_{n-k, \alpha} \sqrt{s_e^2 \left(\frac{n_a + n_b}{n_a n_b} \right)} = \sqrt{s_e^2 \left(\frac{n_a + n_b}{n_a n_b} \right) F(1; N - k; \alpha)} \quad (5.41)$$

При $\Delta < LSD$ или $\Delta_{(a,b)} < LSD_{(a,b)}$ нет оснований для отклонения нуль-гипотезы H_0 о равенстве соседних средних значений.

Результаты расчетов

Рассмотрим влияние типа грунта на общие показатели обилия хирономид. На основе данных из базы по малым рекам Самарской области сформируем выборку из численности N экземпляров отдельных видов Chironomidae на m^2 и их биомассы B ($г/м^2$). Выполним группировку суммарных значений N_s и B_s для каждой пробы и вычислим дополнительно преобразованные выборки из прологарифмированных значений этих показателей обилия и индекса плотности населения $(N_s * B_s)^{1/2}$. Качественные оценки грунтов на дне водоемов в местах отбора проб представим в виде 6 категорий:

- 1- грунты преимущественно без растительных остатков (гравий, камни, песок);
- 2- заиленный песок;
- 3- серые илы и заиленная почва;

- 4- илы с почвой и растительными остатками;
- 5- глинистая почва;
- 6- черный ил и ил с запахом сероводорода.

Выполним проверку нулевой гипотезы об отсутствии влияния типа грунта на общее обилие хирономид, ориентируясь на p -значения, соответствующие вычисленным F -статистикам. Результаты, приведенные в табл. 5.3, свидетельствуют о том, что из всех анализируемых выборок значимые отличия (p -значения меньше 0.05) показателей обилия для различных грунтов имеют место только для $\ln(N_s)$. Весьма близка к этому выводу оказалась и выборка $\ln((N_s * B_s)^{1/2})$.

Таблица 5.3

Результаты проверки по критерию Фишера гипотезы о влиянии типа грунтов на обилие *Chironomidae*

Показатели для анализа	Источник вариации	Сумма квадратов	Степеней свободы	Средние квадраты	F -отношения	p -значения
1. Численность N_s	Между группами	$2.49 \cdot 10^8$	5	$0.49 \cdot 10^8$	0.41	0.84
	Внутри групп	$5.3 \cdot 10^{10}$	439	$1.2 \cdot 10^8$		
	Итого	$5.33 \cdot 10^{10}$	444			
2. Биомасса B_s	Между группами	59200	5	11840	0.61	0.6914
	Внутри групп	8504210	439	19371		
	Итого	8563400	444			
3. $\ln(N_s)$	Между группами	54.7	5	10.9	3.07	0.0099
	Внутри групп	1567.5	439	3.57		
	Итого	1622.2	444			
4. $\ln(B_s)$	Между группами	22.96	5	4.59	1.65	0.144
	Внутри групп	1218.4	439	2.77		
	Итого	1241.4	444			
5. $\ln((N_s * B_s)^{1/2})$	Между группами	31	5	6.2	2.16	0.057
	Внутри групп	1263	439	2.87		
	Итого	1294	444			

Отличия в основных статистических выводах между параллельными выборками из натуральных и прологарифмированных значений могут быть вполне объяснимы, если вспомнить основное предположение дисперсионного анализа о нормальном характере распределения анализируемых выборок.

Кроме описанных в разделе 5.1 критериев согласия, для проверки нормальности закона распределения часто бывает достаточно визуальной оценки, основанной на удивительной способности человеческого глаза обнаруживать сходство геометрического образа с прямой линией. Для этого используют построение графиков на "нормальной вероятностной бумаге", где на оси абсцисс откладывают значения x_i , а на оси ординат – значения функции, обратной интегралу вероятностей $\Phi(z_i) = (x_i - a)/\sigma$. В случае нормального распределения полученные точки ложатся на прямую, как это имеет место для прологарифмированных значений и никак не характерно для натуральных значений (см. рис. 5.6)

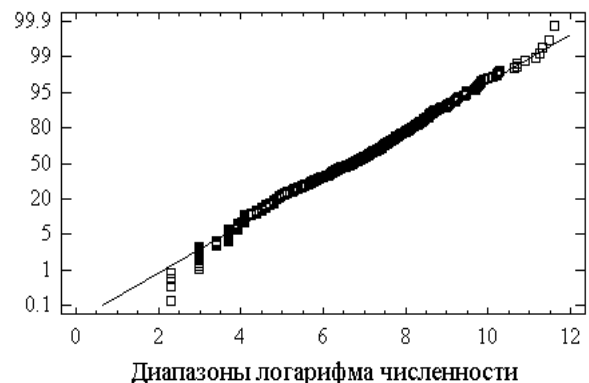
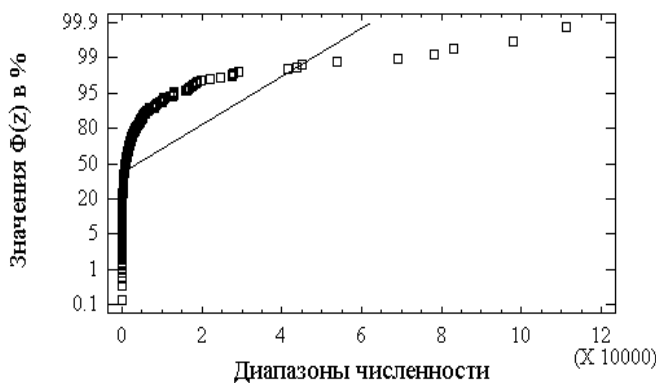


Рис. 5.6. Эмпирические функции распределения общей численности хирономид на нормальной вероятностной бумаге

Как подтверждается результатами, приведенными в табл. 5.3, F -критерий очень неустойчив к отклонению выборок от нормальности (подробнее см. [Lindman, 1974]). Если эксцесс существенно больше 0, что имеет место в случае с натуральными значениями численности и биомассы, то значение статистики F может стать очень маленьким. Нулевая гипотеза при этом не может быть отвергнута, хотя она и не верна. Ситуация обычно меняется на противоположную, если эксцесс меньше 0.

Для проверки другого исходного предположения дисперсионного анализа об однородности групповых дисперсий воспользуемся критериями Кохрена и Бартлетта, представленными в табл. 5.4. Очевидно, что выборки 1 и 2 из натуральных значений показателей обилия не соответствуют требованиям анализа, в то время как для выборок из прологарифмированных значений гипотеза о равенстве групповых дисперсий не отвергается.

Таблица 5.4

Результаты проверки однородности выборочных дисперсий обилия *Chironomidae* в зависимости от типа грунтов

Выборки для анализа	Тест по методу Кохрена		Тест по методу Бартлетта	
	G -критерий	P -значение	M -критерий	P -значение
1. Численность N_s	0.406	0.0	1.381	0.0
2. Биомасса B_s	0.429	0.0	1.159	0.0
3. $\ln(N_s)$	0.210	0.291	1.008	0.602
4. $\ln(B_s)$	0.206	0.396	1.009	0.538
5. $\ln((N_s * B_s)^{1/2})$	0.200	0.571	1.010	0.492

Основываясь на этих рассуждениях, всем предпосылкам дисперсионного анализа отвечает вывод о том, что тип грунта оказывает существенное влияние на численность личинок хирономид в реках, но не влияет на их общую биомассу (при представлении показателей обилия в логарифмических шкалах).

Выполним анализ групповых средних, значения которых для каждой категории грунта представлены в табл. 5.5.

Таблица 5.5

Распределение выборочных значений показателей обилия хирономид для различных категорий грунта

Показатели для анализа	Категория грунта						Общее среднее
	1	2	3	4	5	6	
Количество проб	86	99	127	95	23	15	445
Численность N_s	3683	4912	2985	4376	3163	3455	3870
Биомасса B_s	2.274	2.941	1.954	2.333	2.033	2.708	2.346
$\ln(N_s)$	5.923	6.788	6.776	6.812	6.225	6.760	6.593
$\ln(B_s)$	-0.605	-0.141	-0.332	-0.132	-0.515	-1.080	-0.334
$\ln((N_s * B_s)^{1/2})$	2.659	3.323	3.222	3.340	2.855	2.840	3.129

Более детально параметры семейства сдвиговых распределений представляются на диаграммах размаха типа «прямоугольники и усы» (box-whisker), показанных на рис. 5.7. Вокруг медианы для каждой выборки рисуется прямоугольник, замыкающий 50% наблюдений; среднее значение отмечено знаком «+», а отрезки, концы которых расположены вне прямоугольника, определяют вариационный размах (но не более 1.5 межквартили с каждой стороны).

Представленные данные позволяют сделать следующие выводы о тенденциях изменения обилия хирономид в зависимости от типа грунтов (шкалы – логарифмические):

- численность и биомасса достигают своих максимальных значений на грунтах категории 2-4 (заиленный песок с растительными остатками) и существенно уменьшаются как на "чистых" грунтах категории 1, так и на вязких, глинистых илах категории 5;
- весьма неоднозначно поведение этих показателей на "черных" анаэробных илах категории 6, где при большой медиане общей численности, биомасса достигает своего минимального значения, что, возможно, объясняется развитием видов с небольшим индивидуальным весом особей;
- индекс плотности населения $(N_s * B_s)^{1/2}$ предоставляет более обобщенные выводы об основных закономерностях развития гидробионтов на грунтах различных категорий, чем отдельные показатели численности или биомассы, учитывая динамику их обоих.

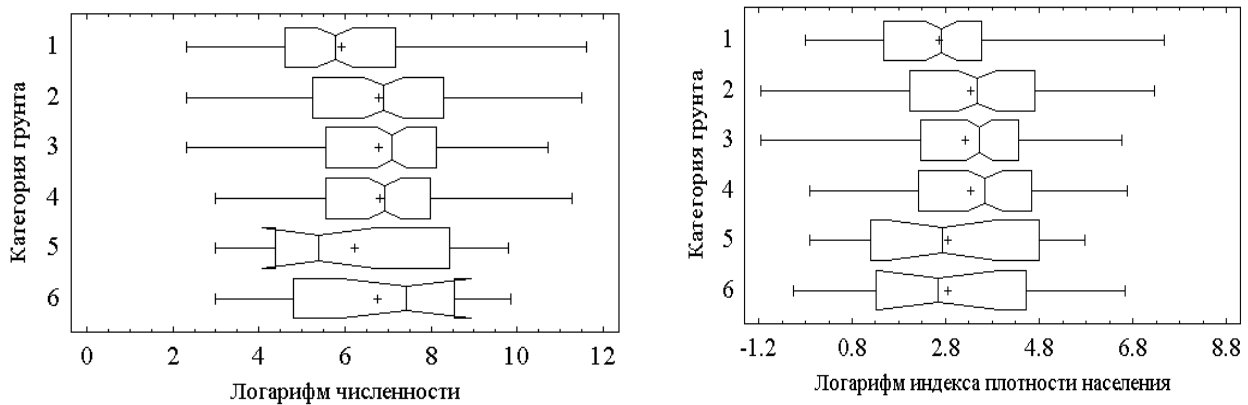


Рис 5.7. Диаграммы размаха типа «прямоугольники и усы»

Естественно, что суммарные показатели численности и биомассы хирономид позволяют оценить лишь самые общие тенденции влияния фактора, т.к. на нижних таксономических уровнях поведение различных групп организмов по отношению к типу грунтов будет далеко неоднозначно. Для оценки влияния фактора на различные трофические группы Chironomidae, разделим все 228 встретившихся видов на 6 групп в зависимости от способа и характера питания, сформируем дополнительные выборки из прологарифмированных значений суммарной численности по каждой группе для каждой пробы и выполним однофакторный дисперсионный анализ влияния категории грунта. Полученные результаты представлены в табл. 5.6.

Таблица 5.6

Однофакторный дисперсионный анализ влияния категории грунтов на логарифм численности трофических групп хирономид

Трофические группы	Количество видов	Общее среднее	Частота нулевого класса, %	Дисперсия фактора S^2_A	Остаточная дисперсия S^2_e	F-отношения	p-значения
Хищники хвататели	30	3.64	28.1	17.42	6.6	2.64	0.023
Всеядные собиратели + хвататели	4	2.50	50.5	72.39	6.8	10.51	0.0
Детритофаги собиратели	60	4.13	24.7	18.6	7.8	2.38	0.038
Сестонофаги+детритофаги фильтраторы	19	1.35	69.4	2.77	4.87	0.57	0.722
Детритофитофаги собиратели + фильтраторы	14	2.97	43.5	56.62	7.8	7.22	0.0
Фитодетритофаги собиратели	101	2.89	42.9	66.07	7.28	9.08	0.0

При реализации этих расчетов мы столкнулись с фундаментальной проблемой, не решенной за 100 лет количественной гидробиологии: следует ли учитывать в составе выборок нулевые значения, т.е. так называемую "частоту нулевого класса", свойственную по теории статистики любому статистическому распределению. Как видно из табл. 5.6, из 445 проб, в которых встречались

хириномиды, виды выделенных трофических групп далеко не обязательно присутствовали в каждой пробе, и исходная анализируемая матрица размерностью 445x6 оказалась заполнена данными примерно наполовину, причем "пустые" клетки можно трактовать и как нули, и как отсутствующие значения.

В.Н. Максимов с соавторами [1999] считают, что «...в действительности, значение численности, равное нулю, совсем не обязательно говорит об отсутствии вида в пробе. При существующих методиках измерения численности вполне вероятно, что ни один экземпляр вида с низким обилием просто не попадает в поле зрения исследователя». Иными словами, нельзя говорить об отсутствии вида в пробе, а только о чрезвычайно низкой, близкой к нулю удельной численности экземпляров.

К сожалению, такая статистически обоснованная концепция "нулевой" численности для видов, не встретившихся в пробе, приводит к серьезным практическим сложностям. Во-первых, становится неопределенным понятие размера выборки, ибо, если количество проб, в которых **встретился** некоторый вид всегда счетно и определено, то число проб, в которых он **не встретился**, сильно зависит от точки зрения экспериментатора (вспомним, например, Александра Ширвиндта, пробующего перечислить роли, которые он **не сыграл**). Во-вторых, на понятии частоты встречаемости видов основаны индексы, являющиеся общеупотребительными в классической количественной гидробиологии, например, индекс доминирования Паляя-Ковнацкого (см. раздел 4.3):

$$D_i = \frac{m_i \cdot \sum_k N_{ik}}{M \cdot \sum_k N_{sk}} 100\% , \quad (5.42)$$

где M – общее количество серий измерений, m_i – количество серий наблюдений, в которых встретился i -й вид, N_{ik} – численность вида i в k -м измерении, N_{sk} – сумма численностей всех видов в k -м измерении. Если принимается концепция "нулевой" численности, то частота встречаемости m_i/M автоматически теряет всякий смысл (поскольку вид встречается **всегда**, принимая иногда значения $N_{ik} \rightarrow 0$) и, после исключения этого соотношения, индекс доминирования D_i гармонично превращается в традиционную вероятность p встретить i -й вид. Вряд ли многие гидробиологи будут с этим согласны.

Тем не менее, нами был избран принцип "значащих нулей" и при логарифмировании шести одинаковых по размеру выборок численностей трофических групп мы использовали прием добавления единичной численности $\ln(N_{ik} + 1)$, поскольку логарифм нуля математически не определен. В этих условиях расчета связь численности подгрупп хириномид с категорией грунта проявляется достаточно отчетливо: влияние фактора во всех случаях достоверно, за исключением группы сестоно-детритофагов, для которых влияние грунта незначимо. Из диаграммы сдвига групповых средних на рис. 5.8 можно, например, видеть, что рост численности хириномид на грунтах категории 6 объясняется развитием одной группы – детритофитофагов. В то же время низкая численность организмов на чистых твердых грунтах категории 1 обусловлена, в основном, всеядными собирателями и детритофитофагами. Напомним также, что на численность сестонофагов + детритофагов фильтраторов тип грунта заметного влияния не оказывает.

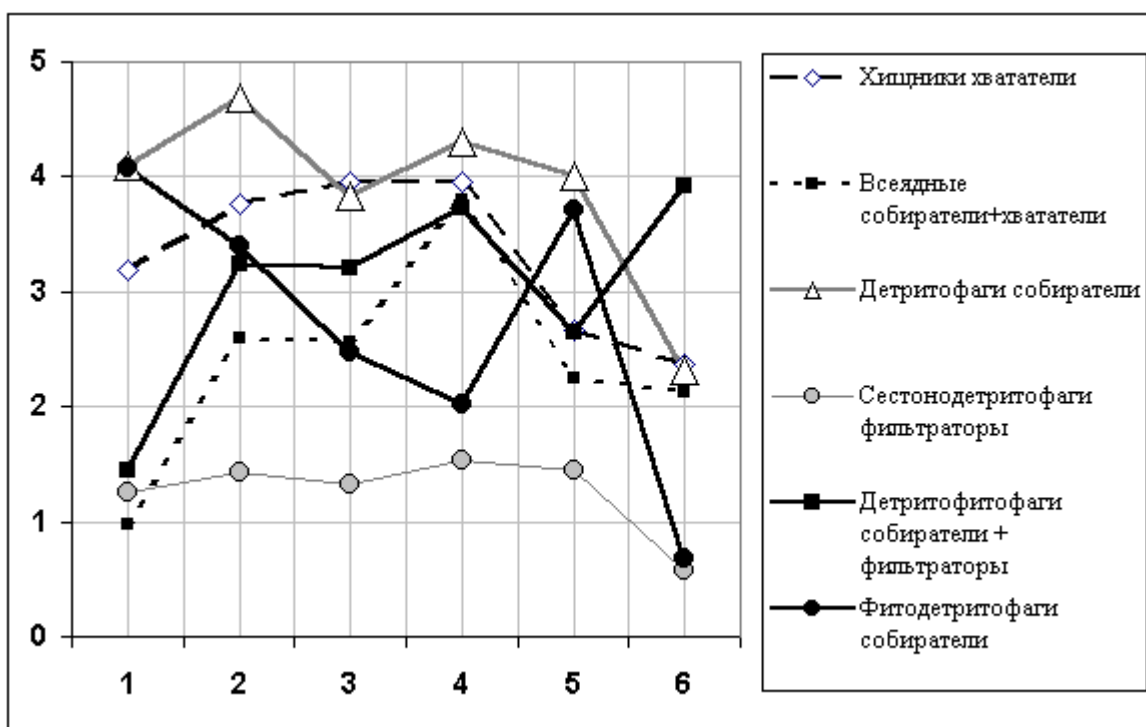


Рис 5.8. Зависимость средних значений логарифмов численности особей отдельных трофических групп (ось ординат) от категории грунтов

Поскольку результаты в табл. 5.6 свидетельствуют о высокой достоверности наличия факторного эффекта, то может быть выполнен анализ, по каким именно уровням фактора групповые средние значимо различаются. В табл. 5.7 приведена матрица парных сравнений Г. Шеффе, в которой для всех возможных пар категорий грунта {1}...{6} приведены вероятности предположения об отсутствии различий между средними значениями логарифма численности хищников-хватателей семейства Chironomidae. Для пар групп, выделенных жирным шрифтом, не отклоняется гипотеза об отсутствии различий.

Таблица 5.7

Вероятность отсутствия различий групповых средних логарифма численности хищников хватателей на разных категориях грунта, оцененная по методу Шеффе

Категории	{1}	{2}	{3}	{4}	{5}	{6}
Средние по группам	3.193	3.764	3.961	3.949	2.658	2.371
{1}	***	0.809	0.472	0.564	0.977	0.933
{2}	0.809	***	0.997	0.998	0.629	0.574
{3}	0.472	0.997	***	1.000	0.417	0.401
{4}	0.564	0.998	1.000	***	0.458	0.431
{5}	0.977	0.629	0.417	0.458	***	0.999
{6}	0.933	0.574	0.401	0.431	0.999	***

Как любую симметричную матрицу расстояний, таблицу парных сравнений удобно интерпретировать в виде графа пороговой связности. На рис. 5.9 представлен такой граф, узлами которого являются категории грунта, а все связи между узлами соответствуют принятым нулевым гипотезам об отсутствии значимых различий численности хирономид-хищников для различных категорий грунтов с использованием трех различных критериев: Шеффе, Дункана и Тьюки.

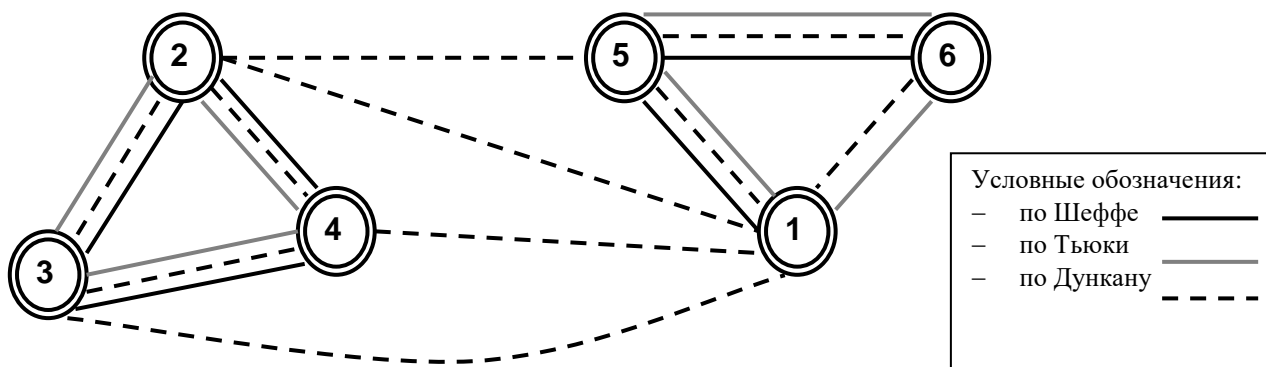


Рис 5.9. Граф связности категорий грунтов на основе равенства групповых средних численности хищников (ребра графа соответствуют принятию нулевой гипотезы по критериям Шеффе, Тьюки и Дункана)

На графе отчетливо выделяются две характерные группы: грунты с большой численностью хищников (категории 2, 3, 4) и грунты, где эта численность относительно мала (категории 1, 5, 6). Можно также отметить, что выводы с использованием критериев Шеффе и Тьюки дали весьма сходные результаты, в то время как критерий Дункана на нашем исходном материале оказался склонен к сильной недооценке возможных различий между категорированными средними.

5.3. Теория и практика двухфакторного дисперсионного анализа

Формулировка задачи

Пусть имеется выборка из m значений X_1, X_2, \dots, X_m некоторого гидробиологического показателя, измеренного в количественной шкале. Изучается влияние, которое оказывают на отклик два качественных признака – фактор A , который имеет k уровней (градаций) A_1, \dots, A_k , и фактор B , разбитый на n уровней B_1, \dots, B_n .

Необходимо:

- проверить гипотезу о принадлежности всех выборок одной генеральной совокупности, т.е. устанавливается, нельзя ли объяснить расхождение наблюдаемых значений для разных уровней факторов случайными обстоятельствами или влиянием неучтенных факторов;
- если нулевая гипотеза отвергается, то оценить степень влияния каждого фактора;
- выделить все пары групп $\{i-j\}$, $i = 1, 2, \dots, k \cdot n$, $j = 1, 2, \dots, k \cdot n$, $i \neq j$, которые имеют между собой статистически значимые различия.

В рамках этой задачи весьма типична ситуация, когда один из факторов (например, фактор B) является "мешающим": он включается в рассмотрение по той причине, что его влияние следует элиминировать, чтобы обнаружить и оценить индивидуальное влияние фактора A .

Общая методика анализа, как и в случае одного фактора, заключается в разложении общей вариации совокупности результатов наблюдения на частные вариации, обусловленные воздействием отдельных факторов и их комбинаций, и на остаточную вариацию, обусловленную случайными причинами. Оценка достоверности влияния факторов проводится по методу Фишера путем расчета отношения дисперсии, характеризующей статистическое колебание групповых средних по отдельным факторам, к дисперсии, характеризующей случайную вариацию.

Рекомендуемая литература та же, что и для раздела 5.2.

Математический лист

Предполагается, что измеряемая величина X есть результат действия факторов A и B и составляющей ϵ , которая является независимой, нормально $N(0, \sigma^2)$ распределенной случайной величиной:

$$X = f(A, B) + \epsilon .$$

Принимается аддитивная и независимая модель действия факторов:

$$f(A_j, B_i) = c + a_j + b_i , \text{ причем } \sum_{j=1}^k a_j = 0 , \sum_{i=1}^n b_i = 0 . \quad (5.43)$$

Величины a_j и b_i называются вкладами факторов. Последние два условия всегда можно выполнить масштабированием величин a_j и b_i за счет изменения величины c .

Для каждого наблюдения из рассматриваемой совокупности справедливо уравнение:

$$x_{ij} = c + a_j + b_i + \epsilon_{ij} , \quad i = 1, \dots, n; \quad j = 1, \dots, k. \quad (5.44)$$

Обычно наблюдения представляют структурной таблицей статистического комплекса. Приведем простейший двухфакторный комплекс, в которой каждому сочетанию (A_j, B_i) уровней (градаций) факторов, т.е. одной клетке таблицы, соответствует одно наблюдение (в таблице сочетание символов «()[^]» обозначает статистическую оценку групповых средних):

Фактор B	Фактор A				Средние по строкам (оценки вкладов B)
	A_1	A_2	...	A_k	
B_1	x_{11}	x_{12}	...	x_{1k}	$x_{1\bullet} = (c + b_1)^{\wedge}$
B_2	x_{21}	x_{22}	...	x_{2k}	$x_{2\bullet} = (c + b_2)^{\wedge}$
...		
B_n	x_{n1}	x_{n2}	...	x_{nk}	$x_{n\bullet} = (c + b_n)^{\wedge}$
Средние по столбцам (оценки вкладов A)	$x_{\bullet 1} = (c + a_1)^{\wedge}$	$x_{\bullet 2} = (c + a_2)^{\wedge}$		$x_{\bullet k} = (c + a_k)^{\wedge}$	$x_{\bullet\bullet} = c^{\wedge}$

Основное тождество дисперсионного анализа

Оценки c , b_i , a_j могут быть получены с помощью метода наименьших квадратов (МНК)

минимизацией суммы
$$\sum_{i,j} (x_{ij} - c - b_i - a_j)^2 \Rightarrow \min \quad (5.45)$$

Основываясь на МНК-оценках

$$\hat{c} = \frac{1}{nk} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^k x_{ij} \equiv x_{\bullet\bullet} , \quad \hat{b}_i = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^k x_{ij} - \hat{c} \equiv x_{i\bullet} - x_{\bullet\bullet} , \quad \hat{a}_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_{ij} - \hat{c} \equiv x_{\bullet j} - x_{\bullet\bullet} , \quad (5.46)$$

введем следующие обозначения:

- для сумм квадратов отклонений под влиянием k уровней фактора A и n уровней фактора B :

$$Q_A = n \sum_{j=1}^k (x_{\bullet j} - x_{\bullet\bullet})^2 = n \sum_{j=1}^k \hat{a}_j^2 , \quad Q_B = k \sum_{i=1}^n (x_{i\bullet} - x_{\bullet\bullet})^2 = k \sum_{i=1}^n \hat{b}_i^2 ; \quad (5.47)$$

- для остаточной суммы квадратов:

$$Q_e = \sum_i \sum_j (x_{ij} - \hat{c} - \hat{b}_i - \hat{a}_j)^2 = \sum_i \sum_j (x_{ij} - x_{i\bullet} - x_{\bullet j} + x_{\bullet\bullet})^2 = \sum_{ij} \hat{\epsilon}_{ij}^2 ; \quad (5.48)$$

- для полной суммы квадратов наблюдений относительно общего среднего $\hat{c} = x_{\bullet\bullet}$:

$$Q = \sum_i \sum_j (x_{ij} - x_{\bullet\bullet})^2 . \quad (5.49)$$

Тогда справедливо следующее соотношение:

$$Q = Q_A + Q_B + Q_e = n \sum_{j=1}^k \hat{a}_j^2 + k \sum_{i=1}^n \hat{b}_i^2 + \sum_i \sum_j \hat{\epsilon}_{ij}^2 , \quad (5.50)$$

т.е. полная сумма квадратов отклонений является суммой квадратов вкладов по факторам и квадратов случайных отклонений (или остатков $\hat{\varepsilon}_{ij}^2$). Другими словами, полное рассеяние есть сумма вариации под влиянием факторов и случайной составляющей.

Проверка нулевых гипотез

По имеющимся наблюдениям требуется проверить предположение об отсутствии влияния фактора **A** (или **B**) на результат измерения, т.е. проверить гипотезы

$$H_A: a_1 = a_2 = \dots = a_k = 0$$

$$H_B: b_1 = b_2 = \dots = b_n = 0.$$

Основой процедуры проверки гипотезы является сравнение двух статистически независимых оценок дисперсии σ^2 .

Одна из них, σ^{2*} оценивает дисперсию вне зависимости от того, верна или нет гипотеза H_A (или H_B) и основана на сумме квадратов случайных отклонений:

$$\sigma^{2*} = \frac{Q_e}{(n-1)(n-k)}. \quad (5.51)$$

Другая, σ^{2**} оценивает дисперсию, если H_A (или H_B) верна. Для гипотезы H_A эта дисперсия основана на сумме квадратов разностей "между столбцами", т.е. по уровням фактора **A**:

$$\sigma_A^{2**} = \frac{Q_A}{k-1}. \quad (5.52)$$

Если гипотеза H_A верна, то отношение

$$F_A = \frac{\sigma_A^{2**}}{\sigma^{2*}} = \frac{Q_A / (k-1)}{Q_e / r} = \frac{\sigma^2 \chi_{k-1}^2 / (k-1)}{\sigma^2 \chi_r^2 / r} \quad (5.53)$$

имеет F -распределение Фишера с $(k-1)$ и r степенями свободы. Если

$$F_A \geq F_{1-\alpha}, \quad (5.54)$$

где $F_{1-\alpha}$ – квантиль этого распределения порядка $1-\alpha$, α – выбранный уровень значимости, то гипотеза H_A отклоняется.

Вместо (5.54) можно использовать эквивалентную процедуру: гипотеза H_A отклоняется, если

$$P\{F \geq F_A\} \leq \alpha, \quad (5.55)$$

где $P\{F \geq F_A\}$ – вероятность при справедливости H_A получить значение, большее, чем F_A ; F – случайная величина, имеющая распределение Фишера.

Для проверки гипотезы H_B используют сумму квадратов разностей "между строками", то

есть по уровням фактора **B**:

$$\sigma_B^{2**} = \frac{Q_B}{n-1}. \quad (5.56)$$

Аналогичным образом, если отношение $F_B = \frac{\sigma_B^{2**}}{\sigma^{2*}}$ велико, то гипотеза H_B отклоняется.

Результаты расчетов

Формирование речных сообществ, их видовой состав и продуктивность гидробионтов находятся в постоянной динамике под воздействием большого количества экологических факторов. Будем оценивать временную изменчивость сообществ, когда набор видов и количество особей претерпевают ежедневные, сезонные и многолетние колебания под воздействием температурного режима, мгновенной гидродинамики водотоков, сбросов токсикантов и т.д. Для прогнозирования динамики экологических систем методами статистического анализа существует обширный и специализированный математический аппарат, который остается за рамками настоящего изложения. Подробно теоретические и прикладные вопросы анализа хронологических трендов экосистем с использованием функциональных предикторов временных рядов рассматривались нами ранее [Розенберг с соавт., 1994]. Здесь мы ограничимся изложением частной методики дисперсионного анализа для оценки влияния многолетней и сезонной составляющих на общие показатели обилия зообентоса.

На основе данных из базы по малым рекам Самарской области сформируем выборку из суммарных значений численности N_s (экз./м²) и биомассы B_s (г/м²) зообентоса и индекса разнообразия Шеннона H для каждой пробы наблюдений. Данные по численности и биомассе предварительно прологарифмируем. Каждому значению варьируемой переменной поставим в соответствие три фактора: водоток, из которого взяты пробы, год исследования (с 1988-99 гг.) и порядковый номер месяца (с 5 по 9) отбора пробы.

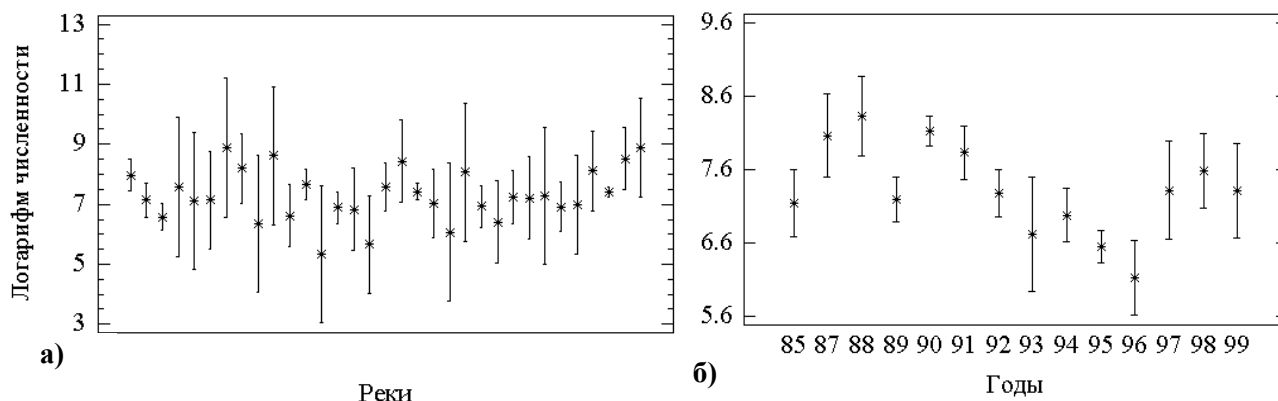
Для оценки влияния регионального фактора выполним предварительно "разведывательный" однофакторный анализ по всем 33 градациям, соответствующим отдельным рекам (см. табл. 5.8).

Таблица 5.8

Результаты проверки гипотезы о влиянии места отбора проб на логарифм численности зообентоса по F-критерию

Источник вариации	Сумма квадратов	Степеней свободы	Средние квадраты	F-отношение	p-значение
Между группами	85.58	32	2.67	0.99	0.49 (фактор не значим)
Внутри групп	1357.12	500	2.71		
Итого	1442.71	532			

Оговоримся, что проблемы пространственной изменчивости, отражающей распределение показателей обилия в зависимости от географических координат поверхности, неизмеримо сложнее описываемого примера, поэтому в данном контексте речь идет не об оценке влияния места отбора пробы вообще, а о конкретном разбиении влияющего фактора на градации. Во-первых, проблематично само понятие «река», как средство обобщения гидробиологических данных, т.к. вариации данных между станциями одной реки, как правило, превышают межрегиональную вариацию (см. фиг. «а» рис. 5.10). Во-вторых, сама природа дисперсионного анализа предполагает тенденцию к недооценке влияния фактора при числе градаций больше 10. Однако выводы табл. 5.8 дают нам формальные основания осуществить дисперсионный анализ в градациях остальных двух факторов: «год» – «месяц», основные результаты которого приведены в табл. 5.9.



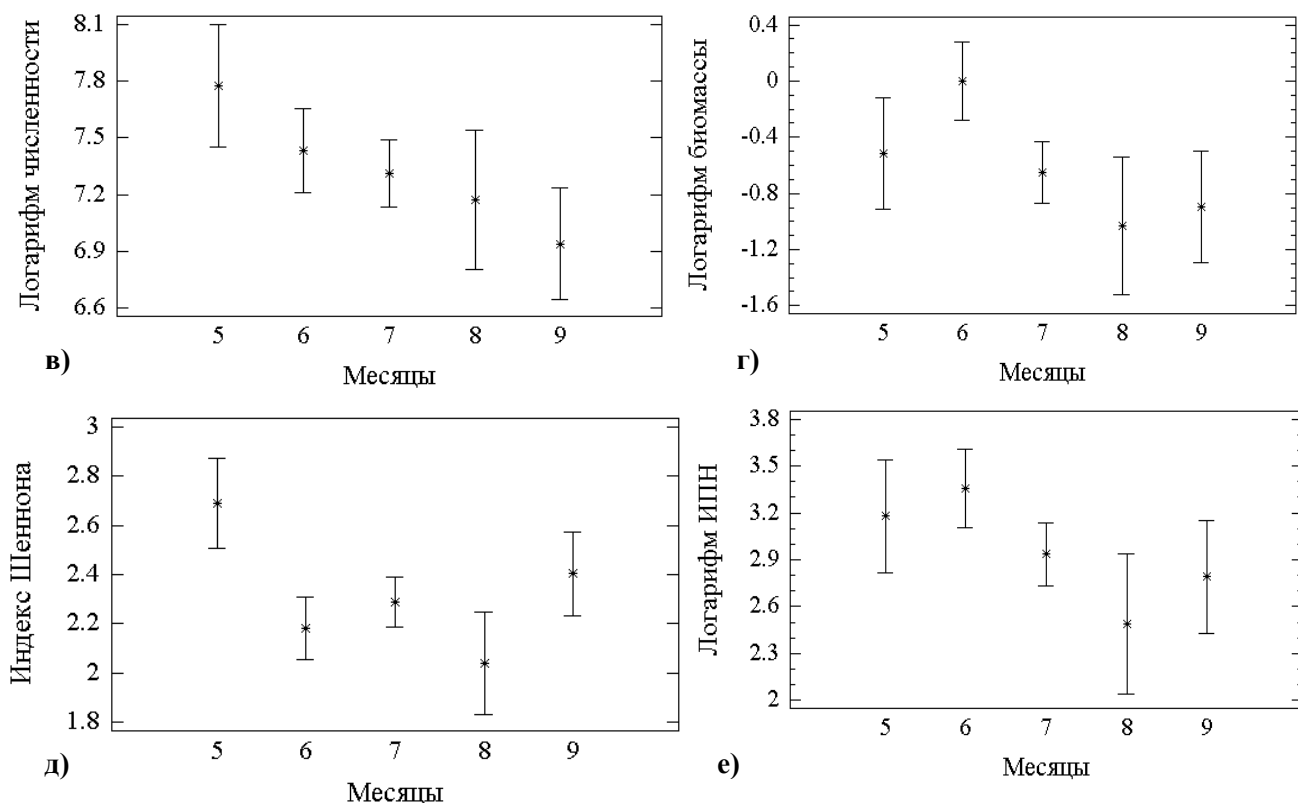


Рис 5.10 Диаграммы изменения групповых средних по результатам дисперсионного анализа показателей обилия и биоразнообразия зообентоса

По существу рассматриваемой проблемы выполненные расчеты влияния факторов позволяют сделать следующие выводы:

1. Во всех случаях (выборки 1-4, 6 в табл. 5.9) отчетливо проявляется влияние многолетнего фактора. Динамика изменения групповых средних по годам для численности зообентоса представлена на рис. 5.10, фиг. «б». Однако вряд ли следует понимать это влияние слишком буквально, как результат изменения гидрологических или радиационно-климатических условий. Можно, например, предложить следующую версию влияния многолетнего фактора. В 1987-91 гг. в коллектив исследователей пришла группа ученых, владеющих современными методами биологического контроля, что существенно расширило диапазон исследований и создало эффект роста численности определяемого материала. Начиная с 1992 г., наблюдалось резкое снижение уровня финансирования академических исследований, в результате чего сузилась широта географического охвата, и внимание исследователей сконцентрировалось на водоемах, подверженных экстремальным антропогенным воздействиям. Рост обилия гидробионтов с 1997 г. можно объяснить как расширением региона исследований на более "чистые" зоны, так и эффектом постепенного самоочищения водотоков после экономической стагнации 1991-97 гг. В любом случае, многолетний фактор является сложным конгломератом трудно идентифицируемых "человеческих", экономических и гидрометеорологических составляющих.

Таблица 5.9

Результаты двухфакторного дисперсионного анализа влияния временных факторов на показатели обилия зообентоса

Выборки для анализа	Источник вариации	Сумма квадратов	Степеней свободы	Средние квадраты	F-отношения	p-значения
1. Численность зообентоса в пробе (логарифм N_s)	Фактор «Месяц»	24.23	4	6.06	2.58	0.0365
	Фактор «Год»	208.12	13	16.01	6.82	0.0
	Остаточная	1208.84	515	2.35		
	Всего	1442.71	532			
2. Численность	Фактор «Месяц»	25.65	4	6.41	2.23	0.0651

Chironomidae в пробе (логарифм N_s)	Фактор «Год»	80.38	13	6.18	2.15	0.0108
	Остаточная	1341.48	446	2.87		
	Всего	1455.08	463			
3. Индекс Шеннона H (по численности зообентоса)	Фактор «Месяц»	11.93	4	2.98	3.95	0.0036
	Фактор «Год»	46.6	13	3.58	4.74	0.0
	Остаточная	388.6	514	0.756		
	Всего	442.16	531			
4. Биомасса зообентоса в пробе (логарифм B_s)	Фактор «Месяц»	40.08	4	10.02	3.09	0.0157
	Фактор «Год»	203.16	13	15.63	4.82	0.0
	Остаточная	1451.89	448	3.24		
	Всего	1694.25	465			
5. Индекс плотности населения $(N_s * B_s)^{1/2}$	Фактор «Месяц»	145189	4	36297	1.28	0.27
	Фактор «Год»	598507	13	46039	1.62	0.0762
	Остаточная	12727600	448	28409		
	Всего	13472500	465			
6. Логарифм индекса плотности населения $\ln((N_s * B_s)^{1/2})$	Фактор «Месяц»	22.49	4	5.62	2.09	0.081
	Фактор «Год»	119.1	13	9.16	3.40	0.0001
	Остаточная	1206.8	448	2.69		
	Всего	1356.6	465			

- В очередной раз подтверждается необходимость обращать внимание на закон распределения зависимого показателя: влияние факторов на индекс плотности населения $(N_s * B_s)^{1/2}$ не было обнаружено, но проявилось после логарифмирования отклика.
- С чисто формальных позиций, влияние сезонного фактора, выраженного календарным месяцем отбора пробы, является значимым для индекса Шеннона, численности и биомассы зообентоса (выборки 1, 3, 4), но незначимо для численности хирономид и индекса плотности населения (выборки 2, 6). Более детальные содержательные сведения можно получить из анализа сдвигов групповых средних, представленных на рис. 5.10. Месяц май характеризуют высокие значения численности N_s и биоразнообразия по Шеннону H , обусловленные развитием личинок амфибиотических насекомых весенней генерации. Начиная с июня, происходит постепенный захват экологических ниш видами-доминантами, в результате чего общая численность и, особенно резко, биоразнообразие H начинают падать. В то же время, для июня характерна максимальная продуктивность и энергообмен в трофических цепях, выраженные через биомассу. Результатом майско-июньской конкуренции между N_s и B_s явилось сглаживание контрастов индекса плотности населения (ИПН). Увеличение индекса Шеннона в сентябре обусловлено развитием осенних генераций амфибиотических насекомых в бентосе рек на фоне небольших показателей их обилия в конце лета.

Представляет интерес сравнить результаты двухфакторного и однофакторного анализа, например, для выборки 2 (численность хирономид). Если оценить по Фишеру локальное влияние сезонного фактора, то его вклад в общий статистический разброс численности следует трактовать как значимый (статистика Фишера $F = 2.80$, а соответствующее ему значение $p = 0.0256$). При переходе к двухфакторной схеме оказалось, что часть дисперсии, приписываемой в однофакторной схеме сезонному фактору, на самом деле объясняется многолетней составляющей (например, в разные годы экспедиции проводились во время разных месяцев).

Хотя у нас нет формальных оснований отвергнуть нулевую гипотезу о равенстве групповых дисперсий по тестам Кохрена и Бартлетта для данного примера, однако значения уровней значимости для обоих критериев находились в слишком опасной близости от порогового значения ($\alpha = 0.05$):

- по тесту Кохрена: G -критерий = 0.259, p -значение = 0.07;
- по тесту Бартлетта: M -критерий = 1.019, p -значение = 0.06.

Поскольку в рамках схемы двухфакторного дисперсионного анализа оценка различий групповых средних представляет собой нетривиальную задачу, выполним на основе однофакторного анализа с использованием метода Шеффе выделение в течение сезона гомогенных групп значений фактора, т.е. комбинаций месяцев, между которыми нет значимых отличий в средних значе-

ниях (см. табл. 5.10). Например, для численности хирономид (выборка 2 табл. 5.9) можно составить три последовательности месяцев, отмеченных затененными клетками таблицы 5.10, внутри которых данные можно считать статистически однородными: а) с мая по июль, б) с июня по август, в) с июля по сентябрь. Таким образом, не отвергнув нулевую гипотезу об отсутствии влияния фактора сезонности для этого показателя, мы можем ставить вопрос об объединении в гомогенные группы некоторые подмножества уровней фактора.

Таблица 5.10

Результаты анализа множественных сравнений для среднемесячных значений показателей обилия зообентоса

Выборки для анализа	Месяцы					Пары месяцев с отличающимися средними
	5	6	7	8	9	
1. Численность зообентоса в пробе ($\ln N_s$)	7.77	7.43	7.31	7.17		{5-9}, {6-9}
		7.43	7.31	7.17	6.94	
2. Численность Chironomidae в пробе ($\ln N_s$)	6.90	6.68	6.39			{5-8}, {5-9}, {6-9}
		6.68	6.39	6.16		
			6.39	6.16	6.03	
3. Индекс Шеннона H	2.68				2.40	{5-6}, {5-7}, {5-8}
		2.18	2.28	2.04	2.40	
4. Биомасса зообентоса в пробе ($\ln B_s$)	-0.518	-0.0029				{6-7}, {6-8}, {6-9}
	-0.518		-0.65	-1.032	-0.895	
Число измерений в группах	58	135	213	50	76	

5.4. Непараметрические критерии для оценки однородности выборок

Формулировка задачи

В рамках постановки задачи однофакторного и двухфакторного дисперсионного анализа (см. разделы 5.2-5.3) выполнить проверку нулевой гипотезы об отсутствии различий между группами наблюдений в условиях неопределенности априорных предпосылок о нормальности распределений и однородности дисперсий.

Ранее было показано, что основные гидробиологические показатели, – численность и биомасса, – не удовлетворяют исходным предположениям о нормальности распределения и для их анализа не могут быть использованы параметрические методы и критерии. Выход был найден в функциональном преобразовании сравниваемых выборок; однако, подвергая деформированию шкалу измерений, мы неизбежно должны оговариваться, что влияние, например, сезонного фактора сказывается в отношении логарифма численности, а не самой численности, т.к., по сути дела, формально это два разных показателя.

В условиях неопределенности исходных предпосылок дисперсионного анализа, проще опираться в своих выводах на отношениях "больше - меньше" между наблюдениями, т.к. эти отношения не зависят от формы распределения. Рассмотрим применение для проверки нулевой гипотезы семейства ранговых непараметрических критериев, опирающихся на **рангах**, которые получают числа X_{ij} при упорядочении всей совокупности.

Рекомендуемая литература: [Большев, Смирнов, 1968; Гаек, Шидак, 1971; Гублер, Генкин, 1973; Кендалл, 1975; Рунион, 1982; Холлендер, Вулф, 1983].

Математический лист

Статистики Вилкоксона и Манна-Уитни для сравнения двух выборок

Пусть имеются две выборки X_1, X_2, \dots, X_m и Y_1, Y_2, \dots, Y_n из n и m числовых результатов наблюдений, функции распределения которых непрерывны и строго возрастают, причем

эти случайные величины независимы в совокупности. Из непрерывности функций распределения следует, что с вероятностью 1 все $m + n$ результатов наблюдений различны. В реальных статистических данных иногда встречаются совпадения, и тогда теоретическая схема действует как приближенная, основанная на усреднении рангов, а надежность ее выводов снижается по мере увеличения числа совпадений. Рассмотрим критерии сравнения средних тенденций двух выборок.

Статистика W двух выборочного критерия, предложенного в 1945 г. Ф. Вилкоксоном (F. Wilcoxon), определяется следующим образом. Все элементы объединенной выборки $X_1, X_2, \dots, X_m, Y_1, Y_2, \dots, Y_n$ упорядочиваются в порядке возрастания. Последовательность рангов (т.е. порядковых номеров места, которое каждое значение занимает в общем упорядоченном ряду объема $m + n$) является некоторой перестановкой чисел $1, 2, \dots, m + n$, а общее число возможных ранговых последовательностей равно $(m+n)!$ Пусть элементы первой выборки X_1, X_2, \dots, X_m занимают в общем вариационном ряду места с номерами R_1, R_2, \dots, R_m , другими словами, имеют ранги R_1, R_2, \dots, R_m . Тогда критерий (статистика) Вилкоксона

$$W = R_1 + R_2 + \dots + R_m \quad (5.57)$$

будет уменьшаться по мере того, как наблюдения из первой группы будут оказываться чаще в левой части вариационного ряда чисел $1, 2, \dots, m+n+1$, т.е. наблюдения Y -ов получают тенденцию превосходить наблюдения X -ов. Вилкоксон показал, что при справедливости нулевой гипотезы, когда значения выборок хорошо перемешаны, статистику W можно считать приближенно нормально распределенной со средним $m \cdot (m+n+1)/2$ и дисперсией $m \cdot n \cdot (m+n+1)/12$. Это позволило разработать методики проверки справедливости нулевой гипотезы на заданном уровне значимости [Большев, Смирнов, 1983].

Статистика U Манна-Уитни (H.B. Mann, D.R. Whitney), предложенная в 1947 г., определяется как число пар (X_i, Y_j) таких, что $X_i < Y_j$, среди всех $m \cdot n$ пар, в которых первый элемент – из первой выборки, а второй – из второй. Иными словами, уславливаются, что $X_i < Y_j$ означает "успех", а всякое событие $X_i > Y_j$ – "неудача". На всем множестве возможных парных сравнений $n \cdot m$ подсчитаем число "успехов" U и полученную случайную величину назовем статистикой Манна-Уитни. На "языке формул" имеем:

$$U = \sum_{\substack{i=1,2,\dots,m \\ j=1,2,\dots,n}} \varphi(x_i, y_j), \quad \text{где} \quad \varphi(x_i, y_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } x_i < y_j \\ 1/2, & \text{если } x_i = y_j \\ 0, & \text{если } x_i > y_j \end{cases} \quad (5.58)$$

Ясно, что U может принимать значения от 0 до $m \cdot n$.

Имеются доказательства [Оуэн, 1973], что статистики W и U эквивалентны в смысле связывающей их линейной функции

$$U = m \cdot n + m(m+1)/2 - W, \quad (5.59)$$

поэтому часто говорят об *общем критерии Вилкоксона–Манна–Уитни*.

Вернемся к задаче однофакторного дисперсионного анализа, оперирующей с таблицей $\mathbf{X} = \{x_{11}, x_{21}, \dots, x_{n1}, x_{12}, \dots, x_{nk}\}$, где $j = 1, 2, \dots, k$ – количество уровней группировки фактора, n_j – количество наблюдений на j -м уровне. Упорядочим величины x_{ij} (все равно как – от меньшего к большему, либо наоборот) и обозначим через r_{ij} ранг числа x_{ij} во всей совокупности. При выполнении гипотезы H_0 любые возможные расположения рангов по местам дисперсионной таблицы равновероятны. Согласно стратегии анализа возникает вопрос: нельзя ли объяснить эмпирическое расположение рангов в таблице измерений чисто случайными причинами. Это соответствует проверке статистической гипотезы о том, что все k предъявленных выборок однородны, т.е. являются выборками из одного и того же закона распределения, для чего необходимо сконструировать ранговый статистический критерий, чувствительный к определенной совокупности альтернатив.

Критерий Краскела-Уоллиса: проверка однородности при одном факторе

Для каждого уровня фактора j рассчитывается средний ранг:

$$R_j = \frac{1}{n_j} \sum_{i=1}^{n_j} r_{ij}. \quad (5.60)$$

Если между столбцами нет систематических отличий, то средние групповые ранги R_j , $j=1,2,\dots,k$, не должны значительно отличаться от среднего ранга, рассчитанного по всей совокупности $\|r_{ij}\|$, который равен $(N+1)/2$ (N – общее количество измерений). Поэтому при справедливости H_0 величины $\left(R_1 - \frac{N+1}{2}\right)^2, \dots, \left(R_k - \frac{N+1}{2}\right)^2$ в совокупности не должны быть большими.

Исходя из этого утверждения, статистика Краскела-Уоллеса рассчитывается как

$$KU = \frac{12}{N(N+1)} \sum_{j=1}^k n_j \left(R_j - \frac{N+1}{2}\right)^2, \quad (5.61)$$

где множитель перед знаком суммы присутствует в качестве нормировочного для обеспечения асимптотической сходимости распределения KU к распределению χ^2 с числом степеней свободы $(k-1)$.

Критерий Джонкхиера для альтернатив с упорядочением

В рамках однофакторного дисперсионного анализа для каждой пары натуральных чисел u и v , соответствующих сравниваемым выборкам, где $k \geq v > u \geq 1$, составим статистики Манна-Уитни:

$$U_{u,v} = \sum_{\substack{i=1,2,\dots,m_u \\ j=1,2,\dots,n_v}} \varphi(x_{i_u}, y_{j_v}). \quad (5.62)$$

Определим статистику Джонкхиера (иное название – критерий Джонкхиера-Терпстра) как усложненный вариант критерия Манна-Уитни для случаев нескольких выборок:

$$I = \sum_{1 \leq u < v \leq k} U_{u,v}. \quad (5.63)$$

Нетрудно заметить, что значение статистики зависит от порядка расположения градаций от 1 до k , поэтому I применяется в тех случаях, когда заранее предполагается, что имеющиеся группы результатов упорядочены по возрастанию влияния фактора. Например, первая группа наблюдений соответствует I классу качества воды в водоеме, 5 группа – V классу, а промежуточные номера соответствуют последовательности классов качества. Свидетельством в пользу упорядоченности эффектов против гипотезы однородности служат большие значения статистики, полученные в эксперименте. Критерий Джонкхиера в этих условиях оказывается более чувствительным в оценке влияния фактора, чем критерий Краскела-Уоллеса.

При небольших объемах выборок распределение статистики I табулировано, а для больших выборок действует нормальная аппроксимация.

Критерий Фридмана : проверка однородности при двух факторах

Будем основываться на структурной таблице двухфакторного статистического комплекса (см. раздел 5.3). Обратим внимание на то, что критерий Фридмана можно применять только к данным, состоящим из равного числа наблюдений для каждой клетки из $k \cdot n$. Подобные планы эксперимента называются *сбалансированными*. Критерий основывается на тех же концепциях, что и статистика Краскела-Уоллеса, однако, в отличие от однофакторного анализа, ранжирование происходит не по всей совокупности величин x_{ij} , а по блочно, т.е. рассматривается каждая отдельная i -я строка и пересчет в ранги происходит для $j = 1, 2, \dots, k$. Тем самым устраняется влияние "мешающего" фактора B , значение которого для всех строк постоянно.

При гипотезе H_0 : $a_1 = a_2 = \dots = a_k = 0$ об отсутствии влияния фактора A каждая строка рангов будет представлять случайную перестановку чисел от 1 до k , причем все $k!$ перестановок

равновероятны. Введем величину $R_j = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_{ij}$, являющуюся средним значением рангов по столбцу j , и будем сравнивать ее с общим средним рангом всех элементов таблицы, равном $R_{cp} = (k+1)/2$.

Статистика Фридмана для проверки гипотезы H_0 имеет следующий вид:

$$S = \frac{12n}{k(k+1)} \sum_{j=1}^k \left(R_j - \frac{k+1}{2} \right)^2 . \quad (5.64)$$

При справедливости нулевой гипотезы (в силу равновероятности построчных перестановок рангов) значения $(R_j - R_{cp})^2$ достаточно малы для всех j и, следовательно, значение S сравнительно невелико. При нарушении H_0 баланс суммы рангов по столбцам нарушается и статистика Фридмана возрастает. Для небольших величин n и k критические значения $S(\alpha, k, n)$ могут быть найдены по таблицам. При $n \rightarrow \infty$ статистика Фридмана асимптотически распределена как χ^2 с числом степеней свободы $(k - 1)$.

Критерий Пейджа для альтернатив с упорядочением

Сформируем таблицу рангов так, как это было сделано при обосновании статистики Фридмана. Критерий Пейджа предназначен для проверки гипотезы H_0 об отсутствии эффекта влияния фактора A ($H_0: a_1 = a_2 = \dots = a_k = 0$) против альтернативы "влияние фактора A увеличивается (вариант: уменьшается) в определенном направлении изменения градаций", т.е. гипотезы об упорядочении $H_1: a_1 \leq a_2 \leq \dots \leq a_k$, где хотя бы одно из неравенств строгое.

Введем величину $Rs_j = \sum_{i=1}^n r_{ij}$, являющейся суммой рангов по столбцу j . Статистика

Пейджа по определению есть:

$$L = \sum_{j=1}^k jRs_j = Rs_1 + 2Rs_2 + \dots + kRs_k . \quad (5.65)$$

Методы проверки нулевой гипотезы с использованием L -критерия Пейджа изложены в литературе [Холлендер, Вульф, 1983; Ликеш, Ляга, 1985] и иллюстрируются ниже на примерах.

Результаты расчетов

В предыдущем разделе был проведен анализ влияния сезонного фактора (т.е. номера месяца, в котором была отобрана проба) на общую численность зообентоса и личинок Chironomidae, в частности. Однозначных выводов, в конечном итоге, сделано не было, в первую очередь потому, что сезонная динамика различных видов водных организмов далеко не однозначна. Рассмотрим результаты проверки нулевой гипотезы об однородности выборок численности отдельных видов хирономид, взятых в различные месяцы отбора проб, с использованием методов непараметрической статистики. В таблице 5.11, кроме значений критерия Краскела-Уоллиса, приведены параллельно величины параметрических F -критериев Фишера, рассчитанных по натуральным и предварительно прологарифмированным выборкам.

Таблица 5.11

Результаты параметрического и непараметрического однофакторного дисперсионного анализа влияния фактора сезонности на численность отдельных видов зообентоса

Наименование видов	Объем выборки	По численности		По логарифму численности		По методу Краскела-Уоллиса	
		F -критерий	p -значение	F -критерий	p -значение	KU -критерий	p -значение
<i>Chironomus plumosus</i>	190	2.62	0.0367	0.39	0.815	2.064	0.723
<i>Cladotanytarsus mancus</i>	138	1.93	0.109	0.85	0.493	3.385	0.495
<i>P.nubeculosum</i>	183	0.90	0.463	0.73	0.574	3.279	0.512
<i>Dicrotendipes nervosus</i>	75	0.06	0.99	3.43	0.0127	13.16	0.010
<i>Cryptochironomus gr. defectus</i>	139	4.65	0.0015	2.07	0.088	10.718	0.029
<i>Procladius ferrugineus</i>	177	0.22	0.926	0.62	0.651	3.302	0.508
<i>Prodiamesa olivacea</i>	59	0.30	0.828	0.35	0.788	1.229	0.746

По результатам расчетов можно сделать следующие выводы:

- обращает на себя внимание факт близости оценок уровней значимости P , рассчитанных по F -критерию для прологарифмированных выборок и по статистике Краскела-Уоллиса, где несовпадение, имеющее принципиальное значение, зафиксировано только для *Cryptochironomus* gr. *defectus*;
- в очередной раз приходится констатировать, что использование дисперсионного анализа для выборок с сильной асимметрией распределения, какими являются ряды натуральных значений численности зообентоса, приводит к совершенно непредсказуемым результатам;
- из семи проанализированных видов зообентоса непротиворечивые выводы о статистически существенном влиянии сезонного фактора на численность зафиксированы только для *Dicotendipes nervosus* (в отношении *Cryptochironomus* gr. *defectus* параметрические и непараметрические оценки разошлись).

Сезонная динамика значений среднего ранга численности некоторых видов представлена на рис. 5.11. Можно отметить, например, не обычные для жизненных циклов *P. nubeculosum* и *Cladotanytarsus mancus* сглаженные подъёмы численности их личинок.

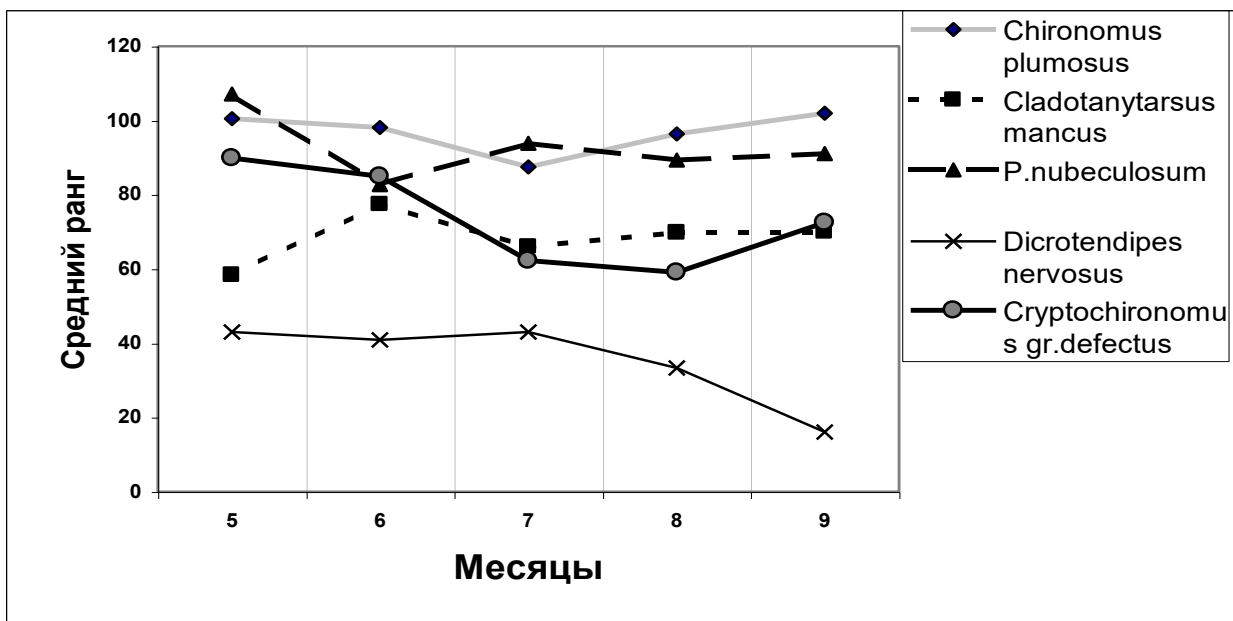


Рис. 5.11. Изменение среднемесячного ранга численности отдельных видов хирономид

Для окончательного уточнения сезонных изменений обилия *Cryptochironomus* gr. *defectus* проверим в качестве альтернативы к нулевой гипотезе предположение о монотонном снижении численности вида с мая по сентябрь с использованием статистики Джонкхиера. Для ее вычисления найдем значения критерия Манна-Уитни U для всех комбинаций индексов u и v , которые меняются от 5 до 9, причем $u < v$:

$$\begin{aligned}
 U_{56} &= 149; & U_{67} &= 621; & U_{78} &= 610.5; & U_{89} &= 145 \\
 U_{57} &= 171; & U_{68} &= 198.5; & U_{79} &= 443; \\
 U_{58} &= 55.5; & U_{69} &= 228; \\
 U_{59} &= 71
 \end{aligned}$$

$$\text{Откуда } I = \sum_{1 \leq u < v \leq k} U_{u,v} = 2692.5 .$$

Для нахождения минимального уровня значимости критерия Джонкхиера воспользуемся нормальной аппроксимацией: $I \sim N(M_I, D_I)$, где

$$M_I = \left(N^2 - \sum_{j=1}^k n_j^2 \right) / 4 = 3460.5; \quad D_I = \left(N^2(2N+3) - \sum_{j=1}^k n_j^2(2n_j+3) \right) / 72 = 67645.$$

Величина $I^* = (I - M_I) / \sqrt{D_I}$ асимптотически имеет стандартное нормальное распределение и по таблицам для $I^* = -2.95$ имеем $p = 0.00051$, т.е. принимается гипотеза о монотонном снижении численности *Cryptochironomus* gr. *defectus* в течении сезона. Заметим, что критерий Джонкхиера оказался более чувствительным к выявлению тенденции, чем статистика Краскела-Уоллиса.

Рассмотрим теперь, как влияют на разнообразие видов зообентоса, оцененное по индексу Шеннона H , два фактора – место расположения точки отбора пробы и месяц, во время которого произведено наблюдение. Поскольку метод Фридмана использует сбалансированные планы, сформируем таблицу средних значений индексов Шеннона для р. Чапаевка, разбив всё течение реки от истоков до устья на 6 участков (см. табл. 5.12). Поскольку на участках 1-4 в августе измерения не проводились, в соответствующие пропущенные клетки таблицы были подставлены средние за август значения индекса на устьевых участках ($x_{ij} = 1.605$).

Таблица 5.12

Средние значения индекса Шеннона по численности зообентоса для различных участков р. Чапаевка и месяцев отбора проб наблюдений

Участки / месяцы	Май	Июнь	Июль	Август	Сентябрь	В среднем
1. Исток (ст. 1-2)	2.637	2.595	2.007	1.605	1.751	2.247
2. Верховья (ст. 3-4)	2.798	1.807	2.683	1.605	2.370	2.414
3. Средний участок (ст. 5-9)	2.756	2.589	2.335	1.605	1.889	2.392
4. Район Колывани (ст. 10-12)	2.692	2.484	2.413	1.605	2.346	2.484
5. Низовья (ст. 14-22)	0.501	1.219	1.414	0.875	1.373	1.077
6. Устье (ст. 23)	1.827	1.436	2.292	2.336	1.220	1.822
В среднем	2.202	2.022	2.191	1.605	1.825	2.073

Выполним предварительно стандартный двухфакторный дисперсионный анализ (см. таб. 5.13). Очевидно значимое влияние фактора $\Phi 1$ расстояния от устья и отсутствие влияние фактора сезонности $\Phi 2$.

Сформируем в соответствии с методом Фридмана две таблицы рангов и рассчитаем для каждого столбца и каждой строки таблицы 5.11 суммы рангов и средние суммы рангов, поместив результаты в табл. 5.14.

Таблица 5.13

Дисперсионный анализ значений индекса Шеннона в зависимости от участков р. Чапаевка и месяцев отбора проб наблюдений

Источник вариации	Сумма квадратов	Степеней свободы	Средние квадраты	F-отношение	p-значение
$\Phi 1$ – участок	5.73	5	1.146	6.04	0.0017
$\Phi 2$ – месяц	1.69	4	0.4224	2.226	0.102
Остаточная	3.795	20	0.1897		
Всего	11.21	29	0.3867		

Таблица 5.14

Ранжирование значений индекса Шеннона по участкам р. Чапаевка и месяцам взятия проб

По строкам таблицы 5.11			По столбцам таблицы 5.11		
Участки	Средний ранг	Сумма рангов	Месяцы	Средний ранг	Сумма рангов
1. Исток (ст. 1-2)	3.5	17.5	Май	4.00	24
2. Верховья (ст.3-4)	4.9	24.5	Июнь	3.17	19
3. Средний участок (ст. 5-9)	4.3	21.5	Июль	3.67	22
4. Район Колывани (ст. 10-12)	4.3	21.5	Август	1.83	11
5. Низовья (ст.14-22)	1.2	6	Сентябрь	2.33	14
6. Устье (ст. 23)	2.8	14			

Рассчитав значение критерия Фридмана для левой части таблицы 5.14, мы получим $S = 13.67$. Этому значению соответствует статистика χ^2 с 5 степенями свободы и вероятностью $p = 0.0178$, т.е. с таким уровнем значимости нулевая гипотеза отвергается в пользу альтернативы и влияние места отбора пробы на индекс Шеннона можно считать установленным.

Аналогично для правой части таблицы имеем $S = 7.86$, $p = 0.096$, т.е. в представленных данных фактор сезонности не оказывает влияния на биоразнообразие. Нельзя не отметить практическое совпадение уровней значимости гипотез, оцененных по критериям Фишера и Фридмана.

Сделаем теперь предположение о том, что биоразнообразие зообентоса монотонно убывает от истоков к устью. Проверим эту гипотезу по критерию Пейджа:

$$L = \sum_{j=1}^k jRs_j = 14 + 2 \cdot 6 + 3 \cdot 21.5 + 4 \cdot 21.5 + 5 \cdot 24.5 + 6 \cdot 17.5 = 404.$$

Для нахождения приближенного значения минимального уровня значимости критерия Пейджа воспользуемся (аналогично расчетам уровня значимости для критерия Джонкхиера) нормальной аппроксимацией распределения следующей статистики:

$$L^* = \frac{L - nk(k+1)/4}{\left[n(k^3 - k^2) / 144(k-1) \right]^{0.5}} = 14.4,$$

что очень близко к нулю по таблицам стандартного нормального распределения и нулевая гипотеза уверенно отвергается, т.е. наше предположение о монотонном снижении индекса Шеннона не противоречит данным.

Впрочем, для незначимого фактора **Ф2** сезонной изменчивости критерий Пейджа также достаточно велик и равен $L = 242$, чему соответствует $p = 0.011$. Это иллюстрирует тезис о том, что в случае упорядоченных альтернатив для критерия Пейджа характерна не всегда обоснованная гипердиагностика в пользу оценки влияния фактора.

5.5. Задача о законе влияния фактора: линейный регрессионный анализ

Мем № 29: «Теоретическая кривая никогда не проходит в точности через все точки, полученные в результате измерений...» В. Фукс [1975].

Формулировка задачи

Пусть имеется две группы числовых переменных $X \equiv (x_1, \dots, x_p)$ и $Y \equiv (y_1, \dots, y_m)$, причем предполагается, что X – независимая переменная (фактор) влияет на значения Y – зависимой переменной (отклик). В общем случае предполагается, что обе переменных измерены в количественных шкалах (интервальной, абсолютной или шкале отношений). Также постулируется независимость самих измерений, т.е. одни наблюдения не оказывают систематического влияния на другие.

Предположим, что из совокупности наблюдений X - Y может быть укомплектована репрезентативная обучающая выборка (X_i, Y_i) , $i = 1, \dots, n$ сопряженных измерений, выполненных в идентичных пространственно-временных условиях. Необходимо по имеющейся обучающей выборке построить функцию $f(X)$, которая приближенно описывала бы изменение Y при изменении X : $Y \approx f(X)$.

Этой постановке соответствует широкий круг задач, связанных с построением (восстановлением) всевозможных зависимостей по имеющимся эмпирическим данным, т.е. открытие больших и малых законов, начиная от закона всемирного тяготения И. Ньютона и кончая законом Б.Л. Гутельмахера о линейной зависимости логарифма скорости экскреции биогенных элементов от массы тела зоопланктеров.

Статистика как метод исследования в принципе не интересуется причинно-следственной связью явлений. Однако рассмотренные в настоящем разделе методы аппроксимации близки идеям математического моделирования в смысле поиска наилучшей функциональной зависимости. Более того, уравнение кривой, полученной в результате обработки данных наблюдений, может подтолкнуть исследователя к пониманию внутренних взаимосвязей изучаемого явления.

Рекомендуемая литература: [Хальд, 1956; Андерсен, 1963; Себер, 1980; Дрейпер, Смит, 1986; Дюк, 1997; С.А. Прохоров, 2002; Прохоров с соавт. 2003].

Математический лист

Предполагается, что множество допустимых функций, из которого подбирается $f(X)$, является параметрическим: $Y \approx f(X, \theta)$, где θ – неизвестный параметр (вообще говоря, многомерный). Если имеет место равенство $f(X, \theta) = A(\theta)X$, где $A(\theta)$ – некоторая матрица коэффициентов, то функция $f(X, \theta)$ линейно зависит от параметров θ и мы имеем дело с задачей *линейного регрессионного анализа*.

При построении аппроксимирующей функции будем считать, что

$$Y = f(X, \theta) + \varepsilon, \quad (5.66)$$

где первое слагаемое – закономерное изменение Y от X , а второе ε – случайная составляющая с нулевым средним. Функция $f(X, \theta)$ является условным математическим ожиданием Y при условии известного X и называется *регрессией Y по X* . Слагаемое ε отражает как внутреннюю присутствующую отклику стохастическую изменчивость (ошибку измерения), так и влияние факторов, не учтенных в $f(X, \theta)$.

Классический регрессионный анализ предполагает, что статистическая природа случайной составляющей является неизменной для всех наблюдений, т.е. $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$ статистически независимы в опытах и одинаково распределены. Неоднородность дисперсий ошибок (*гетероскедастичность*, heteroscedasticity) в целом характерна для гидробиологических данных, поскольку обработке подвергаются показатели, полученные в разные моменты времени, по различным регионам, в различных экспедиционных условиях. Последствия гетероскедастичности могут привести к тому, что вычисленные значения t - и F -отношений уже нельзя рассматривать как наблюдаемые значения случайных величин, имеющих t - и F -распределения, что может приводить к ошибочным статистическим выводам в отношении гипотез о значениях коэффициентов линейной модели.

Простая линейная регрессия

Пусть X и Y одномерные величины, обозначенные как x и y , а функция $f(x, \theta)$ имеет вид $f(x, \theta) = A + bx$, где $\theta = (A, b)$. Относительно имеющихся наблюдений (x_i, y_i) , $i = 1, \dots, n$, полагаем, что

$$y_i = A + bx_i + \varepsilon_i, \quad (5.67)$$

где $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$ – независимые (ненаблюдаемые) одинаково распределенные случайные величины.

Существует ряд методов подбирать "лучшую" прямую линию, из которых наиболее широко используется *метод наименьших квадратов* (МНК), который заключается в следующем. Построим оценку параметра $\theta = (A, b)$ так, чтобы величины

$$e_i = y_i - f(x_i, \theta) = y_i - A - bx_i, \quad (5.68)$$

называемые *остатками*, были как можно меньше, а именно, чтобы сумма их квадратов была минимальной:

$$\sum_{i=1}^n e_i^2 = \sum_{i=1}^n (y_i - A - bx_i)^2 \rightarrow \min \text{ по } (A, b). \quad (5.69)$$

Решение (\hat{a}, \hat{b}) , для которого сумма квадратов невязок оказывается наименьшей, может быть найдено с использованием выборочных средних \bar{x} и \bar{y} по следующим формулам:

$$\hat{b} = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})(x_i - \bar{x})}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} = \frac{n \sum_{i=1}^n y_i x_i - n \cdot \bar{y} \cdot \bar{x}}{\sum_{i=1}^n x_i^2 - n \cdot \bar{x}^2}, \text{ где } \bar{y} = \sum_{i=1}^n y_i / n, \quad \bar{x} = \sum_{i=1}^n x_i / n. \quad (5.70)$$

$$\hat{a} = \bar{y} - \hat{b} \cdot \bar{x}$$

Рассчитать уравнение регрессии не представляет никакой сложности, особенно при наличии компьютера с установленным табличным процессором Microsoft Excel, или любого другого пакета статистических программ. Основные методологические трудности возникают в ходе проверки выполнения априорных предпосылок регрессионного анализа и последующей оценки адекватности полученного уравнения.

Как и в случае дисперсионного анализа, оценка уравнений регрессии предполагает два основных подхода: непараметрический и гауссовый, которые различаются предположениями о характере распределения остатков $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$. Гауссова модель простой линейной регрессии предполагает, что случайная величина ε распределена по нормальному закону $N(0, \sigma^2)$ с некоторой неизвестной дисперсией σ^2 . Сам по себе метод наименьших квадратов в этих предположениях не нуждается, однако в гауссовой модели, во-первых, МНК обладает дополнительными свойствами оптимальности и, во-вторых, оценки неизвестных параметров приобретают ясные статистические свойства.

Разложение полной суммы квадратов и коэффициент детерминации

Нетрудно, как и для однофакторного дисперсионного анализа, рассчитать полную сумму квадратов вариации отклика $Q = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$, и две ее составляющие: сумму квадратов объяс-

ненную моделью $Q_x = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2$, и остаточную сумму квадратов $Q_e = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2$. Все эти

три суммы квадратов связаны соотношением

$$Q = Q_x + Q_e, \quad (5.71)$$

которое представляет собой разложение полной суммы квадратов.

Если вариация отклика, объясненная влиянием переменной X (точнее, уравнением регрессии) $Q_x \rightarrow 0$, то полная сумма квадратов соответствует значению Q_e . В этой ситуации привлечение информации о значениях переменной X не дает ничего нового для объяснения закономерности поведения Y в наблюдениях, а значит $\hat{b} = 0$ и "наилучшая" прямая имеет вид $y = \bar{y}$, отрицающий наличие линейной зависимости Y от X .

Аналогично, тенденция линейной связи между X и Y выражена в максимальной степени, если $Q_e = 0$: при этом, все точки (x_i, y_i) , $i = 1, 2, \dots, n$, располагаются на одной прямой.

Рассмотрим традиционную для дисперсионного анализа F -статистику

$$F = \frac{Q_x / (k-1)}{Q_e / (n-k)} = \frac{(Q - Q_e) / (k-1)}{Q_e / (n-k)}, \quad (5.72)$$

где $k = 2$ – число степеней свободы простой линейной регрессии. Если остатки $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$ распределены нормально $N(0, \sigma^2)$, то F -статистика, рассматриваемая как случайная величина, при справедливости гипотезы H_0 (т. е. когда действительно $\bar{b} = 0$) имеет стандартное распределение Фишера с $(k - 1)$ и $(n - k)$ степенями свободы. В соответствии с этим, нулевая гипотеза отвергается при "слишком больших" значениях F , превышающих пороговое значение $F_{1-\alpha}(k-1, n-k)$. При этом, вероятность ошибочного отвержения гипотезы H_0 равна α . Большинство пакетов прикладных программ при анализе статистической значимости уравнения регрессии, наряду со значением F -статистики, приводят соответствующее ему P -значение (P -value), т. е. вероятность $P\{F(p-1, n-p) > F\}$.

Для оценки тесноты ("меры выраженности") линейной связи принято использовать долю объясненной суммы квадратов, не зависящую от шкал, в которых измерены значения переменных x и y и называемую часто *коэффициентом детерминации*:

$$R^2 = \frac{Q_x}{Q} = 1 - \frac{Q_e}{Q}. \quad (5.73)$$

Этот коэффициент изменяется в пределах от 0 (при $\beta = 0$, т. е. $Q = Q_e$) до 1 (при $Q_e = 0$). Чем ближе к 1 значение R^2 , тем лучше качество подгонки. При $R^2 \rightarrow 0$ можно сделать два вывода: либо фактор не оказывает никакого влияния на отклик, либо функция регрессии имеет существенный нелинейный характер.

Коэффициент детерминации тесно связан с другой мерой связи между переменными – выборочным *коэффициентом линейной корреляции* Пирсона. Пусть определены выборочные дисперсии, характеризующие степень разброса значений X и Y :

$$S_x^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2, \quad S_y^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2, \quad (5.74)$$

а также *выборочная ковариация*, характеризующая совместное распределение этих двух выборок в N -мерном евклидовом пространстве:

$$C(x, y) = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}) \quad (5.75)$$

Коэффициент линейной корреляции Пирсона между выборками Y и X определяется как

$$r_{xy} = \frac{C(x, y)}{\sqrt{S_x^2} \sqrt{S_y^2}}. \quad (5.76)$$

Нетрудно заметить его симметричность, т.е. $r_{xy} = r_{yx}$. Констатируем также без доказательств два известных факта:

- коэффициент детерминации и коэффициент корреляции между переменными x и y при гауссовских предположениях связаны простой формулой $r_{yx}^2 = r_{xy}^2 = R^2$;
- коэффициент корреляции r_{xy} изменяется в диапазоне от -1 до 1 , причем при $r_{xy} = 0$ линейная связь отсутствует, а при $r_{xy} < 0$ мы имеем дело с обратной линейной связью ($b < 0$).

Следует отметить, что традиционные мнения о возможности оценить тесноту линейной связи только по коэффициенту корреляции Пирсона r (либо его квадратам R^2 и η^2) не являются статистически корректными. Например, Я.Я. Вайну [1977] приводит следующую классификацию линейности по r : менее 0.2 – слабая, от 0.2 до 0.4 – слабее средней тесноты, от 0.4 до 0.6 – средняя и т.д. Нетрудно заметить, что коэффициенты корреляции, основанные на сумме квадратов, не учитывают числа степеней свободы, поэтому их сравнение правомочно только для выборок примерно одинаковой размерности. При увеличении числа обработанных измерений статистическая надежность уравнений регрессии по критерию Фишера начинает возрастать, когда как величина коэффициента корреляции чаще всего монотонно снижается.

Для удобства интерпретации параметра угла наклона b иногда пользуются *коэффициентом эластичности*

$$\Theta = \bar{b} \frac{\bar{x}}{\bar{y}} = \frac{\Delta y}{\Delta x} \cdot \frac{\bar{x}}{\bar{y}} = \frac{\Delta y}{\bar{y}} / \frac{\Delta x}{\bar{x}}, \quad (5.77)$$

который показывает среднее изменение (в долях или %) зависимой переменной y при изменении фактора x : $\frac{\Delta y}{\bar{y}} = \Theta \cdot \frac{\Delta x}{\bar{x}}$.

Доверительные интервалы для коэффициентов и проверка гипотез

Если принять дополнительные предположения о гауссовом характере распределения остатков $\epsilon_1, \dots, \epsilon_n$, то:

- оценки \bar{a} и \bar{b} нормально распределены и независимы от дисперсии остатков σ^2 ;
- несмещенной оценкой дисперсии остатков является величина $s^2 = Q_e / (n - k)$, а среднеквадратичное отклонение остаточной ошибки модели регрессии может быть вычислено по формуле

$$s = \sqrt{\frac{1}{n - k} \sum_{i=1}^n (y_i - A - bx_i)^2}, \quad (5.78)$$

где $k = 2$ – число степеней свободы регрессии;

- отношения $\sqrt{n} \frac{\bar{a} - a}{s}$ и $\frac{\bar{b} - b}{s_b}$, где $s_b = s / \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}$, имеют распределение Стьюдента с $(n - 2)$ степенями свободы;
- доверительные интервалы для a и b определяются как

$$|\bar{a} - a| \leq t_p \frac{s}{\sqrt{n}} \quad \text{и} \quad |\bar{b} - b| \leq t_p s_b, \quad (5.79)$$

где t_p – квантиль уровня $(1 + P) / 2$ распределения Стьюдента с $n - 2$ степенями свободы, P – доверительная вероятность.

Статистическая значимость уравнения линейной регрессии проверяется отклонением нулевой гипотезы о равенстве нулю коэффициента b , отражающего угол наклона линии тренда. Гипотеза $H_0: b = 0$ соответствует предположению, что изменчивость y обусловлена только случайными составляющими ϵ_i . Существует два эквивалентных способа проверки нулевой гипотезы:

- если 0 не входит в доверительный интервал для b , т.е. $|\bar{b}| / s_b > t_p$, то гипотезу H следует отклонить; уровень значимости при этом $\alpha = 1 - P$;
- вычисляется статистика, которая в случае, если H_0 верна, распределена по закону Фишера F с числом степеней свободы 1 и $n - 2$:

$$F = \frac{\bar{b}^2 / D\bar{b}}{Q_e^2 / (\sigma^2 (n - 2))} = \frac{\bar{b}^2}{s_b^2}; \quad (5.80)$$

если $F > F_{1-\alpha}$, где $F_{1-\alpha}$ – квантиль уровня $(1 - \alpha)$ распределения $F(1, n - 2)$, то гипотеза H отклоняется с уровнем значимости α .

Тестирование правильности спецификации регрессионной модели

Необходимость изменить функциональную форму регрессии возникает, если неверна одна из следующих гипотез, выполнение которых требуется для того, чтобы метод наименьших квадратов в применении к регрессионной модели (5.67) давал хорошие результаты.

1. Ошибки имеют нулевое математическое ожидание, или, что то же самое, математическое ожидание зависимой переменной является линейной комбинацией регрессоров:

$$\mathbf{E}(\epsilon_i) = 0, \quad \mathbf{E}(Y_i) = \mathbf{b} X_i.$$

2. Ошибки гомоскедастичны, т. е. имеют одинаковую дисперсию для всех наблюдений:

$$\mathbf{V}(\epsilon_i^2) = \mathbf{E}(\epsilon_i^2) = \sigma^2.$$

Если перечисленные предположения неверны, то в ошибке осталась детерминированная (неслучайная) составляющая, которая может быть функцией входящих в модель регрессоров. Это означает, что имеет место неверная спецификация функциональной формы. Заметить ошибку спецификации можно на глаз с помощью графиков остатков. Формальный тест на «нормальность остатков» можно провести с помощью вспомогательной регрессии квадратов остатков по «подозрительным» переменным, значимость которой можно оценить по обычной методике, описанной выше. Похожим образом обнаруживается и гетероскедастичность (отсутствие гомоскедастичности), которая проявляется в том, что разброс остатков меняется в зависимости от значения переменной X . Тест на гетероскедастичность может быть выполнен с помощью LM-статистики, которая равна половине объясненной суммы квадратов из регрессии по константе и X и распределена асимптотически как χ^2 [Цыплаков, URL].

При проверке правильности спецификации нулевая гипотеза всегда состоит в том, что модель специфицирована корректно, а альтернативная гипотеза - в том, что имеется ошибка соответствующей спецификации. Если статистика незначима (например, уровень значимости больше 5%), то следует принять гипотезу о правильности спецификации.

Обычно умеренные ошибки в спецификации не приводят к серьезным последствиям, таким как несостоятельность оценок. При отклонениях остатков от нормальности МНК может давать не очень точные оценки, а вычисляемые t - и F -статистики не распределены в конечных выборках точно как t и F (хотя эти статистики остаются состоятельными, то есть их использование оправдано асимптотической теорией).

Учет нелинейности связи факторов в моделях линейной регрессии

В разделе 2.6 мы подробно останавливались на необходимости учета объективной нелинейности реального мира и проблемах нахождения модели оптимальной сложности.

Лучшим инструментом оценки качества приближения экспериментальных точек к расчетной кривой является человеческий глаз. Для проверки гипотезы о линейном характере связи Y и X более педантичные исследователи, например, делят область рассеяния точек наблюдения на четыре равных квадранта и подсчитывают количество экспериментальных точек, попавших в каждый квадрант: для линейной зависимости характерен четкий дисбаланс между частотами по обеим диагоналям. Более строгие методы проверки гипотезы о линейности связаны с анализом выборочных корреляционных отношений и представлены в главе 6.

Перечислим в таблице 5.15 основные виды функциональных форм регрессионной модели с примерами нелинейных зависимостей. Более сложные нелинейные модели связаны с использованием сплайнов, алгоритмов МГУА и др. [Розенберг с соавт., 1994].

Слово «линейный» в названии "линейный регрессионный анализ" указывает на линейность модели относительно параметров a_j , но не факторов x_j . Это означает, что мы можем сделать с выборкой X любые функциональные преобразования и включить преобразованные факторы в линейное уравнение.

Таблица 5.15

Функциональные формы регрессионных моделей с примерами нелинейных зависимостей

Функциональная форма	Примеры
Полиномиальная	$Y = a_0 + a_1 X + a_2 X^2 + a_3 X^3 + \dots + a_k X^k$
Гиперболическая	$Y = a_0 / (a_1 + X)$
Семейство обращенных полиномиальных функций	$Y = a / (a_0 + a_1 X + a_2 X^2 + \dots + a_k X^k);$ $Y = X / (a_0 + a_1 X + a_2 X^2 + \dots + a_k X^k);$

	$Y = (b_0 + b_1 X + b_2 X^2 + \dots + b_k X^k) / (a_0 + a_1 X + a_2 X^2 + \dots + a_k X^k)$;
Логлинейная	$\ln Y = a_0 + a_1 \ln X$
Обобщенная логарифмическая	$Y = a_0 + a_1 \ln X + a_2 X$
Степенная	$Y = a_0 + a_1 X^c$, где c – любое вещественное число
Экспоненциальная	$Y = a e^{bX}$
Функция Гомперца	$\ln Y = b - a e^{-X}$
Логистическая	$Y = c / (1 + e^{(a+bX)})$
Экспоненциально-степенная	$Y = a e^{bX} X^c$
Обращенная экспоненциальная	$Y = 1 / (a + b e^{-X})$
Показательная	$Y = a * b^X$
Тригонометрическая	$Y = \beta_0 + \beta_1 \sin \omega x + \beta_2 \cos \omega x$

Линеаризации, например, могут легко подвергаться полиномы

$$y_i = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + a_k x_i^k + \varepsilon_i, \quad (5.81)$$

поскольку для имеющейся обучающей выборки (x_i, y_i) , $i = 1, \dots, n$, можно записать матричную форму:

$$Y = XA + \varepsilon, \quad \text{где} \quad X = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^k \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^k \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \dots & x_n^k \end{bmatrix}.$$

В этом и в ряде других случаев расчет коэффициентов a_j можно свести к стандартной задаче линейной регрессии, и потому все формулы МНК оказываются справедливыми и для нелинейной формы аппроксимирующего уравнения.

Выбор между альтернативными функциональными формами обычно осуществляют на основе некоторого критерия, оценивающего точность подбора, в качестве которого обычно используется коэффициент детерминации (R^2). Чтобы учитывать при селекции простоту модели, делают поправку на количество регрессоров k . Это дает коэффициент детерминации, скорректированный на количество степеней свободы:

$$R_0^2 = 1 - \frac{(1 - R^2)n}{n - k}. \quad (5.82)$$

Оценки метода наименьших квадратов являются одновременно и оценками метода максимального правдоподобия [Дрейпер, Смит, 1986]. Поэтому предлагается сравнивать модели на основе максимума логарифмической функции максимального правдоподобия (\hat{L}). Если учесть при этом количество наблюдений (n) и ввести "штраф" за большое количество регрессоров (k), то получится *информационный критерий Акаике* (Akaike information criterion):

$$AIC = -2/n (\hat{L} - k). \quad (5.83)$$

Чем меньше AIC, тем лучшей считается модель.

В некоторых случаях, приведенных в таблице 5.15, нельзя свести нелинейную функцию $f(X)$ к линейной форме. В такой ситуации оценки наименьших квадратов параметров a и b приходится получать с помощью итерационных вычислительных процедур, осуществляющих последовательное приближение к минимуму суммы квадратов

$$Q(a, b) = \sum_{i=1}^n (Y_i - f(a, b, x_i))^2. \quad (5.84)$$

Выполнить это приближение можно стандартными методами нелинейной оптимизации – методами Ньютона-Рафсона, Нелдера-Мидда и проч. [Банди, 1988; Гайдышев, 2001], включаемыми в большинство пакетов статистических программ.

В ряде случаев линеаризация оказывается возможной, но методически неверным является "обратное" преобразование линеаризованных уравнений. Например, в разделе 4.8 отмечалось, что для расчета большинства компонентов материального баланса отдельной особи канонизировано употребление параболических (степенных) зависимостей:

$$Y = a X^k, \quad (5.85)$$

где X и Y – произвольные биоэнергетические или аллометрические показатели, a и k – коэффициенты уравнения регрессии. Подавляющее большинство ученых-экологов (например, [Тодераш, 1984; Балушкина, 1987; Голубков, 2000]) в своих работах рекомендуют применять не вполне корректную схему расчета коэффициентов a и k путем нахождения параметров линейной регрессии вида

$$\lg Y = \lg a + k \lg X. \quad (5.86)$$

Определенная методологическая неточность присутствует и у А.А. Умнова [1976], когда он при стандартных допущениях регрессионного анализа предлагает найти в выражении $Y = aX^k$ значения коэффициентов a и k , обеспечивающие минимальность квадратичной формы

$$Q_e(a, k) = \sum_{i=1}^n (\lg Y_i - \lg a - k \lg X_i) \Rightarrow \min. \quad (5.87)$$

Нетрудно видеть из (5.84), что аксиоматика метода наименьших квадратов требует нахождения экстремума совсем иного функционала:

$$Q_e'(a, k) = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - aX_i^k)^2 \Rightarrow \min. \quad (5.88)$$

Согласно известным положениям регрессионного анализа [Дрейпер, Смит, 1986] нелинейная функция может быть приведена к линейной форме (т.е. линеаризована) только в том случае, если ошибка обоих уравнений регрессии остается *аддитивной*, то есть зависимая переменная является суммой своего математического ожидания и ошибки. Пусть, например, исследователь из своих теоретических соображений желает получить степенную зависимость модели наблюдений $Y = a \cdot X^k$. Выполнив логарифмирование данных и применив МНК, он получает линейную в логарифмах зависимость $\lg Y_i = \lg a + k \lg X_i + \varepsilon_i$. Однако, при обратном преобразовании логлинейного уравнения (5.86) в уравнение (5.85), будет иметь место *мультипликативное* вхождение ошибок ε_i в нелинейное уравнение отклика: $Y_i = a \cdot X_i^k \cdot \varepsilon_i$. Последняя форма записи далеко не идентична стандартной регрессионной модели с аддитивными ошибками $Y_i = a \cdot X_i^k + \varepsilon_i$. Иными словами, выражения (5.85) и (5.86) представляют собой два *принципиально разных* уравнения регрессии, поэтому использование для модели $Y = a \cdot X^k$ МНК-оценок (a, k) из линеаризованного уравнения $\lg Y_i = \lg a + k \lg X_i + \varepsilon_i$, неизбежно приведет к заведомо искаженным результатам.

Из такой ситуации существует два возможных выхода:

- оценки наименьших квадратов параметров a и k для (5.85) получать с использованием итерационных процедур нелинейной оптимизации;
- просто-напросто "забыть" о существовании степенного уравнения (5.85) и во всех случаях анализа данных и последующего расчета составляющих баланса оперировать с a и k , как с коэффициентами вполне корректного и самодостаточного логлинейного уравнения (5.86).

Результаты расчетов

Мем № 30: «По отношению к сообществам донных животных значения индекса Шеннона тесно коррелируют со значениями биотического индекса Вудивисса, отражающего степень загрязнения вод. Существенно, что между разнообразием системы и биомассой организмов существует вполне определенная обратная зависимость, которая по отношению к планктонным сообществам была количественно выражена А.М. Гиляровым, и подтверждена мною на основании данных по нескольким латгальским озерам» А.Ф. Алимов [1990].

Рассмотрим, насколько этот тезис подтверждается для зообентоса рек средней полосы России. Сформируем выборку из 533 сопряженных наблюдений, куда включим следующие показатели зообентоса: индекс Шеннона (H), биотический индекс Вудивисса (V), число видов (S), суммарную численность (N_S) и биомассу (B_S) всех видов в пробе, а также обилие отдельных таксономических групп – хирономид (B_{chi}), олигохет²⁵ (N_{oli} , B_{oli}) и хищников-хватателей (N_h).

Для оценки связи этих показателей выполним расчет подмножества регрессионных уравнений, основные параметры которых представлены в табл. 5.16. По каждой диагностической статистике приведены уровни значимости использованных критериев. Если P -значение, соответствующее величине статистики, больше 5%, то нет оснований отвергать исходную нулевую гипотезу: об отсутствии влияния фактора, равенстве 0 коэффициента угла наклона b , отличии распределения остатков от нормального или влиянии фактора на остатки соответственно.

Некоторые графики полученных зависимостей и гистограмм распределений показаны на рис. 5.12.

По результатам расчетов можно сделать следующие выводы:

1. На используемом фактическом материале отсутствует сколько-нибудь достоверная статистическая связь между индексом Шеннона и натуральными значениями суммарной биомассы зообентоса в пробе (см. уравнение 1 в табл. 5.16). Однако, после логарифмирования биомассы между H и $\ln(B_S)$ появляется вполне значимая **прямо** пропорциональная зависимость (см. уравнение 2 табл. 5.16 и фиг. «а» на рис. 5.12), качественно противоположная установленным на латгальских озерах.
2. Как обсуждалось выше (см. раздел 4.3), статистическая вариация индекса Шеннона включает в себя две компоненты: чисто функциональную зависимость от числа видов S и вклад фактора эквитабельности (равномерности распределения численности экземпляров по видам). Уравнение 4 демонстрирует достаточно тесную связь логарифмов числа видов и биомассы, что выглядит откровенным трюизмом для биологов (чем больше видов в пробе, тем больше биомасса). Поскольку уравнение 5, где откликом является пронормированное на число видов значение индекса Шеннона, значительно уступает по статистическим критериям надежности уравнениям 2 и 4, это заставляет предположить что прямо пропорциональная связь между H и B определяется, в основном, числом видов, а не эквитабельностью.

Таблица 5.16

Регрессионные зависимости между отдельными гидробиологическими показателями (обозначения по тексту)

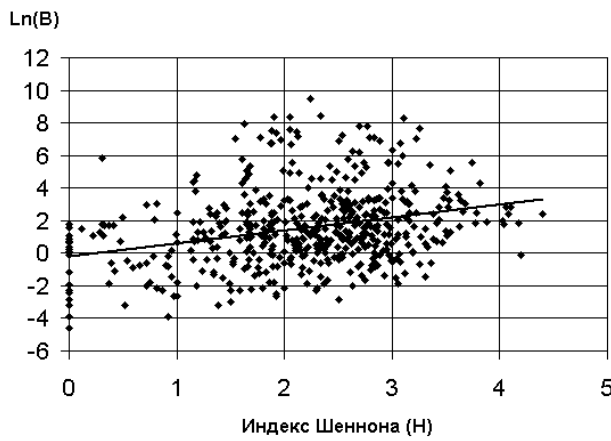
Уравнение регрессии	Коэффициент детерминации R^2 , %	Значимость по F -критерию Фишера	Гипотеза $b=0$ по t -критерию Стьюдента	Распределение остатков	
				Нормальность по критерию χ^2	Гетероскедастичность по критерию χ^2
1. $H = 2.15 + 4.6 \cdot 10^{-5} B_S$	-0.048	0.75	0.866	22.6	3.21

²⁵ Только виды-детритофаги без учета фитофагов *Nais communis*, *Stylaria lacustris* и др.

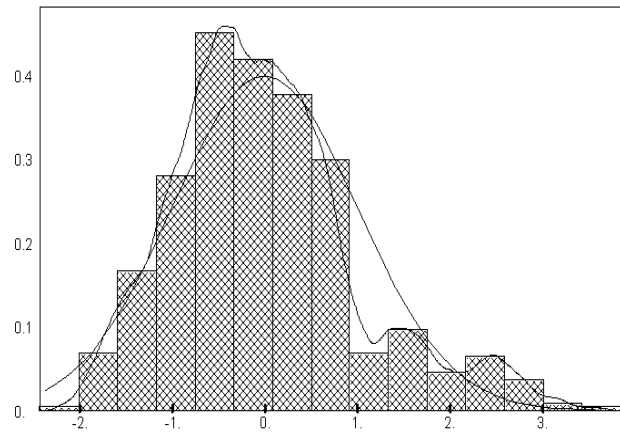
		[0.38]	[0.38]	[0.0]	[0.07]
2. $H = 1.98 + 0.112 \ln(B_s)$	8.69	50.4 [0.0]	7.09 [0.0]	12.0 [0.0025]	6.99 [0.0082]
3. $\ln(B_s) = -0.159 + 0.79 H$	8.69	50.4 [0.0]	7.09 [0.0]	58.0 [0.0]	0.317 [0.57]
4. $\ln(S) = 1.935 +$ $+ 0.136 \ln(B_s)$	16.89	106.48 [0.0]	10.31 [0.0]	54.0 [0.0]	6.56 [0.0104]
5. $H/\ln(S) = 0.873 +$ $+ 0.0174 \ln(B_s)$	1.768	10.34 [0.0014]	3.216 [0.0014]	177.68 [0.0]	38.87 [0.0]
6. $H = 2.319 + 0.09 \ln(B_{Chi})$	4.35	22.49 [0.0]	4.74 [0.0]	10.88 [0.0043]	4.197 [0.0]
7. $H = 2.19 - 0.019 \ln(B_{Oli})$	~ 0	0.926 [0.3363]	0.96 [0.3363]	19.58 [0.0]	0.0053 [0.9418]
8. $H = 2.415 -$ $- 1.155 (N_{Oli}/N_s)$	16.53	103.8 [0.0]	-10.19 [0.0]	14.96 [0.0]	0.0587 [0.8084]
9. $H = 1.46 +$ $+ 1.41 \ln(N_h/N_s)$	24.65	170.8 [0.0]	13.07 [0.0]	20.3 [0.0]	1.67 [0.195]
10. $H = 1.43 + 0.203 V$	22.66	153.0 [0.0]	12.37 [0.0]	4.45 [0.1078]	36.15 [0.0]

Примечание: в квадратных скобках приведены *P*-значения для соответствующей статистики.

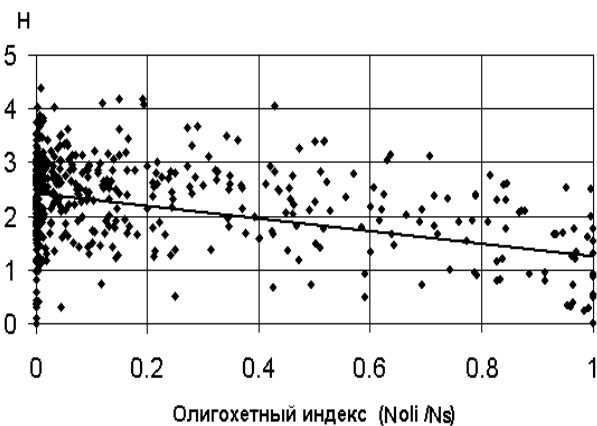
- Если использовать в уравнениях биомассу отдельных таксономических групп бентоса, то их связь с индексом Шеннона для хирономид значительно слабее, а для олигохет-детритофагов вообще отсутствует (см. уравнения 6 и 7).
- Уравнения 8 и 10 подтверждают распространенные выводы об обратной зависимости индекса Шеннона и индекса Гуднайта-Уитлея и Пареле и прямой зависимости *H* и биотического индекса Вудивисса (см. также фиг. «в» и «г» на рис. 5.11).
- Наибольшая надежность модели регрессии была получена для прямо пропорциональной зависимости индекса Шеннона от доли логарифма численности видов хищников-хватателей (уравнение 9).
- Выполненные расчеты показывают, что, на достаточно большой для гидробиологических данных обучающей выборке *n*, полученные коэффициенты корреляции от 0.3 до 0.5 при высоком *F*-критерии не следует оценивать как малые.
- Практически для всех уравнений не отвергается гипотеза о нормальности распределения остатков, что связано, в первую очередь, с нормальностью распределения самого отклика. Этот вывод справедлив, если даже переставить местами отклик и фактор, как это сделано для уравнения 3 (см. фиг. «б» на рис. 5.12).
- В пяти приведенных случаях из десяти гетероскедастичность остатков отсутствует. Однако, даже визуально на фиг. «в» рис. 5.12 можно увидеть значительную сконцентрированность вариации остатков в области малых значений олигохетного индекса. Если бы К.Г. Гуднайт, Л.С. Уитли и Э.А. Пареле использовали при расчете своего индекса прологарифмированные значения численностей, статистическая надежность уравнения 8 существенно бы повысилась.



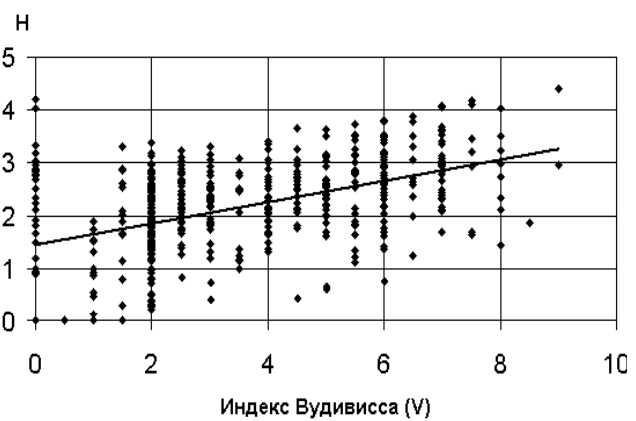
а) график зависимости 3: $\ln(B_s) = a + bH$



б) гистограмма остатков зависимости 3.



в) график зависимости 8: $H = a + b(N_{oli}/N_s)$



г) график зависимости 10: $H = a + bV$

Рис. 5.12. Графики зависимостей между индексом Шеннона и некоторыми гидробиологическими показателями (уравнения приведены в таб. 5.15)

Мем № 31: «Для практического использования при определении качества воды предлагаются следующие методы: система сапробности; биотический индекс Вудивисса в нашей модификации. Для углубленного изучения экологических условий водного объекта можно использовать индекс видового разнообразия Шеннона-Уивера» В.А. Яковлев [1988].

Рассмотрим, подтверждаются ли распространенные утверждения о закономерном влиянии факторов гидрохимического загрязнения на такие показатели как индекс Шеннона H , олигохетный индекс Гуднайта-Уитлея и Пареле P и биотический индекс Вудивисса V , полученные для малых рек Самарской области. Рассчитанные уравнения линейной регрессии зависимости этих индексов от традиционных гидрохимических показателей представлены в табл. 5.17 и на рис. 5.13.

Выполненные расчеты показывают существенно более слабую корреляционную связь гидробиологических индексов с уровнем загрязнения, чем это обычно декларируется. Низкую статистическую значимость уравнений регрессии следует объяснить, видимо, двумя причинами: *объективной* и *технологической*.

Объективная составляющая заключается в том, что обобщенные индексы H , P и V работоспособны, по нашему мнению, лишь в случае ощутимых различий в степени антропогенного воздействия на сравниваемые экосистемы. В изучаемом регионе уровень химического загрязнения воды относительно однороден, за редкими исключениями (устье р. Чапаевка), которые мало влияют на общую статистическую оценку. Поэтому варибельность общих индексов определяется в значительной мере природно-географическими факторами и особенностями биотопов, нежели концентрациями химических ингредиентов. Влияние токсического загрязнения на экологию гид-

робионтов следует оценивать не в "общестатистическом болоте" данных, а по совокупности специально подобранных примеров, полярно разнесенных на шкале "патология – норма", и с учетом всех структурных изменений видовых комплексов биоценозов (о чем пойдет речь в последующих главах).

Таблица 5.17

*Регрессионные зависимости гидробиологических показателей (индекс Шеннона **H**, олигохетный индекс Гуднайта-Уитлея и Пареле **P** и биотический индекс Вудивисса **V**) от гидрохимических факторов*

Наименование фактора, объем выборки и ее размах (<i>min-max</i>)	Уравнения регрессии (<i>C</i> – гидрохимический фактор из столбца 1)	Коэффициент детерминации R² , %	F -критерий Фишера и его p -значение
pH в придонном слое, 331 изм., 5.3 ÷ 9.8	H = 2.18 + 0.001* <i>C</i>	0.303	10 ⁻⁴ [0.99]
	P = 0.464 - 0.031* <i>C</i>	0.046	0.845 [0.358]
	V = 6.68 - 0.351* <i>C</i>	0.368	2.22 [0.137]
Растворенный кислород (на дне), 306 изм., 6.5 ÷ 184 мг/л	H = 2.49 - 0.002* <i>C</i>	0.065	0.799 [0.37]
	P = 0.0785 + 0.0012* <i>C</i>	0.467	2.43 [0.12]
	V = 4.35 - 0.005* <i>C</i>	0.062	0.81 [0.36]
Редокс-потенциал (Eh) в поверхностном слое, 139 изм., 100÷1530 мВ	H = 2.403 - 0.001* <i>C</i>	4.78	7.93 [0.0056]
	P = 0.254 + 0.0003* <i>C</i>	2.54	4.6 [0.034]
	V = 3.819 - 0.25* <i>C</i>	3.11	5.43 [0.02]
Фосфор минеральный, 125 изм., 0.005 ÷ 0.525 мг/л	H = 2.363 - 1.59* <i>C</i>	2.99	4.82 [0.029]
	P = 0.203 + 0.598* <i>C</i>	2.02	3.568 [0.061]
	V = 3.497 - 1.041* <i>C</i>	0.537	0.336 [0.56]
Аммонийный азот, 90 изм., 0.001 ÷ 1.42 мг/л	H = 2.196 - 0.172* <i>C</i>	0.856	0.24 [0.62]
	P = 0.251 - 0.24* <i>C</i>	2.85	3.61 [0.06]
	V = 3.7 - 0.8* <i>C</i>	0.036	0.967 [0.32]
БПК ₅ , 99 изм., 1.55 ÷ 10.59, мг/л	H = 2.6 - 0.118* <i>C</i>	4.61	5.74 [0.018]
	P = 0.0575 + 0.0375* <i>C</i>	3.87	4.95 [0.028]
	V = 3.89 - 0.8* <i>C</i>	2.629	3.64 [0.059]
Железо, 71 изм., 0.001 ÷ 2.6 мг/л	H = 2.35 - 0.477* <i>C</i>	2.99	3.16 [0.08]
	P = 0.2 + 0.12* <i>C</i>	0.512	1.36 [0.24]
	V = 3.89 - 0.8* <i>C</i>	1.38	0.045 [0.83]
Медь, 33 изм., 1 ÷ 19 мкг/л	H = 2.05 + 0.0323* <i>C</i>	1.29	0.589 [0.44]
	O = 0.367 - 0.013* <i>C</i>	0.497	0.84 [0.36]
	V = 1.202 + 0.25* <i>C</i>	21.7	9.9 [0.0036]

Примечание: жирным шрифтом **F**-критерия выделены статистически значимые уравнения регрессии.

Статистическая надежность уравнений регрессии зависит и от **технологии** работы с данными: тщательности подбора аппроксимирующей функции и выполнения исходных предпосылок анализа (нормальности и независимости остатков). Приведем несколько комментариев этому тезису:

1. Нетрудно заметить сильную асимметрию распределения олигохетного индекса Пареле в сторону тяжелого "нулевого хвоста" (т.е. в нижнюю часть графиков на фиг. «в» и «г» рис. 5.13). Нами уже отмечалось, что при расчете любых индексов, построенных на долях численности или биомассы отдельных таксономических групп, предпочтительнее использовать вместо натуральных сумм их прологарифмированные значения.
2. Можно усмотреть в корреляционном облаке точек определенный вид нелинейной зависимости, которая окажется предпочтительнее, чем линейная. Например, использование для фиг. «в» степенной функции $P = -0.163 + 0.186 (\text{БПК}_5)^{0.5}$ увеличивает коэффициент детерминации с 3.87 до 4.63%, а **F**-отношение – с 4.95 до 5.76 ($p = 0.0183$).
3. Наконец, очевидна асимметрия распределения большинства гидрохимических показателей и, связанная с этим гетероскедастичность остатков. Наилучший способ борьбы с этим явлением –

логарифмирование переменных. В частности, для фиг. «д» предпочтительнее уравнение $V = 28.53 - 3.55 \ln(1000 + Eh)$, $R^2 = 4.24$, $F(1,137) = 7.1$, $p = 0.0086$.

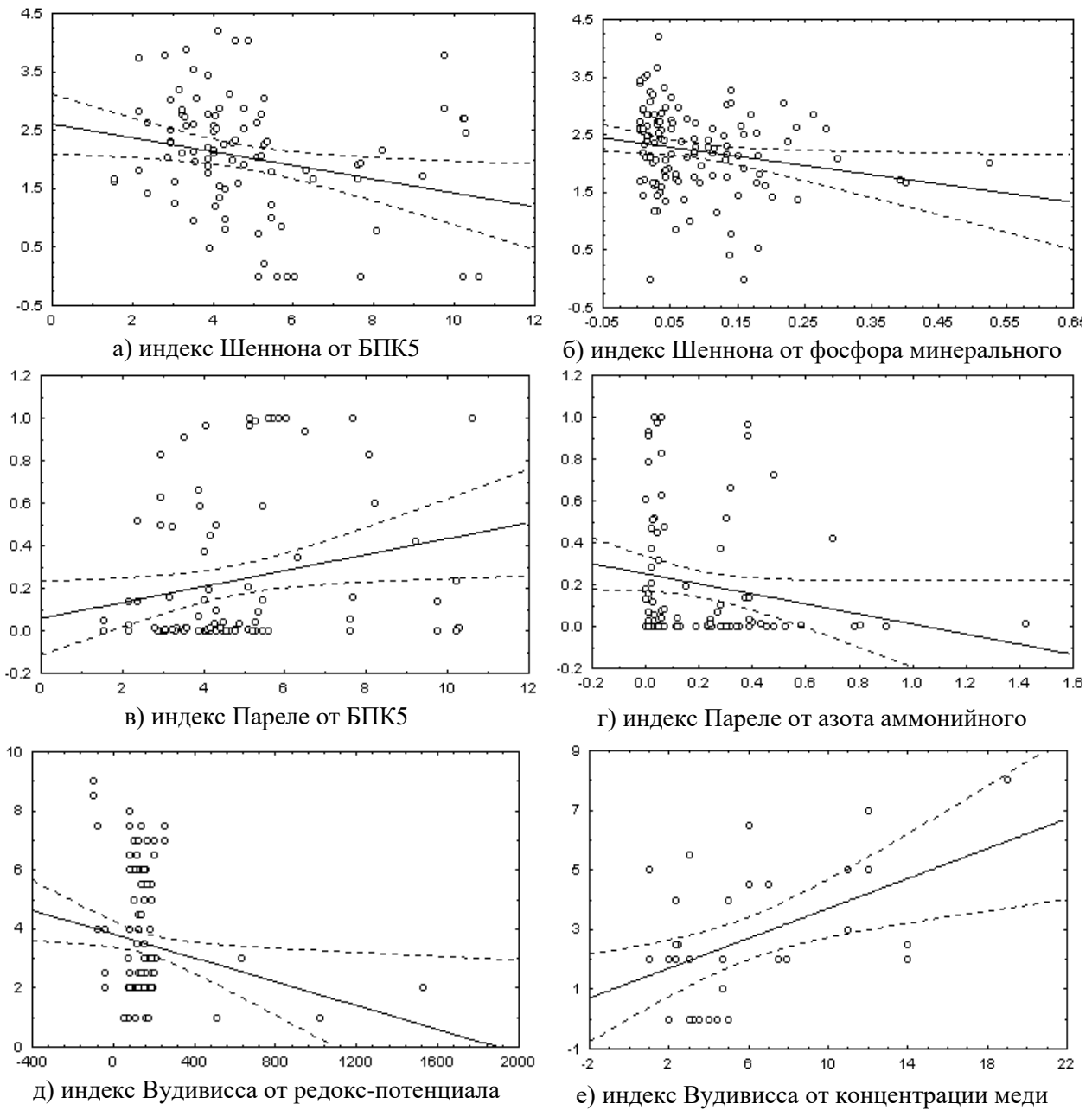


Рис. 5.13. Графики зависимостей гидробиологических индексов по оси ординат от гидрохимических показателей (уравнения приведены в таб. 5.17)

Однако никакая методологическая тщательность обработки не гарантирует от артефактов в виде распространенного феномена "ложной" корреляции. Например, мы затрудняемся дать какое-либо осмысленное объяснение чрезвычайно достоверной прямо пропорциональной (!) связи индекса Вудивисса и концентрации ионов меди (см. фиг. «е» рис. 5.13).

Мем № 32: «Несмотря на большое число исследований, рассматривающих зависимость скорости обмена от индивидуального веса, не было встречено случаев, показывающих необходимость или желательность применения для той же цели других функций. Впрочем, сделана попытка опровергнуть какое-то "реальное существование" (?) степенной зависимости R от W на основании того, что в отдельных случаях... данные аппроксимируются не только прямой... Нельзя принимать всерьез эти предельно наивные высказывания» Г.Г. Винберг [1976].

В математической части была показана недостаточная обоснованность методов линеаризации при оценке параметров степенного уравнения регрессии. Оценим, насколько практически отличаются между собой коэффициенты степенного (5.85) и логлинейного (5.88) уравнений, оптимальные относительно сумм квадратов невязок (5.86) и (5.87), соответственно.

Воспользуемся для этого выборкой [Умнов, 1976], связывающей величину энергетического обмена с массой тела пескожила *Arenicola marina*. А.А. Умновым для этой серии наблюдений после логарифмирования было рассчитано линейное уравнение регрессии

$$\log Y = 1.804 + 0.672X.$$

Поскольку 26 лет назад методы нелинейного программирования были своего рода "вычислительной экзотикой", автор рекомендует использовать найденные коэффициенты для степенной модели, которая после обратного преобразования приобретает вид

$$Y = 63.75X^{0.672}. \quad (5.89)$$

В настоящее время любой исследователь может легко вычислить истинные МНК-оценки нелинейной функции (5.84) и получить для данных, представленных в табл. 5.18, оптимальное степенное уравнение энергетического обмена пескожила

$$Y = 53.36X^{0.785}. \quad (5.90)$$

Если принять во внимание, что по литературным данным (см. раздел 4.8) для различных групп зообентоса показатель степенного уравнения k варьируется от 0.75 до 0.895, то отличия уравнений (5.89) и (5.90) можно признать существенными. Достаточно значительным (на 17%) имело место и снижение остаточной суммы квадратов Q_e .

Из графика на рис. 5.14 легко увидеть, что уравнение (5.89), совпадая с (5.90) в средней части, плохо учитывает расположение экспериментальных точек на "хвостах" кривой.

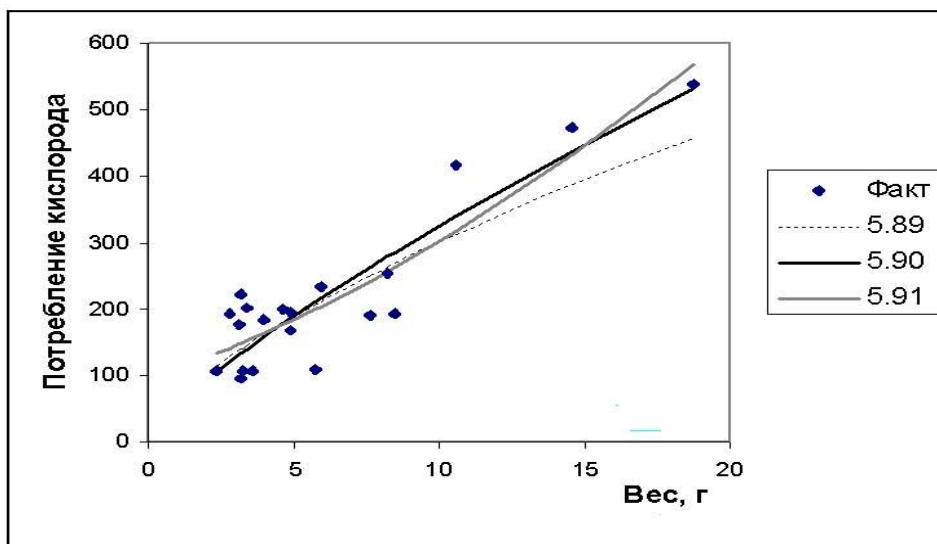


Рис. 5.14. Графики аппроксимирующих функций (номера по тексту) потребления кислорода от веса тела пескожила

Таблица 5.18

Расчет энергетического обмена в зависимости от индивидуального веса пескожила по различным эмпирическим уравнениям (цифровые обозначения по тексту)

Индивидуальный вес, г/экз	Энергетический обмен, мм ³ O ₂ /час экз				
	Получены в эксперименте	Рассчитаны по уравнениям регрессии			
		(5.89)	(5.90)	(5.91)	(5.92)
2.37	105.33	113.89	105.03	132.66	160.76
2.82	192.63	128.01	120.38	140.85	156.20
3.12	177.13	137.02	130.31	146.43	154.51
3.21	221.84	139.67	133.26	148.12	154.20
3.22	95.9	139.96	133.58	148.31	154.18
3.24	107	140.54	134.23	148.68	154.12
3.38	202.5	144.60	138.76	151.34	153.88
3.6	105.4	150.86	145.80	155.55	153.92
4	182.38	161.94	158.37	163.33	155.33
4.65	198.2	179.19	178.23	176.35	161.01
4.91	167.45	185.87	186.00	181.68	164.39
4.93	195	186.38	186.60	182.09	164.68
5.72	108.8	205.97	209.68	198.75	178.60
5.95	233.13	211.51	216.27	203.72	183.57
7.65	190.17	250.45	263.41	242.22	230.90
8.26	254.35	263.71	279.76	256.78	251.55
8.5	191.88	268.84	286.12	262.62	260.07
10.62	416.87	312.26	340.75	316.83	341.50
14.6	472.75	386.79	437.42	431.46	485.71
18.76	538.34	457.82	532.52	569.22	537.81
Остаточная сумма квадратов отклонений Q_e		66656	56935	49973	42359
Скорректированный коэффициент детерминации $R^2_{о}, \%$		73.7	77.6	79.1	81.2

Примечание: жирным шрифтом выделены значения с минимальной ошибкой относительно экспериментальных данных

Мем, предваряющий этот блок расчетов, относится к любопытной категории – "указующим мемам". При этом Г.Г. Винберг [1976] признает: «нет оснований считать, что когда данные могут быть переданы степенной функцией, это указывает на некоторый определенный механизм явления», т.е. на самом деле никакой биофизической закономерности уравнение (5.85) не отражает. Это означает, что с равным правом можно предложить целый ряд иных математических формул, которые будут описывать те же экспериментальные данные с большей степенью адекватности.

Мы бы сочли проявлением собственной "наивности", если бы лишили себя возможности проверить, нет ли иной формы зависимости, которая бы лучше аппроксимировала данные по энергетическому обмену пескожила, чем канонизированное степенное уравнение. Наши поиски не были слишком упорными – первые же тестируемые полиномиальные уравнения 2-й и 3-й степени оказались существенно более адекватными по отношению к экспериментальным данным (коэффициент детерминации в табл. 5.18 рассчитан по формуле (5.82) и учитывает количество регрессоров):

$$Y = 0.5298X^2 + 15.441X + 93.093 ; \quad (5.91)$$

$$Y = -0.2492X^3 + 8.0469X^2 - 46.844X + 229.9. \quad (5.92)$$

Согласно принципу множественности моделей В.В. Налимова [1971], список подобных эмпирических зависимостей может быть существенно продолжен.

Окончательная селекция лучших из них целесообразна, вероятно, исходя из совокупных соображений "ошибка регрессии" + "удобство использования". Если под фактором "удобства" понимать визуальное сравнение коэффициентов, оцененных для разных таксономических групп животных, то выбор степенной зависимости в качестве единого стандарта интерпретации и обобщения следует признать обоснованным.

Однако, в случае разработки ряда имитационных моделей материально-энергетического баланса экосистем [Меншуткин, 1971], применение, например, полиномиальных уравнений значительно предпочтительней, поскольку схема расчета их коэффициентов методом линеаризации является статистически корректной и не требует громоздких итеративных алгоритмов нелинейной оптимизации.

5.6. Непараметрическая корреляция и регрессия

Формулировка задачи

Исходные условия те же, что и для регрессионного анализа: т.е. имеется две группы сопряженных наблюдений

$$X = (x_1, \dots, x_m) \text{ и } Y = (y_1, \dots, y_m).$$

Если есть сомнения в применимости гауссовой модели распределения данных (а они, в большинстве случаев, небезосновательны), то для оценки связи между переменными Y и X можно воспользоваться некоторыми альтернативами метода наименьших квадратов. Обсуждая в разделе 5.4 измерения в порядковых (ординальных) шкалах, мы убедились, что реальным содержанием этих измерений является тот порядок, в котором выстраиваются объекты по степени выраженности измеряемого признака. Порядковый номер числа в таком отсортированном списке называется его *рангом*.

Необходимо оценить степень влияния признака X на степень выраженности отклика Y . Если такого влияния нет, то справедлива нулевая гипотеза H_0 о независимости порядковых признаков. Решение этой задачи будем искать, основываясь на рангах измерений.

Рекомендуемая литература та же, что и для раздела 5.4.

Математический лист

Пусть каждому i -му измерению приписана пара натуральных чисел (r_i, s_i) , где r_i – ранг x_i среди чисел (x_1, \dots, x_m) , а s_i – ранг y_i среди чисел (y_1, \dots, y_m) . Будем при этом считать, что среди рядов чисел X и Y нет повторяющихся значений, так что переход к рангам вопросов не вызывает.

Если признаки X и Y взаимосвязаны, то последовательность рангов r_1, r_2, \dots, r_m влияет на ранговую последовательность s_1, s_2, \dots, s_m ; в противном случае порядок среди Y случаен по отношению порядка среди X . Поэтому центральным моментом обсуждения гипотезы H_0 является оценка, насколько являются ранги s_1, s_2, \dots, s_m равновероятными (т.е. равновероятными) при любом порядке чисел r_1, r_2, \dots, r_m . Вторым важным моментом является выбор меры сходства двух наборов рангов.

Коэффициент ранговой корреляции, предложенный в 1900 г. знаменитым психологом Ч. Спирменом, основан на том, что близость этих двух рядов чисел отражает величина:

$$S = \sum_{i=1}^m (r_i - s_i)^2, \quad (5.93)$$

которая варьируется от 0, если последовательности полностью совпадают, до $(m^3 - m)/3$, когда последовательности рангов полностью противоположны.

Нормированный по своему максимальному значению, коэффициент ранговой корреляции Спирмена

$$\rho = 1 - \frac{6S}{m^3 - m} \quad (5.94)$$

варьирует от +1 до -1 и свои крайние значения принимает в случаях полной предсказуемости одной ранговой последовательности по другой. Заметим, что значение S не зависит ни от значения первого номера последовательности, ни от порядка сортировки.

Другой коэффициент ранговой корреляции, получивший популярность после работ М. Кендалла, в качестве меры сходства между двумя ранжировками использует минимальное число перестановок, которое надо осуществить между соседними объектами, чтобы одно упорядочение объектов превратить в другое.

Статистику Кендалла K подсчитывают следующим образом. Выстраивают сопряженные наблюдения в порядке возрастания признака X и для каждого значения y_i определяют его ранг s_i . На последовательности рангов s_1, s_2, \dots, s_m определяют количество *инверсий*, т.е. нарушений порядка следования. Например, при $m = 4$ и последовательности рангов $\{4, 3, 1, 2\}$ имеем количество инверсий (суть – статистику Кендалла) $K = 3 + 2 = 5$, где 3 – количество инверсий для числа 3 и 2 – количество инверсий для числа 3. Наименьшее возможное значение $K = 0$ получается при полном совпадении ранговых последовательностей, наибольшее $K = m(m-1)/2$ – при полной противоположности.

Коэффициент ранговой корреляции по Кендаллу представляет собой статистику, нормированную по ее максимуму, и изменяется в тех же пределах, что и коэффициент корреляции Спирмена

$$\tau = 1 - \frac{4K}{m(m-1)}. \quad (5.95)$$

Статистика τ Кендалла эквивалентна ρ Спирмена как по мощности, так и по выполнению основных предположений. Обычно, однако, числовые значения ρ Спирмена и τ Кендалла различны, потому что они отличаются как своей внутренней логикой, так и способом вычисления. Более важно то, что статистики Кендалла и Спирмена имеют различную интерпретацию: если коэффициент корреляции Спирмена может рассматриваться как прямой аналог коэффициента корреляции r Пирсона, вычисленный по рангам, то статистика Кендалла скорее основана на подсчете *вероятностей* (выражаясь более точно, проверяется наличие различий между вероятностями порядка расположения наблюдаемых данных для двух величин).

Если в данных имеется много совпадающих значений, то предпочтительнее использовать третью ранговую статистику γ – *критерий*, который по своей интерпретации и вычислениям эквивалентен статистике Кендалла, за исключением того, что совпадения явно учитываются в нормировке. Выражаясь кратко, γ представляет собой разность между вероятностью того, что ранговый порядок двух переменных совпадает, минус вероятность того, что он не совпадает, деленную на единицу минус вероятность совпадений.

Для проверки предположения об отсутствии связи между признаками надо вычислить выборочное значение любого коэффициента ранговой корреляции и сравнить его с критическим значением для данного уровня значимости. Нулевую гипотезу H_0 следует отвергнуть, если полученное в опыте значение коэффициентов ρ или τ по модулю превосходит критическое.

Критические значения ранговых критериев можно найти по таблицам, либо вычислить по приближенным формулам, которые основаны на том, что при H_0 и с увеличением m распределение случайных величин $\rho\sqrt{m-1}$ и $\tau\sqrt{\frac{9m(m+1)}{2(2m+5)}}$ асимптотически приближается к стандартному нормальному закону $N(0,1)$.

Результаты расчетов

В результате гидробиологических наблюдений установлено, что при загрязнении водоемов происходит закономерное изменение соотношения численности личинок хирономид подсемейств Chironominae, Orthoclaadiinae и Tanypodinae. Ортокладиины обычно доминируют в чистых водах, таниподины – в загрязненных, что дало основания Е.В. Балушкиной предложить индекс, отражающий соотношение обилия представителей этих трех подсемейств и описанный в разделе 4.2.

Проверим справедливость этого предположения с использованием ранговых критериев ρ , τ и γ (см. табл. 5.19, где приведены статистики и соответствующие им значения вероятностей p). Расчет был выполнен по выборке из 88 наблюдений, а в качестве показателя загрязнения водоема использовались значения биологического потребления кислорода БПК₅.

Таблица 5.19

Корреляция между БПК₅ и обилием различных групп личинок хирономид с использованием ранговых критериев (N – суммарная численность представителей группы в пробе, A – отношение численности группы к общей численности хирономид)

Наименование показателя и подсемейства хирономид	Коэффициент Спирмена		Коэффициент Кендалла		Статистика γ	
	ρ	p	τ	p	γ	p
<i>N</i> Chironominae	-0.162	0.131	-0.108	0.135	-0.110	0.135
<i>N</i> Orthoclaadiinae	-0.271	0.011	-0.196	0.007	-0.253	0.007
<i>N</i> Tanypodinae	-0.205	0.055	-0.141	0.051	-0.161	0.051
<i>A</i> Chironominae	0.190	0.076	0.129	0.076	0.135	0.076
<i>A</i> Orthoclaadiinae	-0.251	0.018	-0.185	0.011	-0.238	0.011
<i>A</i> Tanypodinae	-0.159	0.139	-0.113	0.118	-0.128	0.118
Индекс Балушкиной	0.251	0.018	0.185	0.011	0.238	0.011

Примечание: жирным шрифтом выделены строки со значимым влиянием фактора

Проведенные расчеты позволяют сделать следующие выводы.

1. На представленном массиве гидробиологических данных выявлена достоверная обратно пропорциональная связь между БПК₅ и численностью представителей подсемейства Orthoclaadiinae.
2. На водотоках Самарской области не подтверждается вывод о влиянии органического загрязнения в диапазоне до 10 мгО₂/л на абсолютную или относительную численность подсемейства Chironominae.
3. Нет веских оснований использовать, как это делает Е.В. Балушкина, в качестве анализируемого показателя относительную (в %) долю численности гидробионтов отдельных подсемейств вместо натурального значения общей численности. Например, если по абсолютной численности Tanypodinae достоверность нулевой гипотезы находится на уровне порога значимости, то для относительной численности гипотезу об отсутствии связи следует принять без колебаний.
4. Несмотря на то, что хирономидный индекс имеет значимую прямо пропорциональную связь с уровнем органического загрязнения, эта корреляция практически полностью основывается на удельной составляющей Orthoclaadiinae, поэтому прагматическая ценность конечного математического выражения для индекса Балушкиной в условиях рассматриваемого примера не определена.
5. Все три используемых ранговых коэффициентов корреляции продемонстрировали весьма близкие результаты оценки значимости нулевой гипотезы, что свидетельствует о надежности полученных выводов.

Представляемый пример демонстрирует также высокую технологичность ранговых коэффициентов корреляции по сравнению с коэффициентом корреляции Пирсона в условиях негауссовых распределений анализируемых выборок. Для доказательства этого выполним параллельный расчет уравнений линейной регрессии классическим методом наименьших квадратов (графики рассчитанных зависимостей представлены на рис. 5.15):

- для численности ортокладин:

$$N_{Ort} = 107.23 - 7.02 * БПК_5$$
 при коэффициенте корреляции $r = 0.068$, статистике Фишера $F(1,86) = 0.41$ и уровне значимости $p = 0.526$;
- для индекса Балушкиной

$$K_b = 7.35 + 0.33 * БПК_5,$$
 при $r = 0.179$, $F(1,86) = 2.85$, $p = 0.095$.

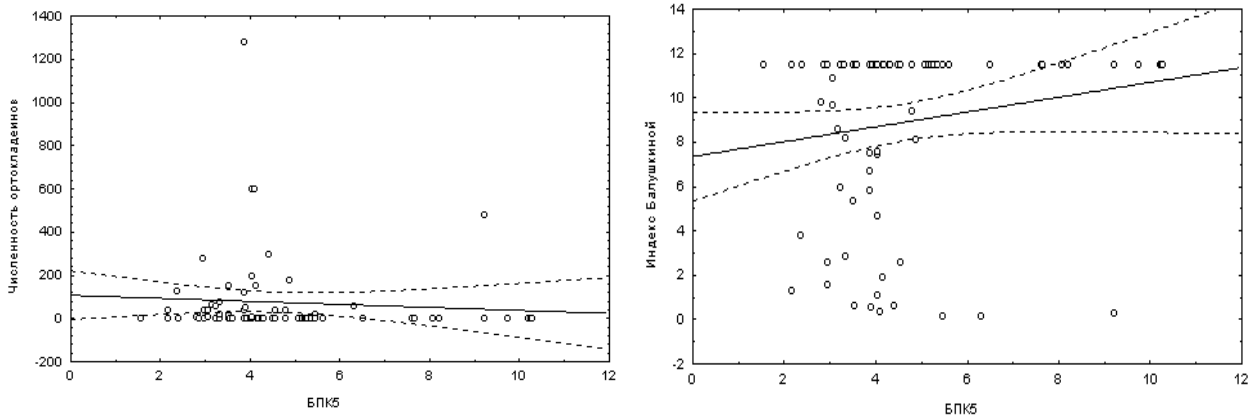


Рис. 5.15. Графики зависимостей численности ортокладин и индекса Балушкиной от значения БПК₅

Поскольку основные предположения регрессионного анализа на этих выборках не выполняются, полученные уравнения и коэффициенты корреляции оказались недостоверными. В то же время, использование непараметрических критериев дало уверенное заключение о наличии такой связи.

6.1. Оценка зависимости признаков в таблицах сопряженности

Формулировка задачи

Пусть имеется ряд из m сопряженных наблюдений двух переменных $A \equiv (a_1, \dots, a_m)$ и $B \equiv (b_1, \dots, b_m)$, причем, предполагается, что A – независимая переменная (фактор) влияет на значения B – зависимой переменной (отклик). При этом типы данных, в которых представлены показатели, носят вполне определенный характер: они должны быть измерены в классификационных или порядковых шкалах, либо сведены к таковым в ходе предварительной обработки.

Предположим, что признак A имеет r градаций (или уровней) A_1, A_2, \dots, A_r , а признак B подразделяется на s градаций B_1, B_2, \dots, B_s . В "свернутом" виде результаты наблюдений можно представить *таблицей сопряженности*, состоящей из r строк и s столбцов, в ячейках которых проставлены частоты событий n_{ij} , т.е. количество объектов выборки, обладающих комбинацией уровней A_i и B_j .

Если между переменными A и B имеется взаимно однозначная прямая или обратная функциональная связь, то все частоты n_{ij} концентрируются по одной из диагоналей таблицы. При связи не столь сильной некоторое число наблюдений попадает и на недиагональные элементы. В этих условиях перед исследователем стоит задача выяснить, насколько точно можно предсказать значение одного признака по величине другого.

В отличие от регрессионного анализа, в данном случае нас интересует не сколько конкретный вид расчетного уравнения $B \approx f(A)$, а надежная и непротиворечивая оценка степени и характера влияния фактора на зависимую переменную. Говоря языком статистики, надо указать распределение вероятностей между возможными значениями второго признака при известном значении первого. Этой проблеме обычно предшествует более простая процедура: надо сначала проверить, существует ли вообще какая-либо связь между этими признаками, или же они ведут себя *независимо* друг от друга.

Рекомендуемая литература: [Елисеева, Рукавишников, 1977; Аптон, 1982; Енюков, 1986; Флейс, 1989].

Математический лист

Проверка нулевой гипотезы

Признаки A и B будут независимыми, если значение, принятое признаком A не влияет на вероятности возможных значений признака B :

$$P(B_j/A_i) = P(B_j) \text{ или } P(A_i, B_j) = P(A_i) P(B_j) \quad (6.1)$$

Значения использованных вероятностей нам неизвестны, однако, по теореме Бернулли, при большом объеме выборки ($n \rightarrow \infty$) частоты в ячейках таблицы сопряженности будут являться оценками этих вероятностей. При выполнении гипотезы о независимости признаков справедливо

$$p_{ij} = p_{i\bullet} \cdot p_{\bullet j}, \quad (6.2)$$

где следующие величины трактуются как ожидаемые частоты:

$$\frac{n_{ij}}{n} \rightarrow p_{ij}; \quad \frac{n_{i\bullet}}{n} \rightarrow p_{i\bullet}; \quad \frac{n_{\bullet j}}{n} \rightarrow p_{\bullet j}; \quad n = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s n_{ij},$$

(замена индекса точкой означает результат суммирования по этому индексу). Тогда проверка нулевой гипотезы сводится к оценке, насколько близки значения фактических и ожидаемых частот, т.е.

$$n_{ij} \approx \frac{n_{i \cdot} \cdot n_{\cdot j}}{n}. \quad (6.3)$$

Методы сравнения эмпирических (H) и теоретических (T) частот по А. Брандту (A. Brandt) и Г. Снедекору (G. Snedecor) основываются на расчете критерия согласия χ^2 , оценивающего меру близости по всем ячейкам таблицы сопряженности:

$$\chi^2 = \sum \frac{(H-T)^2}{T} = \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s \frac{(n_{ij} - \frac{n_{i \cdot} \cdot n_{\cdot j}}{n})^2}{\frac{n_{i \cdot} \cdot n_{\cdot j}}{n}}. \quad (6.4)$$

Если в конкретном опыте величина χ^2 оказывается чрезмерно большой, то приходится признать, что ожидаемые частоты слишком сильно отличаются от наблюдаемых. Ответ на естественный вопрос, о том, какие значения статистики следует считать чрезмерно большими, дает теорема К. Пирсона – Р. Фишера, из которой следует:

- для независимых признаков при неограниченном росте числа наблюдений распределение случайной величины χ^2 стремится к распределению «хи-квадрат»;
- гипотезу о независимости можно принять, если χ^2 не превосходит критического для заданного уровня табличного значения с $(r-1)(s-1)$ степенями свободы;
- для зависимых признаков χ^2 неограниченно возрастает с увеличением n .



Карл ПИРСОН

ет с увеличением n .

В 1934 г. Ф. Йэйтс (F. Yates) предложил ввести в выражение для статистики χ^2 так называемую поправку на непрерывность, которая связана с тем, что непрерывные распределения хи-квадрат и, соответственно, нормальное распределение используются для представления дискретных выборочных частот. С учетом такой поправки данное выражение примет следующий вид:

$$Y^2 = 2 \sum H \cdot \ln \frac{H}{T} = 2 \sum_{i=1}^r \sum_{j=1}^s n_{ij} \cdot \ln \left(\frac{n_{ij} n}{n_{i \cdot} \cdot n_{\cdot j}} \right). \quad (6.5)$$

Оценка силы связи

Как всегда в статистике, интерес исследователя не ограничивается принятием гипотезы, оценивающей величину риска предположения о существовании связи. Если признаки оказались взаимосвязаны (т.е. гипотеза об их независимости была проверена и отвергнута) представляет интерес оценка силы связи, которую хочется видеть в некотором привычном интервале величин, например, от -1 до $+1$ с нулевым значением при отсутствии связи. Сама по себе такая постановка проблемы определенным образом дискуссионна. Достаточно сказать, что нет единого мнения даже у соавторов настоящей книги: один из нас считает приоритетным при оценке силы связи уютный коэффициент корреляции Пирсона r (суть – долю факториальной вариации), а другой – статистики Фишера или χ^2 (то же, но только с учетом степеней свободы), напрямую связанные с фундаментальными для статистики уровнями значимости.

В случае таблиц сопряженности для измерения силы связи предложены десятки формул [Миркин, Розенберг, 1979; Миркин и др., 1989], которые можно свести к трем основным группам:

- традиционные коэффициенты связи, основанные на χ^2 ;
- меры и статистики, основанные на рангах;
- коэффициенты, измеряющие информационную связь между факторами.

Коэффициенты связи, основанные на χ^2 , исходят из предпосылки о том, что, чем больше объем выборки n , тем легче получить статистически значимую величину критерия даже при

очень слабой взаимосвязи переменных (т.е. при больших объемах выборки даже слабые связи будут статистически значимыми).

Чтобы элиминировать влияние объема выборки m , К. Пирсон предложил в качестве меры связи *среднеквадратическую сопряженность* (он же – *редуцированный коэффициент корреляции*)

$$\phi^2 = \frac{\chi^2}{m}, \quad (6.6)$$

который изменяется в диапазоне от 0 до $\min(r-1, s-1)$.

Стремясь нормировать меру связи к единому диапазону, С. Крамер видоизменил формулу (6.6) для своего *коэффициента Крамера*:

$$V^2 = \frac{\chi^2}{m \cdot \min(r-1, s-1)}, \quad (6.7)$$

верхний предел которого единица.

А.А. Чупров нашел для похожей формулы более звучное название – *полихорический коэффициент сопряженности* (*коэффициент Чупрова*):

$$T^2 = \frac{\chi^2}{m \cdot \sqrt{(r-1)(s-1)}}. \quad (6.8)$$

Нетрудно заметить, что T^2 и V^2 эквивалентны, когда число столбцов равно числу строк, в иных случаях V^2 всегда больше, чем T^2 . Для таблицы 2x2 обе меры равны ϕ^2 .

Наконец, можно упомянуть еще один коэффициент, связанный с именем К. Пирсона – *коэффициент контингенции*:

$$C^2 = \frac{\chi^2}{\chi^2 + m}. \quad (6.9)$$

Перечисленные коэффициенты, основанные на χ^2 , остаются неизменными при перестановке местами строк или столбцов таблицы и всегда выражаются положительными числами, поэтому уяснение направления зависимости должно производиться только по виду таблицы сопряженности.

Коэффициенты, основанные на рангах, позволяют извлечь информацию о направлении связи между признаками, используя понятие коррелируемости на основе подсчета числа пар объектов с взаимно возрастающими, взаимно убывающими и равными значениями признаков.

Коэффициент τ Кендалла учитывает число пар с равными признаками и может достигать значений -1 и +1, отражающих высшую степень положительной или отрицательной корреляции между признаками. Обычно вычисляется два варианта статистики Кендалла: τ_b и τ_c , которые различаются только способом обработки совпадающих рангов.

Если в данных имеется много совпадающих значений, предпочтительнее *γ -статистика Гудмана-Кендалла*, которая представляет собой нормированную разность между вероятностью P того, что ранговый порядок двух переменных совпадает, и вероятностью Q того, что он не совпадает:

$$\gamma = (P - Q)/(P + Q).$$

Таким образом, γ -статистика в основном эквивалентна τ Кендалла, за исключением того, что совпадения явно учитываются в нормировке.

Коэффициент d Соммера аналогичен коэффициенту γ с дифференциальным учетом пар с равными значениями признаков. Вычисляются два значения коэффициента, учитывающих равенство первого $d(A|B)$, и второго $d(B|A)$ признака.

Информационный подход к оценке связи. Традиционные меры связи, основанные на χ^2 , представляют собой сугубо эвристические конструкции, интерпретация и математико-статистическое обоснование которых оставляет желать много лучшего. Поэтому понятен интерес к оценкам, основанным на теоретико-информационном подходе к анализу таблиц частот.

Современная трактовка статистической связи между переменными A и B сводится к оценке количества информации

$$I(A, B) = H(B) - H(B|A), \quad (6.10)$$

которое устраняет неопределенность того, какое значение примет B , если известно значение A . Таким образом, мера сопряженности оценивается как доля сопряженного разнообразия величины B , включенной в систему (A, B) , по сравнению с разнообразием (энтропией) B , рассматриваемой отдельно:

$$R_{B|A} = I(A, B) / H(B). \quad (6.11)$$

Практическая трудность построения мер, относящихся к этому семейству, заключается в трудности выбора конкретных дефиниций и формальных выражений понятий "неопределенность" и "информация" из множества возможных. Например, согласно принципа "пропорциональной предикции", высказанного Л. Гудменом и В. Крускалом (L. Goodman, V. Kruscal), мерой связи должно служить относительное уменьшение вероятности ошибки предикции (предсказания) значения зависимого признака по значению независимого. Если в рамках этой концепции производить оценку относительной ошибки, используя отношения правдоподобия и минимизацию числа ошибочных предсказаний, мы получаем меру связи, известную как λ -коэффициент Гудмана:

$$\lambda_{B|A} = \frac{\sum_i p_i \cdot \max_j p_{ji} - \max_j p_{\bullet j}}{1 - \max_j p_{\bullet j}}, \quad (6.12)$$

где $\max_j p_{\bullet j}$ – вероятность, соответствующая модальной категории маргинального распределения B ; $\max_j p_{ji}$ – вероятность модального значения B при i -м значении A . Значения λ лежат в пределах от 0 до 1: 0 означает невозможность предсказания зависимого признака, а 1 означает, что по значению независимого признака можно уверенно предсказать значение зависимого признака. Необходимо отметить, что нулевое значение λ эквивалентно не состоянию статистической независимости, а тождеству модальных категорий переменных A и B .

Кроме несимметричных мер λ , требующих предварительного уточнения, какая из двух переменных является объясняемой, чешские авторы (J. Rehak, B. Rehakova) предложили *симметричный коэффициент Гудмана*:

$$\lambda_{A, B} = \frac{\left[\sum_i p_i \cdot \max_j p_{ji} - \max_j p_{\bullet j} + \sum_j p_j \cdot \max_i p_{ij} - \max_i p_{i\bullet} \right] / 2}{1 - (\max_i p_{i\bullet} + \max_j p_{\bullet j}) / 2}. \quad (6.13)$$

Кроме λ -статистики Гудмана, можно упомянуть еще ряд критериев, основанных на теоретико-информационном подходе к построению мер связи: коэффициент Валлиса, информационные коэффициенты корреляции Линфута, Райского и т.д. [Елисева, Рукавишников, 1977].

Результаты расчетов

В разделах 2 и 5 главы 4 были описаны различные биотические индексы, предложенные Ф. Вудивиссом, Э.А. Пареле и Е.В. Балушкиной. Фиксированный диапазон значений этих индексов соответствует классам качества вод шестибальной шкалы (см. табл. 4.7 главы 4). Сформируем выборку значений этих трех индексов, рассчитанных по результатам гидробиологического мониторинга для различных створов рек Самарской области. Для тех же точек наблюдений оценим класс качества воды по химическим показателям на основе гидрохимического индекса загрязнения воды ИЗВ, либо по методике Былинкиной и Драчева, если имеющихся гидрохимических данных было недостаточно (см. разделы 3.5-3.6).

Сравним, используя таблицы сопряженности (см. табл. 6.1), насколько соответствуют оценки по гидробиологическим индексам реальным классам качества воды по гидрохимическим показателям. Предварительный анализ легко выполнить визуально: при полном совпадении оценок классов все ненулевые значения должны сконцентрироваться на главной диагонали. Этого, разуме-

ется, не произошло и совпадение прогноза класса качества по индексу Вудивисса составило 38% случаев, индексу Пареле – 21%, индексу Балушкиной – 33%.

Таблица 6.1

Таблицы сопряженности, основанные на классах качества воды по гидрохимическим показателям (столбцы) и биотическим индексам (строки)

Градации строк		Градации столбцов – классы качества по гидрохимическим показателям					Итог по строкам	
		2	3	4	5	6		
Классы качества вод, оцененные по биотическому индексу Вудивисса	2	25	22	8	2	0	57	
		4.32%	3.80%	1.38%	0.35%	0.00%	9.84%	
	3	21	52	46	9	3	131	
		3.63%	8.98%	7.94%	1.55%	0.52%	22.63%	
	4	2	27	39	4	3	75	
		0.35%	4.66%	6.74%	0.69%	0.52%	12.95%	
	5	4	24	88	66	44	226	
		0.69%	4.15%	15.20%	11.40%	7.60%	39.03%	
	6	4	6	18	23	39	90	
		0.69%	1.04%	3.11%	3.97%	6.74%	15.54%	
	Итоги по столбцам		56	131	199	104	89	579
			9.67%	22.63%	34.37%	17.96%	15.37%	100.00%
Классы качества вод, оцененные по индексу Пареле	1	23	38	39	10	6	116	
		6.10%	10.08%	10.34%	2.65%	1.59%	30.77%	
	2	7	14	26	12	9	68	
		1.86%	3.71%	6.90%	3.18%	2.39%	18.04%	
	3	6	11	18	9	4	48	
		1.59%	2.92%	4.77%	2.39%	1.06%	12.73%	
	4	3	8	29	10	4	54	
		0.80%	2.12%	7.69%	2.65%	1.06%	14.32%	
	5	1	5	17	24	6	53	
		0.27%	1.33%	4.51%	6.37%	1.59%	14.06%	
	6	1	8	9	12	8	38	
		0.27%	2.12%	2.39%	3.18%	2.12%	10.08%	
Итоги по столбцам		41	84	138	77	37	377	
		10.88%	22.28%	36.60%	20.42%	9.81%	100.00%	
Классы качества вод, оцененные по хирономидному индексу Балушкиной	2	31	32	31	5	11	110	
		6.30%	6.50%	6.30%	1.02%	2.24%	22.36%	
	3	17	54	76	19	8	174	
		3.46%	10.98%	15.45%	3.86%	1.63%	35.37%	
	4	5	35	66	41	30	177	
		1.02%	7.11%	13.41%	8.33%	6.10%	35.98%	
	5	1	8	10	10	2	31	
		0.20%	1.63%	2.03%	2.03%	0.41%	6.30%	
	Итоги по столбцам		54	129	183	75	51	492
			10.98%	26.22%	37.20%	15.24%	10.37%	100.00%

Более объективный анализ связи между оценками качества воды в гидробиологических и гидрохимической шкалах можно сделать с использованием описанных выше статистических критериев. Как свидетельствуют расчеты, представленные в табл. 6.2, в соответствии с критериями χ^2

и τ_b Кендалла нет никаких оснований принимать гипотезу об отсутствии связи между классами качества, оцененными по биотическим индексам и по гидрохимическим показателям.

Сравнительный анализ значений коэффициентов связи позволяет сделать вывод о том, что на имеющемся экспериментальном материале ошутимое превосходство в прогностической силе имеет биотический индекс Вудивисса, тогда как индексы Пареле и Балушкиной дают значительно более скромные и приблизительно одинаковые по точности результаты.

Таблица 6.2

Анализ силы связи в таблице сопряженности (см. табл. 6.1) с использованием различных статистических критериев и коэффициентов

Наименование критерия или коэффициента	Класс по индексу Вудивисса	Класс по индексу Пареле	Класс по индексу Балушкиной
Критерий χ^2	288.45 ($p=0.0$)	69.68 ($p=0.0$)	88.6 ($p=0.0$)
V-статистика Крамера	0.3529	0.215	0.245
Коэффициент контингенции C	0.5766	0.395	0.3906
τ_b - статистика Кендалла	0.5114 ($p=0.0$)	0.2781 ($p=0.0$)	0.2778 ($p=0.0$)
τ_c - статистика Кендалла	0.483	0.2708	0.2662
γ - статистика	0.6567	0.3533	0.3803
Коэффициент d Симмера симметр.	0.5114	0.2779	0.2776
то же, по строкам	0.5048	0.2877	0.2673
то же, по столбцам	0.5181	0.2688	0.2887
λ Гудмана-Крускала симметр.	0.1269	0.054	0.0897
то же, по строкам	0.1388	0.0651	0.1746
то же, по столбцам	0.1158	0.0418	0.0032

Следует еще раз подчеркнуть, что сама по себе величина коэффициентов связи мало о чем говорит и имеет содержательный смысл только при сравнении между собой выборок, имеющих примерно одинаковую размерность и условия формирования. Например, коэффициент λ Гудмана, также как и коэффициент детерминации R^2 , обычно имеет небольшие значения. Оценки этого коэффициента для наших таблиц не превышали 0.15, т.е. объяснено всего около 10% качественной дисперсии. В то же время, значимость критерия "хи-квадрат" свидетельствует о высоком уровне связи. Поэтому, на наш взгляд, не следует недооценивать влияние фактора, ориентируясь на небольшие величины коэффициентов детерминации как для количественных, так и для неколичественных переменных, а полагаться на содержательные результаты, подтвержденные значимостью связей при статистической проверке результатов.

Другой формой визуального анализа таблиц сопряженности является их графическое представление в виде различного рода диаграмм. На рис. 6.1 представлен вариант столбчатой диаграммы совместного распределения значений индекса Вудивисса и классов качества воды, оцененных по гидрохимическим показателям.

Несмотря на выявленный высокий уровень связи между этими признаками, можно отметить значительное снижение адекватности прогноза класса качества воды в области малых значений показателя V: величина индекса Вудивисса менее 3 далеко не всегда свидетельствует о реальном химическом загрязнении воды, а может определяться посторонними факторами (условиями отбора проб, сезонностью и проч.).

Мем № 33: «Об экологическом благополучии водного объекта можно судить по составу доминирующего комплекса донных организмов, соотношению численности личинок хирономид, относящихся к роду *Chironomus*, подсемейству *Orthocladiinae* и трибе *Tanytarsini* ...и другим показателям донных сообществ»

Проанализируем это часто встречающееся в литературе утверждение, сформировав частотные таблицы сопряженности.

Поскольку алгоритмы анализа сопряженности связаны с признаками, измеренными в порядковых шкалах, предварительно выполним следующие преобразования:

- по каждому измерению и анализируемой таксономической группе рассчитаем логарифм индекса плотности населения $\ln((N_s * B_s)^{0.5})$, учитывающему в одном показателе как численность N_s , так и биомассу B_s и имеющему распределение, близкое к нормальному;

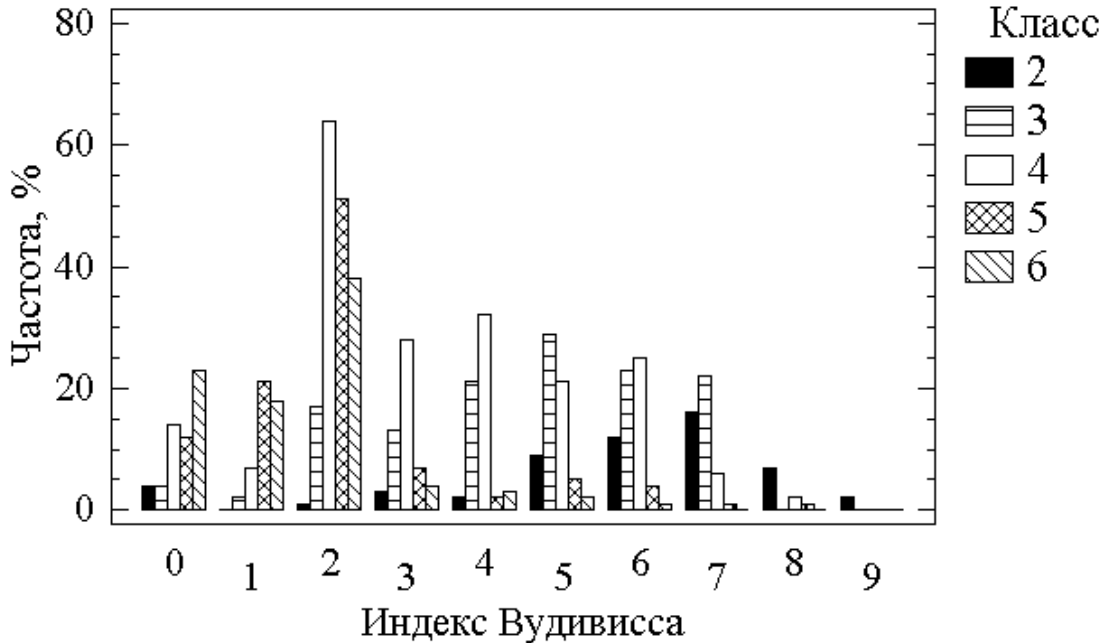


Рис. 6.1. Частотное распределение значений биотического индекса Вудивисса на станциях с разным классом качества воды

- пересчитаем полученные значения $x = \ln((N_s * B_s)^{0.5})$ в диапазон шкалы чисел $\{6 \geq x' \geq 1\}$ по известным формулам масштабирования

$$x' = (x_{\min}' - x_{\min}) + \frac{x_{\max}' - x_{\min}'}{x_{\max} - x_{\min}} x ; \quad (6.14)$$

- округлим значения x' до ближайшего целого, установив значения ранга обилия равным нулю, если данная таксономическая группа в наблюдении отсутствовала (общая выборка наблюдений включала все пробы, в которых был найден хотя бы один вид хирономид).

Используя полученные градации, сформируем таблицы сопряженности обилия хирономид подсемейств Tanypodinae (см. пример в табл. 6.3), Orthocladiinae и Chironominae с двумя факторами среды – классом качества воды по гидрохимическим показателям и ландшафтно-географической категорией станции наблюдения.

Результаты анализа силы и достоверности связи по некоторым основным критериям представлены в табл. 6.4, что дает нам основания сделать следующие выводы:

1. В разделе 5.6 по результатам рангового корреляционного анализа остался открытым вопрос о влиянии органического загрязнения (по БПК₅) на численность хирономид подсемейства Tanypodinae. Анализ таблиц сопряженности дал более категорическое заключение – обилие таниподин определяется, в основном, типологическими особенностями водоемов (являясь вместе с тем показателем процесса их эвтрофирования) и мало зависит от химического загрязнения,;

2. Экологический диапазон видов подсемейств Orthoclaadiinae и Chironominae (трибы Tanytarsini и Chironomini) существенно более узкий, однако их обилие примерно в равной степени определяется как классом качества вод по гидрохимическим показателям, так и факторами, напрямую не связанными с антропогенным воздействием.

Таблица 6.3

Таблица сопряженности, основанная на грациях обилия личинок подсемейства Tanytarsini (столбцы) и ландшафтно-географическим категориям станций (строки)

Ландшафтно-географические категории	Градации обилия Tanytarsini							Итого по строкам
	0	1	2	3	4	5	6	
1. Ручьи и родники	8	3	4	4	1	1	0	21
	1.69%	0.64%	0.85%	0.85%	0.21%	0.21%	0.00%	4.45%
2. Малые реки возвышенностей	82	10	23	14	17	10	3	159
	17.37%	2.12%	4.87%	2.97%	3.60%	2.12%	0.64%	33.69%
3. Малые равнинные реки	6	4	2	4	2	3	1	22
	1.27%	0.85%	0.42%	0.85%	0.42%	0.64%	0.21%	4.66%
4. Средние равнинные реки	31	8	13	19	21	7	1	100
	6.57%	1.69%	2.75%	4.03%	4.45%	1.48%	0.21%	21.19%
5. Устья рек	22	1	11	12	7	2	0	55
	4.66%	0.21%	2.33%	2.54%	1.48%	0.42%	0.00%	11.65%
6. Пруды, озера, водохранилища	57	3	17	20	15	3	0	115
	12.08%	0.64%	3.60%	4.24%	3.18%	0.64%	0.00%	24.36%
Итого по столбцам	206	29	70	73	63	26	5	472
	43.64%	6.14%	14.83%	15.47%	13.35%	5.51%	1.06%	100 %

Таблица 6.4

Анализ силы связи в таблицах сопряженности между грациями обилия отдельных групп видов хирономид и факторами среды: классом качества воды по гидрохимическим показателям и ландшафтно-географическим категориям станций

Факторы среды	Подсемейства/трибы хирономид	Статистика χ^2 «хи-квадрат»		V статистика Крамера	τ_b - статистика Кендалла		λ Гудмана симметр.
		критерий	p		критерий	p	
Класс качества воды (гидрохимический)	Tanytarsini	23.26	0.504	0.1110	-0.0222	0.558	0.0018
	Orthoclaadiinae	97.94	0	0.2270	-0.2919	0	0.0413
	Chironomini	67.2	0.0003	0.189	0.516	0	0.0431
	Tanytarsini	86.10	0	0.2135	-0.2780	0	0.0277
Ландшафтно-	Tanytarsini	47.54	0.022	0.1419	0.0311	0.409	0.0173

географические категории	Orthoclaadiinae	91.29	0	0.1967	-0.2216	0	0.0642
	Chironomini	143.3	0	0.2481	0.248	0	0.126
	Tanytarsini	93.91	0	0.1995	-0.1959	0	0.0625

6.2. Нелинейность отношений и «уиттекеровские» колокола

Формулировка задачи

Пусть имеется ряд из m сопряженных наблюдений двух переменных $X \equiv (x_1, \dots, x_m)$ и $Y \equiv (y_1, \dots, y_m)$, причем предполагается, что хотя бы одна из этих переменных (или обе вместе) измерены в количественных шкалах: интервальной, абсолютной или шкале отношений.

В разделе 5.5 было приведено выражение для расчета коэффициента корреляции Пирсона r_{XY} , который является мерой линейной связи между векторами X и Y . Однако в случае нелинейной зависимости между фактором и откликом значение r_{XY} теряет свою достоверность и может дать ошибочное представление о тесноте связи. Классический пример – параболическая зависимость, для которой коэффициент линейной корреляции может быть близок к 0, как бы не были близки экспериментальные точки к расчетной кривой.

Необходимо в условиях предполагаемой нелинейности оценить наличие связи между X и Y , а также степень ее близости к линейной форме. Для этого определяются показатели, характеризующие концентрацию распределения (и, следовательно, тесноту связи) около кривых регрессии $Y(x)$ и $X(y)$.

Рекомендуемая литература: [Ван дер Варден, 1960; Смирнов, Дунин-Барковский, 1965; Плохинский, 1970; Батоян, 1983; Генкин, 1999; С.А. Прохоров, 2001б, 2002].

Математический лист

Определим метод расчета корреляционных отношений $\eta^2_{y|x}$ и $\eta^2_{x|y}$, введенных К. Пирсоном и являющихся наиболее общими мерами оценки нелинейных связей.

Для вычисления $\eta^2_{y|x}$ разобьем весь диапазон изменения фактора X на k поддиапазонов (интервалов). Пусть теперь $y_{1i}, y_{2i}, \dots, y_{ni}$ – ординаты всех тех точек, абсциссы которых принадлежат i -му интервалу ($i = 1, 2, \dots, k$). Если m_i – количество точек, попавших в i -й интервал, то среднее значение ординат точек, попавших в этот интервал, определяется как

$$\bar{y}_i = \left(\sum_{j=1}^{m_i} y_{ij} \right) / m_i, \quad (6.15)$$

а общая средняя всех ординат – как

$$\bar{y} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^{m_i} y_{ij}. \quad (6.16)$$

Для нахождения меры нелинейной связи вычисляется также дисперсия всех ординат от общей средней (обычная дисперсия ординат)

$$s_y^2 = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^{m_i} (y_{ij} - \bar{y})^2 \quad (6.17)$$

и разброс интервальных средних \bar{y}_i ($i = 1, 2, \dots, k$) от общей средней:

$$s_{\bar{y}}^2 = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k (\bar{y}_i - \bar{y})^2. \quad (6.18)$$

Последняя дисперсия тем меньше, чем хуже зависимость y от x , а в случае полного хаоса $\bar{y}_i = \bar{y}$ и $s_{\bar{y}}^2 = 0$. Квадрат корреляционного отношения $\eta^2_{y|x}$ определяется как отношение дисперсии интервальных средних к дисперсии всех ординат:

$$\eta_{y|x}^2 = s_y^2 / s_y^2 . \quad (6.19)$$

Аналогично вычисляется квадрат корреляционного отношения x от y ; при этом квантуется диапазон изменения признака y на оси ординат:

$$\eta_{x|y}^2 = s_x^2 / s_x^2 . \quad (6.20)$$

Между $\eta_{y|x}^2$ и $\eta_{x|y}^2$ нет какой либо простой зависимости: Y может быть не скоррелирована с X и $\eta_{y|x}^2 = 0$, когда как другой показатель $\eta_{x|y}^2 = 1$ (пример – та же парабола, или колоколовидная кривая по Р. Уиттекеру [1980]). Если $\eta_{y|x}^2 = \eta_{x|y}^2 = 1$, то функциональная зависимость $Y = f(X)$ обратима и Y представляет монотонную функцию от X .

Корреляционное отношение, как и коэффициент детерминации R^2 , всегда положительно и изменяется от 0 до 1. Заметим еще, что во всех случаях $R^2 < \eta_{y|x}^2$ и $R^2 < \eta_{x|y}^2$, так что из равенства нулю любого их корреляционных отношений, коэффициент линейной корреляции r_{xy} также равен 0.

Вернемся к уже обсуждавшейся проблеме: как оценить наличие связи и степень ее близости к линейной форме.

Ошибка коэффициента линейной корреляции определяется по формуле:

$$\sigma_r = \frac{1 - r_{xy}^2}{\sqrt{m}} , \quad (6.21)$$

где m – число сравниваемых реализаций пар признаков X и Y . Тогда достоверность отличия коэффициента корреляции от нуля определяется по критерию Стьюдента:

$$t = \left| \frac{r_{xy}}{\sigma_r} \right| > t_v , \quad (6.22)$$

где число степеней свободы $v = N - 2$.

Ошибка квадрата корреляционного отношения задается следующей формулой:

$$\sigma_{\eta^2} = \frac{(1 - \eta^2)(k - 1)}{(m - k)} , \quad (6.23)$$

где k – число классов корреляционной решетки по соответствующему признаку.

Тогда критерий достоверности отличия корреляционных отношений $\eta_{y|x}^2$ и $\eta_{x|y}^2$ от нуля будет определяться с использованием критерия Фишера:

$$F = \frac{\eta^2}{\sigma_{\eta^2}} > F_{v_1, v_2} , \quad (6.24)$$

где $v_1 = k - 1$, $v_2 = m - k$.

Критерий криволинейности связи Φ позволяет установить границу достоверного различия линейного коэффициента корреляции и корреляционного отношения и выносить решение о существовании сугубо нелинейной связи:

$$\Phi = \frac{(\eta^2 - R^2)(m - k)}{(1 - \eta^2)(k - 2)} > \Phi_{v_1, v_2} . \quad (6.25)$$

Распределение этого критерия также в случае нулевой гипотезы асимптотически приближается к распределению Фишера $F(v_1 = k - 1, v_2 = m - k)$, что позволяет статистически проверить предположение о линейности.

Таким образом, схема *полного корреляционного анализа* выглядит так: первоначально определяется коэффициент линейной корреляции r_{xy} и его достоверность σ_r ; далее – корреляционное отношение $\eta_{y|x}^2$ и его достоверность σ_{η} . Здесь возможны следующие варианты [Плохинский, 1970; Миркин, Розенберг, 1978]:

- если r_{xy} достоверен, а $\eta_{y|x}^2$ недостоверно, то необходим дополнительный анализ распределений;

- если r_{xy} недостоверен, а $\eta^2_{y|x}$ достоверно, то связь нелинейная;
- если r_{xy} недостоверен и $\eta^2_{y|x}$ недостоверно, то связь отсутствует;
- если r_{xy} достоверен и $\eta^2_{y|x}$ достоверно, то определяется критерий криволинейности Φ ;
- если Φ достоверен, то связь нелинейная;
- если Φ недостоверен, то выбирается линейная зависимость как более простая.

Другой способ оценки нелинейности взаимосвязи $Y \approx f(X)$ заключается в проведении двух пересекающихся вспомогательных линий регрессии через точки, соответствующие интервальным средним \bar{Y}_i ($i = 1, 2, \dots, k$) и \bar{X}_l ($l = 1, 2, \dots, n$). Угол θ между этими прямыми определяется по формуле:

$$\operatorname{tg}\theta = \frac{k_2 - k_1}{1 + k_1 k_2}, \quad (6.26)$$

где $k_1 = \eta^2_{y|x}$ и $k_2 = 1/\eta^2_{x|y}$ – угловые коэффициенты обеих прямых. Величина этого угла близка к 0 при наличии линейной корреляции.

В предыдущем разделе отмечалось, что с точки зрения теоретико-информационного подхода измерение статистической связи между переменными есть измерение сопряженного разнообразия:

$$(U(X) - U(X|Y))/U(Y), \quad (6.27)$$

где $U(X)$ – неопределенность (или "энтропия") переменной X , рассматриваемой отдельно, т.е. без знания Y ; $U(X|Y)$ – неопределенность Y при знании X . Спецификация понятия «энтропия» в случае признаков, измеренных в интервальных и номинальных шкалах, наиболее явным образом связана с традиционными статистическими понятиями «дисперсии» и «вариации». Учитывая, что при наблюдениях на уровне интервальной шкалы мы получаем информацию не только о целевой категории объекта по Y , но и количественно оцениваем его отличие от других объектов, естественно использовать следующие дефиниции неопределенностей:

$$U(X) = s_x^2 = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^L \sum_{j=1}^{m_k} (x_{kj} - \bar{x})^2 \quad (6.28)$$

$$\text{и } U(X|Y) = s_x^2 = \frac{1}{L} \sum_{k=1}^L (\bar{x}_k - \bar{x})^2, \quad (6.29)$$

где $\bar{x}_k = \left(\sum_{j=1}^{m_k} x_{kj} \right) / m_k$ – среднее значение варьируемой переменной для примеров, попавших в k -

ый класс, а $\bar{x} = \frac{1}{m} \sum_{k=1}^L \sum_{j=1}^{m_k} x_{kj}$ – общая средняя всех измерений. Тогда нормированная мера связи

$(U(X) - U(X|Y))/U(Y)$ примет вид знакомого по (6.19) квадрата корреляционного отношения:

$$\eta^2_{x|y} = \frac{\sum_{k=1}^L m_k (\bar{x}_k - \bar{x})^2}{\sum_{k=1}^L \sum_{j=1}^{m_k} (x_{kj} - \bar{x})^2}, \quad (6.30)$$

которое, таким образом, является частной реализацией информационного подхода к построению мер связи:

Как и корреляционные отношения, с идеей анализа тенденций интервальных средних связан *прямой градиентный анализ* – один из широко используемых методов ординации растительности, уходящий корнями в труды Л.Г. Раменского начала XX века и получивший развитие в работах Р. Уиттекера и Дж. Кертиса [Whittaker, 1952; Curtis, 1959; цит. по: Миркин, Розенберг, 1978]. Количественный прямой градиентный R -анализ [McIntosh, 1973; Kershaw, 1974; Миркин, Наумова, 1983, 1998; Розенберг, 1984] складывается из следующих этапов:

- интересующий исследователя фактор X разбивается на классы (интервалы - x_i , $i = 1, 2, \dots, k$);
- для анализируемого биологического показателя Y (встречаемость, обилие численности или биомассы для некоторого вида или ассоциации видов) традиционным образом рассчитываются интервальные средние и оценки дисперсий (6.15) – (6.18);
- проводится статистическая проверка гипотезы о влиянии фактора с использованием классического однофакторного дисперсионного анализа (например, по F -критерию Фишера);
- осуществляется построение графика эмпирического распределения интервальных средних \bar{Y}_i в зависимости от градаций фактора среды, ориентированных вдоль оси X ;
- визуально или с помощью эвристических приемов оценивается гипотеза об одновершинном характере этого распределения (модель "колоколовидного распределения" Либиха – Шелфорда – Уиттекера [модель предложена Р. Уиттекером, но отражает принцип лимитирующих факторов Либиха – Шелфорда]);
- в случае полимодальности кривой интервальных средних запускается процедура выравнивания распределения методом скользящей средней [Розенберг, 1984] до достоверно одновершинного распределения (эта процедура может осуществляться несколько раз);
- проводится определение средневзвешенной напряженности фактора и ее дисперсии:

$$\chi = \sum x_i * p_i, \quad \sigma^2 = \sum (x_i - \chi)^2 * p_i, \quad (6.31)$$

где x_i – значение фактора X для середины i -й градации; p_i – доля площади под выровненной кривой распределения (криволинейной трапеции), приходящаяся на i -й интервал.

Положение средневзвешенной напряженности для данного вида на оси фактора X будет свидетельствовать о "принадлежности" вида к минимальным или максимальным значениям исследуемого фактора, а величина дисперсии – о степени эвритопности (большая дисперсия) или стенотопности вида (маленькая дисперсия).

Результаты расчетов

Рассмотрим выборку сопряженных значений концентрации нитрат-ионов в воде C_{NO_3} и индекса Шеннона H , состоящую из 68 измерений, и выполним полный корреляционный анализ.

Для расчета корреляционных отношений предварительно выполняется трудно формализуемая процедура выбора количества и граничных значений диапазонов, поскольку по эмпирическим соображениям в каждой ячейке совместной корреляционной решетки для двух показателей должно быть не менее 6-8 измерений.

Осуществим разбиение области варьирования переменных на интервалы, основываясь на классической стратегии их равной ширины в натуральной шкале. Если с индексом Шеннона все складывается относительно благополучно, то в случае с концентрацией нитратов, мы сталкиваемся с некоторым разочарованием: большинство гидрохимических показателей, как и подробно рассмотренные в разделе 5.1 гидробиологические показатели, характеризуются сильной асимметрией распределения. Поскольку в каждую клетку корреляционной решетки должно попасть хотя бы 1 значение (напомним, лучше – не менее 6), проводим логарифмирование значений C_{NO_3} с добавлением "страховочной" единицы, что в значительной мере стабилизирует распределение – см. фиг. «а» и «б» на рис. 6.2. Но даже и после этого, достичь полного "заселения" решетки удастся лишь "склеив" несколько крайних правых интервалов.

Расчет корреляционных отношений представлен в табл. 6.5.

Таблица 6.5

Расчет корреляционных отношений по выборке
«индекс Шеннона (H) – концентрация нитратов (C_{NO_3}), мг/л»

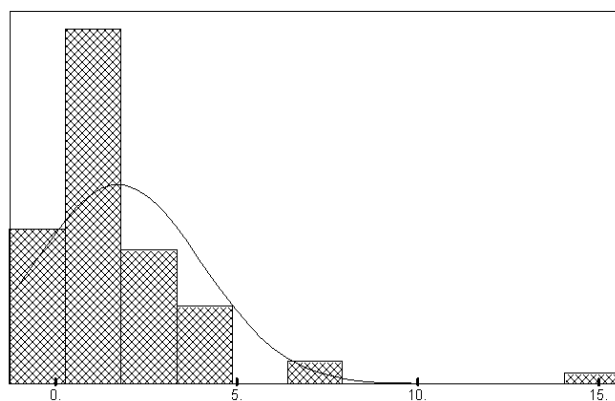
Интервалы $C = \ln(C_{NO_3} + 1)$, общее среднее = 0.791				Интервалы H , общее среднее = 2.098			
Диапазоны	Измерений	Групповые средние		Диапазоны	Измерений	Групповые средние	
		C	H			H	C
До 0.5	23	0.177	2.363	До 1	8	0.584	0.965
0.5 - 1	23	0.718	2.121	1 - 2	20	1.576	0.767

1 -1.5	12	1.246	1.688	2 - 3	31	2.392	0.847
1.5 - 2.8	10	1.829	1.930	3 - 4.19	9	3.594	0.504
Корреляционное отношение $\eta^2_{y x}$		8.53%		Корреляционное отношение $\eta^2_{x y}$		7.89%	
Статистика Фишера для $\eta^2_{y x} = 0$		1.99		Статистика Фишера для $\eta^2_{x y} = 0$		1.83	
Критерий криволинейности связи Φ		1.58		Критерий криволинейности связи Φ		1.35	

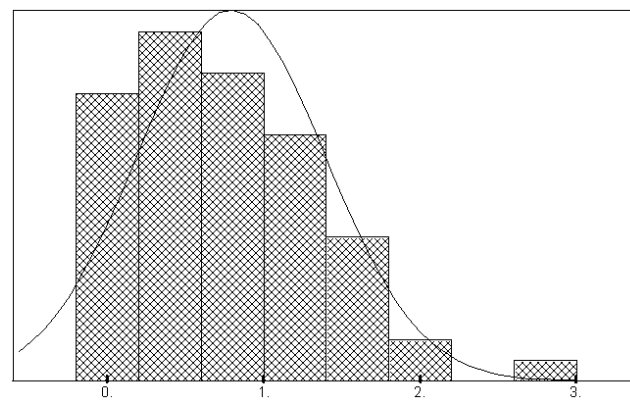
Классический линейный регрессионный анализ приводит к следующему уравнению (фиг. «в» на рис. 6.2):

$$H = 2.329 - 0.292 \ln(C_{\text{NO}_3} + 1)$$

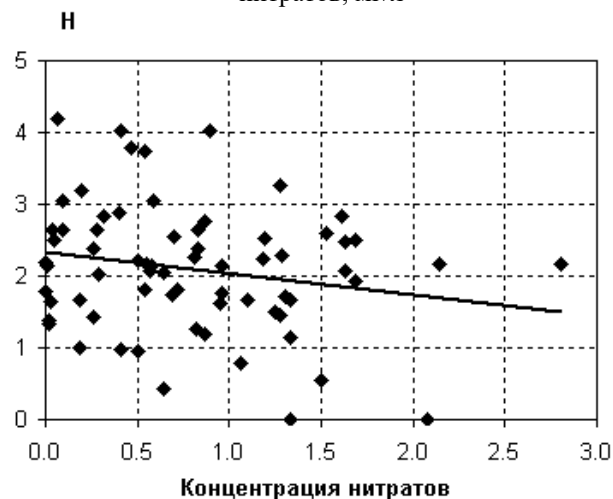
при коэффициенте детерминации $R^2 = 4.017\%$ и статистике Фишера $F(1,66) = 2.76$ [$p = 0.101$].



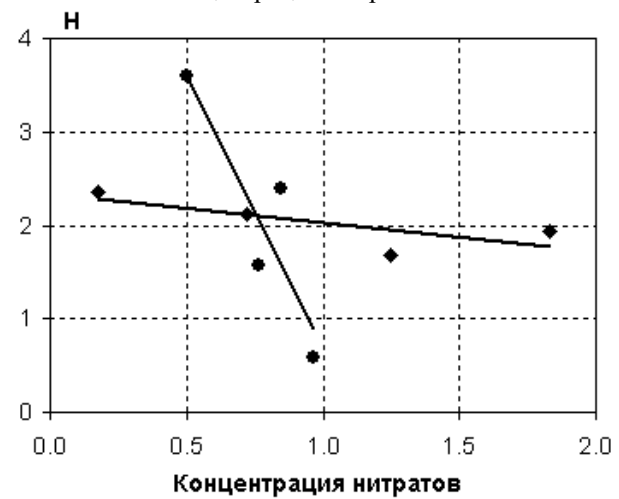
а) гистограмма натуральных значений концентраций нитратов, мг/л



б) гистограмма логарифмированных значений концентраций нитратов



в) корреляционное поле зависимости $H = a - b \ln(C_{\text{NO}_3} + 1)$



г) прямые, построенные по интервальным средним H и $\ln(C_{\text{NO}_3} + 1)$

Рис. 6.2. Графики распределений и регрессионных зависимостей индекса Шеннона от концентрации нитратов

Вряд ли проведенный анализ корреляционных отношений добавил что-нибудь существенное к выводам регрессионного анализа о влиянии концентрации нитратов на индекс Шеннона. С одной стороны, на 5% уровне надежности, как уравнение регрессии, так и корреляционные отношения являются незначимыми, да и угол $\theta = 58^\circ$ между прямым $Y(x)$ и $X(y)$ на фиг. «г» труд-

но назвать небольшим. С другой стороны, при 10% пороге надежности, который не является слишком рискованным для биологических исследований, утверждения о линейной форме зависимости между этими переменными становятся непротиворечивыми, а, используя лексику градиентного анализа можно сказать, что «средневзвешенная напряженность показателя на оси градиента имеет устойчивую обратно пропорциональную тенденцию для индекса Шеннона».

В качестве примера использования градиентного анализа рассмотрим влияние такого важнейшего показателя загрязнения воды, как степень насыщения кислородом в придонном слое (C_{O_2}) на индекс Шеннона H , общую численность видов хищников-хватателей зообентоса (N_h), общую биомассу видов Chironomidae (B_{chi}) и долю хищников этого рода (B_h/B_{chi}).

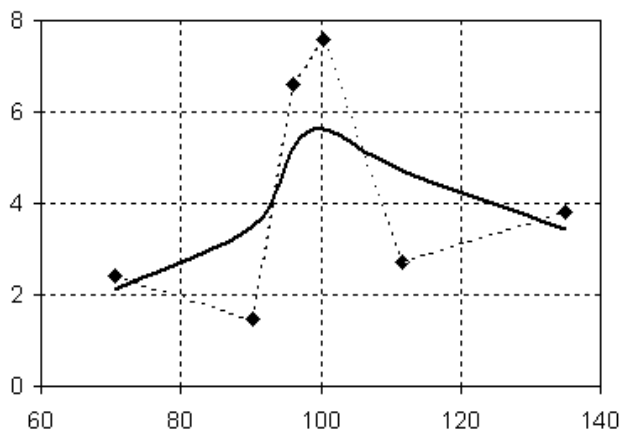
Отличительной особенностью распределения содержания кислорода является сильное сгущение точек измерений относительно среднего значения при наличии мощных "хвостов". Как было показано в разделе 5.5, это делает неустойчивыми большинство уравнений регрессионного анализа. Для выделения границ интервалов воспользуемся концепцией равной заселенности и представим результаты разбиения в табл. 6.6.

Графики распределения средних интервальных значений анализируемых показателей по оси градиента и оценка силы влияния фактора по статистике Фишера приведены на рис. 6.3.

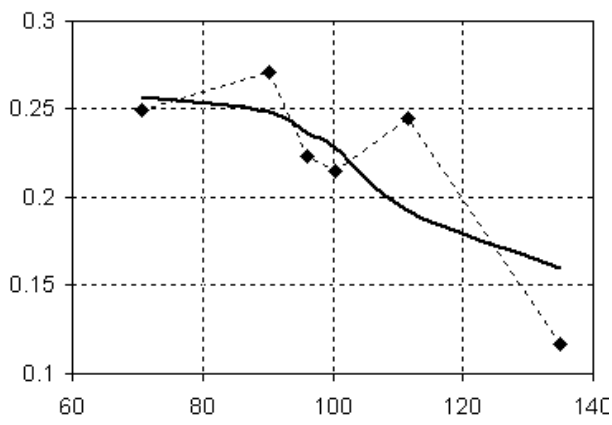
Таблица 6.6

Распределение по диапазонам значений содержания растворенного кислорода, % от степени насыщения

№№ интервалов	Количество точек	Минимум	Максимум	Среднее
1	52	6.5	84	70.68
2	49	85	93	90.2
3	53	94	98	95.99
4	50	99	103	100.42
5	50	105	116	111.6
6	52	118	184	134.90
Всего	306			100.65



а) суммарная биомасса Chironomidae B_{chi}
($F = 2.14, p = 0.06$)



б) доля видов хищников в биомассе Chironomidae B_h/B_{ch}
($F = 1.83, p = 0.106$)

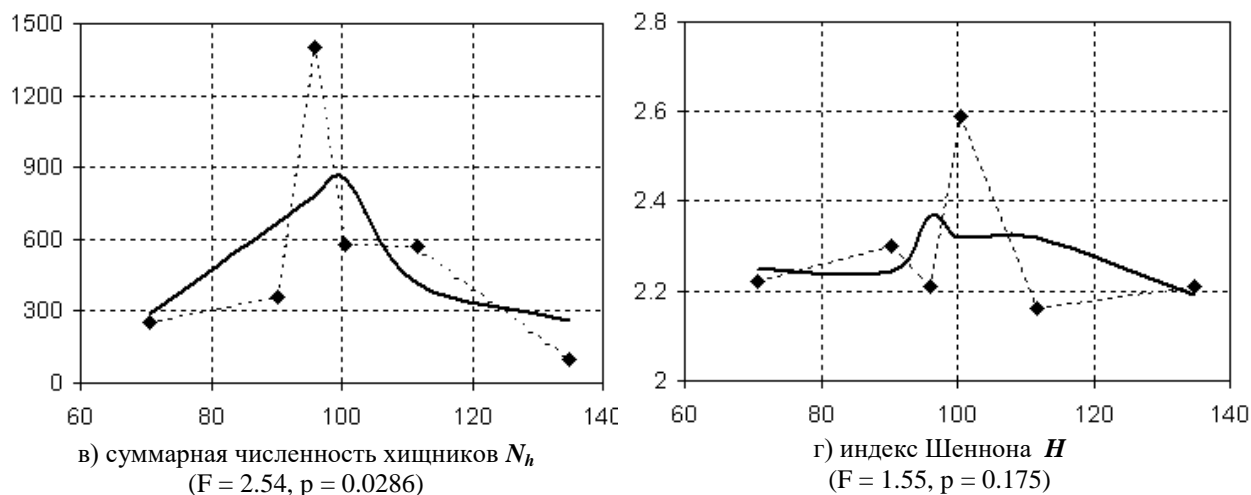


Рис. 6.3. Изменение некоторых гидробиологических показателей от содержания растворенного кислорода (по оси абсцисс в %); пунктирная линия – до выравнивания, сплошная – после.

По результатам расчетов можно отметить четко выраженный "экологический оптимум" для абсолютных значений численности хищников N_h , биомассы хирономид B_{chi} и, в меньшей мере, индекса Шеннона H в области содержания растворенного кислорода $C_{O_2} = 100\%$. В то же время, доля хищных видов B_h/B_{ch} в общей массе хирономидофауны заметно снижается по мере обогащения воды кислородом.

Приемы градиентного анализа могут быть использованы также в том случае, когда отклик Y измерен в порядковой шкале, состоящей из альтернатив (1 – признак присутствует и 0 – в противном случае). Средние интервальные значения отклика заменяются при этом распределением частот встречаемости по оси градиента фактора.

Основные теоретические изыскания градиентного анализа, отличающие его от стандартных процедур дисперсионного анализа, направлены на борьбу с "многовершинностью" частных средних, которая противоречит представлениям о существовании только одного экологического оптимума распределения показателя по градиенту среды.

Одним из простейших способов, позволяющих элиминировать случайные колебания эмпирического тренда и получить плавную "колоколообразную" теоретическую кривую, является метод выравнивания скользящей средней. Предлагается [Розенберг, 1984] определять новые выравненные интервальные средние X_i' по следующим формулам:

$$X_i' = (X_{i-1} + X_i + X_{i+1})/3 \text{ для } k > i > 1 \text{ и}$$

$$X_1' = (2X_1 + X_2)/3, X_k' = (X_{k-1} + 2X_k)/3 \text{ для концевых точек,}$$

где X_i – частные средние исходного дисперсионного комплекса, $i = 1, 2, \dots, k$. Выравнивание способом скользящей средней рекомендуется повторять многократно, до тех пор, пока кривая частных средних по грациям фактора становится достоверно одновершинной, что проверяется сравнением средних по критерию Стьюдента.

Изложенная методика не является "истиной в последней инстанции" (как, впрочем, и любой эмпирико-статистический приём) и требует ряда уточнений и пояснений.

1. Поскольку исследователь, как правило, имеет дело с некоторой ограниченной областью варьирования переменных и выделить в чистом виде роль конкретного фактора среды в ходе наблюдений бывает крайне трудно, "колоколообразная" кривая взаимного влияния в гидроэкологии является скорее исключением, чем правилом (нам пришлось немало потрудиться, чтобы найти подходящий пример). Можно постулировать скорее прямую или обратную линейную зависимость, либо различные фрагменты S-образной кривой, когда в интервалах слева (или справа) влияние фактора вообще отсутствует.
2. Любая, а, тем более, многократная "стрижка неровностей" может утопить в "болоте" усреднения все специфичные "трещинки", которые могут иметь глубокий содержательный смысл. На-

пример, "вздернутые" края эмпирического распределения биомассы хирономид (рис. 6.3 «а») в 1 и 6 интервалах (при небольшом разнообразии по Шеннону) могут быть связаны с закономерным доминированием видов, развивающихся в условиях "нестандартных" биотопов. После сглаживания скользящими средними этот эффект теряется.

3. Вряд ли является плодотворной идея сравнивать два эмпирических распределения по отдельным парам точек с использованием критерия Стьюдента. Эта процедура традиционно поручается в статистике критериям Колмогорова-Смирнова и другим критериям согласия, описанным в разделе 5.1.
4. Определенные сомнения вызывает и правомочность оценки статистической значимости влияния фактора по Фишеру с использованием выравненных значений интервальных средних. Любые суммы квадратов отклонений от некоторых субъективных "средних", являются *смещенными* оценками, поэтому в рассчитанных статистиках исследователь получает искусственно завышенную силу влияния фактора.

Однако, несмотря на достаточно острую критику отдельных работ в области прямого градиентного анализа [Василевич, 1972], он является, безусловно, одним из наиболее эффективных методов ординации, о чем свидетельствуют представленные примеры.

6.3. Интервальные и бинарные структуры

Мем № 34: «...нередко случается, что ловкой обработкой одного и того же материала можно выжать из него при помощи этого приема прямо противоположные заключения» (о методах группировки данных по интервалам. – Ремарка наша) А.А. Чупров [1960].

Формулировка задачи

Пусть имеется ряд наблюдений показателя $Y = (y_1, \dots, y_n)$, принимающий значения на отрезке $[a, b]$. Необходимо найти такое разбиение δ шкалы Y на k интервалов, при котором наилучшим образом используются дифференциально-диагностические возможности признака Y для поиска закономерности его связи с заданным фактором X .

При градиентном анализе или расчете корреляционных отношений возникают нетривиальные вопросы: каков механизм выделения интервалов и на сколько поддиапазонов следует разбивать область варьирования переменных. Нетрудно заметить, что при выделении только одного интервала ($k = 1$) корреляционное отношение $\eta^2_{y|x} = 0$. Если же выбрать разбиение на N интервалов таким образом, чтобы в один поддиапазон попало бы ровно по одной точке, то на той же выборке данных $\eta^2_{y|x}$ становится уже равным 1. Конечно, оба этих разбиения противоречат, если не букве полного корреляционного анализа, то здравому смыслу, однако показывают, что величина корреляционного отношения сильно зависит не только от характера распределения зависимой переменной вдоль оси фактора, но и в значительной мере от способа группировки.

При количественном выражении взаимной корреляции признаков выбор числа групп и границ интервалов – центральная проблема, так как этим обуславливается объективность характеристик связи. Субъективным критерием правильности выбора числа классов k является верная передача типа распределения эмпирических частот данной совокупностью. Если выбрано слишком мало классов, можно потерять характерную картину связи Y с X . При слишком подробном делении на классы можно стусевать реальную картину распределения частот случайными отклоне-

ниями. С точки зрения последователей градиентного анализа, акцент делается на "удобство интерпретации результатов" и предлагается всю область варьирования фактора разбивать на пять равных частей [Миркин, Наумова, 1983].

«Если имеется система долей, например, распределение количественного показателя с относительными частотами (в долях), то общая энтропия вариационного ряда равна сумме частных энтропий по классам распределения» [Плохинский, 1982]. Таким образом, задачу выбора границ интервалов можно определить как, в некотором смысле, минимизацию совокупной энтропии, получающейся в результате группировки.

Дополнительный смысл постановка этой задачи приобретает, когда для нахождения разбиения на поддиапазоны δ некоторой локальной выборки используются свойства распределения другой выборки, сопряженной с анализируемой (т.е. ищется минимум энтропии, основанной на условных вероятностях многомерного распределения нескольких показателей). В этом случае деление на интервалы учитывает реально существующие статистические зависимости факторов и наилучшим образом использует дифференциально-диагностические возможности признака Y для поиска закономерностей его связи с другим признаком X .

Рекомендуемая литература: [Айвазян с соавт., 1983; Алгоритмы и программы..., 1984; Генкин, 1999].

Математический лист

Методы деления количественной шкалы на интервалы

К числу эмпирических способов вычисления числа классов k для выборок умеренных размеров m можно отнести *правило Стуржеса (Sturges)* [Зайцев, 1984]:

$$K = 3.32 \lg(m) + 1 = 1.44 \ln(m) + 1, \quad (6.32)$$

т.е. от 5 до 9 на наших примерах. Другие авторы [Хан, Шапиро, 1969; Лакин, 1990] считают, что число классов k должно быть 12 ± 3 , т.е. разброс мнений весьма велик.

Поскольку нет единых теоретических оснований для оценки качества группировки, то принципиально допустим любой формальный алгоритм, удовлетворяющий определенным требованиям. Можно выделить следующие основные стратегии разбиения на градации:

- *стратегия равной ширины диапазонов* (при этом граничным значениям присваивается ряд "аккуратных" чисел, например, 0, 20, 40, 60, 80, 100);
- *стратегия равной заселенности диапазонов* (граничные значения выбираются таким образом, чтобы в один интервал попало примерно одинаковое количество измерений);
- *сигмальная стратегия* (разбиваемый показатель имеет отчетливое нормальное распределение и выбор границ диапазонов осуществляется в долях дисперсии: одна сигма, две сигмы, три сигмы и т.д. [причем, три сигмы теоретически считаются статистической границей "нормопатология"]);
- *стратегия равных площадей под кривой X между границами диапазонов* (т. е. дискретный аналог определенного интеграла);

Разработаны и практически применяются более строгие способы различных аппроксимаций частотных распределений: оценки Парзена-Надарая [Горелик, Скрипкин, 1984; Фомин, Тарловский, 1986], сглаживание гистограмм [Ивашко, Кузнецов, 1989] и другие оптимизационные стратегии, когда граничные значения выбираются из условия экстремума некоторого критерия. Такие критерии оптимизации разбиения могут быть двух типов:

- *внутренние* (основанные только на свойствах распределения самой разбиваемой выборки);
- с использованием *внешнего дополнения* (например, использующие свойства распределения другой выборки, сопряженной с анализируемой).

Примером оптимального решения с использованием внутреннего критерия является минимизация функционала [Браверман, Мучник, 1983]:

$$F = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^k m_i \sum_{j=1}^{m_i} (y_{ij} - \bar{y}_i)^2 \Rightarrow \min, \quad (6.33)$$

где обозначения те же, что и при расчете корреляционных отношений (6.15)-(6.18).

Все методы, использующие внутренние критерии, предполагают локальный анализ закономерности частотного распределения признака раздельно для каждой выборки X или Y без учета их взаимной статистической обусловленности, что с точки зрения теории информации нельзя считать вполне адекватным.

Использование информационных мер для оптимизации разбиения

Предположим, что каждая величина y_i , $i = 1, 2, \dots, m$, принимающая значения на отрезке $[a, b]$, принадлежит к одному из n классов измерений D_1, D_2, \dots, D_n (это могут быть, например, водоемы, в которых проводились измерения, сезонные признаки или классы качества вод).

Введем разбиение δ диапазона $[a, b]$ на заранее заданное количество интервалов k , границы которых заранее не определены. Обозначим через $p_j(y|D_s)$ частоту попадания значения показателя Y из подмножества $\{y\}_{D_s}$ в j -й диапазон.

Тогда для двух классов D_s и D_l в качестве наилучшего разбиения диапазона $[a, b]$ выбирается такое, которое максимизирует значение меры дивергенции, введенной С. Кульбаком [1967]:

$$J(D_s : D_l; y) = \sum_{j=1}^k (p_j(y|D_s) - p_j(y|D_l)) \cdot \ln \frac{p_j(y|D_s)}{p_j(y|D_l)} \Rightarrow \max \quad (6.34)$$

В общем случае m классов максимизируется величина:

$$J = \sum_{s=1}^n \sum_{l=1}^s J(D_s : D_l; y) . \quad (6.35)$$

Получаемое таким образом разбиение вместе с вероятностями появления значений признака в соответствующих интервалах $p_j(y|D_s)$ называется *интервальной структурой* [Генкин, 1999].

Для двух признаков Y_1 и Y_2 , зная разбиения δ_1 и δ_2 для каждого из них, естественным образом строятся оценки $p_l(Y_1, Y_2|D_s)$ – частоты попадания пары значений анализируемых признаков в прямоугольники со сторонами, равными интервалам соответствующих разбиений. Множество прямоугольников, вместе с оценками вероятностей попадания в них пары значений признаков $p_l(Y_1, Y_2|D_s)$, называется *бинарной (матричной) структурой*.

Таким образом, описываемый методологический принцип анализа различий заключается в том, что сравнению подвергаются не сами наблюдения, а их нормированные частоты попадания в ячейки интервальных или бинарных структур.

Поскольку интервальные и бинарные структуры мало чувствительны к систематическим (а частично и к случайным) ошибкам наблюдений, эти методы нашли широкое применение при обработке клинико-лабораторных признаков. Большой вклад в развитие интервальных методов при решении медико-биологических задач внесли Е.В. Гублер и А.А. Генкин, воплотившие и развившие эти информационные структуры в среде Оболочки Медицинских Интеллектуальных систем [Генкин, 1999].

Рассмотрим принципы формирования интервальных структур и решающих правил при сравнении двух выборок. *Дивергенция Кульбака*, которая имеет смысл средней информационной меры различия двух эмпирических распределений, для этого случая может быть вычислена по формуле

$$J = \sum_{i=1}^k \left(\frac{f_i}{m_1} - \frac{q_i}{m_2} \right) \ln \frac{f_i m_2}{q_i m_1} , \quad (6.36)$$

где f_i, q_i – частоты попадания в i -й интервал примеров сравниваемых выборок, m_1, m_2 – численность обеих выборок. С.Кульбаком [1967] было показано, что статистика

$$J'(x, 1:2) = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} J, \quad (6.37)$$

основанная на дивергенции J , имеет распределение χ^2 с $(k - 1, 1)$ степенями свободы, что позволяет использовать ее для проверки нулевых гипотез. Критерий различия двух выборок $J'(x, 1:2)$, использующий информационную меру Кульбака, предлагается [Генкин, 1999] назвать *J-критерием*, а соответствующий ему уровень значимости обозначать P_J . А.А. Генкиным приводятся формулы, распространяющие использование меры Кульбака на случай сравнения n выборок, однако практических примеров техники такого анализа нам найти не удалось.

В.Н. Вапником с соавторами [Алгоритмы и программы..., 1984] представлен более общий алгоритм нахождения наилучшего разбиения, основанный на минимизации шенноновской энтропии и определяющий как границы диапазонов, так и оптимальное число градаций k .

Результаты расчетов

Рассмотрим выборку значений общей численности хищников-хватателей N_h , причем каждой гидробиологической пробе поставлен в соответствие класс качества воды по шестиступенчатой шкале [ГОСТ 17.1.3.07–82; Драчев, 1964]. Найденные границы интервалов разбиения на 5 интервалов с использованием различных стратегий и критериев представлены в табл. 6.7.

Таблица 6.7

Границы интервалов и количество наблюдений в каждой градации при различных стратегиях деления на 5 диапазонов выборки из численностей хищников-хватателей (описательные статистики: объем выборки $m = 540$, среднее $M = 409.08$, стандартное отклонение $\sigma = 1663$, максимум – 27820, медиана – 80, мода – 0)

Равная ширина интервалов		В долях средне-квадратического отклонения		Минимизация функционала Бравермана – Мучника (6.33)		Равное количество значений без учета повторов		Равномерная "заселенность" интервалов	
Градации	Кол-во	Градации	Кол-во	Градации	Кол-во	Градации	Кол-во	Градации	Кол-во
< 6000	537	от 0 до M	433	< 575	467	< 104	280	= 0	141
< 12000	1	< $(M + \sigma)$	63	< 2640	63	< 260	97	< 55	99
< 18000	0	< $(M + 2\sigma)$	17	< 5900	7	< 560	81	< 160	104
< 24000	1	< $(M + 3\sigma)$	8	< 18278	2	< 1280	53	< 480	104
< 30000	1	> $(M + 3\sigma)$	19	< 27820	1	< 27820	29	< 27820	92

Как видно из представленных результатов, выделение границ интервалов с использованием выборок, типичных для гидробиологических данных, представляет собой далеко не тривиальную проблему. Использование традиционных стратегий равной ширины или долей сигмы, а также большинства формальных критериев, приводит к существенно асимметричному разбиению, которое не может продуктивно использоваться в последующем анализе.

Разделим все множество наблюдений из численностей хищников-хватателей N_h на две выборки: измерения на "чистых" станциях с классом качества вод 3 и менее и измерения на "грязных" станциях. Традиционное сравнение средних с использованием t -критерия Стьюдента не выявляет статистических различий между этими выборками ($p = 0.45$). Осуществим такое разбиение всей области варьирования значений численности на 5 интервалов, которое обеспечивало бы максимальную расщепляющую способность обоих подмножеств, т.е. наибольшую суммарную разность частот (пересчитанную в доли J) в ячейках таблицы сопряженности. Определение оптимального вектора границ диапазонов осуществлялось нами по алгоритму случайного поиска до тех пор, пока значение информационной меры Кульбака J не перестает возрастать (см. табл. 6.8).

В первом столбце табл. 6.8 – интервалы, найденные компьютером, наилучшим образом подчеркивающие различие варибельности численности хищников в рассматриваемых группах. Во втором и третьем столбцах – частота (в скобках – относительная частота) наблюдений численности из соответствующих интервалов. Справа приводятся средние арифметические, не различающиеся по t -критерию, тогда как мера Кульбака J' свидетельствует о значимом ($p_J < 0.00001$) изменении численности N_h в зависимости от уровня гидрохимического загрязнения на станциях наблюдения.

Таблица 6.8

Интервальные структуры численности хищников-хвватателей при относительно низком (группа А – класс качества воды < 4) и высоком (группа В – класс качества воды ≥ 4) уровнях химического загрязнения

Градации численности N_n хищников, экз./м ²	Группа А (класс < 4) $N_1 = 186$	Группа В (класс ≥ 4) $N_2 = 142$	Вклад в информативность	Дивергенция и статистика Кульбака	Средние значения численности в группах А и В и их отличие по t-критерию	
					Гр. А	Гр. В
0 - 3	28 (15.1%)	118 (33.3%)	0.263	$J = 0.307$ $J'(4,1)=37.4$ $P_J < 0.0001$	406.1	390.3
5 - 10	9 (4.8%)	4 (1.1%)	0.030		$t = 0.129$	
12 - 120	62 (33.3%)	99 (28.0%)	-0.025		$t_{кр} = 1.65$	
130 - 140	7 (3.8%)	1 (0.3%)	0.068		$p = 0.45$	
≥ 149	80 (43.0%)	132 (37.3%)	-0.029			

Анализ соотношения составляющих дивергенции Кульбака (вклада в информативность) свидетельствует о том, что различия между группами на 85% обусловлены малыми значениями численности хищных видов зообентоса (диапазон от 0 до 3), которые в "грязных" условиях среды встречаются значительно чаще.

Рассмотрим еще один пример. На гистограммах рис. 6.4 представлено распределение численности некоторых подсемейств и триб хирономид по оптимальным диапазонам разбиения, контрастирующим различия групп наблюдений с разными классами качества воды (группирующий признак тот же, что и в предыдущем примере).

Из всех групп хирономид, которые на рис. 6.4 следуют в порядке убывания информативности, наилучшими индикаторами чистых вод явились виды подсемейства Orthoclaadiinae, в то время, как наименьшей информационной ценностью приходится на подсемейство Tanypodinae. Отчетливая зависимость от уровня загрязнения просматривается и для видов трибы Tanytarsini. Интересной оказалась связь с классом качества для видов трибы Chironomini, частота появления больших численностей которых характерна именно для грязных вод.

С использованием J-критерия, предложенного А.А. Генкиным, для всех проанализированных таксономических подмножеств видов были установлены статистически значимые ($p_j < 0.0003$) отличия между группами с разным уровнем загрязнения.

Таксономические группы	Градации диапазонов		Вклад в информативность	Распределение относительных частот по интервалам структуры, % (заштрихована частота группы с классом качества воды > 3)
	начало	конец		
Подсемейство Orthoclaadiinae, $J = 0.507$	0	10	0.145	
	13	334	0.013	
	340	1440	0.192	
	1480	3160	0.032	
	3300	22880	0.125	
Триба Tanytarsini, $J = 0.404$	0	0	0.15	
	1	40	0.001	
	48	72	0.086	

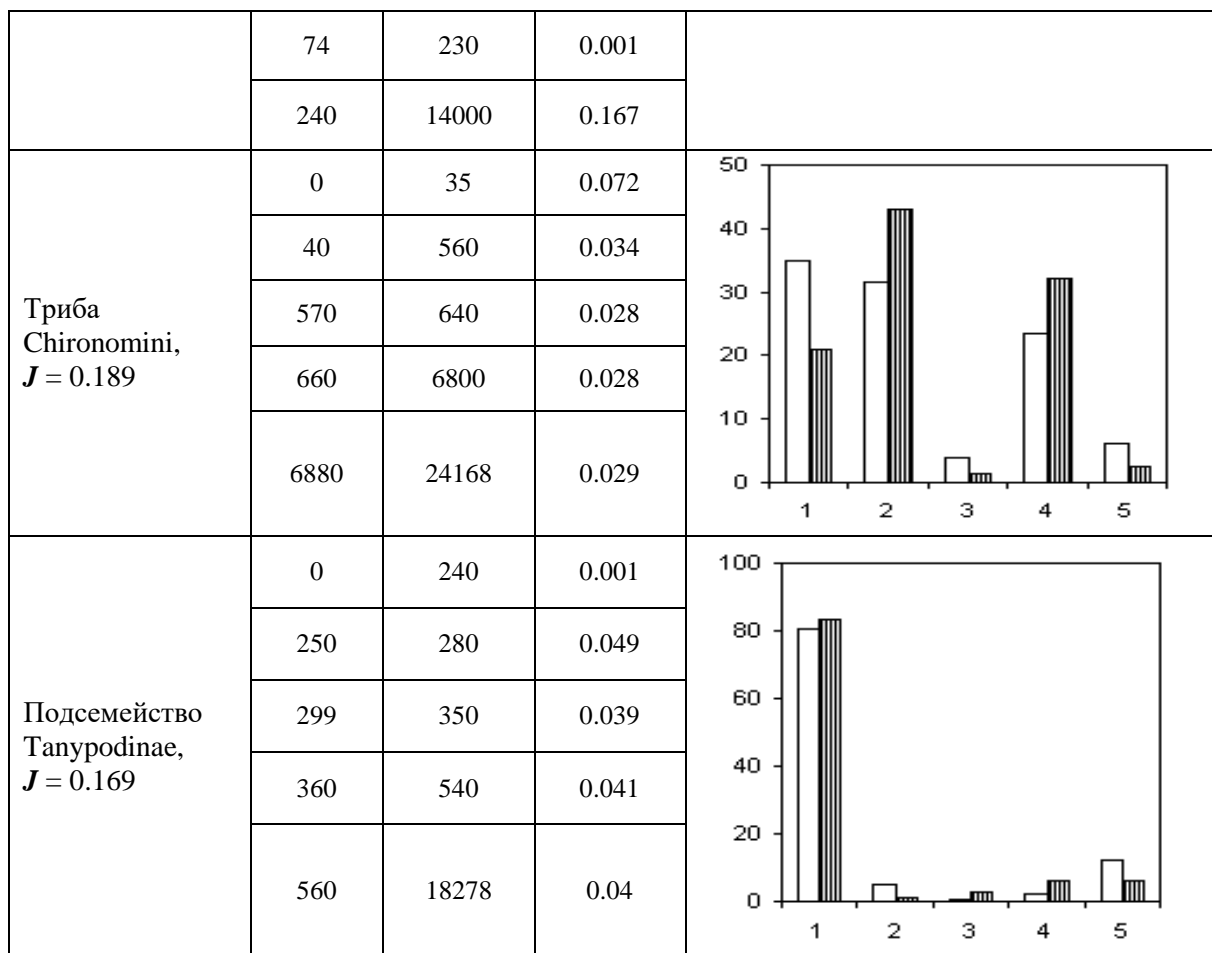


Рис. 6.4. Гистограммы распределения численности по интервалам для различных таксономических групп хирономид

Поскольку для видов Tanypodinae предыдущие методы ставили под сомнение эту гипотезу, можно предположить, что J -критерий (впрочем, как и χ^2) склонен к гипердиагностике вероятности различий между выборками, особенно, в случае большого их объема.

Таким образом, сопряженные таблицы в рамках изложенной технологии оказываются уже не просто набором независимых друг от друга частот появления значений признака в определенных интервалах, а *структурой*, элементы которой – экологически значимые интервалы проявления жизнедеятельности таксономических групп в различных условиях среды.

Многолетний опыт использования описанного метода обработки при анализе лабораторных и инструментальных признаков отчетливо выявил, по крайней мере, 6 различных типов интервальных структур. Приведем некоторые из них.

Самый простой тип – *линейные структуры*, когда частоты для одного условия монотонно возрастают (убывают), а для другого – монотонно убывают (возрастают), т.е. изменяются разнонаправленно. Более сложны для интерпретации часто встречаемые *реципрокные структуры*, в которых нет монотонности, но частоты отрицательно коррелируют. Например, интервальные структуры, у которых частоты для минимальных и максимальных значений статистически неразличимы, а значения центральных частот реципрокны, называются реципрокными в центре (в фитоценологической ординации такие структуры носят названия «клинов»: топоклины, термоклины, галоклины, ценотопоклины и проч.) В некоторых типах структур реципрокность четко выражена только в двух диапазонах изменения признака, справа или слева.

6.4. Нахождение пороговых значений с использованием детерминационного анализа

Формулировка задачи

Пусть имеется две группы числовых переменных $X \equiv (x_1, \dots, x_p)$ и $Y \equiv (y_1, \dots, y_m)$, причем предполагается, что X – независимая переменная ("объясняющий признак") влияет на значения Y – зависимой переменной ("объясняемый признак"). В общем случае предполагается, что обе переменных измерены в количественных шкалах (интервальной, абсолютной или шкале отношений).

Необходимо найти такое значение $E = x_{крит}$, которое может трактоваться на используемом эмпирическом материале как некоторый *порог толерантности*. Синонимами термина $x_{крит}$ являются "предельно допустимая или критическая нагрузка", "экологически допустимый уровень (ЭДУ) нарушающих воздействий" [Левич, 1994] и ряд других словоформ, которые подробно обсуждались в разделе 1.4.

На протяжении всей книги мы неоднократно обращались и будем обращаться к понятию «пороговости», а в этом разделе покажем, как значение $x_{крит}$ может быть получено с использованием несложного алгоритма анализа таблиц сопряженности 2×2 , который в социологических исследованиях именуется как «детерминационный анализ». Использованию этого метода для анализа антропогенных воздействий на пресноводные экосистемы посвящена серия статей коллектива авторов из Московского университета – В.Н. Максимова, Н.Г. Булгакова, А.П. Левича и др. [Замолодчиков с соавт., 1992; Булгаков с соавт., 1995; Левич, Терехин, 1997; Максимов с соавт., 1999, 2000а,б, 2001]. Эти публикации следует трактовать как первый серьезный (хотя и методологически не во всем бесспорный) вклад в разрешение сложных вычислительных проблем оценки границ между областями нормального и патологического функционирования природных объектов.

Математический лист

Основная концепция детерминационного анализа заключается в том, что роль функций традиционного регрессионного или факторного анализа выполняют *правила*, которые авторы метода возводят к силлогистике Аристотеля. *Правило* – это особый математический объект, представляющий суждение вида «Если A , то B » (или сокращенно $A \rightarrow B$), где A , B – соответственно, объясняющий и объясняемый признаки.

Любое правило вида $A \rightarrow B$ всегда рассматривается вместе с двумя характеристиками:

- *точностью* $T = N(A,B)/N(A)$, равной доле случаев B среди случаев A (т.е. доле случаев, в которых правило действует безошибочно);
- *полнотой* $P = N(A,B)/N(B)$, равной доле случаев A среди случаев B (т.е. доле случаев, объясняемых данным правилом),

где $N(A,B)$ – количество случаев, в которых A и B встречаются вместе; $N(A)$ – количество случаев, когда имеет место A безотносительно к B ; $N(B)$ – количество случаев, когда имеет место B безотносительно к A .

Собственно, любое логическое суждение становится правилом детерминационного анализа ("детерминацией") только тогда, если его точность и полнота удовлетворяют некоторым критериям, т.е. находятся в некоторых границах, причем показатель T оценивает надежность, а P – универсальность суждения.

Рассмотрим теперь применимость детерминаций для оценки порога толерантности. Пусть X – нормируемый фактор среды, а Y – оценка экологического состояния. Предположим, что нам известны два числа: $E = x_{крит}$ – значение пороговой нагрузки фактора, которое нам предстоит найти, и $F = y_{норм}$ – пограничное значение на шкале Y , за пределами которой экологическое состояние оценивается как неблагоприятное. В этих условиях корреляционное поле рассеяния всех n значений Y - X можно свернуть до стандартной таблицы сопряженности 2×2 , в ячейках которой находятся частоты (количества измерений), соответствующие приведенным условиям:

Условия для X и Y	$Y \geq F$	$Y < F$	Итого
$X < E$	a	c	$a + c$
$X \geq E$	b	d	$b + d$

Итого	$a + b$	$c + d$	$n = a + b + c + d$
-------	---------	---------	---------------------

В соответствии с этими обозначениями, точность детерминации «Из того, что $X < E$, следует $Y \geq F$ » определяется по формуле

$$T = a / (a+c), \quad (6.38)$$

а ее полнота – по формуле

$$P = a / (a + b). \quad (6.39)$$

Приведенное правило соответствует обратно пропорциональной связи между признаками, хотя в определенных ситуациях (например, для концентрации растворенного в воде кислорода) детерминационное правило может быть сконструировано по альтернативному механизму связи.

В общем случае, граница области экологически допустимых значений фактора двухсторонняя (вспомним, по ком звонят "уиттекеровские колокола"); следовательно, необходимо ввести две пороговые переменные E_1 и E_2 . При этом меняются только столбец условий для X , первое из которых будет выглядеть как « $X \geq E_2$ или $X \leq E_1$ », а второе – как « $E_2 > X > E_1$ », в то время как само правило и выражения для полноты и точности никаких изменений не претерпевают.

Естественно, что можно предложить достаточно большое (из соображений общности можно сказать "бесконечно большое") количество чисел-претендентов для пороговых значений E и F . Предлагается считать оптимальной такую величину E , которой соответствует максимальное значение полноты P при заданной нижней границе точности T . Процедура поиска оптимального решения в детерминационном анализе использует технику полного перебора и сводится к следующему алгоритму:

- рассматривается правило $A \rightarrow B$, где $A = \{ E_1 \leq x \leq E_2 \}$;
- точность $T(E_1, E_2)$ и полнота $P(E_1, E_2)$ правила $A \rightarrow B$ определяются как функции от нижней границы E_1 и верхней границы E_2 интервала X ;
- задается число h , означающее нижнюю границу точности правила, которое должно получиться в результате проведения оптимизации;
- вычисляются функции $T(E_1, E_2)$, $P(E_1, E_2)$, т.е. определяются точность и полнота для всех допустимых значения границ E_1, E_2 интервала X ;
- отбираются те правила, для которых $T(E_1, E_2) \geq h$; если таких правил нет, это значит, что задача оптимизации при заданной величине порога h не имеет решения;
- если такие правила существуют, решением задачи оптимизации служит пара чисел E_1, E_2 , для которых $P(E_1, E_2) = \max$.

В работах В.Н. Максимова с соавторами подробно описана также технология детерминационного анализа совокупного действия нескольких факторов среды в виде многофакторных (до 5) комплексов, поэтому читатель, заинтересованный в изучении проблем синергетики воздействий, может обратиться непосредственно к первоисточникам.

Подробно ознакомиться с концепцией детерминационного анализа можно на сайте разработчиков ДА-программы: <http://www.context.ru>, где также приводятся своеобразные "рецепты" стратегии и тактики статистической обработки. Вот, например, цитата с этого сайта, олицетворяющая тип "агрессивно-самоутверждающего" рекламного мема:

Мем № 35: «В настоящее время имеется около сотни различных методов измерять связь между признаками... Такое "разнообразие методов" не имеет научной ценности, поэтому без ущерба для дела может и должно быть упразднено. Мы сделали это в ДА-системе, предложив пользователям ясную концепцию связи, реализованную в понятии правила (детерминации). Аналогично обстоит дело и с "разнообразием методов" в решении задачи построения новых характеристик на основе заданных. Здесь "многочисленность методов" также имеет фиктивный характер...» [<http://www.context.ru>].

Думается, что любой читатель, памятуя о принципе множественности моделей сложных систем (см. раздел 2.4), будет неприятно озадачен предложением "закрывать за ненужностью" всю

прикладную математику последнего полувека, заменив ее соотношениями полноты и точности двухпольных таблиц сопряженности...

В то же время, используемый в детерминационном анализе алгоритм выбора наилучших границ интервала X с позиций классических методов оптимизации нельзя признать *результативным*. Расчеты по ДА-программе предполагают большую неопределенность конечного результата при практически неконтролируемой свободе выбора параметра условия h -порога точности T .

Будем, например, искать экологически допустимый уровень (ЭДУ) концентрации минерального фосфора в условиях, описанных ниже в таб. 6.9, используя график полноты и точности для различных значений ЭДУ на рис. 6.5. Очевидно, что значение полноты всегда монотонно увеличивается по мере увеличения ширины диапазона E_1-E_2 , причем естественный максимум полноты $P_{max} = 100\%$ достигается при полном охвате всей области варьирования. При этом можно выбрать широкое множество пороговых значений h для точности, которые субъективно могут показаться вполне приемлемыми:

- при $h = T = 60$ – получаем $P = 35.4$ и ЭДУ = 0.023 мг/л;
- при $h = T = 53.1$ – получаем $P = 54.2$ и ЭДУ = 0.036 мг/л;
- при $h = T = 50$ – получаем $P = 68.8$ и ЭДУ = 0.054 мг/л и т.д.

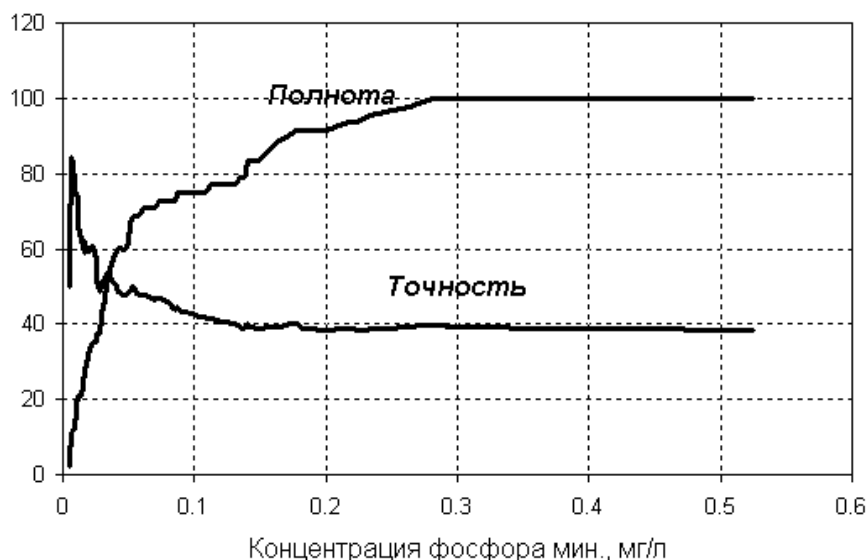


Рис. 6.5. Зависимость полноты и точности детерминационных правил от выбранного порога толерантности для концентрации фосфора

Поэтому, целесообразнее осуществить постановку задачи поиска наилучшего решения в иной интерпретации без параметра h , сконструировав подходящий критерий безусловной оптимизации в виде функциональной комбинации P и T . Например, в теории конструирования библиографических информационно-поисковых систем проблема соотношения полноты и точности (именно отсюда социология заимствовала эти понятия) исследовалась с начала 60-х годов [Аветисян, 1973; Селтон, 1973]. В частности, там широко используется [Попов, 1981, URL] *критерий релевантности* выдачи документов

$$v = (P \cdot T)^{0.5}, \quad (6.40)$$

который при определенных условиях сводится к тетракорическому коэффициенту корреляции Чупрова – см. формулу (6.8) раздела 6.1.

Результаты расчетов

Сформируем по результатам мониторинга сообществ зообентоса на малых реках Самарской области несколько выборок, содержащих сопряженные значения наблюдений пар признаков, один из которых (гидробиологический) считается объясняемым, а другой (гидрохимический) – объясняющим.

Предпосылки детерминационного анализа требуют непрременной трансформации объясняемого признака в шкалу двух градаций. Сама по себе эта процедура не является тривиальной,

поскольку в разделе 6.3 перечислено не менее пяти различных стратегий такого разбиения. В.Н. Максимов с соавторами предлагают делить область варьирования на "два примерно равно заполненных класса" или использовать в качестве границы "среднегодовое значение". Впрочем, анализ устойчивости получаемой оптимальной величины порога толерантности в зависимости от стратегии трансформации гидробиологического показателя в шкалу двух градаций выходит за рамки настоящего изложения.

Сведения об использованных выборках, выбранные условия "благополучности" экосистем и результаты расчетов экологически допустимых уровней (ЭДУ) представим в форме стандартных таблиц сопряженности в табл. 6.9.

Таблица 6.9

Результаты оценки экологически допустимого уровня трех гидрохимических показателей методом детерминационного анализа (затемнены ведущие ячейки таблиц сопряженности, по которым вычислялись критерии полноты P и точности T)

Действующий фактор	Градации фактора относительно критического порога	Неблагополучное состояние	Благополучное состояние	Итого по строкам
БПК ₅ , мгО ₂ /л	ПДК _{вр} – не более 3	Биотический индекс Вудивисса V		
		Менее 3	3 и более	
	Менее 4.02	18	24	42
	Более 4.02	43	14	57
	Итого по столбцам	61	38	$m = 99$
Критерии:	$P = 24/38 = 63.2\%$	$T = 24/42 = 57.1\%$		
Фосфор минеральный, мг/л	ПДК _{вр} – не более (0.05 ÷ 0.2)	Индекс Шеннона H		
		Менее 2.5	Более 2.5	
	Менее 0.036	23	26	49
	Более 0.036	54	22	76
	Итого по столбцам	77	48	$m = 125$
Критерии:	$P = 26/48 = 54.2\%$	$T = 26/49 = 53.1\%$		
Кислород у дна, % от степени насыщенности	ПДК _{вр} – не менее 75	Численность хищников-хвратателей N_h		
		Менее 100 экз/м ²	Более 100 экз/м ²	
	Между 89 и 119	77	117	194
	Менее 89 или более 119	65	47	112
	Итого по столбцам	142	164	$m = 306$
Критерии:	$P = 117/164 = 71.3\%$	$T = 117/194 = 60.3\%$		

По каждой из трех выборок ведущей ячейкой в представленных таблицах сопряженности является «Благополучное состояние экосистемы» и «Действие фактора в диапазоне толерантности (ЭДУ)», а критериями оптимальности сформированной таблицы считаются доли частоты в ведущей ячейке к маргинальным значениям по строке (полнота P) и столбцу (точность T). Диапазоны ЭДУ были рассчитаны по алгоритму соотношения полноты и точности, используемому в программе ДА-анализа.

Найденные значения порогов толерантности по БПК₅ (менее 4.02 мг/л) и концентрации фосфатов (менее 0.036 мг/л) оказались весьма близки соответствующим значениям ПДК для водоемов рыбохозяйственного назначения (см. табл. 3.1). Что касается ЭДУ растворенного кислорода (между 89 и 119%), то можно предположить сильное влияние на его величину характера распределения использованных выборок.

Глава 7. Задачи о классификациях: отношения сходства и порядка для многомерных объектов

7.1. Техника выделения ассоциаций по Браун-Бланке

Мем № 36: «...сообщества – это условности, объединенные в многомерный континуум... При создании классификаций используют прагматический подход. Любая классификация рассматривается как рабочее приближение, и если ее уровень достаточен для практического использования, то дальнейшее совершенствование классификации нецелесообразно» Б.М. Миркин с соавт. [2000].

Формулировка задачи

Пусть имеется матрица наблюдений X размерностью $n \times m$. Столбцами этой матрицы являются исследуемые объекты, соответствующие, в нашем случае, тем географическим точкам наблюдений $i = 1, 2, \dots, n$, где были взяты гидробиологические пробы, а в строках, $j = 1, 2, \dots, m$ будем размещать список видов изучаемых гидробионтов (или некоторых более крупных таксономических групп). Значениями матрицы наблюдений x_{ij} являются конкретные свойства j объекта i , которые имеют смысл обилия (численность, биомасса, балльная оценка) j -го вида и могут быть выражены в шкале произвольного характера.

Задачи классификации экологических сообществ (или задачи *синтаксономии*) сводятся к следующему: необходимо найти для столбцов или строк матрицы наблюдений статистически обоснованные и непротиворечивые структурные отношения сходства и упорядоченности, или иначе – установить классификационную типологию. Если интерпретировать экологические сообщества в традиционных терминах многомерной геометрии, то описания могут быть представлены своеобразными "галактиками" точек в многомерном пространстве осей, представляющих обилия видов [Goodall, 1963; Василевич, 1962, 1969; Миркин, Розенберг, 1978, 1979; Герасименко, Ипатов, 1980; Розенберг, 1984; Миркин, Наумова, 1998]. Задача синтаксономической классификации сводится в этом случае к исследованию закономерностей плотности распределения объектов: выделению наиболее "густых" зон скопления точек и игнорированию "разреженных".

Фундаментальным принципом, используемым для группировки нечетких множеств любой происхождения и имеющим солидное теоретическое обоснование (в том числе, в биоценотических исследованиях [Шмидт, 1964; Куприянова, 1977; Колодяжный, Пааль, 1985; Ястребов, 1991]), является процедура отбора наиболее информативных признаков (т.е. индикаторных видов), играющих ведущую роль в формировании однородных кластеров объектов.

Задача выделения ассоциаций в пространстве видов по Браун-Бланке в своей исходной постановке во многом совпадает с общей задачей распознавания образов "без учителя": на множестве имеющихся описаний необходимо сформировать такие комбинации видов (синтаксоны различных рангов), которые могут оказаться потенциально полезными для эколого-флористической диагностики произвольных сообществ.

Рекомендуемая литература: [Westhoff, van der Maarel, 1978; Миркин, 1989; Миркин, Наумова, 1998; Миркин с соавт., 2000].

Математический лист

Идея классифицировать экологические сообщества по признаку присутствия и отсутствия групп видов возникла независимо в ряде научных направлений, хотя наибольшее развитие она получила в работах Института SIGMA (Station Internationale de Geobotanique Mediterranean et Alpine) в Монпелье (Франция), созданного Жозья Браун-Бланке [J. Braun-Blanquet]²⁶.

В понимании последователей этой школы выделяемые кластеры сообществ – это лишь центры полей рассеивания, образуемые подмножествами индикаторных видов или условными син-

²⁶ История вопроса подробно рассмотрена в ряде публикаций Б.М. Миркина (см., например, [Миркин, Наумова, 1998]).

таксонами, в то время, как виды-эвритопы из классификационных правил исключаются. Конструкции синтаксонов, сформированных по характерным комбинациям диагностических видов, регулируются "Кодексом фитосоциологической номенклатуры" [Barkman et al., 1986; цит. по: Миркин, 1989], который регламентирует определенную последовательность и отличительные особенности синтаксономических рангов.

Синтаксоны эколого-флористической классификации устанавливаются на основе диагностических видов, среди которых различаются следующие типы:

- *константные виды*, встречаемые часто в разных ассоциациях, но не обязательно связанные своим экологическим диапазоном с условиями среды, где распространены ее сообщества;
- *дифференциальные виды*, которые заходят в ассоциацию лишь частью своего диапазона и могут входить в состав нескольких синтаксонов;
- *"верные"* или *характерные виды*, встречающиеся только в одном синтаксоне, экологическая амплитуда которых целиком укладывается в рамки заданных условий существования.

По верности виды подразделяют на пять ступеней: от "абсолютно верных" до "случайных спутников". Поскольку видам присуща экологическая индивидуальность, различают также главные, региональные и локальные "верные" виды: ареал первых совпадает с ареалом ассоциаций, вторые выходят за ее пределы, третьи занимают часть ареала. В современных геоботанических исследованиях характерные виды выступают именно в последнем качестве и чаще всего играют диагностическую роль только в отдельных районах (т.е. являются *локальными*).

Основной классификационной единицей эколого-флористической классификации растительности является *ассоциация* - растительное сообщество определенного флористического состава с единообразными условиями местообитания и единообразной физиономией. Ассоциация, тем не менее, занимает промежуточное положение в общей синтаксономической иерархии, которая имеет следующую последовательность ступеней:

класс \Rightarrow *порядок* \Rightarrow *союз* \Rightarrow *ассоциация* \Rightarrow *субассоциация* \Rightarrow *вариант* \Rightarrow *фация*.

На последних ступенях деления проявляются малосущественные видовые различия, как правило, находящие свое выражение в степени представленности диагностических групп видов.

Перечисленные классификационные положения общей концепции Браун-Бланке – Тюксена на определенном этапе сыграли важную роль в теоретическом обосновании общих конструкций синэкологии. Дальнейший опыт обработки массовых табличных данных показал, что далеко не всегда удается критерии "верных" видов или "эталонных ассоциаций" распространить на сколь угодно широкий круг биотопов или географических регионов [Василевич, 1969]. Однако, в последние 15-20 лет метод Браун-Бланке переживает определенный ренессанс [Миркин с соавт., 2000], связанный как с появлением эффективных компьютерных программ, так и с развитием новых методологических принципов (*дедуктивный метод классификации К. Копецки и С. Гейни, принцип множественности синтаксономических решений* и т.д.; см. [Миркин и др., 1989]).

Отличительной особенностью классификационной техники Браун-Бланке является использование в качестве операционного поля непосредственно первичной матрицы наблюдений, тогда как большинство других алгоритмов кластеризации подвергают анализу вторичную матрицу – матрицу связи признаков или описаний.

Синтетический этап методики Браун-Бланке заключается в последовательном преобразовании описанной выше исходной "валовой" матрицы, где по столбцам расположены точки отбора проб (описания), а по строками – виды растений или организмов. Элементами матрицы являются значения численности или биомассы, которые необходимо пересчитать в баллы обилия от 1 до 9. Основная идея этого этапа метода чрезвычайно проста – необходимо целенаправленно переставлять строки и столбцы матрицы наблюдений до тех пор, пока таблица не приобретет, насколько это возможно, отчетливую блочную структуру. Процесс такой *RQ*-диагонализации первоначальной таблицы приводит к тому, что по ее главной диагонали начинают просматриваться прямоугольные блоки клеток, соответствующие встрече групп близких по экологии видов в группах биоценозов сходных местообитаний.

Существует много версий алгоритмов такого перебора, основанных как на интуитивных, полуэмпирических стратегиях, так и на достаточно строгих формальных методах (например, на использовании математического аппарата задачи о назначениях). В качестве примера приведем краткое описание схемы обработки в модификации, предложенной Х. Элленбергом [Ellenberg, 1956, цит. по: Розенберг, 1984]:

- проводится ранжирование строк (т.е. видов), из которых укомплектовывается три блока: малоинформативные виды **A** высокой (свыше 70%) и **C** низкой (менее 10%) встречаемости, а также информативные виды **B** средней встречаемости;
- блоки **A** и **C** образуют пассивную часть таблицы, а блок **B** – ее активную часть;
- столбцы активной части таблицы ранжируются в соответствии со специально подбираемой системой коэффициентов, учитывающей соотношение разных диагностических групп и расстояние их центра тяжести от главной диагонали активного блока;
- столбцы активной и пассивной части переставляются в соответствии со значениями ранговых коэффициентов, после чего все блоки склеиваются в итоговую синтаксономическую таблицу.

Завершает автоматическую обработку синтаксономический этап, где рассматриваются новые варианты порядка строк и столбцов, при которых виды со сходной ролью в сходных биоценозах оказались бы рядом, с последующей оценкой сформированных ассоциаций. Здесь также приходится пользоваться "ножницами и клеем" и проводить "разрезание" таблицы по столбцам и строкам, только все эти операции выполняются уже "с ведома и по распоряжению" исследователя.

Значительная алгоритмическая завершенность аналитической части метода Браун-Бланке была достигнута в компьютерной программе TWINSPAN, составленной В. Ностом (V. Noest) в постановке М.О. Хилла [Hill, 1979] и дающей хорошие результаты обработки с возможностью гибкой настройки процесса классификации со стороны пользователя.

Результаты расчетов

Сформируем исходную таблицу для обработки по методу Браун-Бланке, используя численность **N** и биомассу **B** видов хирономид, встретившиеся на каждой из 22 станций наблюдений реки Чапаевка. Для сокращения объема публикационного материала из серии наблюдений, полученных для каждого створа реки, было случайным образом отобрано только по одной пробе, в результате чего сформировалась исходная матрица из 22 столбцов и 44 строк.

В качестве показателей обилия использовались значения логарифмов от индекса плотности населения $\ln((N \cdot B)^{0.5})$, округленные до целого и нормированные на интервале от 1 до 9 (подробное описание алгоритма расчетов см. в разделе 6.1). Результаты синтетической обработки по программе TWINSPAN представлены в табл. 7.1.

Визуальный анализ результирующей таблицы позволяет сделать, например, следующие предварительные выводы:

- приписать ассоциативность блокам таблицы {I6:K7}, {R23:S28}, {R39:U44},
- виды 5, 13, 15 трактовать как малоинформативные, в противоположность видам 7, 8, 44;
- ограничившись третьим уровнем разбиения, сформировать 4 группы станций по ассоциированности видового состава: {2, 3, 16}, {13, 15, 11, 20, 21, 8, 10, 23, 14, 17}, {1, 4, 9, 18} и {2, 3, 16}, выделив отдельно станции 7 и 19.

Дополнительная полуавтоматическая синтаксономическая обработка позволяет наполнить формально найденную ассоциативность содержательным экологическим смыслом на основе опыта исследователя-гидробиолога и существенно улучшить познавательную ценность итоговой таблицы.

Используя технику Браун-Бланке, можно находить взаимосвязи не только внутри ассоциаций видов, но и на более высоком трофико-таксономическом уровне. Сформируем исходную таблицу, выбрав в качестве столбцов 14 станций наблюдения на р. Сок и приняв за показатели обилия ранжированные значения $\ln((N_s \cdot B_s)^{0.5})$, где N_s и B_s – средние по всем имеющимся наблюдениям суммарные значения численности и биомассы по отдельным группам водных организмов. В качестве основания для группировки было использовано сочетание системологического признака (подсемейство или триба) и принадлежность к той или иной трофической группе.

Например, из 8 проб, взятых на станции 1 р. Сок, виды трибы Tanytarsini подсемейства Chironominae, относящиеся к детритофагам собирателям, встретились 4 раза с суммарной численностью 10, 80, 210 и 20 экз./м² (т.е. в среднем 40 экз./м² при средней биомассе 0.156 г/м²). Отсюда индекс обилия равен $\ln((40 \cdot 0.156)^{0.5}) = 1.54$ или 2 после нормировки.

Использование показателей обилия видов или таксономических групп, осредненных по всем наблюдениям, полученным на анализируемом участке, вообще говоря, проблематично:

- с одной стороны искусственно завышается реальная встречаемость биологических объектов, т.к. рано или поздно при большом количестве проб в каждой точке могут встретиться все виды, характерные для региона;
- с другой стороны, повышается статистическая надежность результатов по сравнению с выводами, сделанными по одной, случайно взятой пробе²⁷.

Тем не менее, результаты обработки программой TWINSPAN исходной матрицы из осредненных показателей обилия по станциям р. Сок предоставляют возможность сделать, по нашему мнению, более интересные выводы, чем это продемонстрировали расчеты по р. Чапаевка (см. табл. 7.2).

Таблица 7.2

Результаты обработки по методу Браун-Бланке матрицы встречаемости подсемейств и трофических групп хирономид по станциям наблюдений на р. Сок

№ № пп	Таксоны хирономид		A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	Уровни разбиения таксонов	
	Подсемейства/ трибы	Трофические группы	Номера станций наблюдений															
			6	7	10	11	8	9	12	13	14	4	5	1	2	3		
1	Chironomini	Хищ.	2	-	-	-	2	2	3	2	3	2	2	-	-	1	00	
2	Chironomini	Сест	-	-	2	-	-	-	2	2	3	2	-	-	-	-	00	
3	ORTHOCLADIINAE	Детр	2	-	-	-	-	2	1	2	-	-	-	-	2	-	010	
4	Chironomini	Фит/дет	-	-	-	2	-	2	3	3	3	2	-	2	-	2	010	
5	Chironomini	Детр	2	2	2	-	2	2	2	2	2	3	2	2	2	2	01100	
6	ORTHOCLADIINAE	Фит/дет	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	3	2	01100	
7	TANYPODINAE	Хищ.	2	-	-	-	2	2	2	2	3	2	2	2	2	2	01101	
8	Tanytarsini	Детр	2	-	2	-	2	2	2	2	3	3	2	2	2	2	01101	
9	Chironomini	Дет/филь	3	-	-	-	2	3	3	3	3	3	-	3	-	3	01101	
10	Chironomini	Соб/вс	-	-	-	-	2	2	2	3	3	2	2	3	2	2	0111	
11	ORTHOCLADIINAE	Соб/вс	-	-	-	-	-	2	-	2	2	2	2	2	-	2	0111	
12	PRODIAMESINAE	Хищ.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	3	2	3	3	10	
13	DIAMESINAE	Фит/дет	-	-	-	-	-	-	-	-	-	3	-	2	2	2	10	
14	PRODIAMESINAE	Фит/дет	2	-	-	-	-	-	-	-	-	2	2	-	3	2	10	
15	Tanytarsini	Сест	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	-	3	2	2	110	
16	DIAMESINAE	Хищ.	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	-	-	111	
17	PRODIAMESINAE	Сест	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	3	2	111	
18	Tanytarsini	Дет/филь	-	-	-	-	-	-	-	2	-	-	-	2	2	2	111	
19	Tanytarsini	Фит/дет	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2	-	111	
Уровни разбиений станций наблюдений			0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	
			0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1				
			0	0	0	0	1	1	1	1	1							
							0	0	0	0	1							

Примечание: В таблице использованы следующие условные обозначения трофических групп: «Хищ.» - хищники хвататели; «Соб/вс» - всеядные собиратели+хвататели; «Детр» - детритофаги собиратели; «Сест» - сестонофаги+детритофаги фильтраторы; «Дет/филь» - детритофитофаги собиратели + фильтраторы; «Фит/дет» - фитодетритофаги собиратели.

Из анализа табл. 7.2 можно четко выделить несколько пустых и заполненных блоков, например, A12:I19, L12:N19 и т.д. По критерию общей встречаемости групп хирономид легко можно ранжировать четыре кластера станций: {1, 2, 3} с максимальным разнообразием трофических групп, {4, 5}, {8, 9, 12, 13, 14} и, наконец, {6, 7, 10, 11}, где трофическое разнообразие минималь-

²⁷ Авторы сами мучительно размышляют над этой ключевой проблемой применения статистики в гидро-биологии и гидроэкологии, но не рискуют давать никаких рекомендаций ни себе, ни, тем более, читателям.

но. Аналогичную типизацию (визуально или с применением уровней разбиения) нетрудно проделать и с таксономическими группами хирономид, выделив, например, малоинформационные группы 5, 6, 8 и группы 12-19, имеющие существенно узкий экологический диапазон.

7.2. Задача о статистической связи: корреляционный анализ признаков и объектов

Формулировка задачи

Пусть имеется матрица наблюдений X размерностью $n \times m$, строки i которой соответствуют гидробиологическим пробам, $i = 1, 2, \dots, n$, а столбцы j содержат конкретные гидробиологические показатели, $j = 1, 2, \dots, m$, полученные в точке наблюдения i и выраженные в шкале произвольного характера.

Параметры многомерного объекта чаще всего связаны между собой, причем эта связь более или менее тесная. В большинстве случаев она проявляется в виде тенденции, т.е. равномерному увеличению одного из параметров в среднем будет сопутствовать пропорциональное увеличение или уменьшение другого. Необходимо количественно оценить меру стохастической связи между признаками, т.е. уровень их взаимной корреляции.

Рекомендуемая литература: [Василевич, 1969; Кэндалл, Стьюарт, 1973; Миркин, Розенберг, 1978; Плохинский, 1982; Зайцев, 1984].

Математический лист

Корреляционным анализом называется совокупность методов обнаружения корреляционной зависимости между случайными величинами или признаками. В разделе 5.5 нами уже приводилось выражение для коэффициента парной корреляции Пирсона r_{xy} как меры детерминации y и x . В разделе 6.2 коэффициент Пирсона рассматривался в контексте проблемы нелинейности и в сравнении с другими статистиками – корреляционными отношениями. В настоящем разделе осуществим естественное обобщение корреляционного анализа на многомерные объекты.

Геометрическая интерпретация

Числовые значения экспериментальных данных, получаемых при исследовании какого-нибудь конкретного явления, всегда зависят от принятого начала отсчета каждого параметра и от масштаба, в котором этот параметр измеряется. Начало отсчета и масштаб никак не связаны с сущностью явлений, поэтому естественно стремятся к представлению данных в некотором стандартном виде, сопоставивом для различных параметров всего массива измерений. С этой целью принято приводить параметры к так называемой централизованной и нормированной форме.

Центрирование параметра равносильно переносу начала координат в точку, соответствующую арифметическому среднему его значений. Нормирование параметра имеет целью представить параметр не в абсолютных единицах (градусах или $\text{мг}/\text{м}^2$), а в некоторых безразмерных единицах, характеризующих относительное значение признака. Выполним нормирование произвольного измерения j -го признака на i -м объекте по следующей формуле:

$$X_{ij} = \frac{x_{ij} - \left(\sum_{k=1}^n x_{kj} \right) / n}{\frac{1}{n} \sqrt{\sum_{k=1}^n (x_{kj})^2}}, \quad (7.1)$$

где n – количество измерений признака j . Признаки, нормированные по среднеквадратическим значениям, можно сравнивать, несмотря на их возможную физическую неоднородность.

Введем в рассмотрение n -мерное пространство объектов, где каждый признак будет отображаться точкой в многомерном нормированном пространстве с координатами $X_{1j}, X_{2j}, \dots, X_{nj}$. Каждой точке будет соответствовать вектор, направленный из начала координат в эту точку (по математической традиции между ними не делается особенных различий).

Зададимся вопросом о том, какие отношения между векторами в пространстве объектов будут соответствовать корреляционной связи между признаками. Во-первых, следует обратить внимание на то, что все векторы в нормированном пространстве имеют одинако-

вую длину (модуль), равную \sqrt{n} . Во-вторых, если имеется два вектора X_1 и X_2 в n -мерном пространстве и $x_{11}, x_{21}, \dots, x_{n1}$ и $x_{12}, x_{22}, \dots, x_{n2}$ – проекции векторов на координатные оси, то косинус угла между этими векторами равен:

$$\cos(X_1, X_2) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_{i1} \cdot X_{i2} = \frac{\sum_{i=1}^n (x_{i1} - \bar{x}_1)(x_{i2} - \bar{x}_2)}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_{i1})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_{i2})^2}} = r(x_1, x_2), \quad (7.2)$$

т.е. коэффициенту корреляции между признаками x_1 и x_2 .

Если векторы совпадают по направлению, соответствующие им параметры связаны между собой наиболее тесно: косинус угла между векторами и коэффициент корреляции между параметрами равны +1. По мере увеличения угла между векторами связь между параметрами уменьшается и исчезает, когда векторы направлены под прямым углом друг к другу: косинус угла и коэффициент корреляции равны нулю. При дальнейшем увеличении угла между векторами степень связи вновь увеличивается, хотя приращения параметров имеют противоположные знаки. Когда векторы направлены противоположно друг другу, косинус угла и коэффициент корреляции равны -1.

Совокупность коэффициентов корреляции между всеми возможными парами признаков принято представлять в виде корреляционной матрицы $r(x_j, x_k)$; $j = 1, 2, \dots, m$; $k = 1, 2, \dots, m$, которая служит основным "сырьем" для работы многих алгоритмов многомерной статистики (например, в факторном анализе). Матрица симметрична относительно главной диагонали, поскольку $r(x_j, x_k) = r(x_k, x_j)$, а члены матрицы, стоящие на этой диагонали, равны 1, так как $r(x_j, x_j) = 1$.

Как рассматривалось в разделе 6.2, коэффициент линейной корреляции адекватен, если график бинарного отношения двух признаков хорошо аппроксимируется прямой линией. С другой стороны, на количественную оценку уровня связи влияет также закон распределения переменных. По этому поводу существует ряд противоречивых утверждений. Например, М. Кэндалл и А. Стьюарт [1973], а впоследствии и Г. Крамер [1975], утверждают, что формула линейного коэффициента корреляции не зависит от вида распределения и является применимой для большинства случаев закономерностей варьирования данных. Однако сложившаяся практика экспериментальной фитоценологии [Василевич, 1969; Миркин, Розенберг, 1978; Зайцев, 1984] показывает, что использование коэффициента корреляции Пирсона в качестве меры связи оправдано лишь тогда, когда совместное распределение пары признаков нормально или приближено к нормальному и когда встречаемость сравниваемых признаков одинакова (элиминация "d-эффекта", где d – параметр таблицы сопряженности 2×2). Коэффициенты ранговой корреляции Спирмена и Кендалла (см. раздел 5.6) менее чувствительны к законам распределения и отдельным выбросам значений признаков. Поэтому при анализе корреляционных зависимостей обоснованный положительный вывод предпочтительнее делать при наличии значимых корреляций, установленных *всеми* мерами связи.

Формы коэффициента корреляции для разных шкал измерений

Аналогами коэффициента корреляции Пирсона для оценки связи между признаками, измеренными в номинальной шкале, являются многочисленные формулы для мер сходства, описанные в разделе 4.7: коэффициенты Жаккара, Сьеренсена, Рассела-Рао и т.п.

Для признаков, измеренных в порядковых шкалах, кроме ранговых коэффициентов корреляции Спирмена и Кендалла, ориентировочная оценка корреляционной связи может быть получена с использованием любого из многочисленных коэффициентов оценки зависимости признаков в таблицах сопряженности, описанных ранее в разделе 6.1 (например, полихорического коэффициента Чупрова). Для полноты изложения приведем также некоторые меры сопряженности (см. [Миркин и др., 1989]), используемые специально для таблиц ассоциативности 2×2 и имеющие смысл коэффициентов корреляции:

- коэффициент сопряженности Бравайса (он же – показатель подобия Чупрова)

$$C = \frac{ad - bc}{\sqrt{(a+b)(a+c)(d+b)(d+c)}}; \quad (7.3)$$

• коэффициент ассоциации Юла

$$Q = \frac{ad - bc}{ad + bc}; \quad (7.4)$$

где a, b, c, d – значения в клетках таблицы сопряженности 2×2 .

Коэффициент корреляции Фехнера, используя количественные признаки, сводит, тем не менее, анализ связи к подсчету совпавших отклонений от арифметического среднего:

$$R_s = (C - H) / (C + H), \quad (7.5)$$

где C – число совпадений знаков отклонений вариант от соответствующих средних, H – число несовпадающих знаков; $H = n - C$.

Анализ частных и множественных корреляций.

Коэффициенты частной корреляции оценивают "чистую" связь между двумя признаками, элиминируя возможную зависимость между ними за счет других признаков. Если $r(x_1, x_2)$ – коэффициент парной корреляции Пирсона между признаками x_1 и x_2 , а $r(x_1, x_3)$ и $r(x_2, x_3)$ – подобные коэффициенты между x_1 и x_3 и x_2 и x_3 , то коэффициент частной корреляции x_1 и x_2 при исключении зависимости от x_3 вычисляется по формуле:

$$r(x_1 x_2 : x_3) = \frac{r(x_1, x_2) - r(x_1, x_3)r(x_2, x_3)}{\sqrt{r(x_1, x_3)^2 \cdot r(x_2, x_3)^2}}. \quad (7.6)$$

Поскольку термины «связь» и «зависимость» имеют разный философский и статистический смысл, корреляционный анализ в принципе не предназначен для исследования причинно-следственных отношений между явлениями. Однако расчет коэффициентов частной корреляции позволяет косвенно оценивать и направленность взаимного влияния признаков. Например, если значение $r(x_1 x_2 : x_3)$ существенно превышает $r(x_1, x_2)$, то можно предположить, что признак x_3 выполнит роль "статистического шума", заглушающего связь между признаками x_1 и x_2 . Бывают и обратные ситуации, когда коэффициент частной корреляции показывает, что связь между признаками на самом деле обусловлена тем, что они оба зависят от третьего признака и при элиминации его влияния связь пропадает. С использованием похожих формул можно получать *парциальные корреляции*, выравнивая выборки не только по одному, а по двум и более признакам.

Представляет также значительный интерес при изучении структуры экосистем исследование множественных корреляций, т.е. корреляций более чем между двумя признаками. Например, коэффициент множественной корреляции признака x_1 с двумя другими признаками x_2 и x_3 будет иметь по В.И. Василевичу [1969] следующий вид:

$$r(x_1 - x_2 x_3) = \sqrt{\frac{r(x_1, x_2)^2 + r(x_1, x_3)^2 - 2r(x_1, x_2) \cdot r(x_1, x_3) \cdot r(x_2, x_3)}{1 - r(x_2, x_3)^2}}. \quad (7.7)$$

В этой формуле перед корнем следует всегда брать знак «+», следовательно, коэффициент множественной корреляции может принимать значения от 0 до 1.

Методы анализа корреляционной матрицы

На основании значений матрицы $r(x_j, x_k)$ парных коэффициентов корреляций могут делаться разнообразные выводы о природе связей между явлениями, зависящие от направления исследования и изучаемой предметной области. Например, можно отобрать наиболее близкие между собой биотопы или объединить в группы виды гидробионтов, имеющих сходную экологию (точнее, сходное распределение по станциям наблюдения). Следует отметить принципиальную эквивалентность техники Q - и R -анализа, не зависящей от того, подвергаются анализу сами объекты или их признаки: путем простого транспонирования матрицы исходных данных и перемены местами строк и столбцов легко можно заменить тип анализа на противоположный.

Для анализа корреляционной матрицы используется ряд эвристик. Например, Гопкинс [Gopkins, 1957, цит. по: Василевич, 1969], используя в качестве переменных фитоценологические виды, опубликовал методику выделения групп положительно коррелируемых признаков, которые он назвал "основными единицами" (basic unit). Для этого в качестве центров групп выделяются виды, имеющие отрицательные сопряженности, а затем к этим центрам добавляются виды, положительно коррелируемые с ними. В дальнейшем проводится объединение двух или нескольких групп, содержащих общие виды.

На анализе знаков коэффициентов корреляции основана также технология "концептуального моделирования" SOMOD [Качанова, Фомин, 1997]: если у любых трех значимо коррелируемых признаков имеется только одна отрицательная связь или все три связи отрицательны, то в этом случае нарушен знаковый баланс и эмпирические данные образуют "треугольник противоречий", что говорит о нецелостности системы и возможности ее членения на части. При всей внешней привлекательности концепции треугольника непротиворечивых корреляций как простейшего элемента структуры, вряд ли знаковый баланс является универсальным свойством экосистем, а чрезвычайная лабильность статистических связей гидробиологических показателей не позволят сводить анализ поведения биоценозов исключительно к треугольникам противоречий.

Как отмечалось в разделе 2.6, основной способ первичного анализа и визуализации корреляционной матрицы сводится к построению специальных графиков – дендрограмм или дендритов (графов "максимального корреляционного пути").

Наиболее простыми способами построения графических интерпретаций подобного типа являются метод "корреляционных плеяд" П.В. Терентьева [1959; цит. по: Выханду, 1964; Мандель, 1988] и "вроцлавская таксономия", разработанная польскими учеными Вроцлавского математического института [Florek and oth., 1950, цит. по: Василевич, 1969; Ястребов, 1991].

Алгоритм Терентьева осуществляет выделение сильно связанных групп признаков ("корреляционных плеяд") и сводится к следующему. задается пороговое значение коэффициента корреляции r_0 , с помощью которого производится построение срезов корреляционного цилиндра, из которых формируется последовательность подграфов, принимаемых в качестве "плеяд". Узлами этих подграфов являются все рассматриваемые признаки, а ребрами – корреляционные связи по абсолютной величине больше r_0 . При последовательном уменьшении критического уровня, количество ребер увеличивается, плеяды становятся крупнее и начинают сливаться друг с другом. Окончательно выбирается порог r_0 , скорее отвечающий эстетическим вкусам исследователя, чем каким-то формальным правилам.

Результатом вроцлавской таксономии является полный незамкнутый корреляционный путь, который можно отобразить в виде оптимального дерева – дендрита. Он представляет собой графическую структуру, состоящую из m вершин, соединенных между собой $(m - 1)$ ребрами так, что каждая вершина соединена хотя бы с одной другой. Если длину каждого ребра ассоциировать с величиной коэффициента корреляции r_{ij} между вершинами i и j , то оптимальный дендрит имеет максимальную сумму длин соединяющих отрезков из всех возможных. Если принять во внимание, что корреляционная мера по своему смыслу обратна мере дистанции, то граф максимального корреляционного пути идентичен "минимальному дендриту", т.е. дереву минимальной протяженности (minimum spanning tree по [Gower, Ross, 1969]).

Построение полного дендрита начинается с выбора двух наиболее сопряженных признаков, для чего в матрице коэффициентов корреляции определяется максимальное значение r_{ij} , $i \neq j$; признаки i и j образуют две первые вершины графа. Далее в строках i и j находится следующий наиболее сопряженный признак (для определенности – r_{jk} , где $k \neq j, i$), образующий новую третью вершину, соединенную с вершиной j . Далее ищется максимальное значение связи в строках k и j , кроме тех, что уже выбраны. Эта процедура повторяется до тех пор, пока не будут задействованы все признаки. При желании, задавшись пороговым значением r_0 , можно полученный полный граф максимального корреляционного пути разбить на подграфы (плеяды), проводя разрыв между теми признаками, которые вошли в первоначальный граф со значением сопряженности меньше r_0 . Алгоритм вроцлавской таксономии полностью соответствует известному в кластерном анализе методу ближайшей связи (он же – метод "одиночного сцепления" по терминологии

гии Р. Сокала и П. Снита). Это правило строит "волокнистые" кластеры, т.е. кластеры, сцепленные вместе только отдельными элементами, случайно оказавшимися ближе остальных друг к другу.

Оба метода имеют достаточно хорошую иллюстративность при любой размерности m корреляционной матрицы. Метод Терентьева, выделяющий все возможные внутривидовые связи, более чувствителен к величине порога разбиения r_0 и при его снижении возможно лавинообразное загромождение графа малоинформативными ребрами, число которых стремится к $0.5(m-1)^2$ при $r_0 \rightarrow 0$. Количество ребер дендрита в этих условиях никогда не превышает $(m-1)$, однако структура полученных кластеров сильно зависит от случайных флуктуаций корреляционной матрицы: при незначительных изменениях величины хотя бы одного коэффициента r_0 может произойти коренная перестройка всего графа (своего рода "баттерфляй-эффект").

Ряд исследователей полагают недостатком описанных методов визуализации связей «недостаточную адекватность самого коэффициента Пирсона для выделения сопряженных групп видов и игнорирование доверительных интервалов выборочных статистик» [Василевич, 1969]. Но, если отделить "мух от котлет", то становится очевидным, что сами алгоритмы группировки не имеют никакого отношения ни к способу расчета, ни к степени достоверности корреляционной матрицы. По известному выражению Т. Гексли «математика есть только жернов и, засыпав плохое зерно, мы не можем получить хорошей муки». Это дело исследователя - провести необходимый отбор измерений, рассчитать исходную матрицу любым методом, который ему покажется более надежным и адекватным его целям (например, используя в качестве меры связи критерий χ^2 или иной другой индекс) и принудительно обнулить все коэффициенты, которые ему, по каким-то соображениям, покажутся недостоверными.

Результаты расчетов

Сформируем исходную таблицу наблюдений, выбрав в качестве признаков сочетание систематической (подсемейство или триба) принадлежности и трофической группировки видов хирономид – всего $m = 19$ переменных. В строки таблицы по всем имеющимся $n = 453$ наблюдениям зообентоса поместим значения $\ln(N_s)$, где N_s – суммарные значения численностей видов по выделенным группам водных организмов. Включим также три столбца с дополнительными переменными, отражающими условия взятия каждой пробы: температуру воды в придонном слое, глубину и ширину водоема в точке наблюдения.

Матрица парных коэффициентов корреляции Пирсона, рассчитанная по формуле (7.2) и оценивающая тесноту взаимной связи между всеми 22 исходными переменными, представлена в табл. 7.3. На основе матрицы $r(x_j, x_k)$ сформируем граф корреляционных плеяд по П.В. Терентьеву, представленный на рис. 7.1. В качестве первого среза агрегации плеяд коррелируемых признаков примем порог $r_0 = 0.31$.

На этом уровне детализации легко выделяются два следующих обособленных хирономидных комплекса:

- обширная группа, включающая почти всех представителей трибы Chironomini, к которым примкнули некоторые Orthoclaadiinae и хищники Tanypodinae;
- компактная и обособленная группа из всех таксонов Prodiamesinae.

Остальные таксономические группы хирономид мало скоррелированы друг с другом. Снижение порога агрегирования до $r_0 = 0.25$ принципиальных изменений в характер классификации не вносят (на рис. 7.1 вновь обозначившиеся связи отмечены пунктиром).

В целом внутри систематических групп прослеживаются более тесные связи, чем между трофическими группировками. Характерен положительный знак практически всех значимых коэффициентов корреляции между численностями гидробионтов. Это свидетельствует о том, что явление конкурирования за пищевые ресурсы мало распространено среди групп хирономид (что не исключает конкуренцию или замещение на видовом уровне). Наибольшая отрицательная корреляция ($r = -0.24$) между фильтраторами Orthoclaadiinae и детритофитофагами Chironomini вряд ли обусловлена серьезными экологическими причинами.

Корреляция между численностью гидробионтов и физико-гидрологическими условиями биотопа находится приблизительно на том же или более низком уровне, что и между самими гидробиологическими показателями.

Характерно, что такой параметр, как ширина реки вообще не оказывает никакого влияния на обилие зообентоса. Отрицательная корреляция глубины отбора пробы с численностью боль-

шинства групп хирономид не противоречит сложившимся представлениям. Интересным оказалась связь численности с температурой воды в придонном слое: в диапазоне измерений от 7 до 30 °С обилие зообентоса снижается с ростом температуры, что в каждом конкретном случае объясняется особенностями биологии организмов в вегетационный период.

Не претендуя на содержательное истолкование полученных расчетов, отметим, что численность хищников Chironominae (признак 1), температура (признак 20) и глубина отбора проб (признак 21) образуют "треугольник противоречий" по терминологии концептуального моделирования SOMOD при одной отрицательной корреляционной связи. В этом случае частные коэффициенты корреляции после поочередной элиминации гидрофизических показателей оказываются больше соответствующих обычных коэффициентов Пирсона:

$$r_{1,20:21} = 0.227 > r_{1,20} = 0.196 ; \quad r_{1,21:20} = -0.135 > r_{1,21} = -0.068$$

Таблица 7.3

Матрица парных коэффициентов корреляции Пирсона, рассчитанная по численностям подсемейств и трофических групп хирономид (жирным шрифтом отмечены корреляции, значимые при $p < 0.05$)

Признаки	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	22	23	
1 Хищ. ChC	1.00																						
2 Хищ. Di	-0.09	1.00																					
3 Хищ. Or	-0.06	0.10	1.00																				
4 Хищ. Pr	-0.17	0.20	-0.03	1.00																			
5 Хищ. Tn	0.21	-0.03	-0.04	-0.02	1.00																		
6 Вс/Соб ChC	0.30	-0.10	-0.06	-0.17	0.35	1.00																	
7 Вс/Соб Or	0.06	0.02	-0.03	-0.10	0.06	0.13	1.00																
8 Детр ChC	0.38	-0.11	-0.02	-0.10	0.34	0.38	0.06	1.00															
9 Детр ChT	0.06	0.04	-0.01	0.09	0.31	0.23	0.13	0.32	1.00														
10 Детр Or	-0.01	-0.02	-0.02	-0.05	0.16	0.09	-0.07	0.17	0.19	1.00													
11 Сест ChC	0.15	-0.07	0.01	-0.16	0.13	0.31	0.34	0.16	0.13	-0.03	1.00												
12 Сест ChT	-0.08	0.19	0.24	0.18	-0.02	-0.10	-0.05	-0.02	0.05	-0.03	-0.05	1.00											
13 Сест Pr	-0.09	0.04	-0.02	0.37	-0.04	-0.10	-0.04	-0.11	0.04	-0.03	-0.11	0.03	1.00										
14 деТ/филь ChC	0.25	-0.12	0.03	-0.20	0.28	0.47	0.13	0.33	0.10	0.06	0.18	-0.13	-0.13	1.00									
15 деТ/филь ChT	-0.11	0.30	-0.02	0.23	0.04	-0.08	0.02	-0.05	0.02	-0.03	-0.07	-0.01	0.12	-0.06	1.00								
16 Фит/дет ChC	0.22	-0.03	-0.04	-0.08	0.15	0.18	-0.06	0.29	0.17	0.10	0.09	-0.06	-0.05	0.24	-0.06	1.00							
17 Фит/дет Di	-0.13	0.20	-0.02	0.15	-0.00	-0.12	-0.02	-0.11	0.14	0.00	-0.08	-0.03	0.05	-0.11	0.14	-0.03	1.00						
18 Фит/дет Or	-0.20	0.14	-0.01	0.23	-0.04	-0.14	0.08	0.00	0.40	0.16	-0.10	0.18	0.24	-0.24	0.14	-0.04	0.22	1.00					
19 Фит/дет Pr	-0.07	-0.03	-0.02	0.36	0.01	-0.11	-0.09	0.06	0.09	0.08	-0.08	0.16	0.20	-0.10	0.04	-0.03	-0.02	0.16	1.00				
20 Темп. дна	0.20	-0.22	-0.11	-0.32	0.07	0.27	0.05	0.27	-0.07	0.05	0.14	-0.19	-0.20	0.29	-0.14	0.21	-0.25	-0.40	-0.16	1.00			
21 Глубина	-0.07	-0.10	0.01	-0.18	0.08	0.01	-0.11	-0.05	-0.26	-0.05	-0.04	-0.09	-0.12	0.12	-0.09	-0.08	-0.14	-0.36	-0.09	0.30	1.00		
22 Ширина	0.03	-0.08	-0.04	-0.17	-0.01	0.06	-0.01	-0.05	-0.22	-0.04	-0.05	-0.08	-0.10	0.06	-0.08	0.01	-0.11	-0.22	-0.10	0.30	0.50	1.00	
	X ChC	X Di	X Or	X Pr	X Tn	B ChC	B Or	D ChC	D ChT	D Or	C ChC	C ChT	C Pr	T ChC	T ChT	Ф ChC	Ф Di	Ф Or	Ф Pr	Темп.	Глуб.	Шир.	

Примечание: В таблице использованы следующие условные обозначения трофических групп:

«Хищ.» («Х») - хищники хвататели; «Вс/Соб» («В») - всеядные собиратели+хвататели; «Детр» («Д») - детритофаги собиратели; «Сест» («С») - сестонофаги+детритофаги фильтраторы; «деТ/филь» («Т») - детритофитофаги собиратели + фильтраторы; «Фит/дет» («Ф») - фитодетритофаги собиратели.

Условные обозначения семейств и триб: Or - Orthoclaadiinae, Tn - Tanyptodinae, Di - Diamesinae, Pr - Prodiamesinae, Ch – Chironominae (ChC - Chironomini, ChT – Tanytarsini)

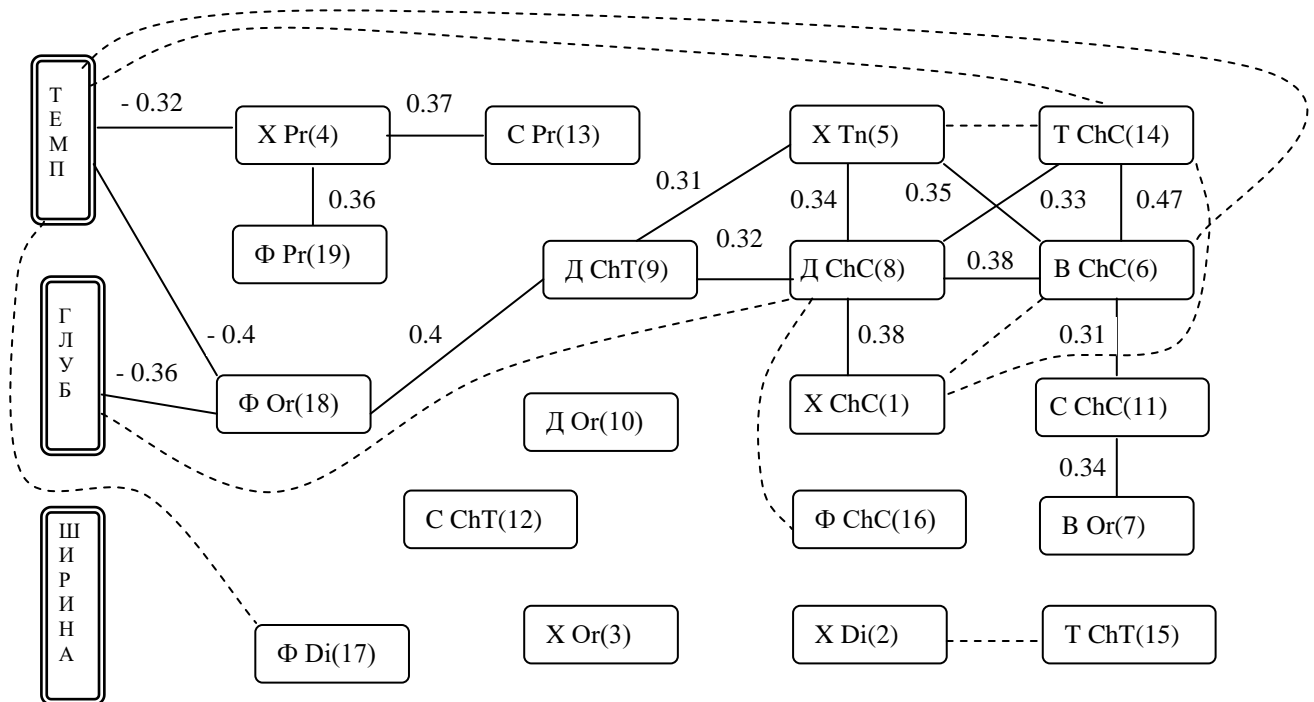


Рис. 7.1. Корреляционные плеяды Терентьева, выделенные из матрицы парных коэффициентов корреляции Пирсона (данные и условные обозначения – из табл. 7.3)

В аналогичной ситуации фитодетритофаги собиратели Orthocladinae (признак 18) с теми же переменными образуют непротиворечивый треугольник с двумя отрицательными связями и частичные корреляции оказываются меньше полных:

$$r_{18,20:21} = -0.326 < r_{18,20} = -0.397 ; \quad r_{18,21:20} = -0.273 < r_{18,21} = -0.357.$$

Множественные коэффициенты корреляции этих гидробиологических признаков с обоими гидрофизическими факторами в обоих случаях увеличиваются:

$$r_{1-20,21} = 0.236 ; \quad r_{18-20,21} = 0.469.$$

Результаты вроцлавской таксономии по той же корреляционной матрице представим в виде минимального дендрита – графа максимального корреляционного пути на рис. 7.2. Анализируя полученный граф, можно отметить, что при пороговом значении $r_o = 0.29$ все множество таксономических единиц хирономид распадается на 4 индивидуальных элемента и 3 группы, качественно совпадающие с корреляционными плеядами Терентьева. Связи с коэффициентом корреляции менее 0.29 представлены на рис. 7.2 пунктиром.

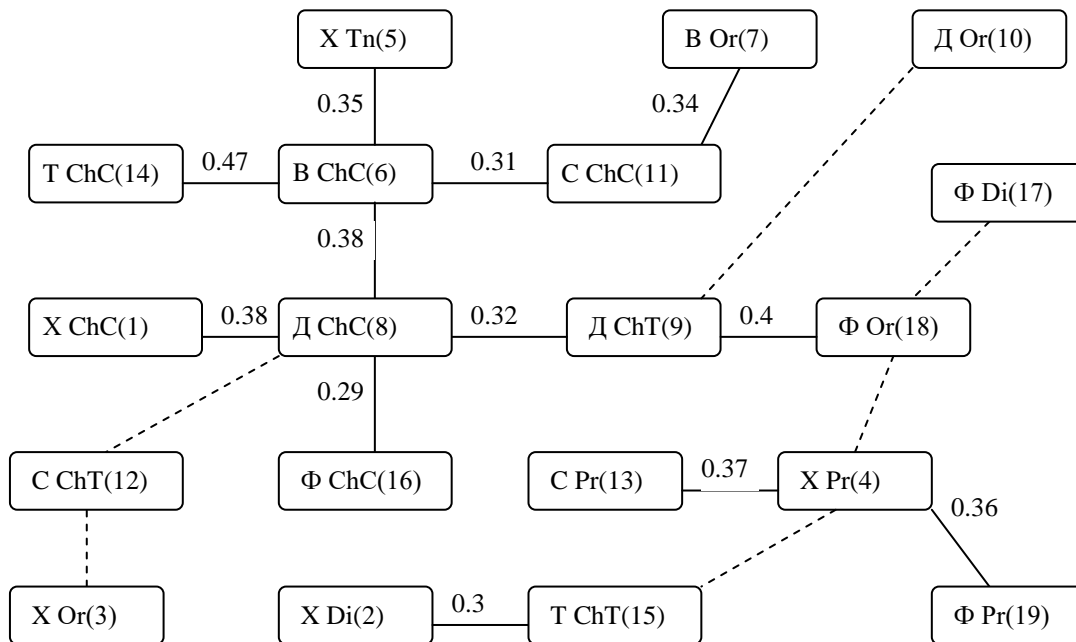


Рис. 7.2. Минимальный дендрит – граф максимального корреляционного пути (данные и обозначения – из табл. 7.3)

Поскольку ранее нами отмечалось, что дендрит и дендрограмма – визуальное отображение одной сущности, представим на рис. 7.3 те же результаты в виде дендрограммы. Т.к. для последней традиционно использование *мер расстояния*, а коэффициент корреляции Пирсона r имеет смысл *меры сходства*, то обычно проводят построение дендрограммы в инверсной шкале $(1 - \text{abs}(r))$, где значения r берутся по абсолютной величине.

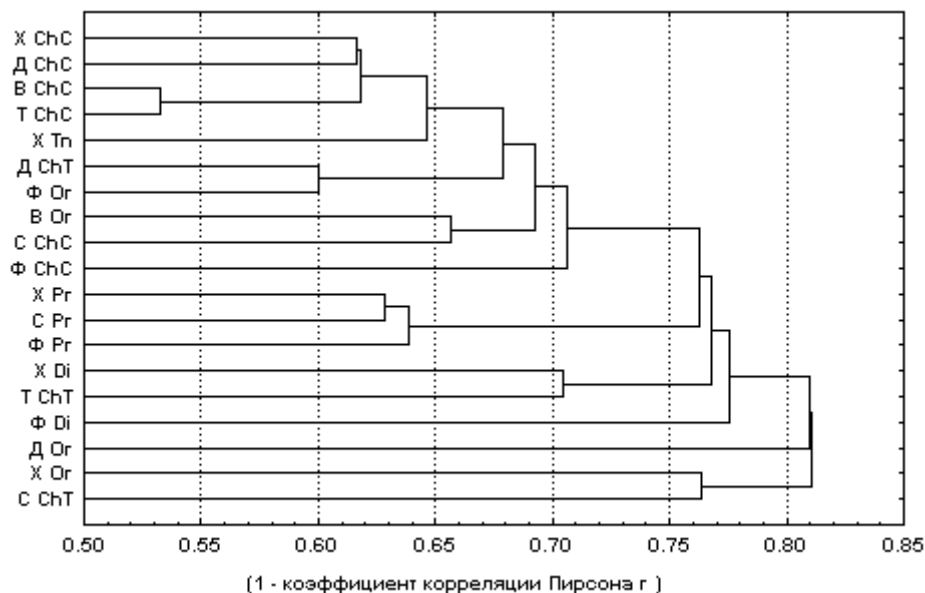


Рис. 7.3. Дендрограмма группировки признаков по методу вроцлавской таксономии (данные и обозначения – из табл. 7.3)

7.3. Задача о разбиении на группы: кластерный анализ

Формулировка задачи

Пусть имеется матрица наблюдений X размерностью $n \times m$, строки i которой соответствуют гидробиологическим пробам, $i = 1, 2, \dots, n$, а столбцы j содержат конкретные гидробиологические показатели, $j = 1, 2, \dots, m$, полученные в точке наблюдения i и выраженные в шкалах измерений произвольного характера.

Если эти данные понимать как точки в признаковом пространстве, то задача кластерного анализа формулируется как выделение "сгущений точек" и разбиение исходной совокупности на однородные подмножества объектов. Кластерный анализ можно рассматривать также как метод редукции (сжатия) некоторого множества данных в более компактную классификацию объектов.

Рекомендуемая литература: [Айвазян с соавт., 1974; Миркин, Розенберг, 1978; Дюран, Оделл, 1980; Классификация и кластер., 1980; Жамбю, 1988; Мандель, 1988].

Математический лист

Кластер определяется, как совокупность точек, лежащих на расстоянии не больше, чем r от некоторого "центра тяжести" в m -мерном пространстве (внутри гиперсферы радиуса r или гиперкуба со сторонами $2r$).

В литературе описывается множество различных методов кластеризации, основанных на использовании матриц сходства, оценивании функций плотности статистического распределения, эвристических алгоритмах перебора, идеях математического программирования и др. Большая часть этих алгоритмов, при всей их несхожести, методически основаны на одной предпосылке – гипотезе компактности, т.е. «в используемом пространстве признаков измерения, принадлежащие одному и тому же классу, близки между собой, а измерения, принадлежащие разным классам хорошо разделены друг от друга» [Кольцов, 1989].

Рассмотрим некоторые алгоритмы, основанные на использовании меры расстояния между объектами D . Введение метрики m -мерного пространства (т.е. способа оценки расстояний) является естественным приемом квантификации свойства схожести объектов: чем ближе между собой объекты в данной метрике, тем они более сходны и наоборот. Без этого само понятие «кластер» во многом теряет смысл, поэтому алгоритмы кластерного анализа часто формулируют в терминах дистанций.

Был предпринят ряд попыток разработать аксиоматический подход к введению метрических мер, согласно которым, например, расстоянием D называется двухместная действительная функция $D(x_1, x_2)$, обладающая следующими свойствами:

- $D(x_1, x_2) \geq 0$ – неотрицательная определенность расстояния (хотя тот же коэффициент корреляции Пирсона принимает и отрицательные значения);
- $D(x_1, x_2) = 0$ тогда и только тогда, когда $x_1 = x_2$ – неразличимость тождественных объектов;
- $D(x_1, x_2) = D(x_2, x_1)$ – симметричность расстояния (хотя в разделе 4.7 приводятся примеры несимметричных мер);
- $D(x_1, x_2) + D(x_2, x_3) \geq D(x_1, x_3)$ – неравенство треугольника (длина любой стороны треугольника не больше суммы длин двух оставшихся).

Более конкретная математическая формулировка не имеет однозначного смысла, поскольку разные субъекты вкладывают в эту аксиоматику неодинаковое содержание. Проблемы выбора конкретных выражений для мер близости или расстояния между объектами подробно обсуждались нами в разделе 4.7.

Пусть мы имеем симметричную матрицу расстояний D между объектами исходной матрицы наблюдений:

$$D = \begin{pmatrix} 0 & d_{12} & \dots & d_{1p} \\ d_{21} & 0 & \dots & d_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ d_{p1} & d_{p2} & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

Компоненты матрицы **D** могут быть рассчитаны с использованием любой из перечисленных выше концепций или формул, что не имеет значения для работы собственно алгоритмов таксономии.

Наиболее распространенную группу эвристических методов кластеризации составляют методы, основывающиеся на иерархической агломеративной процедуре (от латинского *agglomerato* – присоединяю, накапливаю). Эти алгоритмы дают лишь условно-оптимальное решение в некотором подмножестве локальных разбиений (кластеров), однако достоинством этих методов является простота вычислений и интерпретации полученных результатов. Смысл иерархической агломеративной процедуры заключается в следующем. Перед началом кластеризации все объекты считаются отдельными кластерами, т.е. имеется $p = n$ кластеров, каждый из которых включает по одному элементу. На первом шаге алгоритма определяются два наиболее близких или сходных объекта, которые объединяются в один кластер, общее количество которых сокращается на 1 ($p \rightarrow p - 1$). Итеративный процесс повторяется, пока на последнем ($p - 1$)-м шаге все классы не объединятся. На каждом последующем шаге агломеративной процедуры требуется пересчет лишь одной строки и одного столбца матрицы **D**, т.е. рассчитываются расстояния от образованного кластера до каждого из оставшихся кластеров.

Процедура иерархического кластерного анализа предусматривает возможность группировки как объектов (строк матрицы данных), так и переменных (столбцов). В последнем случае роль объектов кластеризации играют признаки исходной матрицы, например, виды гидробионтов.

Использовать построенную дендрограмму для выделения того или иного количества отдельных кластеров можно путем "разрезания" этой дендрограммы на определенном значении шкалы **D**. Фактически это означает, что мы проводим горизонтальную линию, пересекая дерево связей в том месте, где наблюдается максимальный скачок в изменении межкластерного расстояния.

Для определения расстояния между произвольной парой кластеров $\{X_i\}$, $i = 1, \dots, k_1$ и $\{Y_j\}$, $j = 1, \dots, k_2$ с использованием различных версий алгоритмов классификации были сформулированы следующие подходы:

- метод «*одиночной связи или минимального локального расстояния*» (single linkage), знакомый нам по "вrocławской таксономии", когда для включения объекта в кластер требуется максимальное сходство всего лишь с одним членом кластера;
- метод «*полной связи или максимального локального расстояния*» (complete linkage), когда последовательность сцепления между кластерами определяются наибольшим расстоянием между любыми двумя объектами в различных кластерах (т.е. "наиболее удаленными соседями");
- метод «*средней связи Кинга или попарного арифметического среднего*» (unweighted pair-group method using arithmetic averages), где мера сходства между "кандидатом" и членами кластера устанавливается как арифметическое среднее

$$D_3 = \sum_{i=1}^{k_1} \sum_{j=1}^{k_2} d(X_i, Y_j) / k_1 k_2 \quad (7.8)$$

Выделяется также совокупность методов, использующих статистические расстояния между кластерами (*метод групповых средних, центроидный метод, метод Уорда* и т.д.), где предполагается объединение, приводящее к минимизации суммы квадратов отклонений между каждым объектом и центром кластера, содержащим этот объект. Например, в методе Уорда [Ward, 1963] используется мера:

$$D_4 = \frac{k_1 k_2}{k_1 + k_2} (\bar{X} - \bar{Y})^T (\bar{X} - \bar{Y}), \quad \text{где} \quad \bar{X} = \sum_{i=1}^{k_1} x_i / k_1; \quad \bar{Y} = \sum_{j=1}^{k_2} y_j / k_2 \quad (7.9)$$

Кроме иерархических методов классификации большое распространение получили также различные итерационные процедуры, которые пытаются найти наилучшее разбиение, ориентируясь на заданный критерий оптимизации, не строя при этом полного дерева. В начале последовательных итераций в качестве центра выбирается один из элементов и формируется кластер из элементов, удаленных от него не далее чем на r . Далее процедура повторяется для остальных элементов, причем в качестве очередного центра выбирается, например, "типическая" точка – лежа-

щая на минимальном расстоянии от центра оставшегося множества объектов. После выполнения очередного шага выясняется, достигнуто ли желательное разбиение. Существуют различные методы определения критерия остановки процедуры:

- получено определенное заранее количество кластеров;
- все кластеры содержат более определенного числа элементов;
- кластеры обладают требуемым соотношением внутренней однородности и разнородности между собой.

На первом условии основывается наиболее популярный алгоритм – *метод k-средних МакКина* [Фрей, 1967], в котором сам пользователь должен задать искомое число конечных кластеров, обозначаемое k . Принцип классификации заключается в следующем:

- выбираются или назначаются k наблюдений, которые будут первичными центрами кластеров;
- остальные наблюдения приписываются к ближайшим заданным кластерным центрам;
- текущие координаты первичных кластерных центров заменяются на кластерные средние;
- предыдущие два шага повторяются до тех пор, пока изменения координат кластерных центров не станут минимальными.

Наиболее важным свойством, используемым при анализе, является плотность распределения объектов внутри кластеров. Это свойство дает нам возможность определить кластер в виде скопления точек в многомерном пространстве, относительно более плотного по сравнению с иными областями этого пространства, которые либо вообще не содержат точек, либо содержат малое количество наблюдений. Несмотря на достаточную очевидность этого свойства, однозначного способа вычисления такого показателя плотности не существует. Наиболее удачным показателем, характеризующим компактность "упаковки" многомерных наблюдений в данном подмножестве, является дисперсия расстояния от центра кластера до отдельных его точек.

Другим примером критерия однородности может быть, например, функция, описанная А.А. Дорофеюком [1971]:

$$I_m = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m D(p, p) - \frac{2}{m(m-1)} \sum_{q=1}^{m-1} \sum_{p>q} D(p, q) \rightarrow \max, \quad (7.10)$$

значения которой подсчитываются для всех возможных вариантов разбиения исходного множества на m классов. В этой формуле $D(p, p)$ – среднее сходство между собой всех векторов, попавших в одну группу, а $D(p, q)$ – среднее сходство по всем парам векторов из разных групп p и q :

$$D(p, p) = \frac{2}{n_p(n_p-1)} \sum_{x=1}^{n_p-1} \sum_{y>x} D(x, y) \quad D(p, q) = \frac{1}{n_p n_q} \sum_{x \in q} \sum_{y \in p} D(x, y), \quad (7.11)$$

где n_p и n_q – число элементов в группах p и q .

Результаты расчетов

Основной задачей классификации в гидробиологических исследованиях является установление отношений сходства между станциями наблюдений, створами, участками рек и целыми водоемами. В общем случае, на нижнем уровне этой иерархии – станции – может быть сделано несколько проб, составляющих некоторый статистический "образ" водного объекта.

Выполним в терминах меры сходства анализ воспроизводимости повторяющихся измерений, сделанных в разное время в окрестности одной географической точки. Для каждой малой реки Самарской области рассчитаем по формулам (7.11) А.А. Дорофеюка два показателя:

- среднее внутригрупповое расстояние измерений, сделанных на одной станции $D(p, p)$;
- среднее межгрупповое расстояние проб, полученных на разных станциях наблюдения $D(p, q)$.

Воспользуемся следующей метрикой для оценки сходства между измерениями, которая, по нашему субъективному мнению, наилучшим образом отражает отношения сходства между измерениями в многомерном пространстве видов.:

- для численности N_i и биомассы B_i каждого вида в пробе рассчитаем значение

$$X_i = \ln((N_i * B_i)^{0.5});$$

- пронормируем полученные величины на интервале от 0 до 1 по формуле

$$Y_i = (\max X_i - X_i) / (\max X_i - \min X_i);$$

- используем в качестве меры расстояния между пробами $D(x_i, x_k)$ манхэттенское расстояние, равное сумме разностей нормированных $\ln((N_i * B_i)^{0.5})$, вычисленных по всем видам – см. формулу (4.32) из раздела 4.7.

Результаты расчетов, представленные в табл. 7.4, показывают, что изменчивость видового состава и показателей обилия в измерениях, взятых внутри одного биотопа, весьма велика в зависимости от даты наблюдения, конкретной точки отбора проб и прочих факторов. При этом отсутствуют статистически значимые отличия в уровне внутригрупповой вариации манхэттенского расстояния между пробами одной и той же станции и вариацией этого показателя в пробах, взятых на разных станциях той же реки. Иными словами, все пробы, взятые в пределах одной реки из перечисленных в таблице 7.4, принадлежат к одной генеральной совокупности измерений.

Таблица 7.4

Среднее количество проб, взятых на одной станции наблюдения, количество пар сравниваемых между собой измерений N_D , среднее манхэттенское расстояние M_D и его доверительный интервал E_D (отдельно для проб, относящихся к одной и той же станции и к разным станциям)

Наименование реки	Проб на станции	Внутригрупповое среднее			Межгрупповое среднее		
		N_D	M_D	E_D	N_D	M_D	E_D
Чапаевка (верховья)	10.8	812	11.82	± 0.40	7573	13.63	± 0.14
Чапаевка (низовья)	12.9	647	5.73	± 0.31	4106	6.08	± 0.11
Сок	6.8	365	14.95	± 0.63	3913	15.95	± 0.20
Байтуган	3.9	47	18.93	± 1.96	388	16.96	± 0.72
Маза	2.6	20	10.87	± 1.56	170	11.34	± 0.56
Тайдаков	2.6	10	10.42	± 3.64	45	13.25	± 1.29
Муранка	2.5	20	11.20	± 2.93	151	11.35	± 0.98

К аналогичным выводам можно прийти, сравнив вариационный ряд дистанций между парами измерений, принадлежащих одной реке, с межгрупповыми мерами расстояния проб из разных рек. Матрицы исходных данных, представленные пробами из разных водных объектов, в нашем случае оказались очень трудно статистически разделимы.

В дополнение к этому, если ставится задача классифицирования рек или станций наблюдений, то следует принять во внимание следующие малоприятные обстоятельства, связанные со спецификой детерминационного кластерного анализа:

- невозможно использование полного объема повторяющихся данных, т.к. метод работает только с непересекающимися и необъединяемыми строками исходной матрицы наблюдений;
- поскольку отсутствуют методики адекватного "усреднения" проб одной станции, для проведения классификации объектов необходимо по каждому из них отобрать только одну пробу, которая, по субъективному мнению исследователя, наилучшим образом отражает гидробиологические особенности данного биоценоза;
- если для классифицируемого объекта (станции, створа, участка, реки и т.д.) сделано более, чем одно измерение, то остальные пробы будут игнорироваться.

Таким образом, на этапе подготовки данных для кластерного анализа исследователь оказывается в весьма затруднительном положении: какие измерения следует выбрать за "опорные", наилучшим образом характеризующие каждый классифицируемый объект, принимая во внимание, что от этого выбора будет сильно зависеть конечный результат группировки.

Выберем из 97 измерений, сделанных на 14 станциях наблюдения р. Сок, по одной пробе для каждой станции, отобрав их из общего множества примеров по критерию максимального биологического разнообразия (наибольшее количество видов). Общее количество видов зообентоса, которое встретилось в этих пробах, составило 155.

Выполним кластерный анализ участков реки с использованием различных методов объединения и мер расстояния:

- евклидова расстояния в пространстве показателей обилия 155 видов, рассчитанных по формуле $\ln((N \cdot B)^{0.5})$;
- евклидова расстояния с использованием показателя обилия, пронормированного от 0 до 1 по максимальному размаху для каждого вида;
- меры сходства по Сьеренсену.

Полученные дендрограммы, представленные на рис. 7.4, свидетельствуют о том, что при выполнении кластерного анализа исследователь находится в тяжелом комбинаторном положении, будучи поставлен перед необходимостью выбора не только комплекта исходных данных, но также метрики расстояния и алгоритма объединения. Например, для тех же 14 классифицируемых станций р. Сок можно использовать не менее 5 общеупотребимых формул для матрицы сходства и не менее 5 широко распространенных методов построения иерархической классификации. В результате для 14 объектов мы получаем 25 возможных вариантов разбиений, т.е. деревьев, в разной степени отличающихся друг от друга. В итоге неопределенность исходных данных подменяется другой, еще более туманной – неопределенностью результатов классификаций.

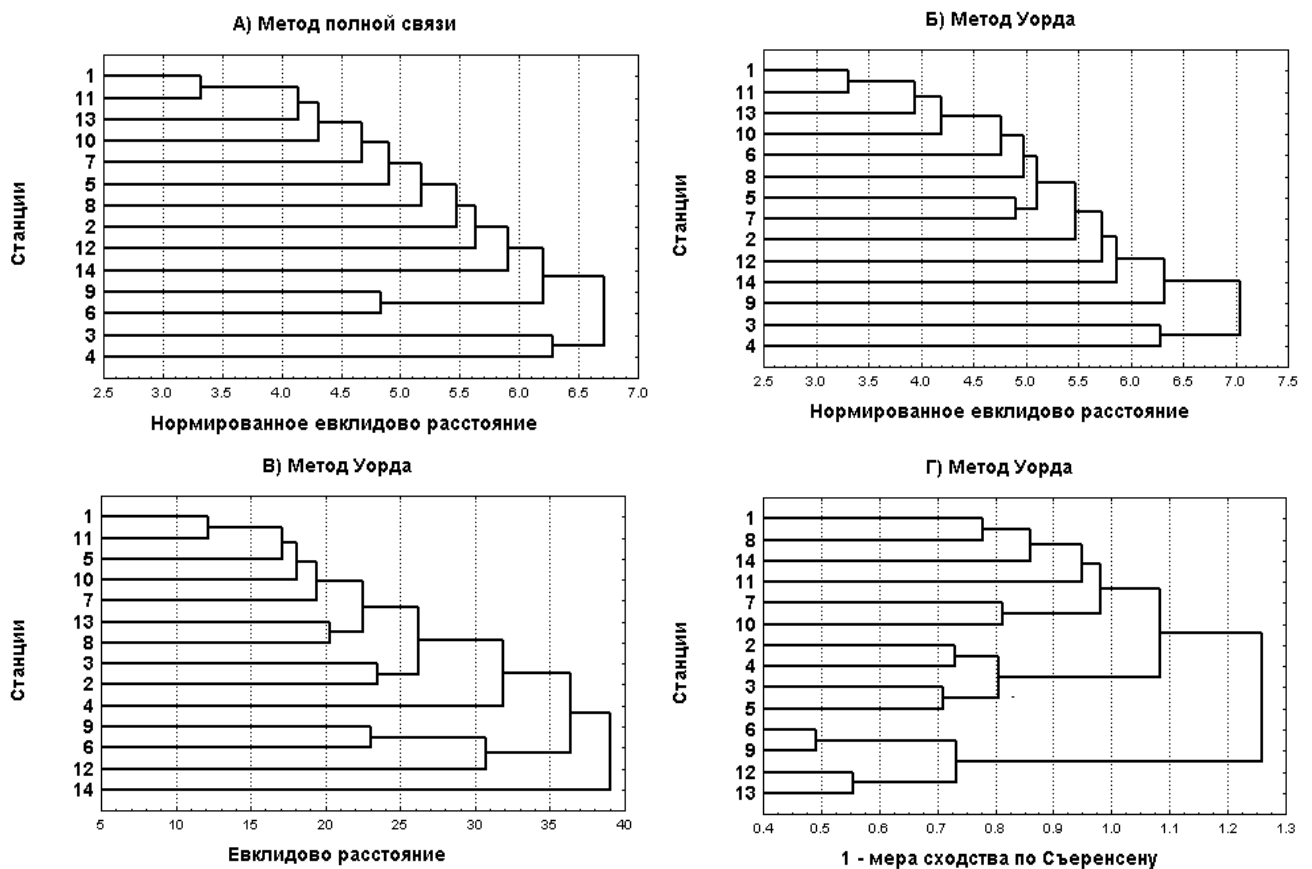


Рис. 7.4. Дендрограммы классификации станций наблюдения р. Сок по пробам зообентоса, выполненные с использованием различных методов и мер расстояний

Существуют некоторые, в разной степени логически размытые рекомендации по выбору технологии расчетов. Например, считается, что более изощренный центроидный метод или алгоритм Уорда приводят к хорошим результатам, хотя при сравнении фиг. «А» и «Б» рис. 7.4 серьезных изменений не обнаруживается.

Евклидово расстояние зависит только от нескольких "доминирующих" разностей, поскольку они возводятся в квадрат, и практически игнорирует длинный "хвост" небольших расхождений. Если это расстояние основывается на натуральных показателях обилия, то его величина определяется 2–3 видами с наибольшей численностью или биомассой. Если, однако, используются нормированные исходные данные, то на первый план в формировании расстояния выдвигаются редкие

виды вне зависимости от их абсолютной численности. Напомним, что мера сходства по Сьеренсену вообще не учитывает обилия, а только факт наличия или отсутствия каждого вида бентоса.

Любой класс (таксон, кластер), состоящий из некоторого подмножества реальных объектов и полученный по технологии "без учителя" – всегда некоторая умоглядная теоретическая конструкция, созданная из субъективных предположений или на основе эвристических алгоритмов, качество которой принципиально невозможно точно измерить. Сказать, например, что классификация «Г» лучше, чем «В», может только коллектив компетентных экспертов, основывающийся, чаще всего, не на формальных критериях, а на интуитивном опыте. Правда, один из авторов [Розенберг, 1975] предлагал в качестве формализации такого сравнения вычисление *меры диссонанса* полученной классифицированной матрицы (например, матрицы сходства, упорядоченной по последовательности «Г») от "случайно перемешанной" матрицы (т.е. матрицы, упорядоченной по случайной последовательности станций); чем больше мера диссонанса, тем лучше классификация. Этот эвристический прием был весьма эффективно использован при анализе мозаичности травянистых растительных сообществ на ценоотическом уровне [Миркин, Розенберг, 1977а].

Нетривиальной является и задача оценки близости (предупорядоченности) двух произвольных деревьев, состоящих из одних и тех же "листьев". Чтобы дать точный ответ, значимо ли отличаются друг от друга варианты классификаций, следует провести, своего рода, кластерный анализ результатов кластерного анализа [Миркин, Черный, 1970; Наумова, 1979]. Например, В.Л. Андреев [1979а] рекомендует использовать в этом случае графо-аналитические методы, известные под общим названием "поиск лидера" и основанные на ранговой корреляции последовательностей агрегируемых элементов, однако, подробное рассмотрение этой задачи выходит за рамки нашей монографии.

7.4. Оценка различий многомерных комплексов наблюдений

Формулировка задачи

Пусть в матрице наблюдений X каждый j -й столбец, $j = 1, 2, \dots, m$, представлен гидробиологическим показателем, а каждая i -я строка, $i = 1, 2, \dots, n$, описывает гидробиологическое измерение, выполненное в некотором пространственно-временном аспекте. Предположим, что каждой строке i поставлен в соответствие некоторый качественный признак (фактор), на основании которого общую многомерную выборку можно сгруппировать в частные независимые случайные выборки: если фактор имеет p уровней A_1, A_2, \dots, A_p , то при каждом уровне A_k фактора, $k = 1, \dots, p$, имеется n_k измерений. Необходимо проверить, насколько статистически значимо различаются между собой блоки матрицы X , относящиеся к разным уровням фактора A , и количественно оценить меру таких различий.

Как и в случае дисперсионного анализа, фактор, который оказывает влияние на количественные результаты измерений, имеет принципиально нечисловую природу и может соответствовать географическому объекту, где была взята проба, категории водоема или сезонному периоду.

Рекомендуемая литература: [Урбах, 1963; Дуда, Харт, 1978; Горелик, Скрипкин, 1984; Андреев, 1979а]

Математический лист

Статистические методы

Использование детерминистических методов кластеризации, описанных в разделе 7.3, оправдано в некоторых частных случаях, когда по условию задачи нужно получить простые решения или невозможно использовать вероятностные методы. Преимущества последних заключается в том, что они допускают наличие ошибок и неполноту знаний о сравниваемых объектах и оперируют с плотностью распределения вероятностей переменных.

В общем случае параметрические методы анализа многомерных наблюдений, принадлежащих к разным классам, основываются на формуле условных вероятностей, предложенной в конце XVIII в. малоизвестным священником и прекрасным английским математиком Томасом Байесом:

$$P(x) P(A_k/x) = P(A_k) P(x/A_k) , \quad (7.11)$$

где $P(x)$ – функция распределения плотности вероятности всех данных в m -мерном пространстве независимо от того, к какому классу они принадлежат; $P(A_k)$ – вероятность наблюдения класса A_k ; $P(A_k/x)$ – условная вероятность того, что вектор x принадлежит классу A_k ; $P(x/A_k)$ – условная вероятность получения для класса A_k вектора данных x .

Формула Байеса позволяет вычислить вероятность справедливости некоторой гипотезы на основании принятых априорных вероятностей. Этот метод в строгом смысле оправдан, если альтернативные гипотезы (в данном случае принадлежность измерения к некоторому классу) основываются на функциях плотности вероятностей, т.е. известны законы распределения случайной величины, которые могут быть оценены по эмпирическим данным.

Как отмечалось выше, в принятой модели данных – таблице наблюдений X – совокупность n измерений может быть представлена "облаком" n точек в m -мерном пространстве, которое в целом можно охарактеризовать положением и степенью компактности. В большинстве методов многомерного анализа предполагается, что имеет место нормальное распределение случайной величины x_{ij} . Это связано с тем, что центральная предельная теорема для одной величины распространяется и на многомерный случай, т.е. последовательность сумм независимых одинаково распределенных случайных векторов сводится к многомерному нормальному распределению $N(\mu, \Sigma)$ с вектором $(m \times 1)$ из средних μ и матрицей $(m \times m)$ ковариаций Σ .

Для определенности рассмотрим задачу разделения двух множеств объектов (множества "Класс 1" и множества "Класс 2"). Очевидно, что два множества будут разделяться тем лучше, чем больше расстояние между их центрами. Кроме того, задача разделения множеств упрощается при условии сужения диаметров этих множеств, если фиксировано расстояние между оболочками и их центрами. Если к тому же многомерный закон распределения значений параметров является нормальным, то для любой пары признаков мы получим два эллипса, как это показано для двух координат x_j и x_k на рис. 7.5. Левая часть рисунка соответствует ситуации, когда разделимость двух областей оценивается, как расстояние между центром области "Класс 1" и всеми точками множества "Класс 2". Правая часть соответствует ситуации, когда разделимость двух областей оценивается как расстояние между центром области "Класс 2" и точками "Класс 1". Пунктирные эллипсы на рис. 7.5 соответствуют ситуации, когда одновременно оценивается дисперсия обоих разделяемых областей, что упрощает задачу их разделения при неизменности расстояний между центрами этих областей. Центрам обеих областей соответствуют векторы математических ожиданий значений каждого признака: $m(X_1)$ и $m(X_2)$ для множеств объектов "Класс 1" и "Класс 2", соответственно.

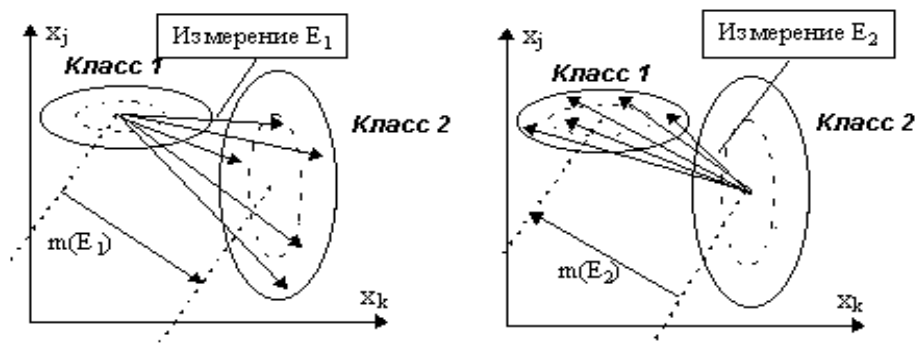


Рис. 7.5. Интерпретация расстояния Махаланобиса для объектов двух классов

Для измерения расстояния от центра области "Класс 1" до точек образа "Класс 2" целесообразно пользоваться квадратичной мерой – выборочным *расстоянием Махаланобиса*, которое при записи в векторной форме будет выглядеть следующим образом:

$$(D_1)^2 = (X_2 - m(X_1))^T C_1^{-1} (X_2 - m(X_1)), \quad (7.12)$$

где $(X_2 - m(X_1))^T$ – транспонированный вектор расстояний между каждой точкой множества "Класс 2" и центром области "Класс 1", $(X_2 - m(X_1))$ – этот же вектор расстояний по выбранным координа-

там, но без его транспонирования, C_1^{-1} – обратная ковариационная матрица контролируемых параметров образов "Класс 1".

По аналогии, для измерения расстояния от центра области "Класс 2" до точек множества "Класс 1" мера Махаланобиса будет иметь вид:

$$(D_2)^2 = (X_1 - m(X_2))^T C_2^{-1} (X_1 - m(X_2)), \quad (7.13)$$

где $(X_1 - m(X_2))$ и $(X_1 - m(X_2))^T$ – прямой и транспонированный векторы расстояний между конкретным примером "Класс 1" и центром области "Класс 2", C_2^{-1} – обратная ковариационная матрица переменных для множества объектов "Класс 2".

В многомерном случае элементы матрицы C , которая является несмещенной оценкой ковариационной матрицы Σ , вычисляются по следующей формуле:

$$c_{jl} = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_{ij} - x_{\bullet j})(x_{il} - x_{\bullet l}), \quad (7.14)$$

где j и l – все возможные пары индексов измеряемых признаков, $j = 1, 2, \dots, m$, $l = 1, 2, \dots, m$. Выражения в скобках – отклонения значений переменных x_{ij} от соответствующего общего среднего $x_{\bullet j}$. При $j = l$ по формуле (7.14) вычисляются среднеквадратичные отклонения, которые соответствует выборочным дисперсиям отдельных переменных, а при $j \neq l$ оцениваются ковариации между двумя переменными. Если каждый элемент ковариационной матрицы C разделить на квадратный корень из произведения соответствующих диагональных элементов

$$\frac{c_{jl}}{\sqrt{c_{jj}c_{ll}}},$$

то получается рассмотренная в разделе 7.2 корреляционная матрица R .

Обратная матрица C^{-1} находится специальными методами линейной алгебры путем определения нетривиального решения матричного уравнения $C C^{-1} = I$, где I – единичная матрица (т.е. матрица, состоящая из единиц, расположенных на главной диагонали). Следует обратить особое внимание на то, что вычисление ковариационных матриц C для векторов, состоящих из десятков и сотен переменных – это вполне реализуемая устойчивая техническая задача, имеющая квадратичную сложность. Однако, располагая вычисленными ковариационными матрицами C , поиск обратных матриц (например, по алгоритму Гаусса) является неустойчивой задачей кубической сложности, поэтому реальным является обращение матриц не более 100-го порядка.

Структура приведенных выражений для расстояния Махаланобиса между вектором и множеством служит основой для построения обобщенного расстояния Махаланобиса, между образами "Класс 1" и "Класс 2" с векторами средних значений $m(X_1)$ и $m(X_2)$, соответственно:

$$D^2 = (m(X_1) - m(X_2))^T C^{-1} (m(X_1) - m(X_2)). \quad (7.15)$$

Приведенная статистическая мера удовлетворяет аксиомам расстояния только в случае равенства ковариационных матриц обоих классов C_1 и C_2 . Поэтому под C^{-1} обычно понимают некоторую усредненную величину, например, объединенную выборочную ковариационную матрицу вида

$$C = [(n_1 - 1) C_1 + (n_2 - 1) C_2] / (n_1 + n_2 - 2). \quad (7.16)$$

К основным преимуществам обобщенного расстояния Махаланобиса следует отнести учет коррелированности признаков между собой и инвариантность относительно невырожденных линейных преобразований, что избавляет от необходимости нормировки исходной матрицы наблюдений.

С использованием расстояния Махаланобиса возможна статистическая проверка гипотез о равенстве двух подмножеств векторов при неизвестной ковариационной матрице. Многомерным аналогом для двухвыборочной t -статистики Стьюдента является двухвыборочная T^2 -статистика Хоттеллинга:

$$T^2 = (m(X_1) - m(X_2))^T C^{-1} (m(X_1) - m(X_2)) n_1 n_2 / (n_1 + n_2) = D^2 n_1 n_2 / (n_1 + n_2). \quad (7.17)$$

Если гипотеза H_0 : $m(X_1) = m(X_2)$ верна, то величина

$$F = \frac{n_1 + n_2 - m - 1}{(n_1 + n_2 - 2)m} \cdot T^2 \quad (7.18)$$

имеет F -распределение с m и $(n_1 + n_2 - m - 1)$ степенями свободы, где m – число переменных.

Алгебраический метод

Описанные выше методы многомерной статистики корректно применимы при выполнении ряда условий: мультиномальность распределения значений измеряемых признаков, равенство ковариационных матриц и достаточно большой объем выборок, позволяющий получать хорошие оценки ковариаций. Каждое из этих условий является скорее исключением, нежели обычной ситуацией, с которой имеет дело биолог. Эти обстоятельства побудили исследователей к поиску иных методов решения задачи разграничения двух совокупностей, основанных на некоторых эвристических принципах. Опишем кратко один из таких методов, предложенный В.Н. Котовым и Н.Г. Терентьевой [1989] и использующий понятие «биоквант», который сами авторы определили как "алгебраический".

Общая формализация самого понятия разграничения казалось бы проста и естественна: две совокупности X_1 и X_2 считаются различными, если в некоторой метрике все внутригрупповые расстояния меньше межгрупповых. И действительно, случаи "идеального" разделения встречаются в практике. Однако объективная реальность имеет дело, как правило, с трангрессирующими совокупностями, где допускается существование общих или промежуточных форм, т.е. где торжествует принцип "неопределенности таксона", характерный для "размытых" множеств.

Более слабое понятие различия можно сформулировать следующим образом: две совокупности X_1 и X_2 считаются различными, если, используя некоторую метрику, в них можно выделить достаточно представительные по численности "скупенности точек" X_1^* и X_2^* , различные в смысле предыдущего определения. Таким образом, биоквантом называются подмножества объектов X_1^* и X_2^* , для которых в заданном метрическом пространстве все внутригрупповые расстояния меньше всех межгрупповых. Пользуясь общепринятой терминологией, согласно которой максимальное расстояние между элементами множества называется диаметром этого множества, биокванты можно охарактеризовать следующим свойством: «Расстояние между биоквантом X_1^* из совокупности X_1 и биоквантом X_2^* из совокупности X_2 больше диаметра каждого из этих биоквантов»

Для нахождения биоквантов предложена [Котов, Терентьева, 1989] некоторая эвристическая процедура, основанная на преобразовании матрицы расстояний в стохастическую матрицу и расчете для каждого объекта X_1 и X_2 специальных оценок включения в биокванты, равных стационарным вероятностям перехода в марковской цепи. После выделения биоквантов принимается или отвергается гипотеза о наличии различий между группами измерений по следующему достаточно условному эвристическому правилу:

- если биокванты составляют не менее 60% от объема соответствующей совокупности, то подмножества хорошо разграничиваются,
- если хотя бы один из биоквантов составляет менее 30% количества измерений, то принимается гипотеза об отсутствии различий;
- в остальных случаях совокупности считаются "слабо разделимыми".

Результаты расчетов

Сформируем матрицу из 412 наблюдений, относящихся к 10 рекам Самарской области, по которым был проделан наиболее репрезентативный объем экспедиционных исследований. В составе р. Чапаевка, характеризующейся определенной региональной неоднородностью, выделим две группы станций, расположенных в верхнем течении (ст. 1-12) и ниже г. Чапаевска (ст. 13 – 23).

В качестве 8 контролируемых переменных будем использовать три группы признаков:

- показатели обилия – прологарифмированные значения общей численности N_s и биомассы B_s по всем видам бентоса;
- показатели биоразнообразия – количество видов S и информационный индекс Шеннона H , рассчитанный по численности зообентоса;
- показатели хирономидного комплекса – значения $\ln((N_s \cdot B_s)^{0.5})$ отдельно по подсемействам Orthoclaudiinae и Tanypodinae, а также трибам Tanytarsini и Chironomini.

Для каждой пары групп измерений, относящихся к разным водоемам, рассчитаем обобщенное расстояние по Махаланобису D^2 , критерий Хоттеллинга T^2 и соответствующие ему F -критерий и значение вероятности p (см. табл. 7.5).

Таблица 7.5

Матрица оценок различий между многомерными комплексами гидробиологических наблюдений на реках Самарской области

	Наименование рек	m	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
1	Уса	8		2.24	2.31	1.45	2.40	2.15	1.54	1.63	3.03	3.12	1.95
				27.23	30.50	11.77	24.44	24.62	17.72	19.61	57.43	43.13	27.40
2	Б.Черемшан	17	2.37		2.02	2.40	3.66	2.71	1.75	1.86	4.54	3.03	1.90
			0.0677		37.43	51.66	79.01	60.56	45.77	49.54	220.50	57.75	49.46
3	Б.Кинель	20	2.79	3.74		2.62	3.25	2.34	1.51	1.51	4.10	2.56	3.53
			0.0318	0.0043		66.86	65.58	48.52	39.25	37.14	199.18	43.65	193.91
4	Маза	19	1.06	5.13	6.78		1.36	1.07	1.71	1.41	3.13	2.92	1.66
			0.4319	0.0006	0.0001		11.29	9.87	48.02	31.29	112.36	55.93	41.45
5	Тайдаков	9	1.63	7.00	6.07	1.03		1.44	2.84	1.24	2.22	3.21	2.41
			0.2527	0.0004	0.0005	0.447		12.01	67.58	12.61	33.77	48.72	46.32
6	Муранка	16	2.10	5.86	4.82	0.97	1.04		1.87	1.12	2.63	1.26	1.47
			0.1028	0.0003	0.0009	0.4787	0.4451		49.35	17.05	71.44	9.80	28.15
7	Чапаевка (верховья)	124	2.10	5.43	4.66	5.70	8.00	5.86		1.45	3.45	1.84	1.68
			0.0411	0	0.0001	0	0	0		108.58	279.26	31.29	127.73
8	Сок	89	2.27	5.78	4.34	3.65	1.46	1.99	13.12		1.23	0.93	1.89
			0.0294	0	0.0002	0.0009	0.1827	0.0562	0		33.13	7.83	140.38
9	Байтуган	29	5.74	23.18	21.19	11.91	3.40	7.48	33.29	3.89		2.94	3.48
			0.0002	0	0	0	0.0071	0	0	0.0005		64.13	249.03
10	Самара	10	3.03	5.20	4.09	5.18	3.58	0.87	3.70	0.91	6.50		2.67
			0.0593	0.0018	0.0045	0.0013	0.0315	0.5611	0.0006	0.5131	0.0001		62.37
11	Чапаевка (низовья)	71	3.11	5.68	22.33	4.77	5.27	3.23	15.39	16.77	28.91	7.11	
			0.0046	0	0	0.0001	0	0.0032	0	0	0	0	

Примечание: Для каждой пары рек в клетках, расположенных выше главной диагонали - обобщенное расстояние по Махаланобису D^2 (вверху) и значения T^2 -критерия Хоттеллинга (внизу); в клетках, расположенных ниже главной диагонали - F -критерий и соответствующая ему вероятность p .

Если величина p превышает выбранный уровень значимости, то нет оснований отвергать нулевую гипотезу о том, что измерения, выполненные на данной паре водоемов, принадлежат к одной генеральной совокупности. Например, можно считать статистически сходными по данному комплексу признаков реки Маза (4) и Тайдаков (5), Маза и Муранка (6), Тайдаков и Муранка – эти и другие пары вероятностей, превышающие 0.05, отмечены в табл. 7.5 жирным шрифтом.

Полученные значения обобщенной меры Махаланобиса, T^2 и F -критериев могут быть интерпретированы как матрицы расстояния между классифицируемыми объектами и обработаны описанными в предыдущем разделе алгоритмами кластерного анализа с целью построения дендрограмм.

На рис. 7.6 приведены результаты классификации рек Самарского региона по методу Уорда. Необходимо отметить, что выброчные меры Махаланобиса D^2 зависят от объема n_1 и n_2 сравниваемых подвыборок, в результате чего при большом количестве измерений, характерных, например, для р. Чапаевка, коэффициенты расстояния оказываются сильно заниженными, что нашло свое отражение в результатах кластеризации на дендрограмме фиг. «а». Значения критерия Хоттеллинга T^2 и F -критерия в этих же условиях являются несмещенными оценками, не так сильно зависящими от количества измерений, поэтому дают, по нашему мнению, более адекватные результаты кластеризации (см. фиг. «б» рис. 7.6).

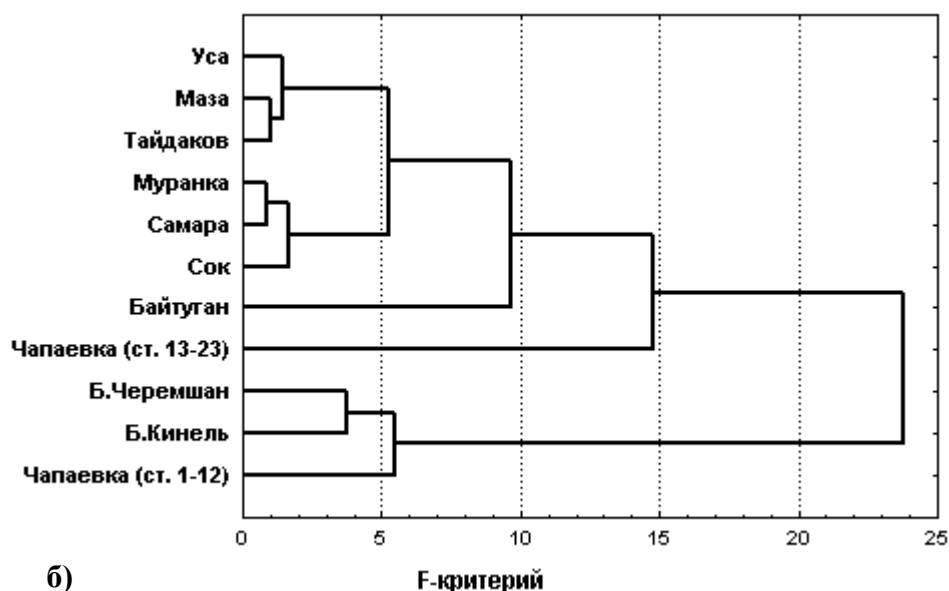
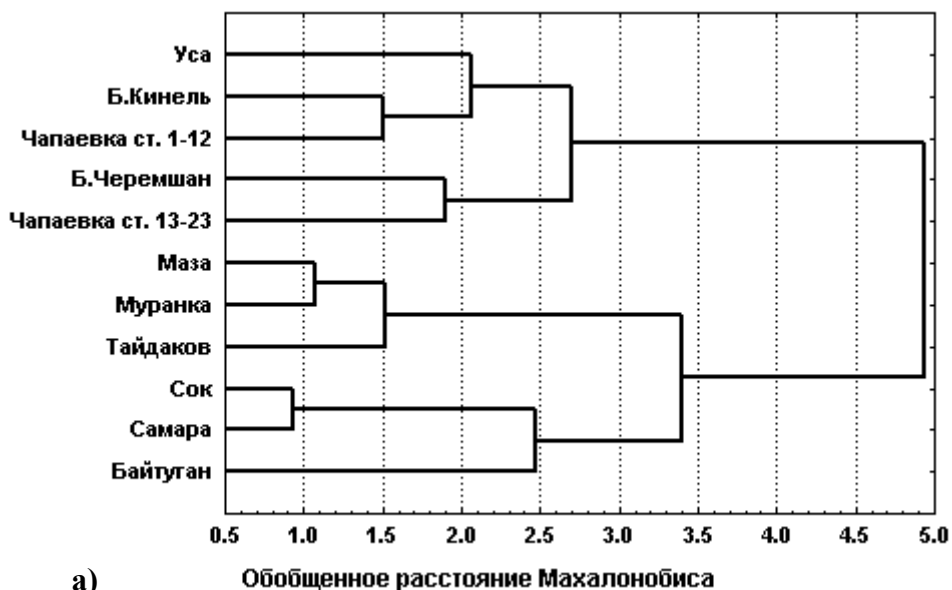


Рис. 7.6. Дендрограммы кластеризации рек Самарской области по методу Уорда с использованием обобщенного расстояния Махалонобиса и критерия Фишера

7.5. Задача о снижении размерности многомерного пространства: факторный анализ

Формулировка задачи

Исходными данными является знакомая по предыдущим разделам таблица наблюдений X , в столбцах которой представлены гидробиологические показатели, измеренные в количественной шкале ($j = 1, 2, \dots, m$), а строки содержат описания экологических объектов в некотором пространственно-временном аспекте ($i = 1, 2, \dots, n$).

Необходимо найти такое линейное преобразование исходной матрицы X , которое позволило бы получить сжатое (редуцированное) представление входных данных в виде матрицы F с

меньшим числом переменных p ($m > p$) без существенной потери содержательной информации об экологических объектах.

Под факторным анализом понимается совокупность статистических моделей, описывающих и объясняющих наблюдаемые данные с помощью небольшого числа скрытых (латентных) факторов, которые могут быть сконструированы с помощью определенных математических методов. Модели факторного анализа применяются при решении следующих задач:

- редукция данных или понижение размерности признакового пространства типа "объект – признак" за счет сведения многочисленных взаимозависимых наблюдаемых переменных к некоторым обобщенным ненаблюдаемым факторам;
- преобразование исходных переменных к виду, более удобному для визуализации или интерпретации; классификация объектов на основе сжатого признакового пространства;
- создание структурной теории исследования объектов и интерпретация косвенных факторов, не поддающихся непосредственному измерению.

В экологии факторный анализ можно считать одним из первых серьезных многомерных методов статистики, использованных, в частности, для ординации растительности [Goodall, 1954]. Имеется обширная литература как по применению факторного анализа вообще [Лоули, Максвелл, 1967; Харман, 1972; Айвазян с соавт., 1974; Дубров, 1978], так и по использованию его в экологических исследованиях [Василевич, 1969; Миркин, Розенберг, 1977б, 1978; Миркин с соавт., 1978а,б; Гелета, Крауклис, 1979; Нинбург, 1985; Колодяжный, 1985; Ястребов, 1991; Красовский, Воробьева, 1998; Сердюцкая, Каменева, 2000].

Математический лист

Под моделью факторного анализа понимают представление исходных переменных в виде линейной комбинации факторов F

$$\begin{matrix} X_1 & X_2 & \dots & X_m & \Rightarrow & F_1 & \dots & F_p \\ \boxed{} & \boxed{} & \dots & \boxed{} & & \boxed{} & \dots & \boxed{} \end{matrix},$$

рассчитанных так, чтобы наилучшим способом (с минимальной погрешностью) представить X :

$$X_j = \sum_{k=1}^p a_{jk} F_k + U_j \quad (7.19)$$

В этой модели латентные переменные F_k , $k = 1, 2, \dots, p$, называются *общими факторами*, а переменные U_j , $j = 1, 2, \dots, m$, – *специфическими факторами* (англ. – unique factor). Значения a_{jk} называются *факторными нагрузками*.

Основное требование к исходным данным для факторного анализа – это то, что они должны подчиняться допущению о многомерном нормальном распределении в совокупности. Для проверки этой гипотезы используют *тест "сферичности" распределения данных Бартлетта*, где оценивается предположение о диагональности матрицы корреляций. Если эта гипотеза не отвергается (т.е. наблюдаемый уровень значимости превышает 5%) – нет смысла в факторном анализе, поскольку направления главных осей случайны. На практике предположение о многомерной нормальности проверить весьма трудно, поэтому факторный анализ чаще всего применяется без такой процедуры, тем более, что ряд исследователей [Лоули, Максвелл, 1967] считает это допущение излишним.

Однако если предполагается, что все признаки X_j стандартизованы ($\sigma_i = 1$, $m(X_j) = 0$), а факторы F_1, F_2, \dots, F_p независимы и не связаны со специфическими факторами U_j , то факторные нагрузки a_{jk} совпадают с коэффициентами корреляции между общими факторами и переменными X_j . Общая дисперсия признака X_j раскладывается при этом на сумму квадратов факторных нагрузок H_i^2 , которая называется *общностью*, и дисперсию специфического фактора $S_{u_i}^2$, или *специфичность*:

$$S_{x_i}^2 = H_i^2 + S_{u_i}^2, \quad \text{где } H_i^2 = \sum_k a_{ik}^2. \quad (7.20)$$

Другими словами, общность H_i^2 представляет собой часть дисперсии переменных, объясненную факторами, а специфичность $S_{u_i}^2$ – часть дисперсии, обусловленную случайными ошибками или переменными, неучтенными в модели. В соответствии с постановкой задачи, необходимо искать такие факторы, при которых суммарная общность максимальна, а специфичность – минимальна.

Основным объектом преобразований в факторном анализе является корреляционная матрица из коэффициентов корреляции Пирсона (иногда – дисперсионно-ковариационная матрица), полученная обычным путем обработки массива данных X . Выделение общих факторов и сжатие информации в ходе факторного анализа сводится к воспроизведению с той или иной степенью точности исходной корреляционной матрицы, т.е. предполагается, что редуцированная корреляционная матрица получена с использованием тех же объектов, но описанных меньшим числом переменных. Таким образом, следует уточнить, что фактически под сжатием информации в факторном анализе понимается уменьшение размерности корреляционной матрицы, а не самих данных, тем более что восстановить исходные данные по корреляционной матрице нельзя.

Поскольку коэффициенты, составляющие корреляционную матрицу, могут вычисляться разным способом, различают следующие техники факторного анализа:

- R – техника, когда коэффициенты корреляции вычисляются между переменными и исходная матрица X сжимается по столбцам, т.е. число признаков уменьшается с m до p ;
- Q – техника, когда изучается корреляция между объектами (точнее, их состояниями, описываемыми векторами параметров) и их количество уменьшается с n до p ;
- P – техника, предполагающая факторный анализ результатов экспериментальных исследований, выполненных на одном и том же объекте в различные промежутки времени.

Одним из наиболее распространенных приемов поиска факторов является *метод главных компонент*. Его основное различие от факторного анализа заключается в том, что главные компоненты F_k связаны с наблюдаемыми переменными X_j линейными функциями преобразования:

$$X_j = \sum_{k=1}^p a_{jk} F_k \quad \text{и} \quad F_k = \sum_{j=1}^m a_{jk} X_j. \quad (7.21)$$

Метод главных компонент более прост в расчетах и интерпретации, но одна из главных трудностей его использования – необходимость преобразования исходных данных, представленных в разных единицах измерения, в сопоставимые величины. Традиционным методом преобразования является нормирование по стандартным отклонениям, когда матрица Z стандартизованных исходных дан-

ных определяется по формуле $z_{ij} = \frac{x_{ij} - x_{\bullet j}}{S_j}$, где $x_{\bullet j}$ – среднее значение j -го признака; S_j – стандартное отклонение; $j = 1, 2, \dots, m$; $i = 1, 2, \dots, n$.

Для вычисления корреляционной матрицы R размером $m \times m$, имеет место простое матричное соотношение:

$$R = \frac{1}{m-1} Z Z^T, \quad (7.22)$$

где T – символ транспонирования.

Основная идея метода главных компонент основана на следующем предположении: чем выше дисперсия вдоль какой-нибудь оси, тем больше информации содержат значения проекций на эту ось. Поэтому вполне естественно предпринять попытку отыскать ось с максимальной дисперсией, которую можно было бы рассматривать как "ординационную" со всеми вытекающими отсюда последствиями. Такая ось называется *первой главной компонентой (фактором)*.

Поиск всей системы взаимно перпендикулярных осей по методу главных компонент сводится к последовательной процедуре: т.е. вначале ищется первый фактор, который объясняет наибольшую часть дисперсии, затем независимый от него второй фактор, объясняющий наибольшую часть оставшейся дисперсии, и т.д.

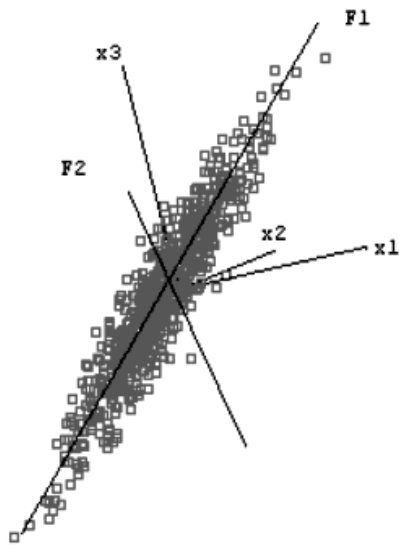


Рис. 7.7. Сжатие признакового пространства с применением факторного анализа

Геометрически это выглядит следующим образом (см. рис. 7.7). Для построения первого фактора F_1 берется прямая, проходящая через центр координат и облако рассеяния данных. При этом отыскивается такая ось, для которой сумма квадратов расстояний всех точек до перпендикуляра к этой прямой была бы максимальной. Это означает, что этой осью объясняется максимум дисперсии переменных. Найденная ось после нормировки используется в качестве первого фактора. Если "облако" данных вытянуто в виде эллипсоида (имеет форму "огурца"), фактор F_1 совпадает с направлением, в котором вытянуты объекты, и по нему с наибольшей точностью можно предсказать значения исходных переменных. Для поиска второго фактора F_2 ищется ось, перпендикулярная первому фактору, также объясняющая наибольшую часть дисперсии, не объясненной первой осью. После нормировки эта ось становится вторым фактором. Если данные представляют собой плоский эллипсоид ("блин") в трехмерном пространстве, два первых фактора позволяют в точности описать эти данные.

Максимально возможное число главных компонент равно количеству переменных.

Основная модель метода главных компонент записывается в матричном виде следующим образом:

$$\mathbf{Z} = \mathbf{A}\mathbf{F}, \quad (7.23)$$

где \mathbf{Z} – матрица $m \times n$ стандартизованных исходных данных; \mathbf{A} – матрица $m \times p$ факторных нагрузок (факторное отображение); \mathbf{F} – матрица $p \times n$ значений факторов; m – количество переменных и n – количество объектов исходной матрицы; p – количество выделенных факторов. Очевидно, что неизвестными являются матрицы \mathbf{A} и \mathbf{F} .

Вычислительные аспекты метода главных компонент сводятся к следующим шагам:

1. Решается характеристическое матричное уравнение

$$\mathbf{R} = \mathbf{\Lambda}\mathbf{V}, \quad (7.24)$$

которое в общем случае имеет m корней λ , называемых *собственными* или *характеристическими числами* (англ. – eigen value) корреляционной матрицы \mathbf{R} , каждому из которых соответствует вектор-столбец \mathbf{V} базисных функций. Собственными значениями квадратной матрицы \mathbf{R} порядка m называются такие значения λ_k , при которых система следующих m уравнений имеет нетривиальное решение:

$$\mathbf{R}\mathbf{V}_k = \lambda_k\mathbf{V}_k, \quad (7.25)$$

где \mathbf{V}_k – *собственные векторы* матрицы \mathbf{R} , соответствующие λ_k ; $k = 1, 2, \dots, m$.

2. Из последовательности собственных значений λ_k выбирается p максимальных. Матрица факторных нагрузок \mathbf{A} каждой исходной переменной j на каждый выделенный фактор k , соответствующая коэффициентам линейных преобразований a_{jk} , вычисляется по формуле

$$a_{jk} = v_{ik}(\lambda_k)^{0.5}, \quad j = 1, 2, \dots, m; \quad k = 1, 2, \dots, p. \quad (7.26)$$

3. Редуцированную матрицу факторов \mathbf{F} , соответствующую исходной таблице \mathbf{X} наблюдений, в которой количество столбцов уменьшено с m до p , рассчитывают по формуле:

$$f_{ik} = \sum_{j=1}^m a_{jk} z_{ij}. \quad (7.27)$$

Основная проблема расчетов состоит в оценке того, сколько главных компонент необходимо построить для оптимального представления анализируемых исходных факторов. Величина λ_k представляет не что иное, как часть суммарной дисперсии совокупности преобразованных данных, объясненную главной компонентой F_k . Если переменные стандартизованы, то $\lambda_1 > \lambda_2 > \lambda_3 \dots$ и

необходимо иметь в виду, что первые несколько членов разложения дают основной вклад в объяснение вариации величин в исходных данных.

Решение о том, когда следует остановить процедуру выделения компонент, зависит главным образом от точки зрения на то, что считать малой долей дисперсии. Это решение достаточно произвольно, однако имеются два критерия: *критерий Кайзера* (Kaiser) и *критерий "каменной осыпи" Кэттелла* (Cattell), которые в большинстве случаев позволяют рационально выбрать число компонент. Но анализ составляющих с малыми величинами собственных значений едва ли целесообразен еще и потому, что они могут оказаться статистически недостоверными из-за ошибок различного происхождения. Ввиду того, что иллюстративной целью факторного анализа часто является получение факторного отображения в графическом виде, обычно ограничивают $p = 2$ и дают изображение пространства в двумерном срезе, поскольку выполнить это для трех и более выделенных факторов проблематично.

Для интерпретации факторов необходимо приписать каждому из них некоторый содержательный смысл, связанный с предметной областью. Чтобы понять, какая гидробиологическая реальность скрыта в найденных факторах, необходимо провести анализ корреляций факторных нагрузок с исходными переменными. Для повышения интерпретируемости факторов используют метод варимаксного вращения VARIMAX, позволяющий добиться большей "выразительности" матрицы факторных нагрузок [Харман, 1972]. Его суть состоит в изменении координатных осей, образуемых факторами, с целью получить более контрастные нагрузки так называемой *простой факторной структуры*. Новые факторы в результате вращения осей ищутся в виде специального

вида линейной комбинации имеющихся факторов: $F_i = \sum_{k=1}^m b_{ik} F_k$, максимизирующей "дисперсии" квадратов факторных нагрузок для переменных

$$\sum_i \left[\sum_k a_{ik}^4 / m - \left[\sum_k a_{ik}^2 / m \right]^2 \right] \rightarrow \max . \quad (7.28)$$

Чем сильнее разойдутся квадраты факторных нагрузок к концам отрезка $[0,1]$, тем больше будет значение целевой функции вращения и тем четче интерпретация факторов.

Результаты расчетов

Выполним факторный анализ методом главных компонент с использованием примера, приведенного в разделе 7.2. Матрица парных коэффициентов корреляции Пирсона, рассчитанная по 453 наблюдениям для 19 признаков, отражающих обилие различных групп хирономид, и 3 гидрофизических признаков, представлена в табл. 7.3.

Были проведены две серии расчетов: для общего набора признаков и с использованием только гидробиологических показателей. В первом случае фактор 1, нагрузки для которого представлены в табл. 7.6, достаточно отчетливо можно приписать условиям существования биотопа – температуре, глубине и ширине водоема, кампанию которым, по трудно объяснимым причинам, составили личинки хирономид фитодетритофагов-собирателей из подсемейства Orthoclaadiinae.

Рассмотрим более подробно факторный анализ структуры хирономидного комплекса (расчет 2 в табл. 7.6). Последовательность выделения главных факторов можно представить в виде графика "каменной осыпи" на рис. 7.8, на котором можно усмотреть два "обвала": при 2 и при 6 отбираемых факторов.

По отношению к водным экосистемам величины главных компонент и базисных векторов могут рассматриваться как показатели определенного типа взаимоотношений между совместно обитаемыми видами, или, иначе говоря, определенного типа ассоциирования. Например, первый фактор объединяет почти все трофические группы трибы Chronomini, к которым добавились хищники Tanyrodinae. Второй фактор структурно обозначен фитодетритофагами-собирающими Orthoclaadiinae и Tanytarsini. Для остальных четырех выделенных нами факторов также можно достаточно адресно подобрать доминирующие группы. Все 6 факторов объясняют около 55% общего статистического разброса, причем на первые два фактора приходится 29%.

Таблица 7.6

Факторные нагрузки по главным компонентам, рассчитанные на основе численности различных подсемейств и трофических групп хирономид (жирным шрифтом отмечены нагрузки, превышающие 0.5)

Переменная	Факторы расчета 1			Факторы расчета 2					
	1	2	3	1	2	3	4	5	6
Собственные значения	3.53	2.56	1.47	3.14	2.15	1.42	1.28	1.22	1.21
Объясненная дисперсия, %	16.04	27.67	34.37	16.52	27.85	35.33	42.07	48.48	54.83
Хищ. ChC	-0.17	0.49	0.20	0.60	-0.20	-0.04	0.05	-0.04	-0.10
Хищ. Di	0.39	-0.19	0.02	-0.05	0.01	0.02	-0.30	-0.01	0.73
Хищ. Or	0.09	-0.11	0.08	-0.03	-0.04	0.00	-0.74	-0.15	0.03
Хищ. Pr	0.41	-0.07	-0.54	-0.11	0.04	0.09	-0.06	0.73	0.30
Хищ. Tn	0.02	0.60	0.00	0.61	0.20	-0.07	0.03	0.05	0.10
Вс/Соб ChC	-0.12	0.63	0.31	0.67	0.01	-0.27	0.06	-0.10	-0.06
Вс/Соб Or	0.25	0.06	0.60	0.00	0.07	-0.82	0.05	-0.06	0.04
Детр ChC	-0.04	0.75	0.04	0.71	0.22	-0.03	-0.06	0.03	-0.12
Детр ChT	0.49	0.54	0.01	0.32	0.70	-0.22	-0.05	0.12	0.08
Детр Or	0.04	0.36	-0.23	0.16	0.58	0.27	0.03	-0.11	-0.15
Сест ChC	0.09	0.25	0.59	0.24	-0.03	-0.70	-0.02	-0.10	-0.11
Сест ChT	0.26	-0.07	-0.19	-0.08	0.09	0.02	-0.77	0.20	0.02
Сест Pr	0.26	-0.03	-0.43	-0.11	0.01	-0.02	0.12	0.67	0.09
деТ/филь ChC	-0.25	0.54	0.26	0.65	-0.14	-0.12	0.03	-0.17	-0.03
деТ/филь ChT	0.31	-0.09	-0.09	0.02	-0.07	0.00	0.08	0.20	0.71
Фит/дет ChC	-0.09	0.50	-0.03	0.51	0.12	0.22	0.04	-0.08	0.00
Фит/дет Di	0.41	-0.13	0.00	-0.17	0.35	0.06	0.17	-0.09	0.52
Фит/дет Or	0.68	0.03	-0.21	-0.23	0.71	-0.11	-0.08	0.27	0.16
Фит/дет Pr	0.17	0.14	-0.58	0.01	0.12	0.11	-0.12	0.70	-0.19
Температура воды (дно)	-0.61	0.30	0.19						
Глубина реки	-0.67	-0.12	-0.07						
Ширина реки	-0.60	-0.08	-0.04						

Примечание: В таблице использованы следующие условные обозначения трофических групп: «Хищ.» - хищники хвататели; «Вс/Соб» - всеядные собиратели+хвататели; «Детр» - детритофаги собиратели; «Сест» - сестонофаги+детритофаги фильтраторы; «деТ/филь» - детритофитофаги собиратели + фильтраторы; «Фит/дет» - фитодетритофаги собиратели; подсемейств и триб: Or – Orthocladiinae, Tn – Tanypodinae, Di – Diamesinae, Pr – Prodiamesinae, Ch – Chironominae (ChC – Chironomini, ChT – Tanytarsini)

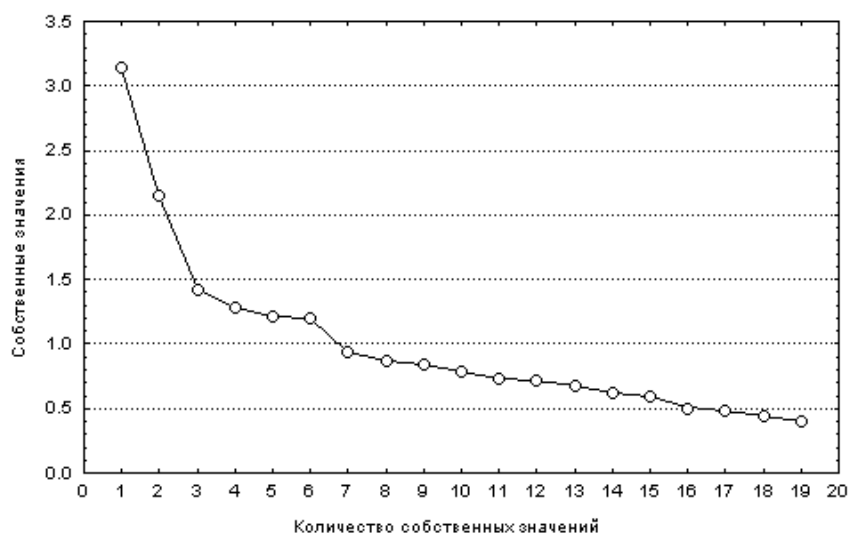


Рис. 7.8. График последовательности собственных значений при выделении главных факторов ("каменистая ось" Кэттелла)

Кроме табличной формы используются графические методы визуализации результатов факторного анализа в виде двухмерных срезов факторного пространства или трехмерных диаграмм (см. рис. 7.9 и 7.10, соответственно).

Используя рассчитанные факторные нагрузки как коэффициенты линейного преобразования, можно сформировать редуцированную матрицу исходных данных, где столбцами являются новые факторизованные признаки. Выделение первых двух главных компонент дает возможность выполнить анализ двухмерной визуализации взаимного расположения объектов в свернутом пространстве факторов.

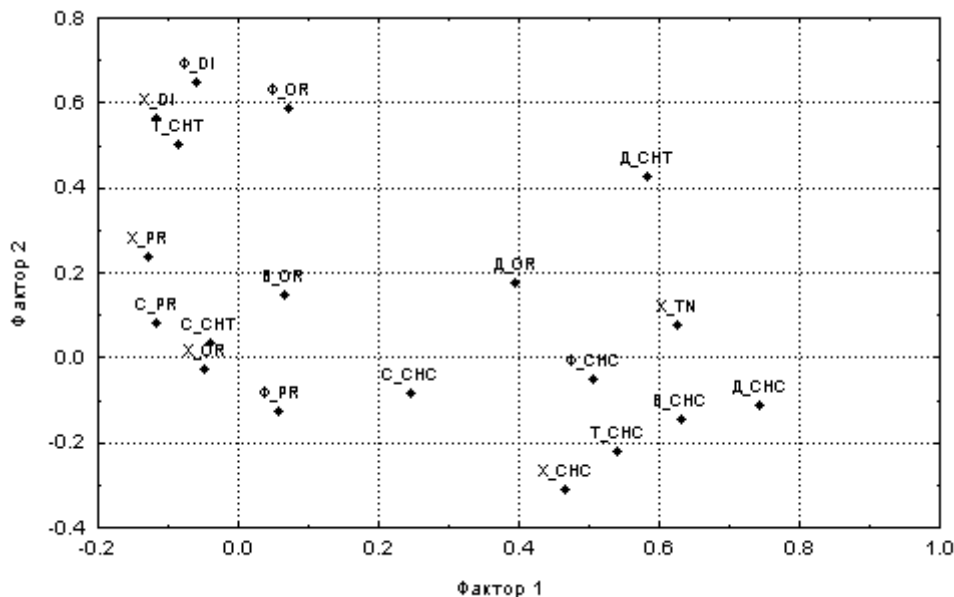


Рис. 7.9. Двухмерный график отображения факторных нагрузок

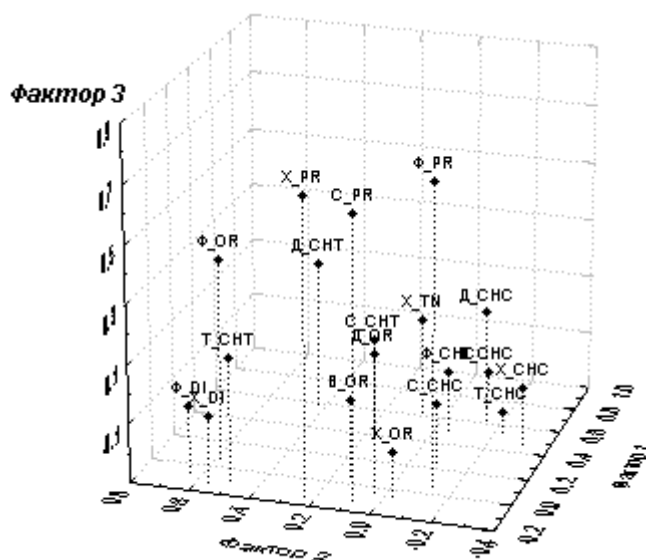


Рис. 7.10. Трехмерный график отображения факторных нагрузок

Поскольку выделение сгущений в облаке из 453 точек вызывает некоторые "изобразительные" трудности, представим на рис. 7.11 расчетные точки, соответствующие групповым средним значений факторов, вычисленным по множеству измерений для каждой малой реки. При таком способе отображения следует иметь в виду, что большинство точек, представленных на рис.

7.11, является в свою очередь трангрессирующими кластерами, диаметр которых может покрывать значительную часть диапазона варьирования факторов.

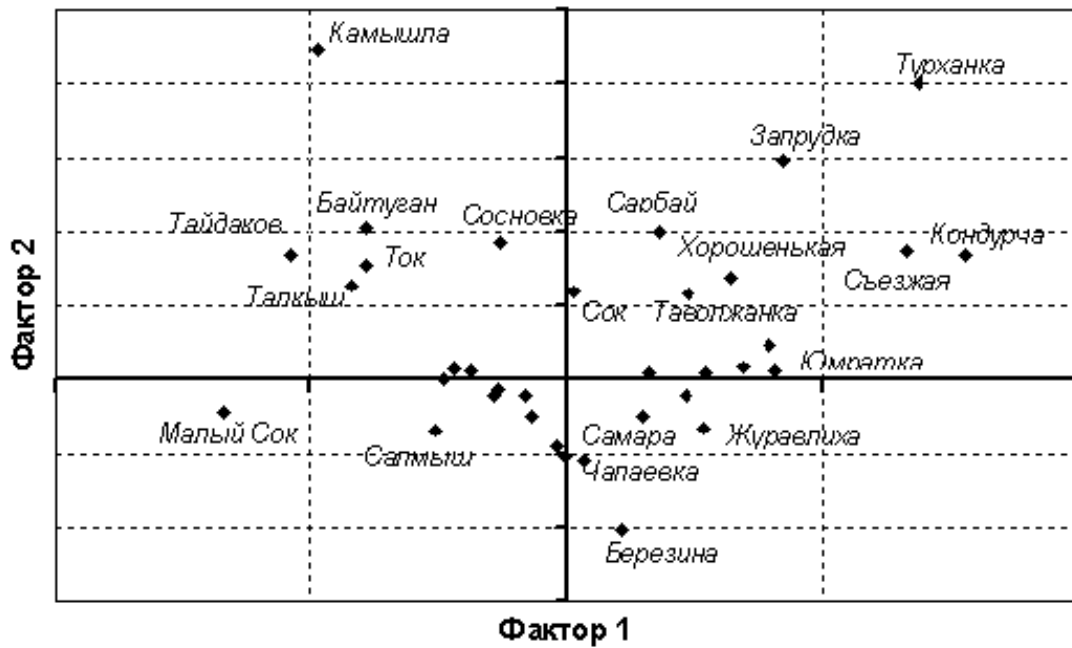


Рис. 7.11. Отображение малых рек Самарской области в пространстве двух главных факторов по результатам отбора проб хирономид

На рис. 7.12 представлено несколько рек из "срединной" части общего графика и для них пунктиром обозначен доверительный интервал значений факторов (который значительно уже минимаксного интервала, соответствующего диаметру подмножеств). Река Чапаевка при этом была разделена на две части, соответствующие верхнему и нижнему течениям.

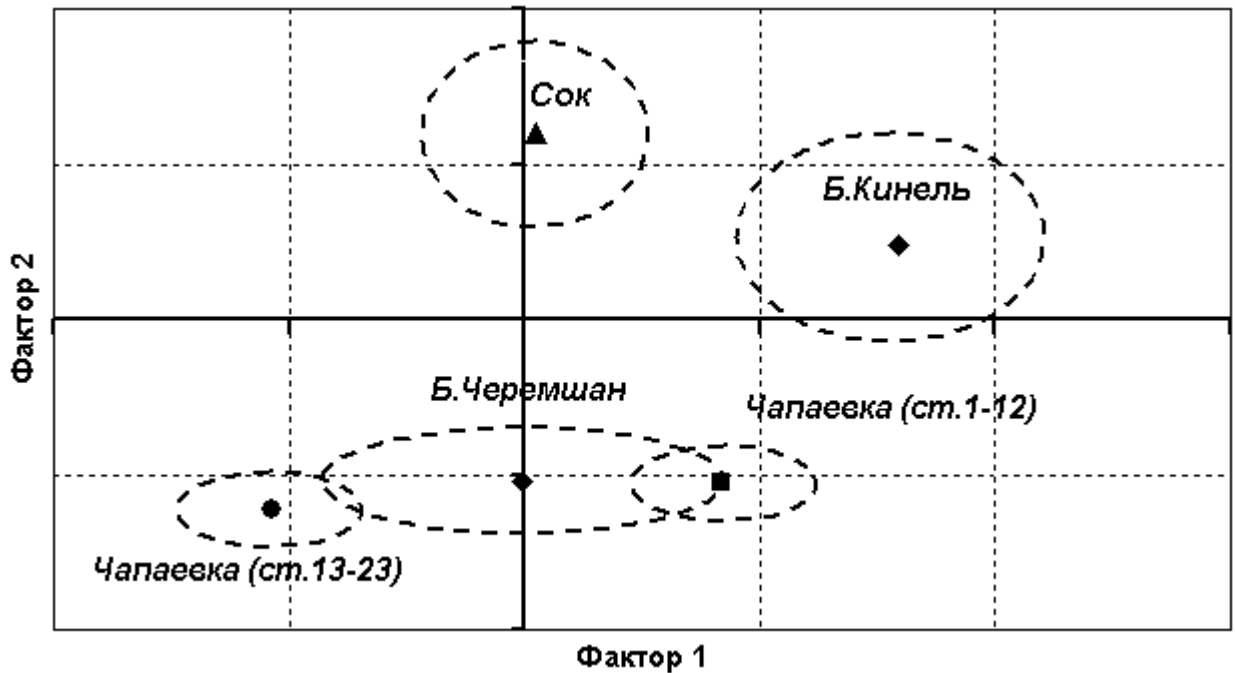


Рис. 7.12. Отображение четырех малых рек Самарской области в пространстве двух главных факторов по результатам отбора проб хирономид (пунктиром обозначена доверительная область варьирования факторов для каждой реки)

Верхний правый квадрант обоих графиков соответствует рекам, у которых велико как значение фактора 1 (который мы ранее связали с обилием ассоциации хищных хирономид из трибы *Chronomini* и подсемейства *Tanyrodinae*), так и фактора 2 (фитодетритофаги-собиратели *Orthoclaadiinae* и *Tanytarsini*).

Нижний левый квадрант объединяет объекты с низким обилием всех этих групп. Можно, например, предположить, что хирономидный комплекс р. Сок отличается от р. Б.Черемшан высоким обилием видов, объединяемых фактором 2, а верхнее течение р. Чапаевка по сравнению с нижним течением той же реки характеризуется более высокой численностью видов хирономид при одинаковом относительно низком обилии фитофильных личинок ортокладеин.

7.6. Метод многомерного шкалирования

Формулировка задачи

Пусть имеется квадратная матрица R размерностью $n \times n$, каждый элемент которой на пересечении i -й строки и j -го столбца, содержит достаточно произвольные сведения о попарном сходстве анализируемых объектов i и j . На выходе алгоритма многомерного шкалирования получаются числовые значения координат, которые приписываются каждому объекту в некоторой новой системе координат (во "вспомогательных шкалах", связанных с латентными переменными).

Многомерное шкалирование (МШ) можно рассматривать как альтернативу факторному анализу, когда, кроме корреляционных матриц, в качестве исходных данных можно использовать произвольный тип матрицы сходства объектов. МШ – это не сколько определенная математическая процедура, а скорее способ наиболее эффективного размещения объектов, приближенно сохраняющий расстояния между ними в новом пространстве признаков, размерность которого существенно меньше исходного.

Рекомендуемая литература: [Терехина, 1986; Краскэл, 1986; Дэйвисон, 1988; Ципилева, 1989].

Математический лист

Методы многомерного шкалирования размещают объекты в пространстве заданной размерности и проверяют, насколько точно полученная конфигурация сохраняет расстояния между объектами. При этом использует алгоритм минимизации некоторой функции, оценивающей качество получаемых вариантов отображения.

Первая в этом направлении работа В. Торгерсона [Torgerson, 1952; цит. по: Терехина, 1986] была посвящена поиску оптимальных шкал и линейному преобразованию матрицы исходных расстояний \mathbf{R} , минимизирующему ошибку \mathbf{E} :

$$\mathbf{T} = L\{\mathbf{R}\} = \mathbf{D}^2 + \mathbf{E}, \quad (7.29)$$

где $L\{\mathbf{R}\}$ – линейное преобразование исходной матрицы расстояний, \mathbf{T} – матрица расстояний, полученная на основе созданных шкал, \mathbf{E} – матрица отклонений модели от исходных данных.

Р. Шепард и Дж. Краскэл [Shepard, 1962; Kruscal, 1964; цит. по: Терехина, 1986] совершили существенный прорыв, разработав *метод неметрического шкалирования* (МНШ), который имеет больше шансов получить действительно геометрическое пространство. Суть этого метода состоит в нелинейном (монотонном) $M\{\mathbf{R}\}$ преобразовании исходной матрицы расстояний:

$$\mathbf{T} = M\{\mathbf{R}\} = \mathbf{D}^2 + \mathbf{E}.$$

Пусть с помощью специальной итерационной процедуры мы определили r шкал F^1, \dots, F^r . Тогда расстояние между парой объектов i и j ; $i = 1, 2, \dots, n$; $j = 1, 2, \dots, n$, определяется, например, формулой Евклида:

$$t_{ij} = \sqrt{\sum_{k=1}^r (F_i^k - F_j^k)^2}. \quad (7.30)$$

Для однозначности задания шкал предполагается, что $\sum_i F_i^k = 0$ и $\sum_i \sum_k (F_i^k)^2 = nr$. Кроме

того, по аналогии с методом главных компонент, первая шкала выбирается с наибольшей дисперсией, вторая – имеет вторую наибольшую дисперсию и т.д. Кроме формулы Евклида могут быть использованы манхеттенское расстояние, метрика Минковского, формула Колмогорова и проч. (см. раздел 4.7)

В качестве критерия оптимизации итерационной процедуры выбора шкал используются различные похожие между собой показатели *стресса* (слово stress в английском языке имеет множество значений, одно из которых – "нагрузка"). Большинство из них сводится к вычислению суммы квадратов отклонений исходных r_{ij} и вычисленных шкалированием d_{ij} расстояний между объектами:

$$\Phi_{ij} = [t_{ij} - f(r_{ij})]^2. \quad (7.31)$$

Здесь t_{ij} – воспроизведенные расстояния в пространстве заданной размерности, r_{ij} – исходное расстояние, а $f(r_{ij})$ обозначает функцию неметрического монотонного преобразования. Таким образом, МНШ воспроизводит не количественные меры сходств объектов, а лишь их относительный порядок.

Для измерения качества подгонки модели Дж. Такейном [Takane, 1977; цит. по Терехина, 1986] был предложен *нормированный показатель стресса*:
$$S = \left(\frac{\|\mathbf{E}\|}{\|\mathbf{T}\|} \right)^{1/2}, \quad (7.32)$$

где норма матрицы $\|\cdot\|$ означает сумму квадратов элементов матрицы. Этот показатель изменяется от 0 до 1: равенство его нулю означает точную подгонку модели, единице – полную ее бессмысленность. Таким образом, чем меньше значение стресса, тем лучше матрица исходных расстояний согласуется с матрицей результирующих расстояний. Кроме стресса Такейна употребимы *нестандартизованный стресс*, *коэффициент стресса Краскела*, использующий простые разности, вместо их квадратов, и *коэффициент отчуждения*. Показателем качества модели является также квадрат коэффициента корреляции между матрицами \mathbf{T} и \mathbf{E} , который, как и в регрессионном анализе, может быть интерпретирован как доля дисперсии преобразованных расстояний \mathbf{T} , объясненная матрицей расстояний \mathbf{D} .

Результаты анализа обычно представляются на двух- и трехмерных диаграммах рассеяния в пространстве шкал с отмеченными точками-объектами, образуя зрительный образ "экологического пространства" наблюдений или свойств. Уровень согласия может быть оценен с помощью графика ступенчатой функции Шепарда, где оси ординат *OY* показываются воспроизведенные расстояния, а по оси *OX* откладываются истинные расстояния между измерениями. Если все воспроизведенные расстояния легли на эту ступенчатую линию, то ранги наблюдаемых расстояний были в точности воспроизведены полученным решением.

Несмотря на то, что имеется много идентичного в характере решения исследуемых проблем, методы МНШ и факторного анализа имеют ряд существенных отличий. Так, факторный анализ требует, чтобы исследуемые данные подчинялись многомерному нормальному распределению, а зависимости были линейными. Методы МНШ не накладывают таких ограничений: они применимы на любых данных, где сохраняется смысл порядок следования рангов сходств (например, матрица сходства может быть получена с использованием оценок экспертов). С точки зрения различий получаемых результатов, факторный анализ стремится разложить общую дисперсию на большее число факторов (координатных осей или латентных переменных) по сравнению с МНШ, в результате чего МНШ часто приводит к проще интерпретируемым решениям.

Результаты расчетов

В табл. 7.5 раздела 7.4 была представлена матрица расстояний Махалонобиса между 10 реками Самарской области, рассчитанная по гидробиологическим показателям. Выполним нелинейное преобразование этой матрицы и отображение координат водных объектов в пространстве двух шкал. Параллельно осуществим многомерное шкалирование матрицы из *F*-критериев Фишера, соответствующих *T*²-критериям Хоттелинга из той же табл. 7.5.

Технически итеративный процесс шкалирования по описанному примеру дал хорошие результаты согласия между исходной и преобразованной функциями расстояния. Значения нормированного стресса по Такейну составили 0.1409 для меры Махалонобиса и 0.1063 для критерия Фишера. Диаграмма Шепарда, представленная на рис. 7.13, показывает достаточно незначительные отклонения от графика ступенчатой функции, что свидетельствует о хорошем качестве подгонки модели. По крайней мере, можно утверждать, что преобразование исходной матрицы расстояний размерностью 11×11 в матрицу координат объектов 11×2 произошло без существенной потери информации.

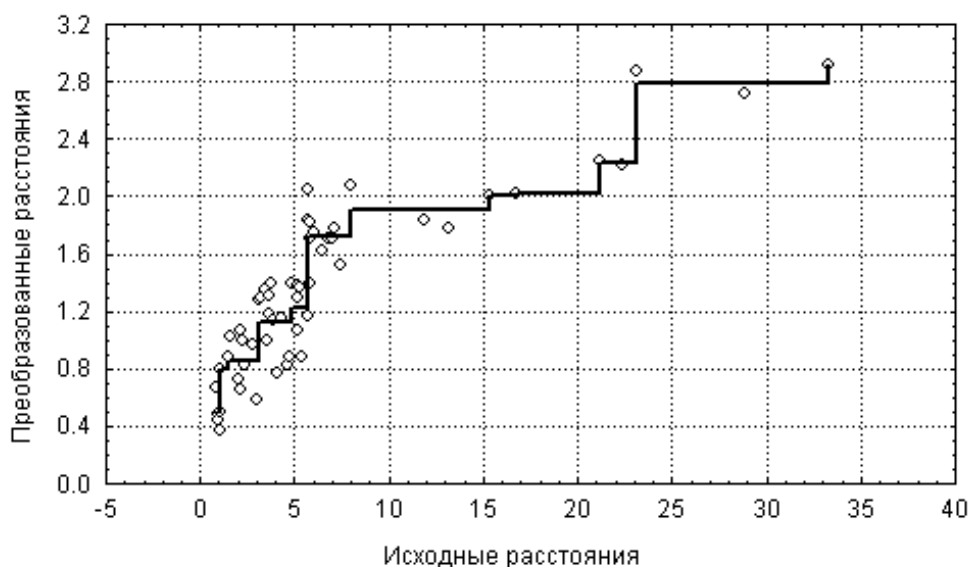


Рис. 7.13. Ступенчатая диаграмма Шепарда для оценки качества многомерного шкалирования

Полученные двухмерные диаграммы рассеяния, представленные на рис. 7.14 («а», «б»), описывают другими средствами ту же предметную сущность, что и дендрограммы на рис. 7.6 («а», «б»). Однако, на наш взгляд, устойчивость и обоснованность решений, полученных в представленном примере методами МНШ, существенно выше, чем у методов кластерного анализа.

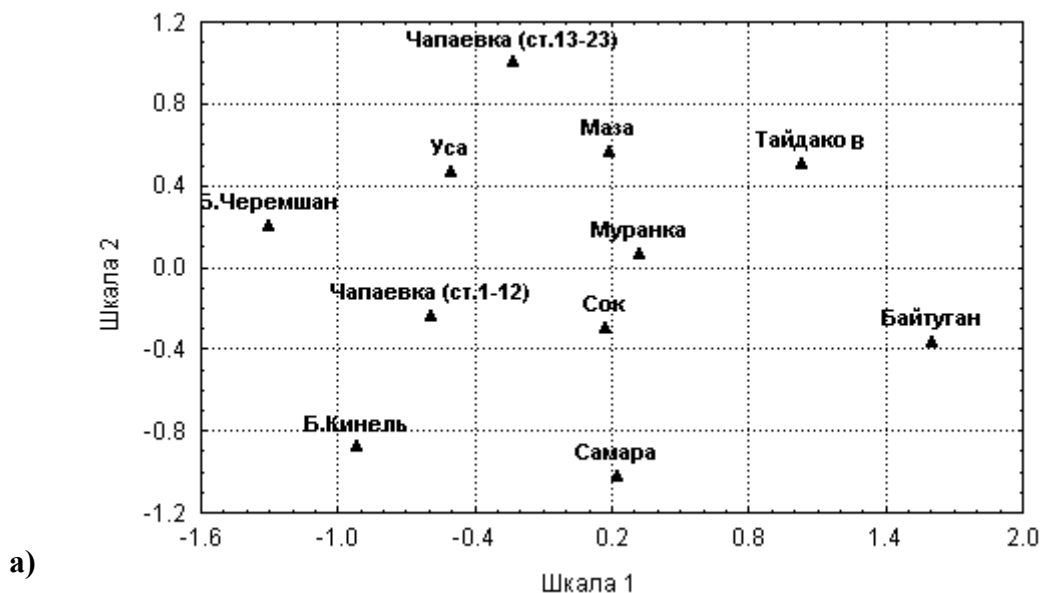
7.7. Общая методика анализа водных объектов по многомерным данным гидробиологического мониторинга (вместо резюме)

Обобщая изложенное в разделах 7.4-7.6, можно предложить следующую методику классификации групп многомерных гидроэкологических измерений, основные этапы которой рассмотрим на примере оценки сходства 14 станций наблюдений по течению р. Сок.

1. Формирование матрицы исходных данных

Методы анализа многомерных наблюдений связаны с определенными ограничениями, как по размеру обрабатываемых матриц, так и по характеру распределения значений признаков. В связи с этим, не представляется возможным использовать для расчетов детализацию гидробиологических переменных на уровне видов: нельзя рассчитать, например, достоверную корреляционную матрицу с использованием столбцов измерений, где встречаемость на всем массиве составляет только 1-2 раза, что для зообентоса далеко не редкость.

Альтернативой информативному пространству видов являются суммарные показатели обилия по систематическим или трофическим группам гидробионтов и другие обобщенные показатели. В качестве исходных данных по 88 наблюдениям, выполненным на р. Сок, будем использовать 11 признаков: логарифмы общих численностей и биомасс по всем видам бентоса, индексы Шеннона, Пареле и Вудивисса и 6 показателей обилия $\ln((N_s * B_s)^{0.5})$ по отдельным подсемействам и трибам хирономид. Объем полученной информации в исходном состоянии: $88 * 11 = 968$ значений.



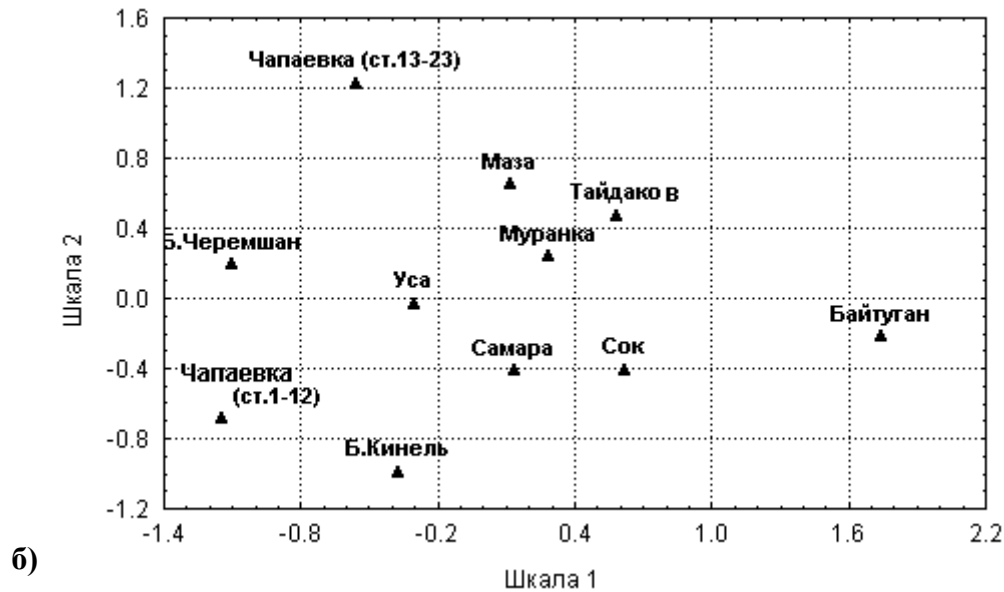


Рис. 7.14. Отображение малых рек Самарской области в пространстве двух шкал, полученных на основе расстояний Махалонобиса («а») и критерия Фишера («б»)

2. Снижение признакового пространства путем выделения главных компонент

Сократим размерность переменных с 11 до 3 ведущих факторов, которые объясняют 58.2% статистического варьирования исходных признаков. Интерпретация выделенных главных компонент, нагрузки которых на исходные переменные представлены в табл. 7.7, достаточно очевидна: первый фактор связан с общим обилием зообентоса и наиболее массовыми видами хириноид, второй фактор трактуется как биоразнообразие, третий фактор объединяет более редкие группы хириноид. Можно лишний раз обратить внимание читателя на отрицательный вклад олигохетного индекса в формирование обобщенных переменных.

Объем информации после факторизации составил $88 \times 3 = 264$ значения.

Таблица 7.7

Значения факторных нагрузок по трем главным компонентам, рассчитанным по обобщенным индексам и показателям обилия групп хириноид на р. Сок
(жирным шрифтом отмечены нагрузки, превышающие 0.5)

Обобщенные индексы и показатели обилия групп	Главные компоненты		
	1	2	3
Численность зообентоса N_s	0.717	0.133	0.453
Биомасса зообентоса B_s	0.833	0.074	-0.077
Индекс Шеннона H	0.225	0.783	-0.089
Индекс Пареле P	-0.212	-0.598	-0.106
Индекс Вудивисса V	-0.085	0.714	-0.081
Триба Chironomini	0.840	-0.040	-0.139
Триба Tanytarsini	0.377	0.346	0.653
Подсемейство Diamesinae	0.025	-0.261	0.652
Подсемейство Orthoclaadiinae	-0.119	0.605	0.610
Подсемейство Prodiamesinae	-0.090	-0.004	0.574
Подсемейство Tanypodinae	0.574	0.133	0.044

3. Дисперсионный анализ факторов

Значения трех главных факторов, вычисленных для каждого из 88 измерений, могут явиться основой для дисперсионного анализа, где проверяется нулевая гипотеза об отсутствии влияния группировки по станциям на характер выполненных наблюдений. Эта гипотеза не отвергается при $F(13,74) = 1.05$ и $p=0.41$ для фактора 2, т.к. на всех станциях зафиксирован приблизительно одинаковый уровень биоразнообразия, которое мы связали с этим фактором. Для остальных двух компонент факторной модели влияние распределения по станциям оказалось достоверным с высоким уровнем значимости и величиной F -критерия, равной 3.4 и 4.2 для фактора 1 и 3, соответственно.

Анализ пространственной динамики групповых средних значений факторов, представленной на рис. 7.15, дает возможность сделать вывод о существенных сдвигах в видовой структуре хирономид вдоль течения реки от истока к устью, где постепенно выпадают виды *Tanytarsini*, *Diamesinae* и *Prodiamesinae*, замещаемые видами *Chironomini* на фоне общего увеличения обилия зообентоса.

4. Формирование матрицы расстояний

Рассчитаем для каждой пары станций p . Сок статистики, отражающие расстояние между "центрами тяжести" соответствующих выборок (меры Махаланобиса и T -критерии Хотеллинга) и достоверность различий между ними (F -критерии и значения вероятностей p) в факторизованном пространстве.

Смысл преобразований в главные компоненты, выполненных на втором этапе, заключался не столько в том, чтобы уменьшить объем вычислений, а чтобы обеспечить устойчивую невырожденность ковариационных матриц. Например, виды подсемейства *Diamesinae* встречались только на станциях 1-4, что означает полную невозможность расчета расстояния Махаланобиса в исходном пространстве признаков для пар станций от 5 до 14 из-за проблем с нахождением обратных матриц. Использование преобразованных факторов практически исключает эти проблемы, что позволило нам гладко вычислить уровни различий между парами всех 14 станций p . Сок, представленные в табл. 7.8.

Объем информации, заключенной в матрице расстояний с учетом ее симметричности: $14 \cdot (14-1) / 2 = 91$ значение.

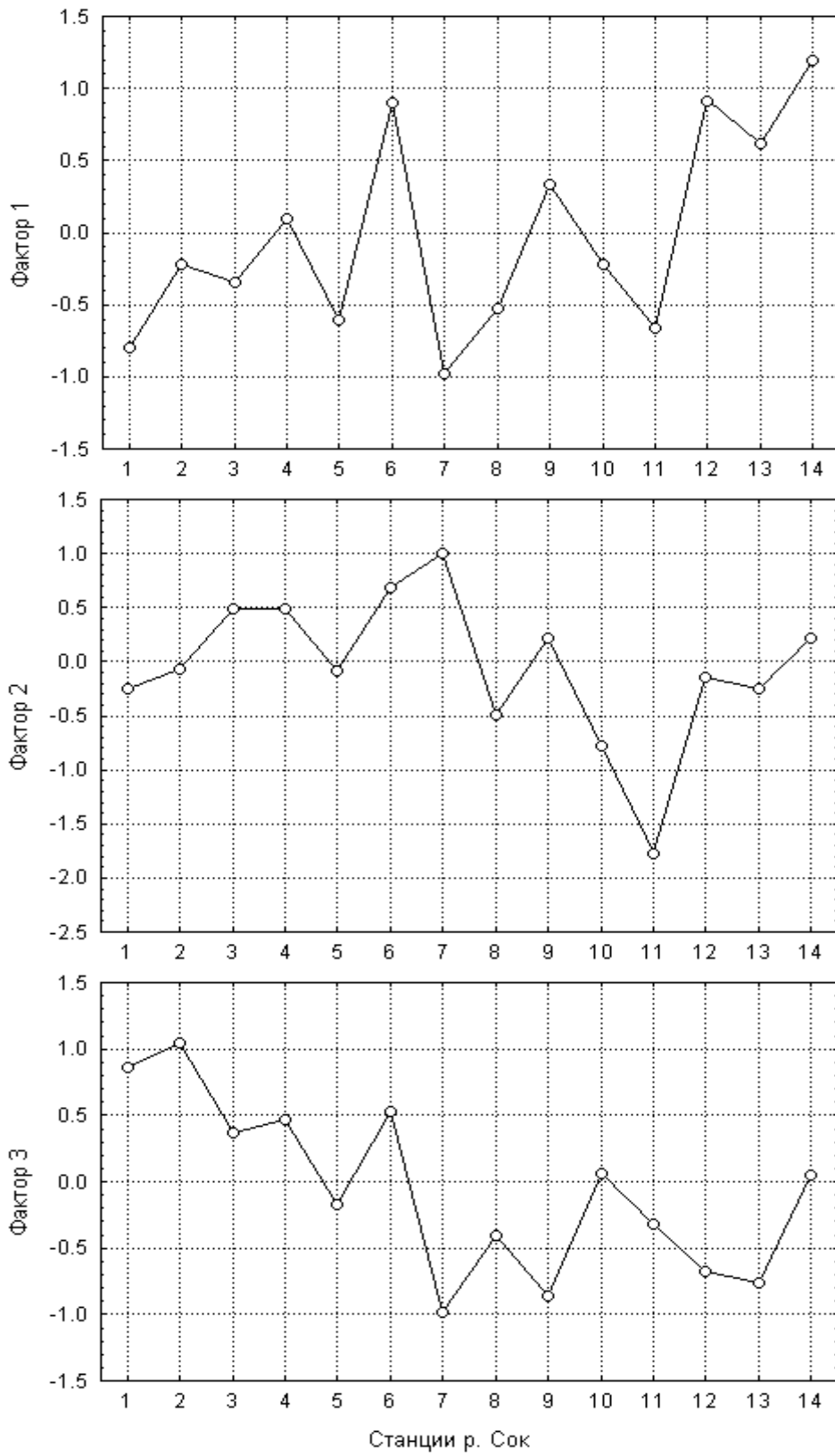


Рис. 7.15. Изменение групповых средних значений главных компонент по станциям от истока к устью р. Сок

Таблица 7.8

Значения T^2 -критерия Хоттеллинга (выше главной диагонали) и вероятностей p оценки различий по F -критерию (ниже главной диагонали) между парами станций p . Сок по комплексу гидробиологических показателей

№ ст.	n изм.	Номера станций наблюдений на р. Сок													
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14
1	8		2.9	9.0	19.5	6.4	14.3	2.8	5.4	18.3	2.5	8.3	28.0	24.0	21.3
2	9	0.497		8.5	7.5	20.3	4.6	8.6	15.0	31.9	5.6	6.6	42.9	41.5	19.1
3	11	0.086	0.096		2.8	4.8	5.3	9.5	6.5	29.4	4.2	7.6	33.7	31.2	28.3
4	9	0.011	0.135	0.492		10.0	3.1	1.5	8.9	22.4	9.2	15.6	30.3	28.8	15.9
5	11	0.175	0.006	0.264	0.064		8.3	6.2	1.7	21.3	1.5	2.7	22.3	19.9	21.1
6	1	0.110	0.401	0.309	0.551	0.165		5.9	12.2	4.0	2.6	4.6	4.9	4.8	2.1
7	1	0.611	0.194	0.130	0.773	0.253	*		3.6	3.4	3.5	4.1	11.0	4.9	6.4
8	5	0.285	0.037	0.191	0.121	0.697	0.346	0.676		6.0	3.4	0.6	8.8	6.4	12.3
9	6	0.022	0.003	0.002	0.009	0.008	0.570	0.617	0.285		6.1	5.4	3.9	1.7	5.3
10	2	0.630	0.307	0.383	0.154	0.757	*	*	0.618	0.377		1.2	5.9	5.3	10.1
11	1	0.235	0.276	0.189	0.074	0.563	*	*	0.955	0.474	*		4.8	4.0	7.3
12	11	0.002	0.0	0.000	0.001	0.003	0.338	0.099	0.107	0.371	0.256	0.344		0.6	5.1
13	10	0.004	0.0	0.001	0.002	0.006	0.360	0.359	0.207	0.702	0.310	0.435	0.909		4.9
14	3	0.029	0.029	0.005	0.045	0.014	*	*	0.178	0.383	0.586	*	0.295	0.325	

Примечания: 1. Жирным шрифтом отмечены вероятности, где различия недостоверны. 2. Для клеток, отмеченных *, значения вероятностей не определены, а вместо расстояния Махаланобиса рассчитывались квадраты евклидовой дистанции.

5. Многомерное шкалирование

В качестве коэффициентов матрицы сходства между комплексами измерений на различных станциях р. Сок можно выбрать любую из четырех статистик, полученных на этапе 4, поскольку для метода МНШ важны не абсолютные значения расстояний, а их взаимная предпорядоченность. На этот раз выполним многомерное шкалирование с использованием матрицы расстояний, составленной из значений критерия Хоттеллинга (см. табл. 7.8).

Полученное решение с достаточной степенью надежности воспроизводит взаимную упорядоченность объектов, заданную в исходной метрике: нормированный коэффициент стресса равен 0.163. Представленные визуально на рис. 7.16 координаты расположения станций в пространстве двух основных шкал позволяют сделать вывод о закономерном изменении гидробиологической обстановки вдоль течения р. Сок: номера станций почти монотонно возрастают вдоль шкалы 1.

Окончательное количество информации после трех этапов сжатия составило только $14 \cdot 2 = 28$ значений, т.е. около 3% от исходного объема.

Если по той же матрице расстояний, составленной из T -статистик Хоттеллинга, выполнить иерархический кластерный анализ с использованием, например, алгоритма Уорда, то получим дендрограмму, изображенную на рис. 7.17. Обе формы представления одной и той же сущности в некотором смысле похожи, но далеко не идентичны, поскольку подходят к проблеме классификации объектов с различных концептуальных позиций.

Сравнение дендрограммы на рис. 7.17, полученной с использованием всего массива наблюдений, и аналогичных дендрограмм на рис. 7.4, где каждую станцию представляло только одно, случайным образом взятое наблюдение, свидетельствует о несомненном преимуществе статистических методов классификационных построений в гидробиологии.

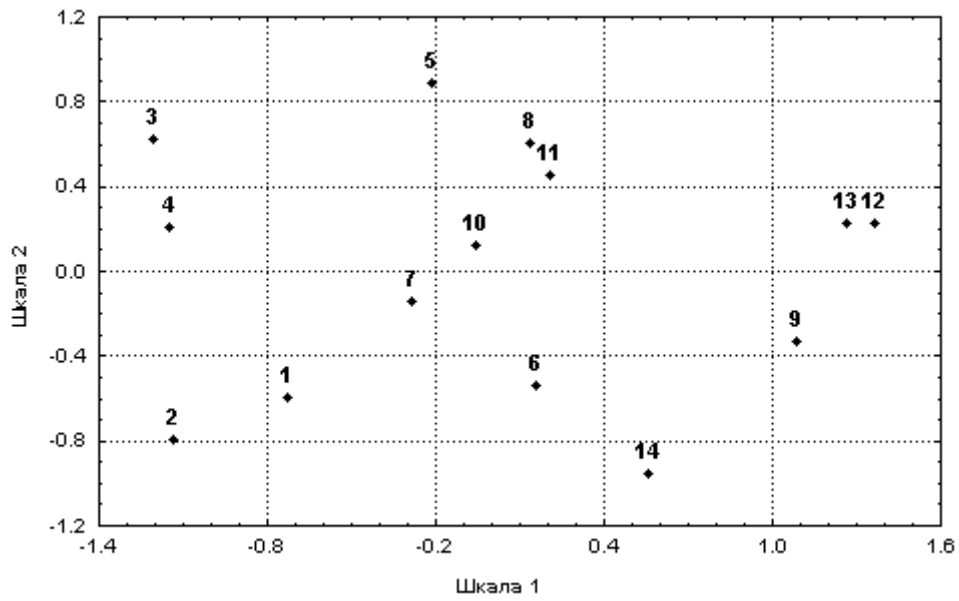


Рис. 7.16. Отображение станций р. Сок в пространстве двух шкал, полученных с использованием статистики Хотеллинга

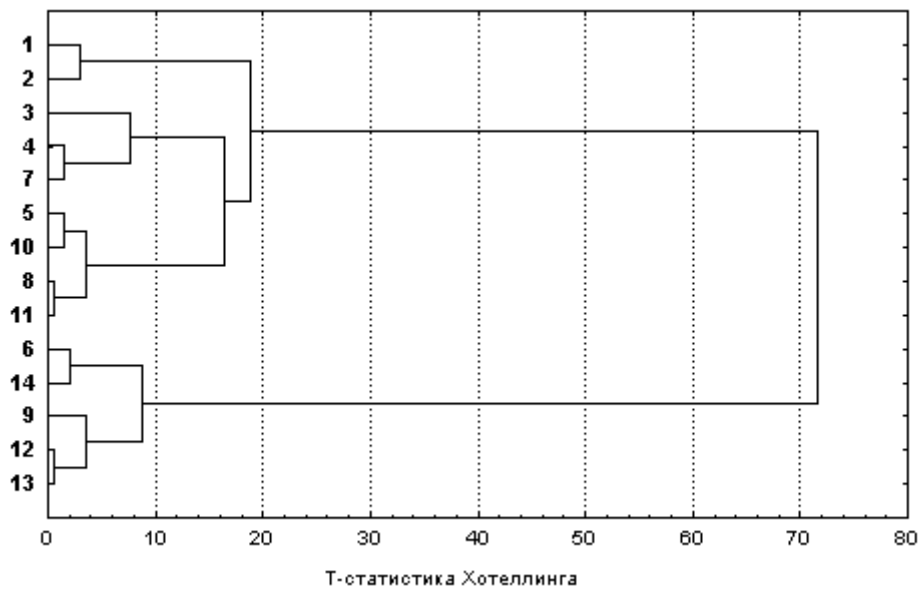


Рис. 7.17. Дендрограмма классификации станций наблюдения р. Сок по пробам зообентоса, выполненная с использованием метода Уорда и Т-критерия

Глава 8. Задача о классе качества вод: прогноз отклика по многомерным эмпирическим данным

8.1. Модель множественной регрессии

Формулировка задачи

Пусть задано пространство признаков X' размерностью $p > 1$, точками которого являются конкретные измерения $x = \{x_1, \dots, x_j, \dots, x_p\}$, где x_j – значение j -го гидробиологического показателя в пробе или некоторого параметра среды, сопутствующего наблюдению. Предположим, что в матрице X' один из столбцов считается объясняемой переменной или откликом y , а некоторое количество остальных признаков m , $m < p$, $m > 1$, определены нами как объясняющие или варьируемые переменные. Если массив наблюдений статистически репрезентативен, то можно сформировать обучающую выборку в виде матрицы независимых переменных $X \rightarrow x_{ij}$, $j = 1, 2, \dots, m$, и сопряженного с ней вектора-столбца $Y \rightarrow y_i$, где $i = 1, 2, \dots, n$ – количество строк измерений ($n > m$), для которых все значения численно определены. Если не оговорено противное, то матрица X дополняется столбцом с фиктивной переменной, тождественно равной единице, $x_{i1} \equiv 1$, что обеспечит вычисление свободного члена регрессии.

Необходимо сконструировать уравнение, выражающее закон изменения отклика Y в зависимости от конкретных значений независимых переменных $X \rightarrow x_{ij}$.

По аналогии с одномерной линейной регрессией (см. раздел 5.5) будем предполагать, что модель наблюдений имеет вид

$$y_i = \theta_1 x_{i1} + \dots + \theta_m x_{im} + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad n \geq m, \quad (8.1)$$

где y_i – значение объясняемой переменной в i -м наблюдении; x_{ij} – известное значение j -ой объясняющей переменной в i -м наблюдении; θ_j – неизвестный коэффициент при j -ой объясняющей переменной; ε_j – случайная составляющая ("ошибка") модели для i -го наблюдения.

Использование множественного регрессионного анализа имеет чрезвычайно широкие возможности для обработки таблиц гидробиологических наблюдений, содержащих, как правило, десятки и сотни потенциальных переменных. В разделе 2.7 была выполнена формальная постановка задачи оценки качества воды, где в "роли" отклика Y фигурировал некоторый показатель произвольной этиологии. Комбинируя факторы в различных сочетаниях, можно, дав простор фантазии, построить тысячи различных вариантов регрессионных моделей и доказать с их помощью любые, в том числе и диаметрально противоположные гипотезы о механизмах функционирования экосистем.

Рекомендуемая литература: [Хальд, 1956; Андерсен, 1963; Себер, 1980; Дрейпер, Смит, 1986; Дюк, 1997; Айвазян, Мхитарян, 1998; С.А. Прохоров, 2001а,б, 2002].

Математический лист

Предположения модели и оценивание по методу наименьших квадратов

Нормальная линейная модель множественной регрессии переменной y с m объясняющими переменными x_1, \dots, x_m основана на следующих предположениях:

- значения $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_m$ в формуле (8.1) представляют собой случайные величины, независимые в совокупности, имеющие одинаковые нормальные распределения $N(0, \sigma_i^2)$ с нулевым математическим ожиданием и дисперсиями $\sigma_i > 0$;
- y_1, \dots, y_n являются наблюдаемыми значениями нормально распределенных случайных величин Y_1, \dots, Y_n , которые независимы в совокупности, и для которых

$$E(Y_i) = \theta_1 x_{i1} + \dots + \theta_m x_{im}, \quad D(Y_i) = \sigma^2,$$

так что $Y_i \sim N(\theta_1 x_{i1} + \dots + \theta_m x_{im}, \sigma^2), i = 1, \dots, n;$

- в отличие от $\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n$, случайные величины Y_1, \dots, Y_n имеют распределения, отличающиеся сдвигами.

Термин «множественная» указывает на использование в правой части модели наблюдений двух и более объясняющих переменных, отличных от постоянного члена.

Оценивание неизвестных коэффициентов модели *методом наименьших квадратов* (МНК) состоит в минимизации по всем возможным значениям $\theta_1, \dots, \theta_m$ суммы квадратов

$$Q(\theta_1, \dots, \theta_m) = \sum_{i=1}^n (y_i - \theta_1 x_{i1} - \dots - \theta_m x_{im})^2 \rightarrow \min. \quad (8.2)$$

Для поиска значений коэффициентов $\theta_1, \dots, \theta_m$, минимизирующих эту сумму, необходимо решить систему из m нормальных линейных уравнений с m неизвестными, которая в векторно-матричной форме имеет вид:

$$X^T X \theta = X^T y, \quad (8.3)$$

где: $X = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1m} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2m} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nm} \end{pmatrix}$ – матрица значений m объясняющих переменных в n на-

блюдениях; X^T – та же матрица в транспонированном виде;

$y = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$ и $\theta = \begin{pmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \\ \vdots \\ \theta_m \end{pmatrix}$ – соответственно, вектор-столбец значений объясняемой переменной в n наблюдениях и вектор-столбец оценок m неизвестных коэффициентов. Система нормальных уравнений (8.3) имеет единственное решение

$$\hat{\theta} = (X^T X)^{-1} X^T y, \quad (8.4)$$

если матрица $X^T X$ не вырождена, т.е. ее определитель отличен от нуля ($\det X^T X \neq 0$), что соответствует линейной независимости столбцов матрицы X .

Обозначив расчетные (т.е. подобранные – fitted) значения объясняющей переменной по оцененной линейной модели связи как $\hat{y}_i = \hat{\theta}_1 x_{i1} + \dots + \hat{\theta}_m x_{im}, i = 1, \dots, n,$ и остаток (residual) для i -го наблюдения как $e_i = y_i - \hat{y}_i$, получим остаточную сумму квадратов:

$$Q_e = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n e_i^2. \quad (8.5)$$

Если рассчитать полную сумму квадратов отклонений

$$Q = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \quad (8.6)$$

и объясненную моделью (explained) сумму квадратов

$$Q_X = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2, \quad (8.7)$$

то, как и в случае простой линейной регрессии с $m = 2$, все эти три суммы квадратов связаны соотношением

$$Q = Q_x + Q_e, \quad (8.8)$$

которое представляет собой разложение полной суммы квадратов. Коэффициент детерминации модели регрессии R^2 определяется как

$$R^2 = 1 - \frac{Q_e}{Q} \quad (8.9)$$

и равен $R^2 = r_{y,\hat{y}}^2$, где $r_{y,\hat{y}}$ – выборочный множественный коэффициент корреляции между переменными y и \hat{y} . Значение R^2 монотонно возрастает с ростом числа переменных (регрессоров) в регрессии, что зачастую не означает улучшения качества предсказания. Потому правильнее использовать скорректированный (adjusted) коэффициент детерминации, учитывающий число использованных регрессоров:

$$R_{adj}^2 = 1 - \frac{\|Y - \hat{Y}\|^2 / (n - m - 1)}{\|Y - \bar{Y}\|^2 / (n - 1)} = 1 - (1 - R^2) \frac{(n - 1)}{(n - m - 1)}. \quad (8.10)$$

Проверка адекватности модели

Определяющим для проверки статистической значимости уравнения является то обстоятельство, что в нормальной линейной модели с несколькими объясняющими переменными оценки $\hat{\theta}_1, \dots, \hat{\theta}_m$ коэффициентов $\theta_1, \dots, \theta_m$ как случайные величины имеют нормальные распределения. Это дает возможность проверить гипотезу $H_0: \theta_j = 0$, которая соответствует предположению исследователя о том, что j -я объясняющая переменная не имеет существенного значения для интерпретации изменчивости величины переменной y и может быть исключена из модели. Если гипотеза $H_0: \theta_j = 0$ не отвергается, то отношение оценки $\hat{\theta}_j$ к его стандартному отклонению $s_{\hat{\theta}_j}$ соответствует t -распределению Стьюдента с $n - m$ степенями свободы, а критическое множество для уровня значимости α имеет вид

$$\left| \frac{\hat{\theta}_j}{s_{\hat{\theta}_j}} \right| > t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n - m). \quad (8.11)$$

В современных компьютерных программах кроме t -статистики приводится также P -значение – вероятность того, что случайная величина, имеющая распределение Стьюдента с $(n - m)$ степенями свободы, примет значение, не меньшее по абсолютной величине, чем наблюдаемое значение $\left| \hat{\theta}_j / s_{\hat{\theta}_j} \right|$. Если указываемое P -значение меньше выбранного уровня значимости α , то это равносильно тому, что значение t -статистики $\hat{\theta}_j / s_{\hat{\theta}_j}$ попало в область отвержения гипотезы H_0 , т.е. $\left| \hat{\theta}_j / s_{\hat{\theta}_j} \right| > t_{1-\frac{\alpha}{2}}(n - m)$. В этом случае параметр θ_j статистически значим и наличие j -й объясняющей переменной в правой части модели существенно для описания наблюдаемой изменчивости объясняемой переменной.

Кроме того, полезно проверить гипотезу об информационной способности всей модели в целом (или, другими словами, гипотезу об общей значимости регрессии в рамках нормальной линейной модели $H_0: \theta_2 = \theta_3 = \dots = \theta_m = 0$) с использованием F -статистики, которая основана на отношении регрессионной суммы квадратов Q_x к остаточной сумме квадратов Q_e :

$$F = \frac{Q_x / (m - 1)}{Q_e / (n - m)}. \quad (8.12)$$

Действительно, чем больше отношение Q_x / Q_e , тем больше есть оснований говорить о том, что совокупность переменных X_1, \dots, X_m действительно объясняет изменчивость отклика

У. Если выполняются перечисленные выше предположения, то F -статистика, рассматриваемая как случайная величина, имеет при гипотезе H_0 стандартное F -распределение Фишера с $(m - 1)$ и $(n - m)$ степенями свободы. В соответствии с этим, гипотеза $H_0 : \theta_2 = \theta_3 = \dots = \theta_m = 0$ отвергается при "слишком больших" значениях F , превышающих пороговое значение при заданном уровне α значимости:

$$F = \frac{Q_X / (m - 1)}{Q_e / (n - m)} > F_{1-\alpha}(m - 1, n - m). \quad (8.13)$$

При этом вероятность ошибочного отвержения гипотезы H_0 равна α . Статистические пакеты, выполняющие регрессионный анализ, приводят кроме F -статистики соответствующее ей P -значение, т.е. оценивается вероятность $P\{F(p - 1, n - p) > F\}$. Если P -значение меньше заданного уровня значимости (равного, например, $\alpha = 0.05$), то уравнение регрессии считается информативным или "значимым в целом". Можно также отметить такой неслучайный факт, что при анализе модели простой (парной) линейной регрессии ($p = 2$) вычисленные P -значения F -статистик совпадают с P -значениями t -статистик, используемых для проверки гипотезы $\theta_2 = 0$.

Переменные, включаемые в модели

"Фиктивные переменные" используются как противоположность "значимым переменным", показывающим уровень количественного показателя, принимающего значения из непрерывного



НАЛИМОВ
Василий Васильевич
(1910-1997),

математик, крупный специалист по наукометрии и теории эксперимента

интервала. Как правило, фиктивная переменная – это индикаторная переменная, отражающая некоторую качественную характеристику. Например, сезонные фиктивные переменные принимают разные значения в зависимости от того, какому месяцу или кварталу года или какому дню недели соответствует наблюдение. Часто применяются бинарные фиктивные переменные, принимающие два значения, 0 и 1, в зависимости от определенного условия. Например, в результате моделирования 0 может означать, что наблюдение принадлежит к "грязным" водоемам, а 1 – к "чистым". Фиктивные переменные, будучи экзогенными, не создают каких-либо трудностей при применении МНК и являются эффективным инструментом построения регрессионных моделей и проверки гипотез.

В линейной регрессионной модели математическое ожидание зависимой переменной – это линейная комбинация регрессоров с неизвестными коэффициентами, которые и являются оцениваемыми параметрами модели. Такая модель является

линейной по виду и в матричной форме ее можно записать как $Y = X\theta + \varepsilon$. Однако не обязательно, чтобы влияющие на Y факторы входили в модель линейно – регрессорами могут быть любые точно заданные (не содержащие неизвестных параметров) функции исходных факторов – это не меняет свойств МНК:

$$y_i = \theta_0 + \sum_{j=1}^k \theta_j \varphi_j(x^i) + \varepsilon_i, \quad i = 1, \dots, n, \quad (8.14)$$

где $\varphi_j(\cdot)$, $j = 1, \dots, m$ – система некоторых функций.

Для применения метода наименьших квадратов важно, чтобы выполнялись два условия:

- каждую из функций $\varphi_j(\cdot)$ можно переобозначить как новую переменную, т.е. преобразованием уравнения регрессии ее можно привести к *внутренне* линейному виду;
- ошибка уравнения регрессии оставалась *аддитивной*, то есть, чтобы зависимая переменная являлась суммой своего математического ожидания и ошибки.

Линеаризация не должна быть самоцелью – может случиться, что "истинная" модель бывает настолько нелинейной, что приходится пожертвовать удобствами общего МНК и использовать нелинейные методы оценивания параметров.

Основное преимущество учета нелинейности для простых моделей связано с компенсацией гомоскедастичности при расчете параметров уравнения регрессии. В методе наименьших квадратов все наблюдения выступают в одинаковых "весовых категориях", и поэтому в оценках непропорционально мало используется информация от признаков с меньшей дисперсией. В то же время, многие гидробиологические переменные таковы, что размер отклонений, связанных с ними, пропорционально зависит от величины самих переменных и возникающая при этом гетероскедастичность снижает эффективность оценок параметров. Например, логарифмирование численности или биомассы существенно может улучшить адекватность расчетного уравнения.

Расширение переменных уравнения регрессии за счет использования различных функциональных генераций исходных признаков позволяет также уменьшить недоопределенность модели, когда сложность структуры аппроксимирующей функции недостаточна для отображения сложности изучаемого динамического процесса («*Время простых моделей прошло*» – У.Р. Эшби). Например, в разделе 2.7 было показано, что огромное большинство процессов в природе может быть описано в виде полиномов высокой степени, являющихся частным случаем обобщенного полинома Колмогорова – Габора (1.13):

$$y = a_0 + \sum_{i=1}^m a_i x_i + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m a_i a_j x_i x_j + \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m a_i a_j a_k x_i x_j x_k + \dots$$

Поэтому основная задача моделирования сложных систем с использованием регрессионных уравнений заключается в том, чтобы "обнулить" (вычеркнуть) в полиноме Колмогорова – Габора подмножество "лишних" или незначимых коэффициентов и сохранить оптимальное сочетание объясняющих членов (выражаясь образным языком – «*отсечь все лишнее от глыбы мрамора, превратив ее в статую*»).

Кроме натуральных степеней исходных переменных можно использовать и другие функции от них: $\ln X$, \sqrt{X} , $1/X$, $e^{\alpha X}$, тригонометрические преобразования, логистическую функцию $1/(1+e^{-X})$, преобразование Бокса-Кокса $\frac{X^\alpha - 1}{\alpha}$ и т.д. В качестве примера использования такого подхода в гидробиологии можно привести работу В.А. Тереховой с соавторами [1998].

Методы структурной идентификации моделей.

Обычно исследователь обладает достаточной свободой при выборе функциональной формы модели. Важно лишь, чтобы при этом не нарушались те условия, которые необходимы для хорошей работы применяемых методов оценивания. Но при этом нужно не забывать проводить проверку правильности спецификации модели и исправлять уравнение, когда получена плохая диагностика (например, исключать или добавлять одночлены более высоких степеней в полиномиальную модель).

Принцип множественности моделей утверждает, что для сложных систем по экспериментальным данным нельзя ограничиваться одной единственной моделью. Для каждого объекта, рассматриваемого как некоторый черный ящик, можно найти бесконечное множество уравнений, имеющих одинаковые или почти одинаковые внешние проявления. Однако логика научных исследований требует селекции одной или нескольких моделей регрессии оптимальной или субоптимальной структуры. Для решения этой задачи генерируются определенные наборы уравнений различной сложности и отбираются лучшие из них по некоторому целесообразно заданному критерию регуляризации.

Большинство таких критериев стремится найти компромисс между сложностью и лаконизмом. Иными словами, в уравнение регрессии включается только то минимальное подмножество входных информативных переменных x , которое без существенной потери информации позволяет объяснить имеющийся статистический разброс.

Стандартная пошаговая процедура "включений с исключениями", впервые описанная в работе М.А. Эфроимсона [Efroimson, 1960; Афифи, Эйзен, 1982; Дрейпер, Смит, 1986], и базирующаяся на общей идее метода наименьших квадратов, позволяет с заданной надежностью выбрать из полной матрицы стандартизированных нормальных уравнений наилучшую невырожденную подматрицу, т.е. выбрать модель наиболее оптимальной структуры. Включение и исключение

переменных в модель осуществляется с использованием некоторой статистики – t -критерия для проверки равенства нулю частного коэффициента корреляции. Квадрат этого критерия имеет F -распределение и поэтому называется *последовательным* (или *частным*) F -критерием Фишера для включения (либо исключения).

Выбор первой переменной для включения в модель осуществляется для признака x_i , который имеет наибольший по абсолютной величине коэффициент парной корреляции с откликом r_{qi} . При этом процедура включения выполняется, если справедливо неравенство для последовательного F -критерия: $F > F_o$, где F_o – наперед заданное исследователем пороговое значение. Процесс расширения количества переменных модели повторяется многократно, пока статистическая значимость включения очередного признака по F -критерию на каждом шаге превышает заданный порог F_o . После очередного расширения модели анализируется взаимная коррелированность отобранных переменных и, если их взаимосвязь существенна, то лишние факторы, вносящие наименьший вклад, из модели исключаются. Более точно, исключению подлежат те переменные, для которых вычисленное значение частного F -критерия меньше F_o . Вычисления прекращаются, если не осталось ни одной переменной, для которой вычисленное значение последовательного F -критерия превысило бы заданный порог.

Робастные методы регрессии

Если распределение ошибок в регрессии отличается от нормального, то это не приводит к таким серьезным последствиям, как несостоятельность оценок. Все же на нормальность рекомендуется обращать внимание, т.к. если распределение ошибок имеет "толстые хвосты" или сильно асимметрично, то метод наименьших квадратов может давать не очень точные оценки. Кроме того, отсутствие нормальности означает, что вычисляемые t - и F -статистики не распределены в конечных выборках точно как t и F . Хотя эти статистики остаются состоятельными, но при сильном отклонении от нормальности асимптотическое приближение может быть очень неточным, особенно, если размер выборки мал. Использование, так называемых, *робастных* методов оценивания позволяет повысить эффективность регрессионного анализа.

В *медианной регрессии* оценки получаются минимизацией суммы модулей отклонений, а не суммы квадратов отклонений, как в методе наименьших квадратов, что делает расчеты более устойчивыми к "аномальным выбросам" измерений.

В отличие от обычной регрессии, *квантильная регрессия* оценивает не математическое ожидание зависимой переменной, а одну из квантилей.

Метод *инструментальных переменных* применяется в случае, когда ошибка в регрессии может быть скоррелирована с некоторыми из регрессоров. Чаще всего его используют для оценивания отдельного уравнения из системы одновременных уравнений. В этом контексте он известен как *двухшаговый метод наименьших квадратов*.

В линейной регрессии с *мультипликативной гетероскедастичностью* дисперсия ошибки равна $e^{(Z(i)\omega)}$, где Z – матрица, состоящая из переменных, от которых зависит дисперсия, ω – вектор параметров гетероскедастичности.

Тобит (цензурированная регрессия) – это регрессионная модель, в которой зависимая переменная является *цензурированной*, т.е. зависимая переменная преобразовывается, если она меньше (или больше) некоторой границы. Типичным примером является модель с левым цензурированием в нуле, когда вместо наблюдаемого отклика y^*_i принимается переменная y_i , которая получает значения $y_i = 0$, если $y^*_i < 0$ и $y_i = y^*_i$, если $y^*_i \geq 0$. В отличие от тобита, в модели *усеченной регрессии* наблюдение целиком исключается, если отклик меньше (или больше) некоторой границы.

Результаты расчетов:

Приведем несколько характерных примеров расчета уравнений регрессии, но прежде необходимо еще раз обратить внимание на то, что эти результаты мы трактуем как "истину" в некоторой ограниченной "области справедливости", а именно – все полученные выводы характерны для изучаемого нами объекта (малых рек Самарской области) и вытекают из конкретного собранного материала со всеми его неточностями и условностями.

Моделирование среднего веса особи

Одной из важнейших характеристик сообществ зообентоса является его размерная структура, выраженная в изменчивости «средних индивидуальных масс особей W_{cp} » (термин из работы В.А. Яковлева [2001] не вполне корректен, т.к. "средний" показатель не может быть одновременно "индивидуальным"). Показатель W_{cp} предлагается [Яковлев, 2001] считать одним из «фундаментальных свойств водных экосистем». Автором найдена основополагающая прямо пропорциональная зависимость между разнообразием (индексом Шеннона H) и W_{cp} , «которая сохраняется даже в антропогенно-нарушенных условиях». Высказываются гипотезы, что средний вес особи закономерно возрастает, например, от горных ландшафтов к лесистым, от бессточных озер к проточным, от глубоководных участков к мелководьям и т.д.

Будем считать средней массой особи W_{cp} частное от деления суммарной биомассы (мг) на суммарную численность для некоторого подмножества организмов, наблюдаемых в конкретной гидробиологической пробе. Эта масса может быть рассчитана как средняя для вида, трибы, семейства, трофической группы или всего зообентоса в целом. Такое усреднение может показаться неправомерным, как не имеющее гидробиологического смысла, однако можно вспомнить, что весьма представительная теория термодинамики идеальных газов основывается на аналогичном показателе – кажущейся (или приведенной) молекулярной массе компонентов, входящих в газовую смесь, которую никто не считает неестественной. Разумеется, речь в данном контексте будет идти уже не о реальном весе какого-то конкретного организма, а о некотором интегральном показателе гидробиологического сообщества, напрямую зависящем от текущего соотношения видов.

Сформируем пять выборок, содержащих значения средней массы особи W для всего зообентоса в целом по результатам 540 проб наблюдений, а также отдельно для видов хищников-хватателей (384 измерения), семейств Oligochaeta (418 изм.), Chironomidae (473 изм.) и трибы Chironomini (337 изм.), встретившихся в тех же пробах. Будем искать регрессионную зависимость среднего веса особи от следующих восьми переменных:

- показателей обилия: X_{NB} – логарифма индекса плотности населения $\ln((N_s * B_s)^{1/2})$, где N_s и B_s – суммарные численность и биомасса, и X_S – общего числа S видов зообентоса в пробе;
- традиционных индексов: X_H – информационного индекса Шеннона, X_V – биотического индекса Вудивисса и X_P – олигохетного индекса Пареле;
- фиктивных переменных, измеренных в порядковых шкалах: X_{MS} – сезонной составляющей ($X_{MS} = d / 30$, где d – количество дней с начала года до даты проведения наблюдения, $X_{MS} = 5 \div 10$), X_{KK} – класса качества вод на станции, оцененного по гидрохимическим показателям, $X_{KK} = 2 \div 6$, и X_{TW} – типа водоема в точке отбора пробы, $X_{TW} = 1 \div 6$.

Тип водоема X_{TW} был специфицирован по следующей последовательности категорий: 1 – ручьи и родники, 2 – малые реки возвышенностей, 3 – малые равнинные реки, 4 – средние равнинные реки, 5 – устья, 6 – озера и водохранилища.

По результатам расчетов, представленным в таблице 8.1, можно сделать следующие выводы:

1. Анализ характера распределения средней массы особей зообентоса выявил большую асимметрию $A = 9.2$ и эксцесс $\mathcal{E} = 107$. Предварительное логарифмирование значений W позволяет существенно приблизить закон распределения отклика $\ln(W)$ к нормальному и одновременно улучшить параметры модели – коэффициент детерминации R^2 и оценку значимости регрессионного уравнения по F -критерию.
2. Для большинства полученных уравнений существует значимая прямо пропорциональная зависимость среднего веса особи от показателя обилия X_{NB} . На этом факте можно было бы развить некоторую содержательную гипотезу, объясняющую продукционные механизмы формирования размерной структуры сообществ. Однако здесь нельзя не принять во внимание возможность чисто статистического эффекта: частное от деления двух показателей всегда в определенной степени зависит от одного из них, особенно, если "вариационная эластичность" переменных различается.
3. Отсутствует достоверная связь W с индексом Шеннона X_H , отражающим эквитабельность численности по видам. В то же время, средний вес особей значимо уменьшается с увеличением числа видов в пробе X_S , представляющего биоразнообразие экосистемы в явном виде. Это значит, например, что гипотезу об увеличении W в условиях отсутствия трофической конкуренции будет чрезвычайно сложно опровергнуть.

Таблица 8.1

Параметры уравнений регрессии, связывающих средний вес особи (W) с комплексом варьируемых переменных (обозначения см. по тексту).
 В шапке таблицы: $M \pm m$ – среднее и доверительный интервал, R^2 – коэффициент детерминации, %; F – статистика Фишера для оценки значимости регрессии

Группа	$M \pm m$	Уравнение регрессии	R^2 / F
Все виды зообентоса	53.8 ± 22.6	$W = -270.6 + 58.1 \cdot X_{NB} + 34.2 \cdot X_H - 13.87 \cdot X_S - 2.87 \cdot X_V - 126.8 \cdot X_P + 4.77 \cdot X_{MS} - 30.65 \cdot X_{KK} + 21.45 \cdot X_{TW}$	14.15 11.69
		$\ln(W) = -3.86 + 0.671 \cdot X_{NB} + 0.38 \cdot X_H - 0.126 \cdot X_S - 0.006 \cdot X_V - 0.885 \cdot X_P + 0.019 \cdot X_{MS} - 0.13 \cdot X_{KK} + 0.189 \cdot X_{TW}$	33.86 34.22
Хищники хвататели	4.66 ± 1.08	$\ln(W) = 1 + 0.044 \cdot X_{NB} + 0.018 \cdot X_H - 0.006 \cdot X_S + 0.071 \cdot X_V + 0.164 \cdot X_P - 0.059 \cdot X_{MS} - 0.0003 \cdot X_{KK} - 0.198 \cdot X_{TW}$	6.96 4.58
Семейство Oligochaetae	2.95 ± 3.26	$\ln(W) = -0.55 + 0.139 \cdot X_{NB} + 0.056 \cdot X_H - 0.044 \cdot X_S + 0.03 \cdot X_V - 0.006 \cdot X_P - 0.158 \cdot X_{MS} + 0.067 \cdot X_{KK} + 0.029 \cdot X_{TW}$	8.15 5.63
Семейство Chironomidae	2.01 ± 0.33	$\ln(W) = -0.93 + 0.148 \cdot X_{NB} + 0.109 \cdot X_H - 0.046 \cdot X_S - 0.06 \cdot X_V + 0.375 \cdot X_P - 0.036 \cdot X_{MS} + 0.065 \cdot X_{KK} + 0.033 \cdot X_{TW}$	15.53 11.85
Триба Chironomini	1.52 ± 0.18	$\ln(W) = 1.1 + 0.014 \cdot X_{NB} + 0.028 \cdot X_H - 0.02 \cdot X_S - 0.003 \cdot X_V + 0.16 \cdot X_P - 0.113 \cdot X_{MS} + 0.066 \cdot X_{KK} - 0.149 \cdot X_{TW}$	5.26 3.33

Примечание: Жирным шрифтом отмечены статистически значимые коэффициенты по t-критерию.

- Влияние сезонного фактора X_{MS} значимо проявляется и становится определяющим для динамики среднего веса, вычисленного для отдельных таксономических групп – семейства Oligochaeta и трибы Chironomini. Этот факт имеет вполне объяснимый гидробиологический смысл: в большой группе организмов, таких, как весь бентос или семейство Chironomidae, всегда найдутся подмножества видов, заполняющих экологическую нишу в любой момент вегетационного периода.
- Зависимость среднего веса особи от категории водоема неоднозначна для различных таксономических групп. Например, хищники и особи видов трибы Chironomini устойчиво крупнее в небольших проточных водоемах. Однако в целом для всего бентоса эта зависимость становится противоположной, что объясняется вкладом моллюсков Unionidae, Gastropoda, Dreissenidae с очень высоким индивидуальным весом особей, которые преобладают в малопроточных глубоководных участках рек.
- Влияние на W_{cp} уровня загрязнения водоемов, оцениваемого явно классом качества X_{KK} и неявно индексами X_V и X_P , носит достаточно эпизодический и нестационарный характер. Можно усмотреть некоторое уменьшение массы организмов зообентоса в целом в грязных водоемах (по X_P и X_{KK}) и аналогичное увеличение веса хирономид в тех же условиях (по X_V). Для остальных моделей факторы загрязнения оказались незначимыми. В определенной мере такой результат объясняется ощутимой взаимной коррелированностью переменных X_{KK} , X_V и X_P : например, коэффициент парной корреляции между индексом Вудивисса V и классом качества составил -0.539. Произошло своего рода "распыление объясняющей способности" между тремя конкурирующими показателями, что могло негативно сказаться на выводах модели.

Уместно на этом примере заметить, что полезность признака, как регрессора не всегда соответствует величине t -критерия Стьюдента, поскольку последний исходит из предположения о взаимной независимости переменных и не учитывает их взаимную коррелированность.

Пошаговая регрессия для оценки связи гидрохимических и гидробиологических показателей

Искусство регрессионного анализа заключается не в прямолинейной технике расчета коэффициентов уравнений, а в тщательной селекции наиболее существенных регрессоров и учете нелинейного характера их связи с откликом, что объединяется в понятие «структурной идентификации модели». Рассмотрим использование пошаговой процедуры в расширенном пространстве переменных на примере анализа связи между гидрохимическими и гидробиологическими показателями.

Сформируем исходный набор признаков из следующих 7 показателей: X_H – информационного индекса Шеннона, X_V – биотического индекса Вудивисса, X_P – олигохетного индекса Парелле, X_{CI} – хирономидного индекса Балужкиной, числа видов X_S , логарифмов суммарной численности X_N и биомассы X_B зообентоса в пробе. Добавим в таблицу признаков столбцы вторичных переменных, которые будем получать за счет всех возможных парных произведений и различных математических функций от всех 7 исходных переменных: X_H^2 , $X_H \cdot X_V$, $X_H \cdot X_P$, $X_H \cdot X_P \cdot X_{CI}$, ..., $1/X_H$, $X_H^{0.5}$, $1/X_H^{0.5}$ и т.д. Общее число варьируемых переменных после преобразования матрицы данных и включения базисных функций увеличивается с 7 до 55.

Зададимся, согласно рекомендациям А. Аффифи и С. Эйсена [1982], пороговым значением для частного F -критерия = 3.5 и, используя пошаговый метод включений с исключениями Эфронсона, получим следующие модели регрессии для различных гидрохимических показателей:

- для концентрации минерального фосфора, мг/л ($n = 117$):

$$Y_p = 0.0917 - 0.0337 \cdot X_S^{0.5} + 0.012 \cdot X_B,$$

т.е. увеличение содержания фосфора сопровождается уменьшением числа видов и увеличением биомассы зообентоса, что характерно для процессов эвтрофирования;

- для концентрации аммонийного азота, мг/л ($n = 86$):

$$Y_{NH4} = 0.00619 + 0.69 / X_S + 0.00107 \cdot X_S \cdot X_N + 0.074 \cdot X_P \cdot X_N - 0.239 \cdot X_H \cdot X_P;$$

- для биохимического потребления кислорода, мгО²/л ($n = 87$):

$$Y_O = 1.096 + 6.58 / X_S + 0.132 \cdot X_H \cdot X_{CI} - 9.22 \cdot X_P + 1.32 / (X_{CI})^{0.5}$$

- для содержания ионов железа, мг/л ($n = 67$):

$$Y_{Fe} = 0.13 - 0.087 \cdot X_P \cdot X_S + 1.39 \cdot X_P^2 + 0.0039 \cdot X_N \cdot X_B.$$

Преимущество пошаговой процедуры, выполнившей подбор информативной комбинации из 55 признаков, заключается не только в компактности получаемых уравнений, но и в существенном повышении уровня их адекватности. Все представленные модели являются достоверными с высоким уровнем значимости, когда как практически все коэффициенты регрессии аналогичных полных линейных уравнений на основе тех же 7 признаков статистически недостоверны по t -критерию. Читатель может сравнить в табл. 8.2 значения коэффициентов детерминации и F – статистик Фишера для оценки значимости двух типов регрессий: полной линейной и нелинейной с селекцией переменных для моделирования одного и того же отклика.

Таблица 8.2

*Сравнительные характеристики регрессионных моделей,
связывающих гидрохимические и гидробиологические показатели*
(R^2 – коэффициент детерминации, %, r – коэффициент множественной
корреляции,
 F – статистика Фишера для оценки значимости регрессии,
 p – вероятность, соответствующая F -критерию)

Наименование отклика (гидрохимического показателя)	Типы регрессионных моделей					
	На основе индексов и обобщенных показателей				На основе относительной численности таксономических групп	
	Полная линейная модель		Нелинейная модель с селекцией переменных			
	R^2 / r	F / p	R^2 / r	F / p	R^2 / r	F / p
Фосфор минеральный	<u>7.35</u> 0.271	<u>1.775</u> 0.099	<u>9.75</u> 0.312	<u>6.154</u> ~0.0	<u>32.08</u> 0.567	<u>6.91</u> ~0.0
Азот аммонийный	<u>4.185</u> 0.205	<u>0.804</u> 0.587	<u>17.49</u> 0.418	<u>4.293</u> ~0.0	<u>47.65</u> 0.69	<u>8.09</u> ~0.0
БПК ₅	<u>5.02</u> 0.224	<u>1.123</u> 0.357	<u>29.87</u> 0.547	<u>6.899</u> ~0.0	<u>43.51</u> 0.66	<u>10.12</u> ~0.0

Железо	$\frac{11.6}{0.341}$	$\frac{1.675}{0.133}$	$\frac{28.26}{0.532}$	$\frac{8.27}{\sim 0.0}$	$\frac{43.75}{0.661}$	$\frac{6.03}{\sim 0.0}$
--------	----------------------	-----------------------	-----------------------	-------------------------	-----------------------	-------------------------

Определяющими параметрами в уравнениях, полученных пошаговой процедурой, являются "натуральные" показатели X_S , X_N и X_B , а столь популярные в гидробиологических работах индексы в нашем примере играют роль очевидных статистов. Например, биотический индекс Вудивисса вообще оказался не связанным ни с одним из гидрохимических показателей.

Связь гидрохимических показателей с обилием таксономических групп

Сформируем матрицу варьируемых переменных из относительных долей таксономических групп зообентоса:

$$x_j = \ln(N_j^s) / \sum_{j=1}^m \ln(N_j^s), \quad (8.15)$$

где N_j^s – общая численность особей j -й группы, $j = 1, 2, \dots, m$; m – число таксономических групп, встретившихся в каждой пробе наблюдений.

Группы, как мы это уже ранее делали неоднократно, выделим по двум параллельным грациям – по систематике и трофическому признаку. Генерировать вторичные переменные в данном случае не будем.

Применим пошаговый метод включений с исключениями Эфроимсона для расчета моделей регрессии для тех гидрохимических показателей, что и в предыдущем примере. Ориентируясь на знак коэффициентов рассчитанных уравнений, представленных в табл. 8.3, можно сформулировать гипотезы об увеличении (знак «+») или уменьшении (знак «-») удельной доли таксономических групп в сообществе при возрастании соответствующего гидрохимического показателя. Относительную достоверность каждого предположения можно оценить по величине частных F -критериев, с которыми отдельные признаки включались в модель (пороговое значение в этом случае было равно 2.5). Коэффициенты множественной корреляции и оценки значимости полученных уравнений с использованием статистики Фишера приведены в табл. 8.2.

Выполненные расчеты со всей очевидностью свидетельствуют о том, что комплекс признаков, составленный из абсолютных или относительных значений обилия и представляющий все таксономические группы гидробионтов, значительно адекватнее связан с факторами среды, чем суммарные гидробиологические показатели или отдельные субъективные индексы. Впрочем, этот практический вывод лишь подтверждает естественное умозаключение: таблица численности и биомассы особей, суммированных по таксономическим группам, уже содержит в полном, хоть и неявном виде, всю информацию, содержащуюся в любом из обобщенных индексов. При этом, обратная информационная трансформация является невозможной, поскольку после расчета любого индекса значительная часть данных о структуре биоценоза становится безвозвратно потерянной.

8.2. Регрессия с качественной зависимой переменной

Формулировка задачи

Пусть в рамках задачи множественной регрессии зависимая переменная Y принимает фиксированные значения из некоторого заранее предопределенного набора, т.е. моделируемому объекту приписывается выбор между двумя и более возможными альтернативами. В частности, модель с бинарной переменной включает отклик, принимающий два значения (обычно 0 и 1), а также регрессоры X , которые содержат факторы, определяющие альтернативный выбор.

Эта задача возникает, как правило, если моделируемый показатель измерен в порядковой шкале, которая принципиально не может быть преобразована в непрерывную числовую последовательность. Пусть, например, рассматривается оценка пола особи: мужской (0) или женский (1). Тогда построенная обычная линейная регрессия будет предсказывать абсурдные значения Y – дробные, отрицательные и больше единицы. Может быть, это как-то и интерпретируется с медицинской точки зрения, но в практике гидробиологических исследований такое будет едва ли возможно.

Для случая с качественной зависимой переменной требуется найти модель, которая порожидала бы дискретное распределение $E(Y / X)$, зависящее от X и хорошо описывающие исходные данные. Классическая модель регрессии не подходит для описания этой ситуации, поскольку предполагает, что зависимая переменная имеет непрерывное распределение.

Таблица 8.3

Коэффициенты регрессионных моделей, связывающих гидрохимические показатели и относительную численность групп зообентоса
(n – количество измерений, m – количество таксономических групп)

Гидрохимические показатели	Коэффициенты уравнения	Наименования таксономических групп зообентоса, относительные численности которых включены в модель	Частный F -критерий
Фосфор минеральный ($n = 126$, $m = 66$)	0.143	Свободный член	-
	0.7	Сестоно-детритофаги фильтраторы / Unionidae	21.39
	- 0.434	Хищники хвататели / Tanypodinae	17.66
	- 0.599	Хищники хвататели / Limoniidae	6.66
	- 0.3	Всеядные собиратели+хвататели / Chironomini	8.24
	- 0.233	Сестоно-детритофаги фильтраторы / Bivalvia	6.71
	- 0.846	Сестоно-детритофаги фильтраторы / Gastropoda	2.92
	-1.38	Сестоно-детритофаги фильтраторы / Simuliidae	3.67
- 0.77	Фитодетритофаги собиратели / Psychodidae	2.93	
Азот аммонийный ($n = 90$, $m = 61$)	0.276	Свободный член	
	11.422	Хищники хвататели / Megaloptera	31.63
	0.362	Детритофаги собиратели / Chironomini	5.21
	- 0.974	Всеядные собиратели+хвататели / Nematoda	6.56
	0.461	Детрито-фитофаги / Tanytarsini	4.68
	0.445	Детрито-фитофаги / Chironomini	3.85
	- 0.797	Хищники хвататели / Tanypodinae	6.28
	-1.277	Фитодетритофаги собиратели / Ephydriidae	5.84
- 0.251	Детритофаги собиратели / Oligochaeta	4.72	
- 0.445	Хищники хвататели / Prodiamesinae	2.54	
БПК ₅ ($n = 100$, $m = 46$)	3.446	Свободный член	
	37.21	Хищники хвататели / Megaloptera	20.46
	2.845	Детритофаги собиратели / Oligochaeta	17.25
	17.63	Всеядные собиратели+хвататели / Nematoda	14.36
	10.25	Сестоно-детритофаги фильтраторы / Chironomini	8.77
	3.844	Детрито-фитофаги / Chironomini	10.16
	- 4.532	Всеядные собиратели+хвататели / Chironomini	4.32
	27.46	Сестоно-детритофаги фильтраторы / Gastropoda	3.91
Железо ($n = 71$, $m = 58$)	0.054	Свободный член	
	4.1	Детритофаги собиратели / Polychaeta	15.35
	1.3	Хищники хвататели / Prodiamesinae	7.24
	2.52	Хищники хвататели / Diamesinae	7.39
	1.25	Детрито-фитофаги / Chironomini	7.48
	2.67	Хищники хвататели / Limoniidae	5.63
	4.01	Хищники хвататели / Homoptera	5.23
	0.461	Детритофаги собиратели / Oligochaeta	5.73
0.87	Хищники хвататели / Tanypodinae	2.64	

С этой целью рассматривается логистическая регрессия, которая выражает статистическую связь в виде зависимости $P\{Y=1|X\}=f(X)$, т.е. прогнозируется вероятность события $\{Y = 1\}$, обусловленная значениями независимых переменных X^1, \dots, X^p . Геометрически суть задачи состоит в том, чтобы найти одну из возможных гиперплоскостей, которая бы в определенном смысле наилучшим образом разделяла бы две группы наблюдений (соответствующие 0 и 1) в пространстве регрессоров.

Рекомендуемая литература: [Бикел, Доксам, 1983; Справочник по прикладной..., 1989].

Математический лист

Логистическая регрессия выражает модель связи между откликом и переменными в виде формулы

$$P\{Y = 1 | X_1, \dots, X_p\} = \frac{e^{\hat{Y}}}{1 + e^{\hat{Y}}}, \quad (8.16)$$

где переменная $\hat{Y} = \theta_0 + \theta_1 X_1 + \dots + \theta_p X_p$ называется *логитом*. Такая модель с бинарной зависимой переменной, по сути, является функцией логистического закона распределения

$$F(x) = \frac{e^{(x-a)/k}}{1 + e^{(x-a)/k}}, \quad (8.17)$$

в которой в качестве аргумента используется линейная комбинация независимых переменных.

Наряду с моделью, имеющей логистически распределенное отклонение, используют также близкую ей модель *пробит* с нормально распределенным отклонением (см. рис 8.1).

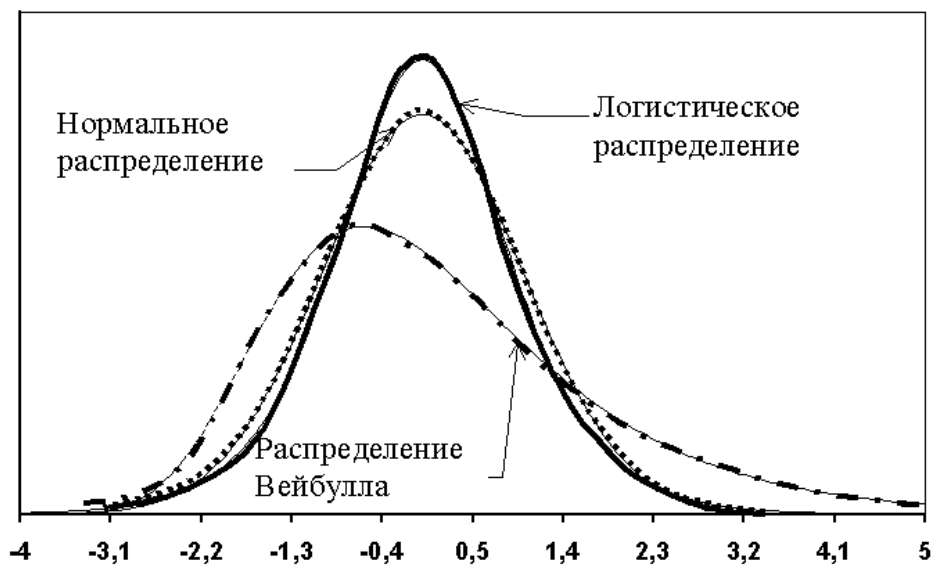


Рис 8.1. Виды распределений, используемых в логистической регрессии

Различить, когда следует применять логит, а когда – пробит, в случае малых выборок невозможно, поскольку оценки коэффициентов θ отличаются множителем, который практически постоянен.

Предлагается два вида моделей выбора, которые могли бы породить интересующие нас распределения зависимой переменной: *пороговая* модель и модель, основанная на *полезности альтернатив*.

Пороговая модель предполагает, что прогнозирование отклика основывается на ненаблюдаемой непрерывной переменной \hat{Y} , математическое ожидание которой является линейной комбинацией набора регрессоров X : $\hat{Y} = X\theta + \varepsilon$. Отклик Y , являющийся дискретной величиной, связан с \hat{Y} следующим образом: если \hat{Y} больше некоторой пороговой величины C , то $Y = 1$, если меньше, то $Y = 0$. Как обычно предполагается, что ошибки ε_i имеют нулевое математическое ожи-

дание, одинаково распределены и независимы. Величину C обычно принимают равной 0.5. Пробит- или логит-уравнение $\hat{Y} = X\hat{\theta}$ задает в этом случае гиперплоскость, которой разделяются две группы точек: $\hat{Y}_i = X\hat{\theta} < 0.5 \Rightarrow 0$ и $\hat{Y}_i = X\hat{\theta} > 0.5 \Rightarrow 1$.

О качестве модели можно судить по графику оценки $E(Y)$ по \hat{Y} , который в случае "хорошей" модели должен быть "крутой" в нуле. На двух графиках, представленных на рис. 8.2, слева внизу и справа вверху расположены правильно предсказанные точки, а слева вверху и справа внизу — неправильно.

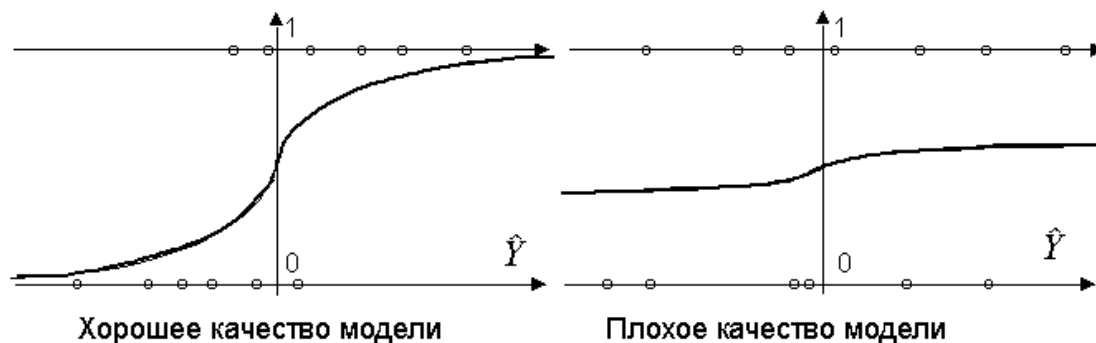


Рис. 8.2. График оценки $E(Y)$ по \hat{Y} для различных моделей с бинарной зависимой переменной

Множественный логит- или пробит-анализ являются естественным продолжением бинарного и возникают, когда рассматривается выбор между более, чем двумя альтернативами. Упорядоченный логит, развивающий пороговую модель, имеет дело с альтернативами, которые можно расположить в определенном порядке. Например, это могут быть шкала оценок класса качества вод, зоны сапробности и т.д.

Будем предполагать, что альтернативы пронумерованы от 0 до S , а переменная Y принимает значение s , если выбрана альтернатива s . Как и в бинарной модели, в основе выбора лежит ненаблюдаемая величина $\hat{Y} = X\hat{\theta} + \varepsilon$, для ранжирования которой рассчитывается s пороговых значений $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_s$. Предполагается, что $Y=0$, если \hat{Y} меньше нижнего (первого) порогового значения, $Y=1$, если \hat{Y} попадает в промежуток от первого до второго порогового значения и т. д.; $Y=S$ выбирается, если \hat{Y} превышает верхнее пороговое значение, т.е.:

$$Y_i = \begin{cases} 0, & \text{если } \hat{Y} \leq \gamma_1 \\ 1, & \text{если } \gamma_1 < \hat{Y} \leq \gamma_2 \\ \dots & \\ S, & \text{если } \hat{Y} > \gamma_S \end{cases} \quad (8.18)$$

Коэффициенты пробита и логита обычно оценивают методом максимального правдоподобия, рассмотрение теоретических аспектов которого выходит за рамки нашего изложения (подробно см. [Цыплаков, URL]). Статистика отношения правдоподобия, которая распределена асимптотически как χ^2 с $m-1$ степенями свободы, где m — количество параметров в исходной модели, используется для построения показателя качества модели, аналогичного F -статистике для линейной регрессии, т.е. для проверки гипотезы о том, что коэффициенты при всех регрессорах, кроме константы, равны одновременно нулю. Для моделей с бинарной зависимой переменной можно сконструировать и некий аналог коэффициента детерминации — псевдо- R^2 : Однако для логистической регрессии, на наш взгляд, существует наиболее естественный критерий качества — вероятность ошибки при оценке прогнозируемых альтернатив. Понятно, что "хорошая" модель должна давать высокий процент правильных предсказаний.

Если категории прогнозируемого отклика не упорядочены (например, сравниваются наблюдения для различных водоемов), то предполагается, что выбор делается на основе функции полезности альтернатив $u(Y, X)$. Для бинарной модели, если $u(1, X) > u(0, X)$, то выбираем 1, а если $u(0, X) < u(1, X)$, то выбираем 0. Для множественного логита Y_i выбирается равным s , если $u_s(Z_i) >$

$u_t(\mathbf{Z}_i) \forall s \neq t$. При выборе вида функции полезности обычно делают одно из двух упрощающих допущений:

- регрессоры для всех альтернатив одни и те же: $u_s = \mathbf{Z} \boldsymbol{\beta}_s + \boldsymbol{\varepsilon}_s$;
- функция имеет один и тот же вид, а меняются только факторы, определяющие выбор, т.е.

$$u_s = \mathbf{Z}_s \boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\varepsilon}_s.$$

При этом также принимается, что ошибки $\boldsymbol{\varepsilon}_s$ имеют стандартное распределение Вейбулла $F(X) = e^{-e^{-X}}$ (см. рис.8.1).

Результаты расчетов

Бинарная логистическая регрессия на основе показателей обилия групп
Сформируем выборку для построения бинарной логистической модели следующим обра-

зом:

- в качестве отклика Y примем альтернативу 0 («чисто»), куда отнесем измерения, сделанные на станциях с классом качества вод 3 и менее, и 1 («грязно»), соответствующую классу 4 и выше;
- в качестве варьируемых переменных примем общее число видов $X_j = S$ и показатели обилия отдельных семейств зообентоса (для хирономид -подсемейств и триб); $X_j = \ln((N_{sj} \cdot B_{sj})^{0.5})$, N_{sj} и B_{sj} – суммарные по видам численность и биомасса j -й таксономической группы в пробе, $j = 2, 3, \dots, 51$.

Полученное уравнение логистической регрессии оказалось значимым с позиций статистики отношения правдоподобия – $\chi^2(50) = 225.9$, $p \approx 0.0$, а коэффициент детерминации псевдо- R^2 составил 33.6%. Верхняя часть списка коэффициентов регрессии, отсортированного по убыванию t -статистики, представлена в табл. 8.4. Большинство рассчитанных коэффициентов имеют отрицательный знак, т.е. чем меньше обилие гидробионтов этих семейств, тем больше шанс, что проба взята из водоема «грязной» категории. Достоверная связь обратного характера наблюдается только для организмов Oligochaeta и Odonata.

Таблица 8.4

Коэффициенты логистической регрессионной модели, связывающей категорию качества вод и обилия таксономических групп зообентоса

Наименования таксономических групп зообентоса	Коэффициенты логита	Стандартная ошибка	t -статистика	P -значение
<i>Ephemeroptera</i>	-0.291	0.066	-4.409	0.000
Oligochaeta	0.147	0.047	3.120	0.002
Триба Tanytarsini	-0.154	0.065	-2.373	0.018
Amphipoda	-0.490	0.208	-2.352	0.019
Coleoptera	-0.222	0.098	-2.267	0.024
Crustacea	-0.274	0.124	-2.208	0.028
Odonata	0.213	0.108	1.974	0.049
Gastropoda	-0.093	0.061	-1.525	0.128
Diptera	-0.329	0.216	-1.523	0.128
Подсемейство Diamesinae	0.141	0.100	1.416	0.158
Dreissenidae	-0.094	0.068	-1.380	0.168
Limoniidae	-0.125	0.094	-1.335	0.183
Megaloptera	0.142	0.108	1.318	0.188
<i>Psychodidae</i>	-0.255	0.199	-1.282	0.201
Nematoda	0.113	0.091	1.248	0.213
Simuliidae	-0.135	0.113	-1.197	0.232
Hemiptera	-0.131	0.110	-1.195	0.233
Hidracarina	0.215	0.192	1.119	0.264
Rhagionidae	-0.201	0.180	-1.118	0.264
Число видов в пробе S	-0.047	0.044	-1.068	0.286
Триба Chironomini	0.059	0.055	1.060	0.290

Гистограмма распределения примеров выборки по шкале прогнозируемой вероятности класса 1 («грязно») представлена на рис. 8.3. Если принять в качестве порогового значения $P = 0.5$, то к классу «грязных» объектов относят значения X_i , для которых $\bar{P}_i = P\{Y = 1 | X_i^1, \dots, X_i^m\} > 0.5$, и тогда общая ошибка предсказания по уравнению регрессии составит менее 20%. Это правило оптимально с точки зрения минимизации числа ошибок, но не всегда верно с точки зрения исследования связи и поэтому порог зачастую сдвигают в сторону класса с минимальной априорной вероятностью встречаемости.



Рис. 8.3. Гистограмма распределения измерений по шкале прогнозируемой вероятности класса 1 - «грязно» (каждому символу на гистограмме соответствует около 5 объектов исходной выборки)

Множественный пробит-анализ по обобщенным показателям

Используем упорядоченный пробит-анализ для непосредственной оценки значения класса качества водоемов в виде числа от 1 до 6. Сформируем выборку из тех же 520 измерений, но в качестве девяти варьируемых переменных будем использовать различные обобщенные гидробиологические показатели и традиционные "интегральные" индексы, перечисленные в табл. 8.5.

С чисто статистической точки зрения было рассчитано вполне благополучное уравнение упорядоченного пробита: критерий $\chi^2(9)$ для статистики отношения правдоподобия составил 257.1 при $p \approx 0.0$, коэффициент детерминации псевдо- R^2 равен 42.3%.

Таблица 8.5

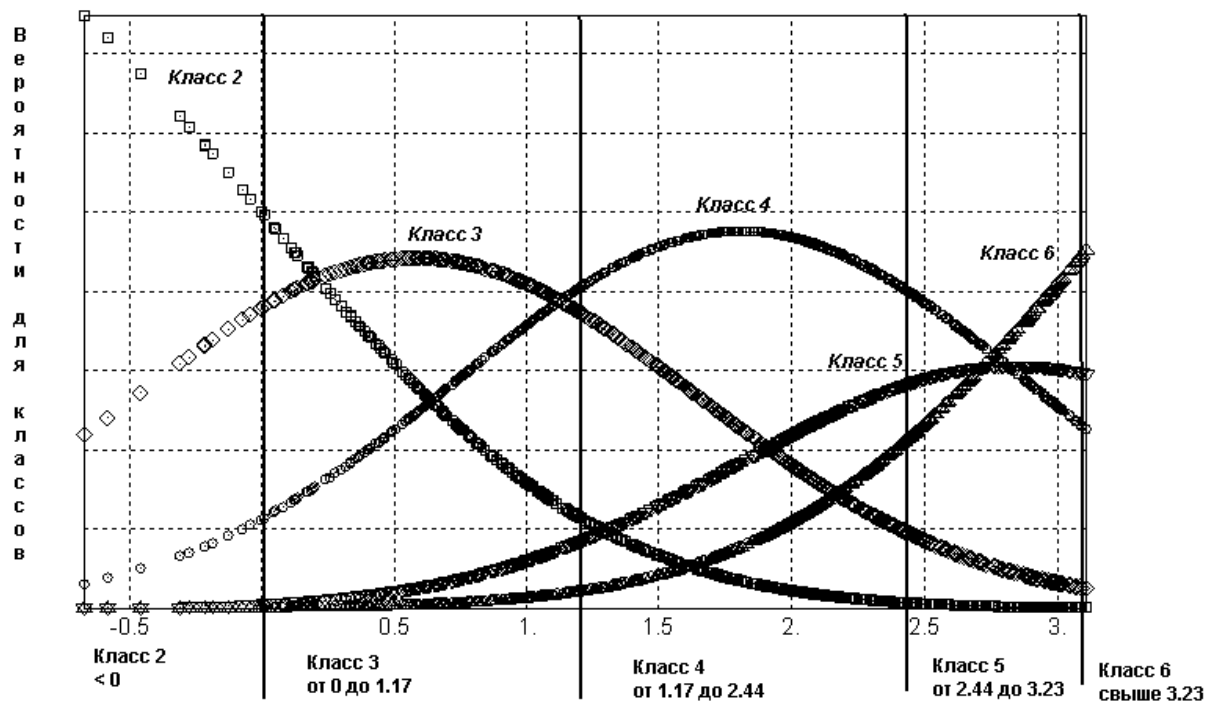
Коэффициенты модели упорядоченного пробита, связывающей класс качества вод и обобщенные показатели зообентоса

Наименования индексов и обобщенных показателей	Коэффициенты пробита	Стандартная ошибка	t-статистика	P-значение
1 Константа уравнения	2.42	0.276	8.76	0.0
2 Индекс Шеннона	0.1117	0.064	1.73	0.08
3 Число видов в пробе	- 0.0348	0.0125	-2.78	0.0056
4 Общая численность (ln экз/м ²)	0.011	0.044	0.249	0.803

5 Общая ,биомасса (ln мг/м ²)	0.0056	0.0246	0.228	0.812
6 Доля хищных видов (численность)	0.00108	0.00455	0.238	0.81
7 Доля хищных видов (биомасса)	-0.00459	0.00348	-1.318	0.189
8 Биотический индекс Вудивисса	- 0.285	0.0318	-8.958	0.0
9 Олигохетный индекс Пареле	0.7679	0.0894	8.584	0.0
10 Хирономидный индекс Балушкиной	0.0289	0.0166	1.738	0.083

Однако анализ уровня значимости коэффициентов пробит-уравнения, представленных в таблице 8.5, показывает, что вполне достоверно связаны с классом качества лишь число видов в пробе, биотический индекс Вудивисса (обратная зависимость) и олигохетный индекс (прямая зависимость).

Упорядоченный пробит представляет собой вероятностную модель, согласно которой попадание в группу, соответствующую каждому классу качества водоема представляет собой случайное событие. Вероятность $P(k|x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip})$ принадлежности i -го измерения к k -му классу (вернее, вероятность попадания в интервал между границами классов) вычисляется по усеченному нормальному распределению, и при этом предполагается, что к расчетному значению $\hat{Y} = X\theta$ прибавляется стандартная нормальная случайная величина. Графики этих вероятностей и граничные значения классов качества вод для полученного нами уравнения упорядоченного пробита изображены на рис. 8.4. В качестве прогноза для каждого наблюдения берется та группа, вероятность $P(k|x_{i1}, x_{i2}, \dots, x_{ip})$ для которой наибольшая.



Расчетные значения уравнения пробита и выделенные границы для классов качества вод

Рис. 8.4. График вероятностей прогнозирования класса качества вод и граничные значения для уравнения упорядоченного пробита

Результаты достоверности оценки классов качества представим в виде таблицы сопряженности «Факт – Прогноз» (табл. 8.6), где по главной диагонали проставлены частоты правильной оценки групп измерений, а в остальных клетках – имеющиеся ошибки оценки.

Таблица 8.6

Результаты прогнозирования класса качества вод по модели упорядоченного пробита

Классы качества	Фактические	Итого	Правильный	Ошибка на
-----------------	-------------	-------	------------	-----------

вод	2	3	4	5	6	прогноз	прогноз, %	два и более класса, %	
Прогнозируемые	2	15	10	2	0	0	27	55.56	7.41
	3	26	53	38	5	0	122	43.44	4.1
	4	11	61	139	56	45	312	44.55	17.95
	5	0	0	0	0	0	0	-	-
	6	1	4	8	26	20	59	33.90	22.03
Итого факт	53	128	187	87	65	520	43.65	14.6	

Качество выполненного прогноза по модели упорядоченного пробита нельзя назвать вполне удовлетворительным, особенно, в области классов загрязненных вод 5 и 6. В частности, оценка класса 5 вообще не реализуема по представленным данным наблюдений. Действительно, ни для одного из измерений кривая вероятностей, соответствующая на рис. 8.4 классу 5, не проходит выше кривых остальных вероятностей.

8.3. Дискриминантные функции для классификации многомерных объектов

Формулировка задачи

Пусть задано пространство признаков X размерностью $m > 1$, точками которого являются конкретные гидробиологические измерения $x = \{x_1, \dots, x_i, \dots, x_m\}$, где x_i – значения численности или биомассы i -й таксономической группы гидробионтов в пробе, либо некоторые обобщенные индексы. Исходная таблица наблюдений разбита на P непересекающихся подмножеств строк, где каждой строке x поставлен в соответствие некоторый класс качества y_k , $k = 1, 2, \dots, p$, причем любому из P классов принадлежит не менее одного объекта. Содержательный смысл задаваемой системы классификации $\{y_1, y_2, \dots, y_p\}$ применительно к гидробиологическим исследованиям может иметь вполне произвольное толкование (например, любые градации сапробности, токсобности, классов качества вод, типов водоемов, природно-климатических зон и т.д.).

Необходимо определить набор формальных решающих правил, позволяющих для произвольного измерения x из X указать класс качества y_k , к которому оно принадлежит.

С одним из методов классификации мы уже познакомились в предыдущем разделе, рассматривая логит- и пробит-анализ, как частный случай множественной регрессии. Другие решающие правила, формируемые на основе вероятностных методов, могут быть получены:

- в виде вероятности диагноза при заданном комплексе симптомов с использованием формулы Байеса или иных стратегий, основанных на минимаксном критерии или критерии Неймана-Пирсона;
- в виде простых классифицирующих функций, как это сделано в линейном дискриминантном анализе Фишера;
- в виде дискриминантных функций, являющихся результатом канонического дискриминантного анализа;
- в виде таких характеристик, как групповая ковариационная матрица, групповой вектор средних и определитель ковариационной матрицы, как это сделано в линейном дискриминантном анализе.

Рекомендуемая литература: [Урбах, 1964; Дуда, Харт, 1978; Кравцов, Милютин, 1981; Айвазян с соавт., 1989; Ким с соавт., 1989].

Математический лист

Байесовская схема принятия решений

Параметрические методы распознавания для поиска оптимальных дискриминационных функций используют аппроксимацию функции вероятностного распределения исходных данных и сводятся к определению отношения правдоподобия в различных областях многомерного пространства признаков. Классификатор может быть непосредственно построен из формулы условных вероятностей Байеса, описанной в разделе 7.4 и апеллирующей к априорным вероятностям принад-

лежности объектов к тому или иному распознаваемому классу и условным плотностям распределения значений вектора признаков.

Если априорные вероятности появления каждого класса равны, то вероятность того, что вектор x принадлежит классу y_i равна:

$$P_i = \frac{P(x/y_i)}{\sum_{k=1}^p P(x/y_k)}. \quad (8.19)$$

Очевидно, что наибольшая из величин $P(x/y_i)$ и будет обеспечивать наименьшую вероятность неправильной классификации или наименьший средний риск. Решающее правило можно сформулировать следующим образом: вектор измерений x принадлежит классу y_i , если

$$P(x/y_i) > P(x/y_j) \quad \forall i \neq j. \quad (8.20)$$

Предположим, например, что каждый класс измерений описывается нормальным распределением и ковариационные матрицы C всех классов одинаковы. Тогда дискриминантная функция имеет следующий вид [Стьюпер с соавт., 1982]:

$$\frac{P(x/y_i)}{P(x/y_j)} = e^{[X'C^{-1}(m_i - m_j) - 0.5(m_i + m_j)'X'C^{-1}(m_i - m_j)]}, \quad (8.21)$$

где m_i, m_j – математические ожидания векторов классов i и j . Для того, чтобы классифицировать произвольный вектор x , нужно рассчитать значения функции для всех возможных пар i и j при $i \neq j$ и отнести измерение к тому классу, для которого отношение условных вероятностей имеет наибольшее значение.

Если ковариационные матрицы классов неодинаковы, то добавляется некоторая функция потерь или платежная матрица, элементами которой R_{ij} являются значения штрафов за неправильную классификацию, когда объект x относят к классу j , когда как он принадлежит классу i . Чаще всего используют платежную матрицу R стандартного вида: ее элементы равны 0, если решающее правило правильно отнесло измерение к своему классу, и 1, если имела место ошибочная классификация. Нетрудно видеть, что при этом функционал среднего байесовского риска превращается в вероятность ошибочной классификации.

В простейшем случае для одной переменной и при двух классах процесс разделения можно представить графически на рис. 8.5. Если выборки признака X , относящиеся к обоим классам, подчинены нормальным законам распределения с дисперсией σ и средними m_1 и m_2 , то пороговая величина x_0 позволяет оптимальным образом разделить признаковое пространство на две области:

$$x_0 = \frac{m_1 + m_2}{2} + \frac{\sigma^2}{m_2 - m_1} \ln \lambda_0, \quad (8.22)$$

где λ_0 – критическое значение коэффициента правдоподобия, который зависит от платежных коэффициентов и априорных вероятностей появления объектов первого и второго класса. Если $r_{11} = r_{22} = 0, r_{12} = r_{21}$ и априорные вероятности равны, то $\lambda_0 = 0$ и линия x_0 проходит посередине между средними обоих классов.

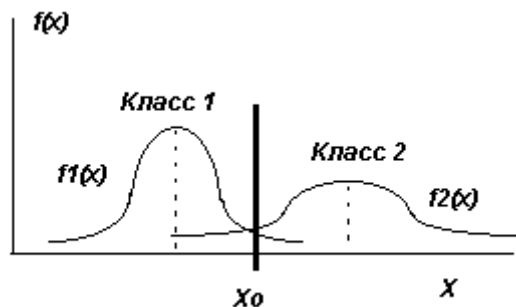


Рис. 8.5. Распределение двух совокупностей 1 и 2 по признаку X

Формула Байеса и оптимальные параметрические решающие правила могут быть использованы, если возможна достаточно точная аппроксимация функции плотности распределения данных. Если эта аппроксимация на основе обучающей выборки недостаточно точна, то и решающая функция будет далека от оптимальной. Сложность расчетов по восстановлению условных функций распределения $F(x/y_i)$ или ее плотности $p(x/y_i)$, $i = 1, 2, \dots, l$, является самым большим препятствием к использованию параметрических методов в многочисленных приложениях.

Однако, когда вид кривой плотности распределения неизвестен и нельзя сделать вообще никаких предположений о ее характере, то все равно общую стратегию Байеса можно обобщить на любой непараметрический метод расчета с участием двух матриц – платежной матрицы R и диагностической матрицы P , содержащей некоторые оценки условных вероятностей отнесения объекта к каждому классу, если объект имеет определенную комбинацию признаков. Существует значительное множество различных алгоритмов формирования диагностической матрицы P , использующих разные эвристические предположения их авторов. Расчет оценок может быть основан, например, на использовании *метода многомерных гистограмм* (частот встречаемости в различных классах объектов обучающей выборки, содержащих тот или иной признак [Гублер, 1978]), средних мер близости для компактных подмножеств объектов [Журавлев, 1978], нормированных разностей между внутригрупповыми средними и общим средним значением признака, эвристиках Е. Парзена [Parzen, 1962] и Э.А. Надарая [1964] и т.д.

Методы линейного дискриминантного анализа

Основной целью дискриминации является нахождение такой линейной комбинации переменных, которая бы оптимально разделила рассматриваемые группы. Линейная функция

$$d_{ik} = a_{ok} + a_{1k} \cdot x_{i1k} + a_{2k} \cdot x_{i2k} + \dots + a_{jk} \cdot x_{ijk} + \dots + a_{mk} \cdot x_{imk}, \quad (8.23)$$

при $i = 1, 2, \dots, n_k$; $k = 1, 2, \dots, p$; называется *дискриминантной функцией* с неизвестными коэффициентами a_{jk} . Здесь d_{ik} – расчетное значение функции для i -го объекта из группы k , состоящей из совокупности n_k измерений; x_{ijk} – значение j -й дискриминантной переменной, $j = 1, 2, \dots, m$ – столбцы матрицы наблюдений.

В общем случае необходимо рассчитать p линейных дискриминантных функций, равное количеству анализируемых популяций, после чего с использованием коэффициентов a_{jk} и постоянной a_{ok} можно провести классификацию любого произвольного наблюдения. Для этого необходимо подставить значения переменных вектора x в дискриминантные уравнения для каждой k -й группы и рассчитать значения оценок отклика, $k = 1, 2, \dots, p$. Вектор x классифицируется как принадлежащий тому классу (группе измерений, популяции) k , для которого величина d_k имеет максимальное значение.

Для расчета коэффициентов дискриминантных функций нужен статистический критерий, оценивающий различия между группами. Очевидно, что классификация переменных будет осуществляться тем лучше, чем меньше рассеяние точек относительно CENTROИДА внутри группы и чем больше расстояние между CENTROИДАМИ групп. Один из методов поиска наилучшей дискриминации данных заключается в нахождении таких дискриминантных функций d_k , которые были бы основаны на максимуме отношения межгрупповой вариации к внутригрупповой.

Многомерное нормальное распределение случайной величины x_{ijk} характеризуется следующими статистическими компонентами:

- вектор из m средних значений $X_{j\bullet\bullet}$ переменной j по всем классам (общее средние значения используемых признаков);
- матрица $m \times m$ сумм квадратов и по парных произведений T , которая показывает степень различий между признаками. Элементы матрицы T задаются соотношением:

$$t_{jl} = \sum_{k=1}^p \sum_{i=1}^{n_k} (x_{ijk} - x_{j\bullet\bullet})(x_{ilk} - x_{l\bullet\bullet}), \quad (8.24)$$

где выражения в скобках – отклонения значений переменных от общего среднего. При $j = l$ получается среднеквадратичное отклонение, которое показывает вариацию наблюдений по отдельной переменной. При $j \neq l$ получается корреляция (ковариация) между двумя переменными.

ными. Если разделить каждый элемент матрицы T на $(n - 1)$ получается ковариационная матрица C . Для получения корреляционной матрицы R следует каждый элемент матрицы T разделить на квадратный корень произведения соответствующих диагональных элементов

$$\frac{t_{jl}}{\sqrt{t_{jj}t_{ll}}};$$

- матрица $m \times p$ из средних значений $X_{jk\bullet}$ переменной j для измерений k -го класса (групповые средние);
- матрица W , которая используется для определения степени разброса внутри классов и отличается от T тем, что при ее вычислении используются средние для отдельных классов, а не общие средние:

$$w_{jl} = \sum_{k=1}^P \sum_{i=1}^{n_k} (x_{ijk} - x_{jk\bullet})(x_{ilk} - x_{lk\bullet}). \quad (8.25)$$

Если элементы матрицы W разделить на $(n - p)$, то получится *внутригрупповая ковариационная матрица* S .

Если расположение центров классов различается между собой, то степень вариации наблюдений внутри классов будет меньше общего статистического разброса: $w_{jl} < t_{jl}$, причем, чем больше расхождение этих величин, тем ощутимее влияния фактора группировки. Введем матрицу разницы этих двух матриц B , которая представляет собой межгрупповую сумму квадратов отклонений и попарных произведений $B = T - W$ (т.е. $b_{jl} = t_{jl} - w_{jl}$). Величины элементов B по отношению к величинам элементов W дают меру различия между группами.

Коэффициенты $a_{0k}, a_{1k}, a_{2k}, \dots, a_{mk}$ разделяющих функций могут быть найдены по методу дискриминантного анализа Фишера как элементы матрицы, обратной к W , что соответствует общей вычислительной процедуре множественной линейной регрессии. Более сложным в математическом отношении является канонический дискриминантный анализ, где ищутся независимые или ортогональные функции, вклады которых в разделение совокупностей не будут перекрываться. С вычислительной точки зрения здесь проводится анализ *канонических корреляций*, в котором определяются последовательные канонические корни и вектора.

Для нахождения p наборов коэффициентов канонических дискриминантных функций необходимо решить систему уравнений:

$$\sum b_{li} v_i = \lambda \sum w_{li} v_i, \quad \sum b_{li} v_i = \lambda \sum w_{li} v_i, \dots, \sum b_{li} v_i = \lambda \sum w_{li} v_i, \quad \sum v_i^2 = 1. \quad (8.26)$$

Как известно из курса линейной алгебры, собственными значениями квадратной матрицы B порядка m называются такие значения λ_j , при которых система следующих m уравнений имеет нетривиальное решение:

$$Bv_j = \lambda_j v_j, \quad j = 1, 2, \dots, m, \quad (8.27)$$

где v_j собственные векторы матрицы B , соответствующие λ_j . Нетривиальное решение системы уравнений: $Bv_j = \lambda_j Wv_j$, $j = 1, 2, \dots, m$, где B и W – симметрические положительно определенные матрицы, относится к обобщенной проблеме собственных значений и может быть получено путем замены переменных, используя разложение по Холецкому.

Используя компоненты собственных векторов v_j для описанных выше ковариационных матриц B и W , находят путем нормировки p наборов нормированных коэффициентов канонических дискриминантных функций $a_{jk} = v_{jk} (n - p)^{0.5}$. С геометрической точки зрения, полученные дискриминантные функции определяют гиперповерхности в m -мерном пространстве. В частном случае при $m = 2$ они являются прямыми, а при $m = 3$ – плоскостями. В этих обозначениях функция расстояния Махаланобиса, описанная в разделе 7.4 и учитывающая расстояние между центроидами двух классов k и r , будет равна:

$$D_{kr}^2 = \sum_{j=1}^m a_j (x_{jk\bullet} - x_{jr\bullet}). \quad (8.28)$$

Заключительный этап дискриминантного анализа включает методы интерпретации межгрупповых различий и методы классификации наблюдений по группам. При интерпретации нужно ответить на вопросы: возможно ли, используя данный набор переменных, отличить одну группу от другой, насколько хорошо эти переменные помогают провести дискриминацию и какие из них наиболее информативны? Детальный анализ проводится с использованием объединенной матрицы ковариации T и ковариационных матриц для отдельных групп W_k , $k = 1, 2, \dots, p$.

Напомним еще раз основные предположения дискриминантного анализа. Во-первых, считается, что анализируемые переменные представляют выборку из многомерного нормального распределения. Отметим, однако, что пренебрежение условием нормальности обычно не является "фатальным" в смысле доверия к результатам расчетов. Более важно второе предположение о статистическом равенстве внутригрупповых матриц дисперсий и корреляций. При искусственном объявлении ковариационных матриц W_k статистически неразличимыми могут оказаться отброшенными наиболее важные индивидуальные черты, имеющие большое значение для хорошей дискриминации. Критерии, используемые для проверки этих предположений, обсуждались нами в разделе 5.2.

Так как дискриминантные функции находятся по выборочным данным, они нуждаются в проверке статистической значимости. Определяющим для дискриминантного анализа является проверка гипотезы об отсутствии различий между групповыми средними $H_0 : m_1 = m_2 = \dots = m_p$, что является многомерным аналогом однофакторного дисперсионного анализа. Для этого может быть использовано *обобщенное расстояние Махаланобиса*, которое в матричном виде можно записать как

$$D^2 = \sum_{k=1}^p n_k (\mathbf{x}_{k\bullet} - \mathbf{x}_{\bullet\bullet}) C^{-1} (\mathbf{x}_{k\bullet} - \mathbf{x}_{\bullet\bullet}) . \quad (8.29)$$

На содержательном уровне его можно интерпретировать как взвешенную сумму расстояний от вектора средних каждой группы $\mathbf{x}_{k\bullet}$ до общего вектора средних $\mathbf{x}_{\bullet\bullet}$. Если гипотеза H_0 верна, а объем выборки стремится к ∞ , то D^2 может быть аппроксимирована F -распределением. Другим, в некоторых случаях более точным способом проверки гипотезы H_0 является использование U -статистики Уилкса (она же – лямбда Вилкса), которая вычисляется как отношение детерминантов (*det*) матрицы внутригрупповой ковариации W и полной ковариационной матрицы T :

$$U = \det(W) / \det(T).$$

Аппроксимация статистики U -Уилкса с помощью F -распределения была выполнена К. Рао.

Наиболее общим принципом применения дискриминантного анализа является включение в исследование по возможности большего числа переменных с целью определения тех из них, которые наилучшим образом разделяют выборки между собой. Для этой цели, как и в случае множественного регрессионного анализа, используется пошаговая процедура, в которой на каждом шаге построения модели дискриминации просматриваются все переменные и находится та из них, которая вносит наибольший вклад в различие между совокупностями. Эта переменная включается в модель на текущем шаге и происходит переход к следующему шагу. Можно также двигаться в обратном направлении и все переменные будут сначала включены в модель, а затем на каждом шаге будут устраняться признаки, вносящие наименьший вклад в предсказание. Пошаговая процедура дискриминантного анализа для отбора переменных основывается на F -критериях однофакторного дисперсионного анализа: « F -включения» и « F -исключения». Значение F -статистики для переменной указывает на ее статистическую значимость при дискриминации между совокупностями и является мерой вклада признака в предсказание членства в группах. Тогда в качестве результата успешного анализа можно сохранить только наиболее информативные переменные модели, то есть те переменные, чей вклад в дискриминацию больше остальных.

Другим полезным критерием, используемым для селекции признаков, является коэффициент множественной корреляции R^2 для соответствующей переменной со всеми другими переменными в текущей модели. При значениях R^2 , близких к 1, анализируемый признак полностью определяется комбинацией других признаков и является избыточным. При сильной взаимной коррелированности переменных матрица задачи становится плохо обусловленной, что резко сказывается на погрешностях расчетов. И, наконец, дискриминантные функции представляются аналогами главных компонент, поэтому для нахождения оптимального числа переменных можно воспользо-

ваться критериями, оценивающими остаточную дискриминантную способность, под которой понимается способность различать группы с помощью переменных, не включенных в модель. Это может быть, например, Λ -статистика, вычисляемая по формуле:

$$\Lambda = \prod_{l=k+1}^p \frac{1}{1+\lambda_l} . \quad (8.30)$$

Если остаточная дискриминация мала, то выполненный анализ достиг своей цели.

Кроме задачи "объяснения", другой главной целью применения дискриминантного анализа является задача "прогнозирования". Как только модель установлена и получены дискриминирующие функции, возникает вопрос о том, как хорошо они могут *предсказывать*, к какой совокупности принадлежит конкретное измерение? Обычно классификация объектов осуществляется с использованием одного из следующих методов:

- произвольный вектор наблюдений x относится к классу k , для которого значение отклика дискриминантных функций d_k является максимальным среди всех $k = 1, 2, \dots, p$;
- вычисляется расстояние Махаланобиса от анализируемого наблюдения до «центра тяжести» каждой группы и наблюдение признается принадлежащим к той совокупности, к которой оно ближе в смысле минимума этого расстояния (этот метод классифицирования считается не вполне точным, так как предполагает нормальный закон распределения относительно среднего для каждой группы);
- используются оценки *апостериорных* вероятностей принадлежности вектора x :

$$P(k | x) = \frac{e^{d_k}}{\sum_{k=1}^p e^{d_k}} , \text{ вычисленные для каждого класса } k = 1, 2, \dots, p.$$

На точность классификации может сильно влиять способ спецификации *априорных* вероятностей наблюдений в различных совокупностях. Если неодинаковая заселенность классов в первоначальной выборке является отражением истинного распределения в популяции, то необходимо положить априорные вероятности пропорциональными объемам совокупностей в выборке. Если это только случайный результат процедуры формирования обучающей выборки, то априорные вероятности принимаются одинаковыми для каждой группы.

Результаты достоверности оценки классов анализируются с использованием таблицы сопряженности «Факт – Прогноз». С помощью этой таблицы можно оценить вероятность ошибочной классификации каждого класса, которая является смещенной.

Результаты расчетов

В качестве примеров используем те же выборки, что были получены в разделе 8.2 при рассмотрении логистической регрессии.

В первом примере разделим 520 гидробиологических измерений на 2 группы: 181 пробы на «чистых» станциях наблюдения с классом качества вод 3 и менее, и 339 проб на станциях, соответствующих классу 4 и выше. В качестве варьируемых переменных примем общее число видов $X_1 = S$ и показатели обилия отдельных семейств зообентоса (для хирономид – подсемейств и триб); $X_j = \ln((N_{sj}B_{sj})^{0.5})$, N_{sj} и B_{sj} – суммарные по видам численность и биомасса j -й таксономической группы в пробе, $j = 2, 3, \dots, 51$.

Используем прямую пошаговую процедуру нахождения информативных дискриминантных функций при пороге F -включения, равном 3, в результате которой было отберем 13 дискриминантных переменных из 50 при статистически незначимой остаточной дискриминации. Как статистике Уилкса ($U = 0.68$), так и обобщенному расстоянию Махаланобиса между группами ($D^2 = 2.07$) соответствует один и тот же аппроксимированный критерий Фишера $F(13,506) = 18.3$, что позволяет отвергнуть нулевую гипотезу о равенстве групповых средних на высоком уровне значимости.

По знаку и абсолютной величине рассчитанных коэффициентов дискриминантных функций, представленных в табл. 8.7, можно качественно оценить удельную индикаторную ценность

отдельных семейств зообентоса для прогнозирования степени загрязнения вод. Естественно, например, предположить, что обилие групп Ephemeroptera, Amphipoda или Ptychopteridae и многих других тем выше, чем чище водоем, в то время как обратная зависимость имеется для Odonata и Dermaptera. Однако прямое использование коэффициентов уравнений в роли индексов «чисто/грязно» не вполне правомочно, поскольку механизм их формирования учитывает целый ряд дополнительных статистических аспектов, таких как взаимная коррелированность признаков и проч.

Таблица 8.7

Коэффициенты дискриминантных функций, оценивающих категорию качества вод по обилию таксономических групп зообентоса
(*p* – априорная вероятность класса на обучающей выборке, R^2 – коэффициент множественной корреляции)

Таксономические группы зообентоса	Класс «Чисто» $p = 0.348$	Класс «Грязно» $p = 0.652$	F-критерий исключения	R^2
Свободный член	-4.51	-2.68		
<i>Ephemeroptera</i>	0.312	-0.050	35.4	0.315
Limoniidae	0.424	0.235	6.0	0.102
Amphipoda	0.380	-0.154	12.8	0.031
Oligochaeta	0.387	0.545	14.9	0.165
Число видов в пробе <i>S</i>	0.199	0.160	2.3	0.532
<i>Rhagionidae</i>	0.311	0.060	3.2	0.052
Simuliidae	0.245	0.055	3.9	0.122
Dreissenidae	0.230	0.077	5.8	0.069
Ptychopteridae	1.363	-0.242	4.6	0.013
Триба Tanytarsini	0.167	0.049	4.1	0.322
Dermaptera	-0.904	0.069	4.3	0.037
Coleoptera	0.034	-0.157	4.3	0.145
Odonata	-0.287	-0.113	3.4	0.109

Использование полученных дискриминантных функций для прогноза категории водоема по шкале («чисто» / «грязно») на примерах обучающей выборки дал более скромные результаты, чем в случае логистической регрессии: всего было правильно опознано 382 измерения или 78.3% от общего числа. Особенно неудачный прогноз имел место для категории «чисто», где было правильно идентифицировано только 103 пробы (56.9%).

Во втором примере выборку из тех же 520 измерений разобьем на 5 групп в соответствии со значением класса качества водоемов, откуда бралась проба. В качестве девяти варьируемых переменных будем использовать различные обобщенные гидробиологические показатели и традиционные «интегральные» индексы. В ходе пошаговой процедуры дискриминантного анализа два признака, связанные с численностью, были исключены как неинформативные, в результате чего получены уравнения, представленные в табл. 8.8.

Таблица 8.8

Коэффициенты дискриминантных функций, оценивающих класс качества вод по обобщенным показателям зообентоса
(отсутствуют коэффициенты для переменных, признанных неинформативными)

Наименования индексов и обобщенных показателей	Классы качества вод					F-критерий исключения
	2	3	4	5	6	
Константа уравнения	-14.61	-14.10	-12.49	-13.89	-10.90	
Биотический индекс Вудивисса	1.78	1.46	0.99	0.78	0.66	23.33
Олигохетный индекс Пареле	3.88	4.04	5.07	7.38	6.20	11.58
Общая биомасса ($\ln B$) мг/м ²	1.29	1.55	1.47	1.55	1.40	3.27
Индекс Шеннона	2.44	2.61	3.15	3.28	2.66	3.54

Хирономидный индекс Балушкиной	0.04	0.22	0.22	0.29	0.21	3.58
Доля хищных видов (по биомассе)	0.07	0.06	0.07	0.06	0.05	3.27
Число видов в пробе	-0.27	-0.33	-0.35	-0.45	-0.40	3.26
Общая численность ($\ln N$), экз./м ²	-	-	-	-	-	1.48
Доля хищных видов (по численности)	-	-	-	-	-	0.99

Основываясь на статистике Уилкса $U = 0.51$, значению которой соответствуют аппроксимация критерия Фишера $F(28, 1836) = 13.4$ и вероятность $p \approx 0.0$, гипотеза о равенстве групповых средних для различных классов качества вод в целом должна быть решительно отвергнута.

Детальный анализ матрицы обобщенных расстояний Махалонобиса для всех возможных пар классов, представленный в табл. 8.9, также свидетельствует о значимых статистических различиях между группами измерений (в наименьшей мере это относится для классов качества 5 и 6, значение вероятности $p = 0.0034$ для которых значительно меньше критического).

Таблица 8.9

Обобщенные расстояния Махалонобиса D^2 (выше главной диагонали) между центроидами измерений на станциях с различным классом качества воды и значения F -статистики Фишера для оценки различий между классами (ниже главной диагонали)

		Классы качества вод				
		2	3	4	5	6
Классы качества вод	2	0	1.39	2.84	7.19	7.09
	3	5.61	0	0.81	3.29	3.81
	4	12.63	6.69	0	1.50	1.91
	5	25.49	18.45	9.66	0	0.68
	6	22.23	17.74	9.96	2.72	0

Не углубляясь в технику расчетов, которые разумно поручить компьютеру, рассмотрим, как с использованием дискриминантного анализа осуществляется классификация конкретных измерений. Пусть для двух гидробиологических проб, взятых на р. Чапаевка в русловой части станции 12, отнесенной по гидрохимическим показателям к классу качества 5, рассчитаны индексы и обобщенные показатели, перечисленные в табл. 8.8. Используя коэффициенты дискриминантных уравнений, вычислим для каждого из этих примеров значения апостериорных вероятностей и расстояний Махалонобиса относительно каждого класса качества вод (см. табл. 8.10). Для измерения от 13 июня 1990 г. наименьшее расстояние Махалонобиса соответствует 5 классу качества вод, в то время, как по максимуму оценок апостериорных вероятностей эта проба соответствует классу качества 4. В то же время, обе статистики, вычисленные по результатам наблюдения от 27 июля 1990 г., относят эту станцию к 5 классу.

Таблица 8.10

Расстояния Махалонобиса и апостериорные вероятности для оценки класса качества вод двух измерений, сделанных на ст. 12 р. Чапаевка

Дата измерения	Статистика для классификации	Классы качества вод				
		2	3	4	5	6
13.06.90	Расстояние Махалонобиса	9.499	5.177	2.408	2.391	3.149
	Апостериорная вероятность	0.004	0.091	0.529	0.248	0.127
27.07.90	Расстояние Махалонобиса	11.164	6.929	4.502	1.845	2.235
	Апостериорная вероятность	0.003	0.050	0.247	0.434	0.267

Результаты достоверности оценки классов качества для всех примеров обучающей выборки представим в виде таблицы сопряженности «Факт – Прогноз» (табл. 8.11), где по главной диагонали проставлены частоты правильной оценки групп измерений, а в остальных клетках – имеющиеся ошибки прогноза.

Остается обратить внимание читателя на то, что общая эффективность прогнозирования класса качества вод с использованием дискриминантного анализа оказалась существенно выше, чем по модели упорядоченного пробита.

Таблица 8.11

Результаты прогнозирования класса качества вод с использованием дискриминантного анализа

Классы качества вод		Фактические					Итого прогноз	Правильный прогноз, %	Ошибка на два и более класса, %
		2	3	4	5	6			
Прогнозируемые	2	26	19	6	0	0	51	51.0	0
	3	12	50	33	8	1	104	48.1	8.6
	4	13	46	129	31	28	247	52.2	16.5
	5	0	11	11	39	15	76	51.3	14.4
	6	2	2	8	9	21	42	50.0	28.5
Итого факт		53	128	187	87	65	520	51.1	14.0

8.4. Задача о «классобности» видов: алгоритм распознавания, основанный на вычислении биоиндикационных индексов

Формулировка задачи

Пусть задано пространство признаков X размерностью $m > 1$, соответствующее некоторому списку видов гидробионтов. Точками этого пространства являются конкретные гидробиологические измерения $x = \{x_1, \dots, x_i, \dots, x_m\}$, где x_i – значение обилия i -го вида в пробе.

Как и в случае дискриминантного анализа, определены P классов $\{y_1, y_2, \dots, y_p\}$, к которым могут относиться всевозможные измерения x из X , причем содержательный смысл используемой системы классификации имеет произвольный характер, включающий любые градации сапробности, токсобности, классов качества вод, типов водоемов, природно-климатических зон и т.д.

Необходимо на основе обучающей выборки определить набор формальных решающих правил, позволяющих для произвольного измерения x из X указать класс качества вод y_k , к которому оно принадлежит.

Математический лист

Сформулируем метод классифицирования измерений x , основанный на следующих эвристических процедурах:

- на этапе обучения рассчитывается матрица оценок R , элементы которой R_{ik} являются тем больше, чем выше индикаторная ценность вида i для класса k (т.е. «сапробность», «токсобность» или, попросту выражаясь, некоторая «классобность»);
- на этапе экзамена подбирается такой алгоритм распознавания, т.е. последовательность формул преобразования матрицы R в вектор результирующих оценок классов t :

$$F(R, x_r) \Rightarrow t, \quad (8.31)$$

которая обеспечивает минимум ошибок классификации для широкого набора тестовых примеров x_r .

Элементы матрицы R будем называть *индикаторными валентностями* (value of indication) вида i в классе k . Рассмотрим три версии расчета индикаторных валентностей и последующей классификации, основанные на следующих различных концепциях:

- использование формулы Зелинки – Марвана вычисления сапробных валентностей;
- вероятностные оценки на основе частот встречаемости видов в водоемах разной категории;
- сбалансированные индикаторные валентности, полученные с использованием методов нелинейной оптимизации.

Алгоритм 1, использующий формулы вычисления сапробных валентностей.

Как было описано в разделе 4.4, оценка зон сапробности по показательным организмам методом Зелинки и Марвана основывается на следующих предпосылках:

- для каждого i -го вида гидробионтов устанавливаются значения сапробных валентностей a_{ik} , которые теоретически совпадают с оценками распределения вероятности встречаемости вида в каждой k -й ступени сапробности и выражаются одной или несколькими цифрами, сумма которых равна 10;
- вводится шкала индикаторного веса J_i , выраженного в баллах от 1 до 5 и оценивающего роль (дискриминирующую важность) i -го вида при оценке степени загрязнения;
- для произвольной гидробиологической пробы, в которой измерены значения обилия видов N_i , с использованием величин a_{ik} и J_i , рассчитывается средневзвешенная сапробность сообщества t_k , которая является оценкой принадлежности пробы к k -й зоне сапробности.

Поскольку метод классификации водоемов по сапробности является единственным практическим способом количественной водной биоиндикации, понятно стремление исследователей-гидробиологов, накопивших значительный массив экспедиционных данных, провести самостоятельные расчеты индикаторных валентностей с учетом региональных особенностей бентофауны, характера загрязнений и типологии водоемов. В разделе 4.4 была приведена формула расчета сапробных валентностей с использованием численности N и встречаемости D_i гидробионтов в основных зонах сапробности (о-р), предложенная П.А. Цимдиным [1979]. Если сделать естественное предположение, что численность вида-индикатора представляет собой среднее значение численности для всех j измерений в k -й зоне, $j = 1, 2, \dots, n_{ik}$, то формула приобретает тривиальный вид отношения групповых средних к глобальной средней:

$$a_{ik} = \frac{N_{ik} \cdot D_{ik}}{\sum_{k=p}^o N_{ik} \cdot D_{ik}} \cdot 10 = \frac{\frac{n_{ik}}{n} \left(\sum_{j=1}^{n_{ik}} N_{ijk} \right) / n_{ik}}{\sum_{k=p}^o \frac{n_{ik}}{n} \left(\sum_{j=1}^{n_{ik}} N_{ijk} \right) / n_{ik}} \cdot 10 = \frac{\sum_{j=1}^{m_{jk}} N_{ijk}}{\sum_{k=p}^o \sum_{j=1}^{m_{jk}} N_{ijk}} \cdot 10, \quad (8.32)$$

где n_{ik} – встречаемость i -го вида в k -й зоне, $D_{ik} = n_{ik} / n$, n – общее число измерений.

Индикаторные веса J_i оцениваются по Сладечеку, ориентируясь на характер распределения сапробных валентностей по зонам. Например, индикаторный вес $J = 5$ присваивается "хорошим" индикаторам, если все 10 баллов сапробной валентности распределены в одной зоне сапробности. Если валентности равномерно распределяются по ступеням, то такие виды считаются индифферентными или "плохими" индикаторами и получают небольшой балл.

Сформированные индикаторные валентности a_{ik} используются на втором этапе для прогнозирования класса водоема по комбинации видов, встретившихся в произвольно взятой пробе. Для этого, в соответствии с методом Зелинки и Марвана, для каждой k -й зоны ($k = 1, 2, \dots, p$) вычисляются средневзвешенные валентности t_k по численностям видов N_i ($i = 1, \dots, n_p$) экзаменуемо-

го измерения с учетом индикаторных весов J_i :

$$t_k = \frac{\sum_{i=1}^{m_r} N_i \cdot 0.1 \cdot a_{ik} \cdot J_i}{\sum_{i=1}^{m_t} N_i \cdot J_i}, \quad (8.33)$$

где m_r – количество видов в тестируемой пробе.

В предыдущих разделах нами было показано, что для вариационных рядов обилия бентосных организмов наиболее характерно логнормальное распределение, в связи с чем логарифмирова-

ние численности особей в пробе существенно нормализует распределение значений N_i и обеспечивает корректное вычисление статистических характеристик: средней, дисперсии и проч. Поэтому альтернативными вариантами формул для a_{ik} и t_k являются:

$$a_{ik} = \frac{\sum_{j=1}^{n_{jk}} \ln(N_{jk} + 1)}{\sum_{k=p}^o \sum_{j=1}^{n_{jk}} \ln(N_{jk} + 1)} \cdot 10 ; \quad t_k = \frac{\sum_{i=1}^{m_t} \ln(N_i + 1) \cdot 0.1 \cdot a_{ik} \cdot J_i}{\sum_{i=1}^{m_t} \ln(N_i + 1) \cdot J_i} \quad (8.34)$$

Рассчитав для тестируемого примера средневзвешенные валентности t_k , имеющие смысл оценок принадлежности пробы к классам качества вод, мы можем избрать одну из двух стратегий классифицирования.

Первая стратегия – наиболее простая и традиционно рекомендуемая математической теорией распознавания образов – предлагает отнести объект к классу, набравшему максимальную оценку, что соответствует минимальному среднему риску ошибки (см., например, формулу 8.20).

Вторая стратегия основывается на аналогии с расчетом индекса сапробности Пантле-Букка. И.К. Тодерашем [1984] предложена формула пересчета средневзвешенных сапробных валентностей $\{t_x, t_o, t_\beta, t_\alpha, t_p\}$ в индекс сапробности по Ротшайну (см. раздел 4.4), которая имеет следующий вид:

$$S_R = 0 \cdot t_x + 1 \cdot t_o + 2 \cdot t_\beta + 3 \cdot t_\alpha + 4 \cdot t_p . \quad (8.35)$$

По величине индекса S_R судят о принадлежности к зоне сапробности.

Алгоритм 2 – оценка индикаторных индексов по частоте встречаемости

Традиционным для гидробиологии является анализ видовой встречаемости, когда для исследователя имеет значение только факт наличия вида в пробе. Такой подход, например, широко используется в кластерном анализе с использованием коэффициентов сходства по Жаккару, Сьёренсену и т.п. Поэтому представляется целесообразным выполнить расчет индикаторных индексов для отдельных видов на основе частот их встречаемости в пробах различных классов.

Сформируем матрицу гидробиологических наблюдений X в альтернативной шкале измерений, положив все ее элементы равными 1, если значение численности i -го вида в j -й пробе не меньше некоторого заданного порога ($N_{ij} \geq \theta$), и 0 в противном случае. Эта операция позволяет нам абстрагироваться от абсолютных величин обилия видов, нестационарных по своей природе, и использовать в качестве байесовских оценок условных вероятностей более устойчивые и унифицированные значения частот встречаемости.

На первом этапе с использованием примеров обучающей выборки, для которых известны значения классов качества вод y_1, y_2, \dots, y_p , сформируем:

- матрицу P оценок условных вероятностей класса k для вида i : $p_{ik} = n_{ik} / n_i$; (8.36)

- вектор-столбец оценок априорной вероятности вида i : $p_i = n_i / n$; (8.37)

- вектор-строку оценок априорной вероятности класса k : $p_k = n_k / n$, (8.38)

где n – общее количество примеров обучающей выборки; n_i – количество измерений, содержащих вид k ; n_k – количество объектов, принадлежащих классу k ; n_{ik} – количество измерений класса k , содержащих вид i .

Сформированные оценки вероятностей используются на втором этапе для прогнозирования или экзамена – определения класса водоема по комбинации видов, встретившихся в произвольно взятой пробе.

Решающее правило, как и в предыдущем случае, представляет собой функциональный преобразователь, на выходе которого по априорным вероятностям и измерению x_r вычисляется вектор t результативных оценок t_1, t_2, \dots, t_p . Суждение о принадлежности пробы x_r к водоему k -й категории может быть вынесено, например, если t_k – наибольшая оценка из t_1, t_2, \dots, t_p . Простейшим вариантом расчета оценок t_k является усреднение значений условных вероятностей для всех m_r видов, встретившихся в тестируемом измерении:

$$t_k = \frac{1}{m_r} \sum_{i=1}^{m_r} p_{ik} , \quad (8.39)$$

т.е. вероятность принадлежности пробы к k -му классу есть средняя вероятность класса k для всех видов, найденных в пробе.

Формула "простых средних вероятностей", традиционная для многих работ в этом направлении [Джурс, Айзенауэр, 1977; Авидон с соавт., 1978], часто дает вполне удовлетворительную точность. Однако ряд теоретико-вероятностных предположений заставляют усомниться в конечной оптимальности аппроксимации первого порядка. Поэтому другим вариантом усреднения вероятностей p_{ik} является использование известного углового преобразования Фишера [Урбах, 1964], при котором частотные оценки вероятностей имеют ошибку, почти не зависящую от самих вероятностей. Используемая при этом функция $\arcsin(2P - 1)$ ведет себя почти так же, как используемая в байесовских подходах функция $\ln(P/(1-P))$, но, в то же время, при P , близких к 0 или 1, не вырождается, устремляясь в бесконечность, а ограничена $\pm\pi/2$. На этих принципах основана работа компьютерной системы PASS [Pogorek et al., 2000], прогнозирующей спектр биологической активности химических соединений по их структурным формулам (адрес Интернет-версии: <http://www.ibmh.msk.su/PASS>). Тогда результирующие оценки принадлежности к классам некоторого тестируемого измерения x_p выражаются через условные вероятности p_{ik} и априорные вероятности классов p_k следующим образом:

$$t_k = \frac{1}{m_r} \sum_{i=1}^{m_r} J'_i * [\arcsin(2p_{ik} - 1) - \arcsin(2p_k - 1)] , \quad (8.40)$$

где J'_i – индикаторный вес вида i , который мы интерпретировали как величину, обратную "шенноновской" энтропии распределения вероятностей по классам:

$$J'_i = 1 / [1 - \sum_{k=1}^p p_{ik} \log_2(p_{ik})] . \quad (8.41)$$

По нашему мнению, именно энтропия H , а не субъективно назначаемые баллы Сладечка, в явном виде характеризует равномерность распределения индикаторных валентностей по классам.

Алгоритм 3 – расчет валентностей с использованием методов оптимизации

Сделаем основные исходные предположения относительно природы индикаторных валентностей R_{ik} , оценивающих сродство (т.е. резистентность или экологическую значимость) i -го вида гидробионтов в k -м классе качества вод. Будем считать, что их величина является некоторой сложной математической функцией F от следующих факторов:

$$R_{ik} = F(n_i, v_k, J_i, k, a_{ik}) , \quad (8.42)$$

где:

- n_i – количество измерений i -го вида, на основе которых вычислена R_{ik} . С позиций классической статистики, чем больше n_i , тем выше надежность и устойчивость рассчитываемых оценок. С другой стороны, гидробиологический опыт свидетельствует о том, что целостная картина наиболее характерных черт биоценоза определяется, в первую очередь, редкими видами, в то время, как массовые виды-эврибионты составляют некоторый "размытый фон";
- v_k – относительная вероятность оцениваемого класса. Поскольку частота встречаемости наблюдений различных классов неодинакова, то разумно предположить, что оценки R_{ik} для "редких" классов должны обладать некоторыми преимуществами при их сопоставлении. Примем в качестве конкретной дефиниции этой оценки класса величину n/n_k , обратную априорной вероятности k -го класса;
- J_i – индикаторная значимость вида i , которая, как было показано выше, формально может быть интерпретирована как величина, обратная к "шенноновской" энтропии распределения

оценок по классам:
$$h_i = \sum_{k=1}^p a_{ik} \log_2(a_{ik}) ; \quad (8.43)$$

- k – порядковый номер класса. Поскольку биоразнообразие и обилие гидробионтов существенно уменьшается с увеличением номеров градаций качества воды, разумно предположить, что некоторым приоритетом должны обладать оценки классов, близких к p ;
- a_{ik} – собственно индикаторные валентности или относительный вклад вида i в развитие биоценозов, характерных для каждого k -го класса качества, которые мы будем рассчитывать по несколько видоизмененной формуле (8.32), в которой учтем как численность, так и биомассу видов (в $\text{мг}/\text{м}^2$), преобразовав их произведение в логарифмическую шкалу:

$$a_{ik} = \frac{\sum_{j=1}^{n_{jk}} \ln(\sqrt{B_{jk} N_{jk}})}{\sum_{k=1}^6 \sum_{j=1}^{n_{jk}} \ln(\sqrt{B_{jk} N_{jk}})} \quad (8.44)$$

По аналогии с функцией желательности, примем мультипликативную модель обобщенных оценок, в которой будут учтены все пять перечисленных факторов:

$$R_{ik} = a_{ik} (n_i)^\alpha (n/n_k)^\beta [3.33/(h_i + 1)]^\gamma k^\lambda, \quad (8.45)$$

где α , β , γ и λ – параметры модели, т.е. некоторые специально подобранные коэффициенты, 3.33 – константа, равная максимально возможному значению энтропии Шеннона при распределении валентностей по p классам ($p = 5$).

Для экзамена (т.е. определения класса водоема по комбинации видов, встретившихся в произвольно взятой пробе), как и в предыдущих версиях алгоритма, будем рассчитывать оценки принадлежности к классам по следующей формуле:

$$t_k = \frac{\sum_{i=1}^{m_t} \ln(\sqrt{N_i \cdot B_i}) \cdot R_{ik}}{\sum_{i=1}^{m_t} \ln(\sqrt{N_i \cdot B_i})}, \quad (8.46)$$

и относить экзаменуемый вектор наблюдений к тому классу, которому соответствует максимальная оценка t_k из всех вычисленных.

Очевидно, что значения компонентов матрицы валентностей R , а, следовательно, и достоверность процесса распознавания, зависит от величин настроечных коэффициентов α , β , γ и λ , которые регулируют долю участия каждого из пяти перечисленных факторов в формировании оценок R_{ik} . Поэтому естественна постановка следующей оптимизационной задачи: «необходимо найти такие α , β , γ и λ , которые сводят к минимуму число ошибок классификации при экзамене всех m примеров обучающей выборки в режиме скользящего контроля:

$$D^2 = \sum_{j=1}^m (Y_j^\phi - Y_j^p)^2 \Rightarrow \min, \quad (8.47)$$

где Y_j^ϕ и Y_j^p – расчетные и фактические значения класса качества вод».

Решение этой экстремальной задачи не может быть представлено в аналитическом виде или, по крайней мере, сведено к системе конечных линейных уравнений. Поэтому минимизация функционала D^2 может быть выполнена только специальными численными методами нелинейного программирования. Для нахождения оптимальных значений коэффициентов α , β , γ и λ воспользуемся модифицированным симплексным методом Нелдера-Мида [Банди, 1988; Гайдышев, 2001]. Этот метод, обеспечивающий достаточно быструю сходимость к экстремуму, не использует производные, что выгодно отличает его от других градиентных методов оптимизации. Основная идея симплекс-метода заключается в том, что по известным значениям целевой функции D^2 в вершинах выпуклого многогранника (симплекса) вычисляется вектор градиента, в направлении которого требуется сделать следующий шаг, чтобы получить наибольшее уменьшение критерия D^2 . По новым точкам строится следующий симплекс и т.д., то есть, образно выражаясь, многогранник постепенно "перекатывается, двигаясь под горку" и, при этом, каждый раз находится наилуч-

шее направление движения. Модификация Нелдера-Мида предполагает автоматическое изменение размеров ребер симплекса, что обеспечивает ему эффективное преодоление "оврагов" и быстрое движение по пологим спускам.

Результаты расчетов

Сформируем матрицу X ($n = 542$, $m = 546$), содержащую информацию о 542 гидробиологических пробах, взятых на малых реках Самарской области. Элементами матрицы наблюдений являются значения численностей особей по 546 видам макрозообентоса, причем, диапазон частот встречаемости различных видов варьируется от 1 до 226 ($p_j = n_j / n = 0.00184 \div 0.417$). Каждое измерение отнесем к одному из классов качества вод по гидрохимическим показателям от 2 до 6 ($p = 5$). Априорные вероятности классов $p_k = n_k / n$ варьируются от 0.103 для класса 2 до 0.356 для класса 4.

Алгоритм 1. Используем формулу П.А. Цимдиня (8.32) и методы анализа сапробных валентностей для прогнозирования класса качества воды. Индикаторные веса будем вычислять по приближенной формуле, связывающей J_i с мерой энтропии по Шеннону H :

$$J_i = 0.75H^3 - 2.8H^2 + 0.63H + 5, \quad \text{где } H = \sum_{k=1}^6 a_{ik} \log_2(a_{ik}/10)/10 \quad (8.48)$$

и дающей хорошую аппроксимацию весов по Сладечку (коэффициент детерминации $R^2 = 0.943$).

Для некоторых видов зообентоса рассчитанные значения индикаторных весов J_i и индикаторных валентностей a_{ik} для классов качества воды ($k = 2, 3, 4, 5, 6$) представлены в табл. 8.12. Для первых пяти видов дана более подробная информация, позволяющая провести детальный анализ механизма расчета.

Таблица 8.12

Значения индикаторных валентностей (a_k) для классов качества воды и индикаторные веса J , рассчитанные для некоторых видов зообентоса
(ΣN_{jk} - сумма численностей вида, попавших в k -й класс; n_{ik} - количество проб i вида, попавших в k -й класс; n_k - общее число измерений k -го класса)

Названия видов		Классы качества воды					По всем классам	Индикат. веса J
		2	3	4	5	6		
1. <i>Parachironomus varus</i>	ΣN_{jk}	63	107	490	603	1080	2343	1.4
	n_{ik}	2	2	5	4	4	17	
	n_{ik}/n_k , %	3.6	1.5	2.6	4.3	5.8	3.14	
	a_{ik}	0.3	0.5	2.1	2.6	4.6		
2. <i>Parametriocnemus lundbecki</i>	ΣN_{jk}	628	316	40			984	3.2
	n_{ik}	8	4	3			15	
	n_{ik}/n_k , %	14.3	3.1	1.6			2.76	
	a_{ik}	6.4	3.2	0.4				
3. <i>Polypedilum scalaenum</i>	ΣN_{jk}	60	3239	21697	290	320	25606	4.2
	n_{ik}	3	15	22	4	2	46	
	n_{ik}/n_k , %	5.4	11.5	11.4	4.3	2.9	8.5	
	a_{ik}		1.3	8.5	0.1	0.1		
4. <i>Eukiefferiella minor</i>	ΣN_{jk}	10					10	5.0
	n_{ik}	1					1	
	n_{ik}/n_k , %	1.8					0.2	
	a_{ik}	10.0						
5. <i>Eukiefferiella gr. claripennis</i>		3.0	0.3	4.2	2.6			1.7
6. <i>Cricotopus bicinctus</i>		3.3	4.9	1.6	0.1			2.0
7. <i>Cricotopus gr. sylvestris</i>		2.7	0.0	2.9	0.0	4.4		2.0

8. <i>Baetis rhodani</i>	8.0	0.4	1.6				3.9
9. <i>Ephemeroptera</i> (прочие)	6.4	1.1	2.2	0.3			2.4
10. <i>Simulium</i> sp.	1.0	1.7	7.2	0.1			3.1
Количество измерений по классам n_k	56	131	193	93	69	542	

Можно отметить следующие свойства оценок a_{ik} , вычисленных по формуле (8.32), не комментируя степень их позитивности или негативности:

- индикаторные валентности зависят только от соотношения групповых средних численности и никак не связаны с абсолютными значениями обилия: вид, встречающийся в единичных экземплярах, будет получать такие же оценки, что и вид, численность которого насчитывает тысячи особей;
- как и любые оценки, основанные на средних, валентности сильно зависят от характера распределения данных, наличия аномальных «выбросов» данных и проч.; так для вида *Polypedilum scalaeenum* большое значение валентности 4-го класса ($a_4 = 8.5$) во многом определяется одним измерением с $N = 17840$ экз/м²;
- наибольшим преимуществом в формировании оценок обладают редкие виды (в том числе, виды, встретившиеся только в одной пробе, например, *Eukiefferiella minor* – они автоматически приобретают максимальный вес 5 и максимальную валентность).

Рассмотрим методику классификации на примере данных, полученных на ст. 5 р. Сок (см. табл. 8.13). Индикаторные валентности и индикаторные веса для всех 7 видов зообентоса, найденных в этой пробе, указаны в табл. 8.12. Согласно данным гидрохимического анализа эта станция отнесена к 2 классу качества вод.

Таблица 8.13

**Расчет по формуле (8.33) обобщенных индикаторных валентностей t_k
на примере классификации данных экспедиционных наблюдений
на ст. 5 р. Сок (30 июля 1999 г.)**

Наименования видов	Численность экз/м ²	Для класса 2: $Na_2J/10$	Для класса 3: $Na_3J/10$	Для класса 4: $Na_4J/10$	Для класса 5: $Na_5J/10$	Для класса 6: $Na_6J/10$	Знаменатель NJ
<i>Eukiefferiella minor</i>	10	50					50
<i>Cricotopus</i> gr. <i>sylvestris</i>	150	82.91		88.44		135.98	307.33
<i>Cricotopus</i> <i>bicinctus</i>	10	6.64	9.75	3.29	0.21	0.09	19.98
<i>Eukiefferiella</i> gr. <i>claripennis</i>	10	5.03	0.44	7.03	4.40		16.90
<i>Simulium</i> sp.	10	3.09	5.32	22.04	0.30		30.75
<i>Ephemeroptera</i> (прочие)	10	15.48	2.79	5.33	0.74		24.33
<i>Baetis rhodani</i>	70	219.93	10.25	45.35			275.53
Итого		383.08	28.55	171.48	5.65	136.07	724.83
Средневзвешенные валентности		0.53	0.04	0.24	0.01	0.19	

Если ориентироваться на максимальные значения обобщенных индикаторных валентностей t_k , представленные в табл. 8.13, то при экзамене *безошибочно* выбираются $t_2 = 0.53$ и 2 класс качества.

Чтобы использовать формулу индекса сапробности в редакции И.К. Тодераша, необходимо предварительно обозначить параллель между зонами сапробности и классами качества вод по ГОСТ 17.1.3.07–82, для чего воспользуемся табл. 4.7 раздела 4.6, где это соответствие установлено: $t_2 = t_0$ для олигосапробной, $t_3 = t_\beta$ для β -мезосапробной, $t_4 = t_\alpha$ для α -мезосапробной и $t_5 = t_p$ для полисапробной зон. Подставив рассчитанные средневзвешенные сапробные валентности в формулу (8.35), получим для станции 5 р. Сок индекс сапробности:

$$S_R = 1 \cdot 0.53 + 2 \cdot 0.04 + 3 \cdot 0.24 + 4 \cdot 0.01 + 5 \cdot 0.19 = 2.25,$$

согласно которому также уверенно, но уже *ошибочно* (!), тестируемый водоем относится к классу 3 (т.е. β -мезосапробной зоне с диапазоном индекса сапробности S_R от 1.5 до 2.5).

Для проверки работоспособности метода и отдельных его модификаций проведем оценку класса качества воды для всех 542 измерений зообентоса, использованных для обучения. Расчеты проведем тремя различными методами классифицирования, приведенными в п.п. 1.1-1.3 табл. 8.14.

Таблица 8.14

Сравнительный анализ адекватности различных методов вычисления оценок индикаторных валентностей и техник распознавания

Метод вычисления оценок принадлежности к классам	На всей выборке			Правильный прогноз без учета проб из 6 класса	Критерий оптимизации D^2
	Правильно распознано ед. / %	Ошибочно распознано ед. / %	Ошибка на 2 класса и более		
1.1. По натуральным численностям и с использованием индексов сапробности	260 48.0 %	282 52.0 %	90 16.6 %	259 54.8 %	691
1.2. По натуральным численностям и по максимумам оценок	315 58.1 %	227 41.9 %	88 16.2 %	307 64.9 %	607
1.3. По логарифмам численностей и по максимумам оценок	341 62.9 %	201 37.1 %	84 15.5 %	338 71.5 %	558
2.1. Простое усреднение оценок вероятности	319 58.9 %	223 41.1 %	86 15.9 %	317 67.0 %	571
2.2. Усреднение вероятностей с угловым преобразованием Фишера	366 67.5 %	176 32.5 %	81 14.9 %	350 74.0 %	580
3.1. Полная черехпараметрическая модель оптимальных оценок	391 74.9 %	131 25.1 %	41 7.9 %	359 78.6 %	274
3.2. Трехпараметрическая модель ($\alpha = 0, \beta = 0.41, \gamma = 1.21, \lambda = 0.71$)	370 70.9 %	152 29.1 %	54 10.3 %	345 75.5 %	345
3.3. Трехпараметрическая модель ($\lambda = 0, \alpha = -0.53, \beta = 0.39, \gamma = 1.189$)	354 67.8 %	168 32.2 %	77 14.8 %	343 75.1 %	499
3.4. Двухпараметрическая модель ($\lambda = 0, \alpha = 0, \beta = 0.35, \gamma = 1.225$)	345 66.1 %	177 33.9 %	76 14.6 %	339 74.2 %	500
3.5. Двухпараметрическая	345	177	79	340	514

модель ($\lambda = 0, \beta = 0, \alpha = -0.47, \gamma = 1.185$)	66.1 %	33.9 %	15.1 %	74.4 %	
3.6. Однопараметрическая модель ($\lambda = 0, \alpha = 0, \beta = 0, \gamma = 1.2$)	329 63.0 %	193 37.0 %	82 15.7 %	325 71.1 %	534

Примечание: правильный прогноз соответствует верной оценке нужного класса качества из 5 возможных альтернатив, т.е. случайный процесс угадывания соответствует вероятности 20%.

По результатам расчета можно сделать следующие выводы:

1. Подтверждается предположение о принципиальной математической несостоятельности подхода Пантле-Букка и всей техники вычисления индексов сапробности. Попытка выразить через "сапробный центр тяжести" некоторую функцию распределения вероятностей принадлежности измерения к 4 зонам сапробности (или 6 классам качества) неизбежно приводит к усреднению факторов видовой структуры биоценоза, а, следовательно, к сильному смещению прогноза в диапазон индекса сапробности от 2 до 3. В частности, по методу 1.1 (табл. 8.14) 371 наблюдение из 542 было отнесено к "среднему" классу 4 (т.е. α -мезосапробной зоне), причем в 178 случаях это было сделано ошибочно.
2. Вектор значений валентностей Зелинки-Марвана T более полно отражает индикаторное значение видов в сообществе. Принадлежность пробы x_p к водоему k -й категории целесообразней осуществлять по $\max t_k$ – наибольшей оценке средневзвешенные валентности из $\{t_\alpha, t_o, t_\beta, t_\alpha, t_p\}$.
3. Выбросы обучающей выборки, т.е. аномально высокие значения численностей по некоторым видам в отдельных пробах, могут сильно сказываться на устойчивости расчета индикаторных валентностей. Этим можно объяснить относительно большое для метода 1.2 количество "грубых" ошибок прогноза на два класса и более. При использовании в методе 1.3 предварительно логарифмированных значений численностей результаты можно назвать вполне стабилизировавшимися. Для сравнения приведем значения индикаторных валентностей, полученных по методу 1.3 для вида *Polypedilum scalaeum* (Sch.), которые сильно отличаются от представленных в табл. 8.12: $A = \{0.5; 3.2; 5.1; 0.8; 0.5\}$ при $J = 1.6$.
4. Весьма неудовлетворительными оказались результаты экзамена для проб, взятых в загрязненных водоемах класса 5 и, особенно, 6, на которые пришлось преимущественная доля ошибок. Сказывается, с одной стороны, некоторая жесткость санитарно-гигиенического подхода к оценке класса качества по гидрохимическим показателям, когда по некоторому лимитирующему фактору, например, концентрации поверхностно-активных веществ, водоем относится к 6 классу, что не мешает развиваться структурно деформированному, но количественно полноценному сообществу гидробионтов. С другой стороны, ошибки определяются и чисто статистическими эффектами: то небольшое количество видов-эврибионтов, обычно характерное для грязных водоемов, недостаточно для точной его идентификации, поскольку эти виды имеют невысокие индикаторные веса J и валентности, вносящие равномерный вклад в средневзвешенные оценки t_k .

Алгоритм 2. Используем в качестве индикаторных индексов оценки вероятности встречаемости видов. Результаты экзамена примеров обучающей выборки для двух вариантов: по формуле "простых средних вероятностей" и с использованием углового преобразования Фишера приведены в пунктах 2.1 и 2.2 табл. 8.14.

Расчеты показывают, что вероятностные оценки индикаторных индексов, полученные на основе частот встречаемости видов и не учитывающие абсолютные значения численностей организмов, оказались существенно лучше оценок индикаторных валентностей, рассчитанных с использованием формулы, включающей натуральные значения численностей (пункты 1.1 и 1.2 табл. 8.14). Это – лишнее подтверждение известного тезиса о некорректности сопоставления средних значений без учета закона статистического распределения выборок.

Алгоритм 3. Выполним расчет индикаторных валентностей, обеспечивающих минимум ошибок классификации. В качестве начальных приближений для полной модели

$$R_{ik} = a_{ik} (n_i)^\alpha (n/n_k)^\beta (3.33/(h_i + 1))^\gamma k^\lambda$$

выберем, по априорным соображениям, наиболее ожидаемые значения $\alpha = 0.2$, $\beta = 0$, $\gamma = 1$ и $\lambda = 0.5$. В ходе симплекс-процедуры по методу Нелдера-Мида было просчитано 160 вариантов матрицы R размерностью 546×5 и для каждого варианта найдено число ошибок классификации D^2 , пока, наконец, не было найдено оптимальное решение: $\alpha = -0.52$, $\beta = 0.41$, $\gamma = 1.21$, $\lambda = 0.68$, т.е. расчетная формула приобрела вид:

$$R_{ik} = \{a_{ik} (n/n_k)^{0.41} [3.33/(h_i + 1)]^{1.21} k^{0.68}\} / n_i^{0.52}.$$

Значения полученных коэффициентов λ , β и γ полностью подтверждают наши исходные предпосылки, в то же время как отрицательная величина коэффициента α приводит к нетрадиционному для статистики, но важному для биологии выводу о том, что основными индикаторами состояния экосистем являются редкие виды.

Поскольку переусложнение расчетной модели так же вредно, как и ее недоусложнение, оценим степень вклада каждого из перечисленных выше параметров. Для этого выполним серию расчетов матрицы оптимальных оценок R по моделям разной степени сложности: по полной четырехпараметрической модели и по упрощенным моделям, в которых поочередно элиминировались один или несколько факторов, т.е. значения параметров α , β или λ априори принимался равным нулю.

Полученные результаты представлены в табл. 8.14 строками 3.1-3.6. Серия расчетов с исключением из общей формулы для валентностей R отдельных факторов дает уверенное основание полагать, что все компоненты модели (8.45) являются информативными для прогноза класса качества вод, поскольку снижение эффективности распознавания при элиминации любого из коэффициентов оказывается весьма существенным. Однопараметрическая модель оценок 3.6, учитывающая только такой фактор, как уровень доминантности индикаторных валентностей (т.е. индикаторный вес J_i в понимании Зелинки-Марвана), методически полностью соответствует модели 1.3 и отличается от нее лишь использованием комбинированного показателя обилия $(N \cdot B)^{0.5}$ вместо численности экземпляров зообентоса N .

Принципиальное отличие рассчитанных индикаторных валентностей от традиционных валентностей Зелинки-Марвана заключается в том, что для последних вводится жесткое условие нормировки – сумма сапробных валентностей должна быть равна 10. Нам представляется, что введение этого условия не связано с каким-то другим содержательным смыслом, кроме стремления непременно пересчитывать оценку по валентностям во вторичные по идеологии и нерезультативные по технике индексы сапробности Пантле-Букка. Достаточно отказаться от этого условия, чтобы получить другую, гораздо более привлекательную возможность – сравнивать между собой отдельные виды по их индикаторной значимости в данной зоне сапробности или водоемах определенного класса качества. Если сопоставить для отдельных видов характер распределения вычисленных нами значений R_{ik} по классам и сапробных валентностей, взятых из литературных источников (см. табл. 8.15) то можно усмотреть неплохое соответствие оценок для чистых водоемов, в то время как виды, объявленные классическими полисапробами, в наших региональных условиях оказались эврибионтами и не набрали высокой индикаторной значимости.

Не имея технической возможности представить полный список всех 546 видов зообентоса, приведем в табл. 8.16 индикаторные валентности для некоторых видов хирономид, сгруппировав их по отводимой им роли в отдельных классах качества вод. Нетрудно прийти к выводу, что наибольшей индикаторной значимостью обладают редко встречающиеся виды.

Доля правильной классификации качества вод, достигнутая описанными эвристическими методами распознавания с использованием видов зообентоса в качестве алфавита признаков, оказалась существенно выше, чем при аналогичных расчетах методами упорядоченного пробита и дискриминантного анализа на основе обобщенных гидробиологических индексов (см. разделы 8.2 и 8.3). В дополнение к этому, полученные результаты могут быть серьезно улучшены за счет чисто математических операций.

Во-первых, для повышения достоверности и эффективности вычисляемых индикаторных индексов необходимо предварительно провести тщательный ручной или автоматизированный отбор гидробиологических измерений для включения в обучающую выборку. Расчет индикаторных

валентностей предпочтительней проводить не на всем массиве наблюдений, а на некотором "опорном" подмножестве надежных примеров, где сведены до минимума случайные ошибки измерений и влияние таких посторонних факторов, как сезонность, неудачный выбор места отбора пробы и т.д. Мы этого в нашей работе не сделали из принципиальных соображений, желая оценить общий уровень и степень влияния "шума", неизбежно сопровождающего гидробиологические измерения. Зато проведенный тщательный анализ ошибок экзамена показал, что не менее 100 проб из 542 вообще не могут быть правильно классифицированы ни компьютером, ни человеком.

Во-вторых, качество любой процедуры классификации определяет выбор информативного комплекса видов-индикаторов. Ввиду сложности гидробиологических объектов часто возникает тенденция непременно учесть в анализе все наблюдаемые виды, независимо от их реальной индикаторной значимости. Оптимальные классификационные процедуры всегда преследуют иную цель – добиться наибольшего эффекта наименьшим числом признаков, для чего большое внимание уделяется выбору наиболее информативного пространства переменных. Среди существующих способов предварительного отбора признаков можно упомянуть метод минимизации дивергенции, аппроксимацию функции распределения видового обилия в разных классах качества вод, метод максимизации кластеризуемости и т.д., о чем частично шла речь в главе 7.

В заключение затронем такую важную проблему как интерпретация и способ использования рассчитанных оценок индикаторных валентностей. По укоренившейся в гидробиологии традиции, полученные индексы рекомендуется использовать "As is" (т.е. "как они есть") для практического определения классов качества вод исследователям из других регионов. Мы полагаем, что оценки, полученные нами, работоспособны только для определенного типа водоемов (малых и средних равнинных рек) и в определенных ландшафтно-географических условиях. Неэффективность концепции "всемирных" сапробных валентностей, пригодных для водоемов любого типа или местоположения, стала очевидной еще 30 лет назад и было бы иллюзией надеяться на ее возрождение в ином информационном качестве. В то же время, развитие вычислительной техники, корпоративных баз данных и Интернет-технологий создают предпосылки для динамического формирования обучающей выборки и расчета "контекстно-зависимых" валентностей, оптимальных в условиях тестируемого комплекса измерений. В этом разделе мы ставили своей целью показать, какими математическими средствами и приемами может быть решена эта задача.

Наконец, как отмечалось выше, любая естественно-научная теория должна выполнять, как минимум, две функции: "объяснения" и "прогнозирования" наблюдаемых феноменов [Розенберг, 1988; Розенберг с соавт., 1999], причем для сложных систем объединение в одной модели этих функций невозможно.

Таблица 8.15

Вычисленные нами оценки валентностей для классов качества вод и сапробные валентности для некоторых видов зообентоса

Наименование видов зообентоса	Оценки классов качества					Сапробные валентности по зонам					
	2	3	4	5	6	k	o	β -m	α -m	p	J
<i>Sphaeriastrum rivicola</i>		0.1	0.2	0.2	0.1			3	5	2	2
<i>Chaoborus</i> sp.			2.3	0.8		-1	2	4	2	2	1
<i>Ablabesmyia monilis</i>		0.3	0.3	0.1	0.1		2	5	3		2
<i>Ablabesmyia phatta</i>	0.6	0.6	1.0				2	5	3		2
<i>Eukiefferiella bavarica</i>	1.9	1.4				1	6	3			3
<i>Eukiefferiella coerulescens</i>		10.0				1	6	3			3
<i>Eukiefferiella longicalcar</i>		10.0					7	3			4
<i>Eukiefferiella longipes</i>	10.0					1	5	4			3
<i>Psectrotanypus varius</i>		0.5	2.2					2	7	1	3
<i>Paratanytarsus austriacus</i>	1.8	1.5					4	6			3
<i>Stempellinella minor</i>	1.5		2.1				5	5			3
<i>T.pallidicornis</i>	0.1	0.3	0.5				2	6	2		3
<i>Asellus aquaticus</i>		0.7	0.4		0.3			2	8	-1	4

<i>Astacus astacus</i>		6.7				3	4	3			2
<i>Dreissena polymorpha</i>		0.2	0.1	0.3	0.5		4	6			3
<i>B.bioculatus</i>		2.1	1.1				1	6	3		3
<i>Baetis rhodani</i>	0.8	0.2	0.5			3	3	3	1		1
<i>B.vernus</i>	2.0	1.4					2	5	3		2
<i>Centroptilum luteolum</i>	0.2	0.2	0.3	0.2			2	7	1		3
<i>Cloeon dipterum</i>	0.2	0.3	0.3				3	4	3		2
<i>Caenis macrura</i>		0.2	0.2			4	4	2			2
<i>Ecdyonurus sp.</i>	10.0						4	5	1		2
<i>Ephemera danica</i>			9.4			1	4	4	1		1
<i>Ephemerella ignita</i>	0.5	0.4	0.2	0.2		1	3	3	3		1
<i>Siphonurus linneanus</i>	1.9	1.5					3	4	3		2
<i>Hydrobates fluviatilis</i>	1.6	1.8					4	6	-1		3
<i>Glossiphonia complanata</i>	0.1	0.3	0.5	0.4				6	4		3
<i>Herpobdella octoculata</i>	0.4	0.2	0.3				-1	2	6	2	3
<i>Limnodrilus hoffmeisteri</i>			0.1	0.1	0.1				4	6	3
<i>Tubifex tubifex</i>		0.1	0.2	0.2	0.1			-1	2	8	4
<i>Leuctra fusca</i>	5.8						2	5	3		2
<i>Leuctra sp.</i>	2.2	1.3					2	5	3		2
<i>Nemoura cinerea</i>	1.6	0.6					4	4	2		2
<i>Nemoura sp.</i>	0.8	0.4	0.7				4	4	2		2
<i>Atherix ibis</i>	10.0					2	5	3	-1		2
<i>Atherix sp.</i>	0.4	0.5	0.2			2	5	3	-1		2
<i>Simulium sp.</i>	0.2	0.2	0.1	0.1		3	3	2	2		1
<i>Hydropsyche ornatula</i>	0.2	0.2	0.9					6	4		3
<i>Hydropsyche sp.</i>	1.0	0.5	0.6			1	2	4	3		1
<i>Hydroptila sp.</i>	5.8						3	6	1		3
<i>Lepidostoma hirtum</i>	1.2		2.6				3	7			4
<i>Neureclipsis bimaculata</i>	10.0					-1	6	4			3
<i>Polycentropus flavomaculatus</i>		10.0				1	3	4	2		1
<i>Rhyacophila sp.</i>	1.4	0.0	1.4				5	5			3

Таблица 8.16

Индикаторные валентности некоторых видов хирономид, характерные для отдельных классов качества воды малых и средних рек Самарской области

Виды хирономид	Индикаторные валентности классов качества					Встречаемость
	2	3	4	5	6	
Индикаторы класса 6						
<i>Sergentia gr. longiventris</i>					9.3	1
<i>Stenochironomus sp.</i>					9.3	1
<i>Glyptotendipes paripes</i>			0.9		1.5	2
<i>Cricotopus gr. intersectus</i>	0.6		0.4		0.6	3
Индикаторы класса 5						
<i>Lipiniella agrayloides</i>				8.3		1
<i>Endochironomus sp.</i>				5.8		2
<i>E. donatoris</i>			0.9	1.4		2
<i>Ablabesmyia longistyla</i>			0.9	1.3		2
Индикаторы класса 4						
<i>Lympophyes sp.</i>			6.3			1
<i>Brillia sp.</i>			4.3			2
<i>Monopelopia sp.</i>			4.3			2

<i>Polypedilum scalaenum</i>						
<i>Polypedilum sordens</i>			4.3			2
<i>Rheopelopia</i> sp.			4.3			2
<i>Pagastia</i> sp.			4.3			2
<i>Glyptotendipes barbipes</i>			3.5			3
<i>Microtendipes</i> gr. <i>rydalensis</i>	1.1		1.3			2
Индикаторы класса 3						
<i>Psectrocladius</i> gr. <i>dilatatus</i>			7.3			1
<i>Harnischia</i> sp.			5.0			2
<i>Hydrobaenus distylus</i>			5.0			2
<i>Metriocnemus</i> gr. <i>hydropetricus</i>			5.0			2
<i>Psectrocladius simulans</i>			5.0			2
<i>Conchapelopia melanops</i>			5.0			2
<i>Chironomus anthracinus</i>			1.6	0.1		9
<i>Diamesa heterodentata</i>	1.1		1.5			2
<i>Tanytarsus usmaensis</i>			1.5	0.7		2
Индикаторы класса 2						
<i>Paratrichocladius rufiventris</i>	10.0					1
<i>Parorthocladius</i> sp.	7.0					2
<i>Paramerina</i> sp.	7.0					2
<i>Cricotopus albiforceps</i>	7.0					2
<i>Orthocladius oliveri</i>	7.0					2
<i>Mesocricotopus</i> sp.	7.0					2
<i>Tvetenia discoloripes</i>	7.0					2
<i>Cricotopus</i> gr. <i>cylindraceus</i>	5.7					3
<i>Rheocricotopus effusus</i>	5.7					3
<i>Pseudodiamesa nivosa</i>	4.9					4
<i>Paratanytarsus austriacus</i>	1.8	0.9				2
<i>Cryptotendipes</i> sp.	1.7	1.0				2
<i>Telopelopia</i> sp.	1.7	0.2				7
Плохие индикаторы						
<i>Polypedilum nubeculosum</i>	0.01	0.03	0.04	0.03	0.02	187
<i>Chironomus plumosus</i>		0.02	0.05	0.03	0.03	195
<i>Procladius ferrugineus</i>	0.01	0.04	0.05	0.01	0.02	177
<i>Tanytarsus</i> sp.	0.03	0.04	0.04	0.01	0.01	184
<i>Cryptochironomus</i> gr. <i>defectus</i>	0.01	0.03	0.06	0.03	0.02	143
<i>Cladotanytarsus mancus</i>	0.02	0.05	0.05	0.01	0.02	139
<i>Cricotopus sylvestris</i>	0.02	0.03	0.06	0.03	0.03	100
<i>Cricotopus bicinctus</i>	0.05	0.06	0.05	0.01		124
<i>Dicrotendipes nervosus</i>		0.06	0.04	0.04	0.07	75
<i>Paratanytarsus confusus</i>	0.04	0.08	0.07	0.03	0.01	64
<i>Microchironomus tener</i>	0.01	0.06	0.09	0.05	0.03	58
<i>Cladopelma</i> gr. <i>lateralis</i>	0.01	0.05	0.11	0.04	0.03	59
<i>Procladius choreus</i>	0.05	0.06	0.11	0.03	0.02	50
<i>Prodiamesa olivacea</i>	0.06	0.07	0.11	0.01		61
<i>Paracladius conversus</i>	0.05	0.11	0.08	0.02		55

Индикаторные валентности, выборочно приведенные в табл. 8.16, были рассчитаны нами исключительно для выполнения конкретной задачи – обеспечить минимум ошибок прогноза класса качества воды и изначально не предназначались для "объяснения" (например, формирования каких-либо научных гипотез о роли того или иного вида в общей системе классификации водоемов).

8.5. Задача о двух классах и разделяющей гиперплоскости: метод «обобщенного портрета»

Формулировка задачи

Пусть зависимая переменная Y , отражающая качество вод, принимает одно из двух значений. Класс 1 может, например, трактоваться как "Чисто", "Норма" или "Относительно удовлетворительная ситуация", а 0 – как "Грязно", "Патология", "Чрезвычайная экологическая ситуация" и т.п. В соответствии с этой классификацией, таблица гидробиологических наблюдений, соответствующая обучающей выборке, разделяется на два конечных подмножества векторов: $X = x_1, \dots, x_a$ и $\bar{X} = \bar{x}_1, \dots, \bar{x}_b$. Элементы x_i , $i = 1, 2, \dots, m$, векторов X и \bar{X} соответствуют варьируемым переменным, в состав которых могут входить значения обилия i -го вида в пробе, а также всевозможные обобщенные индексы и гидробиологические показатели.

Необходимо найти такое уравнение оптимальной гиперплоскости в m -мерном пространстве признаков

$$X\varphi_0 - c_0 = 0, \quad (8.49)$$

которая разделяет точки множеств X и \bar{X} и, в то же время, наиболее удалена от выделяемых областей – выпуклых оболочек каждого из этих множеств. Геометрическая интерпретация задачи разделения двух подмножеств точек плоскостью (точнее, прямой линией) для случая двух переменных представлена на рис. 8.6.

Рекомендуемая литература: [Вапник, Червоненкис, 1974; Алгоритмы и программы..., 1984].

Математический лист

Пусть в некотором пространстве существует две (или несколько) областей, не имеющих общих точек, и что измерения – точки из этих областей. Каждой такой области можно приписать наименование, т. е. дать название, соответствующее образу. Сами эти области заранее не определены, т. е. нет каких-либо сведений о расположении их границ или правил определения принадлежности точки к той или иной области.

Процесс обучения распознаванию образов состоит в том, что предъявляются точки, случайно выбранные из этих областей. Необходимо построить поверхность, которая разделяла бы не только показанные в процессе обучения точки, но и все остальные точки, принадлежащие этим областям. Иначе говоря, цель обучения состоит в построении таких функций от векторов-измерений, которые были бы, например, положительны на всех точках одного и отрицательны на всех точках другого образа. Если предъявляемые измерения принадлежат не двум, а большему числу образов, то задача состоит в построении поверхностей, разделяющей все области друг от друга.

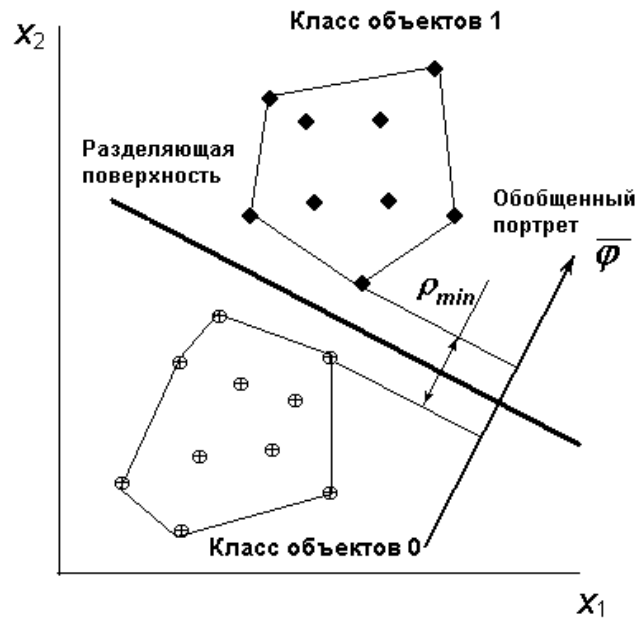


Рис. 8.6. Геометрическая интерпретация метода обобщенного портрета

Класс R -моделей распознавания образов, использующих принцип разделения, основан на гипотезе полимодальности плотности распределения объектов в исходном признаковом пространстве. Иными словами, объекты группируются в "сгустки" точек, которые могут быть разделены друг от друга некоторой гиперповерхностью и при этом достигается приемлемая ошибка классификации.

Конкретные алгоритмы этого типа построены по единой схеме: из класса решающих правил подходящей емкости выбирается правило, минимизирующее количество неправильных опознаний на обучающей выборке. Во многих случаях класс решающих функций задается параметрически, т.е. считается, что вид функции известен с точностью до значения конечного числа параметров (коэффициентов модели). Самыми распространенными являются представления разделяющих функций в виде линейных уравнений, обобщенных нелинейных полиномов, эволюционных моделей и моделей метода группового учета аргументов (МГУА). Близки этой концепции и Π -модели, реализующие метод потенциальных функций, основанный на используемой в физике идее потенциала – всюду положительной и монотонно убывающей функции расстояния.

При использовании методов, основанных на предположениях о виде решающих функций, исследователь, прежде всего, обращается к линейным моделям. Это обусловлено высокой размерностью пространства признаков, характерной для реальных задач, вследствие чего при повышении степени полиномиальной решающей функции имеет место огромный рост числа ее членов при проблематичном сопутствующем повышении качества распознавания. Как отмечалось ранее, свойства линейных диагностических моделей, в которых изучаемый показатель представлен взвешенной суммой исходных признаков, хорошо изучены. Результаты этих моделей при соответствующем нормировании легко интерпретируются как расстояния от исследуемых объектов до некоторой гиперплоскости в пространстве признаков или, что эквивалентно, как проекции объектов на некоторую прямую линию в данном пространстве.

Рассмотрим метод нахождения разделяющей гиперплоскости, т.е. функции из класса линейных по параметру решающих правил. Наиболее конструктивным алгоритмом в этой области является *метод обобщенного портрета*, строгое математическое обоснование которого выполнено В.Н. Вапником и А.Я. Червоненкисом [1974]. Построение разделяющей поверхности идет здесь следующим образом. Ищется такое направление Φ_0 в полном пространстве признаков, чтобы проекции выпуклых оболочек точек обучающей выборки первого и второго класса на это направление были максимально удалены друг от друга:

$$\Phi_0 = \max_{\Phi} \left[\min_{x_i \in X} x_i \Phi - \max_{\tilde{x}_i \in \tilde{X}} \tilde{x}_i \Phi \right] \quad (8.50)$$

Как показано на рис. 8.6, оптимальная разделяющая плоскость проводится перпендикулярно выбранному направлению Φ_0 через середину отрезка, соединяющего проекции разделяемых областей:

$$c_0 = \frac{\min_{x_i \in X} x_i \Phi + \max_{\tilde{x}_i \in \tilde{X}} \tilde{x}_i \Phi}{2}. \quad (8.51)$$

Эта разделяющая гиперплоскость отделяет точки множества X , для которых $x\Phi_0 > c_0$, от точек множества \tilde{X} , для которых $x\Phi_0 < c_0$, а ее направляющий вектор Φ_0 и называется, собственно, «*обобщенным портретом*».

Основным достоинством методов, основанных на предположениях о классе решающих функций, является ясность математической постановки задачи распознавания, как задачи поиска экстремума. В частности, нахождение оптимальной разделяющей гиперплоскости по методу обобщенного портрета представляет собой задачу квадратичного программирования, решение которой опирается на теорему Куна-Таккера. При этом ищется точка α_0 , соответствующая положительному максимуму квадратичной формы

$$W(\alpha) = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \alpha_{ij} - \psi^t \psi / 2, \quad \text{где } \psi = \sum_{i=1}^a \sum_{j=1}^b \alpha_{ij} (x_i - \tilde{x}_j). \quad (8.52)$$

Поиск экстремума достигается с помощью достаточно хорошо изученных специальных алгоритмов перцептронного типа (модификация метода Гаусса-Зайделя) или стандартных градиентных методов, к которым относится, в частности, метод сопряженных градиентов [Алгоритмы и программы..., 1984].

Особая ситуация возникает, когда безошибочное разделение векторов невозможно. Это бывает, если классы трангрессируют, а проекции их выпуклых оболочек перекрываются, либо "завзор" между классами ρ_{\min} меньше некоторого заданного значения ρ_0 . В этом случае из обучающей выборки исключается вектор, наиболее препятствующий успешному разделению. Затем, если разделение все еще невозможно, из оставшегося множества удаляется следующий малоинформативный элемент. Поиск продолжается до тех пор, пока либо задача не будет решена, либо число исключенных точек не превзойдет заданную долю общего числа векторов в обучающей выборке. В случае успешного нахождения обобщенного портрета, оставшаяся совокупность векторов называется информативной.

Важнейшей проблемой является проверка адекватности моделей прогнозирования, т.е. оценка достоверности полученных решающих правил. Эффективность работы различных алгоритмов распознавания образов оценивается с использованием критериев качества, которыми, в общем случае, являются либо собственно вероятности ошибочной классификации, либо связанные с ними некоторые функции потерь. При этом различают условную вероятность ошибочной классификации, ожидаемую ошибку алгоритма классификации на выборке заданного объема и асимптотическую ожидаемую ошибку классификации. Для оценки выбранного показателя качества того или иного алгоритма применяется три основных экспериментальных способа:

- выборка используется одновременно как обучающая и контрольная;
- выборка разбивается на две части - обучающую и контрольную;
- используется оценка "скользящего контроля".

Первый способ соответствует *критерию внутренней непротиворечивости модели*, выраженному в частотах ошибок первого и второго рода на обучающей выборке (или процентах несовпадений в классификациях "учителя" и машины). Способ дает завышенную оценку качества распознавания по сравнению с той же оценкой на независимых от обучения данных. Второй способ оценивает адекватность на *внешнем дополнении* (т.е. на экзаменуемых примерах, не участвовавших в построении самой модели). Метод является самым простым и убедительным, и им широко пользуются, если экспериментальных данных достаточно.

Оценка скользящего контроля формируется при работе алгоритма, который состоит в том, что из обучающей выборки поочередно удаляются описания одного объекта, на оставшемся материале строится решающее правило и по нему классифицируется исключенный объект. Такая процедура повторяется $(n - 1)$ раз. Доля правильных опознаний при скользящем контроле является несмещенной оценкой вероятности ошибки на всей генеральной совокупности и, следовательно, наиболее репрезентативной оценкой качества модели. Однако этот метод является и самым трудоемким, так как требует многократного построения правила распознавания.

Основной задачей построения моделей является структурная идентификация решающего правила, связанная с выбором оптимального признакового пространства, дающего наилучшее качество прогнозирования. Кроме чисто технических проблем, связанных с математической обработкой плохо обусловленных матриц большой размерности, методологически верно максимально учитывать известное предостережение Уильяма Оккама: «частностей должно быть не больше, чем их необходимо». Действительно, сложная модель прогнозирования, основанная на бессистемном привлечении множества малоинформативных переменных, далеко не всегда оказывается оптимальной: добившись высокого качества предсказания на обучающей выборке, вероятность ошибки классификации векторов генеральной совокупности для такой модели часто возрастает.

Одним из путей борьбы с "проклятием размерности" является использование специальных пошаговых алгоритмов (см. также разделы 8.1 и 8.3), предназначенных для формального выделения в исходном пространстве переменных такого оптимального подпространства, в котором построенная гиперплоскость доставляет минимум критерию P , учитывающему как вероятность ошибок классификации, так и число использованных признаков. При прямой пошаговой процедуре фиксированное подпространство переменных наращивается добавлением на каждом шаге одного признака, в наибольшей степени улучшающего критерий P . Обратная пошаговая процедура заключается в исключении признаков до тех пор, пока критерий P не достигнет минимума. Специальный метод последовательных включений с исключениями представляет собой комбинацию прямой и обратной пошаговых процедур.

В отличие от параметрических методов распознавания, успешность применения метода обобщенного портрета мало зависит от рассогласования теоретических представлений о законах распределения объектов в пространстве признаков с эмпирической реальностью. Метод позволяет использовать любой способ представления информации – непрерывный, когда координаты вектора x могут принимать любые значения, и дискретный, которым удобно кодировать признаки, измеренные в порядковой шкале. Используемый нами программный комплекс FOP [Алгоритмы и программы., 1984] предполагает предварительное преобразование всего исходного пространства признаков в бинарную форму, в результате чего область изменения каждого признака x_i разбивается на k интервалов с произвольным числом градаций ($9 \geq k \geq 2$). Далее признаку x_i ставится в соответствие k бинарных признаков z_{ij} по традиционному правилу:

- $z_{ij} = 1$, если значение x_i лежит в j -м интервале;
- $z_{ij} = 0$, в противном случае.

Переход в пространство бинарных признаков реализует целый ряд преимуществ:

- все исходные признаки, независимо от разброса их индивидуальных значений, нормируются в единую (или, по крайней мере, сопоставимую) шкалу;
- в обобщенном портрете легко учитывается нелинейное и немонотонное влияние признака на результат классификации (разделяющая поверхность в исходном пространстве признаков является по своей сути нелинейной);
- в моделях прогнозирования корректно используется весь комплекс как количественных, так и качественных признаков (наличие или отсутствие видов).

Тогда уравнение разделяющей гиперплоскости в пространстве бинарных признаков имеет вид

$$\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{k(i)} \lambda_{ij} - \beta = 0, \quad (8.53)$$

где m – число исходных признаков, λ_{ij} – настраиваемые коэффициенты, связанные кусочно-постоянными функциями с элементами вектора обобщенного портрета ϕ , β – свободный член

уравнения. С использованием этого уравнения *решающее правило* заключается в расчете расстояния η в многомерном пространстве от тестируемого объекта z^j до разделяющей гиперплоскости и классификации наблюдения по следующей простой процедуре: если $\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{k(i)} \lambda_{ij} - \beta \geq 0$, то экзаменуемый вектор z^j относится к классу 1, в противном случае – к классу 0.

Следует отметить, что алгоритм обобщенного портрета применим и для распознавания объектов, относящихся более чем к двум классам, путем использования одного из методов: последовательной дихотомии или "один против всех". Например, можно сформировать обучающую выборку с априорными оценками трех классов: 2 – "стабильный", 1 – "кризисный" и 0 – "экологическое бедствие". Применима следующая стратегия обработки данных:

- рассчитывается гиперплоскость, разделяющая класс 2 (стабильный) от 0 + 1 (все остальные менее благополучные объекты);
- рассчитывается гиперплоскость, разделяющая класс 0 (бедствие) от 1 + 2 (все остальные более благополучные объекты);
- два полученных решающих правила позволяют непротиворечиво распознать одну из трех градаций для любого из экзаменуемых объектов.

В работе Б.А. Курляндского с соавторами [1988] описан пример прогнозирования количественных значений гигиенических нормативов и ПДК методом построения обобщенного портрета.

Линейные модели распознавания адекватны только простым геометрическим конфигурациям областей пространства признаков, в которые отображаются объекты разных классов, выделенных "учителем". При более сложных распределениях, порождающих геометрическую неоднородность объектов, эти модели принципиально не могут отражать многие особенности структуры экспериментальных данных, которые способны нести ценную диагностическую информацию.

С помощью методов, основанных на дополнительных предположениях о классе решающих функций (эволюционных, МГУА, нейросетевых и т.д. – см. главу 9), можно строить диагностические модели высокой сложности и получать практически приемлемые результаты. В то же время, достижению практических целей в этом случае не всегда сопутствует извлечение новых знаний о природе распознаваемых объектов. Возможность извлечения этих знаний, в частности, об экологических механизмах взаимодействия видов (признаков), принципиально ограничена емкостью класса решающих функций. Поэтому максимально, что можно сказать после построения той или иной диагностической модели высокой сложности – это перечислить комбинации признаков и сами признаки, вошедшие в результирующую модель. Но содержательный смысл явлений, отражающих внутреннюю природу и структуру исследуемых объектов, в рамках нелинейного подхода часто остается нераскрытым. Более простые линейные модели, используемые для целей "объяснения", имеют в этом смысле несомненные преимущества.

Результаты расчетов

В отличие от примеров предыдущих разделов, уравнения обобщенного портрета рассчитаем на основе опорного множества специально подобранных примеров с заранее известным откликом. Для формирования обучающей выборки из общего массива наблюдений малых рек Самарской области выделим: зону (т.е. область образа) с чрезвычайной экологической ситуацией (43 станции класса 0) и зону относительно экологической стабильности (43 станции класса 1).

При отборе и классификации точек наблюдения будем учитывать весь комплекс абиотических показателей, территориально-статистические и экспертные оценки степени антропогенной нагрузки, а также степень изученности и непротиворечивости данных. Всем измерениям, включаемым в обучающую выборку, присвоим признак класса 0 с чрезвычайной экологической ситуацией (ЧЭС) или 1 относительной экологической стабильности (ОУС) в соответствии с предварительной классификацией станций. Гидробиологические пробы на остальных 160 станциях наблюдения будем использовать лишь для экзамена.

Сформированная таким образом компактная обучающая выборка содержит $n = 160$ векторов x с исходными данными, из которых 70 было отнесено к классу ОУС и 90 к классу ЧЭС. На примере этой обучающей выборки выполним три варианта расчетов.

Вариант 1. Рассчитаем уравнение оптимальной разделяющей гиперплоскости с использованием следующих 5 основных индексов и обобщенных количественных показателей зообентоса: числа видов S в каждой пробе, суммарной численности N_s (экз./м²) и биомассы B_s (г/м²), информационного индекса Шеннона H и биотического индекса Вудивисса V . Область значений каждого из этих признаков разобьем на диапазоны (градации), причем границы диапазонов выберем оптимальным образом в соответствии с критерием равной заселенности диапазонов (см. раздел 6.3). Получим уравнение разделяющей гиперплоскости со свободным членом $\beta = 2.6$ и коэффициентами λ_j которые представлены в таблице 8.17.

Таблица 8.17

Коэффициенты λ_j модели распознавания состояния экосистемы по набору индексов и обобщенных количественных показателей зообентоса

№№ пп	Наименование показателей		Градации разбиения показателей j			
			1	2	3	4
1	Количество видов S	Диапазон	1 - 3	4-8	9-16	17-41
		λ_j	-69.53	-77.66	23.97	123.22
2	Численность N	Диапазон	1 - 400	401-1300	1301-3700	>3700
		λ_j	00.00	21.73	42.19	-63.92
3	Биомасса B	Диапазон	До 0.35	0.35-2.5	2.5-10	>10
		λ_j	15.06	6.68	-16.35	-5.38
4	Индекс Шеннона H	Диапазон	До 1.36	1.36-1.9	1.9-2.9	2.9-4.4
		λ_j	-72.35	17.26	26.05	29.03
5	Индекс Вудивисса V	Диапазон	0 - 1.2	равно 2	2.3-6	6.7-9
		λ_j	-22.15	-29.56	-30.62	82.33

Приведем примеры использования решающего правила.

На ст. 3 р. Байтуган в пробе от 17 июля 1991 г. было определено 20 видов бентоса ($N = 3360$ экз./м², $B = 3.3$ г/м², $H = 3.29$, $V = 8$). Используя коэффициенты табл. 8.17, имеем:

$$\eta = 2.6 + 123.22 + 42.19 - 16.35 + 29.03 + 82.33 = 263, \text{ т.е. } > 0,$$

что позволяет уверенно классифицировать экосистему этого участка реки как экологически стабильную (класс ОУС). Аналогично, на ст. 8 (в пределах с. Байтуган) той же реки в составе бентофауны зарегистрировано 6 видов ($N = 490$ экз./м², $B = 1.06$ г/м², $H = 1.71$, $V = 2$), что соответствует оценке

$$\eta = 2.6 - 77.66 + 21.73 + 6.68 + 17.26 - 29.56 = -58.9, \text{ т.е. } < 0,$$

дающей основание отнести станцию к зоне экологического кризиса (класс ЧЭС).

Сравнительный анализ коэффициентов уравнения разделяющей гиперплоскости по их абсолютной величине дает возможность утверждать, что основными показателями, определяющими качество экосистем, остается видовое разнообразие, выраженное через обилие (число видов S) и равномерность распределения (индекс H). В то же время, значения биомассы B вносят несущественный вклад в оценку качества экосистемы, а тенденция монотонного возрастания весовых коэффициентов λ_j по мере увеличения численности организмов при $N > 3700$ резко меняет свой знак на противоположный (т.е. в сторону экокризисных явлений), что является признаком серьезных структурных нарушений в водоеме. Имеет свои гносеологические корни и феномен явной нелинейности вклада обоих индексов – Шеннона H (значения до 1.36) и Вудивисса V (значения выше 6).

Вариант № 2. Альтернативной моделью распознавания классов ОУС и ЧЭС является уравнение гиперплоскости, основанное на видовом составе зообентоса. При ее расчете используем следующие необязательные допущения:

- показатели обилия преобразуем в бинарные векторы, компоненты которых $z_{ij} = 1$, если j -й вид зафиксирован в i -м наблюдении, и $z_{ij} = 0$, в противном случае (напомним, что сам метод позволяет для каждого вида использовать до 9 градаций численности);

- список видов объектов обучающей выборки ограничим 166 видами семейства хирономид (отряд Diptera, сем. Chironomidae), в связи с отличными биоиндикационными свойствами последних и надежностью полученных нами натуральных данных.

В ходе моделирования используем метод последовательных включений с исключениями, и в результате работы пошаговых процедур из всего списка хирономид отберем 68 видов, обладающих наилучшей классификационной значимостью (предполагается, что остальные 98 видов либо в равной мере присутствуют в водоемах обеих категорий, либо низкая частота их встречаемости не дает оснований для включения в решающее правило). В табл. 8.18 приведены верхняя и нижняя часть списка видов, отобранных в результате алгоритма селекции и отсортированных по убыванию значений коэффициентов λ , а позиции 20-49 с λ , близкими к 0, опущены.

Численные значения λ , по нашему мнению, имеют вполне обоснованный смысл индикаторных индексов "экологического благополучия" (при $\lambda > 0$) или "экологического кризиса" (при $\lambda < 0$). Например, наличие в составе донных сообществ видов *Cladotanytarsus mancus* ($\lambda = +114$), *Cricotopus bicinctus* ($\lambda = +99$) и других видов левой части табл. 8.18 свидетельствует о значительной вероятности отнесения водоема к "чистому" классу ОУС, а вида *Procladius choreus* ($\lambda = -133.8$) и других, представленных в табл. 8.18 справа, – к "грязному" классу ЧЭС.

С использованием уравнения обобщенного портрета для любого тестируемого наблюдения легко рассчитать его расстояние η от разделяющей гиперплоскости. Достаточно просто сложить рассчитанные коэффициенты для тех видов, которые встретились в пробе и добавить к ним свободный член уравнения. Если эта мера больше нуля, то это – класс ОУС, при отрицательной величине – класс ЧЭС (см. табл. 8.19.)

Таблица 8.19

Пример использования модели распознавания по видовому составу хирономид для двух произвольных станций наблюдения

№№ пп	Наименование видов	Коэффициенты обобщенного портрета λ ,	
		Ст.6, р. Сок (15.07.1998)	Ст.5, р. Черновка (16.07.1987)
1	<i>Cladotanytarsus mancus</i>	114.88	114.88
2	<i>Harnischia fuscimana</i>	47.18	Отс.
3	<i>Tanytus punctipennis</i>	42.64	Отс.
4	<i>Chironomus obtusidens</i>	38.3	Отс.
5	<i>Microchironomus tener</i>	-2	Отс.
6	<i>Prodiamesa olivacea</i>	-5.36	-5.36
7	<i>Polypedilum scalaenum</i>	-16.56	Отс.
8	<i>Micropsectra</i> sp.	Отс.	-38.3
9	<i>Polypedilum nubeculosum</i>	Отс.	-38.3
10	<i>Cladopelma</i> gr. <i>lateralis</i>	Отс.	-38.3
11	<i>Cryptochironomus</i> gr. <i>defectus</i>	-106.42	Отс.
$\sum \sum \lambda_{ij} x_i^j$		112.66	-5.38
$\eta = \sum \sum \lambda_{ij} x_i^j - \beta$ ($\beta = 47.04$)		65.62	-52.42
Результат классификации		Относительно удовлетворительная ситуация (ОУС)	Чрезвычайная экологическая ситуация (ЧЭС)

Вариант № 3. Комбинированную модель, основанную на полном признаковом пространстве, получим с использованием всего набора переменных: из 5 индексов и обобщенных показателей обилия зообентоса и 166 признаков видовой структуры.

Сравнительная оценка достоверности полученных моделей-претендентов, представленная в табл. 8.20, осуществлялась по двум критериям:

- надежность распознавания на обучающей выборке;
- проверка на внешнем дополнении с использованием процедуры скользящего контроля.

Таблица 8.18

Коэффициенты уравнения разделяющей гиперплоскости для распознавания состояния экосистемы по видовому составу хирономид

NN пп	Наименования видов, характерных для класса 1 ("чисто")	Встречаемость в выборке	Коэффициенты λ модели	NN пп	Наименования видов, характерных для класса 0 ("грязно")	Встречаемость в выборке	Коэффициенты λ модели
1	<i>Microtendipes pedellus</i> (De Geer)	10	129.98	50	<i>Procladius</i> sp.	49	-5.36
2	<i>Cladotanytarsus mancus</i> (Walk.)	26	114.88	51	<i>Rheotanytarsus curtistylus</i> (Goetgh.)	3	-9.16
3	<i>Ablabesmyia monilis</i> (L.)	8	105.06	52	<i>Polypedilum scalaenum</i> Schrank	13	-16.56
4	<i>Paracladopelma camptolabis</i> K.	10	99.7	53	<i>Polypedilum</i> sp.	4	-22.14
5	<i>Cricotopus bicinctus</i> (Mg.)	35	99.32	54	<i>Chironomus plumosus</i> (L.)	1	-27.8
6	<i>Brillia</i> gr. <i>modesta</i> (Mg.)	5	99.18	55	<i>Chironomus muratensis</i> Ryser.	1	-31.9
7	<i>Corynoneura</i> sp.	4	97.76	56	<i>Parachironomus varus</i> Goetgh.	3	-33.74
8	<i>Clinotanypus nervosus</i> (Mg.)	6	93.06	57	<i>Dicrotendipes notatus</i> (Mg.)	5	-33.74
9	<i>Psectrocladius</i> gr. <i>sordidellus</i> (Zett.)	3	74.66	58	<i>Microspectra</i> gr. <i>praecox</i> (Mg.)	8	-36.9
10	<i>Paratanytarsus confusus</i> Pal.	19	71.06	59	<i>Eukiefferiella</i> sp.	1	-37.14
11	<i>Cricotopus</i> sp.	2	65.42	60	<i>Polypedilum nubeculosum</i> (Mg.)	3	-38.3
12	<i>Prodiamesa olivacea</i> (Mg.)	2	58.76	61	<i>Cladopelma</i> gr. <i>lateralis</i> (G.)	5	-38.3
13	<i>Teleopelopia</i> sp.	5	51.58	62	<i>Microspectra</i> sp.	1	-38.3
14	<i>Glyptotendipes gripekoveni</i> K.	5	47.18	63	<i>Stictochironomus crassiforceps</i> (K.)	5	-40.22
15	<i>Harnischia fuscimana</i> K.	8	47.18	64	<i>Tanytarsus pallidicornis</i> Walk.	6	-45.54
16	<i>Monodiamesa bathyphila</i> K.	6	43.78	65	<i>Eukiefferiella similis</i> Goetgh.	1	-65.7
17	<i>Tanypus punctipennis</i> (Mg.)	8	42.64	66	<i>Glyptotendipes glaucus</i> (Mg.)	3	-95.44
18	<i>Parametriocnemus</i> sp.	4	39.52	67	<i>Cryptochironomus</i> gr. <i>defectus</i> (K.)	29	-106.42
19	<i>Chironomus obtusidens</i> G.	7	38.3	68	<i>Procladius ferrugineus</i> (K.) <i>choreus</i>	1	-133.82

Сравнительный анализ адекватности полученных моделей

Результат классификации	По обучающей выборке			При скользящем контроле		
	Число наблюдений	Число правильно распознанных, %	Число ошибочно распознанных, %	Число наблюдений	Число правильно распознанных, %	Число ошибочно распознанных, %
1. Модель, основанная на структурных показателях зообентоса S, N, B, H, V						
Класс ОУС	70	64(91.4)	6(8.6)	64	62(88.3)	2(11.7)
Класс ЧЭС	90	82(91.1)	8(8.9)	82	80(88.7)	2(11.3)
Всего	160	146(91.3)	14(8.8)	146	142(88.5)	4(11.5)
2. Модель, основанная на видовом составе хирономид						
Класс ОУС	68	68(100.0)	0(0.0)	68	51(75.0)	17(25.0)
Класс ЧЭС	89	89(100.0)	0(0.0)	89	77(86.5)	12(13.5)
Всего	157	157(100.0)	0(0.0)	157	128(81.5)	29(18.5)
3. Модель, учитывающая оба класса признаков						
Класс ОУС	70	70(100.0)	0(0.0)	70	59(84.3)	11(15.7)
Класс ЧЭС	90	90(100.0)	0(0.0)	90	80(88.9)	10(11.1)
Всего	160	160(100.0)	0(0.0)	160	139(86.9)	21(13.1)

По внутреннему критерию вне конкуренции оказались модели 2 и 3, включающие видовой состав и обеспечивающие почти 100% разделение гиперплоскостью классы "ЧЭС" и "ОУС". Однако экстраполяционные свойства этих моделей, оцененные по результатам скользящего контроля, несколько уступили по надежности модели, основанной на использовании обобщенных структурных показателей. Этот результат вполне соответствует сложившимся представлениям о недостаточной устойчивости моделей, построенных на основе обширных, разреженных матриц.

Метод обобщенного портрета дает надежность правильного распознавания экологической ситуации в пределах 85-90%. Ошибки классификации объясняются в основном вариабельностью проб под влиянием сезонной или многолетней динамики, а также определенной неоднозначностью критериев исходного деления на классы.

Таким образом, метод обобщенного портрета дает нам возможность:

- по произвольным гидробиологическим пробам проводить распознавание качества воды в водоеме;
- количественно ранжировать биоиндикационную ценность отдельных видов на множестве наблюдений, полученных непосредственно в изучаемом регионе;
- рассчитывать "модельно обоснованные" индексы экологического благополучия для отдельных точек наблюдения, а в комплексе – для пространственных гидроэкосистем

Действительно, для любого примера, к которому применимо найденное решающее правило, можно рассчитать его расстояние η от разделяющей плоскости (см. рис. 8.7), численно равное правой части уравнения (8.53) для решающего правила. Чем это расстояние больше, тем больше благополучие экосистемы (при $\eta > 0$) или глубже ее кризисность (при $\eta < 0$), что дает нам основания интерпретировать η как некоторую меру на шкале нормирования качества вод или очередной индекс экологического благополучия [Шитиков с соавт., 2001]. Нулевому значению η соответствует пограничное состояние, которое можно классифицировать как "Напряженное или критическое". Если оценить это расстояние η в многомерном пространстве видов от найденной гиперплоскости до каждой пробы, взятой на 23 станциях р. Чапаевка от истока до устья (см. рис. 8.7), получим сложную пространственную динамику благополучия экосистемы (с точки зрения развития зообентоса) с выделением трех зон:

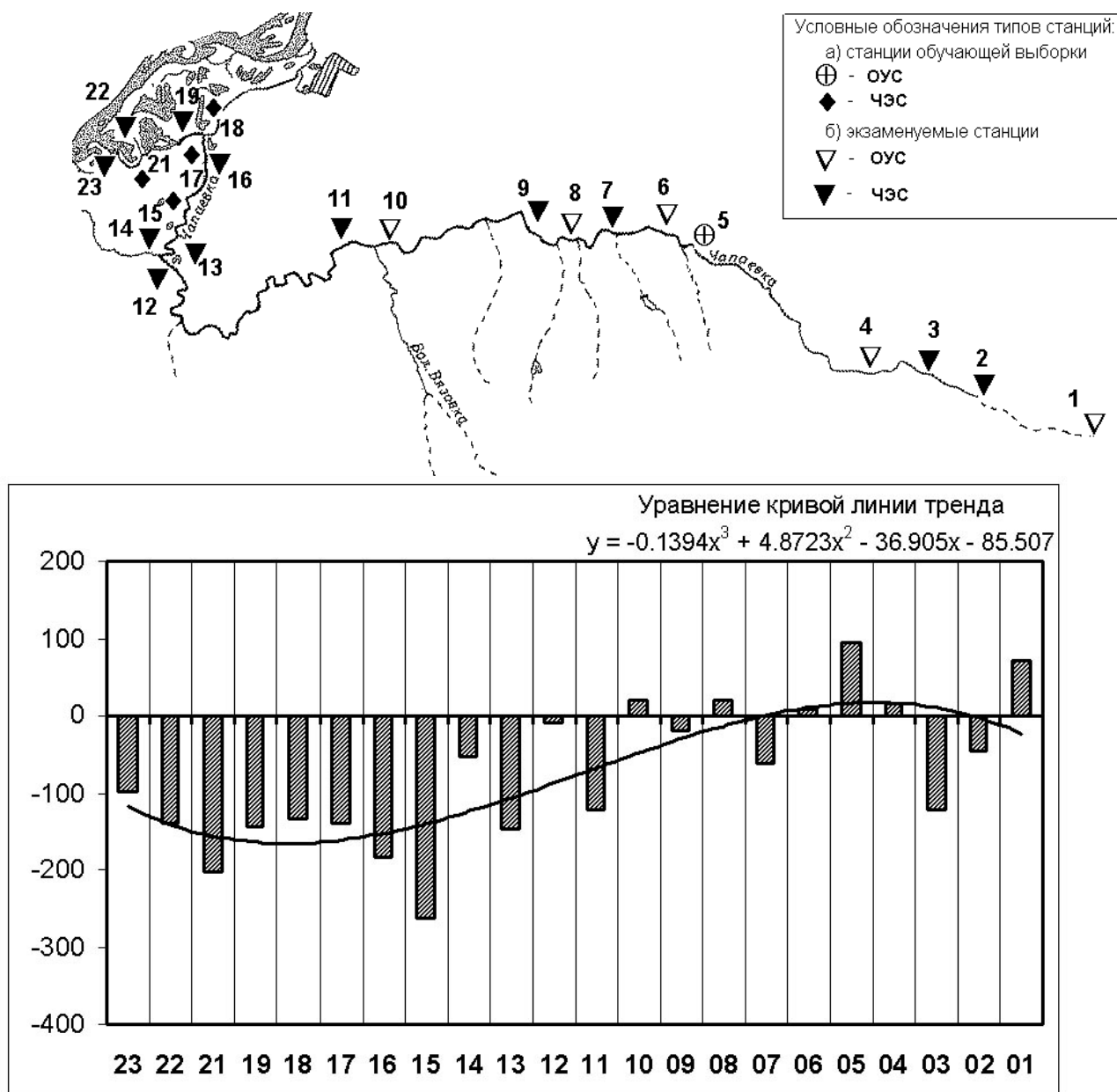


Рис. 8.7. Схема расположения станций наблюдений на р. Чапаевка и диаграмма распределения индекса экологического благополучия η по руслу реки (на диаграмме по оси абсцисс – станции р. Чапаевка, по оси ординат – значения η) Показана аппроксимирующая кривая тренда, соответствующая полиному третьего порядка.

- состояние в верхнем течении реки (ст.1–10), где при отсутствии промышленного загрязнения наблюдаются процессы эвтрофирования под влиянием сельскохозяйственной нагрузки, может быть охарактеризовано как переходное от "стабильного" к "критическому";
- в районе г. Чапаевска (ст.13 и ниже) в зоне сброса промышленных сточных вод наблюдается состояние отчетливого экологического кризиса;
- в устье реки (ст. 23) кризисное состояние несколько стабилизируется за счет разбавления относительно чистыми водами Саратовского водохранилища.

Подробно результаты исследования состояние экосистемы р. Чапаевка в условиях антропогенного воздействия изложены нами ранее [Экологическое состояние..., 1997] и полученные выводы по представленным моделям распознавания вполне соответствуют данным комплексных многолетних наблюдений. Следует также отметить, что из 23 станций на рис. 8.7, только 5 были

использованы в обучающей выборке, что свидетельствует о вполне приемлемых экстраполяционных свойствах решающих правил, полученных по методу обобщенного портрета.

Как уже отмечалось выше, разделяющая гиперплоскость делит совокупность измерений только на 2 класса. Однако не представляет методологических трудностей осуществить пересчет диапазона значений расстояния η в любую из широкоупотребительных шкал оценки качества вод: 6-разрядную шкалу по Былинкиной и Драчеву, 9-разрядную систему по Окснюк и Жукинскому или любую другую (см. раздел 3.4). Для этого достаточно составить репрезентативную выборку из примеров обучающей последовательности, каждому из которых будет поставлен в соответствие нормативный класс качества по выбранной шкале, и определить коэффициенты уравнения регрессии такого пересчета.

8.6. Задача об ассоциативности видов: алгоритм формирования логических высказываний

Формулировка задачи

Пусть пространство признаков X размерностью $m > 1$, соответствующее некоторому списку видов гидробионтов, предварительно преобразовано к бинарному виду, т.е. $x_i = 1$, если значение обилия i -го вида в пробе превышает некоторый заданный порог, и $x_i = 0$ в противном случае, $i = 1, 2, \dots, m$. Пусть также обучающая последовательность, в которую включаются специально отобранные измерения x из X , распадается на два подмножества векторов – векторы первого класса X и векторы второго класса \bar{X} .

Необходимо осуществить поиск по обучающей выборке непротиворечивых логических закономерностей и сформировать некоторую систему логических решающих правил, каждое из которых содержит информацию, заключенную не только в отдельных признаках, но и в различных сочетаниях значений признаков.

Биологический смысл формируемых логических конструкций заключается в попытке выделить в составе заданных биоценозов эволюционно сложившиеся совокупности взаимозависимых, контактирующих организмов, связанных общностью судьбы (консортивные группы, ассоциации, синузии и проч.).

Рекомендуемая литература: [Бонгард, 1967; Вайнцвайг, 1973; Голендер, Розенблит, 1978].

Математический лист

Рассмотрим логический метод распознавания, известный под названием алгоритм «Кора», который широко используется в геологоразведочных работах и скрининге лекарственных препаратов.

Задается множество характеристических логических функций $\Psi(x, \tau)$, которые называются логическими высказываниями и представляют собой некоторую комбинацию исходных переменных x_{ij} , связанных между собой операцией конъюнкции, т.е. знаком логического произведения «И» (AND, \wedge): $x_{i1} \wedge x_{j2} \wedge \dots \wedge x_{kl}$, где $i, j, k \in M$ – индексы исходного словаря признаков, $l = 1 \div 5$ – количество элементов в логическом высказывании или его ранг. Каждый из сомножителей может трактоваться при этом на языке булевой алгебры как «Истина» (TRUE при $x_{ij} = 1$) или ее отрицание, т.е. «Ложь» (NOT TRUE или FALSE при $x_{ij} = 0$).

Алгоритм «Кора» многократно просматривает обучающую выборку, предварительно разделенную на два класса (0 и 1), и, с использованием операций алгебры логики, выделяет из множества высказываний так называемые непротиворечивые логические высказывания $\Psi(x, \tau^*)$, покрывающие все множество примеров. Непротиворечивым высказыванием для каждого класса считается конъюнкция, которая встречается некоторое количество раз только в одном классе и ни разу не встречается в другом. При генерации логических высказываний алгоритм руководствуется рядом следующих правил:

1. Конъюнкции сортируются по продуктивности или мощности, оцениваемой числом наблюдений, для которых это высказывание справедливо. Чем больше продуктивность конъюнкции, тем выше прогностическая ценность выделенной комбинации признаков. В случае детерминист-

ской задачи распознавания в конечное решающее правило включаются конъюнкции, продуктивность которых превышает некоторый порог Δ .

2. Из генерируемого списка исключаются подчиненные (или дочерние) конъюнкции, полностью содержащие более короткие претенденты. После такой операции поглощения ликвидируется избыточность решающего правила, в котором остаются конъюнкции минимального ранга, содержащие выделенные закономерности в концентрированной форме.
3. Исключаются высказывания, которые по определенным критериям считаются "предрассудками". К ним относятся конъюнкции, не связанные с объективным правилом классификации, но в силу ограниченности выборки получившие хорошие оценки на обучении. Для выделения признаков, склонных к предрассудкам, выполняют bootstrap-процедуру, в которой обучающая выборка многократно случайным образом разбивается на классы. Разбитая таким образом выборка является тестом, позволяющим присвоить каждому исходному признаку штрафные баллы за склонность к предрассудкам. Конъюнкции, набравшие сверхнормативное количество штрафных очков, из решающего правила исключаются.

Описанием каждого класса является логическая сумма (дизъюнкция) некоторого количества непротиворечивых и продуктивных конъюнкций, прошедших описанные выше этапы отбора. Комбинация этих логических высказываний представляет собой своеобразную мозаично-фрагментарную разделяющую поверхность специального типа (в отличие от линейной поверхности "обобщенного портрета"). Существует возможность использовать сгенерированные конъюнкции для экзамена тестируемых примеров по принципу голосования (конъюнкции как бы используются в качестве "электората"). Однако, мы полагаем, что специальная ценность использования алгоритма «Кора» состоит в извлечении из моря исходных данных нетрадиционных и непротиворечивых гипотез об экологии видов – феноменах их взаимной обусловленности или конкурентности.

Алгоритм «Кора», как и другие логические методы распознавания образов, является достаточно трудоемким, поскольку при отборе конъюнкций необходим полный или частично направленный перебор. Поэтому при применении логических методов предъявляются высокие требования к эффективной организации вычислительного процесса, и эти методы хорошо работают при сравнительно небольших размерностях пространства признаков и емкости задаваемого класса характеристических функций.

Практический пример

Используем алгоритм «Кора» для логико-структурного анализа той же обучающей выборки, что и в алгоритме 2 раздела 8.5. Напомним, что алфавит признаков соответствовал 166 видам хирономид, класс X включал 70 проб на станциях с относительно удовлетворительной экологической ситуацией (ОУС), а класс \bar{X} – 90 измерений в зоне с чрезвычайной экологической ситуацией (ЧЭС).

Небольшая часть полученных высказываний приведена в табл. 8.21. Например, вид *Microtendipes pedellus* встретился в 9 наблюдениях класса ОУС и ни в одном наблюдении класса ЧЭС. Сочетание видов *Cladotanytarsus mancus* и *Cricotopus bicinctus* при обязательном отсутствии *Cryptochironomus* gr. *defectus* достигли того же 8 раз. Логические высказывания класса ЧЭС несколько беднее и часто оказываются, хотя бы фрагментарно, зеркальным отражением конъюнкций класса ОУС.

Таблица 8.21

Фрагменты логических решающих правил, характеризующих категории
качества вод по видовому составу хирономид
(затенены сомножители, являющиеся признаком отсутствия вида)

Класс ОУС		Класс ЧЭС	
Мощность	Логическое высказывание	Мощность	Логическое высказывание
5	Brillia gr. modesta	4	<i>Dicrotendipes notatus</i> √
6	<i>Clinotanypus nervosus</i>		<i>Harnischia fuscimana</i> √
8	<i>Harnischia fuscimana</i>		<i>Tanytarsus pallidicornis</i>
9	<i>Microtendipes pedellus</i>	4	<i>Ablabesmyia monilis</i> ^
9	<i>Cricotopus bicinctus</i> ^ <i>Paratanytarsus confusus</i>		<i>Cladotanytarsus mancus</i> ^
8	<i>Cladotanytarsus mancus</i> ^ <i>Cricotopus bicinctus</i> ^ Cryptochironomus gr. defectus		<i>Harnischia fuscimana</i> ^ Microchironomus tener
8	<i>Harnischia fuscimana</i> ^ <i>Polypedilum nubeculosum</i> ^ <i>Procladius ferrugineus</i>		5
9	<i>Microtendipes pedellus</i> ^ <i>Micropsectra gr.praecox</i> ^ Dicrotendipes notatus	<i>Endochironomus impar</i> ^	
		<i>Paracladopelma camptolabis</i> ^ <i>Polypedilum scalaenum</i>	

9.1. Классификация наблюдений с использованием иерархических деревьев решений

Формулировка задачи

Пусть в таблице произвольных гидробиологических наблюдений X размерностью $m > 1$ один из признаков, измеренный в порядковой шкале, определяет класс объекта и может принимать значения из некоторого фиксированного набора $\{y_1, y_2, \dots, y_k, \dots, y_p\}$. Необходимо на основе обучающей выборки сформировать дерево классификации (дерево решений), содержащее совокупность логических условий, позволяющих для произвольного измерения x из X указать класс качества y_k , к которому оно может принадлежать.

Еще в XVII столетии великий ученый Готфрид Лейбниц ("Новые опыты о человеческом разуме", 1704 г.) пытался раскрыть тайну "*Всеобщего Искусства Открытия*". Он утверждал, что одной из двух частей этого искусства является *комбинаторика* – перебор постепенно усложняющихся комбинаций исходных данных. Второй частью является *эвристика* – свойство догадки человека. На языке нашего времени эта часть соответствует модели мышления человека, включающей в себя процессы генерации эвристик (догадок, изобретений, открытий).

Универсальным методом поиска решений является *метод полного перебора*²⁸ и, обладая мы бесконечным запасом времени и ресурсов, то можно найти решение любой задачи. Здесь имеется в виду не конструирование нового знания, а, прежде всего, "выбор" наиболее правдоподобных вариантов. Можно отметить другой универсальный метод ускорения полного перебора — быстрое отсечение ложных (или вероятно ложных) ветвей перебора на основе использования алгебр логики.

Простейшие (одномерные) логические правила типа "если A , то B " мы рассматривали в разделе 6.4, когда описывали детерминационный анализ. Более широкие возможности предоставляют системы анализа на основе *деревьев решений* (Tree Analyzer), которые позволяют свести исходную матрицу данных X к набору простых правил, представленных в виде иерархической структуры – дерева. Этот метод моделирования сочетает мощный аналитический аппарат генерации решений с простотой использования технологии и интуитивно понятными конечными результатами.

Рекомендуемая литература: [Breiman et al., 1984; Коршунов, 1995; Loh, Shih, 1997; Деревья классификации., URL]. Интересные методические материалы и Интернет-конференция по теме находятся также на сайте лаборатории BaseGroup Labs – <http://www.basegroup.ru/labs>.

Математический лист

Деревья решений – один из методов автоматического анализа данных, основные идеи которого восходят к работам П. Ховленда (P. Hoveland) и Е. Ханта (E. Hunt) конца 50-х годов XX в. Их итогом явилась основополагающая монография [Hunt et al., 1966], давшая импульс развитию этого направления.

Построение деревьев классификации – один из наиболее важных приемов, используемых при проведении "добычи данных и разведывательного анализа" (Data Mining), реализуемый как совокупность методов аналитической обработки больших массивов информации с целью выявить в них значимые закономерности и/или систематические связи между предикторными переменными, которые затем можно применить к новым совокупностям измерений.

Деревья решений представляют собой последовательные иерархические структуры, состоящие из узлов, которые содержат правила, т.е. логические конструкции вида "если ... то ...". Конечными узлами дерева являются "листья", соответствующие найденным решениям и объединяющие некоторое количество объектов классифицируемой выборки. Это похоже на то, как поло-

²⁸ Один из принципов системологии – принцип осуществимости моделирования сложных систем Б.С. Флейшмана [1982] делает невозможной процедуру полного перебора для большинства реальных экосистем. Но если понимать под «системой» совокупность только тех элементов и связей, которые необходимы для решения конкретной задачи (для достижения определенной цели), то процедура перебора может быть вполне реализуемой.

жение листа на дереве можно задать, указав ведущую к нему последовательность ветвей, начиная от корня и кончая самой последней веточкой, на которой лист растет.

Есть целый ряд причин, делающих деревья классификации более гибким средством, чем традиционные методы анализа:

- схема *одномерного ветвления*, которая позволяет изучать эффект влияния отдельных предикторных переменных и проводить последовательный анализ их вклада;
- возможность одновременно работать с переменными различных типов, измеренных в непрерывных и порядковых шкалах, либо осуществлять любое монотонное преобразование признаков;
- отсутствие предварительных предположений о законах распределения данных.

Область применения деревьев решений в настоящее время широка, но все задачи, решаемые этим методом, могут быть объединены в три следующие группы:

- *Описание данных*: деревья решений позволяют хранить информацию о данных в компактной форме, т.е. вместо обширных таблиц данных мы можем хранить дерево решений, которое содержит в концентрированной форме точное описание объектов;
- *Классификация*: деревья решений отлично справляются с задачами классификации, т.е. отнесения объектов к одному из заранее известных классов; при этом целевая переменная должна быть измерена в порядковой шкале;
- *Регрессия*: если целевая переменная имеет непрерывные значения, деревья решений позволяют установить зависимость целевой переменной от независимых (входных) переменных. Например, к этому классу относятся задачи численного прогнозирования (предсказания значений целевой переменной).

На сегодняшний день существует значительное число алгоритмов, реализующих построение деревьев решений, из которых наибольшее распространение и популярность получили следующие:

- **CART** (Classification and Regression Tree), разработанный Л. Брейманом с соавторами [Breiman et al., 1984], представляет собой алгоритм построения бинарного дерева решений – дихотомической классификационной модели; каждый узел дерева при разбиении имеет только двух потомков; как видно из его названия, алгоритм решает задачи как классификации, так и регрессии;
- **C4.5** – алгоритм построения дерева решений с неограниченным количеством потомков у узла, разработанный Р. Куинленом [Quinlan, 1993]; не умеет работать с непрерывным целевым полем, поэтому решает только задачи классификации;
- **QUEST** (Quick, Unbiased, Efficient Statistical Trees) – программа, разработанная В. Ло и И. Ши [Loh, Shih, 1997], в которой используются улучшенные варианты метода рекурсивного квадратичного дискриминантного анализа, позволяющие реализовать *многомерное ветвление по линейным комбинациям порядковых предикторов*; содержит ряд новых средств для повышения надежности и эффективности индуцируемых деревьев классификации.

Основная идея построения деревьев решений из некоторого обучающего множества X , сформулированная в интерпретации Р. Куинлена, состоит в следующем.

Пусть в некотором узле дерева сконцентрировано некоторое множество примеров X^* , $X^* \subset X$. Тогда существуют три возможные ситуации.

1. Множество X^* содержит один или более примеров, относящихся к одному классу y_k . Тогда дерево решений для X^* – это "лист", определяющий класс y_k .
2. Множество X^* не содержит ни одного примера, т.е. представляет пустое множество. Тогда это снова "лист", и класс, ассоциированный с "листом", выбирается из другого множества, отличного от X^* (скажем, из множества, ассоциированного с родителем).
3. Множество X^* содержит примеры, относящиеся к разным классам. В этом случае следует разбить множество X^* на некоторые подмножества. Для этого выбирается один из признаков j , имеющий два и более отличных друг от друга значений и X^* разбивается на новые подмножества, где каждое подмножество содержит все примеры, имеющие определенный диапазон значений выбранного признака. Это процедура будет рекурсивно продолжаться до тех пор, пока любое подмножество X^* не будет состоять из примеров, относящихся к одному и тому же классу.

Описанная процедура построения дерева решений сверху вниз, называемая *схемой "разделения и захвата"* (divide and conquer), лежит в основе многих современных методов построения деревьев решений. Процесс обучения также называют *индуктивным обучением* или *индукцией деревьев* (tree induction).

При построении алгоритмов индукции деревьев решений особое внимание уделяется следующим ключевым вопросам:

- какой принять вид критерия для селекции признака, по которому пойдет разбиение;
- как выбрать момент, когда следует прекратить дальнейшие ветвления;
- каков механизм отсечения ветвей.

Правило разбиения: каким образом следует выбрать признак?

Для построения дерева с одномерным ветвлением, находясь на каждом внутреннем узле, необходимо найти такое условие проверки, связанное с одной из переменных j , которое бы разбивало множество, ассоциированное с этим узлом на подмножества. Общее правило для выбора опорного признака можно сформулировать следующим образом: *«выбранный признак должен разбить множество X^* так, чтобы получаемые в итоге подмножества X_k^* , $k = 1, 2, \dots, p$, состояли из объектов, принадлежащих к одному классу, или были максимально приближены к этому, т.е. количество чужеродных объектов из других классов в каждом из этих множеств было как можно меньше».*

Были разработаны различные критерии, например, теоретико-информационный критерий, предложенный Р. Куинленом:

$$T(j) = H(X^*) - \sum_{k=1}^p \frac{|X_k^*|}{|X^*|} \cdot H(X_k^*) \Rightarrow \max \quad \forall j = 1, 2, \dots, m, \quad (9.1)$$

где $H(X^*)$ и $H(X_k^*)$ – энтропия подмножеств, разбитых на классы, рассчитанная по формуле Шеннона.

Алгоритм CART использует, так называемый, *индекс Джини* (в честь итальянского экономиста Corrado Gini), который оценивает "расстояние" между распределениями классов

$$G(c) = 1 - \sum_{j=1}^n p_j, \quad (9.2)$$

где c – текущий узел, а p_j – вероятность класса j в узле c .

Большинство из известных алгоритмов являются "жадными алгоритмами": если один раз был выбран атрибут и по нему произведено разбиение на подмножества, то алгоритм не может вернуться назад и выбрать другой атрибут, который дал бы лучшее разбиение. И поэтому на этапе построения дерева нельзя сказать даст ли выбранный атрибут, в конечном итоге, оптимальное разбиение.

Правило остановки: разбивать дальше узел или отметить его как лист?

В дополнение к основному методу построения деревьев решений были предложены следующие правила:

- использование статистических методов для оценки целесообразности дальнейшего разбиения или так называемой "ранней остановки" (prepruning); в конечном счете, "ранняя остановка" процесса построения привлекательна в плане экономии времени обучения, но здесь уместно сделать одно важное предостережение: этот подход строит менее точные классификационные модели и поэтому ранняя остановка крайне нежелательна – признанные авторитеты в этой области Л. Брейман и Р. Куинлен советуют буквально следующее: *«Вместо остановки используйте отсечение».*
- ограничение глубины дерева; можно остановить дальнейшее построение, если разбиение ведет к дереву с глубиной превышающей заданное значение;
- **контроль нетривиальности разбиения, т.е. получившиеся в результате узлы должны содержать количество примеров, не менее заданного порога.**

Этот список эвристических правил можно продолжить, но на сегодняшний день не существует таких, которые имели бы глобальную практическую ценность. Многие из них применимы в

каких-то частных случаях и, поэтому, к их использованию следует подходить с достаточной осторожностью.

Правило отсечения: каким образом ветви дерева должны отсекаются?

Очень часто алгоритмы построения деревьев решений дают сложные деревья, которые имеют много узлов и ветвей. Такие "ветвистые" деревья очень трудно понять, а ценность правила, справедливого скажем для 1-3 объектов, крайне низка и в целях анализа данных практически непригодно. Гораздо предпочтительнее иметь дерево, состоящее из малого количества узлов, не вполне идеально классифицирующее обучающую выборку, но обладающее способностью столь же хорошо прогнозировать результат для *тестовой выборки*.

К сожалению, достаточно непросто конкретно определить, что же такое дерево классификации "подходящего размера", кроме общего тезиса о том, что оно должно уметь использовать ту информацию, которая улучшает точность прогноза, и игнорировать ту информацию, которая прогноза не улучшает. Для решения вышеописанной проблемы часто применяется так называемое "отсечение ветвей" (pruning), которое происходит снизу вверх, двигаясь с листьев дерева, отмечая узлы как листья, либо заменяя их поддеревом. Если под точностью дерева решений понимается отношение правильно классифицированных объектов, то нужно отсечь или заменить поддеревом те ветви, которые не приведут к возрастанию ошибки.

Классификация новых примеров

После индукции дерева решений его можно использовать для распознавания класса нового объекта. Обход дерева решений начинается с корня дерева. На каждом внутреннем узле проверяется значение объекта X_m по атрибуту, который соответствует алгоритму проверки в данном узле, и, в зависимости от полученного ответа, находится соответствующее ветвление, и по этой дуге осуществляется движение к узлу, находящему на уровень ниже и т.д. Обход дерева заканчивается, как только встретится узел решения, который и дает название класса объекта X_m .

Результаты расчетов

Сформируем обучающую выборку, состоящую из 117 наблюдений, признаками которой являются значения индексов Вудивисса, Шеннона, Пареле, Балужкиной, а также число видов в пробе, средние значения численности и биомассы, концентрация минерального фосфора и тип водоема (значения от 1 до 5 в зависимости от ширины русла и скорости течения). В качестве целевой переменной будем использовать класс качества вод от 2 до 6.

Получим два дерева решений: "компактное" дерево с использованием жестких процедур отсечения ветвей и упрощения правил и "полное" дерево, где единственным условием было концентрация в одном узле не менее 2 примеров обучающей выборки. "Компактное" дерево, представленное на рис. 9.1, состоит только из 8 узлов, в основе логических правил которых лежит всего 3 исходных признака из 9.

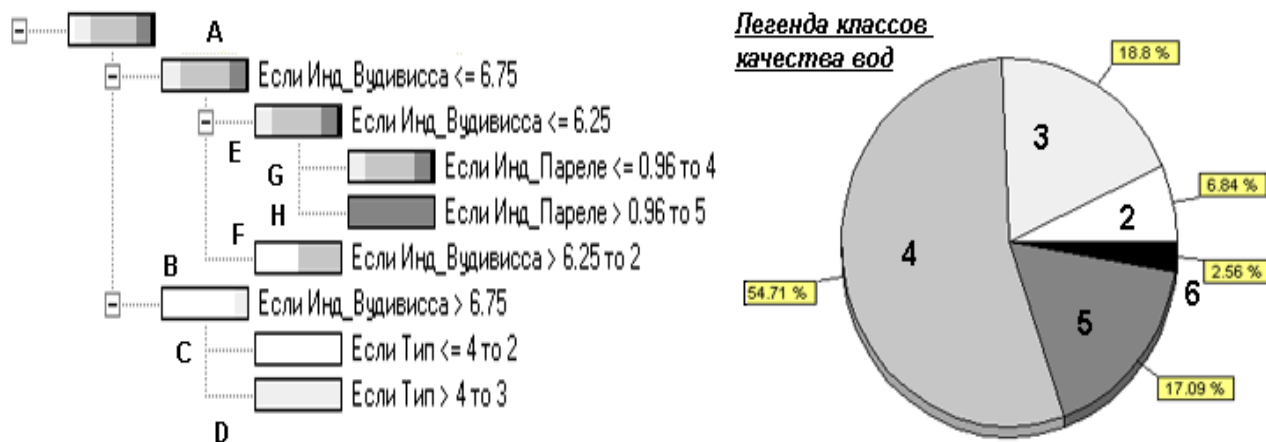


Рис. 9.1. Дерево решений, построенное для классификации качества вод с использованием процедур отсечения ветвей и упрощения.

В частности, двигаясь от корня, мы, вместе с 7 измерениями попадаем в узел В, если индекс Вудивисса больше 6.75, либо, в противном случае, с остальными измерениями поступаем в узел А. Из

узла В, используя дополнительное условие по типу водоема, осуществляется переход на два листа С и D. Двигаясь же по основной ветви от узла А мы, в конце концов, приходим к узлу G, где сосредотачиваются все плохо распознаваемые примеры в количестве 63 измерений. Всем этим объектам присваивается класс 4, причем в 44 случаях это было выполнено ошибочно. Таким образом, исполнив свою объясняющую роль интерпретации существенных факторов, "компактное" дерево показало посредственные результаты в прогнозировании (38.4% ошибок).

Полное дерево, построенное без применения излишне жестких мер по обрезанию ветвей, использует все 9 предикторных переменных и гораздо сложнее в интерпретации, поскольку состоит из 54 узлов, из которых 28 являются "листьями" (см. табл. 9.1). Однако громоздкость сформированных правил компенсируется великолепными интерполяционными свойствами: на обучающей выборке зафиксировано только 9 ошибок классификации, что составляет 7.6%.

9.2. Генетический алгоритм селекции информативных переменных

Формулировка задачи

Пусть для решения произвольной задачи регрессии или классификации имеется множество измерений в пространстве варьируемых переменных размерностью $m > 1$. Необходимо заданный набор признаков разбить на две категории: информативные переменные, существенные для решения поставленной задачи, и незначимые переменные, несущие мало дополнительной информации для нахождения искомой зависимости.

Важным условием применения любых статистических методов является объективно существующая связь между известными входными значениями и неизвестным откликом. Эта связь может носить случайный характер, искажена шумом, но она должна существовать. Известный афоризм «*garbage in, garbage out*» («мусор на входе – мусор на выходе») нигде не справедлив в такой степени, как при использовании методов самоорганизации и нейросетевого моделирования. Это объясняется, во-первых, тем, что итерационные алгоритмы направленного перебора комбинаций параметров нейросети оказываются весьма эффективными и очень быстрыми лишь при хорошем качестве исходных данных. Однако, если это условие не соблюдается, число итераций быстро растет и вычислительная сложность оказывается сопоставимой с экспоненциальной сложностью алгоритмов полного перебора возможных состояний. Во-вторых, сеть склонна обучаться, прежде всего, тому, чему проще всего обучиться, а, в условиях сильной неопределенности и зашумленности признаков, это – прежде всего артефакты и явления "ложной корреляции".

Отбор информативных переменных в традиционной регрессии и таксономии осуществляют путем "взвешивания" признаков с использованием различных статистических критериев. Так в главе 8 нами были описаны пошаговые процедуры, основанные, в той или иной форме, на анализе коэффициентов частных корреляций или ковариаций. Однако трудность проблемы формирования наиболее информативного подмножества признаков обусловлена тем, что после отбрасывания одного признака соотношение значимостей остальных анализируемых переменных в общем случае изменяется. Прямой путь решения этой задачи заключается в полном переборе всех C_m^{m-p} сочетаний переменных, что требует гигантского объема вычислений. Поэтому для этих целей используют различные секвенциальные (последовательные) процедуры, не всегда приводящие к результату, достаточно близкому к оптимальному. Элегантный автоматизированный подход к выбору значимых входных переменных может быть реализован с использованием генетического алгоритма, который можно считать "интеллектуальной" формой метода проб и ошибок.

Рекомендуемая литература: [Goldberg, 1989; Скурихин, 1995; Васильев, Ильясов, 1999].

Таблица 9.1

Дерево решений, построенное для классификации качества вод без использования

процедур отсечения ветвей и упрощения
(условные обозначения в шапке: **М** – количество примеров обучающей вы-
борки,
ассоциированных с узлом, **f** – число ошибок, **k** – лист класса качества вод)

Правило узла	М	f	k
<i>if Инд_Вудивисса <= 6.5 then</i>	11		
0			
<i>if Инд_Вудивисса <= 6.25 then</i>	10		
8			
<i>if Инд_Вудивисса <= 0.75 then Класс 3</i>	2	0	3
<i>if Инд_Вудивисса > 0.75 then</i>	10		
6			
<i>if Инд_Пареле <= 0.96 then</i>	10		
5			
<i>if P_мин <= 0.346 then</i>	10		
3			
<i>if Инд_Балушкиной <= 0.165 then Класс 4</i>	2	1	4
<i>if Инд_Балушкиной > 0.165 then</i>	10		
1			
<i>if Инд_Вудивисса <= 1.5 then</i>	8		
/ / / / / / <i>if P_мин <= 0.0905 then Класс 5</i>	6	0	5
<i>if P_мин > 0.0905 then Класс 4</i>	2	0	4
<i>if Инд_Вудивисса > 1.5 then</i>	93		
<i>if Инд_Шеннона <= 1.075 then Класс 3</i>	2	0	3
<i>if Инд_Шеннона > 1.075 then</i>	91		
<i>if P_мин <= 0.0075 then Класс 4</i>	5	1	4
<i>if P_мин > 0.0075 then</i>	86		
/ / / / / / / <i>if Инд_Шеннона <= 1.52 then</i>	8		
<i>if Tип <= 3.5 then Класс 2</i>	2	1	2
<i>if Tип > 3.5 then Класс 4</i>	6	0	4
/ / / / / / / / / <i>if Инд_Шеннона > 1.52 then</i>	78		
<i>if Инд_Балушкиной <= 6.43 then</i>	41		
<i>if N_видов <= 6.5 then</i>	6		
/ / / / / / / / / / / <i>if P_мин <= 0.1335 then</i>	4	0	3
Класс 3			
<i>if P_мин > 0.1335 then Класс</i>	2	1	4
4			
<i>if N_видов > 6.5 then</i>	35		
/ / / <i>if Инд_Вудивисса <= 4.75</i>	27		
then			
<i>if Ср_Биомасса <=</i>	23	0	4
171.305 then Класс 4			
/ / / / / / / / / / / / / <i>if Ср_Биомасса > 171.305</i>	4		
then			

Генетический алгоритм, позаимствованный у природных аналогов, является наиболее ярким представителем *эволюционных методов* (см. раздел 2.8) и представляет собой мощное поисковое средство, эффективное в различных проблемных областях.

Принципы эволюционной теории, заложенные Чарльзом Дарвиным в работе "Происхождение видов", сводятся к двум основным выводам:

- естественный отбор как движущая и направляющая сила эволюции, что предполагает некоторый механизм выделения самых сильных и полезных экземпляров (решений, структур, особей, алгоритмов);
- наличие некоторых степеней свободы эволюционного процесса в виде изменчивости объектов, т.е. наличие шага генерации новых структур искомым объектам (перечисление то же) в виде непрекращающейся последовательности "проб и ошибок".

Именно эти принципы отбора наилучших объектов являются ключевой эвристикой всех эволюционных математических методов, позволяющих зачастую уменьшить время поиска решения на несколько порядков по сравнению со случайным поиском. Механизм естественного отбора связывается здесь с некоторой функцией оптимальности $f(x)$, определяющей сравнительную ценность произвольного варианта, а изменчивость привносится путем специальных модификаций фрагментов бинарного кода.

Генетический алгоритм был разработан Дж. Холландом (J. Holland) в 1975 г. в Мичиганском университете. В дальнейшем Д. Голдберг (D. Goldberg) выдвинул ряд гипотез и теорий, помогающих глубже понять природу эволюции, а К. ДеДжонг (C. DeJong) предложил оптимальный вариант подбора параметров алгоритма для повышения общей эффективности работы.

Канонический генетический алгоритм характеризуется следующими особенностями.

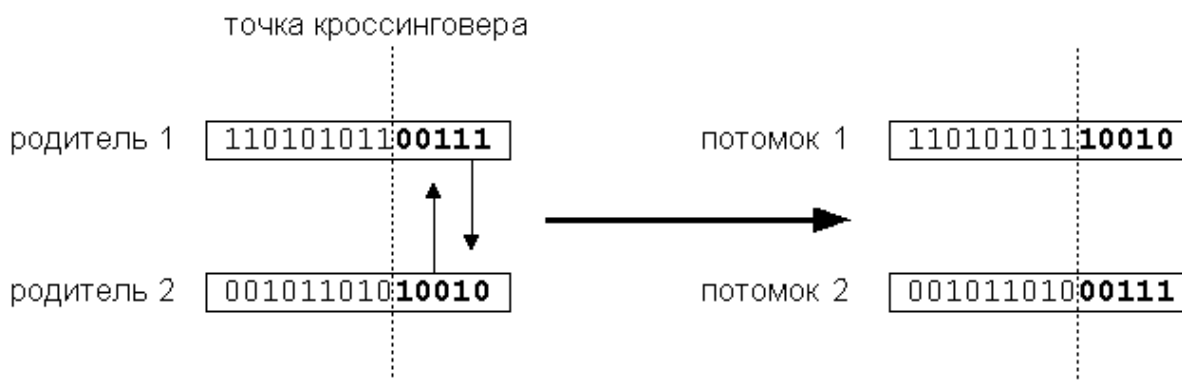
1. Задается функция оптимальности $f(x)$, определяющая эффективность каждой найденной комбинации признаков. Формируемое решение кодируется как вектор x , который называется "*хромосомой*" и соответствует битовой маске, т.е. двоичному представлению набора исходных переменных. В *хромосоме* выделяются части вектора – "*гены*", изменяющие свои значения в определенных позициях – "*аллелях*".
2. В соответствии с определенными ограничениями инициализируется исходная "*популяция*" $P^0(x_1^0 \dots x_\lambda^0)$ потенциальных решений – совокупность решений на конкретной итерации, состоящая из некоторого количества *хромосом* λ , число которых задается изначально и в процессе перебора обычно не изменяется.
3. Каждая *хромосома* x_i , $i = 1, \dots, \lambda$ в *популяции* декодируется в форму, необходимую для последующей оценки, и ей присваивается значение эффективности $\mu(x_i)$ в соответствии с вычисленной функцией оптимальности. Кроме того, каждой *хромосоме* присваивается вероятность воспроизведения $P(x_i)$, $i = 1, \dots, \lambda$, которая зависит от эффективности данной *хромосомы*. Существуют различные схемы отбора, самая популярная из них – пропорциональный отбор:

$$p(x_i^t) = \frac{f(x_i^t)}{\sum_{j=1}^{\lambda} f(x_j^t)}. \quad (9.3)$$

4. В соответствии с вероятностями воспроизведения $P(x_i)$ создается новая популяция *хромосом*, причем с большей вероятностью воспроизводятся наиболее эффективные элементы. *Хромосомы* производят потомков, используя операции рекомбинации: кроссинговера и мутации.
5. Процесс останавливается, если получено удовлетворительное решение, либо если исчерпано отведенное на эволюцию время. Если процесс не окончен, то вновь повторяются процессы оценки и воспроизведения новой *популяции*.

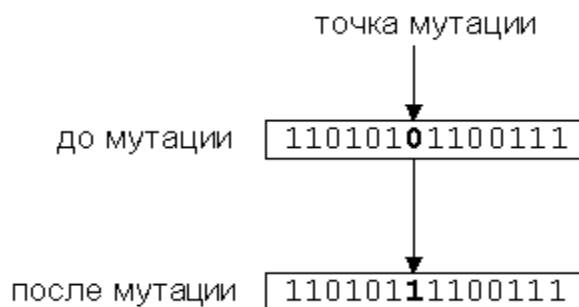
Операция воспроизведения на шаге 4 служит для создания следующей *популяции* на основе предыдущей при помощи операторов кроссинговера и мутации, которые имеют случайный характер. Каждой *хромосоме* промежуточной *популяции* X_i^t в случае необходимости подбирается партнёр и созданная *хромосома* помещается в *результлирующую популяцию*.

Оператор кроссинговера производит скрещивание хромосом и обмен генетическим материалом между родителями для получения потомков. Этот оператор служит для исследования новых областей пространства и улучшения существующих (эволюционное приспособление). Простейший одноточечный кроссинговер производит обмен частями, на которые хромосома разбивается точкой кроссинговера, выбираемой случайно.



Двухточечный кроссинговер обменивает кусок строки, попавшей между двумя точками. Предельным случаем является равномерный кроссинговер, в результате которого все биты хромосом обмениваются с некоторой вероятностью.

Оператор мутации применяется к каждому биту хромосомы с небольшой вероятностью ($p_i \approx 0.001$), в результате чего бит (аллель) изменяет значение на противоположный.



Мутация нужна для расширения пространства поиска ("эволюционное исследование") и предотвращения невозвратимой потери бит в аллелях.

Существует также оператор воспроизведения, называемый «инверсией», который заключается в реверсировании аллелей между двумя случайными позициями, однако для большинства задач он не имеет практического смысла и поэтому мало эффективен.

Для исследования эффективности генетических алгоритмов используется понятие «шаблона». Шаблоны представляют собой гиперплоскости различной размерности в l -мерном пространстве и определяются с помощью элементов множества $\{0,1,*\}^l$, где l – длина хромосомы в битах, * – в данной позиции может быть любой бит. Генетический алгоритм обрабатывает шаблоны, и производит выборку значительного числа гиперплоскостей из областей с высокой приспособленностью, причем в течение одного поколения популяции оценивается $O(\lambda^3)$ структур. Это и отличает эволюционные процессы от различных эвристических и случайно-поисковых методов, в которых единственное решение развивается само по себе, а предыдущий опыт не используется.

Решение, получаемое при помощи генетического алгоритма, по своему характеру субоптимально, но это не мешает применять метод для поиска глобальных экстремумов в широком классе задач оптимизации многоэкстремальных функций.

Результаты расчетов

Используем для последующего анализа выборку из 520 измерений, где в качестве варьируемых переменных представлены общее число видов $X_1 = N$ и показатели обилия отдельных таксонов зообентоса (для хирономид – подсемейств и триб); $X_j = \ln((N_{sj}B_{sj})^{0.5})$, N_{sj} и B_{sj} – суммарные

по видам численность и биомасса j -й таксономической группы в пробе, $j = 2, 3, \dots, 51$. В предыдущей главе эта выборка уже использовалась нами при описании логистической регрессии и дискриминантного анализа (см. разделы 8.2 и 8.3). В качестве прогнозируемого отклика была взята категория качества воды в альтернативной шкале «Чисто» (2 и 3 класс) / «Грязно» (4 – 6 класс).

Функцию оптимальности получаемых решений $f(x)$ определим как статистику, связанную с качеством прогноза отклика на примерах обучающей выборки и полученную с помощью моделей вероятностных и обобщенно-регрессионных нейронных сетей. Сети этих типов выбраны потому, что для них общее время обучения и оценки относительно мало. Кроме того, эти сети очень сильно страдают от присутствия неинформативных входных переменных, а потому являются хорошим детекторами их обнаружения.

Выполним экзамен большого числа комбинаций входных переменных с помощью функции описанного типа. Каждый возможный вариант набора входных переменных можно представить в виде битовой маски по одному биту на каждую переменную (см. табл. 9.2). Ноль в соответствующей позиции означает, что эта исходная переменная не включена во входной набор, а единицы соответствуют базовому набору признаков. Начальная популяция хромосом на итерации 1 была сформирована нами случайным образом, хотя для этого возможно использование специальных простых правил.

Таблица 9.2

Результаты эволюционного процесса формирования информативного набора переменных с использованием генетического алгоритма
($\mu(x_i)$ – оценка эффективности хромосомы)

№ итераций	$\mu(x_i)$	Битовые маски хромосом
1	2.0001	10000011011001011010100111010010110100010001011110
2	2.0093	11101010010110010100000101100001110010110010011010
3	2.0049	1001010110010001001111011100111111110001001101011
4	2.0124	11100000110011000100011101010010110000010001011110
5	2.0154	11000111001101101101101111010010110101010001010110
6	2.0076	00011010010110010100010101100001110010111011000111
7	2.0078	00011010010111010100010101100001110010010010000111
...
97	2.0063	10010011101100010001101011110110111000001101100011
98	2.0070	10111001110101000100101001001001000101001101110010
99	2.0149	10111001101100000100101001001001000101101001000010
100	2.0042	01111000111100000110001101000010111101101001000010
Наилучшее найденное решение:		
	2.0450	1101101011111100010001001110000110101101110101010

Емкость популяции индивидуумов в нашем случае была установлена $\lambda = 100$, а процесс эволюции продолжался на протяжении 100 поколений (т.е. цикл отбор-порождение-оценка был повторен 100 раз и при этом построено и оценено 10000 версий нейронных сетей). Генетический алгоритм в поисках оптимального набора генов следил за популяциями хромосом, оценивая эффективность $\mu(x_i)$ каждой из них с помощью стандартного отклонения от регрессии при обучении обобщенно-регрессионной нейронной сети одинаковой конфигурации с коэффициентом сглаживания, равном 0.3. По значениям ошибки производился отбор лучших вариантов масок, которые комбинировали друг с другом с помощью искусственных генетических операций скрещивания и мутаций, интенсивностью которых можно было управлять (скорость мутации была выбрана 1, а скорость скрещивания – 0.3).

В соответствии с найденным наилучшим решением, все подмножеств видов зообентоса можно разбить на две примерно равные категории: 27 групп информативных индикаторов качества воды (первые три уровня в табл. 9.3) и 22 группы организмов, малозначимых для нейросетевого моделирования (в той же таблице внизу). Следует еще раз подчеркнуть, что отнесение како-

го-либо класса или семейства к малоинформативной категории вовсе не означает отсутствие фактической биологической зависимости обилия организмов этого таксона от уровня загрязнения. Это может быть, например, объяснено его сильной корреляцией с какой-либо другой значащей группой, вследствие чего пришлось пожертвовать одним из таксонов, объявив его малоценным для статистической обработки.

Иногда бывает полезно уменьшить размерность задачи даже ценой некоторой потери точности, поскольку это повышает иллюстративность и улучшает способность нейросетевой модели к обобщению. Можно создать дополнительный стимул к исключению лишних переменных, назначив специальный штраф за элемент. Это число будет умножаться на количество элементов и результат будет прибавляться к уровню ошибки при оценке качества сети. Назначим штраф за элемент, равный 0.002, и повторим эволюционный процесс. В этих условиях из 50 исходных переменных будет отобрано в качестве информативных только четыре признака, представленных первыми двумя уровнями в табл. 9.3: обилие семейств *Ephemeroptera*, *Oligochaeta*, а также подсемейства *Orthoclaadiinae* и трибы *Tanytarsini* семейства *Chironomidae*. Если же увеличить штраф за элемент до 0.005, то выбирается только один значимый признак – обилие организмов семейства *Ephemeroptera*. Таким образом, варьируя параметрами генетического алгоритма можно эшелонировать весь список переменных по уровню их связи с целевой функцией, что и нашло свое отражение в табл. 9.3.

Таблица 9.3

Результаты селекции информативного набора переменных с использованием генетического алгоритма

Уровень информативности	Таксономические группы зообентоса
Наилучшие биоиндикаторы	<i>Ephemeroptera</i>
Хорошие биоиндикаторы	<i>Oligochaeta</i> , <i>Chironomidae</i> (подсемейство <i>Orthoclaadiinae</i> и триба <i>Tanytarsini</i>)
Информативные группы	<i>Amphipoda</i> , <i>Bivalvia</i> , <i>Chaoboridae</i> , <i>Ceratopogonidae</i> , <i>Coleoptera</i> , <i>Dermaptera</i> , <i>Dreissenidae</i> , <i>Gastropoda</i> , <i>Hidracarina</i> , <i>Limoniidae</i> , <i>Megaloptera</i> , <i>Nematoda</i> , <i>Odonata</i> , <i>Plecoptera</i> , <i>Polychaeta</i> , <i>Psychodidae</i> , <i>Ptychopteridae</i> , <i>Simuliidae</i> , <i>Tabanidae</i> , <i>Trichoptera</i> , <i>Chironomidae</i> (подсемейства <i>Diamesinae</i> , <i>Prodiamesinae</i> , <i>Tanypodinae</i> и триба <i>Chironomini</i>)
Группы, незначимые для прогноза качества воды	<i>Arachnoidae</i> , <i>Collembola</i> , <i>Crustacea</i> , <i>Culicidae</i> , <i>Cylindrotomidae</i> , <i>Diptera</i> , <i>Dolichopodidae</i> , <i>Diplura</i> , <i>Dixidae</i> , <i>Ephydridae</i> , <i>Hemiptera</i> , <i>Hirudinea</i> , <i>Homoptera</i> , <i>Hydrida</i> , <i>Muscidae</i> , <i>Nematocera</i> , <i>Rhagionidae</i> , <i>Stratiomyidae</i> , <i>Tipulidae</i> , <i>Unionidae</i>

9.3. Многорядный алгоритм МГУА для оценки качества вод

Формулировка задачи

Предположим, что имеется набор исходных данных в виде матрицы X из n наблюдений в пространстве варьируемых переменных размерностью $m > 1$, характерный для стандартной задачи множественной регрессии. Пусть сформирована обучающая последовательность примеров, в которой каждой строке матрицы X поставлено в соответствие известное значение отклика Y , измеренное в количественной шкале.

Необходимо, используя методы самоорганизации, получить модель, выражающую закон изменения отклика Y в зависимости от конкретных значений независимых переменных X .

Рекомендуемая литература: [Ивахненко, 1969, 1982; Ивахненко, Лапа, 1971; Ивахненко с соавт., 1976; Брусиловский, 1987; Ивахненко, Юрачковский, 1987; Розенберг с соавт., 1994].

Математический лист

Ранее, в разделе 2.8 были рассмотрены основные принципы самоорганизации моделей, лежащие в основе такого направления в математическом анализе данных как метод группового учёта аргументов – МГУА (*Group Method of Data Handling, GMDH*). Модели самоорганизации МГУА можно рассматривать как своеобразное связующее звено, объединяющее различные методологические концепции, представленные, в том числе, и разделами настоящей книги.

С одной стороны, МГУА считается, своего рода, интеллектуальным обобщением регрессионного анализа, понимаемого в наиболее широком смысле. От классической множественной регрессии МГУА отличается лишь использованием специфических квадратичных критериев внешнего или внутреннего типа, а также многорядными итерационными процедурами нахождения оптимального решения задачи.

С точки зрения организации вычислений метод группового учета аргументов можно представить как следующий итеративный цикл:

- задается некоторое множество \mathfrak{R} достаточно простых функций от исходных аргументов, которые называются *предикторами* или *частными структурами* модели, и формируется первый слой модели;
- из частных структур текущего слоя генерируется по определенным правилам новый слой предикторов, которые теперь сами становятся последним слоем;
- из частных описаний последнего слоя отбираются L лучших, где L – ширина отбора (*селекции*);
- если не выполняется условие прекращения селекции (например, продолжает возрастать критерий качества модели), осуществляется генерация нового слоя;
- самый лучший набор частных структур последнего слоя объявляется искомым оптимальным решением задачи.

В этом описании налицо все признаки эволюционного алгоритма – отбор (селекция) и генерация нового поколения.

Наконец, форма многорядного представления моделей МГУА, где в каждом слое локализуются достаточно простые функции (полиномы не более 2 порядка от двух переменных), но общая целостная модель представляет чрезвычайно сложную конструкцию, содержит много общего с описываемыми далее моделями искусственных нейронных сетей.

В рекомендованной литературе представлены различные схемы процесса самоорганизации при синтезе моделей МГУА: комбинаторные, многорядные, гибридизации, основанные на конечных стохастических автоматах и т.д.

Остановимся на общей схеме *многорядного алгоритма МГУА*, которая воспроизводит схему массовой селекции, аналогичную задаче нахождения оптимальной структуры перцептрона. В многорядной полиномиальной модели "полное" описание (т.е. регрессионная модель от m факторов)

$$y = F(x_1, x_2, \dots, x_m) \quad (9.4)$$

заменяется последовательностью рядов "частных" описаний:

- первый ряд селекции – $y_1 = f(x_1, x_2), y_2 = f(x_1, x_3), \dots, y_s = f(x_{m-1}, x_m)$, где $s = C_m^2$;
- второй ряд селекции – $z_1 = f(y_1, y_2), z_2 = f(y_1, y_3), \dots, z_p = f(y_{s-1}, y_s)$, где $p = C_s^2$ и т.д.

Общая результирующая сложность модели (9.4) зависит, таким образом, от двух факторов – вида частного описания f и количества рядов селекции.

Каждое частное описание является функцией только двух переменных. Поэтому коэффициенты такого регрессионного уравнения могут быть легко определены даже по небольшому числу наблюдений обучающей последовательности методом наименьших квадратов. Различные модифи-

кации многорядного алгоритма отличаются друг от друга по виду опорной функции f . В алгоритме с линейными полиномами используются частные описания вида

$$Y_k = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_j, \quad 0 < i < m, \quad 0 < j < m. \quad (9.5)$$

Усложнение модели в этом случае происходит только за счет увеличения числа учитываемых аргументов: на первом ряду селекции синтезируются модели, содержащие по 2 аргумента, на втором - по 3 или 4, на третьем - до 8 аргументов и т.д.

Многорядные алгоритмы при использовании нелинейных опорных функций, например:

$$\begin{aligned} Y_k &= a_0 + a_1 x_i + a_2 x_j + a_3 x_i x_j; \\ Y_k &= a_0 + a_1 x_i + a_2 x_j + a_3 x_i x_j + a_4 x_i^2 + a_5 x_j^2; \end{aligned} \quad (9.6)$$

позволяют получить модели практически любой сложности, так как на каждом ряду селекции степень полинома удваивается. При этом число коэффициентов модели может исчисляться уже миллионами, хотя минимум критерия селекции обычно достигается достаточно быстро.

Чтобы обеспечить несмещенность получаемого решения, исходную выборку предварительно разделяют случайным образом на две статистически однородные части: *обучающую* и *проверочную (контрольную) последовательности*. Для этого все имеющиеся экспериментальные точки ранжируются, т.е. располагаются в ряд по величине дисперсии

$$D^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n [(y_i - \bar{y}) / \bar{y}]^2, \quad (9.7)$$

где \bar{y} – среднее значение отклика, и делятся на две части. Точки с четными номерами образуют первую последовательность, а точки с нечетными номерами – вторую последовательность.

Обучающая последовательность используется для нахождения обычным методом наименьших квадратов коэффициентов $a_0 - a_5$ частных описаний (9.5)-(9.6), связывающих отклик Y с любыми двумя аргументами – исходными признаками, либо выходными переменными частных описаний предыдущего ряда. Проверочная последовательность, которая в этих расчетах участия не принимает, служит в качестве модельно-независимого порогового фильтра селекции, играющего роль внешнего дополнения к обучающей выборке.

Из одного ряда селекции в другой на каждом шаге самоорганизации пропускаются не все частные описания, полученные путем полного перебора пар факторов (s, p и т.д.), а только небольшая их часть, например, m уравнений, которые являются "наилучшими" в смысле заданного критерия регулярности, определяемого по частным описаниям на проверочной последовательности. В качестве конкретных математических выражений, используемых для регуляризации, обычно используют одну из следующих статистик:

- абсолютной среднеквадратичной ошибки $\delta^2 = \frac{1}{n_{np}} \sum_{i=1}^{n_{np}} (y_i - y_i^*)^2 \quad (9.8)$

- относительной среднеквадратической ошибки $\Delta^2 = \frac{n_{np} \delta^2}{\sum_{i=1}^{n_{np}} y_i^2} \quad (9.9)$

- коэффициента корреляции выходной переменной Y с аргументом x_k

$$K_{yxk} = \frac{\sum_{i=1}^{n_{np}} y_i x_{ik}}{\sqrt{\sum_i y_i^2 \sum_i x_{ik}^2}}, \quad (9.10)$$

где n_{np} – количество точек проверочной выборки, Y и Y^* – фактическое и расчетные значения прогнозируемой переменной.

Поскольку при использовании нелинейных опорных функций отмечается опасность потери существенного аргумента, то предпочтительнее использовать алгоритмы, оптимизирующие на каждом шагу длину частного описания (например, выбирающие вид частного описания с максимумом

- работа в случае, если число измеренных признаков превышает число объектов, и число объектов достаточно мало;
- работа при наличии пропусков в таблице.

Как отмечалось в разделе 2.8, большинству перечисленных требований удовлетворяет подход, основанный на применении искусственных нейронных сетей (ИНС).

Рекомендуемая литература: [Горбань, 1990, 1998а,б; Уоссермен, 1992; Горбань, Россиев, 1996; Васильев с соавт., 1997; Царегородцев, Погребная, 1998; Дьяконов, Круглов, 2001; Нейронные сети..., 2001].

Математический лист

Структура искусственного нейрона

Многие современные НС сконструированы из *формальных нейронов*, отдалённо напоминающих свой биологический прототип. Структура нейрона имеет вид, представленный на рис. 9.2, при следующих обозначениях:

- x_1, \dots, x_n – значения, поступающие на входы (синапсы) нейрона;
- w_1, \dots, w_n – *веса* синапсов, которые могут быть как тормозящими, так и усиливающими;
- S – взвешенная сумма входных сигналов:

$$S = \sum_{i=1}^n w_i x_i - T ; \quad (9.11)$$

- T – *порог* нейрона (во многих моделях обходятся без него);
- F – функция *активации* нейрона, преобразующая взвешенную сумму в выходной сигнал

$$y = F(S) . \quad (9.12)$$

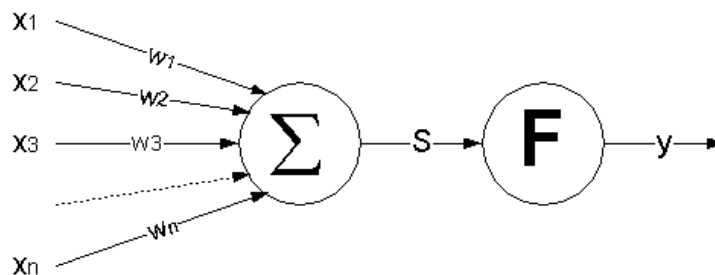


Рис. 9.2 Структура искусственного нейрона

Вид функции активации может иметь различное математическое выражение, выбор которого определяется характером решаемых задач. Например, функция активации может быть:

- *линейная*

$$y = k \cdot S ; \quad (9.13)$$

- *пороговая бинарная*

$$y = \text{sign}(S) = \begin{cases} 1, S > 0; \\ 0, S \leq 0. \end{cases} \quad \text{или биполярная} \quad y = \begin{cases} 1, S > 0; \\ -1, S \leq 0. \end{cases} ; \quad (9.14)$$

- *линейная ограниченная*

$$y = \begin{cases} p, S > \alpha; \\ -p, S < -\alpha; \\ S, -\alpha \leq S \leq \alpha. \end{cases} ; \quad (9.15)$$

- *сигмоидная*

$$y = \frac{1}{1 + e^{-cS}}, \quad (9.16)$$

где $C > 0$ – коэффициент ширины сигмоиды по оси абсцисс;

- функция *гиперболического тангенса*

$$y = th(cS) = \frac{e^{cS} - e^{-cS}}{e^{cS} + e^{-cS}}; \quad (9.17)$$

- *логарифмическая*

$$y = \ln(S + \sqrt{S^2 + 1}) \quad (9.18)$$

(данная функция характерна тем, что имеет диапазон $[-\infty; +\infty]$ с точкой перегиба в начале координат, усиливает очень слабые сигналы и ослабляет очень сильные);

- *радиально-базисная*, имеющая вид функции Гаусса

$$y = e^{-\frac{S^2}{2\sigma^2}}, \quad (9.19)$$

где σ – среднее квадратичное отклонение нормального распределения, характеризующее ширину функции, S в этом случае определяется как расстояние между входным и весовым вектором: $S^2 = \sum_i (x_i - w_i)^2$.

Вид некоторых функций активации представлен на рис. 9.3.

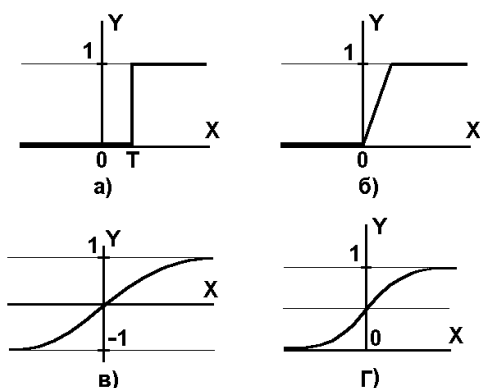


Рис. 9.3 Вид функций активации:
 а) функция единичного скачка;
 б) линейный порог (гистерезис);
 в) гиперболический тангенс;
 г) сигмоид

Одной из наиболее распространенных функций активации является нелинейная функция с насыщением – так называемая логистическая функция или сигмоид (9.16). При уменьшении коэффициента C сигмоид становится более пологим, вырождаясь в пределе при $C = 0$ в горизонтальную линию на уровне 0.5. При увеличении C сигмоид приближается по внешнему виду к функции единичного скачка с порогом T в точке $x = 0$.

Из выражения для сигмоиды очевидно, что выходное значение нейрона лежит в диапазоне $[0, 1]$.

Популярность сигмоидной функции определяют следующие ее ценные свойства:

- способность усиливать слабые сигналы лучше, чем большие, и сопротивляться "насыщению" от мощных воздействий;
- монотонность и дифференцируемость на всей оси абсцисс;
- простое выражение для ее производной:

$$f'(x) = C \cdot f(x) \cdot (1 - f(x)), \quad (9.20)$$

что дает возможность использовать широкий спектр оптимизационных алгоритмов.

Следует также отметить существование других типов формальных нейронов (сигма-пи нейроны и стохастические нейроны, нейроны с поправочным блоком), учитывающих другие свойства биологического прототипа. Наиболее интересны голографические нейроны, используемые в голографической парадигме ИНС.

Структура многослойного перцептрона

Теоретическое обоснование нейросетевого моделирования базируется на теореме А.Н.Колмогорова, доказавшего, что любую непрерывную многомерную функцию на единичном отрезке $[0; 1]$ можно представить в виде конечного числа одномерных [Головки, 1999]:

$$f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{p=1}^{2n+1} g\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i \Phi_p(x_i)\right), \quad (9.21)$$

где g и Φ_p непрерывные и одномерные функции, $\lambda_i = \text{const}$. Отсюда с помощью любой многослойной ИНС всего с двумя перерабатывающими слоями можно с любой точностью аппроксимировать любую многомерную функцию на единичном отрезке.

На сегодняшний день существует много разновидностей нейронных сетей, характерных для различных типов задач, которые можно классифицировать по следующим признакам:

- тип входной информации (аналоговые или двоичные данные);
- характер обучения (с учителем и без);
- характер настройки синапсов (фиксированные или динамические связи);
- метод обучения (обратное распространение, конкурентная настройка, использование правила Хебба, гибридные сети и т.д.);
- характер связей (прямое и прямое-обратное распространение информации);
- архитектура (персептроны, самоорганизующиеся ИНС Кохонена, сети адаптивного резонанса, рециркуляционные, рекуррентные, встречного распространения, ИНС с обратными связями Хэмминга и Хопфилда, с двунаправленной ассоциативной памятью, с радиально-базисной функцией активации и т.п.).



КОЛМОГОРОВ Андрей Николаевич
(1903-1987)
выдающийся отечественный математик

Рассмотрим возможности обучения ИНС на примере многослойного персептрона с прямым распространением информации. Характер связей сети для нашего случая будет выглядеть, как показано на рис 9.4:

Нейроны регулярным образом организованы в слои, причем элементы некоторого слоя связаны только с нейронами предыдущего слоя, и информация распространяется от предыдущих слоёв к последующим.

Входной слой, состоящий из чувствительных (сенсорных) S -элементов, на который поступают входные сигналы X_i , никакой обработки информации не совершает и выполняет лишь распределительные функции. Каждый S -элемент связан с совокупностью ассоциативных элементов (A -элементов) первого промежуточного слоя, а A -элементы последнего слоя соединены с реагирующими элементами (R -элементами).

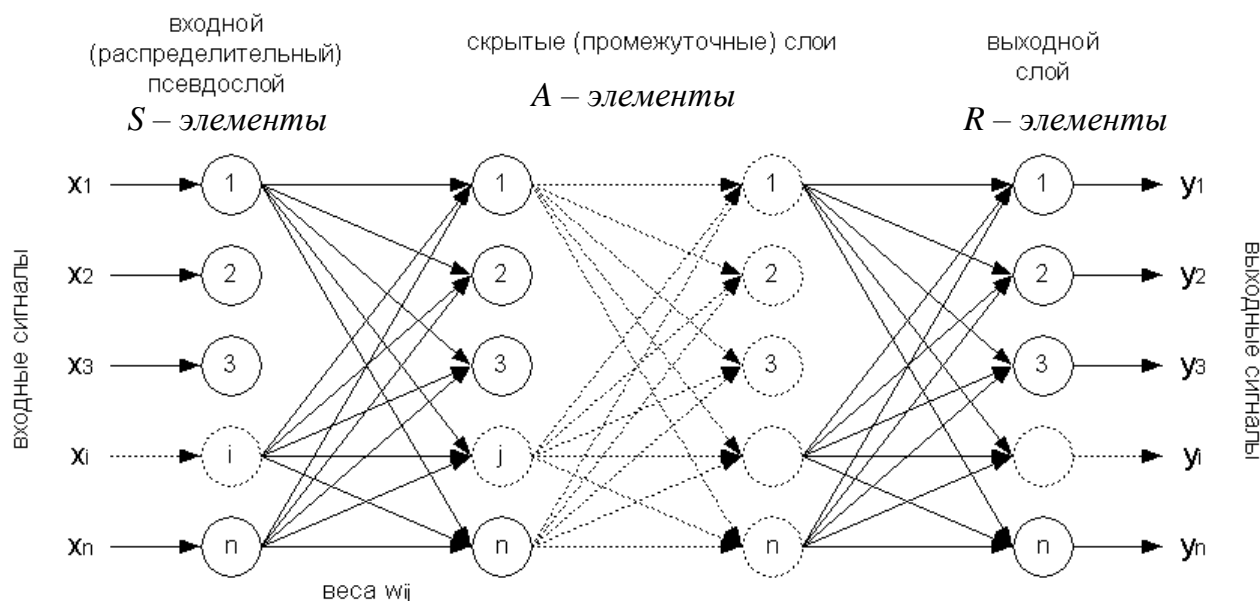


Рис. 9.4. Структура многослойного перцептрона

Взвешенные комбинации выходов R -элементов составляют реакцию системы, которая указывает на принадлежность распознаваемого объекта определенному образу. Если распознаются только два образа, то в перцептроне устанавливается один R -элемент, который обладает двумя реакциями – положительной и отрицательной. Если образов больше двух, то для каждого образа устанавливают свой R -элемент, а выход каждого такого элемента представляет линейную комбинацию выходов A -элементов.

Выбор количества слоёв и типа активационной функции влияет на способность сети решать те или иные задачи. *Однослойная сеть* способна формировать линейные разделяющие поверхности и легко сводится к рассмотренному нами в разделе 8.5 методу обобщенного портрета. Линейная модель является хорошей точкой отсчета для сравнения эффективности различных *многослойных сетей* с нелинейными функциями активации, позволяющими, как показано выше, аппроксимировать любые выпуклые многомерные функциональные зависимости.

Уточним механизм моделирования разделяющих поверхностей многослойным перцептроном. Уровень активации каждого нейрона представляет собой простую линейную функцию X -ов, т.е. берется взвешенная сумма подающихся на вход сигналов с добавлением к ней порогового значения. Эта активация затем преобразуется с помощью заданной функции $y = F(S)$. Если в качестве функции активации использовать сигмоидную кривую, имеющую S -образную форму, то комбинация линейной функции нескольких переменных и скалярной логистической функции

$$y = \frac{1}{1 + e^{-cS}}$$
 приводит к характерному профилю "сигмоидного склона", который выдает элемент первого промежуточного слоя.

На приведенном рис. 9.5а соответствующая поверхность изображена в виде функции двух входных переменных. При изменении весов $w_1 \dots w_n$ и порогов T может меняться как ориентация всей поверхности отклика, так и крутизна склона (большим значениям весов соответствует более крутой склон). Элемент с большим числом входов выдает многомерный аналог представленной поверхности.

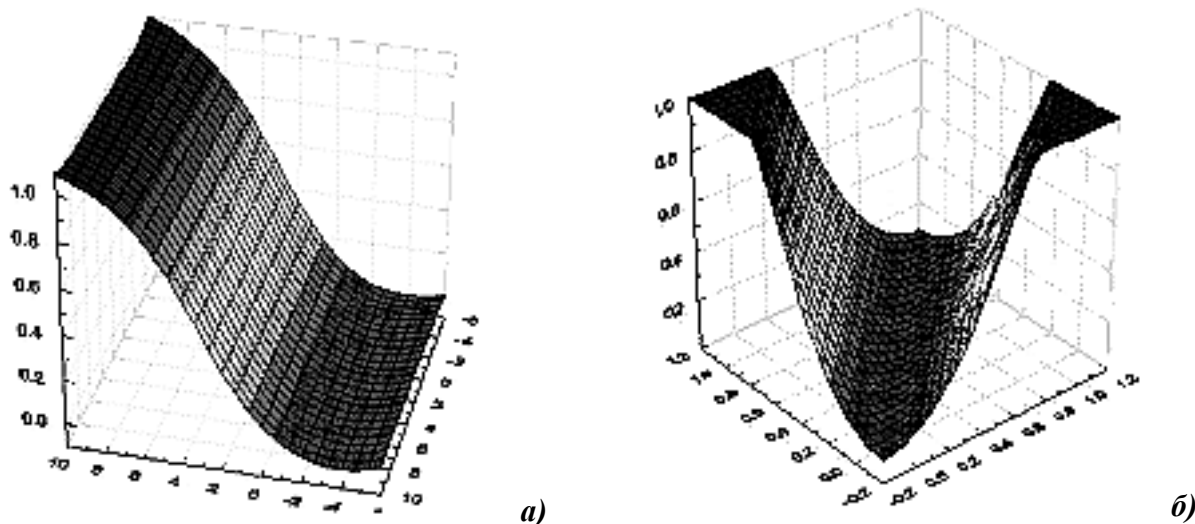


Рис. 9.5. Вид простейшей разделяющей поверхности сигмоидного типа для одного нейрона (фиг. а) и персептрона с одним промежуточным слоем (фиг. б)

В многослойной сети подобные функции отклика комбинируются друг с другом с помощью последовательного взятия их линейных комбинаций и применения нелинейных функций активации. На рисунке 9.5б изображена типичная поверхность отклика для сети с одним промежуточным слоем, состоящим из двух элементов, и одним выходным элементом. Две разных сигмоидных поверхности объединены в одну поверхность, имеющую форму буквы «U».

Обучение многослойного персептрона

После того, как определено число слоев и число элементов в каждом из них, нужно найти значения весовых коэффициентов w_1, \dots, w_n и порогов для каждого составляющего нейрона, которые бы минимизировали ошибку прогноза, выдаваемого сетью. Для того, чтобы оценить, насколько верное решение сделала ИНС, определяется среднеквадратичная ошибка сети как разница между эталонным и выходным вектором:

$$E = \frac{1}{n} \sum_j (y_j - y_j^*)^2, \quad (9.22)$$

где Y^*_j – известное выходное значение для примеров обучающей выборки. Процесс обучения сети заключается в многократной подгонке коэффициентов w_1, \dots, w_n к имеющимся выборочным данным с использованием различных алгоритмов нелинейной оптимизации.

Здесь оказывается очень полезным понятие поверхности ошибок. Каждому из N свободных параметров модели (весов и порогов) соответствует одно измерение в многомерном пространстве. Пусть $(N+1)$ -е измерение соответствует ошибке сети E . Для всевозможных сочетаний значений весов соответствующие им значения ошибок представляют собой множество точек, образующих поверхность ошибок. Тогда цель обучения нейронной сети состоит в том, чтобы найти на этой многомерной поверхности самую низкую точку. В случае линейной модели с суммой квадратов в качестве функции ошибок поверхность ошибок представляет собой параболоид – гладкую поверхность, похожую на часть поверхности сферы, с единственным минимумом, который достаточно легко локализовать. В случае нейронной сети поверхность ошибок имеет гораздо более сложное строение и имеет локальные минимумы, плоские участки, седловые точки и длинные узкие овраги (см. рис. 9.6).

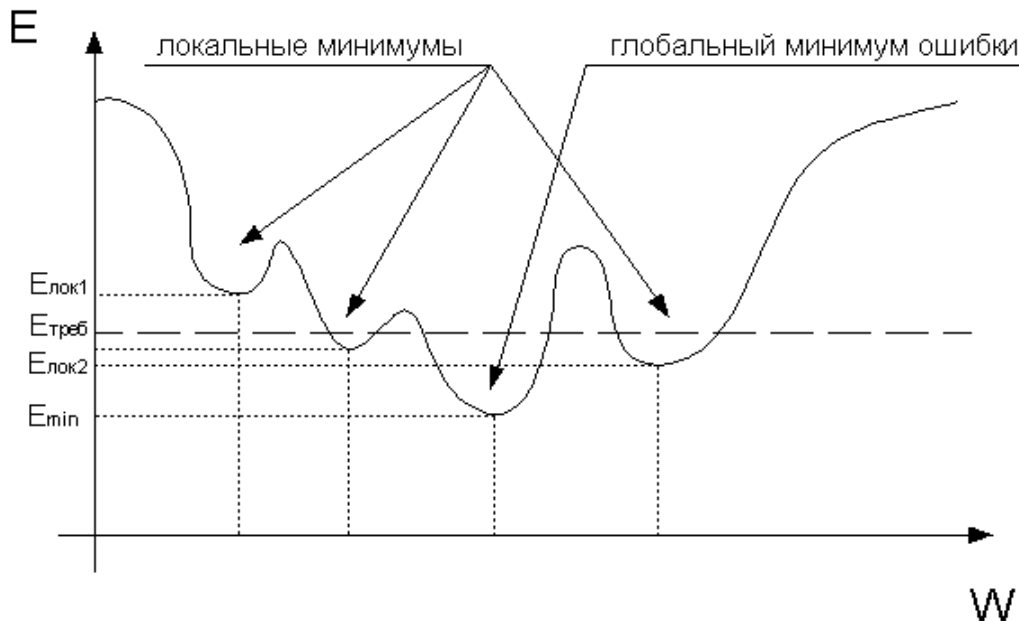


Рис. 9.6. Интерпретация поверхности ошибок нейронной сети

Аналитическими средствами найти в таких условиях глобальный минимум невозможно, поэтому процесс обучения ИНС, по сути дела, заключается в исследовании этой поверхности. Отталкиваясь от случайной начальной конфигурации весов и порогов, *алгоритм оптимизации* начинает передвижение к минимуму, используя на каждом шаге вектор градиента (т.е. направления кратчайшего спуска). Можно сказать, что процесс ведет себя как слепой кенгуру – каждый раз прыгает в направлении, которое ему кажется наиболее привлекательным. В общем случае результат обучения ИНС может соответствовать субоптимальному решению, т.е. не глобальному оптимуму, а решению, которое нас устроит. В самом деле, если $E_{лок2} < E_{требуемое}$, то такое решение вполне приемлемо. Другое дело, когда веса попадают в область локального минимума (такого как $E_{лок1}$) и при этом $E_{лок} > E_{требуемое}$, а величины шага обучения не хватает чтобы выйти оттуда.

Самый известный алгоритм обучения сети – так называемый, *алгоритм обратного распространения* (back propagation) [Нейронные сети..., 2001]. В основу метода легли прямой ход вычисления выходных значений, вычисление ошибки последнего слоя и рекурсивное обратное распространение.

Для выходного слоя определение ошибки δ_j нейрона j тривиально:

$$\delta_j = (y_j - y_j^*) F'(S_j)$$

и напоминает систему поощрений-наказаний, используемую при обучении однослойных сетей. Для каждого предыдущего слоя ошибка определяется рекурсивно через ошибку следующего слоя:

$$\delta_j = \left(\sum_{i=1}^m \delta_i w_{ij} \right) \cdot F'(S_j),$$

т.е. для каждого j -го нейрона ошибки следующего слоя как бы распространяются к нему обратно сквозь соответствующие веса. Этот механизм обратного распространения дополнен традиционными для многих градиентных методов оптимизации процедурами оценки вектора кратчайшего спуска, изменения величины шага пропорционально крутизне склона и проч. Существуют также современные алгоритмы обучения сетей второго порядка, такие как *метод сопряженных градиентов* и *метод Левенберга-Маркара*, которые во многих задачах работают на порядок быстрее [Bishop, 1995].

Переобучение и обобщение

Основная задача моделирования состоит в подборе сети, адекватно прогнозирующей совершенно новые наблюдения. С. Бишоп [Bishop, 1995] пишет: «Минимизация ошибок на обучающем множестве, которое не бывает ни идеальным, ни бесконечно большим, - это совсем не то же самое, что минимизация «настоящей» ошибки заранее неизвестной модели явления». Сеть с небольшим количеством весов может оказаться недостаточно гибкой, чтобы смоделировать имеющуюся зависимость. Однако, слишком большое количество нейронов и слоев позволяет моделировать очень сложные функции, но это часто приводит к переобучению сети, когда модель будет давать совершенно правильные ответы, но только на тех примерах, которым её обучили.

Выбор нейросети «правильной» сложности сводится к двум рецептам: использование контрольных выборок и экспериментирование. Механизм контрольной кросс-проверки заключается в том, что некоторая часть обучающих наблюдений резервируется, т.е. подгонка коэффициентов модели и поиск минимума ошибки сети по ним не осуществляется. Эти измерения, как и в алгоритмах МГУА, используются только для независимого контроля результата и называются контрольной выборкой. Если разбиение на обучающее и контрольное множества было выполнено однородно, то, по мере того как сеть обучается, ошибка обучения и ошибка на контрольном множестве будут одновременно уменьшаться. Если же контрольная ошибка перестала убывать или даже стала расти, это указывает на то, что сеть стала чересчур точно аппроксимировать данные и наступает фаза переобучения. В этом случае следует уменьшить число A -элементов или слоев сети.

Описанные проблемы с локальными минимумами и выбором размера сети приводят к тому, что в практической работе с ИНС приходится экспериментировать с большим числом различных вариантов конфигурации.

Понижение размерности входных переменных

Цель задачи заключается в таком преобразовании входных данных, чтобы та же информация была бы записана с помощью меньшего числа переменных. Мы уже обсуждали эту проблему, когда знакомились с методом главных компонент (см. раздел 7.5). Следует подчеркнуть, что один из основных недостатков традиционного факторного анализа состоит в том, что это преобразование является линейным и может улавливать только линейные направления максимальной вариации. Поэтому рассмотрим другой подход к решению этой проблемы: *нелинейный вариант метода главных компонент*, основанный на применении автоассоциативных сетей.

Автоассоциативная сеть – это сеть, предназначенная для воспроизведения на выходе своих же сигналов. У такой сети число выходов совпадает с числом входов, а все нейроны имеют особое свойство. Если число элементов промежуточного слоя сделать меньше числа входов/выходов, то это заставляет сеть "сжимать" информацию, представляя ее в меньшей размерности. Трехслойная автоассоциативная сеть сначала линейно преобразует входные данные в меньшую размерность промежуточного слоя, а затем снова линейно разворачивает их в выходном слое. Можно показать, что такая сеть на самом деле реализует стандартный алгоритм анализа главных компонент. Для того, чтобы выполнить нелинейное понижение размерности, нужно использовать пятислойную сеть (см. рис. 9.7). Ее средний слой служит для уменьшения размерности, а соседние с ним слои, отделяющие его от входного и выходного слоев, выполняют нелинейные преобразования.

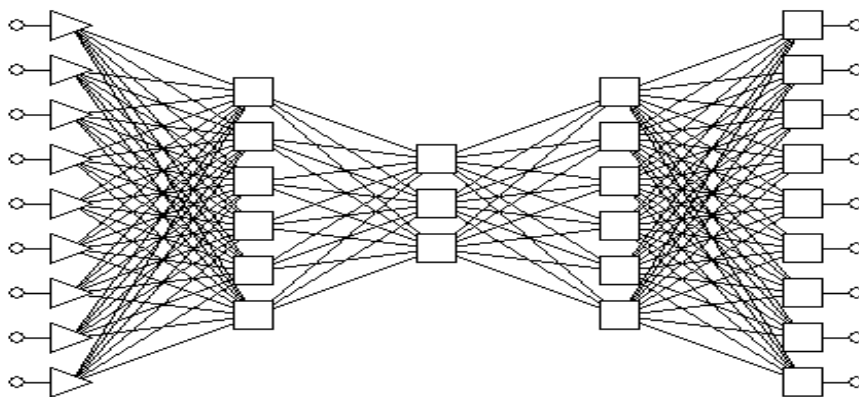


Рис. 9.7. Автоассоциативная сеть для понижения размерности признакового пространства с девяти до трех

Если из автоассоциативной сети удалить два последних слоя, то получается сеть для преобразования, с помощью которой генерируется версия входных данных в уменьшенной размерности.

Результаты расчетов

Прогнозирование альтернативной переменной

Построим нейронную сеть для классификации двух категорий качества вод "Чисто" / "Грязно" на базе многослойного персептрона с использованием обучающей выборки из 520 примеров, описанной в разделах 8.2, 8.3 и 9.2. Входами сети являются значения обилия 27 таксономических групп зообентоса, отобранных в результате генетического алгоритма (см. раздел 9.2), а также количество видов в пробе. По условиям работы всех алгоритмов построения сетей данные подвергаются *препроцессингу* – предварительному масштабированию исходных значений входов в единую шкалу: в нашем случае используем известную формулу минимакса, в результате чего каждый преобразованный признак варьируется на интервале $[0,1]$.

Примем стандартную модель персептрона с 28 входами, одним выходом и одним промежуточным слоем, состоящем из 14 A -нейронов, т.е. полусумме числа входных и выходных элементов (см. рис. 9.8). Выполним обучение сети в трех вариантах:

- с использованием линейной функции активации;
- с использованием логистической функции активации и оценкой качества сети по среднеквадратичной ошибке;
- с использованием логистической функции активации и оценкой качества сети по информационному критерию (энтропии).

Для каждого из вариантов обучение проведем в двух режимах: без использования контрольного множества и с применением кросс-проверки на контрольном множестве. В первом случае сеть обучается на всех 520 примерах, а во втором случае 120 примеров выделяются в качестве внешнего дополнения и используются для независимого контроля качества сети.

Построенная сеть в нашем случае для каждого произвольного вектора X выдает на выходе некоторое значение апостериорной вероятности на интервале от 0 до 1. Для конкретной классификации примеров используются два задаваемых доверительных уровня: *порог принятия* (т.е. минимальное значение выхода, при котором наблюдение будет считаться принадлежащим классу 1) и *порог отвержения* (т.е. максимальное значение выхода, относящее измерение к классу 0). В нашем примере мы задали эти пороги равными 0.55 и 0.45 соответственно. Все вектора, предъявленные сети и имеющие отклик внутри диапазона доверительных уровней, классифицируются как неопределенные.

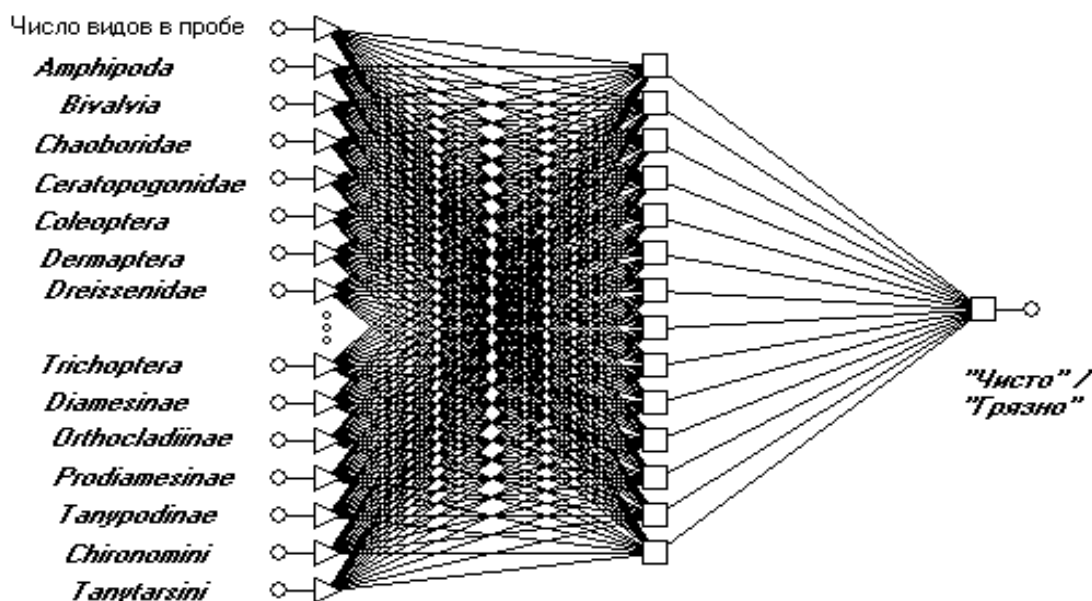


Рис. 9.8. Схема многослойного персептрона для оценки категории качества воды по обилию групп зообентоса

Результаты моделирования по традиции для всех задач классификации оценим как долю ошибочных опознаний на обеих выборках (см. табл. 9.5, где приведены данные только для режима с кросс-проверкой).

Таблица 9.5
Результаты использования модели персептрона с одним промежуточным слоем для оценки категории качества воды

Вид функции активации нейронов	Оценка качества сети	Результат прогноза	Обучающая выборка			Контрольное множество		
			Класс "Чисто"	Класс "Грязно"	Правильный прогноз, %	Класс "Чисто"	Класс "Грязно"	Правильный прогноз, %
Линейная функция	Среднеквадратическая ошибка	"Чисто"	136	5	94.4	28	7	75.6
		"Грязно"	7	271	98.1	7	53	84.1
		Отказ	1	0		2	3	
		Итого	144	276	96.9	37	63	81.0
Логистическая (сигмоидная) функция	Среднеквадратическая ошибка	"Чисто"	140	0	97.2	33	7	89.2
		"Грязно"	3	276	100	3	55	87.3
		Отказ	1	0		1	1	
		Итого	144	276	99.0	37	63	88.0
Логистическая (сигмоидная) функция	Простая энтропия	"Чисто"	141	0	97.9	34	4	91.9
		"Грязно"	2	276	100	2	58	92.1
		Отказ	1	0		1	1	
		Итого	144	276	99.3	37	63	92.0

На основе выполненных расчетов можно сделать следующие очевидные выводы:

- использование методов нейросетевого моделирования для этого примера дало весьма ощутимый выигрыш по сравнению с логистической регрессией (раздел 9.2) и линейным дискриминантным анализом (раздел 9.3);
- вариант построения нелинейной разделяющей поверхности с использованием сигмоидной функции активации более эффективен по сравнению с вариантом линейных разделяющих гиперплоскостей;
- использование энтропии в качестве функции ошибок сети с альтернативным параметром выхода имеет некоторые преимущества по сравнению со стандартным среднеквадратичным отклонением, которое теоретически больше подходит для задач регрессии;
- кросс-проверка на контрольном множестве, включенная при обучении, в двух случаях из трех привела к уменьшению ошибки на самом обучающем множестве и дала возможность провести независимую оценку качества на внешнем дополнении;
- ошибка на контрольной выборке оказалась несколько выше, чем при обучении, однако, в нашем случае этот факт вряд ли можно объяснить феноменом переобучения.

Нейронную сеть вследствие ее принципиальной многомерности обычно интерпретируют как "черный ящик", поскольку визуальный или статистический анализ коэффициентов усиления и порогов, как это делается, например, в множественной регрессии, для всех структурных связей графа представляет собой весьма утомительную процедуру, не гарантирующую достоверных выводов. Тем не менее, при желании, можно заглянуть "внутрь" этого ящика и попытаться выяснить роль каждого скрытого элемента, создаваемый ими потенциал активации и прочие нейронные характеристики (в рамках нашего изложения мы этого желания не испытали).

Сети для множественной классификации

Построим нейронную сеть для непосредственной оценки значения класса качества водоемов в виде числа от 1 до 6. Сформируем выборку из тех же 520 измерений, но в качестве девяти варьируемых переменных будем использовать различные обобщенные гидробиологические показатели и традиционные "интегральные" индексы зообентоса.

Архитектура выбранного персептрона с одним промежуточным слоем представлена на рис. 9.9. Сеть имеет 5 выходов, соответствующих каждому из присутствующих в обучающей выборке классов качества воды. При правильном распознавании на одном из выходных элементов появляется высокое значение активации при незначительной ее величине на остальных четырех.

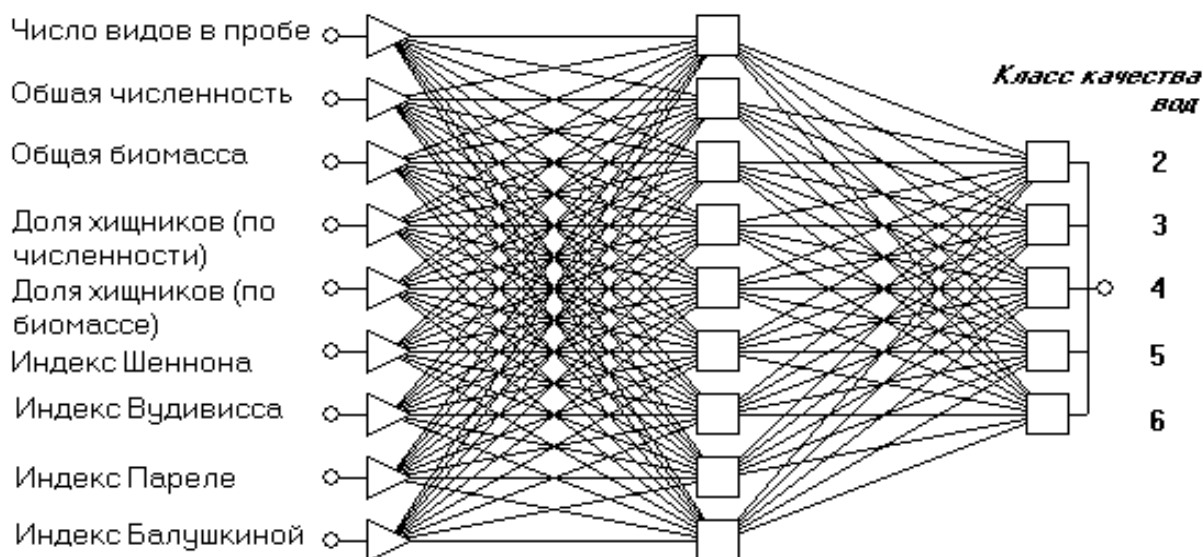


Рис. 9.9. Нейронная сеть для прогнозирования пяти классов качества воды

Нами использовалась в выходном слое специальная функция активации (Softmax), представляющая собой взвешенную и нормированную на единицу сумму экспонент. Можно показать, что если входные данные представляют собой выборку из какого-либо экспоненциального распределения, то выходы софтмакс-элементов можно трактовать как вероятности (напомним, что самым известным примером экспоненциального распределения является нормальное). Например, если для измерения на ст. 1 р. Байтуган активации выходных нейронов сети оказались равными $\{0.314, 0.503, 0.142, 0.028, 0.018\}$, то с вероятностью 0.503 можно предположить, что это измерение было взято из водоема 3 класса качества, а с вероятностью 0.817 – из водоема 2-3 классов.

Хотя анализ весовых коэффициентов и активностей отдельных фрагментов сети представляется неблагоприятной деятельностью, методы нейросетевого моделирования позволяют оценить относительную значимость влияния отдельных исходных переменных на отклик, т.е. выполнить анализ чувствительности сети по ее входам. Этот анализ дает возможность идентифицировать неинформативные переменные с низкой чувствительностью, которые могут благополучно игнорироваться в последующих просчетах. Разумеется, подобные заключения должны приниматься со всей осторожностью, поскольку никакой анализ чувствительности не гарантирует абсолютную точность и надежность оценок "полноценности" переменных в модели. Например, в литературе приводится много примеров взаимного влияния и обусловленности исходных факторов, когда ни одна из переменных по отдельности не несет существенную информацию (классы будут выглядеть совершенно перемешанными), но, учитывая всю совокупность признаков, классы можно легко разделить.

Чувствительность каждой входной переменной измеряется в терминах ошибки сети: т.е. вычисляется прирост общей погрешности предсказания, если бы анализируемая переменная была бы исключена на входе. Более удобно для анализа отношение двух ошибок: ошибки сети без использования j -й переменной к аналогичной ошибке при ее наличии. Если это отношение равно или менее 1, то анализируемая переменная либо не участвует в работе нейросетевой модели вообще,

либо даже мешает ее работе, снижая общую эффективность. Иногда стоит удалять переменные даже с чувствительностью несколько более чем 1.0, и переквалифицировать сеть с целью достижения ее большей компактности и надежности. Значения прироста ошибки δ_j и отношения чувствительности η_j для переменных, использованных в рассматриваемом примере, представлены в табл. 9.6. Подробные выводы легко может сделать сам читатель; мы же выскажем только предположение, что странная "рокировка" ролей общей биомассы и индекса Шеннона при переходе от стадии обучения к контролю объясняется не только случайными причинами.

Таблица 9.6

Анализ чувствительности входных переменных модели многослойного персептрона для прогнозирования класса качества вод

Анализируемые входные переменные	Обучающая выборка			Контрольная выборка		
	Ранг	δ_j	η_j	Ранг	δ_j	η_j
Биотический индекс Вудивисса	1	0.377	1.095	1	0.381	1.078
Олигохетный индекс Пареле	2	0.355	1.030	2	0.369	1.045
Общая биомасса (ln), мг/м ³	3	0.351	1.018	7	0.354	1.003
Число видов в пробе	4	0.350	1.016	3	0.357	1.012
Хирономидный индекс Балушкиной	5	0.348	1.010	8	0.354	1.003
Общая численность (ln), экз/м ³	6	0.348	1.009	5	0.356	1.007
Доля хищников (по численности)	7	0.347	1.007	9	0.353	0.999
Доля хищников (по биомассе)	8	0.347	1.006	6	0.356	1.007
Индекс Шеннона	9	0.346	1.003	4	0.356	1.008

Результаты достоверности оценки классов качества представим в виде таблицы сопряженности "Факт/Прогноз" (табл. 9.7), где по главной диагонали проставлены частоты правильной оценки групп измерений, а в остальных клетках – имеющиеся ошибки прогноза отдельно для обучающей выборки и контрольной последовательности.

Несмотря на всю математическую мощь нейронных сетей, эффективность распознавания класса качества вод с использованием персептрона лишь незначительно превысила достоверность дискриминантного анализа (см. раздел 8.3) и уступила методу, основанному на видовых индикаторных индексах (раздел 8.4). Очевидно, что здесь был достигнут порог насыщения для уровня информативности "интегральных" показателей зообентоса, превысить который невозможно никакими интеллектуальными ухищрениями. Модель на данном наборе признаков сделала все, что могла и дальнейшие резервы повышения эффективности – в расширении признакового пространства с привлечением данных о видовой структуре. Это подтверждает и тот уникальный для методов распознавания факт, когда ошибка классификации на контрольной выборке оказалась меньше, чем на обучающей последовательности.

Таблица 9.7

Результаты прогнозирования класса качества вод по модели многослойного персептрона

Классы качества вод		Фактические					Итого прогноз	Правильный прогноз, %	Ошибка на два и более класса, %
		2	3	4	5	6			
Прогноз по обучающей выборке	2	18	10	3	0	0	31	58.06	9.67
	3	13	52	24	6	0	95	54.47	6.31
	4	11	25	77	15	17	145	53.10	19.31
	5	0	10	14	36	15	75	48.0	13.3
	6	1	2	6	6	9	24	37.5	37.5
Итого факт		43	99	124	63	41	370	51.89	13.5
Прогноз по контрольной выборке	2	7	3	2	0	0	12	58.33	16.6
	3	2	15	14	3	1	35	42.86	11.42
	4	1	8	40	6	7	62	64.52	12.9
	5	0	2	5	13	11	31	41.94	6.45

	6	0	1	2	2	5	10	50.00	30.0
Итого факт	10	29	63	24	24	150	53.33	12.66	

Задача о понижении размерности

Чтобы осуществить нелинейное понижение размерности исходной матрицы наблюдений для прогнозирования класса качества вод, используемой в предыдущем примере, выполним следующие действия:

- построим автоассоциативную сеть – персептрон с пятью слоями, как показано на рис. 9.7;
- обучим автоассоциативную сеть на имеющейся обучающей выборке 9x520 с использованием любого итеративного алгоритма (для определенности используем метод сопряженных градиентов);
- удалим два последних слоя автоассоциативной сети и получим сеть для пре-процессирования, понижающую размерность данных (см. рис. 9.10);
- с помощью пре-процессирующей сети получим версию входных данных в уменьшенной размерности: те же 520 строк исходной таблицы наблюдений с метками класса качества вод, но количество варьируемых признаков сведено от 9 к 3 без существенной потери информации;
- построим обрабатывающую сеть в виде второго трехслойного персептрона и обучим ее на модифицированном обучающем множестве, полученном на предыдущем шаге;
- объединив обе сети (см. рис. 9.10), получим единую сеть, которая последовательно пересчитывает исходные данные в пространство трех главных компонент, после чего обрабатывает уже преобразованные факторы, прогнозируя значение отклика.

В нашем конкретном случае достоверность распознавания по полученной двухуровневой сетевой модели несколько снизилась по сравнению с обычным персептроном, представленным на рис. 9.9. Однако общий смысл перехода в пространство небольшой размерности состоит не столько в том, чтобы повысить эффективность прогноза, сколько в попытке дать какое-то разумное объяснение имеющимся внутренним механизмам анализируемых явлений. Один из способов это сделать – проанализировать двух- или трехмерную визуализацию классифицируемых объектов в осях главных факторов (см. рис. 9.11). Изучив на полученной "картинке" сильно трангрессирующее облако точек, принадлежащих разным классам качества воды, мы, по крайней мере, поняли, какая трудновыполнимая задача была поставлена перед методами распознавания.

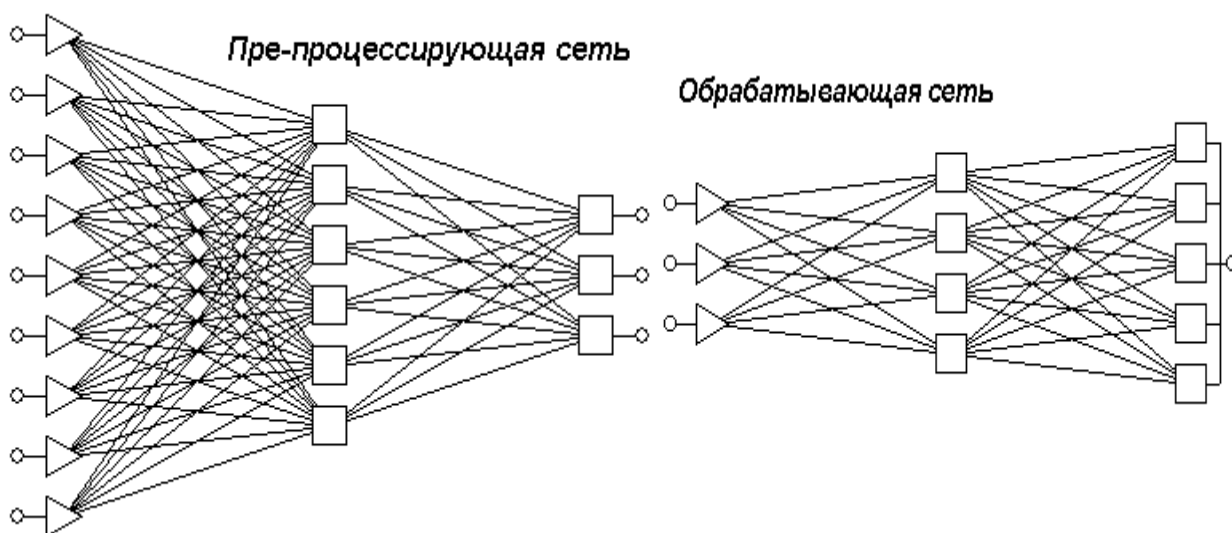


Рис. 9.10. Последовательность двух сетей для понижения размерности признакового пространства

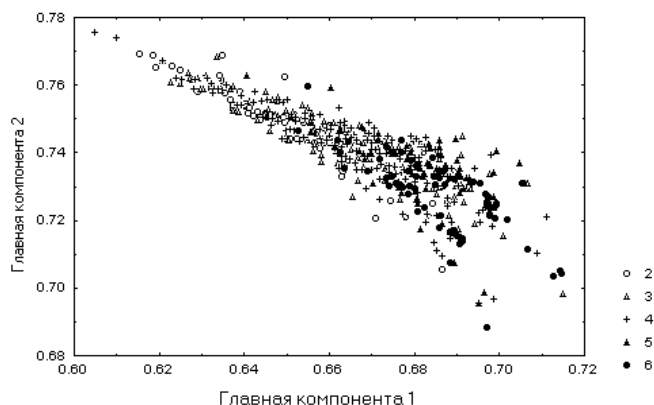
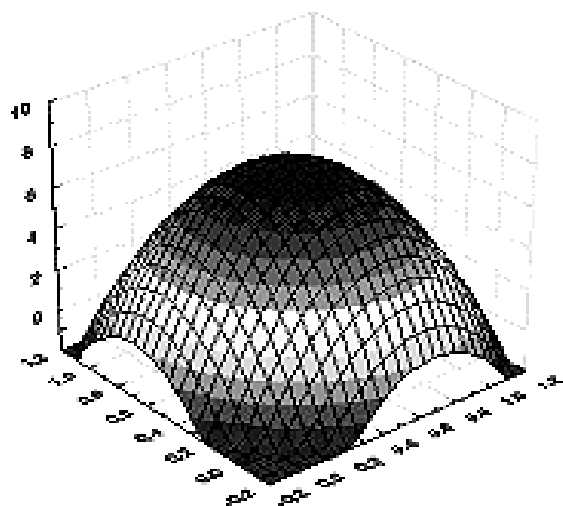


Рис. 9.11. Изображение в пространстве двух главных компонент облака точек, соответствующих различным классам качества воды

9.5. Решение задачи регрессии с помощью нейросетей различной архитектуры

Формулировка задачи

Пусть в таблице произвольных гидробиологических наблюдений X размерностью $m > 1$ откликом Y является один из любых признаков, измеренных в количественной шкале.

Необходимо решить задачу регрессии, целью которой является оценка по матрице входных переменных параметров функции выходной переменной, принимающей непрерывный диапазон числовых значений.

Математический лист (продолжение раздела 9.4)

Нейронные сети наиболее часто используемых архитектур выдают выходные значения в некотором определенном диапазоне (например, на отрезке от 0 до 1 в случае логистической функции активации). Для задач классификации это не создает никаких трудностей. Однако для задач регрессии особую важность имеет масштаб и диапазон существования выходных значений, поскольку на передний план выходят проблемы, связанные с эффектом экстраполяции.

Как показано в главе 1.5, простейшей из масштабирующих функций, сводящей переменные сети к "приемлемому" диапазону, является минимаксная функция: она находит минимальное и максимальное значение переменной по обучающему множеству и выполняет линейное преобразование так, чтобы значения лежали в нужном диапазоне, как правило, на отрезке $[0,1]$. Если эти действия применяются только к измерениям обучающей выборки, то есть гарантия, что результаты преобразования попадут в область возможных выходных значений сети. Сеть может быть обучена, но выход сети будет находиться в определенных границах, пересечение которые будет пресекаться.

Это обстоятельство можно считать достоинством, если бы не проблема экстраполяции: если продолжать кривую вправо по числовой оси, то выход ее за лимитируемые пределы неизбежен, даже если мы еще достаточно близко отошли от диапазона обучающих векторов. Чтобы избежать этого, сужают целевой диапазон минимаксной масштабирующей функции, например, делают его от 0.25 до 0.75, создавая некоторый запас. Интересно заметить, что на среднем участке сигмоидная кривая "почти линейна", поэтому другой путь для учета экстраполяции - использование линейного выходного слоя.

Задачи регрессии методами нейросетевого моделирования можно решать с помощью сетей различных типов: многослойного персептрона, линейной сети, радиальной базисной функции и обобщенной регрессионной сети. Линейная модель по сути ничем не отличается от обычной линейной регрессии, но на языке нейронных сетей представляется сетью без промежуточных слоев, которая в выходном слое содержит только линейные элементы (то есть элементы с линейной

функцией активации). Обучить линейную сеть можно с помощью стандартного алгоритма линейной оптимизации.

В предыдущем разделе было описано, как многослойный персептрон моделирует функцию отклика с помощью функций "сигмоидных склонов". Столь же естественным является подход, основанный на разбиении пространства окружностями или, в общем случае, гиперсферами, которые задаются своим центром и радиусом. Поверхность отклика такого радиального элемента представляет собой гауссову функцию колоколообразной формы, с вершиной в центре и понижением к краям (см. рис. 9.12). Наклон гауссова радиального элемента можно менять подобно тому, как можно менять наклон сигмоидной кривой в персептроне.

Сеть, построенная на *радиальных базисных функциях (RBF)*, имеет промежуточный слой из радиальных элементов, каждый из которых воспроизводит гауссову поверхность отклика. Поскольку эти функции нелинейны, то для моделирования любой произвольной функции отклика нет необходимости использовать более одного промежуточного слоя – достаточно лишь взять оптимальное число радиальных элементов. RBF-сети имеют как ряд достоинств (компактность, быстрая обучаемость), так и недостатков. Например, с "групповым" представлением пространства модели связано неумение сетей RBF экстраполировать свои выводы за область известных данных: при удалении от обучающего множества значение функции отклика быстро падает до нуля.

В предыдущем разделе, говоря о задачах классификации, мы упомянули о том, что выходы сети можно интерпретировать как оценки вероятности того, что элемент принадлежит некоторому классу, и сеть, фактически, "учится" оценивать функцию плотности вероятности. Аналогичная интерпретация может иметь место и в задачах регрессии – выход сети рассматривается как ожидаемое значение модели в данной точке пространства входов, связанное с плотностью вероятности совместного распределения входных и выходных данных.

Задача оценки плотности вероятности имеет давнюю историю в математике и относится к области байесовой статистики. Возможный подход к оценке плотности вероятности основан на *ядерных оценках Парзена* [Parzen, 1962], связывающих ансамбли близко лежащих точек с некоторым доверием к уровню плотности, которое по мере отдаления убывает и стремится к нулю. В методе ядерных оценок в точке, соответствующей каждому наблюдению, помещается некоторая простая функция (например, гауссова функция), затем все они складываются, и в результате получается оценка для общей плотности вероятности. Если обучающих примеров достаточно количество, то такой метод дает достаточно хорошее приближение к истинной плотности вероятности.

Аппроксимация плотности вероятности с помощью ядерных функций является методологической основой для *вероятностных (PNN)* и *обобщенно-регрессионных (GRNN) нейронных сетей*. В этих сетях в точку расположения каждого обучающего наблюдения помещается гауссова ядерная функция. Окончательная выходная оценка сети получается как взвешенное среднее выходов по всем обучающим наблюдениям, где величины весов отражают расстояние от этих наблюдений до той точки, в которой производится оценивание. Таким образом, более близкие точки вносят больший вклад в оценку.

Первый промежуточный слой сети GRNN состоит из радиальных элементов, а второй промежуточный слой содержит элементы, которые помогают оценить взвешенное среднее и состоит из двух нейронов. Обобщенно-регрессионная сеть обучается почти мгновенно, но может получиться большой и медленной. Как и сеть RBF, сеть GRNN не обладает способностью эффективно экстраполировать данные.

Результаты расчетов

Моделирование индивидуального веса особи

Выполним синтез различных нейронных сетей для прогнозирования зависимости среднего веса особей семейства хирономид от восьми различных переменных, подробно описанных в разделе 8.1:

1. логарифма индекса плотности населения $\ln((N_s * B_s)^{1/2})$, где N_s и B_s – суммарные численность и биомасса;
2. общего числа видов зообентоса в пробе;
3. информационного индекса Шеннона;
4. биотического индекса Вудивисса;

5. олигохетного индекса Пареле;
6. сезонной составляющей, учитывающей дату проведения наблюдения;
7. класса качества вод по гидрохимическим показателям в точке отбора пробы;
8. типа водоема.

В составе общей таблицы наблюдений, состоящей из 473 измерений, выделим обучающую выборку из 400 объектов, а остальные примеры используем для контроля. Средние значения выходной переменной составили для обучающей и контрольной выборок, соответственно, 1.78 и 3.24 мг, стандартные отклонения – 2.70 и 6.71.

С помощью "интеллектуального генератора" построим 50 нейронных сетей различного типа и архитектуры, из которых отберем наилучшие модели, т.е. имеющие наименьшую ошибку на контрольном множестве. Будем попутно исключать при этом из числа входных переменных признаки, имеющие низкую чувствительность. Основные результаты расчетов представлены в табл. 9.8.

Эти результаты позволяют сделать два достаточно общих вывода:

- еще раз подтверждается тезис "множественности моделей" В.В. Налимова (в частности, исключение из модели от 2 до 4 различных переменных не приводит к серьезному ухудшению их качества);
- результаты свидетельствуют о хороших интерполяционных и плохих экстраполяционных качествах обобщенно-регрессионных сетей, антиподом которых в этом отношении являются линейные сети.

Однако, как основной вывод, следует признать, что между средним весом особей и представленным комплексом переменных существует достаточно слабая статистическая зависимость, которую *не удалось существенно улучшить* с использованием различных методов нейросетевого моделирования. Например, на обучающей выборке лишь GRNN-модель оказалась чуть лучше (коэффициент корреляции 0.464 против 0.394) обычной линейной регрессионной модели, представленной в таблице 8.1 раздела 8.1.

Доля общей вариации индивидуального веса, объясненная любой из протестированных сетей табл. 9.8, составляет от 3 до 5%. В то же время, если на той же выборке в качестве выходной переменной принять, например, индекс Шеннона, то доля объясненной дисперсии даже при моделировании трехслойным персептроном составит от 42.3 % на обучающей выборке до 38.6 % на контрольной последовательности. Коэффициент корреляции Пирсона в тех же условиях изменяется от 0.817 до 0.790 соответственно, что следует оценить как весьма высокий показатель применительно к гидробиологическим моделям.

Таблица 9.8

Результаты прогнозирования среднего веса особи с использованием нейронных сетей различного типа (в числителе – показатель для обучающей выборки, в знаменателе – для контрольной последовательности)

Наименование показателей	Трехслойный персептрон	Линейная модель	Радиальные базисные функции RBF	Обобщенно-регрессионная модель GRNN
Характеристики сети: количество элементов входного и скрытого слоев	Входных – 6 Скрытых – 6	Входных – 4	Входных – 6 Скрытых – 2	Входных – 8 Скрытых – 400
Перечень входных переменных, исключенных из модели	6, 8	1, 3, 5, 7	4, 6	-
Средняя абсолютная разность расчетных и фактических значений	<u>3.08</u> 4.02	<u>1.49</u> 2.80	<u>1.48</u> 2.80	<u>1.42</u> 2.80
Стандартное отклонение ошибки сети	<u>2.58</u> 6.51	<u>2.65</u> 6.50	<u>2.62</u> 6.67	<u>2.49</u> 6.59
Отношение стандартного отклонения ошибки сети к стандартному отклонению отклика	<u>0.955</u> 0.970	<u>0.980</u> 0.968	<u>0.970</u> 0.994	<u>0.922</u> 0.982
Коэффициент корреляции расчетных и фактических значений	<u>0.297</u> 0.328	<u>0.199</u> 0.402	<u>0.242</u> 0.111	<u>0.464</u> 0.264

Анализ связи между гидрохимическими и гидробиологическими показателями

Ранее нами были приведены примеры построения регрессионных моделей по методу "включений с исключениями" Эфроимсона (раздел 8.1) и моделей МГУА на основе алгоритма многорядной селекции (раздел 9.3). В этих примерах оценивалась взаимосвязь между некоторыми гидрохимическими параметрами качества воды (концентрациями ионов железа, аммонийного азота, минерального фосфора и БПК) и 7 основными гидробиологическими показателями обилия и индексами: X_H – информационного индекса Шеннона, X_V – биотического индекса Вудивисса, X_P – олигохетного индекса Пареле, X_{CI} – хирономидного индекса Балушкиной, числа видов X_S , логарифмов суммарной численности X_N и биомассы X_B зообентоса в пробе.

Для прогнозирования каждого из указанных гидрохимических показателей в ходе перебора многих вариантов была построена наилучшая нейросетевая модель со следующими параметрами:

- для ионов железа – трехслойный перцептрон (MLP-сеть) с 5 элементами промежуточного слоя на основе 5 входных переменных, в состав которых не вошли индекс Шеннона X_H и число видов X_S ;
- для аммонийного азота – RBF-сеть на основе радиально-базисных функций с 6 входными переменными (исключен индекс Пареле X_P) и 9 элементами промежуточного слоя;
- для минерального фосфора – RBF-сеть с 6 входными переменными (исключена биомасса X_B) и 27 элементами промежуточного слоя;
- для БПК – MLP-сеть с 9 элементами промежуточного слоя на основе 6 входных переменных, в состав которых не вошел индекс Вудивисса.

Несмотря на известную теоретическую проблематичность корректного сравнения математических моделей, имеющих разную параметричность, количество степеней свободы и проч. [Брусилковский, Розенберг, 1981; Розенберг, 1989], мы сочли возможным предложить читателю некоторый анализ эффективности моделирования всеми протестированными методами. Как и в другой нашей работе [Розенберг с соавт., 1994], сопоставление моделей-претендентов проведем по системе критериев, представленных в табл. 9.9.

В целом, определенные преимущества в "соревновании" методов прогнозирования оказались на стороне моделей ИНС. Однако даже в ходе перебора более четырехсот версий различных сложных нейросетей, не удалось найти модель для прогноза концентрации аммонийного азота, лучшую, чем простенькое уравнение регрессии. В некоторых случаях с позиций различных критериев эти оценки могут разойтись: например, для прогноза БПК, если принять во внимание коэффициент корреляции, лучшей оказалась модель ИНС, но меньшую среднюю ошибку доставляет уравнение регрессии.

Таблица 9.9

Оценка эффективности различных моделей-претендентов прогнозирования гидрохимических показателей по совокупности критериев (сокращения: МШР – модель пошаговой регрессии, МГУА – модели самоорганизации, ИНС – нейросетевые модели)

Химический компонент	Тип модели	Средне-квадратическая ошибка	Средний модуль ошибки	Максимальный модуль ошибки	Критерий регулярности	Коэффициент корреляции	Критерий Дарбина-Уотсона
Железо	МШР	0.317	0.242	1.09	0.847	0.532	1.83
	МГУА	0.322	0.237	1.08	0.840	0.440	2.04
	ИНС	0.293	0.205	1.27	0.781	0.628	2.18
Аммонийный азот	МШР	0.230	0.169	1.04	0.908	0.418	1.37
	МГУА	0.237	0.177	1.09	0.907	0.364	1.147
	ИНС	0.233	0.171	1.11	0.920	0.395	1.22
Минеральный фосфор	МШР	0.0756	0.0575	0.269	0.950	0.312	0.981
	МГУА	0.0730	0.0567	0.241	0.932	0.372	1.072
	ИНС	0.0665	0.0485	0.234	0.836	0.551	1.33
БПК ₅	МШР	1.70	1.19	5.96	0.837	0.546	1.11
	МГУА	2.00	1.44	5.46	0.969	0.247	0.925
	ИНС	1.71	1.28	4.95	0.828	0.561	1.22

Примечание. Жирным шрифтом выделены "наилучшие" с точки зрения эффективности значения критериев.

Резерв повышения надежности моделей прогнозирования гидроэкологических показателей видится нам в объединении отдельных моделей в "коллектив", суммарная эффективность которого практически всегда оказывается значительно выше любого из его членов. Структурные связи в коллективе выбираются таким образом, чтобы положительные свойства той или иной модели (метода) дополняли друг друга, а отрицательные – компенсировались [Растрин, Эренштейн, 1981]. Системы коллективного распознавания и прогнозирования значительно более устойчивы к не вполне объяснимым "провалам", которые свойственны отдельным индивидуальным методам (см., например, модель МГУА для БПК₅ в табл. 9.9). Конкретные методы и примеры объединения отдельных прогнозов в работоспособный коллектив были описаны ранее [Брусиловский, Розенберг, 1983; Брусиловский, 1987; Розенберг с соавт., 1994].

9.6. Обучение без учителя: нейросети Кохонена

Формулировка задачи

Пусть имеется таблица произвольных гидробиологических наблюдений X размерностью $m > 1$.

Рассмотренный в предыдущих разделах алгоритм обучения нейронной сети с помощью процедуры обратного распространения подразумевал наличие некоего внешнего классификатора (как правило, человека), предоставляющего сети как входные, так и целевые выходные образы. Алгоритмы, пользующиеся подобной концепцией, называются алгоритмами обучения с учителем.

В то же время вся глава 7 была посвящена задаче кластерного анализа – алгоритмам без учителя – разбиению множества объектов на заданное или неизвестное число классов на основании некоторого априорного математического критерия качества классификации, отражающего в той или иной мере следующие неформальные требования:

- внутри групп объекты должны быть тесно связаны между собой;
- объекты разных групп должны быть далеки друг от друга;
- при прочих равных условиях распределение объектов по группам должно быть равномерным.

Главная черта, делающая привлекательным обучение без учителя, – это его "самостоятельность", а возможная область применения состоит в обнаружении новых явлений. Естественным оказалось проникновение нейросетевых методов и в эту область моделирования.

Рекомендуемая литература: [Кохонен, 1982; Kohonen, 1982; Уоссермен, 1992; Нейронные сети., 2001]

Математический лист

Самоорганизующиеся карты (*Self Organizing Maps – SOM*), разработанные Т. Кохоненом [Kohonen, 1982], представляют собой мощный аналитический инструмент, объединяющий в себе две основные парадигмы анализа – кластеризацию и проецирование, т.е. визуализацию многомерных данных на плоскости. Сеть Кохонена распознает кластеры в многомерных обучающих данных и относит все данные к тем или иным кластерам, используя алгоритм проецирования с сохранением топологического подобия. При этом те элементы выборки, которые находятся в относительной близости в исходном многомерном пространстве, оказываются рядом и в пространстве с более низкой размерностью.

Разумеется, при любой попытке свернуть информацию об объекте из m -мерного пространства в точку на плоскости могут быть потеряны некоторые детали, однако, такой прием часто бывает полезен, так как он позволяет визуализировать данные, которые никаким иным способом проанализировать невозможно. Если, например, сеть встретится с набором данных, не похожим ни на один из известных образцов, то она не сможет классифицировать такое наблюдение и тем самым выявит его новизну.

Сеть Кохонена имеет всего два слоя: входной и выходной, составленный из радиальных нейронов упорядоченной структуры (выходной слой называют также слоем топологической кар-

ты). Нейроны выходного слоя располагаются в узлах двумерной сетки с прямоугольными или шестиугольными ячейками. Количество нейронов в сетке определяет степень детализации результата работы алгоритма, и, в конечном счете, от этого зависит точность обобщающей способности карты.

Процесс обучения, как и в случае обучения с учителем, заключается в подстраивании весов синапсов методом последовательных приближений на основании их значений от предыдущей итерации. Обучение по алгоритму Кохонена сводится к минимизации разницы между входными сигналами нейрона, поступающими с выходов нейронов предыдущего слоя $y_i^{(n-1)}$, и весовыми коэффициентами его синапсов:

$$w_{ij}(t) = w_{ij}(t-1) + \alpha \cdot \left[y_i^{(n-1)} - w_{ij}(t-1) \right], \quad (9.23)$$

где t обозначает номер эпохи (итерации).

Полный алгоритм обучения будет выглядеть так.

1. На стадии инициализации всем весовым коэффициентам присваиваются небольшие случайные значения.
2. На входы сети подается входной образ, и сигналы возбуждения распространяются в выходном слое согласно принципам классических прямопоточных сетей, то есть для каждого нейрона рассчитывается взвешенная сумма его входов, к которой затем применяется активационная (передаточная) функция нейрона, в результате чего получается его выходное значение $y_i^{(n)}$, $i=0, \dots, M_i-1$, где M_i – число нейронов в слое i ; $n=0, \dots, N-1$, а N – число слоев в сети.
3. Из всего выходного слоя выбирается нейрон, значения синапсов которого максимально подходят входному образу, и для него осуществляется подстройка весов синапсов с применением формулы (9.23). Эта, так называемая, аккредитация может сопровождаться "затормаживанием" всех остальных нейронов слоя и введением выбранного нейрона в насыщение. Иными словами, в ходе обучения модифицируется не только нейрон-"победитель", но, в меньшей степени, и его соседи.
4. Цикл повторяется с шага 2, где попеременно предъявляются все образы из входного набора пока выходные значения сети не будут стабилизированы с заданной точностью.

Оценка выигравшего нейрона на шаге 3 может осуществляться с использованием любого алгоритма k -ближайших соседей (например, путем расчета скалярных произведений векторов весовых коэффициентов с вектором входных значений и максимальное произведение будет указывать на выигравший нейрон).

В результате итеративной процедуры обучения сеть организуется таким образом, что каждому входному измерению, заданному в m -мерном пространстве исходных признаков, будет соответствовать ячейка-"победитель" на двумерной решетке топологического слоя сети. Для визуализации структуры кластеров, полученных в результате обучения карты, применяется унифицированная матрица расстояний. Элементы матрицы определяют расстояние между весовыми коэффициентами каждого нейрона и его ближайшими соседями. Большое значение расстояния говорит о том, что данный нейрон сильно отличается от окружающих и относится к другому классу.

Основная трудность применения сетей Кохонена, как и в случае факторного анализа, заключается в смысловой интерпретации топологической карты и увязывании ее отдельных участков с некоторыми конкретными обобщениями из предметной области.

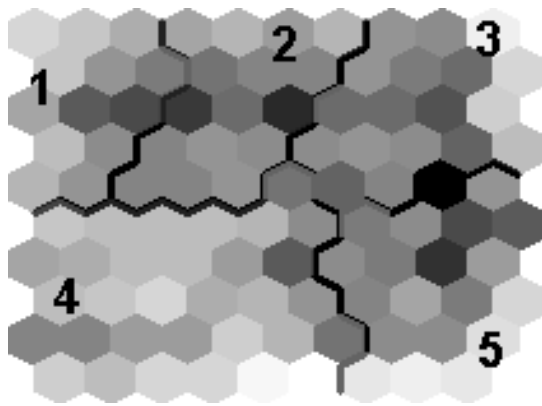
Результаты расчетов

Сформируем выборку из 88 наблюдений, выполненных на 15 станциях р. Сок. В качестве конкретных признаков, описывающих эти измерения, используем показатели обилия по 6 основным таксономическим группам хирономид (отдельно по подсемействам Orthocladiinae, Tanytarsinae, Diamesinae, Prodiamesinae и трибам Chironomini и Tanytarsini), а также индексы Шеннона, Вудивисса и Пареле.

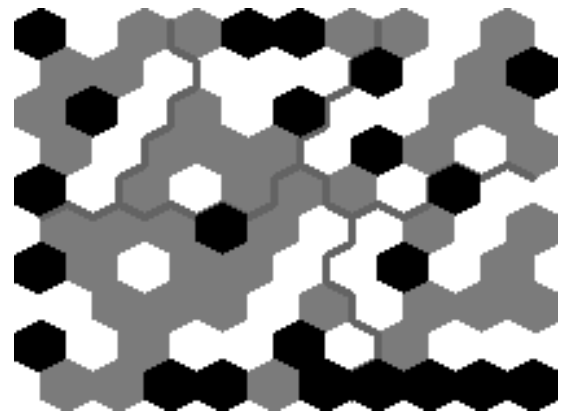
Выполним обучение самоорганизующейся сети с выходным топологическим слоем 10x10 ячеек и представим на рис. 9.13 серию карт Кохонена для рассматриваемого примера. Каждая карта представляет собой отображение выходного слоя нейронов, расположенных в узлах двумерной координатной сетки с прямоугольными или шестиугольными ячейками (шестиугольники дают более корректные результаты, т.к. расстояние между центрами ячеек ближе к евклидову, чем между центрами прямоугольников). Для визуализации карт будем применять градации серого цвета, т.е. чем больше значение отображаемого показателя, тем темнее прорисовывается связанный с ним узел. Полученный набор раскрасок может использоваться для анализа закономерностей, имеющихся между компонентами набора данных.

Представленные на рис. 9.13 карты Кохонена могут быть интерпретированы следующим образом.

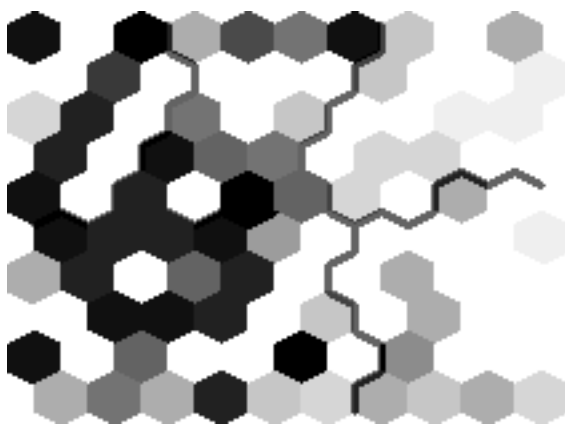
1. Карта а) описывает унифицированную матрицу расстояний между каждым нейроном и его ближайшими соседями. Узлам, резко контрастирующим со своей окрестностью, соответствует черный цвет, а участкам, носящим характер "сглаженного плато", – белый. Группу ячеек, расстояние между которыми внутри этой группы меньше, чем расстояние до соседних групп, определим как кластер. В качестве примера используем разбиение топологической карты на 5 кластеров.



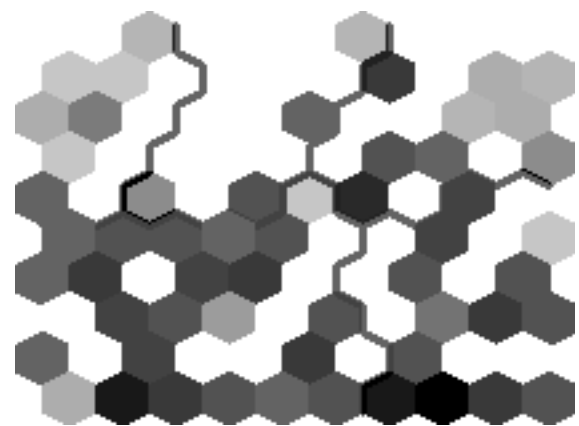
Карта а). Области кластеров



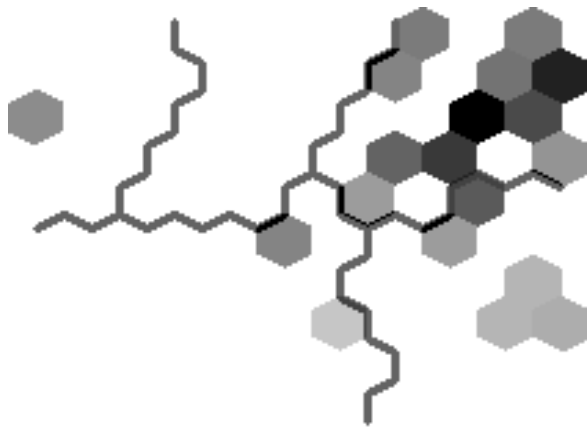
Карта б). Частоты выигрышей



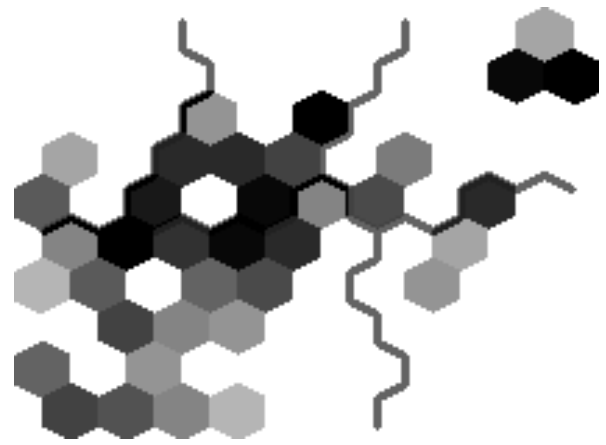
Карта в). По станциям



Карта г). Индекс Вудивисса



Карта д). Обилие *Prodiamesinae*



Карта е). Обилие *Tanypodinae*

Рис. 9.13. Топологические карты Кохонена для комплекса наблюдений, сделанных на р. Сок

2. С каждым произвольным измерением обучающей или контрольной выборки связывается "нейрон-победитель", т.е. нейрон выходного слоя, имеющий максимальную близость в смысле некоторой функции расстояния. На карте б) представлена матрица частот выигрышей, которая показывает, сколько раз каждый элемент выиграл (т.е. оказывался ближайшим к обрабатываемому наблюдению) после тестирования всех 88 примеров обучающей выборки. Если узел выигрывал два раза, то он окрашен в черный цвет. Ввиду того, что количество измерений меньше числа элементов решетки сети, то некоторые узлы оказались незадействованными и окрашены в белый цвет. Большие значения частот выигрышей традиционно указывают на центры кластеров топологической карты.
3. Можно выбрать любую переменную исходной таблицы и отобразить ее в виде карты. Эти карты представляют собой проекции матрицы расстояний на соответствующую компоненту (признак в таблице X). На карте в) более темным цветом окрашены узлы, связанные с наблюдениями на станциях, расположенных ближе к устью. Можно отчетливо увидеть, что измерения, сделанные в верховьях, попали в кластеры 3 и 5, в то время, как станции, расположенные ниже по течению, сконцентрировались в кластерах 1 и 4.
4. Темным цветом на карте г) представлены измерения с наибольшим значением индекса Вудивисса. Хотя распределение этого показателя существенно размыто, определенное его превышение можно усмотреть в кластерах 4 и 5.
5. На картах д) и е) можно ясно оценить как изменяется видовой состав индикаторной части хирономидного комплекса: если в кластере 3, который мы связываем с верхним течением, сравнительно велико обилие реофильных представителей подсемейства *Prodiamesina*, то для 4-го кластера, где больше устьевых измерений, отчетливо увеличивается удельный вес пелофильных видов подсемейства *Tanypodinae*.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

"Что такое счастье – это каждый понимал по-своему..."²⁹

Работая над этой книгой, мы не хотели создавать некий императив, обозначающий законченное руководство к действию, и, тем более, не собирались покушаться на чужое понимание «счастья».

«Наука есть способ описания окружающей действительности на основе аксиоматических моделей»³⁰. И все научные знания, непротиворечивые в рамках границ объявленных исходных предпосылок, представляют собой абсолютную истину. Таковым может быть любой индекс A , показывающий убедительные результаты на подмножестве рек B региона R .

Но любые выдвинутые аксиомы всегда имеют ограниченную область справедливости, вне которой они ошибочны. Неокончателность аксиоматики в науке есть обязательное для нее явление и ошибочность, связанная с применением утверждений за рамками обозначенных границ, является, наряду с ленью, "двигателем прогресса". Все развитие науки сводится к последовательному приближению путем замены действующих аксиом на более общие.

Поэтому, принимая индексы, предложенные Ф. Вудивиссом, Э.А. Пареле, Е.В. Балускиной (да и собственные – Т.Д. Зинченко с соавторами) и многими другими, как некоторую самодостаточную данность, мы своей работой лишь хотели обратить внимание наших коллег на то, что идентичные (и, рискуем предположить, более простые и обоснованные) результаты могут быть получены путем *простой подстановки* исходных данных в обычные регрессионные или дискриминантные уравнения (см. главу 8).

«Частностей должно быть не больше, чем их необходимо», но оценить, какую дополнительную информационную нагрузку несет новая сформулированная закономерность или индекс, можно только обладая некоторым объемом знаний и приемов, в том числе, в области математической статистики.

"Сотри случайные черты и, ты увидишь, мир прекрасен..."³¹

Мы не хотели в очередной раз подчеркивать принципиальную сложность окружающего экологического мира – многочисленные сетования по этому поводу успели основательно надоесть. Но вряд ли очень парадоксальным будет иное утверждение – модели экологических систем, как средство отображения для наблюдателя свойств окружающей действительности, должны быть *принципиально просты*.

Любое зеркало, отражающее реальный объект, всегда ограничено (например, лишено объемности), но стремится выделить ту конкретную сущность, которая нужна в конкретный момент наблюдателю (например, блеск губной помады модницы). Вспомним хотя бы слова Гамлета: «Я зеркало поставлю перед Вами, где Вы насквозь увидите себя». Поэтому при моделировании действительности (суть – конструировании экологической системы) нужно уметь выделить только тот процесс или свойства, которые необходимы для решения *нужной задачи*.

Приведем не совсем экологический пример – процесс падения шляпы со шкафа, который, при желании, можно трактовать как очень сложный. Например, с позиций квантовой механики это падение – проявление корпускулярно-волнового дуализма материи: любой "частице" с энергией E и импульсом p соответствует волна де Бройля с длиной $\lambda = h/p$ и частотой $\nu = E/h$, где h – постоянная Планка. С позиций гидродинамики это падение подчиняется уравнению Навье-Стокса и аксиоматике механики сплошных сред. Ас-

²⁹ Заключительная фраза из повести Аркадия Гайдара "Чук и Гек".

³⁰ Хазен А. О лженауке, ее последствиях и об ошибках в науке // Наука и жизнь, 2002, № 10. – С. 103-110.

³¹ Иоганн В. Гёте "Фауст".

троном начнет вычислять траекторию падения с учетом мгновенного расположения всех основных космических объектов и конфигурации общего гравитационного поля. И только ученик 8 класса уверенно подставит массу шляпы в простейшее уравнение для свободного падения.

Конечная цель конструирования экологической теории всегда проста и должна быть выражена "одним числом" – исследуемую экосистему нужно отнести к одной из немногих категорий качества ("хорошая", "плохая", "грязная", "неустойчивая", "депрессивная" и т.д.), которая является итогом поставленной задачи. Поэтому, анализируя процесс смены парадигм в экологии [Розенберг, Смелянский, 1997], можно предполагать в текущем столетии обратное движение "маятника" (точнее, новый виток "диалектического штопора") от диатропической познавательной модели С.В. Мейена [1990; Чайковский, 1992] назад к прагматической ньютоновской модели, оснащенной, однако, мощным интеллектуальным придатком отсева "лишних" (малоинформативных в каждом конкретном случае) частностей. Основная задача науки – разработать методы адекватного представления *«простыми средствами сложных свойств экосистем»* (точнее говоря, сложных реалий окружающего мира). Перефразируя Ю. Одума [1975], *«...принцип сводимости свойств целого к сумме свойств его частей должен служить первой рабочей заповедью экологов»*, нужно только выбрать физиономически верные свойства "частей" и выполнить над ними целеобусловленные функциональные преобразования.

Конечная простота модели представления экосистемы предполагает одновременно и ее необходимую внутреннюю сложность, внешне скрытую, по возможности, от внимания исследователя. Прообразом такого решающего автомата является нейросетевая модель (см. главу 9), внутри которой, при ограниченном наборе входных и целевых переменных, заложен сложный, многоуровневый и самонастраивающийся механизм преобразований.

Л.Ф.Сердюцкая, И.П.Каменева

Модели водных экосистем и их фазовые портреты (на примере модели круговорота азота в Куйбышевском водохранилище)

Мем № 37: *«В свое время прославленный французский писатель Бернарден де Сент-Пьер, "бессмертный" член Академии наук Франции, пожаловался Бонапарту, что в Академии к нему относятся без должного уважения. Бонапарт осведомился, знает ли знаменитый автор "Поля и Вирджинии" дифференциальное исчисление. Получив отрицательный ответ, Бонапарт дал понять, что академик, не знающий дифференциалов, не заслуживает уважения. К концу XX века подобная требовательность никому бы не пришла в голову».* В.В. Дружинин и Д.С. Конторов [1976].

Круговорот биогенных элементов представляет собой ключевой механизм формирования качества воды, однако сложность процессов круговорота приводит к созданию сложных многокомпонентных имитационных моделей, которые оказываются недостоверными из-за неопределенности входящих в модели параметров и возможности получения качественно различных прогнозов при практически одних и тех же параметрах. Отсюда следует крайняя актуальность решения задач достоверного формального описания процессов в экосистемах, в том числе, процессов круговорота азота и фосфора, как одних из основных биогенных элементов, определяющих продуктивность и качество воды водных объектов.

Модель круговорота азота в Куйбышевском водохранилище создана с целью выявления основных причин цветения водоема, а также для прогноза продукционной способности водохранилища, исходя из существующих антропогенных нагрузок.

Для моделей круговорота азота разработана одна из методик верификации – методика связности, существенно уменьшающая неопределенность параметров с помощью выявления связей, наложенных на параметры, из условий сохранения устойчивости нетривиальных особых точек последовательно для нескольких структур круговорота.

Суть этой процедуры состоит в следующем. На начальном этапе составляется система небольшого количества (два–три) уравнения, в которых априори заключена особенность имитируемого процесса и которые легко поддаются теоретическому анализу, в частности, удовлетворяют условиям положительности стационарной точки и устойчивости. Однако эта исходная модель не является достаточно конструктивной, и задача состоит в ее расширении с последовательным введением необходимых фазовых координат при сохранении свойств динамики процесса, заключенных в исходную систему.

Отметим, что верификацией модели нельзя найти однозначно все параметры – некоторые из них всегда будут свободными. Поэтому последние необходимо идентифицировать (назначить численные значения) по реальным данным. Здесь часть параметров моделей идентифицирована по гидрохимическим и гидробиологическим характеристикам Куйбышевского водохранилища, а часть – по другим водоемам. В последнем случае идентифицировались параметры, которые приблизительно равны для круговорота азота в разных условиях. Они выбирались так, чтобы при их варьировании в достаточно широкой области сохранялись устойчивость и качественная картина.

Реальным объектом моделирования является Куйбышевское водохранилище. Методика связности применяется для моделей с постоянными коэффициентами (среднегодовой ход), однако демонстрируется переход и к моделям с переменными параметрами (температура воды, освещенность, поступления органического и неорганического азота в водоем), которые отражают сезонную динамику.

В дальнейшем, если это не будет оговорено, то средняя температура воды (T) водохранилища принимается равной 14 °С. Все расчеты ведутся в азотных единицах (тонны азота). Литературные ссылки, обобщающие основные исходные предположения и численные значения величин, использованных при построении моделей, приведены в [Сердюцкая, Каменева, 2000].

П.1.1. Среднегодовые модели с постоянными коэффициентами

Моделируемые процессы

В последующих моделях в качестве динамических переменных используются следующие величины: P – количество фитопланктона в водохранилище; B – количество бактериопланктона; Z – количество зоопланктона; N_0 – количество растворенного и детритного органического азота; N_1 – количество минерального азота в водохранилище. Последний в свою очередь подразделяется на такие компоненты: NH_4 (N_1) – количество аммонийного азота; NO_3 (N_2) – количество нитратного азота в водохранилище. Все перечисленные выше величины рассчитаны в тоннах азота.

Предполагается, что весь азот в водохранилище можно представить как неорганический (где N_1 – переменная) и органический (где P, B, Z, N_0 – переменные). Органический азот, в свою очередь подразделяется на живой (где P, B, Z – переменные) и неживой (где N_0 – переменная).

Теперь попытаемся описать процессы, происходящие между этими динамическими переменными.

Физические процессы

Сбросы в водоем органического и неорганического азота в сутки (равны C , где C – некоторая константа).

Сток азота через плотину для органического и минерального азота в сутки. Данный процесс линейно зависит от величины переменной.

Биологические процессы

Фиксация свободного азота. Запас связанного азота в водоеме может пополниться путем усвоения молекулярного азота воздуха свободноживущими фиксаторами азота (разными видами *Azotobacter*, *Clostridium pasteurianum*) и некоторыми сине-зелеными водорослями. Поскольку последние в водоемах распределены очень широко, то фиксация азота из воздуха за счет их развития может достигать в природных водах очень большой величины.

Здесь рассматриваются процессы азотфиксации фито- и бактериопланктона. Для наших модельных условий запишем:

- – азотфиксация фитопланктоном за сутки равна kP^{32} ;
- – азотфиксация бактериопланктоном за сутки равна kB .

Предполагается также, что эти два процесса линейно зависят от величины переменной.

Усвоение минерального азота. Минеральный азот в воде обычно встречается в очень небольших концентрациях, не превышающих долей миллиграмма на литр. В основном он используется водорослями, в частности, планктонными.

Так как рост фитопланктона зависит от количества питания (минеральных соединений), запишем, пользуясь законом взаимодействия масс, что потребление фитопланктоном неорганического азота за сутки равно kPN_1 .

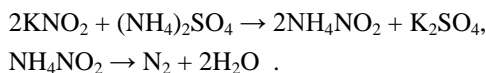
Минерализация органического азота. Образовавшиеся в водоеме белковые вещества растений и животных в дальнейшем, после отмирания организмов, подвергаются минерализации с помощью бактерий. Участие бактерий в азотном цикле является необходимым условием круговорота. Азот распадающихся белковых веществ выделяется в первую очередь в виде аммиака. Таким образом, в результате этого процесса водоем пополняется минеральными соединениями и обедняется органическими. Заметим, что потребность фитопланктона в биогенных элементах обеспечивается за счет регенерации в умеренных широтах и составляет 18–25 %. При моделировании этот процесс разбивается на две стадии:

- минерализация органического азота бактериопланктоном за сутки равна kBN_0 (по закону взаимодействия масс);
- поступление неорганических соединений азота в водоем за счет минерализации за сутки равно kB (линейная зависимость).

³² Символ k здесь и в дальнейшем обозначает константу.

Денитрификация и другие процессы, связанные с потерей азота в водоеме. Переход азота в газообразную форму из нитратов, т.е. $\text{NO}_3^- \rightarrow \text{NO}_2^- \rightarrow \text{N}_2$, называется денитрификацией. Этот процесс при наличии денитрифицирующих бактерий протекает достаточно энергично лишь тогда, когда в наличии имеются нитраты и достаточное количество легкоусвояемого органического вещества, а также анаэробные условия.

Если в окружающей среде одновременно с NO_2^- присутствуют аммонийные соли или аминокислоты, то свободный азот может в этом случае выделяться за счет их химического взаимодействия:



Этот процесс называется *косвенной динитрификацией*.

Потери азота возможны также в результате деаммонификации, $\text{NH}_4 \rightarrow \text{N}_2$, а также при образовании летучих окислов азота с участием мочевины, некоторых аминокислот и разнообразных нестойких азотсодержащих соединений.

Будем считать, что на нашем объекте все перечисленные выше процессы в той или иной степени имеют место. Хотя чаще всего денитрификация наблюдается в грунтах, а не в толще воды. Для краткости объединим их в один процесс и будем называть просто денитрификацией, подразумевая наличие и других процессов, связанных с потерей азота в водоеме.

Разделим и этот процесс на две стадии:

- потери неорганического азота в водоеме за счет денитрификации за сутки равны kBN_1 (по закону взаимодействующих масс);
- переход азота в газообразную форму (выход из системы) в сутки равен kB (линейная зависимость).

Выделения зоопланктона. Роль зоопланктона в круговороте азота и других биогенных элементов подчеркивается во многих работах.

Экспериментальным путем показано, что взятые для опыта животные-детритофаги (пресноводные планктонные рачки-фильтраты, дафнии, пресноводные моллюски лужанки и насекомые жучки-кожееды) обеспечивают достаточно высокий уровень поступления биогенных элементов, доступных для усвоения звеном первичных продуцентов. Так, в эвтрофных водоемах (чем является и наш объект) выделения аммиака зоопланктоном почти на 56 % обеспечивают ежегодные потребности фитопланктона в азоте. Все это свидетельствует о необходимости учета этого процесса в круговороте азота.

Таким образом, для модели выделения зоопланктона за сутки равны kZ (линейная зависимость).

Смертность. При моделировании учитывается также и смертность живых компонентов (P, Z, B), т.е. переход в мертвую органику (N_0):

- отмирание фитопланктона за сутки равно kP (линейная зависимость);
- отмирание бактериопланктона за сутки равно kB (линейная зависимость);
- отмирание зоопланктона за сутки равно $kZ + k_1Z$ (линейная зависимость), где под k_1Z подразумевается выедание зоопланктона хищниками более высокого трофического уровня, другими словами, выход из системы.

Питание зоопланктона. Считаем, что зоопланктон питается фито-, бактериопланктоном и детритным азотом. Отсюда, учитывая закон взаимодействующих масс, получим:

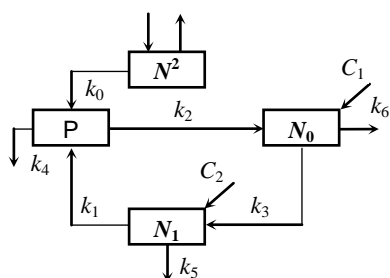
- выедание зоопланктоном фитопланктона за сутки равно kZP ;
- выедание зоопланктоном бактериопланктона за сутки равно kZB ;
- потребление зоопланктоном детритного азота за сутки равно kZN_0 .

Такие процессы, как обмен биогенами толщи воды с дном, фотохимическое окисление при моделировании круговорота азота не учитывались ввиду отсутствия натуральных данных по конкретному водоему.

Модель из трех уравнений

Рассмотрим простейший случай круговорота биогенного элемента в водоеме, где в качестве фазовых переменных приняты следующие величины: P – количество фитопланктона; N_0 – количество органического азота; N_1 – количество неорганического азота в водоеме.

Блок-схема круговорота азота в Куйбышевском водохранилище (три фазовые переменные) представлена на рис. П.1. На ее основе составлена модель, состоящая из трех обыкновенных дифференциальных уравнений:



$$\begin{aligned}
 \dot{P} &= k_0 P + k_1 T N_1 P - k_2 P - k_4 P, \\
 \dot{N}_0 &= C_2 + k_2 P - k_3 T N_0 - k_6 N_0, \\
 \dot{N}_1 &= C_1 + k_3 T N_0 - k_1 T N_1 P - k_5 N_1,
 \end{aligned}
 \tag{П.1}$$

где k_0 – коэффициент азотфиксации фитопланктона;
 k_1 – коэффициент потребления фитопланктоном неорганического азота;
 k_2 – смертность фитопланктона;
 k_3 – коэффициент трансформации органического азота;
 k_4 – выедание фитопланктона зоопланктоном;
 k_5 – сток неорганического азота через плотину;

Рис. П.1

k_6 – сток органического азота через плотину; C_1 – поступление неорганического азота в водоем; C_2 – поступление органического азота в водоем.

Нахождение реальной стационарной точки модели. Объем Куйбышевского водохранилища равен 58 км^3 . Средняя концентрация неорганического азота (N_1) $\sim 0,4$ мг/л или в переводе на все водохранилище $N_1 = 23200$ т. Для органического азота средняя концентрация $\sim 0,657$ мг/л, т.е. в пересчете на весь водоем $N_0 = 38106$ т.

Теперь переведем биомассу фитопланктона P в азотные единицы. Средняя концентрация фитопланктона $\sim 9,334$ мг/л. В переводе на сухой вес эта цифра принимает значение $2,3335$ мг/л. Общий азот составляет в среднем 9 % от сухого веса, т.е. $0,21$ мг/л (азота), или для всего водохранилища $P = 12181$ т.

Таким образом, получаем стационарную точку модели (П.1) (в тоннах азота):

$$P^0 = 12181; \quad N_0^0 = 38106; \quad N_1^0 = 23200 \quad (\text{П.2})$$

Поиск коэффициентов. За год в Куйбышевское водохранилище поступает 426900 т общего азота, т.е. $C_1 = 1185,8 - C_2$ (т/сут). (П.3)

За год сток общего азота – 385900 т, т.е. $k_6 N_0^0 + k_5 N_1^0 = 385900$ т или $k_6 N_0^0 + k_5 N_1^0 = 1071,944$ т/сут, отсюда

$$k_5 = 0,046 - 1,6425 k_6 \text{ (сут}^{-1}\text{)}. \quad (\text{П.4})$$

В Куйбышевском водохранилище за год аккумулируется 41000 т азота, т.е. 113 т/сут. Следовательно, $k_1 T N_1^0 P = 113$, отсюда

$$k_1 = 2,856 \cdot 10^{-8} \text{ (C} \cdot \text{T} \cdot \text{сут}^{-1}\text{)}. \quad (\text{П.5})$$

Коэффициент прижизненных выделений и смертность фитопланктона составляет

$$k_2 = 0,35/360 = 0,972 \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1}. \quad (\text{П.6})$$

Коэффициент азотфиксации фитопланктона $k_0 = 0,9458 \text{ год}^{-1}$ или $2,63 \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1}$.

Оставшиеся коэффициенты C_2, k_6, k_4, k_3 верифицируем по условию стационарности (П.2) модели (П.1), используя соотношениями (П.3)–(П.6):

$$k_4 = 0,0109 \text{ сут}^{-1}, \quad (\text{П.7})$$

$$k_3 = \frac{C_2 + 11,84 - 38106 k_6}{533484}. \quad (\text{П.8})$$

Относительно двух коэффициентов k_6 и C_2 сделаем два предположения: $k_6 = k_4 - k_0 = 8,304 \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1}$, тогда из (П.4) получим $k_5 = 0,0324 \text{ сут}^{-1}$; $C_1 = C_2$, тогда $C_2 = 592,9$ т/сут, а по (П.8) получим $k_3 = 5,404 \cdot 10^{-4} \text{ (C} \cdot \text{T} \cdot \text{сут}^{-1}\text{)}$.

Из третьего уравнения системы (П.1) (стационарный вариант), уточняя коэффициент C_1 и используя (П.5)–(П.8), получаем $C_1 = 576,4$ т/сут.

Список коэффициентов:

$$C_1 = 576,4 \text{ т/сут};$$

$$k_0 = 2,63 \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1};$$

$$k_2 = 0,972 \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1};$$

$$k_4 = 0,0109 \text{ сут}^{-1};$$

$$k_6 = 8,304 \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1}.$$

$$C_2 = 592,9 \text{ т/сут};$$

$$k_1 = 2,856 \cdot 10^{-8} \text{ (C} \cdot \text{T} \cdot \text{сут}^{-1}\text{)};$$

$$k_3 = 5,404 \cdot 10^{-4} \text{ (C} \cdot \text{T} \cdot \text{сут}^{-1}\text{)};$$

$$k_5 = 0,0324 \text{ сут}^{-1};$$

Исследование на устойчивость. Исследуя на устойчивость стационарную точку модели (П.1) (приравнивая к нулю ее правые части), получаем следующие необходимые условия устойчивости:

$$1) \quad k_4 > k_0;$$

$$2) \quad M = (C_1 + C_2)k_1 k_2 T + k_1(k_4 - k_0)TC_2 - k_2 k_5(k_2 + k_4 - k_0) > 0;$$

$$3) \quad (k_1 T + k_6 + k_1 T P^0 + k_5)[(k_1 T P^0 + k_5) + (k_1 T)^2 P^0 N_1^0] > \quad (\text{П.9})$$

$$> (k_1 T)^2 P^0 N_1^0 (k_3 T + k_6) - k_1 k_2 k_3 (T)^2 P^0;$$

$$4) \quad (k_3 T + k_6)M > C_2 k_1 T (k_4 k_3 T + (k_4 - k_0)k_6 + k_2 k_6).$$

Условия (П.9) для численных значений коэффициентов выполняются.

Система (П.1), а также все последующие модели были исследованы на устойчивость численным образом с помощью определителей Гурвица.

Модель из четырех уравнений

Расширим модель (П.1), добавив фазовую координату Z – количество зоопланктона в водоеме, при этом численные значения тех коэффициентов новой модели, которые отражают те же процессы, что и в предыдущей, остаются прежними.

На рис.П.2 представлена блок-схема процесса круговорота азота в Куйбышевском водохранилище (четыре фазовые переменные). На ее основе составлена модель, состоящая из четырех обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{P} &= k_0 P + k_1 TN_1 P - k_2 P - \tilde{k}_4 TPZ, \\ \dot{Z} &= \tilde{k}_4 TPZ + k_3 TN_0 Z - k_7 Z - k_{10} Z, \\ \dot{N}_0 &= C_2 + k_2 P - k_3 TN_0 - k_6 N_0 - k_9 TN_0 Z + k_7 Z, \\ \dot{N}_1 &= C_1 + k_3 TN_0 - k_1 TN_1 P - k_5 N_1, \end{aligned} \quad \text{П.10}$$

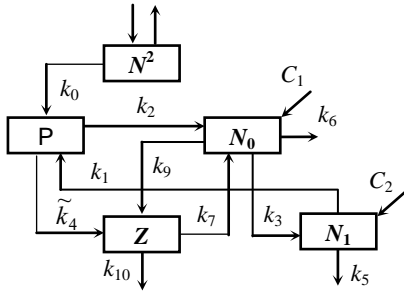


Рис. П.2

где: k_7 – смертность зоопланктона; k_9 – коэффициент потребления зоопланктоном органического азота; k_{10} – коэффициент выедания зоопланктона хищниками более высокого трофического уровня; \tilde{k}_4 – измененный коэффициент выедания фитопланктона зоопланктоном.

Нахождение реальной стационарной точки модели. Стационарное значение для зоопланктона обозначим через Z^0 . Средняя биомасса зоопланктона составляет 448 мг/м³. Предположим, что процентное соотношение по азоту в зоопланктоне то же, что и в бактериях, тогда значение средней концентрации зоопланктона в азотных единицах – 22,4 мг/м³. Для всего водохранилища – 1299,2 т.

Таким образом, получаем стационарную точку модели (П.10) (в тоннах азота):

$$P^0 = 12181; Z^0 = 1299,2; N_0^0 = 38106; N_1^0 = 23200 \quad \text{П.11}$$

Поиск коэффициентов. Приравнивая к нулю правые части системы (П.9), из первого уравнения, используя (П.11), получаем: $\tilde{k}_4 = 6,012 \cdot 10^{-7} (\text{C} \cdot \text{т} \cdot \text{сут})^{-1}$. В эвтрофном водоеме пища зоопланктона содержит 5–15 % фитопланктона и 10–20 % детрита, причем $k_9 = \tilde{k}_4$. Из третьего уравнения системы получим $k_7 = 0,32 \text{ сут}^{-1}$. Из второго уравнения – $k_{10} = 0,743 \text{ сут}^{-1}$.

Список коэффициентов:

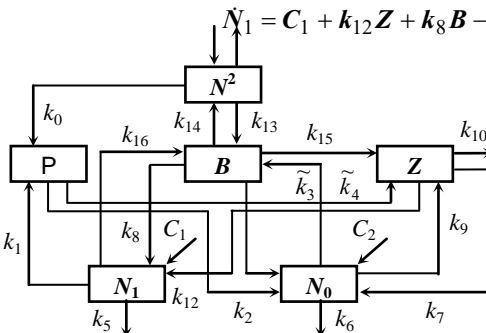
$C_1 = 576,4 \text{ т/сут};$	$C_2 = 592,9 \text{ т/сут};$
$k_0 = 2,63 \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1};$	$k_1 = 2,856 \cdot 10^{-8} (\text{C} \cdot \text{т} \cdot \text{сут})^{-1};$
$k_2 = 0,972 \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1};$	$k_3 = 5,404 \cdot 10^{-4} (\text{C} \cdot \text{т} \cdot \text{сут})^{-1};$
$\tilde{k}_4 = 6,012 \cdot 10^{-7} (\text{C} \cdot \text{т} \cdot \text{сут})^{-1};$	$k_5 = 0,0324 \text{ сут}^{-1};$
$k_6 = 8,304 \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1};$	$k_7 = 0,32 \text{ сут}^{-1};$
$k_9 = 6,012 \cdot 10^{-7} (\text{C} \cdot \text{т} \cdot \text{сут})^{-1};$	$k_{10} = 0,103 \text{ сут}^{-1}.$

Модель из пяти уравнений

Расширим модель (П.10), добавив фазовую координату B – количество бактериопланктона в водоеме, при этом численные значения коэффициентов новой модели, которые отражают те же процессы, что и в предыдущей, остаются прежними.

На рис. П.3 представлена блок-схема процесса круговорота азота в Куйбышевском водохранилище при наличии пяти фазовых переменных, на основе которой составлена модель, состоящая из пяти обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{P} &= (k_0 - k_2)P + k_1 TN_1 P - \tilde{k}_4 TPZ, \\ \dot{Z} &= \tilde{k}_4 TPZ + k_9 TN_0 Z + k_{11} TBZ - (k_{10} + k_{12} + k_7)Z, \\ \dot{B} &= \tilde{k}_3 TN_0 B - k_{11} TBZ + k_{16} TN_1 B - (k_8 + k_{15} + k_{14} - k_{13})B, \\ \dot{N}_0 &= C_2 + k_2 P + k_{15} B + k_7 Z - \tilde{k}_3 TN_0 B - k_9 TN_0 Z - k_6 N_0, \\ \dot{N}_1 &= C_1 + k_{12} Z + k_8 B - k_{16} TN_1 B - k_1 TN_1 P - k_5 N_1, \end{aligned} \quad \text{П.12}$$



где k_8 – коэффициент выделения бактериопланктоном минерального азота; k_{11} – коэффициент потребления зоопланкто-

ном бактериопланктона; k_{13} – коэффициент азотфиксации бактериопланктона; k_{12} – коэффициент выделения бактериопланктоном молекулярного азота; k_{15} – смертность бактериопланктона; k_{16} – коэффициент денитрификации; \tilde{k}_3 – измененный коэффициент трансформации органического азота.

Нахождение реальной стационарной точки модели. Найдем стационарное значение для бактериопланктона, средняя биомасса которого составляет 1,9 мг/л. 10% от сухого веса составляет азот, а 75% – вода, т.е. получим 0,471 мг/л. Для всего водохранилища $B = 2731,8$ т азота.

Таким образом, получаем (в тоннах азота) стационарную точку модели (П.12):

$$P^0 = 12181; Z^0 = 1299,2; B = 2731; N_0^0 = 38106; N_1^0 = 23200.$$

Поиск коэффициентов. Приравняем к нулю правые части системы (П.13). Из второго уравнения получим $k_{12} = 0,115 \text{ сут}^{-1}$. По результатам исследований $k_{13} = 0,01 \cdot k_0 \approx 3,63 \cdot 10^{-4} \text{ сут}^{-1}$. Предположим, $k_{15} = k_7 = 0,3 \text{ сут}^{-1}$, где k_{15} – смертность бактериопланктона, а k_7 – смертность зоопланктона, т.е. $k_{15} = 0,3 \text{ сут}^{-1}$. Из четвертого уравнения получим $k_{13} = 7,595 \cdot 10^{-7} (\text{C} \cdot \text{T} \cdot \text{сут})^{-1}$.

Для процесса денитрификации примем $k_{16} = k_1 \cdot 10^{-2}$, отсюда $k_{16} = 2,856 \cdot 10^{-10} (\text{C} \cdot \text{T} \cdot \text{сут})^{-1}$. Из пятого уравнения системы (П.12) получим $k_8 = 0,0509 \text{ сут}^{-1}$. Из третьего уравнения следует: $k_{14} = 6,132 \cdot 10^{-5} \text{ сут}^{-1}$.

Список коэффициентов:

$C_1 = 576,4 \text{ т/сут};$	$C_2 = 592,9 \text{ т/сут};$
$k_0 = 2,63 \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1};$	$k_1 = 2,856 \cdot 10^{-8} (\text{C} \cdot \text{T} \cdot \text{сут})^{-1};$
$k_2 = 0,972 \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1};$	$k_3 = 7,595 \cdot 10^{-7} (\text{C} \cdot \text{T} \cdot \text{сут})^{-1};$
$k_4 = 6,012 \cdot 10^{-7} (\text{C} \cdot \text{T} \cdot \text{сут})^{-1};$	$k_5 = 0,0324 \text{ сут}^{-1};$
$k_6 = 8,304 \cdot 10^{-3} \text{ сут}^{-1};$	$k_7 = 0,32 \text{ сут}^{-1};$
$k_9 = 6,012 \cdot 10^{-7} (\text{C} \cdot \text{T} \cdot \text{сут})^{-1};$	$k_{10} = 0,103 \text{ сут}^{-1};$
$k_{11} = 3,006 \cdot 10^{-6} (\text{C} \cdot \text{T} \cdot \text{сут})^{-1};$	$k_{12} = 0,115 \text{ сут}^{-1};$
$k_{14} = 6,132 \cdot 10^{-5} \text{ сут}^{-1};$	$k_{16} = 2,856 \cdot 10^{-10} (\text{C} \cdot \text{T} \cdot \text{сут})^{-1}.$

Модель из шести уравнений

Расширим модель (П.12), разбив компоненту N_1 (минеральный азот) на две составляющие: N_1 – количество аммонийного азота в водоеме и N_2 – количество нитратного азота в водохранилище. Численные значения коэффициентов новой модели, которые отражают те же процессы, что и в предыдущей, остаются прежними.

Блок-схема круговорота азота в Куйбышевском водохранилище уже из расчета шести фазовых переменных изображена на рис. П.4. На основе блок-схемы составлена модель, состоящая из шести обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} \dot{P} &= k_0 P + k_1^1 TPN_1 + k_1^2 TPN_2 - k_2 P - \tilde{k}_4 TPZ, \\ \dot{Z} &= \tilde{k}_4 TPZ + k_9 TN_0 Z + k_{11} TBZ - (k_{10} + k_7 + k_{12}^1 + k_{12}^2) Z, \\ \dot{B} &= k_{13} B + k_{17} TN_1 B + \tilde{k}_{16} TN_2 B + \tilde{k}_3 TN_0 B - k_{11} TBZ - (\tilde{k}_8 + k_{18} + k_{15} + k_{14}) B, \\ \dot{N}_0 &= C_2 + k_2 P - k_{15} B - k_7 Z - \tilde{k}_3 TN_0 B - k_9 TN_0 Z - k_6 N_0, \\ \dot{N}_1 &= C_1^1 + k_{12}^1 Z + \tilde{k}_8 B - k_{17} TN_1 B - k_1^1 TPN_1 - k_5^1 N_1, \\ \dot{N}_2 &= C_1^2 + k_{12}^2 Z + k_{18} B - k_{16} TN_2 B - k_1^2 TPN_2 - k_5^2 N_2, \end{aligned} \quad (\text{П.13})$$

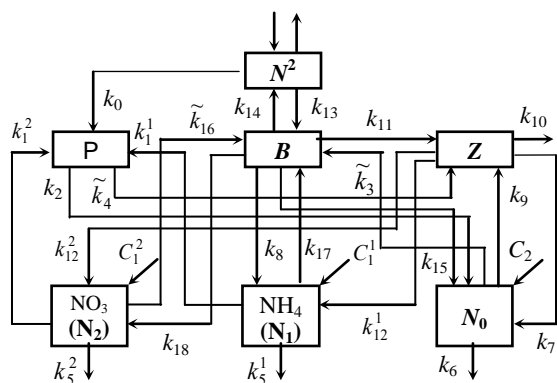


Рис. П.4.

где k_1^1 – коэффициент потребления фитопланктоном аммонийного азота; k_1^2 – коэффициент потребления фитопланктоном нитратного азота; k_{12}^1 – коэффициент выделения зоопланктоном аммонийного азота; k_{12}^2 – коэффициент выделения зоопланктоном нитратного азота; k_5^1 – коэффициент стока через плотину аммонийного азота; k_5^2 – коэффициент стока через плотину нитратного азота; k_{17} – коэффициент нитрификации; k_{18} – коэффициент выделения бактериопланктоном нитратного азота;

\tilde{k}_8 – видоизмененный коэффициент выделения бактериопланктоном аммонийного азота; \tilde{k}_{16} – видоизмененный коэффициент денитрификации; C_1^1 – поступления в водоем аммонийного азота; C_1^2 – поступления в водоем нитратного азота.

Нахождение реальной стационарной точки модели. Найдем стационарное значение для аммонийного и нитратного азота. Средняя концентрация аммонийного азота $\sim 0,226$ мг/л, а в пересчете на все водохранилище $N_1^0 = 13108$ т. Тогда $N_2^0 = 10092$ т. Таким образом, получаем (в тоннах азота) стационарную точку модели (П.13): $P^0 = 12181$; $Z^0 = 1299,2$; $B^0 = 2731,8$; $N_0^0 = 38106$; $N_1^0 = 13108$; $N_2^0 = 10092$.

Поиск коэффициентов. Приравняем к нулю правую часть системы (П.13).

По условию $k_1^1 TN_1^0 P^0 + k_1^2 TN_2^0 P^0 = k_1 T \tilde{N}_1^0 P^0$.

Отсюда $k_1^1 = \frac{k_1 \tilde{N}_1^0 - k_2 N_2^0}{N_1}$, где \tilde{N}_1 – общий минеральный азот.

Пусть $k_1^2 = \frac{1}{2} k_1 = 1,428 \cdot 10^{-8}$, тогда $k_1^1 = 3,955 \cdot 10^{-8}$ (С·т·сут) $^{-1}$.

Должны выполняться следующие условия:

1. $\tilde{k}_{16} TN_2^0 B^0 = k_{16} TN_1^0 B^0$, откуда $\tilde{k}_{16} = \frac{k_{16} N_1^0}{N_2^0} = 6,566 \cdot 10^{-10}$ (С·т·сут) $^{-1}$.
2. $C_1^1 + C_1^2 = C_1$.
3. $k_5^1 N_1^0 + k_5^2 N_2^0 = k_5 \tilde{N}_1^0$. Пусть $k_5^1 N_1^0 = k_5^2 N_2^0 = \frac{1}{2} k_5 \tilde{N}_1^0$. Тогда $k_5^1 = 0,0287$ сут $^{-1}$ и $k_5^2 = 0,0372$ сут $^{-1}$.
4. $k_{12}^1 Z^0 + k_{12}^2 Z^0 = k_{12} Z^0$ или $k_{12}^1 + k_{12}^2 = k_{12}$. Предположим: $k_{17} = \tilde{k}_3 \approx 7,97 \cdot 10^{-7}$ (С·т·сут) $^{-1}$;
 $k_{12}^1 = k_{12}^2 = \frac{1}{2} k_{12} = 0,0575$ сут $^{-1}$; $C_1^1 = C_1^2 = \frac{1}{2} C_1 = 288,2$ т/сут (по условию 2);

Из шестого уравнения системы (П.13) находим $k_{16} = 0,0138$ сут $^{-1}$. Из третьего уравнения получим $\tilde{k}_8 = 0,0138$ сут $^{-1}$. В пятом уравнении уточним $C_1^1 = 289,54$ сут $^{-1}$.

Список коэффициентов:

$C_1^1 = 289,54$ т/сут;	$C_1^2 = 288,2$ т/сут;
$C_2 = 592,9$ т/сут;	$k_0 = 2,63 \cdot 10^{-3}$ сут $^{-1}$;
$k_1^1 = 3,955 \cdot 10^{-8}$ (С·т·сут) $^{-1}$;	$k_1^2 = 1,428 \cdot 10^{-8}$ (С·т·сут) $^{-1}$;
$k_2 = 0,972 \cdot 10^{-3}$ сут $^{-1}$;	$\tilde{k}_3 = 7,595 \cdot 10^{-3}$ (С·т·сут) $^{-1}$;
$\tilde{k}_4 = 6,012 \cdot 10^{-7}$ (С·т·сут) $^{-1}$;	$k_5^1 = 0,0287$ сут $^{-1}$;
$k_5^2 = 0,0372$ сут $^{-1}$;	$k_6 = 8,304 \cdot 10^{-3}$ сут $^{-1}$;
$k_7 = 0,32$ сут $^{-1}$;	$\tilde{k}_8 = 0,0138$ сут $^{-1}$;
$k_9 = 6,012 \cdot 10^{-7}$ (С·т·сут) $^{-1}$;	$k_{10} = 0,103$ сут $^{-1}$;
$k_{11} = 3,006 \cdot 10^{-6}$ (С·т·сут) $^{-1}$;	$k_{12} = 0,115$ сут $^{-1}$;
$k_{12}^1 = 0,0575$ сут $^{-1}$;	$k_{12}^2 = 0,0575$ сут $^{-1}$;
$k_{13} = 3,63 \cdot 10^{-4}$ сут $^{-1}$;	$k_{15} = 0,3$ сут $^{-1}$;
$k_{14} = 6,132 \cdot 10^{-5}$ сут $^{-1}$;	$k_{17} = 7,97 \cdot 10^{-7}$ (С·т·сут) $^{-1}$;
$\tilde{k}_{16} = 6,566 \cdot 10^{-10}$ (С·т·сут) $^{-1}$;	$k_{18} = 0,0138$ сут $^{-1}$.

П.1.2. Сезонные модели с переменными коэффициентами

По своей структуре сезонные модели не отличаются от моделей с постоянными коэффициентами: они описывают те же процессы и используют те же численные значения коэффициентов. Существенным отличием является только введение в ряд параметров (в явном виде) времени как аргумента.

В качестве переменных величин в этой части будут рассматриваться следующие параметры: температура воды, освещенность и сбросы в водоем азота. Все остальные коэффициенты будут такими же как и в соответствующих моделях с постоянными коэффициентами.

Модель из трех уравнений

Перепишем модель (П.1) уже при условии переменных параметров:

$$\begin{aligned} \dot{P} &= k_0 I(t)P + k_1 I(t)T(t)N_1P - (k_2 + k_4)P, \\ \dot{N}_0 &= C_2(t) + k_2P - k_3T(t)N_0 - k_6N_0, \\ \dot{N}_1 &= C_1(t) + k_3T(t)N_0 - k_1I(t)T(t)N_1P - k_5N_1, \end{aligned} \quad (\text{П.14})$$

где $C_1(t)$ и $C_2(t)$ – сбросы в водоем минерального и органического азота (рис. П.5), определены согласно поступлениям азота в Куйбышевское водохранилище, $T(t)$ – температура воды и $I(t)$ – освещенность воды Куйбышевского водохранилища определены соответственно по рис. П.6.

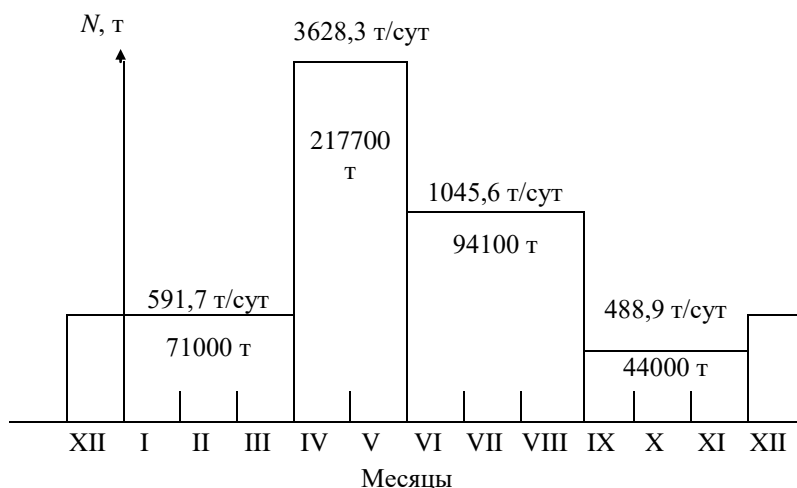


Рис. П.5. Поступление азота в Куйбышевское водохранилище

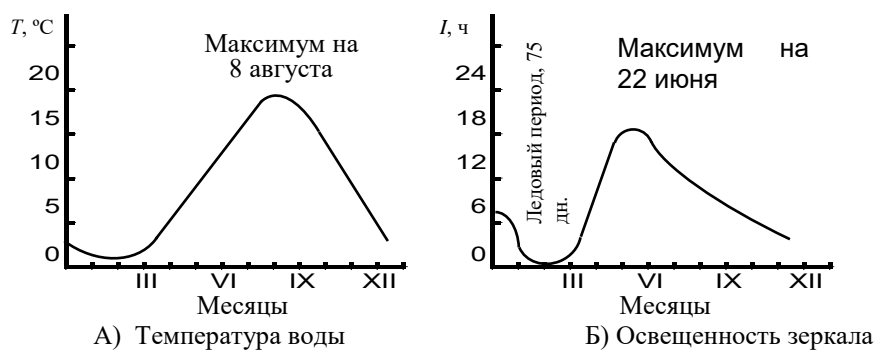


Рис. П.6. Температура и освещенность Куйбышевского водохранилища

Во всех имитационных расчетах временной интервал бра́лся равным 360 дней, а временной шаг – 5 дней.

Аналогичным образом переписем остальные уравнения (П.10), (П.11) и (П.12):

Модель из четырех уравнений

$$\begin{aligned} \dot{P} &= k_0 I(t)P + k_1 I(t)T(t)N_1P - k_2P - k_4PZ, \\ \dot{Z} &= k_4PZ + k_9N_0Z - (k_7 + k_{10})Z, \\ \dot{N}_0 &= C_2(t) + k_2P - k_3T(t)N_0 - k_6N_0 - k_9N_0Z + k_7Z, \\ \dot{N}_1 &= C_1(t) + k_3T(t)N_0 - k_1I(t)T(t)N_1P - k_5N_1, \end{aligned} \quad (\text{П.15})$$

Модель из пяти уравнений

$$\begin{aligned}
\dot{P} &= k_0 I(t)P + k_1 I(t)T(t)N_1 P - k_2 P - k_4 PZ, \\
\dot{Z} &= k_4 PZ + k_9 N_0 Z + k_{11} BZ - (k_{10} + k_{12} + k_7)Z, \\
\dot{B} &= k_{13} I(t)B + k_3 T(t)N_0 B - k_{11} BZ + k_{16} N_1 B - (k_8 + k_{15} + k_{14})B, \\
\dot{N}_0 &= C_2(t) + k_2 P + k_{15} B - k_3 T(t)N_0 B + k_7 Z - k_9 N_0 Z - k_6 N_0, \\
\dot{N}_1 &= C_1(t) + k_{12} Z + k_8 B - k_{16} N_1 B - k_1 I(t)T(t)N_1 P - k_5 N_1,
\end{aligned} \tag{П.16}$$

Модель из шести уравнений

$$\begin{aligned}
\dot{P} &= k_0 I(t)P + k_1^1 I(t)T(t)PN_1 + k_1^2 I(t)T(t)PN_2 - k_2 P - k_4 PZ, \\
\dot{Z} &= k_4 PZ + k_9 N_0 Z + k_{11} BZ - (k_{10} + k_7 + k_{12}^1 + k_{12}^2)Z, \\
\dot{B} &= k_{13} I(t)B + k_{17} BN_1 + \tilde{k}_{16} N_2 B + \tilde{k}_3 T(t)N_0 B - k_{11} BZ - (\tilde{k}_8 + k_{18} + k_{15} + k_{14})B, \\
\dot{N}_0 &= C_2(t) + k_2 P + k_{15} B + k_7 Z - \tilde{k}_3 T(t)N_0 B - k_9 N_0 Z - k_6 N_0, \\
\dot{N}_1 &= C_1^1(t) + k_{12}^1 Z + \tilde{k}_8 B - k_{17} N_1 B - k_1^1 I(t)T(t)PN_1 - k_5^1 N_1, \\
\dot{N}_2 &= C_1^2(t) + k_{12}^2 Z + k_{18} B - \tilde{k}_{16} N_2 B - k_1^2 I(t)T(t)PN_2 - k_5^2 N_2.
\end{aligned} \tag{П.17}$$

Исследование чувствительности моделей и их фазовые портреты

Изучение чувствительности моделей состоит, главным образом, в исследовании особенностей динамики экосистем внутри областей, ограниченных бифуркационными поверхностями, и является дополнительным к качественному исследованию моделей экосистем, в частности, к проблеме устойчивости.

Методы теории чувствительности могут быть использованы для решения двух задач, возникающих при построении динамических многокомпонентных имитационных моделей:

1. на этапе выбора структуры модели и для настройки параметров, обеспечивающих согласование на некотором интервале времени экспериментальных наблюдений и выхода модели. Обычно этот этап построения имитационных моделей сопряжен с большими трудностями, вызванными неопределенностью параметров моделей и связей между компонентами моделей. Как известно, в моделировании экосистем строгие методы для уточнения структуры имитационных моделей отсутствуют. Методы теории чувствительности дают формальный и в определенном смысле оптимальный метод определения поправки, которую надо добавить к предварительно назначенным параметрам модели, а также дают метод поиска существенных параметров модели;
2. на этапе исследования модели уже установленной структуры для отыскания чувствительных компонентов водной экосистемы, определения критических значений параметров при моделировании токсического эффекта, антропогенного эвтрофирования, а также при моделировании синергизма различного типа загрязнений.

Функции чувствительности выявляют те особенности динамики, которые не усматриваются при обычном переборе параметров, а качественные свойства моделей, обнаруженные функциями чувствительности, существенно уменьшают неопределенность моделей обычного типа, обусловленную неточностью исходных параметров (основная трудность имитационного моделирования).

Аппарат теории чувствительности оказывается адекватным сути задачи моделирования антропогенного воздействия на экосистему. Прогноз антропогенного воздействия на экосистему, собственно говоря, и заключается в выявлении тенденции изменения состояния экосистемы.

Если водная экосистема описывается уравнениями состояния

$$\dot{x} = f(x, P, t) \tag{П.18}$$

при $x(t_0) = a$, где x – вектор состояний; P – вектор параметров размерности m ; t – время; $x(t_0)$ – вектор начальных состояний, то дифференциальные уравнения чувствительности первого порядка получаются путем дифференцирования уравнений модели по компонентам P_i :

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial x_j}{\partial P_i} \right) = \frac{\partial f_i}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial P_i} + \frac{\partial f_j}{\partial P_i} \tag{П.19}$$

и по компонентам векторов начальных состояний:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial x_j}{\partial \alpha_i} \right) = \frac{\partial f_j}{\partial x_k} \frac{\partial x_k}{\partial \alpha_i}. \quad (\text{П.20})$$

Начальные условия для уравнений (П.19) и (П.20) имеют вид (П.16) и (П.17) соответственно:

$$\frac{\partial x_j}{\partial P_i}(t_0) = 0, \quad (\text{П.21})$$

$$\frac{\partial x_j}{\partial \alpha_i}(t_0) = \delta_{ji}, \quad \delta_{ji} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \quad (\text{П.22})$$

Уравнения (П.19) и (П.20) решаются совместно с уравнениями состояния (П.13), а полученные функции чувствительности $\frac{\partial x_j}{\partial P_i}$ и $\frac{\partial x_j}{\partial \alpha_i}$ применяются для изучения влияния антропогенных факторов.

Дифференцирование по параметрам и начальным условиям уравнений (П.14) приводит к дифференциальным уравнениям чувствительности 2-го порядка:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial^2 x_i}{\partial \mu_j \partial \mu_k} \right) &= \frac{\partial f_i}{\partial x_a} \frac{\partial^2 x_a}{\partial \mu_j \partial \mu_k} + \left(\frac{\partial^2 f_i}{\partial x_a \partial \mu_k} + \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_a \partial x_b} \frac{\partial x_b}{\partial \mu_k} \right) \cdot \frac{\partial x_a}{\partial \mu_j} + \\ &+ \frac{\partial^2 f_i}{\partial x_a \partial \mu_j} \frac{\partial x_a}{\partial \mu_k} + \frac{\partial^2 f_i}{\partial \mu_j \partial \mu_k}. \end{aligned} \quad (\text{П.23})$$

$$\text{При начальном условии} \quad \frac{\partial^2 x_i}{\partial \mu_j \partial \mu_k}(t_0) = 0, \quad \left[\mu = \begin{pmatrix} P \\ \alpha \end{pmatrix} \right]. \quad (\text{П.24})$$

Функции чувствительности 2-го порядка $\frac{\partial^2 x_j}{\partial \mu_j \partial \mu_k}$ (П.23), (П.24) используются для изучения синергизма антропогенных воздействий.

Таким образом, функции чувствительности показывают, какие из фазовых координат и в какой момент времени наиболее сильно реагируют на изменения того или иного параметра, а также какова реакция системы при воздействии на несколько параметров одновременно.

На рис. П.7 представлена графическая реализация модели (П.17). Отметим, что динамика общих переменных этой модели совпадает как в количественном, так и в качественном отношении с моделью (П.16).

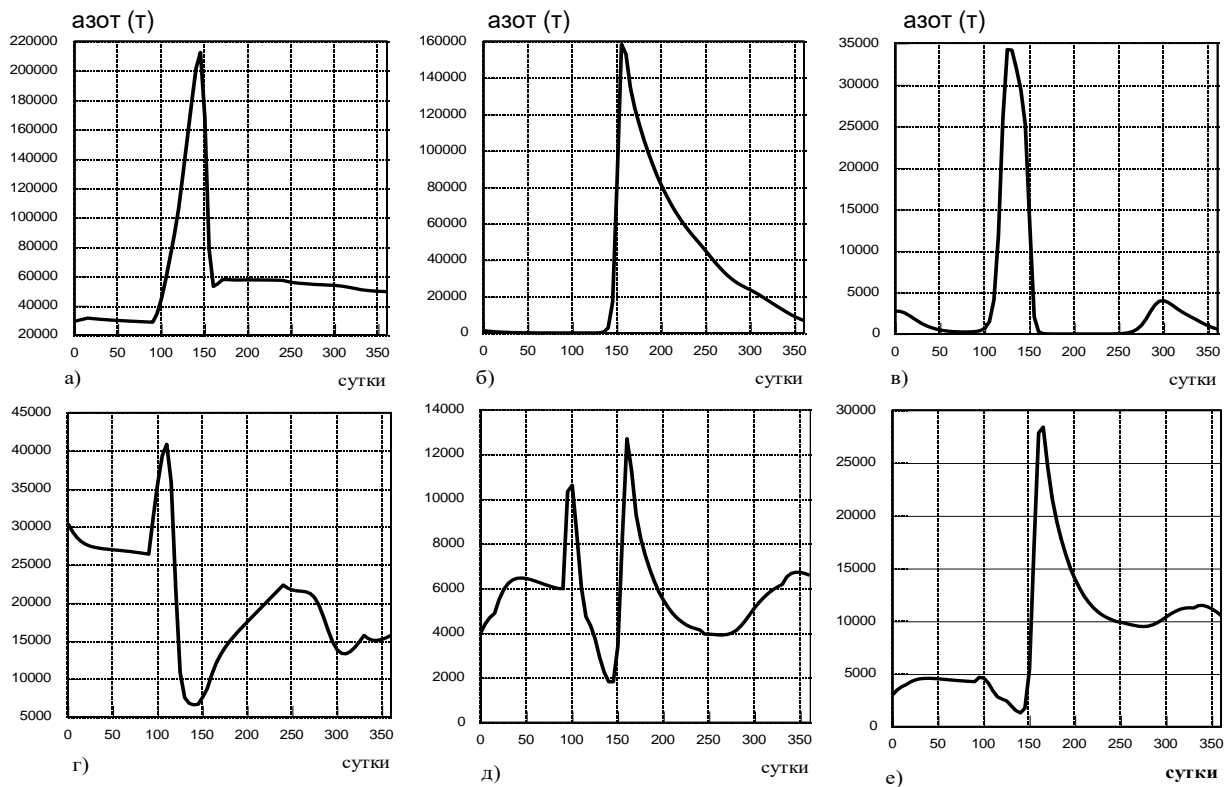


Рис. П.7. Годовая динамика фазовых переменных модели круговорота азота в Куйбышевском водохранилище (6 переменных):
а) фитопланктон; б) зоопланктон; в) бактериопланктон; г) органический азот;
д) аммонийный азот; е) нитратный азот

На рис. П.8 изображены функции чувствительности 1-го порядка по коэффициенту потребления минерального азота фитопланктоном для системы (П.16). Следует отметить наибольшую реакцию системы на изменение параметра потребления фитопланктоном нитратного азота.

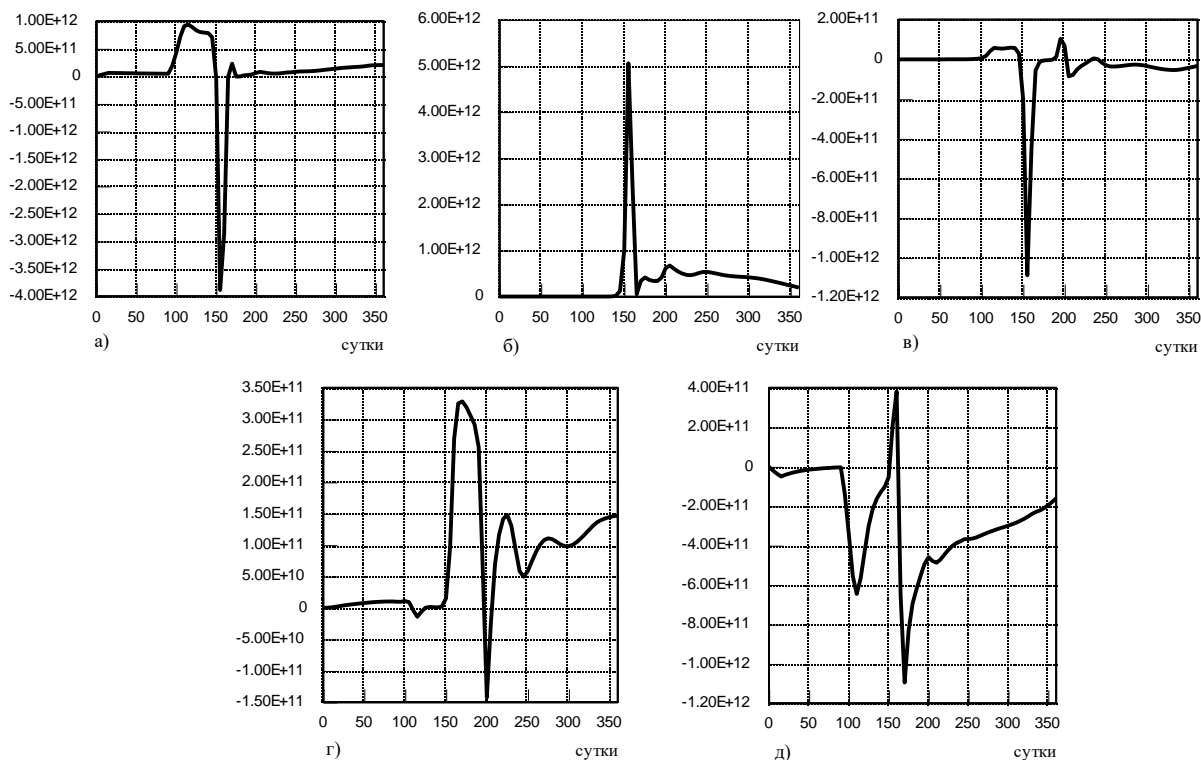


Рис. П.8. Функции чувствительности 1-го порядка фазовых переменных модели круговорота азота в Куйбышевском водохранилище (5 переменных):

а) фитопланктон; б) зоопланктон; в) бактериопланктон;
 г) органический азот; д) минеральный азот

Построенная и синтезированная в результате применения метода связности имитационная модель круговорота азота с переменными параметрами дает возможность исследовать разные аспекты динамики биогенных в водохранилище.

Проведем теперь качественное исследование модели (П.17).

Компонентный анализ, примененный к численным значениям моделируемых переменных показал, что две первые главные компоненты содержат 85 % накопленной дисперсии. В табл.П.1 представлены факторные нагрузки после вращения осей главных компонент по варимаксному критерию.

Таблица П.1

Переменная	Фактор 1	Фактор 2
Фитопланктон	0,20868	-0,90646*
Бактериопланктон	0,27355	0,88999*
Зоопланктон	-0,91284*	0,06036
Органический азот	0,36445	-0,80868*
Аммонийный азот	-0,75069*	-0,48141
Нитратный азот	-0,97176*	-0,11180

Примечание. Звездочкой (*) помечены значения $> 0,7$

Интерпретируя факторы, представленные в таблице П.2, заметим, что фактор 1 связан в основном с минеральными формами азота, а фактор 2 – с органическими формами азота и продуцентами. График проекций для 1 года (360 суток, шаг 5 суток) по первым двум главным факторам представлен на рис. П.9.

Годовой фазовый портрет модели (П.17) отражает почти всю информацию, которую несут в себе сложные графики на рис. П.7 – П.8. Так, с марта по июнь возрастает роль фактора 2, четко наблюдается два пика – весенний (большой) и осенний (меньший). "Прогонка" модели (П.17) на 5 лет и последующее применение вышеизложенного многомерного структурного подхода к качественному исследованию результатов моделирования дает возможность установить устойчивый годовой цикл колебаний обобщенных фазовых координат.

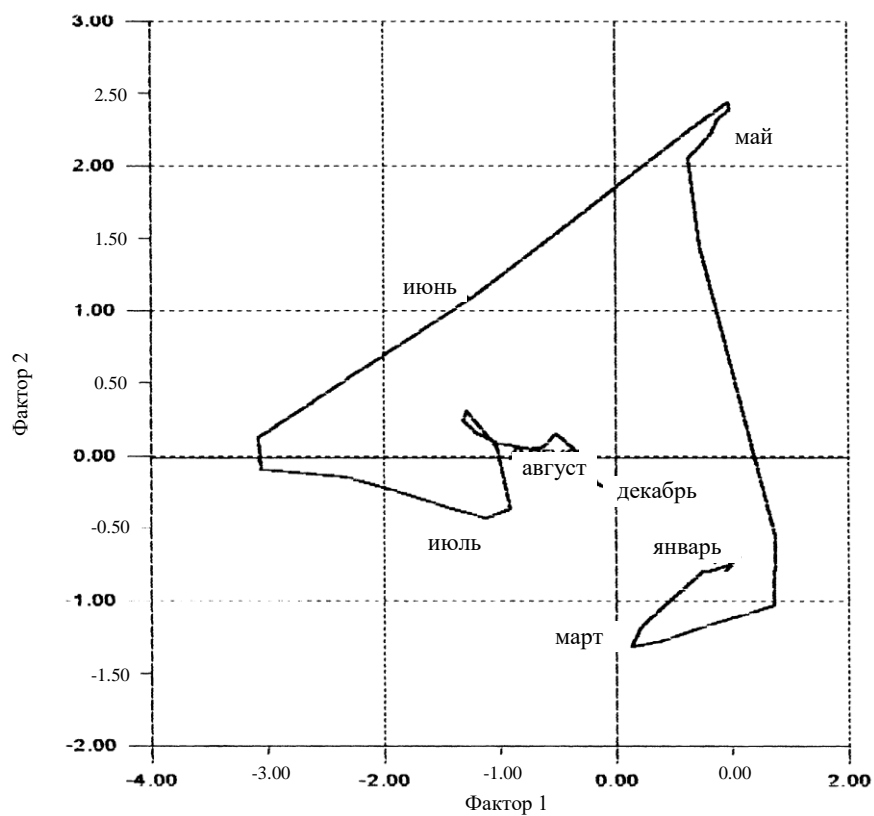


Рис. П.9. Годовой фазовый портрет шестипараметрической модели круговорота азота в пространстве двух главных факторов

С.В. Крестин

Модель трансформации азотосодержащих веществ Куйбышевского водохранилища

Считается, что самым распространенным биогенным элементом в пресноводных водоемах является фосфор, на втором месте находится азот. Поэтому концентрации азота и фосфора в воде часто являются решающими при прогнозировании "цветения воды". Во многих работах (см., например, [Сердюккая, 1984; Леонов, 1989; Леонов и др., 1991; Леонов, Цхай, 1995]) рассматриваются математические модели трансформации соединений азота, фосфора и кислорода в водной среде, а так же их взаимодействие с гидробионтами.

Ниже рассматривается еще одна оригинальная модель, опирающаяся на модели А.В. Леонова и описывающая трансформацию соединений азота в водной среде.

Модель включает в себя 17 переменных состояния водной среды C_i ($i=1-17$): соединения азота (биологические – в биомассах гетеротрофных бактерий BN , фитопланктона FN , простейших PRN , зоопланктона ZON ; химические – в форме растворенного органического DON , аммонийного NH_4 , нитритного NO_2 , нитратного NO_3 , детритного ND [$i=1-9$, соответственно]), соединения фосфора (биологические – в биомассах гетеротрофных бактерий BP , фитопланктона FP , простейших PRP , зоопланктона ZOP ; химические – в форме растворенного органического DOP и минерального DIP ; детритного PD [$i=10-16$, соответственно]) и содержание растворенного в воде кислорода O_2 ($i=17$).

Для оценки условий трансформации биогенных соединений в экосистеме водохранилища используется, так называемое, нульмерное приближение (или приближение полного перемешивания). При этом заведомо пренебрегают пространственной неоднородностью экологических процессов в водохранилище.

Модель экосистемы водохранилища задается уравнением общего вида:

$$d(C_i W)/dt = WR_i + \sum_j Q_j q_{ji} - Q C_i + Y_i, \quad (П.25)$$

где R_i – скорость биохимической трансформации соответствующего соединения C_i , г/(м³ сут); W – объем водохранилища, м³; t – время, сут; Q_j и q_{ji} – расходы реки и боковых притоков и концентрации компонентов в них, м³/сут и г/м³, соответственно; Q – расход пропуска из водохранилища, м³/сут; Y_i – скорости выноса биогенных веществ в водоем со дна и с водосбора (без учета притоков; для O_2 эта переменная описывает реэрацию и поглощение донными отложениями, г/сут.).

Изменение биомассы гидробионтов характеризуется выражением

$$R_i = (U_i - L_i - S_i) C_i - G_i,$$

где $i = 1-4$ и $10-13$ для компонентов N и P , соответственно; U_i , L_i , S_i – удельные скорости потребления веществ, выделения продуктов метаболизма и отмирания гидробионтов, соответственно, сут⁻¹; G_i – скорость выедания гидробионтов согласно схеме их трофических взаимодействий, сут⁻¹ (см., например, [Уморин, 1983]).

Для каждой группы гидробионтов C_i задается ассортимент $Pool_i$ взаимозаменяемых соединений N и P :

$$Pool_i = \sum d_{ij} C_j,$$

где d_{ij} – коэффициенты предпочтения в потреблении субстратов, $\sum d_{ij} = 1$, $0 \leq d_{ij} \leq 1$.

Общее выражение для удельных скоростей потребления задается уравнениями:

$$U_i = \frac{K_i}{1 + (C_i / Pool_i) + (C_{i+9} / Pool_{i+9})} \quad \text{для } i = 1 - 4,$$

$$U_i = \frac{K_{i,9}}{1 + (C_i / Pool_i) + (C_{i,9} / Pool_{i,9})} \quad \text{для } i = 10 - 13.$$

где K_i – максимальная скорость потребления субстратов сут⁻¹, скорректированная по температуре и освещенности.

Скорости потребления U_{ij} гидробионтами C_i отдельных соединений C_j задаются:

$$U_{ij} = \frac{K_i \square d_{ij} C_j}{C_i + Pool_i \square (1 + C_{i+9} / Pool_{i+9} \square)} \quad \text{для } i = 1 - 4,$$

$$U_{ij} = \frac{K_{i-9} \square d_{ij} C_j}{C_i + Pool_i \square (1 + C_{i-9} / Pool_{i-9} \square)} \quad \text{для } i = 10 - 13.$$

Нетрудно видеть, что удельные скорости потребления U_i представляют собой суммы скоростей потребления отдельных U_{ij} веществ:

$$U_i = \sum_j U_{ij} .$$

Скорости метаболических выделений гидробионтов L_i и их смертности S_i составляют определенную долю удельных скоростей потребления и задаются уравнениями:

$$\begin{aligned} L_i &= R_i U_i , \\ R_i &= \alpha_{i1} U_i / (1 + \alpha_{i2} U_i) + 1 - \alpha_{i1} / \alpha_{i2} , \\ S_i &= V_{i1} + V_{i2} C_i / U_i , \end{aligned}$$

где α_{i1} , \square α_{i2} , V_{i1} , V_{i2} – внутренние параметры модели.

Выражения для скоростей трансформации остальных соединений C_i , где $i=5-9$ и $14-17$, имеют вид:

$$\begin{aligned} R_5 &= K_5 C_9 - U_1 C_1 + C_3(L_3 - U_{3,5}) + L_2 C_2 + L_4 C_4 , \\ R_6 &= L_3 C_3 - U_{2,6} C_2 - K_7 C_6 , \\ R_7 &= K_7 C_6 - U_{2,7} C_2 - K_8 C_7 , \quad R_8 = K_8 C_7 - U_{2,8} C_2 , \\ R_9 &= C_3(S_3 - U_{3,9}) + S_2 C_2 + S_1 C_1 - K_5 C_9 + C_4(S_4 - U_{4,9}) , \\ R_{14} &= K_6 C_{16} + L_{11} C_{11} + L_{13} C_{13} - K_9 C_{14} - U_{10} C_{10} + C_{12}(L_{12} - U_{12,14}) , \\ R_{15} &= K_9 C_{14} - U_{11} C_{11} + L_{10} C_{10} , \\ R_{16} &= C_{12}(S_{12} - U_{12,16}) + S_{11} C_{11} + S_{10} C_{10} - K_6 C_{16} + C_{13}(S_{13} - U_{13,16}) , \\ R_{17} &= p_1 U_1 C_1 / (1 + p_2 U_1) - H_1 K_7 C_6 - H_2 K_8 C_7 - H_3(K_1 C_1 + L_2 C_2 + L_3 C_3 + L_4 C_4) , \end{aligned}$$

где \square K_i – константы трансформации веществ, H_i – стехиометрические коэффициенты, p_i – константа фотосинтетического процесса.

При описании кислородного режима учитываются температурные зависимости скоростей потребления O_2 при нитрификации и его выделения при фотосинтезе. В расчетах оцениваются затраты на окисление продуктов метаболизма гидробионтов и поглощение O_2 донными отложениями. Использована зависимость коэффициента реаэрации водной среды от скорости ветра, предложенная для водохранилищ [Bahks, 1975, цит. по: Бреховских, 1988].

Значения максимальной скорости потребления веществ гидробионтами K_{i0} корректируются по температуре и освещенности:

$$K_i = K_{i0} R_{Ti} R_{Li} ,$$

где i – индекс рассматриваемого гидробионта (изменяется от 1 до 4); K_{i0} – оптимальное значение скорости потребления веществ; R_{Ti} и R_{Li} – коэффициенты коррекции по температуре и освещенности соответственно.

Для описания температурной коррекции максимальных скоростей потребления веществ использована экспоненциальная функция:

$$R_{Ti} = A_{i0} + \frac{A_{i1}(\exp(A_{i2}T) - 1)}{1 + A_{i3} \exp(A_{i2}T)} + \frac{A_{i4}(\exp(A_{i5}T) - 1)}{1 + A_{i6} \exp(A_{i5}T)} ,$$

где T – температура воды, $^{\circ}\text{C}$; A_{ik} – константы.

Температурная коррекция скорости трансформации детритных компонентов N и P , соответственно в DON и DOP , задается в модели линейной зависимостью:

$$K_5 = K_{50} T , \quad K_6 = K_{60} T ,$$

где K_{50} и K_{60} – значения параметров при $T = 1$ $^{\circ}\text{C}$.

Температурная коррекция скоростей трансформации неорганических химических соединений осуществлялась в соответствии с зависимостью

$$K_i = K_{i0} \Xi^{(T-20)},$$

где $i = 7-10$ при описании химической трансформации NH_4 до NO_2 , NO_2 до NO_3 , DOP до DIP ; Ξ – температурный коэффициент, равный 1.05; K_{i0} – значения параметров при 20 °С.

Зависимость коэффициента коррекции R_{I2} от условий освещенности имеет вид [Леонов, Цхай, 1995]:

$$\begin{aligned} R_{I2} &= (e / K_I h_0) [\exp(-r_x) - \exp(-r_I)] , \\ r_I &= I / I_0 , \quad r_x = r_I [\exp(-K_I h_0)] , \\ K_I &= K_a + K_b C_4 , \\ I &= I_a [1 + \cos(2 \pi (t - t_p) / f)] , \end{aligned}$$

где t – время суток, I_a – среднесуточная освещенность, f – фотопериод, $t_p=12$ ч, $I_0=350$ кал/(см² сут); K_a , K_b и h_0 – внутренние параметры модели.

Для бактерий, простейших и зоопланктона коррекция соответствующих коэффициентов по освещенности не проводилась и $R_{I1} = R_{I3} = R_{I4} = 1$.

Величина нагрузки Y_i в общем случае может быть представлена в виде:

$$Y_i = J_i \Omega + \omega E_i ,$$

где ω – длина (в м), Ω – площадь зеркала водохранилища (м²); J_i – поток вещества через межфазные поверхности, г/(м² сут); E_i – путевая нагрузка, связанная с поступлением с берегов, кроме учитываемых притоков, г/(м сут).

Для описания потока оседающего детрита используется следующее выражение:

$$J_i^{out} = -k C_i , \quad i=9 \text{ и } 16 ,$$

где k – скорость осаждения (гидравлическая крупность), м/сут.

В след за А.В. Леоновым [1989] считается, что величина потока взвешенного материала со дна в водную среду прямо пропорциональна скорости ветра V , м/с, и обратно пропорциональна глубине водохранилища H , м:

$$J_i^{in} = b_i V / H , \quad i=9 \text{ и } 16 ,$$

Значение $k = 2.0$, $b_9 = 6.4 \cdot 10^{-3}$, $b_{16} = 0.1$ определены при параметризации модели.

Поток O_2 через свободную поверхность водохранилища представлен в виде

$$J_i^{in} = k_r (C_{0i} - C_i) , \quad i=17 .$$

Здесь коэффициент переноса через границу воздух-вода, имеет вид

$$k_r = 0.728 V^{1/2} - 0.317V + 0.037V^2 ,$$

а C_{017} – содержание растворенного кислорода в воде при насыщении, рассчитываемое в зависимости от температуры [Леонов, 1989]:

$$C_{017} = 14.61996 - 0.4042T + 0.00842T^2 - 0.00009T^3 .$$

В практике моделирования кислородного режима водных объектов процесс поглощения O_2 донными отложениями обычно воспроизводится в виде реакции нулевого порядка, так как в широком диапазоне концентраций скорость поглощения не зависит от содержания O_2 в воде [Бреховских, 1988; Мизандронцев, 1991]. Поэтому учитывается лишь температурная зависимость соответствующего потока O_2 :

$$J_i^{out} = J_{0i} (1.09)^{T-20} , \quad i=17 .$$

Здесь J_{017} – поток O_2 при $T=20$ °С, который соответствует конкретному типу донных отложений и характеру окислительно-восстановительных реакций вблизи границы вода-дно. Величина этого потока принимается неизменной и определяется при параметризации модели.

Описанная выше модель достаточно громоздка. Поэтому для иллюстрации проанализируем меньшую по объему модель трансформации только азотосодержащих соединений.

В работах [Леонов, 1989; Леонов, Цхай, 1995] изучаются органический, аммонийный, нитритный, нитратный и дитритный азот, а так же взаимодействие этих форм азота с бактериями, фитопланктоном, простейшими и зоопланктоном.

В нашей модели ради простоты ограничимся рассмотрением взаимодействий только трех видов азотосодержащих соединений (NH_4 , NO_2 , NO_3) и фитопланктона. Здесь применен камерный подход, состоящий в том, что в водоеме исключается пространственная неоднородность и все компоненты считаются идеально перемешанными. Учтены следующие процессы взаимодействия. Аммоний солевой частично поглощается фитопланктоном, частично перерабатывается в нитриты. Некоторое количество нитритов преобразуется в нитраты. Нитраты поглощаются фитопланктоном. Кроме взаимодействия их друг с другом учитывается от-

ток и приток воды и связанный с этим перенос компонентов. Все выше сказанное позволяет записать следующую систему дифференциальных уравнений:

$$\begin{aligned} N_1' &= Q_{PP} N_1^{PP}/W - Q_{OT} N_1/W + (S + M - (1 - \delta)\mu)vB - K_1 N_1 \\ N_2' &= Q_{PP} N_2^{PP}/W - Q_{OT} N_2/W + K_1 N_1 - K_2 N_2 \\ N_3' &= Q_{PP} N_3^{PP}/W - Q_{OT} N_3/W + K_2 N_2 - \delta\mu vB, \end{aligned} \quad (\text{П.26})$$

где N_1, N_2, N_3 – концентрации, соответственно $\text{NH}_4, \text{NO}_2, \text{NO}_3$; K_1, K_2 – коэффициенты не консервативности для аммонийного и нитритного азота; S, M, μ – скорости осаждения, смертности и роста фитопланктона, v – стехиометрический коэффициент, характеризующий содержание азота в единице сухого веса биомассы фитопланктона; δ – доля нитратного азота в потреблении азота фитопланктоном; Q_{PP}, Q_{OT} – количество втекающей и вытекающей из камеры воды, W – объём камеры, B – концентрация фитопланктона (см. [Рекомендации по прогнозированию..., 1984]):

$$B = -b/a + (B_0 + b/a)\exp(at/\varepsilon_1),$$

где:

$$a = \varepsilon_1(\rho + S + M + Q/W), \quad b = \mu/H - \varepsilon_0(\rho + S + M + Q_{OT}/W) + Q_{PP}\varepsilon_1 B_{PP\Phi}/W,$$

ρ, S, M – скорость респирации, осаждения и гибели фитопланктона, соответственно; ε_0 – коэффициент поглощения света водой при отсутствии фитопланктона; ε_1 – коэффициент поглощения света в результате развития фитопланктона; B_0 – начальная концентрация фитопланктона; $B_{PP\Phi}$ – концентрация фитопланктона в поступающей в камеру воде; H – средняя глубина камеры; t – время.

Введем обозначения:

$$\alpha = \frac{\mu}{\varepsilon_1 H(\rho + S + M + Q_{OT}/W)} + \frac{Q_{PP} B_{PP\Phi}}{W(\rho + S + M + Q/W)},$$

$$\beta = B_0 - \alpha \quad \gamma = (\rho + S + M + Q/W).$$

Тогда:

$$\begin{aligned} b/a &= -\alpha, \quad B_0 - b/a = B_0 - \alpha = \beta, \quad a/\varepsilon_1 = -\gamma \quad \text{и} \\ B &= \alpha + \beta \exp(-\gamma t). \end{aligned} \quad (\text{П.27})$$

Решая уравнения системы (П.26) с учетом (П.27), после несложных выкладок получаем:

$$N_1 = A_1 \exp(-a_1 t) + E_1 + F_1 \exp(-\gamma t),$$

где: $a_1 = K_1 + Q_{OT}/W$,

$$\begin{aligned} A_1 &= N_1^0 \frac{Q_{PP} N_1^{PP} + W(S + M(1 - \delta)\mu)v\alpha}{a_1 W} - \frac{(S + M - (1 - \delta)\mu)v\beta}{a_1 - \gamma}, \\ E_1 &= \frac{Q_{PP} N_1^{PP} + W(S + M(1 - \delta)\mu)v\alpha}{a_1 W}, \quad F_1 = \frac{(S + M - (1 - \delta)\mu)v\beta}{a_1 - \gamma}, \end{aligned}$$

N_1^0 – начальная концентрация аммонийного азота.

$$N_2 = A_2 \exp(-a_2 t) + E_2 + D_2 \exp(-a_1 t) + F_2 \exp(-\gamma t),$$

где: $a_2 = K_2 + Q_{OT}/W$,

$$\begin{aligned} A_2 &= N_2^0 \frac{Q_{PP} N_2^{PP} + K_1 E_1 W}{a_2 W} - \frac{K_1 A_1}{K_2 - K_1} - \frac{K_1 F_1}{K + Q/W - \gamma}, \\ E_2 &= \frac{Q_{PP} N_2^{PP} + K_1 E_1 W}{a_2 W}, \quad D_2 = \frac{K_1 A_1}{K_2 - K_1}, \quad F_2 = \frac{K_1 F_1}{K_2 + Q_{OT}/W - \gamma}, \end{aligned}$$

N_2^0 – начальная концентрация NO_2 .

$$N_3 = A_3 \exp(-a_3 t) + E_3 + D_3 \exp(-a_1 t) - A_2 \exp(-a_2 t) + F_3 \exp(-\gamma t),$$

где: $a_3 = Q_{OT}/W$,

$$A_3 = N_3^0 - \frac{Q_{PP}N_3^{PP} - K_2WE + \delta\mu\nu\alpha W}{Q_{OT}} + A_2 + \frac{K_2D_2}{K_1} \frac{K_2F_2 - \delta\mu\nu\beta}{Q_{OT}/W - \gamma},$$

$$D_3 = \frac{K_2D_2}{K_1}, \quad E_3 = \frac{Q_{PP}N_3^{PP} + K_2WE_2 - \delta\mu\nu\alpha W}{Q_{PP}}, \quad F_3 = \frac{K_2F_2 - \delta\mu\nu\beta}{Q_{PP}/W - \gamma},$$

N_3^0 – начальная концентрация NO_3 .

Расчеты производились по однокамерной модели с шагом в 10 дней на общем промежутке времени в 1 год. Коэффициенты, при которых производились вычисления, приведены в следующей таблице:

Таблица П..2.

Коэффициенты, при которых производились расчеты

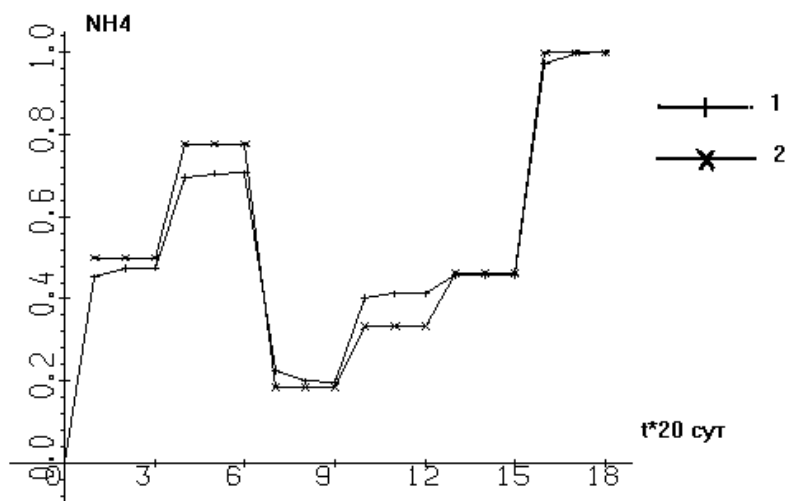
K_1	0.207	H	30.0
K_2	10.0	B_0	0.000305733
P	0.5	N_1^0	0.001
M	0.5	N_2^0	0.00002
S	0.6	N_3^0	0.14
μ	0.02	Q_{OT}	0.503
ν^*	0.08	Q_{PP}	0.503
ε_I	9.0	W	6.642
δ	0.1		

Параметры, отмеченные *, взяты из работы [Рекомендации по прогнозированию.., 1984], остальные получены экспериментально в ходе расчетов.

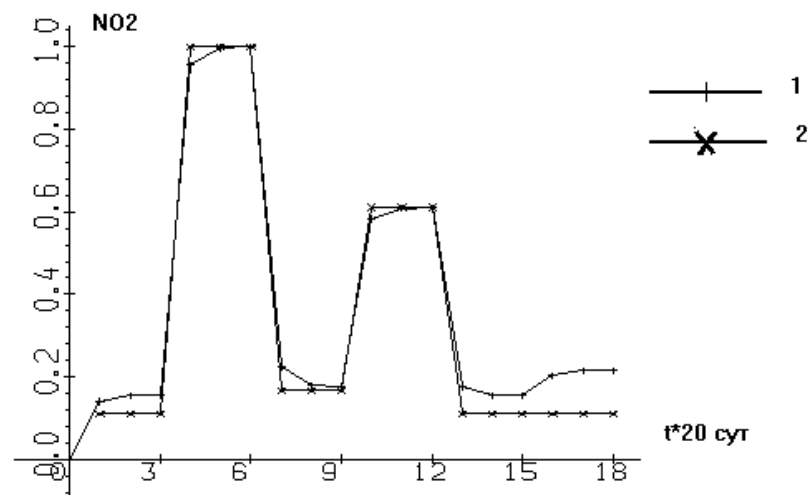
На вход камеры подавались концентрации, взятые из наблюдений, произведенных в 1988 г. на Приплотинном плесе Куйбышевского водохранилища [Паутова, Номоконова, 1994]. В ходе расчетов выявилось хорошее совпадение данных, взятых из наблюдений с расчетными (см. рис. П.10-П.13). На каждом рисунке оба графика нормированы на единицу, то есть максимальное значение как экспериментальных, так и теоретических данных равно единице.

Графики на этих рисунках состоят из достаточно сложных сочетаний "впадин" и "поднятий", как для кривых наблюдений, так и для расчетных кривых. Сам характер совпадений поведения экспериментальных и теоретических кривых свидетельствует о высокой степени количественной адекватности рассмотренной модели. Сезонная динамика концентрации фитопланктона (рис. П.13), кроме того, демонстрирует качественную картину трех пиков "цветения": весеннего (незначительный), летнего и осеннего.

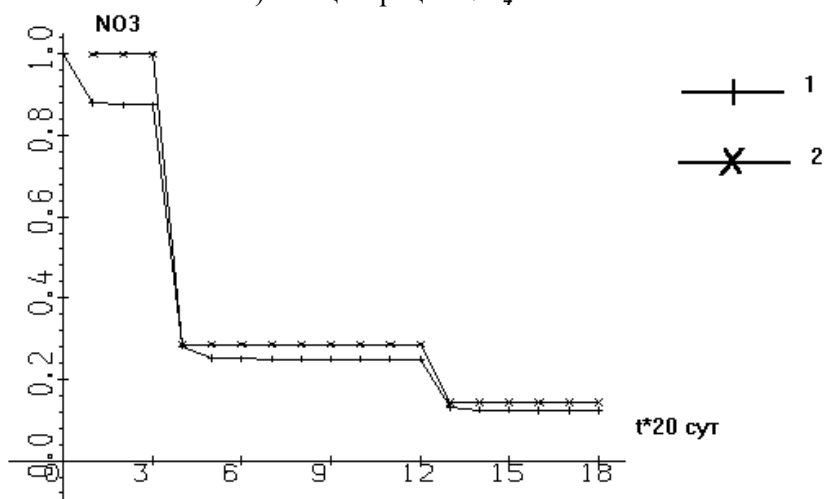
Дальнейшее совершенствование модели может идти, например, в направлении "корректировки" превышения расчетных значений над экспериментальными "поднятиями" и "впадинами".



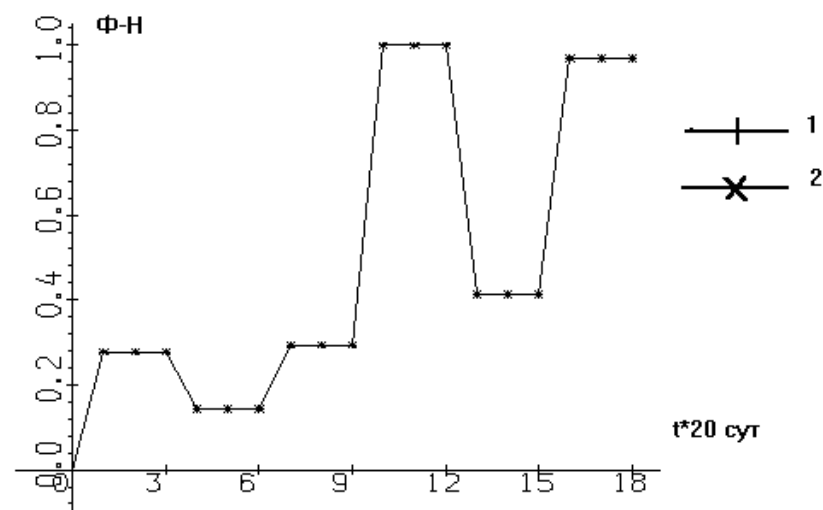
а) Концентрация NH_4



б) Концентрация NO_2



в) Концентрация NO_3



г) Концентрация фитопланктона

Рис. П10. Зависимость нормированных концентраций ингредиентов от времени t (1 – результаты моделирования, 2 – наблюдения)

ВИРТУАЛЬНЫЙ РАЗГОВОР АВТОРОВ С РЕЦЕНЗЕНТАМИ

Мем № 38: *«Поэт: ...Ты рьяный чтец, но критик дикий.
Так я, по-твоему, - великий, повыше Пушкина поэт?
Скажи, пожалуйста?!»*

*Гражданин: Ну, нет!
Твои поэмы бестолковы, твои элегии не новы,
Сатиры чужды красоты, неблагозвучны и обидны,
Твой стих тягуч...»* Н.А. Некрасов "Поэт и гражданин"

В процессе подготовки монографии мы ознакомили с ее текстом своих коллег—математиков и биологов, разослав им электронные вложения от Томска до германского Геттингена. Они взяли на себя труд внимательно прочитать рукопись, и при этом высказали немало ценных советов и замечаний. Часть из них мы учли в окончательном варианте, который читатель держит в руках. Но наша дискуссия по отдельным пунктам рецензий показалась нам столь интересной, что мы сочли возможным представить ее в форме виртуальной беседы, "стенографический" отчет о которой и представлен ниже.

Действующие лица:

ВШ, ГР, ТЗ – Владимир Шитиков, к.т.н., Геннадий Розенберг, чл.-корр. РАН, Татьяна Зинченко, к.б.н. (ИЭВБ РАН) – авторы;

НЦ – др. Натан Цейтлин, Институт Макса Планка (Геттинген, Германия);

ВЛ – Василий Леонов, доцент кафедры прикладной информатики Томского государственного университета, редактор электронного журнала "Биометрика";

ДФ – Дмитрий Филимонов, к.ф.-м.н., вед. науч. сотр. лаборатории структурно-функционального конструирования лекарств Института биомедицинской химии РАН;

NN – анонимные рецензенты журналов эколого-биологического профиля.

ВЛ: Поздравляю вас с хорошей работой, которую по достоинству оценят многие читатели. Ваша книга меня очень порадовала своей глубиной, авторской увлеченностью и незаурядным кругозором авторов! Что в наше время встречается не часто. Однако я не вполне уверен в том, что вы сами ее сейчас оцениваете адекватно. Таких книг сейчас практически нет. Если вы издаете ее малым тиражом и в малоизвестном издательстве, книгу читатель не узнает. Поэтому настоятельно рекомендую не выкладывать ее в свободный доступ в интернете, а искать хорошее издательство. Книгу купят многие. Я обещаю сделать ей хорошую рекламу на своем сайте. Только если будете издавать в хорошем издательстве, почти всю графику надо переделывать. Графика бледная...

ВШ, ГР и ТЗ: Спасибо, Василий, за столь благоприятный отзыв на наш скромный труд.

ВЛ: О слове «интернет». Согласно современным доводам филологов его надо писать с маленькой буквы...

ВШ: Неисповедимы пути русского языка. Скоро, наверное, будут писать с маленькой буквы и windows и билл гейтс.

ВЛ: Говоря «А», вы не всегда развиваете ключевые для существа дела мысли. Например, на стр. 28 вы цитируете Е.П. Воробейника с соавторами [1994], который предлагает критические значения оценивать с использованием толерантных множителей, используемых в математической теории надежности. Определеннее было бы вам рассказать о коэффициенте k , ссылаясь на теорию толерантных интервалов в статистике. Это не то же самое, что доверительные интервалы. Можете посмотреть краткое изложение толерантных интервалов в книге П. Мюллера с соавторами [1982].

ВШ: Мы бы с удовольствием рассказали еще о многом и объяли все необъятные просторы статистики, но помним предостережение Козьмы Пруткава.

НЦ: К списку основополагающей литературы, упомянутому во введении, я бы добавил и другие великолепные книги, которые приятно читать не только биологу, но и любому математику и исследователю: В.Ю. Урбаха [1964], В.В. Александрова и В.С Шнейдерова [1984], Е.В.Гублера и А.А. Генкина [1973].

ВШ: Но тогда нам нужно добавить сюда и Вашу Интернет-монографию "Из опыта аналитического статистика", помещенную на сайте <http://matstat.gmxhome.de>. Особенную ценность пред-

ставляет там раздел "Рекомендуемая литература по математической теории эксперимента", содержащий проиндексированный список нескольких сотен книг на русском языке с Вашими комментариями. Но вспомните эпиграф к этому разделу: «*Не надо читать много книг*» (Мао Дзэ Дун). Я бы вспомнил и подкорректированную фразу из Экклезиаста «*И далее предупреждаю тебя, сын мой, в делании множества книг нет конца и многие их изучения – суть утомления плоти*». Но, если серьезно, – авторам было очень трудно исчерпывающе охватить всю литературу, небезынтесную для углубления рассматриваемых проблем, как, впрочем, и список самих этих проблем.

ВЛ: Мне очень понравился раздел 2.4. "Математические модели в экологии". Рекомендую его дополнить работами В.В. Налимова, в частности, его книгой "В поисках иных смыслов", в которой он весьма остро ставит вопрос о том, в какой мере современная наука является "научной"? Немало интересного по этой теме и в его последней книге "Разбрасываю мысли". Спасибо за цитирование отдельных фрагментов моих статей. Но, чтобы читателю удобнее было найти первоисточник, лучше бы после каждого такого фрагмента давать точную ссылку.

ВШ: Признаемся, грешны. Если где-то встречали нетривиальную мысль или малоизвестный интересный факт, то старались повзаимствовать. И если где-то опускали точный адрес первоисточника, то только из стремления не перегружать текст "именами, адресами, явками, паролями...". Читателю не всегда интересно, кто первым обратил внимание на тот или иной факт. Кстати, приведу цифры цитируемости фамилий отдельных персоналий по тексту книги: Г.С. Розенберг – 64, Р. Фишер – 59, А.Н. Колмогоров – 30, А.Ф. Алимов – 25, В.В. Налимов – 14, В.П. Леонов – 11, В.К. Шитиков – 10. Вы, Василий, находитесь во вполне приличной компании.

ГР: Готов констатировать, что это не плагиат, а хорошая память...

ВЛ: Далее, вы пишете: «*Основной задачей регрессионного анализа является идентификация вида восстанавливаемой функциональной зависимости $Y \approx f(X)$* ». Но регрессионное уравнение является статистической или, вернее, стохастической зависимостью. И в этом случае некорректно говорить о функциональной зависимости. Это антиподы – функция и вероятностная зависимость.

ВШ: Признаться, я не знаю, что такое в природе "функциональная зависимость" без предлога "вероятностная". В реальном мире детерминированных функций просто не бывает – даже движение Земли вокруг Солнца подвергается массе возмущений.

ВЛ: Владимир, Вы просто "перегибаете палку"! Вспомните школьную алгебру, вузовскую аналитическую геометрию и т.д. Одно дело говорить о моделях реальных процессов, и совсем иное – в принципе отвергать существование такого понятия как функция. На днях я на сайте "Биометрика" открыл новый раздел, посвященный А.Н. Колмогорову в связи со столетием со дня его рождения. Так вот, его теория вероятностей построена полностью на функциях.

ВШ: Ох, мой дорогой доцент! Не знаю, насколько имеет смысл продолжать "функциональную" дискуссию, но что-то зацепило. Попробуем «*отделить мух от котлет*». В анфиладе миров, с которыми сталкивается человек, можно выделить два обособленных, но взаимно влияющих мира:

- *Абстрактный мир математики*, включающий и математический анализ в его детерминационной ипостаси и методы исследования стохастических процессов (теория вероятностей, математическая статистика и пр.). Как любой абстрактный мир он абсолютно точен и однозначен. Например, окружность – вполне однозначное математическое понятие и способ вычисления ее длины достаточно детерминирован (в смысле точности определения величины π);
- *Реальный мир физических, химических, биологических и прочих процессов*. Все эти процессы принципиально многофакторны, нестационарны и стохастичны. В них просто нет ни функций, ни детерминизма. В некотором приближении детерминированными процессами можно назвать лишь некоторые внутримолекулярные явления.

НЦ: Нельзя! Понятия «в некотором приближении» и «детерминированные» логически не совместимы.

ВШ: Например, длина волны одной спектральной линии криптона почти в точности равна $6.0378 \cdot 10^{-7}$ м. Процесс атомного излучения изотопа Kr^{86} можно назвать "в некотором приближении" детерминированным процессом, что и было использовано в качестве эталона меры длины вместо известной платиновой болванки. Аналогично принят и эталон времени. Но, дело не в этом. Изучение процессов реального мира заключается в приспособлении ("восстановлении" по В.Н.Вапнику) некоторой приглянувшейся абстрактной функции из математического мира для описания имеющихся эмпирических данных. Это проделывали и И. Ньютон, и Г. Ом, и А.Майкельсон (для вычисления скорости света). Возникали "законы", имеющие внешне детерминированную внешность, но вероятностные (как любая модель вообще) по своей природе, поскольку процесс реального мира и приспособленная для его описания математическая "функция" принципиально неидентичны.

- НЦ:** Переход "закономерности" в "закон" – это переход количества в качество. Но, тем не менее, закономерность и закон – разные вещи. Закон (природы, в частности) не знает исключений – иначе это не закон, а закономерность или правило.
- ВШ:** Например, Вы вышли на футбольное поле исследовать реальный центральный круг. Измерили 20 раз длину окружности и радиус и оценили по уравнению регрессии число π . Оно может варьироваться от 3.05 до 3.3, потому что Ваш круг может являться и не кругом вовсе, а эллипсом и нужно вести расчеты по иной формуле. Или Вы неточно находили центр окружности, радиус и проч. "Закон" в виде формулы или модели и реальный процесс никогда не совпадают.
- НЦ:** Но мне кажется, нам тут нечего рассуждать. В любом учебнике по математическому моделированию эти вопросы толково разобраны. Могу открыть и процитировать.
- ГР:** И опять я готов констатировать, что эта дискуссия о соотношении случайности и детерминированности не конструктивна. Мне представляется, что должно существовать понимание того, что это – «две стороны одной медали» и очень многое определяют цели исследования (объяснение, прогноз, измерение и пр.).
- ВШ:** Отнюдь, нет: мы потихоньку уткнулись в ключевой вопрос системологии: "что есть СИСТЕМА?". Если СИСТЕМА – это и есть сам реальный мир, то это представление имеет право на жизнь, но в практических целях оно малопродуктивно. Рациональнее предложить другое понятие «системы» (а значит и ЗАКОНА системы) – "это ОТОБРАЖЕНИЕ в мозгу исследователя некоторых *наблюдаемых свойств* реального мира, необходимых для решения поставленной задачи". Отсюда следствие: "система не может быть СЛОЖНОЙ". Утверждая так, исследователь либо неверно обозначил цели, либо привлек незначимые факторы, либо не нашел пути вычленения главного индикаторного показателя («нет фригидных женщин, а есть только неумелые любовники»). И.Ньютон, например, поставил своей целью оценить силу физического взаимодействия между телами. Он сконструировал специально для этой цели СИСТЕМУ взаимно влияющих материальных тел, нашел (вероятно, статистически!) закономерность в виде регрессионного уравнения и назвал ее ЗАКОНОМ всемирного тяготения. Так где та грань между законом и закономерностью? Понятно, что отличие между ними – в мере всеобщности. Но тогда надо разработать принципы измерения всеобщности. Одна моя шефиня, готовя докторскую диссертацию по экономике, открыла двадцать с лишним новых экономических законов рационального природопользования при социализме, которые вскорости благополучно загнулись...
- НЦ:** Вот Вам и примеры закономерностей... Все-таки я не во всём согласен как с Марксом, так и с Каутским! Моделируемые процессы имеют принципиально разную внутреннюю сложность, а сложность модели должна быть адекватна сложности процесса.
- ГР:** Совершенно верно. Взаимодействие двух шариков может быть описано по Ньютону простой формулой, взаимодействие двух популяций из хищников и их жертв – одним дифференциальным уравнением. Совершенно другое дело – модель экосистемы даже небольшого озера. В противоположность оценке вещественно-энергетических параметров простых физических систем, исследование экологических систем связано с изучением сложных морфофункциональных параметров. Описания экосистем нельзя "вогнать" в простые уравнения, поскольку аналитические модели отдельных качеств не адекватны принципам поведения всей системы в целом.
- ВШ:** Все зависит от поставленной задачи. Однако предлагаю закрыть тему и двинуться дальше.
- НЦ:** В главе 3 вы приводите хороший критический анализ показателей химического загрязнения воды. Убедительно, но одна загвоздка. Все показатели суть – случайные величины! Значит их сравнение с эталоном – предмет теории проверки статистических гипотез!
- ВШ:** Именно эта причина и побудила нас дополнить главу разделом 3.7.
- НЦ:** Я не совсем удовлетворен формой его изложения. В теории статистики приняты определённые нормы языка и обозначений. Хотелось бы их придерживаться, а вы этим грешите на протяжении всей книги. В частности, статистические параметры (константы) принято обозначать греческими буквами, а их статистические оценки – латинскими (или греческими же с "крышечкой"). Наконец, трудно понять, что к чему, из-за отсутствия примеров.
- ВШ:** Замечание по "нормам языка" справедливо. А пример мы не дали по следующим причинам.
Во-первых, мы не очень согласны с Вашим тезисом о "независимости" измерений концентраций отдельных ингредиентов. Все данные многокомпонентного химического анализа в пространственно-временном аспекте являются, как правило, СОПРЯЖЕННЫМИ. Тут правильно говорить о статистических оценках варьирования самого показателя μ , как суммы нормированных на ПДК концентраций n ингредиентов, измеренных в одной

точке в одно и то же время. Эти статистики должны быть рассчитаны по единым формулам, т.е. как и для остальных независимых столбцов.

Во-вторых, нам видится целая "матрешка" задач от простейшей к наиболее сложной:

- а). Есть один сформулированный критерий качества воды μ и альтернатива гипотез: больше или меньше μ некоторого порогового значения ρ (в Вашей интерпретации $\rho = 1$);
- б). Далее, перейдем от двух классов "чисто - грязно" к шести гостированным классам качества воды. Тогда нужно пять раз выполнить проверку гипотезы (а) для разных пороговых значений ρ (например, $\rho = 0.5, 0.8, 1, 2.5$ и 5). Получается вектор из пяти значений α -вероятностей.
- в). В условиях задач (а) и (б) критерий качества воды не один, а несколько, например, "Концентрация химических примесей", "Показатель биологического разнообразия фауны", "Показатель рекреационного и эстетического благополучия водоема", причем граничные значения для всех классов определены. В итоге вычислений как в разделе 3.7. получается матрица из 3×5 α -вероятностей. А вот что с ней делать дальше? В этом и суть проблемы.

НЦ: Верно ли я понял, что μ может быть равно, скажем, 2.6 и мы отнесём эту грязь к классу качества 4? Тогда и так ясно, что об остальных классах качества можно не беспокоиться и рассматривать только сравнение μ с ближайшей пороговой величиной 2.5!

ВШ: Альтернативная оценка "чисто-грязно" безобразно груба – для любой реки всегда можно найти такую пробу, где какой-нибудь компонент превысит ПДК. А нужная граница между классами находится как вероятность максимально приближенная к критической. Но для этого надо вычислить весь вектор вероятностей.

НЦ: Со временем эту задачу можно подробно разобрать, построить графики, номограммы, всё будет легко считать. Только, насколько я понимаю, в каждой пробе воды мы имеем дихотомизм: или она чистая, или грязная! А "среднее" (это тот самый индекс ИЗВ, который меня *ИЗВ-одит!*) – есть, по моему, "средняя температура по больнице". Кстати, Вы, наверное, будете смеяться, но "средняя температура тела людей, заболевших одной болезнью" – вполне легитимная статистика! Только есть один нюанс: она не интерпретируемая! Просто она имеет размерность температуры и является неким эмпирическим коэффициентом в формуле для вероятностных расчётов. Её можно, например, использовать для расчёта вполне интерпретируемой *области допустимых значений* (см. Л.Н. Большев и Н.В. Смирнов [1968]) *температуры* гриппозных больных в критическом периоде их заболевания. То же можно сказать и об ИЗВ.

ВШ: ИЗВ не столь уж плох, как Вы его ругаете. Во-первых, это – единственная утвержденная на уровне министерства методика оценки загрязнения в шести-балльной шкале. Во-вторых, усреднение идет всегда строго по шести компонентам и, если компонентов измерено менее шести, то расчет просто не производится. В этих условиях сумма Σ и среднее M функционально идентичны $M = \Sigma/6$ или $\Sigma = 6M$.

НЦ: Извините! Ваша река Сок – объект с распределёнными (по её длине и времени) параметрами физических свойств. В одних пробах $\mu < 1$ (чистая), в других – $\mu > 1$ (грязная). А как брать пробы на объекте – это не дело предметной науки (гидрологии, в вашем случае), а методов рандомизации и ГОС-Тов. И считать надо не ИЗВ: как я уже писал, это не интерпретируемая статистика, хоть трижды утвержденная бюрократами! Нужно оценивать долю "чистых" проб по отношению ко всем пробам, причем интерпретация результатов должно быть с распределёнными статистическими параметрами, как и сам объект.

ВШ: Вы, Натан, давно не были в России и забыли, что не параметры, а деньги здесь так мастерски распределяются, что их никто не найдет, тем более, на тщательные гидрохимические исследования... Что касается Вашего подхода, то, по моему посконному мнению, в этом объективном мире есть только два вида измерений: простая выборка (или вектор измерений) и многомерная матрица СОПРЯЖЕННЫХ наблюдений (т.е. n различных показателей измерены при условии единства места и времени измерения). И БОЛЬШЕ НИЧЕГО. Есть некоторые попытки некоторых субъектов назвать многомерным пространством измерений некоторую совокупность несвязанных между собой простых выборок, но я, как честный программист и гидробиолог, с такими данными ничего общего иметь не хотел бы. А что же все-таки нам делать с несколькими частными критериями качества вод?

НЦ: Попробуйте использовать методику многокритериального экспертного оценивания (МЭО), подробно представленную в моей книге.

ВШ: Да, эксперты стоят дешевле (и потому легче покупаются). Из того, что я понял в МЭО, все сводится к одной формуле. Имеется n частных критериев качества K_i и общий критерий качества K_{cp} рас-

считывается как средневзвешенное из этих значений: $K_{cp} = \sum B_i * K_i / \sum B_i$, где B_i – некоторые веса. Остальное – сплошные частности, которые заключаются в многоярусном способе расчета B_i . В гидробиологии такой подход использовали многие: и Е.В. Балушкина, и В.И. Баканов, и наш соавтор Т.Д. Зинченко.

Кстати, Ваша «статистическая оценка обобщенного среднего взвешенных частных критериев качества – ОСВ СО ЧКК» (ух, правильно?) мало съедобна без какой-либо оценки ошибки или доверительного интервала. Т.е. является такой же не интерпретируемой статистикой, как и ИЗВ.

Честно говоря, я с большим сомнением отношусь к средним (или средневзвешенным) величинам, особенно, когда надо определить класс или категорию (в нашей книге это постоянно подчеркивается). Для убедительности по этому поводу приведу следующий пример. Пусть в некоей Государственной Думе образовался комитет, состоящий из 12 чел, в том числе:

- Правые партии – 5 чел.
- Центр ("партия власти") – 1 чел.
- Левые партии (коммунисты) – 6 чел.

Нужно выбрать председателя, но мнения разделились. Обратились к специалисту по экспертному оцениванию г-ну Z. Он предлагает следующую методику:

«Вводим для каждой партии "балл левизны" от 1 (Немцов) до 9 (Зюганов). Партии центра дадим балл 6. Тогда средний критерий левизны комитета: $(1 \cdot 5 + 5 \cdot 1 + 9 \cdot 6) / 12 = 6.1$. Т.к. ближе всего к этому критерию "партия власти", то следует избрать председателем ее представителя». Через некоторое время Президент вручает в Кремле г-ну Z премию за выдающиеся заслуги в области науки и техники. Вы спросите, "причем тут Президент?" А я Вам скажу, что именно таким образом оценивают класс качества воды по индексам сапробности, используя формулу Пантле-Букка.

Далее, веса B_i можно оценивать тремя методами:

- собрать шеренгу экспертов, как это делаете Вы, и заставить их пробаллировать ситуацию (собрать то можно, да где их взять и чем кормить?);
- придумать для ранжирования важности каждого частного критерия какое-нибудь аналитическое выражение (например, каждой пробе присвоить ценность, увеличивающуюся по мере приближения даты наблюдения к 1 июля, когда гидробиологические тесты имеют наименьшую погрешность);
- использовать для расчета значений весов методы оптимизации, доставляющие, например, минимум ошибки распознавания.

Третий метод с использованием коллектива предикторов наиболее перспективен, наименее субъективен и описывается в нашей предыдущей книге "Экологическое прогнозирование" [Розенберг и др., 1994а]. К сожалению, для него необходима обучающая выборка с реками, для которых точно известен объективный класс качества. Но тут брезжит очень занятный подход, связанный со следующей вычислительной процедурой:

- а) выбирается 1-й частный критерий, он объявляется основанием для оценки классов, после чего по процедуре Бейтса-Гренджера или алгоритму Дикинсона-Ершова рассчитываются оптимальные (с точки зрения критерия 1) значения весов остальных критериев B_i ;
- б) процедура повторяется для всех частных критериев и получается матрица B весовых коэффициентов размерностью $n \times m$ (что с ней делать, я пока не придумал; надо ее как-то рекурсировать или свернуть в вектор).

ДФ: Вы собираетесь в неявном виде использовать метод стохастической аппроксимации, или, если вульгарно, "бутстреп". На сайте "Высокие статистические технологии" А.И. Орлова об этом в достаточном объеме написано.

НЦ: Однако, перейдем к части 3. На рис. 5.1 основные типы вероятностных распределений случайной величины представлены плохо. Координаты не названы; надо изобразить параметры (M , σ и др.)!

ВЛ: Рекомендую задать в EXCEL выражение для плотности, сгенерировать порядка 100-300 наблюдений и далее построить в ППП "STATISTICA" эти кривые распределения.

ВШ: А может дать возможность попрактиковаться самостоятельно нашим читателям?

НЦ: Описание распределения Стьюдента (стр. 208) мне не понравилось. Там всё не то и не так! Начинать надо с χ^2 -распределения и т. д. Можно переписать у Н. Джонсона и Ф. Лиона [1981] или у других.

ВЛ: Было бы нелишним более четко акцентировать на необходимости проверки обязательных условий применения критерия Стьюдента при сравнении выборок.

ВШ: Но, помилуйте, мы писали не учебник по математической статистике, а практический справочник для гидробиологов, использующих те или иные статистические приемы в своей предметной области. И "математические листы" мы привели, скорее, не для обоснования самого подхода (об этом напи-

саны груди специальной литературы), а чтобы привести конкретные расчетные формулы критериев и статистик, которые могут встретиться по ходу использования отдельных методов. Например, используя ППП "STATISTICA" для проверки гипотезы о законе распределения, гидробиолог может столкнуться с возможностью рассчитать, скажем, критерий Шапиро-Уилка, о котором он не имеет ни малейшего представления. И тогда он открывает нашу книгу на стр. 212..., после чего остаются удовлетворенными и авторы и читатель. А более "продвинутый" пользователь в дальнейшем может обратиться к первоисточникам. Что касается критерия Стьюдента, то, в отличие, например, от медицины, его использование в гидробиологии почему-то весьма непопулярно и трудно сказать, насколько это явление обоснованно.

НЦ: Я перечитал много статистических работ (статей, книг, учебников). Многие авторы переписывают друг у друга и у "классиков", мягко говоря, не критически. Вот и появляются в новейших учебниках голые точечные оценки, некорректные сравнения популяций по средним, небрежно указанные (или не окаямленные вовсе) области определения регрессионной модели, неокругленные статистических оценки, неоправданно большие (и иногда неясно, зачем нужные) корреляционные матрицы, громоздкие математические модели с незначимыми факторами и многое другое из "классического наследия". Это относится и к давно раскритикованным критическим пятипроцентным уровням значимости. Вот и у вас: *«выбирается критический уровень значимости $\alpha_{кр}$ из стандартной линейки типа 0,001; 0,01; 0,05 (например, $\alpha_{кр} = 0,05$)»*. Всё не то и не так!

ВШ: Вы в своих "Записках..." [Цейтлин, URL] предлагаете экспертно оценивать уровень ответственности в баллах, по которому уже и рассчитывается уровень значимости. Лично мне эта "двухуровневность" кажется малопонятной: эксперту все равно, что назначать – балл от 0 до 10 или непосредственно $\alpha_{кр}$.

НЦ: Вы даете определение основной задачи математической статистики как *«вычисление статистик, являющихся критериями для оценки достоверности априорных предположений, гипотез или выводов по существу эмпирических данных»*. Мне это не нравится. Скажите, какие у Вас есть книги, и я скажу, откуда лучше переписать, что есть основной предмет математической статистики. Я считаю, что: *«Основным предметом математической статистики является сбор и математическая обработка информации, полученной в результате наблюдений реально существующего объекта (или явления), подлежащего экспериментальному изучению и математическому моделированию»*.

ВШ: Напишем сокращенно, обрезав информационные излишки: *«сбор и математическая обработка»*. Совершенно с Вами не согласен – это ужасное гипертрофирование. "Сбором" занимается гидробиология, химия, гидродинамика и пр., но никак не статистика. "Математическая обработка" – это не есть БРЕНД статистики, т.к. это слишком общее определение, куда подходит масса других разделов математики или точных наук от топологии до прогнозирования маразмов. *Любое определение только тогда имеет смысл, когда оно подчеркивает основную характерную черту определяемой сущности*. Наше определение – гораздо конкретнее, и потому симпатичнее. А чем еще занимается статистика?

НЦ: Статистика занимается еще методологией сбора! В.В. Налимов приводит коллекцию из 165-и определений понятия «математическая статистика», многие из которых не только лишены чёткости, но и противоречат друг другу. Ваше будет 166-м. Но наиболее глубокое представление об изучаемом предмете можно приобрести только на собственном опыте.

На стр. 210 вы пишете: *«Причина такого выделения нулевой гипотезы заключается в том, что она обычно рассматривается как утверждение, несостоятельность которого более бесспорно, чем истинность.»* Это неверно. Обычно сравнивают величины ущербов от ошибочного отклонения гипотез. Далее, написано: *«Нулевая гипотеза H_0 не отклоняется, если вычисленное значение статистики критерия $K_{рас}$ не превышает порогового $K_{пор}$ »* Просто неверно! Бывает и наоборот. Посмотрите формулировку статистических гипотез в разделе 1.1. моей книги.

ВШ: Вы упоминаете некоторые наиболее удачные разделы и формулировки из Вашей прекрасной работы. Я несколько не собираюсь Вам возражать. Но что нам прикажете делать – выбрасывать куски из своей книги и заменять их на Ваши? Это вряд ли разумно, несмотря на позитивный конечный результат. *«Каждый пишет, как он дышит»*. Но мы постараемся в нужных местах вставить рекомендации обратиться к Вашей книге – кому надо, тот прочтет, сравнит и поумнеет.

НЦ: Написано (с. 213): *«Применение критериев согласия связано с определенными теоретическими и вычислительными сложностями»*. Дело не в этом – как теоретические, так и вычислительные (с появлением ЭВМ) сложности преодолены. Суть в том, что желательно использовать сразу несколько критериев! Особенно, если Вы заранее предполагаете, что распределение нормальное. Кстати, в моей книге описана более простая редакция d -критерия Гири. Получилось F -распределение Фишера, а расчёты элементарные!

Вы также приводите много гистограмм распределения выборок гидробиологических показателей и их функциональных преобразований. Я бы гистограммы вообще не рисовал – мне они не нравятся,

поскольку сильно зависят от разбиения данных на интервалы. Обработку данных лучше представлять сразу в виде ЭФР (*эмпирической функции распределения*) в доверительных границах для заданного (нормального, раз вы хотите) распределения! ЭФР не зависит от разбиения данных на интервалы (!), а если хотите посмотреть ЭФПВ, то сгладьте и продифференцируйте её численно – получится красиво!

На мой взгляд, вы слишком часто приводите значения критериев согласия, Стьюдента, Фишера и пр.. Эти значения ни уму ни сердцу ничего не дают, тем более, в итоговых таблицах (мало ли какие промежуточные величины вычисляются)! Зато не всегда приводите соответствующий им уровень значимости. Необходимо приводить всегда и только α -критерии (*P*-значения)!

ВШ: Не думаю! Народ должен привыкать к "натуральным" значениям статистик и, при некотором навыке, исследователю достаточно будет просто посмотреть на значение F-критерия, чтобы сделать исчерпывающий вывод.

ГР: А я здесь готов согласиться с Вашим замечанием, Натан.

ВЛ: Стоит подчеркнуть, что описываемые вами в гл. 5 классический дисперсионный анализ (ANOVA) является параметрическим методом. Однако есть и многочисленные методы непараметрического дисперсионного анализа. Кроме того, не понимаю, почему при изложении двухфакторной модели Вы исключили из рассмотрения эффект взаимодействия? Здесь было бы уместно перейти от 2-х факторного анализа к многофакторному, указав на другие виды эффектов факторных взаимодействий.

НЦ: Слишком подробно описан дисперсионный анализ. Я бы лучше потратил время на описание многомерного регрессионного анализа и просто указал, что дисперсионный анализ – это его частный случай!

ГР: Дисперсионный анализ родился в недрах биологии (Р. Фишер), тщательно прорабатывался биологами (Н.А. Плохинский) и считается основной математической доктриной биологии. Во многих случаях важно (с такой же необходимостью как клистир, прописываемый всем в "Бравом солдате Швейке") проверить гипотезу о влиянии на одномерную выборку того или иного качественного фактора, не прибегая к построению регрессии. Такова *традиция*, поэтому однофакторный ANOVA и все его детали должны быть растолкованы гидробиологу. Во всех пакетах прикладных программ дисперсионному анализу также уделяется достаточно важное место.

НЦ: Добавлю только: "*гнетущая традиция*"! (Со мной также согласны Н. Дрейпер и Г. Смит [1986]). У меня студенты мехмата не могли толком понять этот "клистир", пока я не начал его излагать в одном ключе с регрессионным анализом. Сразу всё стало просто и ясно.

По тексту раздела 5.2 я не во всем согласен с вашими выводами относительно статистик Бартлетта и Кокрена (мне они просто не нравятся, так как формулируются без альтернативной гипотезы). Лучшее уж критерий Хартли – Дэвид (см. Дж. Себер [1980]), а ещё лучше (уж извините!) мой критерий, который я назвал критерием Фишера – Бонферрони. Не верно также мнение об ошибочности простого попарного сравнения групповых средних по Стьюденту (эта, так называемая "проблема Беренса – Фишера" давно решена). Но тут важно другое. Чтобы уйти от субъективного взгляда на частные методы и критерии, нужно каждую гипотезу проверять с помощью НЕСКОЛЬКИХ критериев, в том числе и непараметрических. Если ВСЕ критерии дружно дают малые *P*-значения, значит разность безусловно достоверна! А наши внутренние статистические разборки – какой критерий мощней иного – только запутывают гидробиологов!

Далее, вы много раз повторяете формулировку: «*Проверка гипотез о равенстве групповых средних*». Это принципиально неверно! Параметрические гипотезы проверяют относительно параметров (констант)! А средние - это случайные оценки параметров. Корректнее говорить «*Проверка гипотез относительно центров распределения случайных величин*» или «*Проверка гипотез относительно математических ожиданий распределения случайных величин*».

ВШ: Несмотря на смешанные чувства от Вашей критики, она весьма полезна. Особенно по части необходимости точности формулировок. С точки зрения статистика Вы, безусловно, правы. Но, с позиций практического биолога, выражение «*Проверка гипотез о равенстве выборочных средних*», как-то ближе к телу. А при реализации конкретных вычислений эти реверансы в сторону ритуальных статистических схем вообще кажутся бессмысленными. Например, Вы подходите к компьютеру с традиционной цепочкой предположений типа «*Я хочу сравнить два центра распределения... Правда, я ничего не знаю о законе распределения генеральных совокупностей и не знаю как найти математические ожидания. Поэтому буду сравнивать их оценки в виде выборочных средних*». Компьютер пропустит Вашу "предобеденную молитву" и начнет сравнивать **выборочные средние**. Хотя, повторяю, Вы совершенно правы.

- НЦ:** Теперь замечания общего характера: на рисунках надо по возможности приводить достоверные интервалы. Популярно говоря, мы по случайно разбросанным точкам пытаемся воссоздать как бы один или два холма. Склоны холмов можно изобразить так, как изображают склоны гор на географической карте, т.е. в виде линий равного уровня значимости: 80%, 90%, 95% и 99-%! С компьютером это сделать просто. А эти «прямоугольники и усы» только путают некомпетентного читателя (а таких большинство)!
Далее, некоторые диаграммы плохо понятны. Не нужно рисовать логарифмы! Надо рисовать натуральные значения, но на полулогарифмической бумаге! И, наконец, за что мне нравятся медики – они любое утверждение подкрепляют *P*-значением, а вы это делаете не всегда! И приводимые значения статистик округляйте до 2-3 значащих цифр, т.к. большая точность выглядит эдаким неуместным кокетством.
- ВШ:** Ваши замечания верны и исполнимы, но отложим их для будущих редакций. Хотя логарифмическая бумага выглядит некоторым анахронизмом. По-моему, все равно, что деформировать, оси координат или корреляционное поле...
Что касается излишней точности, то знаете, почему уважаемые фирмы продают, допустим, надувные матрацы за 1399.99 долларов? Учитывают психологию потребителя! А чем мы хуже?
- НЦ:** Вы сомневаетесь (стр. 227): «...следует ли учитывать в составе выборок нулевые значения, т.е. так называемую "частоту нулевого класса"...». Насколько я помню, Е. Маркова лет 25 назад докладывала решение. У неё есть свой сайт. Можете проконсультироваться...
Граф связности категорий грунтов на рис. 5.9 мне не понравился. Если вы написали пособие для гидрологов, то этими критериями и линиями вы их совсем запутываете. Вместо того, чтобы просто, достоверно и однозначно ответить на конкретные вопросы.
- ВШ:** Этот граф мы привели как некоторую прелюдию к разговору в главе 7 о трансформации матрицы сходства в граф минимального пути, подготавливая читателя к "будущим забегам".
- НЦ:** В разделах 5.3-5.4 вы анализируете влияние сезонного фактора, выраженного календарным месяцем отбора пробы... Не могу не высказать сожаления, что вы не пользуетесь регрессионным анализом вместо дисперсионного. Тогда вместо календарного месяца можно было бы просто записать несколько базисных функций ряда Фурье, и ЭВМ сама бы выделила значимые члены, дала бы (количественную) регрессионную модель и не надо было бы приводить лишних таблиц. А вы получили бы удовольствие от количественной интерпретации регрессионной модели...
- ВШ:** Совершенно с Вами согласен. Я сам вздохнул с огромным облегчением, дописав разделы 5.1-5.4. Но примеры носили чисто методический характер для иллюстрации именно этих методов.
- НЦ:** Мне совершенно не нравится ваша постановка задачи регрессионного анализа (раздел 5.5). Почему речь идет о законе, а не о закономерности? Почему обе переменных должны быть измерены в количественных шкалах (это не обязательно)? Вы собираетесь «построить функцию $f(X)$, которая приближенно описывала...». Зачем приближенно? Надо требовать адекватность!
- ВШ:** Регрессия – «как много в этом звуке...» и столько разногласий! Нам близки воззрения М.М. Бонгарда, А.Г. Ивахненко и В.Н. Вапника. Есть объективный закон природного явления, который необходимо восстановить по эмпирическим данным. "Выборочная закономерность" – как-то слишком мелко и не стоит возни.
Регрессия выполняема только для количественных шкал, поскольку оперирует со средними, дисперсиями и проч. Вы, конечно, можете какую-нибудь порядковую или бинарную шкалу интерпретировать как количественную – воля и ответственность Ваша. А как Вы найдете среднее из величин, которые принимают, например, только два значения 0 и 1?
Помните, у Окуджавы: «Две спутницы верных: любовь и разлука, проходят сквозь сердце мое». У регрессии – две стороны медали: адекватность как мера близости и вероятностность как мера удаленности. И та и другая выражаются суммой квадратов отклонений от линии регрессии. Здесь под словом «приближенно», в отличие от детерминированного подхода, мы хотели подчеркнуть *вероятностную суть любой регрессии*.
- НЦ:** Вы часто употребляете термин «уравнение регрессии». Так многие пишут, но это неверно. Следует писать «...в виде модели регрессии». Попробуем разобраться не спеша.

Имеем некоторую случайную величину Y , которая распределена нормально с центром V_y и стандартным отклонением σ_y , то есть $Y \sim N(V_y, \sigma_y)$. Существует некоторый фактор X – независимая переменная, которая может принимать определенные значения $X = x$. Если хотя бы один из параметров распределения Y , например, центр V_y , является функцией x : $V_y = \eta(x)$, то *имеет место регрессия Y по X* . Функция $\eta(x)$ называется *истинной функцией регрессии* (ее вид и свойства часто неизвестны). Задачей регрессионного анализа (РА) является восстановление по экспериментальным данным наиболее вероятного вида этой функции, которая после восстановления будет уже называться в отчете *эмпирической функцией регрессии (ЭФР)*.

Уравнением регрессионная функция бывает временно, когда она записывается в виде системы уравнений и решается относительно коэффициентов. В результате расчёта коэффициентов уравнение регрессии становится эмпирической функцией регрессии (ЭФР)! Такова корректная терминология.

ВШ: В рамках своей книги мы используем, казалось бы, вполне общепринятые понятия:

- *Модель* – некоторая система взаимосвязанных уравнений произвольного типа, воспроизводящих суть наблюдаемых процессов или явлений;
- *Уравнение* – форма представления задачи о поиске аргументов, при которых значения двух функций равны;
- *Функция* – некоторый математический оператор, описывающий преобразования аргументов.

Обычно функция – одноместное понятие, не содержащее символ « \Rightarrow », и представляет собой правую часть уравнения регрессии. Обратимся, в частности, к «Большой Советской энциклопедии»: «*Цель регрессионного анализа состоит в определении общего вида уравнения регрессии, построении оценок неизвестных параметров, входящих в уравнение регрессии, и проверке статистических гипотез о регрессии*» (статья со ссылкой на Г. Крамера [1975], Н. Дрейпера и Г. Смита [1986]). Т.е. БСЭ ведет речь исключительно о "*регрессионных зависимостях*" и ничего не говорит о "*функциях регрессии*". Вряд ли можно предположить, что БСЭ не права – статьи там писались высочайшими профессионалами и тщательно редактировались.

Существующие традиции статистики требуют некоторой чисто ритуальной преамбулы типа «*Пусть где-то (непонятно где) существует некоторая генеральная совокупность данных или истинная функция регрессии. Мы о них ничего не знаем, поэтому...*». Но вряд ли этот процесс умозаключений очень интересен практикам. Им хочется просто взять быка за рога и на основе набора эмпирических данных рассчитать коэффициенты приближенного, но адекватного *уравнения регрессии*, которое можно было бы использовать для предсказания или управления.

ВЛ: Очень важно более четко сказать об основных предпосылках регрессионного анализа и о степени влияния отклонения от этих требований: Привожу кратко все семь "заповедей от регрессии" со ссылкой на книгу И. Вучкова с соавторами [1987]:

1. Ошибки (невязки) есть случайные величины.
2. Ошибки имеют нулевое математическое ожидание.
3. Все значения ошибок не коррелируют между собой и имеют одинаковые дисперсии (условие гомоскедастичности; это предположение в гидрологии, в связи с сезонностью, может нарушаться, особенно в данных, представляющих собой временные ряды).
4. Ошибки имеют нормальное распределение.
5. Матрица регрессоров F не случайна, т.е. ее элементы - известные числа, точно заданные исследователем.
6. На параметры уравнения регрессии априорно не накладывается никаких ограничений.
7. Матрица регрессоров F имеет ранг равный числу коэффициентов в уравнении регрессии.

Если все эти предположения выполняются, то имеет место случай классического РА независимо от метода оценки коэффициентов.

ДФ: Это стандартное заблуждение, что для метода наименьших квадратов (МНК) необходима нормальность распределения случайных ошибок зависимой переменной Y , то есть разностей $Y-(a+bX)$. У В.Н. Вапника несколько десятков нудных страниц посвящено доказательству теорем, главным итогом которых является то, что среди распределений с одинаковой дисперсией нормальное является экстремальным (в определённом смысле, самым плохим) и, используя его, мы можем только перестраховаться, занижить значимость результата. Требование нормальности всего лишь удобно для легкого доказательства некоторых статистических теорем, но линейная регрессия по МНК может излагаться и с позиций функционального анализа, и вообще сама по себе. Получаемые результаты не зависят от доказательства нужных для остепенения теорем. В век быстрых компьютеров можно использовать метод стохастической аппроксимации, который, по сути, большую часть классической статистики со всякими распределениями, параметрическими оценками и т.п. отправляет просто "в корзину", оставляя лишь фундаментальные понятия и теоремы.

- NN:** (Из рецензии "Журнала общей биологии" на нашу статью, указывающую на некорректность сведения степенных уравнений энергетического обмена к линейной форме – см. пример к разделу 5.5): Теоретически проблема некорректности линеаризаций, возможно, и существует. Но при практическом применении обоих видов анализа к большим массивам данных, оказывается, что различия в оценках параметров находятся в пределах статистических ошибок.
- ВШ:** Возможно, Вы правы, но лишь только потому, что стандартные ошибки коэффициентов энергетических уравнений весьма высоки (хотя вопрос о том, насколько существенны различия, всегда достаточно субъективен). Но в нашей работе речь идет не о том, насколько "неверный" результат близок к "верному", а о том, как методологически правильно выполнить расчет. А выводы пусть делают гидробиологи, имеющие необходимые экспериментальные данные.
- NN:** Уравнение, описывающее эмпирические данные по интенсивности дыхания ракообразных от массы тела, Г.Г. Винберг предлагал в середине 50-х годов. Тогда это было блестящее исследование. Надо бороться с неряшливой математикой, но надо ли ворошить прах усопших, тем более, когда они были действительно выдающимися учеными.
- ВШ:** Такие глубоко почитаемые нами ученые как Г.Г. Винберг и А.А. Умнов, заложили основы научного мировоззрения, связанного с расчетом энергетических балансов. Но они не могли не ошибаться в некоторых второстепенных частностях (особенно, в методах статистической обработки, которые лимитировались уровнем технического обеспечения того времени). Мы считаем моральным долгом перед их памятью и проявлением бережного отношения к научному наследию (а не желанием "ворошить прах усопших") обсудить с научным обществом эти неточности, чтобы использовать в дальнейшем более корректные подходы в соответствии с духом времени.
- NN:** То, что полином "лучше" опишет любую зависимость – очевидный и наперед известный результат (у полинома больше параметров). Но "лучше", не всегда "верно". Что же касается цитаты из статьи Г.Г. Винберга, то, по крайней мере, в использовании степенного уравнения для описания зависимости метаболизма от массы тела он оказался полностью прав. Достаточно посмотреть последние публикации за 3 года, чтобы увидеть большое число моделей, предсказывающих не только степенной вид зависимости, но и значения коэффициентов (см., например, [West G.V. et al., 1999] и др.). Вряд ли стоит опубликовывать свои взгляды на эту "проблему", апеллируя к состоянию науки 26 лет назад.
- ВШ:** Совершенно непонятно, что Вы понимаете в статистике под словом «*верно*». Обычно верной моделью из двух возможных претендентов считается та, что более *точна* (адекватна) по отношению к эмпирическим данным (разумеется, с учетом параметричности расчетного уравнения, для чего существуют специальные статистические критерии). И уж никогда массовость какого-либо предположения не была свидетельством его верности. Вместе с тем, традиционно (см. главу 2) принято различать модели для *объяснения* (относительно простые модели, к которым не предъявляются требования оптимальности, но, в силу их широкой распространенности, пригодные для поиска общих гипотез) и модели для *прогнозирования* (более сложные и точные модели). Не имея ничего против степенного уравнения как модели для объяснения, мы показываем, что не только *верными*, но и более *удобными* моделями для целей прогнозирования могут являться и иные структурные версии (причем, не обязательно полиномы).
- ГР:** Добавлю от себя. В связи с различием в разных моделях объяснения и прогнозирования для сложных систем можно предложить такую дихотомическую схему [Брусиловский, Розенберг, 1981б; Розенберг, 1984, 1989]: различать *праксеологичность* (количественная "точность") и *собственно адекватность* (качественная "точность"). Тогда, регрессионные модели служат, в основном, целям прогнозирования и могут вообще не отражать ни структуру, ни механизм функционирования моделируемой сложной экосистемы и будут хотя и полезны для практики в силу количественной точности своих прогнозов, но не адекватны реальным объектам в гносеологическом смысле. Для аналитических моделей (типа Вольтерра), напротив, нельзя говорить о праксеологичности (так как при их построении исследователь идет на ряд существенных упрощений, модели основаны только на априорной информации и пр.), но имеет смысл говорить о гносеологической адекватности. Думается, именно здесь лежит непонимание *NN*, который пытается в модель Г.Г. Винберга "вложить" и адекватность, и праксеологичность, что для сложных систем недостижимо. Критерии оценки адекватности и праксеологичности моделей достаточно многочисленны, но и их также следует разделить на два основных класса: *внутренние* и *внешние*. Если для оценок праксеологичности моделей такое разделение достаточно очевидно (внутренние критерии основаны на той же информации, по которой строилась модель [МНК], а внешние – на новой [МГУА]), то для оценки собственно адекватности моделей такое разделение дать сложнее. Можно считать, например, что внутренними критериями являются теоретические предпосылки самой экологии или гидробиологии

(численность популяции не должна быть отрицательной...). Тогда внешние критерии следует искать в области математики и математического анализа моделей экосистем.

- НЦ:** Методы структурной идентификации – это колоссальная наука, даже искусство! Сперва следует подобрать и обосновать структуру регрессии, включающую все подозреваемые факторы и соответствующие базисные функции, а только потом выбирать наилучшее в каком-то смысле подмножество базисных функций. А у вас он сведен только к выбору наилучшего подмножества базисных функций; в каком смысле – не ясно. Например, теория подобия даёт структуру мультипликативных функций регрессии при описании процессов в движущейся среде, в частности – гидродинамики процессов массопереноса. Можно подобрать дифференциальные уравнения этих процессов, интегралы которых и дают **ОБОСНОВАННУЮ** теорией структуру регрессионной функции, известную с точностью до параметров, которые, в свою очередь, и определяются по экспериментальным данным. Что-то похожее есть, вероятно, и в гидробиологии. Там же следует упомянуть ортогональные полиномы Чебышева, сплайн-функции, функции Фурье и многие другие.
- ВШ:** Массопередача в сплошных средах – явление на несколько порядков более простое и предсказуемое, нежели взаимодействие популяций между собой и со средой. Единственный путь статистического моделирования экосистем – самоорганизация моделей. А для этого нужно сформулировать разумные критерии селекции и предоставить необходимые степени свободы выбора базисных функций, в том числе, и "экзотических". Об этом подробно – в главе 9.
- НЦ:** Вы пишете, что «*принципиально нельзя ограничиваться одной регрессионной моделью*»? Иногда (и, даже, почти всегда) можно! Той, что адекватна (по ошибке воспроизводимости), имеет значимые коэффициенты регрессии и базисные функции, наиболее близкие к ортогональной системе. Иными словами, лучшей из эмпирических адекватных функций регрессии является менее сложная.
- ВШ:** Стоп!!! Качество любой модели регрессии определяют две конкурирующие величины: сумма квадратов отклонений от регрессии (СКО) и число степеней свободы, вернее, количество регрессоров (КР). Первый показатель отражает адекватность, второй – сложность. Увеличивая (КР), вы снижаете (СКО). Налицо – задача нахождения экстремума или модели оптимальной сложности.
- НЦ:** СКО – не интерпретируемая статистика. Вот если СКО поделить на число степеней свободы, получим интерпретируемую статистику – остаточную дисперсию. А если мы оценим дисперсию воспроизводимости (ДВО) отклика – получим оценку ошибки отклика. Модель регрессии, остаточная дисперсия погрешности которой не превосходит статистически дисперсию ошибки воспроизводимости отклика, и будет адекватной (см. литературу).
- ВШ:** Для решения задачи оптимизации различные функциональные формы статистик СКО, СКО/КР или (ДВО - СКО/КР) являются эквивалентными.
- НЦ:** ДВО не определяется как СКО/КР!
- ВШ:** Давайте четко различать, какую задачу мы перед собой ставим. Пусть есть 1 этап – оценка адекватности каждой из L рассчитанных моделей в отдельности – тут есть стандартная "кухня" интерпретируемых статистик: критерии Стьюдента, Фишера и проч. Но мы говорим о втором этапе – выборе "наилучшей" модели из L различных реализаций, каждая из которых уже прошла на 1-м этапе тест на адекватность. Ни F -критерий, ни остаточная дисперсия тут не могут являться тестом на "наилучшесть", поскольку **МОНОТОННО** уменьшаются с увеличением сложности.
- НЦ:** Остаточная дисперсия в процессе расчётов методом включения обычно уменьшается с увеличением сложности, то есть, с возрастанием числа значимых регрессоров, но затем, при появлении мало значимых или вовсе незначимых регрессоров, проходит через минимум и возрастает.
- ВШ:** Такое далеко не всегда. Гораздо чаще СКО стремится к нулю: например, увеличивая степень полинома, вы придёте к тому, что кривая точнехонько объедет все экспериментальные точки. Но подобная причудливая модель ни у кого не вызовет интереса. Нужно придумать что-то иное, основанное на той же "сладкой парочке" (КР и СКО). Интересные критерии, например, предлагает В.Н. Вапник [Алгоритмы и программы..., 1984]. Впрочем, мы начинаем повторяться или длиннотно обсасывать терминологические изыски.
- НЦ:** Это мы зря. Надо идти вперёд – к новым длиннотам и изыскам! Например, вы не вполне точно понимаете «адекватность». Все время в тексте, проверяя по Фишеру гипотезу об информационной способности модели регрессии, вы говорите об адекватности. Это же разные вещи!
- ВШ:** В общенаучном смысле «адекватность (от лат. *adaequatus* – равный) – термин, который служит для обозначения верного воспроизведения объективных связей в представлениях, понятиях и суждениях» [БСЭ]. В статистическом смысле один из тестов на адекватность – проверка на однородность двух дисперсий: воспроизводимости и остатков. Мы имеем полное право предположить, что дисперсия воспроизводимости отклика оценивается как его среднеквадратичное отклонение. Тогда, в определенном смысле, упомянутые Вами гипотезы – одинаковые вещи!

НЦ: Дисперсия воспроизводимости отклика оценивается как квадрат среднеквадратичного отклонения ошибки воспроизводимости отклика.

ВШ: Самое сложное в биологии – это понять, что есть «воспроизводимость» и его ошибка. Что, например, есть воспроизводимость роста человека, как не все множество его возможных значений?

НЦ: «С чего начинается Родина», т.е. регрессионная модель (РМ)? С области определения факторного пространства и с области значений для отклика. А в ваших примерах их нет! Надо оконтурить область E определения РМ хотя бы через минимумы и максимумы факторов! Правда при пассивном эксперименте область определения E , как правило, не образует прямоугольную фигуру (точнее, гиперпараллелепипед). Например, при корреляции двух факторов областью E может быть эллипс, сильно вытянутый вдоль случайно ориентированной главной оси. Задавая в таком случае область определения E в виде прямоугольника, мы ошибемся, если включим в нее подобласти, на самом деле не принадлежащие E . Эту задачу рекомендуется решать просто и правильно, чтобы полученные регрессионные функции не приводили к существенным ошибкам в периферийных точках факторного пространства. Я не знаю, где еще пишут о сложной задаче окаймления области определения РМ, поэтому можно сослаться на раздел 6 в моей монографии.

ДФ: Вы пишете, что в регрессионном анализе *«размерность признакового пространства практически не должна превышать 150-200, иначе возникают трудности вычислительного характера при матричных преобразованиях»*. В книге Дж. Себера [1980], едва ли не исчерпывающей эту тему, описан модифицированный алгоритм Грама-Шмидта, успешно применяемый мною к матрицам из 1000 признаков и около 40000 объектов. Не надо с матрицами манипулировать, надо лишь решать свою задачу. Кстати, спектр возможных базисных функций гораздо шире, чем рекламируемый вами полином Колмогорова-Габора. Хотя многие из них, действительно, могут быть приближены полиномами. Но для одних – это очевидно, а для других – не нужно.

ВШ: Спасибо, коллеги. Наш диалог о регрессии – это ловкий слалом между вехами истин и заблуждений. Но давайте пойдём дальше.

ВЛ: Вы совершенно справедливо подчеркиваете, что результат, полученный при использовании кластерного анализа, является одним из возможных. Любое найденное разбиение необходимо сравнить с аналогичными результатами, полученными с применением других комбинаций метрик, алгоритмов объединения и т.д., а также с результатами использования других методов анализа данных. Следует убедиться самому и суметь убедить в этом своих оппонентов, что полученная классификация является оптимальной.

ГР: Нельзя забывать и о целях классификации. Свою библиотеку я могу "расклассифицировать" в соответствии с авторским или предметным указателями, или по цвету корешков книг...

ВШ: Гидробиологические данные – элементы размытых множеств с отсутствием четких границ и поэтому результат их кластеризации неустойчив к стратегии агломерации и задаваемой метрике. При этом нельзя сделать никаких априорных предположений ни о распределениях данных, ни о том, что должно получиться в итоге.

Пусть, например, мы имеем 25 классифицируемых объектов. Кроме того, мы имеем обычно не менее 5 общеупотребительных метрик и не менее 5 алгоритмов построения иерархической классификации. В результате для 25 объектов мы получаем 25 возможных вариантов разбиений (т.е. деревьев). Не подменяем ли мы неопределенность данных неопределенностью деревьев, еще более туманной и приводящей в ужас не только осла Буридана?

И мне видятся тут такие проблемы, требующие решения:

- раз уж мы получили 25 различных деревьев, то надо хотя бы оценить, значимо ли они отличаются друг от друга. Провести, своего рода, кластерный анализ результатов кластерного анализа. Каким методом можно оценить близость (предупорядоченность) двух произвольных деревьев из одних и тех же "листьев"?
- если нет метода сравнить два дерева, то как вообще можно сравнить две возможные версии кластеризации (например, оценить близость двух исходных матриц расстояний)?
- на основании какого критерия можно оценить, насколько одна классификация лучше другой?

ВЛ: Ничего не поделаешь - весь жизненный опыт человечества показывает, что в конечном счете применение новых, более совершенных методов анализа увеличивает количество информации об одном и том же объекте. Это, так сказать, общеметодологический аспект.

В нашем же случае (25 объектов, 5 метрик и 5 алгоритмов) ответ еще более очевиден. Во-первых, выбор метрик и алгоритмов не произволен, а имеет вполне целенаправленный характер, учитывающий априорную информацию о природе кластеризуемых объектов. Во-вторых, верифицируемость решения следует проверять по его предсказательной способности. А в этом случае, согласно теории байесовских оценок, мы получаем более точную оценку наших вероятностей (имеется в виду вероятности выбора решения).

- ВШ:** Не хотелось бы комментировать упоминание о мистической "предсказывающей способности" при кластеризации. Любой класс, агрегат, кластер, полученный по технологии "без учителя" и состоящий из некоторого подмножества реальных объектов, – всегда умозрительная теоретическая конструкция, которую принципиально невозможно точно измерить, а, следовательно, оценить качество предсказания. Например, В.И. Ленин разделил все человечество на эксплуататоров и эксплуатируемых, последних – на пролетариат и крестьянство, а последних – на кулаков, середняков и бедняков... В результате его "кластеризации" и "прогностической" операции одинаково перестреляли и тех, и иных. Но, к счастью (?), он имел большую обучающую выборку...
- ВЛ:** Уважаемый коллега Владимир Кириллович! Вряд ли Ваш аргумент достаточно убедителен. Не думаю, что стрельба началась от того, что "вожди всех времен и народов" поделили все человечество на группы. В этом убеждает вся история человечества еще до появления Ленина. *«После того, не значит вследствие того»*.
Далее, аргумент относительно предсказательности следует понимать в контексте всей остальной информации о свойствах объектов. Т.е. наличие группировок при анализе одного набора признаков означает высокую вероятность аналогичных группировок и при использовании других наборов.
- ВШ:** Давайте поближе к реальности. Допустим, что пять друзей-гидробиологов вышли на берег Женевского озера и в 25 его точках отобрали пробы зообентоса. Получили прямоугольную матрицу наблюдений и никаких особенных априорных вероятностей при этом не испытали. И решили выполнить кластеризацию объектов. Один исследователь с традиционным образованием сформировал матрицу коэффициентов сходства 25×25 , используя классическую в гидробиологии меру сходства Сьеренсена, учитывающую только факт присутствия или отсутствия каждого вида бентоса. Другой, прочитавший на пару книг больше, рассчитал ту же матрицу, применив традиционное для программы STATISTICA евклидово расстояние численностей видов. Третий – перевел численности видов в некоторые баллы обилия и избрал манхэттенское расстояние. Четвертый вычислил коэффициенты парной корреляции рангов по Спирмену. Пятый – используя метод главных компонент, свернул пространство видов до 5 главных факторов и вычислил евклидово расстояние в пространстве факторов. Получилось пять матриц сходства с некоторой вариативностью предупорядоченности изученных объектов и, следовательно, пять различных деревьев иерархической классификации одних и тех же станций (даже расклассифицированных одним методом!). Предположим, они начали спорить, отстаивая каждый свою точку зрения и вызывая тень отца Байеса в надежде получить от него априорные вероятности. Но их дискуссия оказалась тщетной, поскольку не нашлось критерия, который бы оценивал, какой "результат является оптимальным (см. В. Леонова)", а тень отца Байеса безмолвствовала.
Выход я вижу один – считать все пять деревьев результатом работы 5 экспертов и искать синтез некоторого коллективного разбиения. Но, для этого необходимо научиться оценивать, насколько близки друг другу два результата классификации, т.е. два дерева. Это дает возможность некоторому обработчику результатов сказать *«ребята, вы напрасно спорите, все ваши деревья можно считать эквивалентными»* или *«вот вы трое получили очень близкие деревья, а приверженцы, предположим, Сьеренсена и Спирмена могут пока отдохнуть»*.
- ГР:** Действительно, получить картину "порядка" (априорные вероятности) зачастую невозможно, а вот создать "беспорядок" кажется более простой задачей. Задача автоматической классификации всегда может быть сведена к задаче диагонализации матрицы связи классифицируемых объектов. Тогда в матрице "порядка" вдоль диагонали стоят выделенные "блоки" сходных объектов. Можно представить процедуру диагонализации исходной матрицы как определение такой последовательности объектов (или признаков), которая бы минимизировала некоторую меру уклонения (*меру диссонанса*, [Лефевр, 1973; Розенберг, 1975]) этой матрицы от эталонной. Вот здесь, в качестве эталона и появляется "беспорядок" – исходная матрица, все строки и столбцы которой перепутаны случайным образом. Лучшей можно будет считать ту классификацию, для которой мера диссонанса между организованной матрицей и эталонной матрицей "беспорядка" (или средней из нескольких матриц "беспорядка") будет больше. Ясно, что предлагаемая процедура – эвристична, но ничего другого мне не известно...
- ВЛ:** Я не исключаю, что в теории графов возможно и есть такие варианты сравнения. Лично мне они также не известны. Однако я не могу согласиться с тем, что выход только один или два. При анализе данных нами выработан своеобразный стандартный набор приемов. Например, лично я в аналогичных ситуациях очень часто использую непараметрический дискриминантный анализ с локальной оценкой плотности распределения. Среди этих приемов есть и обязательный анализ таблиц сопряженности при кластеризации по количественным признакам и по дискретным качественным. Так что Вы зря иронизируете относительно предсказательности!
- ВШ:** Насколько я понимаю, частотные таблицы сопряженности могут быть использованы, когда (и только когда) на входе имеется матрица наблюдений из двух признаков, измеренных в порядковых шкалах

не слишком большой дискретности ($n \times m < 100$, где n и m – число градаций признаков). Как их можно использовать для сравнения классификаций, мне абсолютно непонятно.

ВЛ: Я имел в виду многомерные таблицы сопряженности. Обозначаем принадлежность отдельных наблюдений отдельным ветвям и узлам каждого из 5 полученных деревьев. Вот Вам и 5-мерная таблица сопряженности. Далее вполне возможно в этом случае использовать, например, анализ соответствий Бензекри-Гутмана.

ВШ: Нет ли более или менее полной публикации, описывающей технологию таких расчетов?

ВЛ: Нет, такой публикации нет. Каждая работа над отдельным массивом – это всегда творческая работа и комбинации методов, как правило, отличаются друг от друга. Различаются как исходные массивы и задачи исследования, так и доступный набор статистических методов (пакетов). Спектр последних со временем расширяется – например, сейчас я активно использую через telnet статистические пакеты, установленные в США, в частности в Лос-Анджелесе. И хотя за это удовольствие приходится платить в USD, но зато имеешь доступ к мощным средствам.

Надо сказать, что анализ таблиц сопряженности вообще недооценивают большинство исследователей. А, между тем, он очень много может идентифицировать! Анализ таблиц сопряженности можно (и нужно!) использовать для любых видов дискретных признаков. Сам анализ с виду прост и несложен, но его нюансы видны только профессионалу, глубоко знающему теорию метода. Прелести этого анализа – в переходе от 2-х признаков к большому их числу. Вычислительные сложности здесь огромнейшие, а программных реализаций отбора наиболее оптимальных вариантов нет. И хотя теория известна уже более 100 лет, большинство пакетов дальше самых элементарных операций этой теории не идут. Я сейчас пытаюсь сделать некоторые надстройки для более глубокого анализа таких таблиц. Но дело это очень трудоемкое и необходимо много времени потратить на программирование и отладку этих алгоритмов.

ГР: Здесь следует остановиться еще на одном аспекте количественных методов (не только в гидроэкологии) – то, что я называю «индексологией». Во второй главе мы говорим о том, что «*весь смысл математической обработки многомерных таблиц наблюдений заключается... в редукции данных или понижении размерности признакового пространства типа "объект-признак"*». Такое "схлопывание информации" по В.В. Налимову приводит к применению и в научных исследованиях, и в действующих методиках биологического мониторинга множества разнообразных индексов, за которыми пытаются закрепить либо новую информационную сущность (индекс Шеннона – хотя, это не так), либо обобщение квалифицированных экспертов (индекс Вудивисса), либо "нечто этакое..." (подавляющее большинство "придуманных" индексов). И здесь в мнениях не сходятся даже соавторы. Так, Владимир Кириллович ратует за использование, в частности, индекса $(N \cdot B)^{0.5}$, где N – численность, а B – биомасса организмов (см. стр. 66). В разделе 2.1 мы отмечали, что сложные системы обладают простыми (аддитивными) и сложными (неаддитивными) свойствами. В рамках "индексологии" иногда удается описать тем или иным эвристическим способом именно простые свойства сложных систем. Самый наглядный пример – введение Г. Омом без колебаний и особенных теоретических обоснований показателя «сопротивление» путем деления напряжения (в вольтах) электрической цепи на силу тока (в амперах), что позволяет нам в течение 175 лет успешно пользоваться этой никем не измеренной и имеющей (в данном контексте) сомнительный "реальный" смысл величиной. Этот показатель (как и величина индекса $(N \cdot B)^{0.5}$) были бы более "реальными", если бы они "вытекали" из некоторой оптимизационной модели. Например, $(N \cdot B)^{0.5}$ является максимумом функции $2/3(N \cdot B)^{3/2}$. К сожалению (к счастью?) я не могу придумать модель, которая приводила бы именно к такому виду "взаимодействия" численности и биомассы...

Нельзя забывать и о том, что различные индексы сопряженности и сходства отражают различные "аспекты связи". В книге мы говорим об этом, но еще раз поясню. Например, коэффициент линейной корреляции (в показателях 4-хпольной таблицы; см. формулу 7.3) существенным образом зависит от, так называемого, d -эффекта, т.е. от числа описаний, в которых оба сравниваемых вида отсутствуют. Причем, этот эффект достигается либо когда виды действительно "не хотят" встречаться по каким-то экологическим соображениям, либо у них существенно различается встречаемость (пальма и берёза в Тольятти). Таким образом, если мы определяем корреляцию между длиной хвоста и шириной ушей у кошек, мы должны быть уверены, что у всех наших объектов есть и уши, и хвост. К сожалению (для коэффициента корреляции), виды в природе имеют разную встречаемость и достичь значимой сопряженности можно увеличивая значение клетки d .

ВШ: В разделе 8.4 мы предлагаем некоторый новый алгоритм оценки индикаторной значимости видов на основе матрицы P частот встречаемости i -го признака в k -м классе. Я не знаю никаких литературных ссылок, где бы описывался сколько-нибудь похожий алгоритм классификации, кроме нескольких малоизвестных работ и реально действующей системы PASS. К какому разделу распознавания образов или иной математики относится этот метод – нельзя ли помочь с терминологическими тонкостями?

- ДФ:** Раскладывание по полочкам – это, скорее, в корпоративных интересах узких специалистов. Опыт показывает, что одну и ту же, абсолютно одинаковую математику разные кланы от наук называют, записывают и интерпретируют по-разному, хотя практические результаты получаются одинаковыми. Например, есть частотная вероятность по Мозесу или аксиоматическая по Колмогорову, а есть ещё, кажется, Шметтерер, который вообще всю статистику выводит из определения средней величины, употребляя слово «вероятность» только, разве что, в ругательном смысле. А квантовая механика по Шрёдингеру, по Гейзенбергу, с интегралами по траекториям Фейнмана? Где даже наши доблестные философы немало копий наломали, причем и по судьбам ученых! Но потом математики напряглись и доказали абсолютную тождественность всех версий, так что квантовая механика теперь у нас одна. Таких примеров не счесть! Да и этих "полкораспределителей" сколь угодно – чего стоит один многотомник Айвазяна "Прикладная статистика", где каждое третье слово непонятно, а в каждой второй формуле – ошибка.
- Все ваши алгоритмы вытекают непосредственно из байесовского подхода (именно, подхода, а не формулы, т.к. подход – это целая идеология, включающая и формулу Байеса). На самом деле, мне очень трудно придумать случай, не сводимый к байесовскому подходу, потому что надлежащим выбором платёжной матрицы и априорной вероятности можно добиться почти всего. Например, можно изложить в свете этой идеологии метод максимума правдоподобия.
- NN:** (Из рецензии журнала "Известия Академии наук", сер. биол. на отклоненную статью по материалам раздела 8.4). Все же: чем предлагаемый метод "обобщенного портрета" лучше, чем хорошо и давно известный метод дискриминантного анализа, который содержится во всех пакетах статистической обработки данных (STATISTICA, SPSS, STATGRAPHICS и т.п.). У меня создается впечатление, что определенными преимуществами обладает именно дискриминантный анализ.
- ВШ:** Чтобы расширить спектр впечатлений, попробуйте на досуге выполнить дискриминантный анализ сильно разреженной матрицы размерностью, скажем, 250x300, которая на 95% заполнена нулями (а именно таковы, чаще всего, гидробиологические, фитоценологические и пр. данные). Негативные эмоции Вам гарантированы.
- Кроме того, нельзя ограничивать круг разрешаемых к использованию математических методов только пакетами общего назначения, иначе остановится прогресс (громко сказано, но верно по сути). Кстати, индекс Шеннона или меру сходства по Сьеренсену тоже нельзя рассчитать ни в пакете STATISTICA, ни в других, но они почему-то широко используются в биологии.
- NN:** Судя по вашему тексту, метод обобщенного портрета, кажется, вообще игнорирует существование теории вероятностей и статистики и даже метода наименьших квадратов.
- ВШ:** Действительно, он основан на другой теоретико-вероятностной теореме – теореме Гливенко о равномерной сходимости частот появления событий к их вероятностям, которую математическая наука считает не менее глубокой, чем, например, принцип максимального правдоподобия. Строгому обоснованию метода обобщенного портрета посвящено несколько сот страниц [Вапник, Червоненкис, 1974], в том числе, вполне корректной проработке теорем о вероятности ошибки коэффициентов при построении оптимальной разделяющей гиперплоскости. Полагая, что ученым-экологам будут не слишком интересны чисто математические аспекты, мы сделали акцент исключительно на практической реализации метода, отослав желающих к специальной литературе (к сожалению, таких желающих не оказалось даже среди рецензентов).
- ВЛ:** Кстати, сейчас большое развитие в области распознавания образов получают *методы ресэмплинга* для получения асимптотических оценок. Кроме МНК есть и другие методы оценок параметров уравнений – наименьших модулей, ортогональная регрессия и пр. Математика и статистика продолжают бурно развиваться!..
- NN:** Фраза на с. 10 (в рецензируемой статье. – *Ремарка наша*): «Модель смогла построить решающее правило, только предварительно исключив из рассмотрения 14 объектов обучающей выборки» – вызывает, по меньшей мере, изумление. Это все равно, что при регрессионном анализе выбрасывать все точки, не укладывающиеся на аппроксимируемую кривую!
- ВШ:** Это исключение так же естественно, как выход некоторых экспериментальных точек за пределы доверительного интервала ("трубы", а не аппроксимирующей кривой) относительно линии регрессии. Не правда ли, Натан?
- НЦ:** Выход экспериментальных точек за пределы доверительного интервала, построенного вокруг линии регрессии, совершенно правомерен. Доверительный интервал строится не для экспериментальных точек, а для условного математического ожидания отклика. Большинство (скажем, 99%) экспериментальных точек лежат в пределах области допустимых значений отклика (с заданной вероятностью, скажем, 95%). Но и то некоторые точки «имеют право» выпрыгивать за границы этой области. И только 1 – 2 «выброса» могут вызвать у нас подозрение в том, что они не принадлежат к изучаемой совокупности. Их наличие проверяют по критериям «выброса» (например, Груббса).

- ВШ:** Так и тут, невозможно разделить плоскостью взаимопроникающие "облака" точек двух классов, не отбросив в ходе оптимизирующих операций несколько (~ 5%) точек, препятствующих разделению.
- NN:** Приведенный пример для р. Чапаевка (бывшая Мбча) выглядит не слишком убедительным: на протяжении всего нескольких десятков километров по течению реки на станциях с 6 по 9 "экологическая стабильность" дважды сменяется на "экологический кризис" и обратно и при этом авторы равнодушно замечают, что на этом участке реки «...происходит естественное и стабильное развитие зообентоса, несмотря на отмеченные там процессы антропогенного эвтрофирования». Одномоментная съемка не может в принципе дать оценку стабильности, если иметь в виду относительное постоянство структурных и функциональных характеристик системы *во времени*. Представляется также крайне сомнительным, что о "развитии зообентоса" можно судить только по видовому составу личинок хирономид. И почему появление в зообентосе, скажем, *Glyptotendipes glaucus* и *Procladius ferrugineus* – это признак неестественного развития зообентоса ("экологический кризис"), а обнаружение в пробах *Ablabesmia monilis* и *Cricotopus bicinctus* – это признак благополучия?
- ТЗ:** Хотелось бы в этот хор статистиков добавить и слово практика-гидроэколога. В рамках нашей книги мы не стремились (да и не смогли бы) убедить педантичного читателя ни в отменных биоиндикационных свойствах отдельных видов личинок хирономид (хотя это – установленный в биологии факт), ни в возможности изменения видовой структуры зообентоса по течению реки среднего размера (хотя абсолютно не понятно, кто способен сомневаться в том, что существует не только временная динамика, но и пространственная динамика [неоднородность] экосистемы от истока к устью). А если уж конкретно по четырем названным видам, то первые два индицируют процесс эвтрофирования участков р. Чапаевки, а вторые, реафильные виды характерны для водоемов с проточной и чистой водой. По-настоящему заинтересованный читатель может обратиться к:
- обширной литературе по проблемам и методам биоиндикации и оценке качества вод по зообентосу (в том числе и по хирономидам – например, [Зинченко, 2002]);
 - цитируемым первоисточникам по реке Чапаевка (Мбча), чтобы по подробнее познакомиться с изучаемым объектом и объемом проведенных исследований (см., например, [Экологическое состояние..., 1994]).
- NN:** Авторы так и не определили, что именно они имеют в виду под терминами «качество экосистемы», «стабильность экосистемы» и «кризисность экосистемы». В отсутствие этих определений остается совершенно непонятым, какое отношение к этим терминам, допускающим далеко не однозначное толкование, имеет сугубо математическая конструкция – расстояние от точки в пространстве признаков до разделяющей гиперплоскости.
- ВШ:** А какое, кстати, имеет отношение стрелка пружинного барометра к такому ёмкому и неоднозначному термину, как «погода»? Если бы мы могли точно сформулировать термины «качество», «стабильность» и «кризисность экосистемы» и предложить фундаментальные способы их количественной оценки, экологическую науку можно было бы закрывать за неимением проблемных тем. Эти термины мы использовали не в рамках "мироздания вообще", а исключительно в рамках *предположений нашей модели*: чем больше величина отклика модели, тем выше качество экосистемы.
- ТЗ:** А все-таки, нельзя ли определеннее сказать, как мы относимся к "индексам": на протяжении всей книги мы их то ругаем, то (тут же) признаем их прогностическую силу...
- ВШ:** Как отдельный феномен, каждый индекс (и любой другой частный показатель) ограничен и малоэффективен, но в рамках многофакторных моделей их роль весьма позитивна.
- ВЛ:** Уверен, что раздумья над противоречиями и сопоставление аргументов и контраргументов – лучший способ найти некую новую систему взглядов на любую проблему, в том числе и эту.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРНЫХ ИСТОЧНИКОВ И ИНТЕРНЕТ-ССЫЛОК

- Абакумов В.А.* Продукционные аспекты биомониторинга пресноводных экосистем // Продукционно-гидробиологические исследования водных экосистем. – Л.: Наука, 1987. С. 51-61.
- Абакумов В.А., Максимов В.Н., Ганьшина Л.А.* Экологические модуляции как показатель изменения качества воды // Научные основы контроля качества вод по гидробиологическим показателям: Тр. Всес. конф. – Л., 1981. С. 117-136.
- Абакумов В.А., Сущеня Л.М.* Гидробиологический мониторинг пресных вод и пути его совершенствования // Экологические модификации и критерии экологического нормирования: Тр. Междунар. симпоз. – Л.: Гидрометеоздат, 1991. С. 41-51.
- Абросов Н.С., Боголюбов А.Г.* Экологические и генетические закономерности сосуществования и коэволюции видов. – Новосибирск: Наука, 1988. – 333 с.
- Абросов Н.С., Ковров Б.Г., Черепанов О.А.* Экологические механизмы сосуществования и видовой регуляции. – Новосибирск: Наука, 1982. – 301 с.
- Авакян А.Б., Салтанкин В.П., Шаранов В.А.* Водохранилища. – М.: Мысль, 1987. – 325 с.
- Аверкин А.Н., Батыришин И.З., Блишун А.Ф. и др.* Нечеткие множества в моделях управления и искусственного интеллекта // Под ред. Д.А. Поспелова. – М.: Наука, 1986. – 312 с.
- Аветисян Д.О.* Проблемы информационного поиска: (Эффективность, автоматическое кодирование, поисковые стратегии) - М.: Финансы и статистика, 1981. - 207 с.
- Авидон В.В., Аролович В.С., Козлов С.П., Пирузян Л.А.* Применение подструктурного анализа для скрининга биологически активных соединений // Химико-фармацевтический журнал. 1978. № 5. С. 88-94.
- Адлер Ю.П., Маркова Е.В., Грановский Ю.В.* Планирование эксперимента при поиске оптимальных условий. – М.: Наука, 1976. – 279 с.
- Азгальдов Г.Г.* Общие сведения о методологии квалиметрии // Стандарты и качество. 1994. №.11. С. 24-35.
- Азгальдов Г.Г., Райхман Э. П.* О квалиметрии. – М.: -Стандарты, 1973.
- Айвазян С.А., Бежяева З.И., Староверов О.В.* Классификация многомерных наблюдений. – М.: Статистика, 1974. – 240 с.
- Айвазян С.А., Буштабер В.М., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д.* Прикладная статистика. Классификация и снижение размерностей. – М.: Финансы и статистика, 1989. – 607 с.
- Айвазян С.А., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д.* Прикладная статистика. Основы моделирования и первичная обработка данных. Справочное издание. – М.: Финансы и статистика, 1983. – 472 с.
- Айвазян С.А., Енюков И.С., Мешалкин Л.Д.* Прикладная статистика: Исследование зависимостей: Справочник. – М.: Финансы и статистика, 1985. – 182с.
- Айвазян С.А., Мхитарян В.С.* Прикладная статистика и основы эконометрики. – М. Юнити, 1998. – 1024 с.
- Айвазян С.А., Степанов В.С.* Инструменты статистического анализа данных // Мир ПК. 1997. № 8. Расширенная Интернет-версия по адресу <http://www.tvp.ru/prog/progrfr.htm>.
- Айвазян С.А., Степанов В.С.* Программное обеспечение по статистическому анализу данных: методология сравнительного анализа и выборочный обзор рынка // ТВП (Теория Вероятностей и ее Применения). Адрес в Интернет <http://www.cemi.rssi.ru/rus/publicat/e-pubs/ep97001t.htm>
- Айзерман М.А., Браверман Э.М., Розоноэр Л.И.* Метод потенциальных функций в теории обучения машин. – М.: Наука, 1970. – 384 с.
- Алгоритмы и программы* восстановления зависимостей. – М.: Наука, 1984. – 816 с.
- Алекин О.А.* К вопросу о химической классификации природных вод // Вопросы геохимии. 1946. С. 14-35.
- Алекин О.А.* Основы гидрохимии. – Л.: Гидрометеоздат, 1970. – 296 с.
- Александров В.В., Горский Н.Д.* Алгоритмы и программы структурного метода обработки данных. – Л.: Наука, 1983. – 208 с.
- Александров В.В., Шнейдеров В.С.* Обработка медико-биологических данных на ЭВМ. – Л.: Медицина, 1984. – 160 с.
- Алексахин С.В. и др.* Прикладной статистический анализ данных. Теория. Компьютерная обработка. Области применения. В 2-х томах. – М.: ПРИОР, 2002. – 688 с.
- Алексеев В.А.* Основы биоиндикации качества вод на уровне организмов // Водн. ресурсы. 1984а. № 2. С. 107-121.
- Алексеев В.А.* Система токсобности и ее место в унифицированной системе качества вод СССР // Водн. ресурсы. 1984б. № 5. С. 76-87.
- Алимов А.Ф.* Интенсивность обмена у пресноводных двустворчатых моллюсков // Экология. 1975. № 1. С. 10-20.

- Алимов А.Ф.** Структурно-функциональный подход к изучению сообществ водных животных // Экология. 1982. № 3. С. 45-51.
- Алимов А.Ф.** Исследования биотических балансов экосистем пресноводных водоемов в СССР // Гидробиол. журн. 1987. Т. 23. № 6. С. 7-10.
- Алимов А.Ф.** Общие основы учения биологической продуктивности водоемов // Гидробиол. журн. 1988. Т. 24. № 3. С. 40-51.
- Алимов А.Ф.** Введение в продукционную гидробиологию. – Л.: Наука, 1989. – 152 с.
- Алимов А.Ф.** Основные положения теории функционирования водных экосистем // Гидробиол. журн. 1990. Т. 26. № 6. С. 7-13.
- Алимов А.Ф.** Элементы теории функционирования экосистем. – СПб.: ЗИН РАН, 2000. – 147 с.
- Алимов А.Ф., Балушкина Е.В., Умнов А.А.** Подходы к оценке состояния водных экосистем // Экологическая экспертиза и критерии экологического нормирования. – СПб.: СПбНЦ РАН, 1996а. С. 37 - 47.
- Алимов А.Ф., Бульон В.В., Гутельмахер Б.Л., Иванова М.Б.** Методы изучения участия гидробионтов в процессах самоочищения водоемов // Роль гидробионтов в очистке сточных вод. – Фрунзе: Илим, 1977. С. 3-42.
- Алимов А.Ф., Голубков С.М., Панов В.Е.** Закономерности функционирования и стратегия управления экосистемами эстуария реки Невы // Экологическое состояние водоемов и водотоков бассейна реки Невы. – СПб.: СПбНЦ РАН, 1996б. С. 187-203.
- Алимов А.Ф., Финогенова Н.П.** Количественная оценка роли сообщества донных животных в процессах самоочищения пресноводных водоемов // Гидробиологические основы самоочищения вод. – Л.: ЗИН АН СССР, 1976. С. 5-14.
- Андерсен Т.** Введение в многомерный статистический анализ. – М.: Физматгиз, 1963. – 500 с.
- Андреев В.Л.** Системы классификации в биогеографии и систематике (детерминистские методы) // Иерархические классификационные построения в географической экологии и систематике. – Владивосток: ДВНЦ АН СССР, 1979а. С. 3-59.
- Андреев В.Л.** Статистические методы классификационных построений в биогеографии и систематике // Иерархические классификационные построения в географической экологии и систематике. – Владивосток: ДВНЦ АН СССР, 1979б. С. 60-96.
- Аптон Г.** Анализ таблиц сопряженности. – М.: Финансы и статистика, 1982. – 144 с.
- Аркадьев А.Г., Браверман Э.М.** Обучение машины классификации объектов. – М.; Наука, 1971. – 192 с.
- Арманд А.Д.** Информационные модели природных комплексов. – М.: Наука, 1975. – 126 с.
- Арнольд В.И.** Теория катастроф. – М.: Наука, 1990. – 128 с.
- Афифи А., Эйзен С.** Статистический анализ: Подход с использованием ЭВМ. – М.: Мир, 1982. – 488 с.
- Ащепкова Л.Я.** Математические модели водных экосистем (обзор) // Математическое моделирование водных экологических систем. – Иркутск: ИГУ, 1978. С. 6-46.
- Баевский Р.М.** Прогнозирование состояния на грани нормы и патологии. – М.: Медицина, 1979. – 157 с.
- База эколого-экономических данных крупного региона (Методическое пособие).** – Тольятти: ИЭВБ РАН, 1991. – 62 с.
- Базыкин А.Д.** Математическая биофизика взаимодействующих популяций. – М.: Наука, 1985. – 180 с.
- Баканов А.И.** Обзор существующих подходов к районированию водохранилищ // Экологическое районирование пресноводных водоемов. Труды ИБВВ АН СССР, вып. 62(65). – Рыбинск: ИБВВ АН СССР, 1990. С. 3-16.
- Баканов А.И.** Способ ранжирования гидробиологических данных в зависимости от экологической обстановки в водоеме // Биол. внутр. вод. 1997. № 1. С. 53-58.
- Баканов А.И.** Использование комбинированных индексов для мониторинга пресноводных водоемов по зообентосу // Водн. ресурсы. 1999. Т. 26. № 1. С. 108-111.
- Баканов А.И.** Использование зообентоса для мониторинга пресноводных водоемов // Биол. внутр. вод. 2000а. № 1. С. 68-82.
- Баканов А.И.** О некоторых методологических вопросах применения системного подхода для изучения структур водных экосистем // Биол. внутр. вод. 2000б. № 2. С. 5-18.
- Балушкина Е.В.** Функциональное значение личинок хирономид / Тр. Зоол. ин-та АН СССР. Т. 142. – Л.: Наука, 1987. – 179 с.
- Балушкина Е.В.** Применение интегрального показателя для оценки качества вод по структурным характеристикам донных сообществ // Реакция озерных экосистем на изменение внешних условий. – СПб.: ЗИН РАН, 1997. С. 266-292.
- Балушкина Е.В.** Структура сообществ донных животных и оценка экологического состояния р. Ижоры: оценка качества вод р. Ижоры по структурным характеристикам донных животных в разные годы // Биол. внутр. вод. 2002. № 4. С. 61-68.

- Балушкина Е.В., Финогенова Н.П.** Структурные характеристики зообентоса как основа оценки состояния экосистем Невской губы и восточной части Финского залива // Структурно-функциональная организация пресноводных экосистем разного типа. Труды ЗИН РАН. Т. 279. – СПб.: Наука, 1999. – С. 269 - 292.
- Балушкина Е.В., Финогенова Н.П., Слепухина Т.Д.** Изменение характеристик зообентоса в системе Ладога – р. Нева – Невская губа – восточная часть Финского залива // Экологическое состояние водоемов и водотоков бассейна р. Невы. – СПб.: ЗИН РАН, 1996. С. 91-100.
- Банди Б.** Методы оптимизации. – М.: Радио и связь, 1988. – 178 с.
- Барабаш Ю.Л. и др.** Вопросы статистической теории распознавания / Под ред. Б.В. Варского. – М.: Советское радио, 1967. – 400с.
- Батоян В.В.** Решение задач геохимии ландшафтов и почвоведения с применением математических методов. – М.: МГУ, 1983. – 120 с.
- Башкин В.Н.** Оценка степени риска при критических нагрузках загрязняющих веществ на экосистемы // География и природные ресурсы. 1999. № 1. С. 35-39.
- Бейм А.М., Красовский Г.И., Сутокская И.В., Васюкович Л.Я.** Эколого-гигиенические подходы к биоиндикации качества воды // Самоочищение воды и миграции загрязнений по трофической цепи. – М.: Наука, 1984. С. 16-22.
- Беляев В.И.** Теория сложных геосистем. – Киев: Наук. думка, 1978. – 155 с.
- Беляев В.И., Ивахненко А.Г., Флейшман Б.С.** Имитация, самоорганизация и потенциальная эффективность // Автоматика. 1979. № 6. С. 9-17.
- Беляев М.П.** Справочник предельно допустимых концентраций вредных веществ в пищевых продуктах и среде обитания. – М.: Госсанэпиднадзор, 1993. – 141 с.
- Берман Д.И., Виленкин Б.Я.** Некоторые принципы исследования сообществ // Количественные методы в экологии и биоценологии животных суши. – Л.: Наука, 1975. С. 10-12.
- Бершадский А., Новик К., Новицкий Д. и др.** Азбука многомерного анализа (в картинках) / Научный руководитель проекта Л.Н. Столяров. – М.: Студенческая Лаборатория "Computer Science" МФТИ, Програм-Банк, 1999. – Адрес в Интернет <http://www.cslab.mipt.ru>
- Беспамятнов Г.П., Кротов Ю.А.** Предельно допустимые концентрации химических веществ в окружающей среде. – Л.: Химия, 1985. – 528 с.
- Бешелев С.Д., Гурович Ф.Г.** Математико-статистические методы экспертных оценок. – М.: Статистика, 1980. – 263 с.
- Бигон М., Харпер Дж., Таунсенд К.** Экология: Особи, популяции, сообщества: В 2-х т. – М.: Мир, 1989. Т. 1. – 667 с.; Т. 2. – 477 с.
- Бикел П., Доксам К.** Математическая статистика. – М.: Финансы и статистика, 1983. Вып. 1. - 278 с.; Вып. 2. – 254 с.
- Биоиндикация природных водоемов (телекоммуникационный проект) / ГУ ЯО "Центр телекоммуникаций и информационных систем в образовании", 2002. Адрес в Интернет www.windows-1251.edu.yar.ru/russian/misc/eco_page/bioind**
- Биоиндикация: теория, методы, приложения / Под ред. Г.С. Розенберга. – Тольятти: Изд-во Интер-Волга, 1994. – 266 с.**
- Боголюбов А.Г.** Столетие биометрии в России // Изв. СамНЦ РАН. 2002. Т. 4. № 2. С. 189-196.
- Богословский Б.Б.** Озероведение. – М.: МГУ, 1960. – 335 с.
- Большев Л.Н., Смирнов Н.В.** Таблицы математической статистики. - М.: ВЦ АН СССР, 1968 (2-е изд.). - 474 с.
- Бонгард М.М.** Проблема узнавания. – М.: Наука, 1967. – 320 с.
- Бондаренко В.В.** 48 часов с Nostalgie. – Самара: Изд. Дом "Бахрах-М", 2002. – 240 с.
- Борисов А.Н., Алексеев А.В., Крумберг О.А. и др.** Модели принятия решений на основе лингвистической переменной. – Рига: Зинатне, 1982. – 256 с.
- Борисов А.Н., Алексеев А.В., Меркурьева Г.В. и др.** Обработка нечеткой информации в системах принятия решений. – М: Радио и связь. 1989. – 304 с.
- Боровиков В.П.** Statistica для студентов и инженеров. – М.: КомпьютерПресс, 2001. – 301 с.
- Браверман Э.М., Мучник Ч.Б.** Структурные методы обработки эмпирических данных. – М.: Наука, 1983. – 464 с.
- Брагинский Л.П.** Экологические подходы к исследованию механизмов действия токсикантов в водной среде. // Формирование и контроль качества поверхностных вод. Вып. 1. – Киев: Наук. думка, 1975. С. 5—15.
- Брагинский Л.П.** Теоретические аспекты проблемы нормы и патологии в водной экотоксикологии. // Теоретические вопросы водной токсикологии. – Л.: Наука, 1981. С. 29-40.
- Брагинский Л.П.** Некоторые принципы классификации пресноводных экосистем по уровням токсической загрязненности // Гидробиол. журн. 1985. Т. 21. № 6. С. 65-74.
- Брагинский Л.П., Комаровский Ф.Я, Мережко А.И.** Персистентные пестициды в экологии пресных вод. – Киев: Наук. думка, 1979. – 140 с.
- Браунли К. А.** Статистическая теория и методология в науке и технике. - М.: Наука, 1977. - 408 с.

- Бреховских В.Ф.** Гидрофизические факторы формирования кислородного режима водоемов. – М.: Наука, 1988. – 168 с.
- Брусиловский П.М.** Становление математической биологии. – М.: Знание, 1985. – 62 с.
- Брусиловский П.М.** Коллективы предикторов в экологическом прогнозировании. – Саратов: Изд-во Саратов. ун-та, 1987. – 104 с.
- Брусиловский П.М., Розенберг Г.С.** О возможности построения модели, удовлетворительно описывающей колебания в одной реальной системе хищник-жертва // Динамика эколого-экономических систем. – Новосибирск: Наука, 1981а. С. 84-91.
- Брусиловский П.М., Розенберг Г.С.** Проверка неадекватности имитационных моделей динамической системы с помощью алгоритмов МГУА // Автоматика. 1981б. № 6. С. 43-48.
- Брусиловский П.М., Розенберг Г.С.** Модельный штурм при исследовании экологических систем // Журн. общ. биол. 1983. Т. 44, № 2. С. 266-274.
- БСЭ** – Большая Советская Энциклопедия / РУБРИКОН - информационно-энциклопедический проект компании «Русс. портал». Адрес в Интернет http://www.rubricon.ru/bse_1.asp
- Будилова Е.В., Дрогалина Ж.А., Терехин А.Т.** Основные направления современной экологии и ее математический аппарат: анализ публикаций // Журн. общ. биол. 1995. Т. 56. № 2. С. 179-189.
- Букатова И.Л.** Эволюционное моделирование и его приложения. – М.: Наука, 1979. – 232 с.
- Букатова И.Л., Михасев Ю.И., Шаров А.М.** Экоинформатика. Теория и практика эволюционного моделирования. – М.: Наука, 1991. – 206 с.
- Булгаков Г.П.** Принципы оценки качества текучих вод Узбекистана с помощью МБМ // Тр. Среднеазиат. регион. н.-и. гидрометеорол. ин-та. 1989. № 135. С. 13-21.
- Булгаков Н.Г., Дубинина В.Г., Левич А.П., Терехин А.Т.** Метод поиска сопряженностей между гидробиологическими показателями и абиотическими факторами среды (на примере уловов и урожайности промысловых рыб) // Изв. РАН. Сер. биол. 1995. № 2. С. 218-225.
- Бульон В.В.** Первичная продукция планктона внутренних водоемов. – Л.: Наука, 1983. – 151 с.
- Бульон В.В.** Закономерности первичной продукции в лимнических экосистемах. – СПб.: Наука, 1994. – 222 с.
- Бурдин К.С.** Основы биологического мониторинга. – М.: МГУ, 1985. – 158 с.
- Былинкина А.А., Драчев С.М., Ицкова А.И.** О приемах графического изображения аналитических данных о состоянии водоема // Материалы 16-го совещ. Гидрохим. ин-та АН СССР. – Новочеркасск: АН СССР, 1962.
- Вайну Я.Я.-Ф.** Корреляция рядов динамики. – М.: Статистика, 1977. – 119 с.
- Вайнцивайг М.Н.** Алгоритм обучения распознаванию образов «Кора» // Алгоритмы обучения распознаванию образов / Под ред. В.Н. Вапника. – М.: Сов. радио, 1973. С. 110-116.
- Вайнштейн Б.А.** Об оценке сходства между биоценозами // Биология, морфология и систематика водных организмов. – Л.: ЗИН АН СССР, 1976. С. 156-164.
- Ван дер Варден Б.Л.** Математическая статистика. – М.: Изд-во иностр. лит., 1960. – 302 с.
- Вапник В.Н., Червоненкис А.Я.** Теория распознавания образов. – М.: Наука, 1974. – 487 с.
- Василевич В.И.** О количественной мере сходства между фитоценозами // Проблемы ботаники. Т. 6. – М.; Л.: Наука, 1962. С. 83-94
- Василевич В.И.** Статистические методы в геоботанике. – Л.: Наука, 1969. – 232 с.
- Василевич В.И.** Количественные методы изучения структуры растительности // Итоги науки и техники. Ботаника. Т. 1. – М.: Изд-во ВИНТИ, 1972. С. 7-83.
- Василевич В.И.** Очерки теоретической фитоценологии. – Л.: Наука, 1983. – 248 с.
- Василевич Н.Г.** Системный подход и методологические проблемы экологии // Методология частных наук. – Иркутск, 1979. С. 104-112.
- Васильев В.И.** Распознающие системы: Справочник. – К.: Наук. думка, 1983. – 230с.
- Васильев В.И., Ильясов Б.Г.** Интеллектуальные системы управления с использованием нечеткой логики. Учеб. пособие. – Уфа: УГАТУ, 1995. – 80 с.
- Васильев В.И., Ильясов Б.Г.** Интеллектуальные системы управления с использованием генетических алгоритмов. Учебное пособие. – Уфа: УГАТУ, 1999. – 105 с.
- Васильев В.И., Ильясов Б.Г., Валеев С.В., Жернавков С.В.** Интеллектуальные системы управления с использованием нейронных сетей. Учебное пособие. – Уфа: УГАТУ, 1997. – 92 с.
- Васильев В.И., Коноваленко В.В., Горелов Ю.И.** Имитационное управление неопределенными объектами. – К.: Наукова думка, 1989. – 216 с.
- Васильева Е.А., Виниченко В.Н, Гусева Т.В. и др.** Как организовать общественный экологический мониторинг / Под ред. М.В. Хотулевой. – М.: СоЭС - Методический центр «Эколайн», 1998. Адрес в Интернет www.cci.glasnet.ru/mc/books/monitor
- Васюкович Л.Я.** Норма и патология // Теоретические проблемы водной токсикологии. – М.: 1983. С. 164-165.

- Ватанабе С.** Разложение Карунена–Лоэва и факторный анализ. Теория и приложения // Автоматический анализ сложных изображений. – М.: Мир, 1969. С. 239-253.
- Вентцель Е.С.** Теория вероятностей. – М.: Высш. шк., 1999. – 576 с.
- Верхаген К., Дейн Р., Грун Ф и др.** Распознавание образов: состояние и перспективы. – М.: Радио и связь, 1985. – 104 с.
- Виленкин Б.Я.** Взаимодействующие популяции // Математическое моделирование в экологии. – М.: Наука, 1978. С. 5-16.
- Вильсон А.Дж.** Энтропийные методы моделирования сложных систем. – М.: Наука, 1978. – 248 с.
- Винберг Г.Г.** Некоторые общие вопросы продуктивности озер // Зоол. журн. 1936. Т. 15. Вып. 4. С. 587-603.
- Винберг Г.Г.** Интенсивность обмена и пищевые потребности рыб. – Минск: Изд. Белорус. Ун-та, 1956. – 254 с.
- Винберг Г. Г.** Первичная продукция водоемов. – Минск: Изд-во АН БССР, 1960. – 328 с.
- Винберг Г.Г.** Зависимость энергетического обмена от массы тела у водных пойкилотермных животных // Журн. общ. биол. 1976. Т. 37. Вып. 1. С. 56-70.
- Винберг Г. Г.** Общие основы изучения водных экосистем. – Л.: Наука, 1979а. – 273 с.
- Винберг Г.Г.** Опыт применения разных систем биологической информации загрязнения вод в СССР // Влияние загрязняющих веществ на гидробионтов и экосистемы водоемов. – Л.: Наука, 1979б. С. 43-51.
- Винберг Г.Г.** Опыт применения разных систем биологической индикации загрязнения вод в СССР // Влияние загрязняющих веществ на гидробионтов и экосистемы водоемов. – Л., Наука, 1979в. С. 285-292.
- Винберг Г.Г.** Температурный коэффициент Вант-Гоффа и уравнение Аррениуса в биологии // Журн. общ. биол. 1983. Т. 44. № 1. С. 3-42.
- Винберг Г.Г., Анисимов С.И.** Математическая модель водной экосистемы // Фотосинтезирующие системы высокой продуктивности. – М.: Наука, 1966. С. 213-223.
- Виттих В.А.** Системообразующая функция интеграции знаний в организациях. Препринт № 2. – Самара: ИПУСС РАН, 1998. 20 с.
- Виттих В.А.** Инженерная эпистемология // Проблемы управления и моделирования в сложных системах: Труды III Международной конференции. – Самара: СамНЦ РАН, 2001. С. 92-100.
- Водный кодекс** Российской Федерации. Принят Государственной Думой 18 октября 1995 года. Адрес в Интернет <http://www.medinfo.ru/ecolog/ek3.shtml>
- Волков И.В., Заличева И.Н., Ганина В.С. и др.** О принципах регламентирования антропогенной нагрузки на водные экосистемы // Водн. ресурсы. 1993. Т. 20. № 6. С. 707-713.
- Волков И.В., Заличева И.Н., Шустова Н.К. Ильмаст Т.Б.** Есть ли экологический смысл у общенациональных рыбохозяйственных ПДК? // Экология. 1996. № 5. С. 350-354.
- Воробейник Е.Л., Садыков О.Ф., Фарафонов М.Г.** Экологическое нормирование техногенных загрязнений наземных экосистем. – Екатеринбург: УИФ Наука, 1994. – 380 с.
- Временная типовая** методика определения экономической эффективности осуществления природоохраняющих мероприятий и оценки экономического ущерба, причиняемого народному хозяйству загрязнением окружающей среды. – М.: Экономика, 1986. – 96 с.
- Временные методические** указания по комплексной оценке качества поверхностных и морских вод. Утв. Госкомгидрометом СССР 22.09.1986 г. № 250-1163. – М.: 1986. – 5 с.
- Вудивисс Ф.С.** Биотический индекс р. Трент. Макробеспозвоночные и биологическое обследование // Научные основы контроля качества поверхностных вод по гидробиологическим показателям. – Л.: Гидрометеоиздат, 1977. С. 132-161.
- Вучков И., Бояджиева Л., Солаков Е.** Прикладной линейный регрессионный анализ. – М.: Финансы и статистика, 1987. – 239 с.
- Выханду Л.К.** Об исследовании многопризнаковых биологических систем // Применение математических методов в биологии. Т. III. – Л.: ЛГУ, 1964. С. 9-12.
- Выхристюк Л.А., Зинченко Т.Д., Шитиков В.К.** Комплексная оценка экологического состояния равнинных рек в условиях антропогенных воздействий // Научные аспекты экологических проблем России. – СПб.: Гидрометеоиздат, 2001. С. 70.
- Гаазе-Рапопорт М.Г., Поспелов Д.А.** От амебы до робота: модели поведения. – М.: Наука, 1987. – 285 с.
- Габор Д.** Перспективы планирования // Автоматика. 1972. № 2. С. 16-22.
- Гаек Я., Шидак З.** Теория ранговых критериев. – М.: Наука, 1971. – 376 с.
- Гайдышев И.П.** Анализ и обработка данных: специальный справочник. – СПб.: Питер, 2001. – 752 с.
- Гегель Г.** Энциклопедия философских наук. – М.: Наука, 1974. С. 240.
- Гелашвили Д.Б., Безруков М.Е., Бельшева О.И., Черников А.А.** Количественные методы оценки кумулятивного и комбинированного действия ксенобиотиков // Экологический мониторинг. Ч. III: Методы биологического и физико-химического мониторинга. – Н. Новгород: ННГУ, 1998. С. 175-217.
- Гелашвили Д.Б., Зинченко Т.Д., Выхристюк Л.А., Карандашова А.А.** Интегральная оценка экологического состояния водных объектов по гидрохимическим и гидробиологическим показателям // Изв. СамНЦ РАН. 2002. № 2. С. 270-275.

- Гелета И.Ф., Крауклис А.А.** Применение метода главных компонент при анализе структуры и динамики наземного покрова таежных фаций // Моделирование и прогноз динамики геосистем. – Иркутск: Ин-т геогр. Сибири и Дал. Востока СО АН СССР, 1979. С. 111-132.
- Генкин Я.Я.** Новая информационная технология анализа медицинских данных. – СПб: Политехника, 1999. – 191 с.
- Георгиевский В.Б.** Идентификация и верификация моделей водных экосистем // Проблемы сохранения, защиты и улучшения качества природных вод. – М.: Наука, 1982. С. 156-163.
- Герасименко Г.Г., Ипатов В.С.** Анализ распределения обилия видов как метод классификации растительности // Бот. журн. 1980. Т. 65. № 5. С. 717-724.
- Герасимов И.П.** Научные основы современного мониторинга окружающей среды // Изв. АН СССР. Сер. геогр. 1975. № 3. С. 13-25.
- Герасимов И.П.** Мониторинг окружающей среды // Общие проблемы географии и моделирование геосистем: Тр. XXII Международного географического конгресса. – М., Наука, 1976. С. 15-34.
- Гидробиологический режим** малых рек в условиях антропогенного воздействия / Под ред. Андрушайтиса Г.П., Качаловой О.Л. – Рига: Зинатне, 1981. – 166 с.
- Гильманов Т.Г.** Математическое моделирование биогеохимических циклов в травяных экосистемах. – М.: МГУ, 1978. – 169 с.
- Гиляров А.М.** Соотношение биомассы и видового разнообразия в планктонном сообществе // Зоол. журн. 1969. Т. 48. № 4. С. 485-493.
- Гинзбург Э.Х.** Сравнение оценок показателя силы влияния // Генетика. 1969. Т. 5. № 4. С. 150-160.
- Гладышев М.И.** Основы экологической биофизики водных систем. – Новосибирск: Наука, 1999. – 113 с.
- Глазовская М.А.** Технобиогеомы – исходные физико-географические объекты ландшафтно-геохимического прогноза // Вест. МГУ. Сер. геогр. 1988. № 4. С.54-59.
- Гмурман В.С.** Теория вероятностей и математическая статистика. – М.: Высш. шк., 1972. – 368 с.
- Гнеденко Б.В.** Курс теории вероятностей: Учебник. – М.: Наука, 1988. – 380 с.
- Голендер В.Е., Розенблит А.Е.** Вычислительные методы конструирования лекарств. – Рига: Зинатне, 1978. – 179 с.
- Головко В.А.** Нейроинтеллект: Теория и применения. Книга 1 Организация и обучение нейронных сетей с прямыми и обратными связями. – Брест: БПИ, 1999. – 260 с. Книга 2 Самоорганизация, отказоустойчивость и применение нейронных сетей – Брест: БПИ, 1999. – 228 с.
- Голубева Г.В.** Использование хирономид в индикации качества воды малых рек Нечерноземной зоны РСФСР // Биоценология рек и озер Волжского бассейна. – Ярославль: ИБВВ АН СССР, 1985. С. 34-61.
- Голубков С.М.** Функциональная экология личинок амфибиотических насекомых // Тр. Зоол. ин-та АН СССР. Т. 284. – СПб.: Наука, 2000. – 294 с.
- Горбань А.Н.** Обучение нейронных сетей. – М.: Изд. СССР-США СП "ParaGraph", 1990. – 160 с.
- Горбань А.Н.** Нейроинформатика и ее приложения // Открытые системы. 1998а. № 4. Адрес в Интернет <http://www.osp.ru/os/1998/04/05.htm>
- Горбань А.Н.** Функции многих переменных и нейронные сети // Соросовский образовательный журнал. 1998б. № 12. С. 105-112.
- Горбань А.Н., Дунин-Барковский В.Л., Кирдин А.Н. и др.** Нейроинформатика. – Новосибирск: Наука. Сибирское предприятие РАН, 1998. – 296 с.
- Горбань А.Н., Россиев Д.А.** Нейронные сети на персональном компьютере. – Новосибирск: Наука, 1996. – 276 с.
- Горелик А.Л., Гуревич И.Б., Скрипкин В.А.** Современное состояние проблемы распознавания. – М.: Радио и связь, 1985. – 160 с.
- Горелик А.Л., Скрипкин В.А.** Методы распознавания. – М.: Высш. шк., 1984. – 219 с.
- Горстко А.Б., Эпштейн Л.В.** Имитационная система «Азовское море» – инструмент анализа и прогнозирования // Математическое моделирование водных экологических систем. – Иркутск, ИГУ, 1978. С. 47-58.
- ГОСТ 12.1.007-76.** Система стандартов безопасности труда. Вредные вещества. Классификация и общие требования безопасности. – М.: Гос. комитет СССР по стандартам, 1976.
- ГОСТ 14.413-80.** Банки данных технологического назначения. Общие требования. – М.: Гос. ком. СССР по стандартам, 1980. – 3 с.
- ГОСТ 17.1.1.01-77.** Охрана природы. Гидросфера. Использование и охрана вод. Основные термины и определения. М: Гос. ком. СССР по стандартам, 1977.
- ГОСТ 17.1.1.02-77.** Охрана природы. Гидросфера. Классификация водных объектов. – М.: Гос. ком. СССР по стандартам, 1977.
- ГОСТ 17.1.1.03-86** (СТ СЭВ 5182-85). Охрана природы. Гидросфера. Классификация водопользований. - М.: Гос. ком. СССР по стандартам, 1986.
- ГОСТ 17.1.2.04-77.** Охрана природы. Гидросфера. Показатели состояния и правила таксации рыбохозяйственных водных объектов. – М.: Гос. ком. СССР по стандартам, 1977.

- ГОСТ 17.1.3.07-82.** Охрана природы. Гидросфера. Правила контроля качества воды в водоемах и водотоках. – М.: Гос. ком. СССР по стандартам, 1982.
- ГОСТ 17.1.5.02-80.** Охрана природы. Гидросфера. Гигиенические требования к зонам рекреации водных объектов. – М.: Гос. ком. СССР по стандартам, 1980.
- Государственный доклад** "О состоянии окружающей природной среды Российской Федерации в 1995 г.". – М.: Центр междунар. проектов, 1996. – 458 с.
- Гренандер У.** Лекции по теории образов. – М.: Мир. Т. 1. Синтез образов. 1979. – 384 с.; Т. 2. Анализ образов. 1981. – 448 с.; Т. 3. Регулярные структуры. 1983. – 432 с.
- Гродзинский М.Д.** Эмпирические и формально-статистические методы определения областей допустимых и нормальных состояний // Научные подходы к определению норм нагрузок на ландшафты. – М.:Изд-во МГУ, 1988. С. 215-224.
- Гублер Е.В.** Вычислительные методы анализа и распознавания патологических процессов. – Л.: Медицина, 1978. – 296 с.
- Гублер Е.В., Генкин А.А.** Применение непараметрических критериев статистики в медико-биологических исследованиях. – Л.: Медицина, 1973. – 142 с.
- Гусев А.Г.** Охрана рыбохозяйственных водоемов от загрязнения. – М.: Пищ. пром-ть, 1975. – 179 с.
- Гусева Т.В., Молчанова Я.П., Заика Е.А. и др.** Гидрохимические показатели состояния окружающей среды: справочные материалы. – М.: СоЭС, Метод. центр «Эколайн», 2000. Адрес в Интернет www.cci.glasnet.ru/mc/refbooks/hydrochem
- Гутельмахер Б.Л.** Метаболизм планктона как единого целого. – Л.: Наука, 1986. – 155 с.
- Даддингтон К.** Эволюционная ботаника. – М.: Мир, 1972. – 308 с.
- Дедю И.И.** Экологический энциклопедический словарь. – Кишинев: Гл. ред. Молдав. Сов. Энциклопедии, 1990. – 408 с.
- Дейт К.** Введение в системы баз данных. – Киев: Диалектика, 1998. – 784 с.
- Деревья классификации** / Электронный учебник по статистике. Адрес в Интернет <http://www.statsoft.ru/home/>
- Джеффферс Дж.** Введение в системный анализ: применение в экологии. – М.: Мир, 1981. – 252 с.
- Джонсон Н., Лион Ф.** Статистика и планирование эксперимента в технике и науке. – М.: Мир. Т. 1. 1980. – 610 с.; Т. 2. 1981. – 520 с.
- Джурс П., Айзенаур Т.** Распознавание образов в химии. – М.: Мир, 1977. – 230 с.
- Дзюбан Н.А., Кузнецова С.П.** О гидробиологическом контроле качества вод по зоопланктону // Научные основы контроля качества вод по гидробиологическим показателям: Тр. Всес. конф. – Л.: Наука, 1981. С. 117-136.
- Дидэ Э. и др.** Методы анализа данных: Подход, основанный на методе динамических сгущений. – М.: Финансы и статистика, 1985. – 357с.
- Динамическая теория** биологических популяций / Под ред. Р.А. Полуэктова. – М.: Наука, 1974. – 456 с.
- Дмитриев В.В.** Экологическое нормирование состояния и антропогенных воздействий на природные экосистемы // Вестн. СПб. ун-та. 1994. Сер. 7. Вып. 2(14). С. 60-70.
- Дмитриев М.Т., Казнина Н.И., Пинигина И.А.** Санитарно-химический анализ загрязняющих веществ в окружающей среде. – М.: Химия, 1991. – 544 с.
- Долгов Г.И., Никитинский Я.Я.** Гидробиологические методы // Стандартные методы исследования питьевых и сточных вод. – М.: Мосполиграф, 1927. С.142-217.
- Домбровский Ю.А.** Модель биотического круговорота Таганрогского залива // Изв. СКНЦ ВШ. Естеств. Науки. 1977. № 2. С. 94-102.
- Дорофеев А.А.** Алгоритмы автоматической классификации // Проблемы расширения возможностей автоматов (Труды Ин-та пробл. управ. АН СССР). Вып 1. – М.: ИПУ АН СССР, 1971. С. 5-41.
- Драбкова В.Г., Сорокин И.Н.** Озеро и его водосбор – единая природная система. – Л.: Наука, 1979. – 196 с.
- Драчев С.М.** Борьба с загрязнением рек, озер и водохранилищ промышленными и бытовыми стоками. – М.-Л.: АН СССР, 1964. – 274 с.
- Дрейпер Н., Смит Г.** Прикладной регрессионный анализ: В 2-х кн.– М.: Финансы и статистика. Кн. 1. 1986. – 366 с.; Кн. 2. 1987. – 351 с.
- Дружинин В.В., Конторов Д.С.** Проблемы системологии (проблемы теории сложных систем). – М.: Сов. радио, 1976. – 296 с.
- Дубницкий В.Ю., Цейтлин Н.А.** Оценка качества материала по содержанию вредных примесей с учетом интересов производителя и потребителя // Модели и системы. Труды. Вып. 1. – Харьков: Харьк. военный ун-т, 1999. С. 30-32.
- Дубров А.М.** Обработка статистических данных методом главных компонент. – М.: Финансы и статистика, 1978. – 135 с.
- Дуда Р., Харт П.** Распознавание образов и анализ сцен. – М.: Мир, 1978. – 510 с.
- Дуплаков С.М.** Материалы к изучению перифитона // Труды Лимнологической станции в Косине. 1933. Т. 16. С. 9-136.

- Дьяконов В., Круглов В.* Математические пакеты расширения МАТЛАБ. Специальный справочник. – СПб.: Питер, 2001. – 480 с.
- Дэйвисон М.* Многомерное шкалирование. Методы наглядного представления данных. – М.: Финансы и статистика, 1988. – 348 с.
- Дюк В.* Обработка данных на ПК в примерах. – СПб.: Питер, 1997. – 240 с.
- Дюран Б., Оддел П.* Кластерный анализ. – М.: Статистика, 1977. – 128 с.
- Елисеева И.И., Юзбашев М.М.* Общая теория статистики. – М.: Финансы и статистика, 1995. – 368 с.
- Елисеева Л.И., Рукавишников В.О.* Группировка, корреляция, распознавание образов. – М.: Статистика, 1977. – 144 с.
- Емельянов В.В., Ясиновский С.И.* Введение в интеллектуальное имитационное моделирование сложных дискретных систем и процессов. Язык РДО. – М.: Изд-во АНВИК, 1998. – 427 с.
- Емельянова В.П., Данилова Г.Н., Зенин А.А.* Метод комплексной оценки загрязнения воды // Оценка и классификация качества поверхностных вод для водопользования. – Харьков, 1979. С. 126-128.
- Емельянова В.П., Данилова Г.Н., Родзиллер И.Д.* Способ обобщения показателей для оценки качества поверхностных вод // Гидрохим. материалы. 1980. Т. 77. С. 88-96.
- Енюков И.С.* Методы, алгоритмы, программы многомерного статистического анализа. – М.: Финансы и статистика, 1986.
- Жадин В. И.* Донные биоценозы реки Оки и их изменения за 35 лет. // Загрязнение и самоочищение р. Оки. – М.; Л.: Наука, 1964. С. 226-287.
- Жамбю М.* Иерархический кластер-анализ и соответствия. – М.: Финансы и статистика, 1988. – 342 с.
- Жолдакова З.И., Сеницына О.О., Харчевникова Н.В., Зайцев Н.А.* Проблема единого эколого-гигиенического нормирования химических веществ в окружающей среде // Гигиена и санит. 1998. № 4. С. 57-60.
- Жукинский В.Н., Окснюк О.П., Олейник Г.Н., Кошелева С.И.* Проект системы комплексной оценки качества поверхностных пресных вод // Водн. ресурсы. 1978. № 3. С. 83-93.
- Жукинский В.Н., Окснюк О.П., Олейник Г.Н., Кошелева С.И.* Принципы и опыт построения экологической классификации качества поверхностных вод суши // Гидробиол. журн. 1981. Т. 17. № 2. С. 38-50.
- Журавлев Ю.И.* Об алгебраическом подходе к решению задач распознавания или классификации // Проблемы кибернетики. Вып. 33. – М.: Наука, 1978. С. 5-68.
- Журавлев Ю.И., Никифоров В.В.* Алгоритмы распознавания, основанные на вычислении оценок. // Кибернетика. 1971. № 3. С. 1-11.
- Загоруйко Н.Г.* Методы распознавания и их применение. – М.: Сов. радио, 1972. – 308 с.
- Заде Л.* Основы нового подхода к анализу сложных систем и процессов принятия решений // Математика сегодня. – М.: Знание, 1974. С. 5-49.
- Заде Л.А.* Понятие лингвистической переменной и его применение к принятию приближенных решений. – М.: Мир, 1976. – 165 с.
- Заика В.Е.* Сравнительная продуктивность гидробионтов. – Киев: Наук. думка, 1983. – 206 с.
- Зайцев Г.Н.* Математическая статистика в экспериментальной ботанике. – М.: Наука, 1984. – 424 с.
- Закс Л.* Статистическое оценивание. – М.: Статистика, 1976. – 598 с.
- Замолодчиков Д.Г.* Оценка экологически допустимых уровней антропогенного воздействия на пресноводные экосистемы // Проблемы экологического мониторинга и моделирования экосистем. – СПб: Гидрометеоиздат, 1993. Т. 15. С. 214-233.
- Замолодчиков Д.Г., Булгаков Н.Г., Гурский А.Г. и др.* К методике применения детерминационного анализа для обработки экологических данных // Науч. докл. высш. шк. Биол. науки. 1992. № 7. С. 116-133.
- Зенкевич Л.А.* Продуктивность морских водоемов СССР // Тр. фаунист. конф. Зоологического ин-та АН СССР. – Л.: Секция гидробиол., 1934. С. 11-18.
- Зенкевич Л.А.* Фауна и биологическая продуктивность моря. Т. 1. – М.: Сов. наука, 1951. – 505 с.
- Зернов С.А.* Общая гидробиология. Изд. 2. – М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1949. – 587 с.
- Зинченко Т.Д.* Хирономиды поверхностных вод бассейна Средней и Нижней Волги (Самарская область). Эколого-фаунистический обзор. – Самара: ИЭВБ РАН, 2002. – 174 с.
- Зинченко Т.Д., Выхристюк Л.А., Шитиков В.К.* Методологический подход к оценке экологического состояния речных систем по гидрохимическим и гидробиологическим показателям // Изв. СамНЦ РАН. 2000. Т. 2. № 2. С. 233-243.
- Зинченко Т.Д., Молодых Н.В.* Закономерности многолетних изменений хирономид в бентосе Куйбышевского водохранилища // Экологические проблемы бассейнов крупных рек. – Тольятти: ИЭВБ РАН, 1993. С. 78-79.
- Зинченко Т.Д., Шитиков В.К.* Гидробиологический мониторинг как основа типологии малых рек Самарской области // Изв. СамНЦ РАН. 1999. Т. 1. № 1. С. 118-127.
- Зоммер Е.А.* Теоретические и экспериментальные предпосылки к разработке экологически обоснованных региональных ПДК // Вторая Всесоюзная конференция по рыбохозяйственной токсикологии: Тез. докл. – СПб., 1991. Т. 1. С. 224-226.

- Зорин Н.А.** О неправильном употреблении термина "достоверность" в российских научных психиатрических и общемедицинских статьях // Адрес в Интернет <http://www.biometrica.tomsk.ru:8101/lib/naukoved/let1.htm>
- Ивахненко А.Г.** Самообучающиеся системы распознавания и автоматического управления. – Киев: Техника, 1969. – 392 с.
- Ивахненко А.Г.** Долгосрочное прогнозирование и управление сложными системами. – Киев: Техника, 1975. – 311 с.
- Ивахненко А.Г.** Индуктивный метод самоорганизации моделей сложных систем. – Киев: Наук. думка, 1982. – 296 с.
- Ивахненко А.Г., Зайченко Ю.П., Димитров В.Д.** Принятие решений на основе самоорганизации. – М.: Сов. радио, 1976. – 280 с.
- Ивахненко А.Г., Кротов Г.И., Чеберкус В.И.** Многорядный алгоритм самоорганизации долгосрочных прогнозов (на примере экологической системы оз. Байкал) // Автоматика. 1980. № 4. С. 28-47.
- Ивахненко А.Г., Лана В.Г.** Предсказание случайных процессов. – Киев: Наук. думка, 1971. – 416 с.
- Ивахненко А.Г., Юрачковский Ю.П.** Моделирование сложных систем по экспериментальным данным. – М.: Радио и связь, 1987. – 118 с.
- Ивашко В.Г., Кузнецов С.О.** Оценки правдоподобия в продукционных экспертных системах / Экспертные системы: состояние и перспективы. – М.: Наука, 1989. – 152 с.
- Ивлев В.С.** О превращении энергии при росте беспозвоночных // Бюлл. МОИП. Отд. биол. 1938. Т. 47, № 4. С. 267-277.
- Ивлев В.С.** О структурных особенностях биоценозов // Изв. АН Латв. ССР. 1954. Т. 10 (87). С. 53-68.
- Ивлев В.С.** Экспериментальная экология питания рыб. – М.: Пищепромиздат, 1955. – 252 с.
- Израэль Ю.А.** Глобальная система наблюдений. Прогноз и оценка изменений состояния окружающей природной среды. Основы мониторинга // Метеорология и гидрология. 1974. № 7. С. 3-8.
- Израэль Ю.А.** Концепция мониторинга состояния биосферы // Мониторинг состояния окружающей природной среды. Тр. 1 советско-английского симпозиума. – Л.: Гидрометеиздат, 1977. С. 10-25.
- Израэль Ю.А.** Экология и контроль состояния природной среды. – М.: Гидрометеиздат, 1984. – 560 с.
- Израэль Ю.А., Абакумов В.А.** Об экологическом состоянии поверхностных вод СССР и критериях экологического нормирования // Экологические модификации и критерии экологического нормирования. – Л.: Гидрометеиздат, 1991. С. 7-18.
- Исаков Ю.А., Казанская Н.С., Тишков А.А.** Зональные закономерности динамики экосистем. – М.: Наука, 1986. – 150 с.
- Исаченко А.Г.** Ландшафтоведение и физико-географическое районирование. – М.: Высш. шк., 1991. – 336 с.
- Казан Ю.С.** О вероятностном подходе к установлению пороговых и неэффективных доз при действии химических веществ // Гигиена и санитария. 1978. № 8. С. 278.
- Казан Ю.С., Станкевич В.В.** Коэффициент кумуляции как количественный критерий // Актуальные вопросы гигиены труда, промышленной токсикологии и профпатологии в нефтяной и нефтехимической промышленности. – Уфа, 1964. С. 48-49.
- Казначеев В.П., Спиринов Е.А.** Космопланетарный феномен человека: проблемы комплексного изучения. – Новосибирск: Наука, 1991. – 304 с.
- Калинина В.Н., Панкин В.Ф.** Математическая статистика. – М.: Высш. шк., 2001. – 336 с.
- Калужский государственный педагогический университет им. К.Э. Циолковского.** Лаборатория биоиндикации. Адрес в Интернет <http://kspu.kaluga.ru/biomon/index.htm>
- Каменев А.Г.** Продукция сообществ макрозообентоса водотоков // Биопродуктивность и биоиндикация водотоков правобережного Средневожья: Макрозообентос. – Саранск: 1993. С. 136-182.
- Каминский В.С.** Состав и качество поверхностных вод: Понятие «качество» воды // Основы прогнозирования качества поверхностных вод. – М.: Наука, 1982. С. 6-22.
- Камлюк Л.В.** Энергетический обмен у свободноживущих плоских и кольчатых червей и факторы, его определяющие // Журн. общ. биол. 1974. Т. 35. Вып. 6. С. 874-885.
- Каплин В.М.** Превращение органических веществ в природных водах. Автореф. докт. дисс. – Иркутск: Иркутск. гос. ун-т, 1973. – 36 с.
- Качанова Т.Л., Фомин Б.Ф.** Реконструктивный анализ поведения сложных систем по эмпирическим данным. Препринт № 1. – СПб: Изд-во СПбГЭТУ, 1997.
- Кашкаров Д.Н.** Среда и сообщество (Основы синэкологии). – М.: Медгиз, 1933. – 383 с.
- Кендалл (Кендэлл) М.** Ранговые корреляции. – М.: Статистика, 1975. – 212 с.
- Кендалл М., Стьюарт А.** Теория распределений. – М.: Наука, 1966. – 566 с.
- Кендалл М., Стьюарт А.** Статистические выводы и связи. – М.: Наука, 1973. – 899 с.
- Ким Дж.О., Мьюллер Ч.У., Клекка У.Р. и др.** Факторный, дискриминантный и кластерный анализ. – М.: Финансы и статистика, 1989. – 215 с.
- Кимстач В.А.** Классификация качества поверхностных вод в странах Европейского экономического сообщества. – СПб.: Гидрометеиздат, 1993. – 48 с.

- Китаев С.П.** Термические классификации озер мира // Водн. ресурсы. 1978. № 1. С. 87-103.
- Китаев С.П.** Экологические основы биопродуктивности озер разных природных зон. – М.: Наука, 1984. – 207 с.
- Классификация и кластер** / Под ред. Дж. Вэн-Райзина. – М.: Мир, 1980. – 390 с.
- Кожова О.М.** Применение методов экосистемного анализа к оценке качества вод (на примере Ангары и Байкала). // Научные основы контроля качества поверхностных вод по гидробиологическим показателям. Тр. Советско-английского семинара. – Л.: Гидрометеиздат, 1977. С. 16-29.
- Кожова О.М.** Прогноз состояния водных экосистем и приемы экологической оценки действия антропогенных факторов // Прогнозирование экологических процессов. – Новосибирск: Наука, 1986. С. 27-34.
- Кожова О.М., Ащепкова Л.Я., Загоренко Г.Ф.** Исследование некоторых методов биологического контроля рек // Гидробиологические исследования в Восточной Сибири. Чтения памяти проф. М.М. Кожова. – Иркутск: Изд. ИГУ. 1979. Вып. 3. С. 67-82.
- Кожова О.М., Павлов Б.К.** Организация биомониторинга Байкала // Приемы прогнозирования экологических систем. – Новосибирск: Наука, 1985. С. 4-8.
- Кожова О.М., Павлов Б.К.** Популяционные аспекты исследования зоопланктона оз. Байкал // Прогнозирование экологических процессов. – Новосибирск: Наука, 1986. С. 132-138.
- Колмогоров А.Н.** Избранные труды: Математика и механика. – М.: Наука, 1985. С. 136-138.
- Колодяжный С.Ф.** Проблемы изучения взаимосвязей в биометрических исследованиях // Исследование биологических систем математическими методами. – Л.: 1985. С. 18-34.
- Колодяжный С.Ф., Пааль Я.Д.** О некоторых проблемах теории и практики количественной классификации растительности // Исследования биологических систем математическими методами. – Л.: 1985. С. 126-138.
- Коломыц Э.Г.** Модели цепных реакций в лесных экосистемах как основа локального мониторинга глобальных изменений // Теоретические проблемы экологии и эволюции (Третьи Люблинские чтения). – Тольятти: ИЭВБ РАН, 2000. С. 73-76.
- Кольцов П.П.** Математические модели теории распознавания образов // Компьютер и задачи выбора. – М.: Наука, 1989. С. 89-119.
- Комплексные оценки** качества поверхностных вод / Под ред. А.М. Никанорова. – Л.: Гидрометеиздат, 1984. – 139 с.
- Константинов А.С.** Основные принципы оценки мощности системы биологического самоочищения водоемов, некоторые показатели ее работы в Волгоградском водохранилище и пути установления ПДК в естественных условиях // Водн. ресурсы. 1973. № 4. С. 149-153.
- Константинов А.С.** Общая гидробиология. – М.: Высш. шк., 1979. – 480 с.
- Константинов А.С.** Оценка и индикация состояния экосистем в условиях антропогенного воздействия // Научные основы контроля качества поверхностных вод по гидробиологическим показателям. – Л.: Гидрометеиздат, 1981. С. 75-89.
- Коршунов Ю.М.** Математические основы кибернетики. – М.: УРСС, 1995. – 325 с.
- Котов В.Н.** Применение теории измерений в биологических исследованиях. – Киев: Наук. думка, 1985. – 98 с.
- Котов В.Н., Терентьева Н.Г.** Разграничение двух совокупностей биологических объектов на примере планктонных видов рода *Anabaena Vory*. Препринт. – Киев: Институт ботан. им. Н.Г. Холодного АН УкрССР, 1989. – 52 с.
- Кохонен Т.** Ассоциативные запоминающие устройства. – М.: Мир, 1982. – 383 с.
- Кравцов Б.А., Милютин Л.И.** Возможности применения многомерной классификации при изучении популяций древесных растений // Пространственно-временная структура лесных биогеоценозов. – Новосибирск: Наука, 1981. С. 47-65.
- Крамер Г.** Математические методы статистики. – М.: Мир, 1975. – 648 с.
- Крапивин В.Ф.** О теории живучести сложных систем. – М.: Наука, 1978. – 248 с.
- Крапивин В.Ф., Свирижев Ю.М., Тарко А.М.** Математическое моделирование глобальных биосферных процессов. – М.: Наука, 1982. – 270 с.
- Краскел Дж.Б.** Многомерное шкалирование и другие методы поиска структуры // Статистические методы для ЭВМ. – М.: Наука, 1986. С. 301-347.
- Краснощевков Г.П., Розенберг Г.С.** Естественно-исторические аспекты формирования территории Волжского бассейна // Изв. СамНЦ РАН. 1999. Т. 1. № 1. С. 108-117.
- Красовский Г.Н., Воробьева Л.В.** Эколого-гигиеническая оценка водной среды на основе факторного анализа // Гигиена и санит. 1998. № 4. С. 19-23.
- Красовский Г.Н., Егорова Н.А.** Гигиенические и экологические критерии вредности в области охраны водных объектов // Гигиена и санит. 2000. № 6. С. 14-16.

- Красовский Г.Я.** Аэрокосмический мониторинг поверхностных вод (практические аспекты). – М.: Науч. совет по космич. исслед. для народн. хоз-ва МКС АН СССР. – 231 с.
- Крестин С.В., Розенберг Г.С.** Об одном механизме "цветения воды" в водохранилище равнинного типа // Биофизика. 1996. Т. 41. Вып. 3. С. 650-654.
- Крестин С.В., Розенберг Г.С.** Двухмерная модель "цветения воды" в водохранилище равнинного типа // Изв. СамНЦ РАН. 2002. Т. 4. № 2. С. 276-279.
- Кривоуцкий Д.А., Степанов А.М., Тихомиров Ф.А., Федоров Е.А.** Экологическое нормирование на примере радиоактивного и химического загрязнения экосистем // Методы биоиндикации окружающей среды в районах АЭС. – М.: Наука, 1988. С. 4-16.
- Критерии оценки** экологической обстановки территорий для выявления зон чрезвычайной экологической ситуации и зон экологического бедствия. Утверждено Приказом Минприроды РФ от 30 ноября 1992 г. – 51 с. (Опубликовано в газете "Зеленый мир". 1994. № 11).
- Крогиус Ф.В., Крохин Е.М., Куренков И.И., Менишуткин В.В.** Модель экологической системы озера Дальнего // Гидробиол. журн. 1969. Т.5. № 5. С. 14-22.
- Кузин Л.Т.** Основы кибернетики. (Основы кибернетических моделей). Т. 2. – М.: Энергия, 1979. – 584 с.
- Кулагин Ю.З.** К теории экологического прогнозирования // Экология. 1980. № 5. С. 36-41.
- Кульбак С.** Теория информации и статистика. – М.: Наука, 1967. – 408 с.
- Кун Т.** Структура научных революций. – М.: Прогресс, 1977. – 300 с.
- Куприянова Т.П.** Принципы и методы физико-географического районирования с применением ЭВМ. – М.: Наука, 1977. – 124 с.
- Куркин К.А.** Системный подход в экологических исследованиях // Системные исследования. – М.: Наука, 1977. С. 195-211.
- Курляндский Б.А., Шитиков В.К., Тихонов В.Н., Ковалев А.Ф.** Прогнозирование гигиенических нормативов методом построения "обобщенного портрета" // Гигиена труда и профессиональные заболевания. 1988. № 6. С. 33-37.
- Кустов В.В., Тиунов Л.А., Васильев Г.А.** Комбинированное действие промышленных ядов. – М.: Медицина, 1975. – 184 с.
- Кутикова Л.А.** Коловратки речного планктона как показатели качества вод // Методы биологического анализа пресных вод. – Л.: ЗИН АН СССР, 1976. С. 80-90.
- Лазарев Н.В.** Основы промышленной токсикологии. – Л.: Медгиз, 1938. – 388 с.
- Лакин Г.Ф.** Биометрия. – М.: Высш. шк., 1990. – 352 с.
- Лапач С.Н., Чуйсенко А.В., Бабич П.И.** Статистические методы в медико-биологических исследованиях с использованием Excel. – М.: Изд-во "Морион Лтд", 2000. – 320 с.
- Ланко А.В., Цугленок Н.В., Цугленок Г.И.** Имитационные модели пространственно распределенных экологических систем. – Новосибирск: Наука, 1999. – 190 с.
- Ларичев О.И., Мечитов А.И., Мошкович Е.М., Фуремс Е.М.** Выявление экспертных знаний (процедуры и реализации). – М.: Наука, 1989. – 128 с.
- Лбов Г.С.** Методы обработки разнотипных экспериментальных данных. – Новосибирск: Наука, 1981. – 157 с.
- Левич А.П.** Структура экологических сообществ. – М.: МГУ, 1980. – 181 с.
- Левич А.П.** Биотическая концепция контроля природной среды // Докл. Академии наук. 1994. Т. 337 № 2. С. 257-259.
- Левич А.П., Терехин А.Т.** Метод расчета экологически допустимых уровней воздействия на пресноводные экосистемы (метод ЭДУ) // Водн. ресурсы. 1997. Т. 24. № 3. С. 328-335.
- Левушкин С.И.** Понятие вида и экология // Материалы к II Всесоюзному совещанию "Вид и его продуктивность в ареале". – Вильнюс: Лит. АН, 1976. С. 83-85.
- Лем С.** Сумма технологии. – М.: Мир, 1968. – 608 с. Адрес в Интернет <http://lib.ru//LEM/summa.txt>
- Леман Э.** Проверка статистических гипотез. – М.: Наука, 1964. – 498 с.
- Леме Ж.** Основы биогеографии. – М.: Прогресс, 1976. – 309 с.
- Леонов А.В.** Математическая модель совместной трансформации соединений азота, фосфора и кислорода в водной среде: ее применение для анализа динамики компонентов в евтрофном озере // Водн. ресурсы. 1989. № 2. С. 105-123.
- Леонов А.В., Остащенко М.М., Лаптева Е.Н.** Математическое моделирование процессов трансформации органического вещества и соединений биогенных элементов в водной среде: предварительный анализ условий функционирования экосистемы Ладожского озера // Водн. ресурсы. 1991. № 1. С. 51-72.
- Леонов А.В., Цхай А.А.** Прогноз качества воды проектируемого водохранилища на основе модели трансформации соединений азота и фосфора // Водн. ресурсы. 1995. № 3. С. 261-272.
- Леонов В.П.** Три "Почему ..." и пять принципов описания статистики в биомедицинских публикациях // "Биометрика". а. Адрес в Интернет <http://www.biometrica.tomsk.ru>
- Леонов В.П.** Долгое прощание с лысенковщиной // "Биометрика". б. Адрес в Интернет <http://www.biometrica.tomsk.ru>

- Леонов В.П.** Искушение знанием или «Сколько стоит биометрика?» // "Биометрика". в. Адрес в Интернет <http://www.biometrica.tomsk.ru>
- Лефевр В.А.** Конфликтующие структуры. – М.: Сов. радио, 1973. – 158 с.
- Ли Н.** Экологическая экспертиза. Учебное руководство. – М.: Экопрос, 1995. – 187 с.
- Ликеш И., Ляга И.** Основные таблицы математической статистики. – М.: Финансы и статистика, 1985. – 356 с.
- Лисенков А.Н.** Математические методы планирования многофакторных медико-биологических экспериментов. – М.: Медицина, 1979. – 344 с.
- Литвак Б.Г.** Экспертная информация. Методы получения и анализа. – М.: Радио и связь, 1982. – 184 с.
- Логвиненко Н.В.** Петрография осадочных пород. – М.: Высш. шк., 1974. – 399 с.
- Логофет Д.О., Свирежев Ю.М.** Концепция устойчивости биологических систем // Проблемы экологического мониторинга и моделирования экосистем. – Л.: Гидрометеиздат, 1983, Т. 6. С. 159-171.
- Лорьер Ж.-Л.** Системы искусственного интеллекта. – М.: Мир, 1991. – 342 с.
- Лоули Д., Максвелл А.** Факторный анализ как статистический метод. – М.: Мир, 1967. – 144 с.
- Лукьяненко В.И.** Общая ихтиотоксикология. – М.: Легкая и пищ. пром-ть, 1983. – 320 с.
- Лукьяненко В.И.** Экология водоемов. Охрана и рациональное использование рыбных запасов бассейна Волги. Концепции, цели, задачи. – Н.Новгород: ННГУ, 1992. – 32 с.
- Лукьяненко В.И.** Экологические ПДК и комплексный экологический мониторинг качества вод // Розенберг Г.С., Краснощеков Г.П. Волжский бассейн: экологическая ситуация и пути рационального природопользования - Тольятти: ИЭВБ РАН, 1996. С. 218-219.
- Луценко Е.В.** Теоретические основы и технология адаптивного семантического анализа в поддержке принятия решений (На примере универсальной автоматизированной системы распознавания образов "ЭЙ-ДОС-5.1"). – Краснодар: КЮИ МВД РФ, 1996. – 278 с. Адрес в Интернет <http://lc.narod.ru/aidos/aidos96/aidos96.htm>
- Луценко Е.В.** Автоматизированный системно-когнитивный анализ в управлении активными объектами (системная теория информации и ее применение в исследовании экономических, социально-психологических, технологических и организационно-технических систем). – Краснодар: КубГАУ. 2002. – 605 с. Адрес в Интернет <http://lc.narod.ru/aidos/aidos02/index.htm>
- Любимцев А.А.** Об ошибках в применении математики в биологии. I. Ошибки от недостатка осведомленности // Журн. общ. биол. 1969а. Т. 3. № 5. С. 572-584.
- Любимцев Л.Л.** Об ошибках в применении математики в биологии. II. Ошибки, связанные с избытком энтузиазма // Журн. общ. биол. 1969б. Т. 3. № 6. С. 715-723.
- Любимцев А.А.** Дисперсионный анализ в биологии. – М.: МГУ, 1986. – 200с.
- Лянунов А.А.** Проблемы теоретической и прикладной кибернетики. – М.: Наука, 1980. – 335 с.
- Мазуров В.Д.** Плохо формализуемые задачи планирования технико-экономических систем. – Свердловск: Средне-Урал. кн. изд-во, 1982. – 64 с.
- Майстренко В.Н., Хамитов Р.З., Будников Г.К.** Эколого-аналитический мониторинг суперэкоотоксикантов. – М.: Химия, 1996. – 319 с.
- Макарова Н.П.** Балансовый анализ уравнений биоэнергетики // Биология моря (Киев). 1975. Вып. 33. С. 49-55.
- Макрушин А.В.** Биологический анализ качества вод. – Л.: ЗИН АН СССР, 1974а. – 60 с.
- Макрушин А.В.** Библиографический указатель по теме "Биологический анализ качества вод" с приложением списка организмов-индикаторов загрязнения. – Л.: ЗИН АН СССР, 1974б. – 53 с.
- Максимов В.Н.** Об одном способе оценки качества природных вод // Самоочищение и биоиндикация природных вод. - М.: Наука, 1980. С. 212-219.
- Максимов В.Н., Булгаков Н.Г., Левич А.П., Терехин А.Т.** Методика применения детерминационного анализа данных мониторинга для целей экологического контроля природной среды // Успехи соврем. биол. 2001. Т. 121. № 2. С. 131-143.
- Максимов В.Н., Булгаков Н.Г., Милованова Г.Ф.** Детерминационный анализ связей между различными компонентами экосистем. Сравнение с методами традиционной статистики // Изв. РАН. Сер. биол. 1999. № 4. С. 469-477.
- Максимов В.Н., Булгаков Н.Г., Милованова Г.Ф., Левич А.П.** Детерминационный анализ в экосистемах: сопряженности для биотических и абиотических компонент // Изв. РАН. Сер. биол. 2000а. № 24. С. 482-491.
- Максимов В.Н., Милованова Н.Г., Булгаков Н.Г., Левич А.П.** Индикация состояния экосистем методами детерминационного анализа // Теоретические проблемы экологии и эволюции. – Тольятти: ИЭВБ РАН, 2000б. С. 113-120.

- Малиновский А.А.** Общие вопросы строения систем и их значение для биологии // Вопросы методологии системного исследования. – М.: Наука, 1970. С. 146-183.
- Мандель И.Д.** Кластерный анализ. – М.: Финансы и статистика, 1988. – 176 с.
- Маргалев Р.** Облик биосферы. – М.: Наука, 1992. – 214 с.
- Масалович А.И.** Этот нечеткий, нечеткий, нечеткий мир // PC Week/RE. 1995. № 16. С. 15-18.
- Масалович А.И.** Нечеткая логика: на гребне "Третьей Волны" // Адрес в Интернет [http://www. toga-centre.ru/library/fuzzy/ct_fuz. htm](http://www.toga-centre.ru/library/fuzzy/ct_fuz.htm)
- Мейен С.В.** Нетривиальная биология (Заметки о...) // Журн. общ. биол. 1990. Т. 51. № 1. С. 4 -14.
- Мейер М.** Теория реляционных баз данных. – М.: Мир, 1987. – 608 с.
- Мейндональд Дж.** Вычислительные алгоритмы в прикладной статистике. – М.: Финансы и статистика, 1988. – 350 с.
- Менишуткин В.В.** Математическое моделирование популяций и сообществ водных животных. – Л.: Наука, 1971. – 196 с.
- Менишуткин В.В., Кожова О.М., Ащенкова Л.Я.** Модель сезонной динамики экосистемы озера Байкал // Модели природных систем. – Новосибирск, Наука, 1978. С. 57-64.
- Менишуткин В.В., Кожова О.М., Ащенкова Л.Я., Кротова В.А.** Камерная модель динамики экосистемы озера Байкал с учетом трехмерной циркуляции вод // Математическое моделирование водных экосистем. – Л.: Гидрометеоздат, 1981. С. 288-298.
- Менишуткин В.В., Умнов А.А.** Математическая модель простейшей водной экологической системы // Гидро-биол. журн. 1970. Т. 6. Вып. 2. С. 28-35.
- Меркурьев В.В., Молдавский М.А.** Семейство сверток векторного критерия для нахождения точек множества Парето // Автоматика и телемеханика. 1979. № 1. С. 110-121.
- Методика изучения** биогеоценозов внутренних водоемов. – М.: Наука, 1975. – 240 с.
- Методика расчета** предельно-допустимых сбросов (ПДС) веществ в водные объекты со сточными водами – Харьков: ВНИИВО, 1990. – 115 с.
- Методические рекомендации** по применению биотестирования для оценки качества воды в системах хозяйственно-питьевого водоснабжения. МР № ЦОС ПВ Р 005-95. – М.: 1995. – 50 с.
- Методические рекомендации** по установлению ПДК загрязняющих веществ для воды рыбохозяйственных водоемов. – М.: 1986. – 36 с.
- Методические указания** к экспериментальному изучению процессов трансформации химических веществ при их гигиеническом регламентировании в воде. № 2966-84. – М.: Минздрав СССР, 1984. – 24 с.
- Методические указания** по изучению мутагенной активности химических веществ при обосновании их ПДК в воде. № 4110-86. – М.: Минздрав СССР, 1986. – 23 с.
- Методические указания** по обоснованию гигиенических нормативов химических веществ в воде водных объектов хозяйственно-питьевого и культурно-бытового водопользования. МУ 2.1.5.720-98. – М.: 1998. – 44 с.
- Методические указания** по определению концентраций химических веществ в воде централизованного хозяйственно-питьевого водоснабжения: Сборник методических указаний. – М.: 1997. – 112 с.
- Методические указания** по разработке и научному обоснованию предельно допустимых концентраций вредных веществ в воде водоемов. № 1296-75. – М.: Минздрав СССР, 1976. – 78 с.
- Методология оценки** состояния экосистем: учебное пособие / Под ред. О.М. Кожовой и В.В. Воробьева. – Ростов-на-Дону: Изд-во ООО «ЦВВР», 2000. – 128 с
- Методы определения** токсичности и опасности химических веществ (токсикометрия) / Под ред. И.В. Санюцкого. – М.: Медицина, 1970. – 343 с.
- Мизандронцев И.Б.** Химические процессы в донных отложениях водоемов. – Новосибирск: Наука, 1991. – 176 с.
- Минский М., Пейперт С.** Перцептроны. – М.: Мир, 1971. – 252 с.
- Миркин Б.Г., Черный Л.Б.** Об измерении близости между различными разбиениями конечного множества объектов // Автоматика и телемеханика. 1970. № 5. С. 6-18.
- Миркин Б.М.** О парадигме в фитоценологии // Журн. общ. биол. 1984. Т. 45. № 6. С. 749-788.
- Миркин Б.М.** Теоретические основы современной фитоценологии. – М.: Наука, 1985. – 136 с.
- Миркин Б.М.** Современное состояние и тенденции развития классификации растительности методом Браун-Бланке // Итоги науки и техники. Ботаника. Т. 9. – М.: ВИНТИ, 1989. – 126 с.
- Миркин Б.М., Наумова Л.Г.** Градиентный анализ растительности // Успехи совр. биол. 1983. Т. 95. Вып. 2. С. 304-318.
- Миркин Б.М., Наумова Л.Г.** Наука о растительности (история и современное состояние основных концепций). – Уфа: Гилем, 1998. – 413 с.
- Миркин Б.М., Наумова Л.Г., Соломещ А.И.** Современная наука о растительности. – Уфа: Логос, 2000. – 264 с.
- Миркин Б.М., Розенберг Г.С.** Анализ мозаичности травянистых растительных сообществ. 2. Ценотический уровень // Биол. науки. 1977а. № 2. С. 121-126.

- Миркин Б.М., Розенберг Г.С.** Факторный анализ в фитоценологии. 1. Общая характеристика модели // Биол. науки. 1977. № 12. С. 121-126.
- Миркин Б.М., Розенберг Г.С.** Фитоценология. Принципы и методы. – М.: Наука, 1978. – 212 с.
- Миркин Б.М., Розенберг Г.С.** Количественные методы классификации, ординации и геоботанической индикации // Итоги науки и техники. Ботаника. Т. 3. – М.: ВИНТИ, 1979. С. 71-137.
- Миркин Б.М., Розенберг Г.С., Бурцева Е.А.** Факторный анализ в фитоценологии. 2. Сравнение влияния ведущих факторов // Биол. науки. 1978а. № 4. С. 136-143.
- Миркин Б.М., Розенберг Г.С., Гареева Л.М., Яценко О.В.** Факторный анализ в фитоценологии. 3. Оценка экологичности классификаций // Биол. науки. 1978б. № 12. С. 130-135.
- Миркин Б.М., Розенберг Г.С., Наумова Л.Г.** Новый коэффициент межвидовой сопряженности, удобный для классификации пойменных лугов (трансформированный коэффициент Дайса, ТКД) // Растительность речных пойм, методы ее изучения и вопросы рационального использования: Тез. докл. Всесоюз. конф. – Уфа: БФАН СССР, 1972. С. 85-86.
- Миркин Б.М., Розенберг Г.С., Наумова Л.Г.** Словарь понятий и терминов современной фитоценологии. – М.: Наука, 1989. – 223 с.
- Мозговой Д.П., Розенберг Г.С., Владимирова Э.Д.** Информационные поля и поведение млекопитающих. – Самара: Изд-во "Сам. ун-т", 1998. – 92 с.
- Моисеев Н.Н.** Человек и ноосфера. – М.: Мол. гвардия, 1990. – 352 с.
- Моисеенко Т.И.** Методические подходы к нормированию антропогенных нагрузок на водоемы Субарктики (на примере Кольского севера) // Проблемы химического и биологического мониторинга экологического состояния водных объектов Кольского севера. – Апатиты: Кольский науч. центр, 1995. С. 7-23.
- Моисеенко Т.И.** Экотоксикологический подход к нормированию антропогенных нагрузок на водоемы Севера // Экология. 1998. № 6. С. 452-461.
- Моисеевкова Т.А., Шитиков В.К.** Принципы организации регионального банка эколого-экономической информации // Моделирование процессов экологического развития (М., ВНИИСИ АН СССР). 1989. № 7. С. 110-117.
- Мокеева Н.П., Межов Б.В.** Численность зообентоса как показатель изменений в морских донных сообществах // Гидробиол. журн. 1986. Т. 22. № 4. С. 28-31.
- Мокров И.В., Гелашвили Д.Б.** Оценка качества городской среды по стабильности развития березы повислой (*Betula pendula* Roth) // Экологические и метеорологические проблемы больших городов и промышленных зон. Тез. докл. – СПб.: РГГМУ, 1999. С. 43-44.
- Молчанов А.М.** Математические модели в экологии: Роль критических режимов // Математическое моделирование в биологии. – М.: Наука, 1975. С. 133-141.
- Мордохай-Болтовской Ф.Д.** Особенности программы и методики биогеоценологических исследований внутренних водоемов // Программа и методика биогеоценологических исследований. – М.: Наука, 1974. – 76 с.
- Морозов В.Г.** Эволюционное моделирование рядов произвольной вариабильности: необходимость и методика прогнозирования // Изв. СамНЦ РАН. 2000. Т. 2. № 2. С. 206-215.
- Мостеллер Ф., Тьюки Дж.** Анализ данных и регрессия. – М.: Финансы и статистика, 1982. – 30 с.
- Муравейский С.Д.** Роль географических факторов в формировании географических комплексов // Вопр. географии. 1948. С. 9-36.
- Мюллер П., Нейман П., Шторм Р.** Таблицы по математической статистике: – М.: Финансы и статистика, 1982. – 272 с.
- Нагель Э., Ньюмен Д.** Теорема Гёделя. – М.: Знание, 1970. – 62 с.
- Надарая Э.А.** Об оценке плотности распределения случайных величин // Сообщ. АН ГССР. 1964. Т. 34. № 2. С. 277-280.
- Налимов В.В.** Применение математической статистики при анализе вещества. – М.: Физматгиз, 1960. – 430 с.
- Налимов В.В.** Теория эксперимента. – М.: Наука, 1971. – 207 с.
- Налимов В.В.** Теоретическая биология? Ее все еще нет... // Знание – сила. 1979. № 7. С. 9-11. Адрес в Интернет <http://www.biometrica.tomsk.ru:8101/lib/naukoved/\nalimov1.htm>
- Налимов В.В.** Вероятностная модель языка. – М.: Наука, 1979. – 176 с.
- Налимов В.В.** Спонтанность сознания. Вероятностная теория смыслов и смысловая архитектура личности. – М.: Изд-во "Прометей" МГПИ им. Ленина, 1989. – 112 с.
- Наумов Н.П.** Экология животных. 2-е изд. – М.: Высш. шк., 1963. – 618 с.
- Наумов Н.П.** Биологические (сигнальные) поля и их значение в жизни млекопитающих // Успехи современной териологии. – М.: Наука, 1977. С. 93-108.
- Наумова В.В.** Некоторые приложения теории графов к классификации // Иерархические классификационные построения в географической экологии и систематике. – Владивосток: ДВНЦ АН СССР, 1979. С. 113-120.
- Нейман Ю.** Вводный курс теории вероятностей и математической статистики. – М.: Наука, 1968. – 448 с.

- Нейронные сети*. Statistica Neural Networks. – М.: Горячая линия – Телеком, 2001. – 182 с.
- Нетрадиционные модели* и системы с нечеткими знаниями /Под ред. А.Ф. Блишуна. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 144 с.
- Никитин Я.Ю.* Асимптотическая эффективность непараметрических критериев. – М.: Наука, 1995. – 240 с.
- Николаевский В.С.* Биомониторинг, его значение и роль в системе экологического мониторинга и охране окружающей среды // Методологические и философские проблемы биологии. – Новосибирск. Наука, 1981. С. 341-354.
- Николис Дж.* Динамика иерархических систем: Эволюционное представление. – М.: Мир, 1989. – 448 с.
- Никулина В.Н.* Опыт использования разных методов оценки степени загрязнения вод по альгофлоре // Методы биологического анализа пресных вод. – Л.: ЗИН АН СССР, 1976. С 38-58.
- Нильсен Н. Д.* Искусственный интеллект. Методы поиска решений.- М.: Мир, 1973. – 298 с.
- Нинбург Е.А.* Разграничение морских бентосных сообществ на основе данных факторного анализа (метод главных компонент) // Исследование биологических систем математическими методами. – Л.: 1985. С. 111-126.
- Новиков С.М., Поройков В.В., Тертичников С.Н. и др.* Анализ тенденций в развитии информационных технологий и обоснование концепции разработки банка токсикологических данных SARETbase // Гигиена и санит. 1995. № 1. С. 29-33.
- Новиков С.М., Фурсова Т.Н.* Метод количественной оценки кумулятивных свойств вредных веществ // Гигиена и санит. 1987. № 10. С. 52-55.
- Новиков С. М., Шашина Т. А., Скворцова Н. С.* Критерии оценки риска при кратковременных воздействиях химических веществ // Гигиена и санит. 2001. № 5. С 87-89.
- Новиков Ю.В., Плитман С.И., Ласточкина К.С. и др.* Оценка качества воды по комплексным показателям // Гигиена и санит. 1987. № 10. С. 7-11.
- Новиков Ю.В., Ласточкина К.С., Болдина З.Н.* Методы исследования качества воды водоемов. – М.: Медицина, 1990. – 376 с.
- Ноулер Л., Хауэлл Дж., Голд Б. и др.* Статистические методы контроля качества продукции. – М.: Изд-во стандартов, 1989. – 96с.
- Одум Ю.* Основы экологии. - М.: Мир, 1975. - 740 с.
- Одум Ю.* Экология: В 2-х т. – М.: Мир, 1986. Т. 1. – 328 с.; Т. 2. – 376 с.
- Оксиюк О.П., Жукинский В.Н., Брагинский Л.П. и др.* Комплексная экологическая классификация качества поверхностных вод суши // Гидробиол. журн. 1993. Т. 29. № 4. С. 62-77.
- Оксиюк О.П., Олейник Г.Н., Юрченко В.В., Шевцова Л.В.* Гидробиологический режим и процессы формирования качества воды в каналах // Проблемы гидробиологии каналов. – Киев: Наук. думка, 1978. С. 176-198.
- Орлов А.И.* Прикладная теория измерений // Прикладной многомерный статистический анализ. – М.: Наука, 1978. С. 68-138.
- Орлов А.И.* Устойчивость в социально-экономических моделях. – М.: Наука, 1979. – 296 с.
- Орлов А.И.* Задачи оптимизации и нечеткие переменные. – М.: Знание, 1980. – 53 с.
- Орлов А.И.* Репрезентативная теория измерений и ее применение // «Высокие статистические технологии» а. / Адрес в Интернет <http://antorlov.chat.ru/reprteor.htm>
- Орлов А.И.* Современная прикладная статистика // «Высокие статистические технологии» б. / Адрес в Интернет <http://antorlov.chat.ru/statisc.htm>
- Орловский С.А.* Проблемы принятия решений при расплывчатой информации. – М.: Наука, 1981. – 370 с.
- Основы общей промышленной токсикологии* / Под ред. Н.А. Толоконцева и В.А. Филова. – Л.: Медицина, 1976. – 304 с.
- Оуэн Д.Б.* Сборник статистических таблиц. Изд. 2-е, испр. – М.: ВЦ АН СССР, 1973. – 586 с.
- Охапкин А.Г., Кузьмин Г.В.* Фитопланктон как индикатор сапробности воды Саратовского водохранилища // Водн. ресурсы. 1978. № 3. С. 193-196.
- Палий В.Ф.* О количественных показателях при обработке фаунистических материалов // Зоол. журн. 1961. Т. 60. Вып. 1. С. 3-12.
- Пастухова Е.В.* Изменение фауны и флоры Москва-реки под влиянием антропогенных факторов // Растительное и животное население Москвы и Подмосковья. – М.: 1978. С. 112-114.
- Патин С.А.* Влияние загрязнения на биологические ресурсы и продуктивность мирового океана. – М.: Пищепромиздат, 1979. – 304 с.
- Паутова В.Н., Номоконова В.И.* Продуктивность фитопланктона Куйбышевского водохранилища. – Тольятти: ИЭВБ РАН, 1994. – 188 с.
- Пашутин С.Б.* Феномены биологической эволюции. Адрес в Интернет <http://www.pereplet.ru/pops>

- Перечень рыбохозяйственных** нормативов: предельно допустимых концентраций (ПДК) и ориентировочно безопасных уровней воздействия (ОБУВ) вредных веществ для воды водных объектов, имеющих рыбохозяйственное значение. – М.: ВНИИРО. 1999. – 304 с.
- Песенко Ю.А.** Принципы и методы количественного анализа в фаунистических исследованиях. – М.: Наука, 1982. – 287 с.
- Пикунов В.С., Цапук Д.А.** Устойчивое развитие территорий: картографо-геоинформационное обеспечение. – М.; Смоленск: Изд-во Смоленского гос. ун-та, 1999. – 176 с.
- Пинигин М.А.** Гигиенические основы оценки суммарного загрязнения воздуха населенных мест // Гигиена и санит. 1985а. № 1. С. 66-69.
- Пинигин М.А.** Оценка комбинированного действия атмосферных загрязнений методом подбора его коэффициентов // Гигиена и санит. 1985б. № 9. С. 74-76.
- Пинигин М.А.** Теория и практика оценки комбинированного действия химического загрязнения атмосферного воздуха // Гигиена и санит. 2001. № 1. С. 9-12.
- Пиотровски Е.** Использование кинетики метаболизма и выведения токсических веществ в решении проблемы промышленной токсикологии. – М.: Мир, 1976. – 279 с.
- Плохинский Н.А.** Биометрия. – М.: МГУ, 1970. – 367 с.
- Плохинский Н.А.** Биометрический анализ в биологии. – М.: МГУ, 1982. – 157 с.
- Плошко Б.Г., Елисеева И.И.** История статистики: Учебное пособие. – М.: Финансы и статистика, 1990. – 295 с.
- Подиновский В.В., Ногин В.Д.** Парето-оптимальные решения многокритериальных задач. – М.: Наука, 1982. – 254 с.
- Покровский А.А.** Метаболические аспекты фармакологии и токсикологии пищи. – М.: Медицина, 1979. – 180 с.
- Попечителев Е.И., Романов С.В.** Анализ числовых таблиц в биотехнических системах обработки экспериментальных данных. – Л.: Наука, 1985. – 148 с.
- Попов И.И.** Некоторые модели оценки и оптимизации информационных систем: математический аппарат моделирования // НТИ. 1981. Сер. 2. № 3. С. 10-16.
- Попов И.И.** Моделирование и оптимизация документальных информационных систем. / Адрес в Интернет <http://www.rsuh.ru/e-library/porov>
- Популярная медицинская** энциклопедия / Под ред. Б.В. Петровского. – М.: Советская энциклопедия, 1988. – 513 с.
- Попченко В.И.** Закономерности изменений сообществ олигохет в условиях загрязнения водоемов // Водные малощетинковые черви: Матер. 6 Всесоюз. симп. – Рига: 1987. С. 117-122.
- Попченко В.И.** Экологические модификации сообществ зообентоса в условиях загрязнения водных экосистем // Экологические модификации и критерии экологического нормирования. – Л.: Гидрометеиздат, 1991. С. 144-151.
- Попченко В.И., Булгаков Г.П.** Методы изучения зообентоса для оценки качества вод // Руководство по гидробиологическому мониторингу пресноводных экосистем. – СПб.: Гидрометеиздат, 1992. С. 78-92.
- Правила охраны** поверхностных вод. – М.: Госкомитет СССР по охране природы, 1991. – 34 с.
- Предельно допустимые** концентрации (ПДК) химических веществ в воде водных объектов хозяйственно-питьевого и культурно-бытового водопользования: ГН 2.1.5.689-98. Ориентировочные допустимые уровни (ОДУ) химических веществ в воде водных объектов хозяйственно-питьевого и культурно-бытового водопользования: ГН 2.1.5.690-98. – М.: Минздрав РФ, 1998.
- Пригожин И., Стенгерс И.** Порядок из хаоса: Новый диалог человека с природой. – М.: Прогресс, 1986. – 431 с.
- Приемы прогнозирования** экологических систем / Ред. О.М. Кожова и Л.Я. Ащепкова. – Новосибирск: Наука, 1985. – 126 с.
- Прикладная статистика.** Методы обработки данных. Основные требования и характеристики. – М.: ВНИИСтандартизации, 1987. – 64 с.
- Проблема порогости** в токсикологии / Под ред. Г.Н. Красовского. – М.: Минздрав СССР, АМН СССР, 1979. – 103 с.
- Прохоров С.А.** Аппроксимативный анализ случайных процессов. 2-е изд. – Самара: СамНИЦ РАН, 2001а. – 380 с.
- Прохоров С.А.** Прикладной анализ неэквилибриальных временных рядов. – Уральск: СГАУ, 2001б. – 375 с.
- Прохоров С.А.** Моделирование и анализ случайных процессов: Лабораторный практикум. – Самара: СГАУ, 2002. – 191 с.

- Прохоров С.А., Иващенко А.В., Графкин А.В.** Автоматизированная система корреляционно-спектрального анализа случайных процессов. – Самара: СамНЦ РАН, 2003. – 286 с.
- Прохоров Ю.В.** Вероятность и математическая статистика. Энциклопедия. – М.: Большая Российская Энциклопедия, 2002. – 910 с.
- Пузаченко Ю.Г., Скулкин В.С.** Структура растительности лесной зоны СССР. Системный анализ. – М.: Наука, 1981. – 275 с.
- Пушников А.Ю.** Введение в системы управления базами данных. Часть 1. Реляционная модель данных: Часть 2. Нормальные формы отношений и транзакции. – Уфа: БГУ, 1999. Часть 1 – 108 с.; часть 2 – 138 с.
- Пфанцгль И.** Теория измерений. – М.: Мир, 1976. – 249 с.
- Пых Ю.А., Малкина-Пых И.Г.** Об оценке состояния окружающей среды. Подходы к проблеме // Экология. 1996. № 5. С. 323-329.
- Райс Дж.** (Rice J.R.) Будущее систем программного обеспечения для научных исследований // Computer-weekly (Computer-week Moscow). 1998. № 10. С. 25-26. (www.infoart.ru/it/press/cwm/10_98/sistem.htm)
- Растринин Л.А., Марков В.А.** Кибернетические модели познания: Вопросы методологии. – Рига: Зинатне, 1976. – 286 с.
- Растринин Л.А., Эренштейн Р.Х.** Метод коллективного распознавания. – М.: Энергоатомиздат, 1981. – 80 с.
- Рашевски Н.** Некоторые медицинские аспекты математической биологии. – М.: Мир, 1966. – 310 с.
- Реймерс Н.Ф.** Природопользование: Словарь-справочник. – М.: Мысль, 1990. – 637 с.
- Рекомендации по прогнозированию** качества поверхностных вод. – М.: ВНИИ траспорт. строит., 1984. – 44 с.
- Розенберг Г.С.** О сравнении различных методов автоматической классификации // Автоматика и телемеханика. 1975. № 9. С. 145-148.
- Розенберг Г.С.** Обзор методов статистической геоботаники. 3. Методы автоматической классификации. – М., 1977. 38 с. Деп. В ВИНТИ 11.04.1977. № 1321-77.
- Розенберг Г.С.** Сравнение различных методов экологического прогнозирования. Прогноз динамики экосистем. // Экология. 1981. № 1. С. 12-18.
- Розенберг Г.С.** Модели в фитоценологии. – М.: Наука, 1984. – 256 с.
- Розенберг Г.С.** О системной экологии // Журн. общ. биологии. 1988. Т. 49. № 5. С. 580-591.
- Розенберг Г.С.** Адекватность математического моделирования экологических систем // Экология. 1989. № 6. С. 8-14.
- Розенберг Г.С.** К построению системы концепций современной экологии // Журн. общ. биологии. 1991. Т. 52. № 3. С. 422-440.
- Розенберг Г.С., Беспалый В.Г., Голуб В.Б. и др.** Экспертная система для оценки экологического состояния крупного региона (на примере Куйбышевской области) // Теоретические проблемы эволюции и экологии. – Тольятти.: ИЭВБ АН СССР, 1991, С. 183-192.
- Розенберг Г.С., Долотовский И.М.** Еще раз о показателях силы влияния // Биол. науки. 1988. № 9. С. 105-110.
- Розенберг Г.С., Дунин Д.П., Костина Н.В. и др.** Информационные технологии для оценки экологического состояния крупного региона (на примере Волжского бассейна и Самарской области) // Проблемы региональной экологии. Вып. 8. – Томск: СО РАН, 2000. С. 213-216.
- Розенберг Г.С., Краснощеков Г.П.** Волжский бассейн: экологическая ситуация и пути рационального природопользования - Тольятти: ИЭВБ РАН, 1996. – 249 с.
- Розенберг Г.С., Краснощеков Г.П., Шитиков В.К.** К созданию пространственно-распределенной базы эколого-экономических данных бассейна крупной реки (на примере Волжского бассейна) // Вопросы экологии и охраны природы в лесостепной и степной зонах: Межвед. сб. науч. тр. – Самара: Изд-во "Сам. ун-т", 1995. С. 8-15.
- Розенберг Г.С., Мозговой Д.П., Гелашивили Д.Б.** Экология. Элементы теоретических конструкций современной экологии. – Самара: СамНЦ РАН, 1999. – 396 с.
- Розенберг Г.С., Смелянский И.Э.** Экологический маятник (смена парадигм в современной экологии) // Журн. общ. биол. 1997. Т. 58. № 4. С. 5-19.
- Розенберг Г.С., Феклистов П.А.** Прогнозирование годичного прироста деревьев методами самоорганизации // Экология. 1982. № 4. С. 43-50.
- Розенберг Г.С., Шитиков В.К., Брусилковский П.М.** Экологическое прогнозирование (Функциональные предикторы временных рядов). – Тольятти: ИЭВБ РАН, 1994а. – 182 с.
- Розенберг Г.С., Шитиков В.К., Мозговой Д.П.** Экологическая информатика: Учебное пособие. – Самара: Изд-во Самар. ун-та, 1993. – 151 с.
- Розенблатт Ф.** Принципы нейродинамики. Перцептроны и теория механизмов мозга. – М.: Мир, 1965. – 480 с.
- Розенталь М.М.** Марксистский диалектический метод – М.: Госполитиздат, 1952.

- Романенко В.Д., Оксикюк О.А., Жукинский В.Н. и др.** Экологическая оценка воздействия гидротехнического строительства на водные объекты. – Киев: Наук. думка, 1990. – 256 с.
- Россолимо Л.Л.** Основы типизации озер и лимнологического районирования // Накопление вещества в озерах. – М.: 1964. С. 5-46.
- Руководство по гидробиологическому мониторингу пресноводных экосистем.** – СПб.: Гидрометеиздат, 1992. – 318 с.
- Руководство по методам гидробиологического анализа поверхностных вод и донных отложений /** Под ред. В.А. Абакумова. – Л.: Гидрометеиздат, 1983. – 239 с.
- Рунион Р.** Справочник по непараметрической статистике. - М.: Финансы и статистика, 1982. - 198 с.
- Рябинин Н.А.** Анализ фауны панцирных клещей темнохвойно-широколиственных лесов юга Дальнего Востока на основе методов теории множеств // Известия Академии наук, серия биологическая. 1993, вып. 2. С. 271-279.
- Самарский А.А.** Что такое вычислительный эксперимент? // Наука и жизнь. 1979. № 3. С. 27-33.
- Саноцкий И.В.** Индивидуальная реактивность и вероятность изменения здоровья человека при химических воздействиях (полемика по принципиальным вопросам) // Медицина труда и промышленная экология. 1993. № 3-4. С. 9-12.
- Саноцкий И.В., Уланова И.П.** Критерии вредности в гигиене и токсикологии при оценке опасности химических соединений. – М.: Медицина, 1975. – 328 с.
- СанПиН 4630-88.** Санитарные правила и нормы. Охрана поверхностных вод от загрязнения. – М.: Минздрав СССР, 1988. – 69 с.
- СанПиН 2.1.5.980-00.** Санитарные правила и нормы. Гигиенические требования к охране поверхностных вод. – М.: Минздрав России, 2000. – 24 с.
- СанПиН 2.1.4.1074-01.** Санитарные правила и нормы. Питьевая вода. Гигиенические требования к качеству воды централизованных систем питьевого водоснабжения. Контроль качества. – М.: Минздрав России, 2002. – 103 с.
- Сафонов В.О.** Экспертные системы – интеллектуальные помощники специалистов. – СПб: Санкт-Петербургская организация общества "Знания" России, 1992. – 196 с.
- Сборник санитарно-гигиенических нормативов и методов контроля вредных веществ в объектах окружающей среды.** – М.: Медицина, 1991. 134 с.
- Свирижев Ю.М.** Вито Вольтерра и современная математическая экология // Вольтерра В. Математическая теория борьбы за существование. – М.: Наука, 1976. С. 245-286.
- Свирижев Ю.М.** Нелинейные волны, диссипативные структуры и катастрофы в экологии. – М.: Наука, 1987. – 368 с.
- Свирижев Ю.М., Логофет Д.О.** Устойчивость биологических сообществ. - М.: Наука, 1978. - 350 с.
- Себер Дж.** Линейный регрессионный анализ. – М., Мир: 1980. – 286 с.
- Северцов С.А.** Динамика населения и приспособительная эволюция животных. – М.; Л.: Изд-во АН СССР, 1941. – 316 с.
- Селтон Дж.** Автоматическая обработка, хранение и поиск информации. – М.: Сов. радио, 1973. – 168 с.
- Сёмкин Б.И.** Эквивалентность мер близости и иерархическая классификация многомерных данных // Иерархические классификационные построения в географической экологии и систематике. – Владивосток: ДВНЦ АН СССР, 1979. С. 97-112.
- Сёмкин Б.И., Двойченко В.И.** Об эквивалентности мер сходства и различия // Исследование систем. – Владивосток: ДВНЦ АН СССР, 1973. С. 18-43.
- Сердюцкая Л.Ф.** Верификация экологических моделей круговорота азота (на примере Кременчугского водохранилища): Дисс. ... канд. техн. наук. – Харьков., 1984. – 134 с.
- Сердюцкая Л.Ф., Каменева И.П.** Системный анализ и математическое моделирование медико-экологических последствий аварии на ЧАЭС и других техногенных воздействий. – Киев: "Медэкол" МНИЦ БИО-ЭКОС МЧС и НАН Украины, 2000. – 173 с.
- Сидельников Ю.В.** Теория и организация экспертного прогнозирования. – М.: ИМЭМО АН СССР, 1990. – 196 с.
- Сильвестров Д.С.** Программное обеспечение прикладной статистики. Обзор состояния. Тенденции развития. – М.: Финансы и статист., 1988. – 240 с.
- Скурихин А.Н.** Генетические алгоритмы // Новости искусственного интеллекта. 1995. № 4. С. 6-46.
- Смирнов Н.В., Дунин-Барковский И.В.** Курс теории вероятностей и математической статистики для технических приложений. Изд. 2-е, испр. и доп. – М.: Наука, 1965. – 511 с.
- Смит Дж.** Математические идеи биологии. – М.: Мир, 1970. – 180 с.
- Смолл Р.Д. (Small R.D.)** Интеллектуальный анализ данных: мифы и факты // Computer-weekly (Computer-Week Moscow). 1997. № 22-23. С. 38-39. Адрес в Интернет www.infoart.ru/it/press/cwm/22_97/data.htm
- Соловьев В.Н., Фирсов А.А., Филов В.А.** Фармакокинетика. – М.: Медицина, 1980. – 424 с.
- Сотник С.Л.** Основы проектирования систем с искусственным интеллектом (курс лекций). 2000. Адрес в Интернет http://www.alicetele.com/~sergei/index_e.htm

- Сотник С.Л.** Идентификация колебательного звена методом группового учета аргументов и искусственной нейронной сетью с генетическим алгоритмом обучения // Адрес в Интернет http://www.alicetele.com/~sergei/index_e.htm
- Справочник по типовым** программам моделирования / Под ред. А.Г. Ивахненко – Киев: Техника, 1980. – 184 с.
- Справочник по прикладной** статистике. В 2-х т. / Под ред. Э. Ллойда, У. Ледермана, Ю.Н. Тюрина. – М.: Финансы и статистика, 1989. Т. 1. – 510 с.; 1990. Т. 2. – 526 с.
- Старобогатов Я.И.** Системный подход в экологии // Системные исследования. – М.: Наука, 1970. С. 114-118.
- Статистический словарь.** – М.: Финансы и статистика, 1989. – 623 с.
- Стивенс С.С.** Экспериментальная психология. Т.1. – М.: ИЛ, 1960. С. 5-78.
- Стрельцов А.Б., Шнынов А.В., Гаркунов М.И.** Организация биомониторинга в г. Калуге. // Антропогенные воздействия и здоровье человека. Вып. 1. – Калуга: 1995. С. 10-23.
- Стьюпер Э., Брюггер У., Джурс П.** Машинный анализ связи химической структуры и биологической активности. – М.: Мир, 1982. – 235 с.
- Сукачев В.Н.** Соотношение понятий биогеоценоз, экосистема и фация // Почвоведение. 1960. № 6. С. 4-10.
- Сукачев В.Н.** Основные понятия о биогеоценозах и общее направление их изучения // Программа и методика биогеоценологических исследований. – М.: Наука, 1966. С. 12-50.
- Сурков Ф.А. и др.** Моделирование абиотических факторов экосистемы Азовского моря // Изв. СКНЦ ВШ. Естеств. наук. 1977. № 2. С. 21-49.
- Суценя Л.М.** Интенсивность дыхания ракообразных. – Киев: Наук. думка, 1972. – 195 с.
- Тарасов А.Г.** Биотический индекс дельты рек Волги и Северного Каспия: Автореф. дис. ... канд. биол. наук. – М.: МГУ, 1993. – 23 с.
- Таунсенд К., Фохт Д.** Проектирование и программная реализация экспертных систем на персональных ЭВМ. – М.: Финансы и статистика, 1990. – 346 с.
- Ташкер И.Д.** О статистических критериях и их использовании при гигиеническом контроле // Гигиена и санитар. 1991. № 12. С. 85-87.
- Ташкер И.Д.** К проблеме установления безопасных уровней токсических веществ во внешней среде // Адрес в Интернет http://www.medved.kiev.ua/arhiv_mg/st_2000/00_2_9.htm
- Телитченко М.М., Кокин К.А.** Санитарная гидробиология. – М.: Изд. МГУ, 1968. – 103 с.
- Теоретические вопросы** классификации озер / Отв. ред. Н.П. Смирнов – СПб.: Наука, 1993. – 185 с.
- Терентьев П.В.** Метод корреляционных плеяд // Вест. Ленингр. ун-та. Серия биол. 1959. № 9. Вып. 2. С. 137-141.
- Терехина А.Ю.** Анализ данных методами многомерного шкалирования. – М.: Наука, 1986. – 168 с.
- Терехова В.А., Шитиков В.К., Семенова Т.А.** Микромицеты Куйбышевского водохранилища. IV. Взаимодействие с абиотическими и биотическими факторами // Микология и фитопатология, 1998. Т. 32. Вып. 1. С. 44-48.
- Тимофеев-Ресовский Н.В., Яблоков А.В., Глотов Н.В.** Очерк учения о популяции. – М.: Наука, 1973. – 277 с.
- Тихонов В.Н., Шитиков В.К.** Анализ варибельности признаков и биологическая норма // Гигиена и санитар. 1984а. № 7. С. 63-64.
- Тихонов В.Н., Шитиков В.К.** К вопросу прогнозирования кумулятивных свойств веществ в токсикологических исследованиях // Гигиена и санитар. 1984б. № 4. С. 79-80.
- Тихонов В.Н., Шитиков В.К., Кондратов С.А.** О математическом моделировании интоксикации при повторяющихся воздействиях // Гигиена и санитар. 1987. № 7. С. 62-65.
- Тодераш И.К.** Функциональное значение хирономид в экосистемах водоемов Молдавии. – Кишинев: Штинница, 1984. – 172 с.
- Толковый словарь** по охране природы / Под ред. В.В. Снакина. – М.: Экология, 1995. – 191 с.
- Трахтенберг И.М.** Приоритетные аспекты проблем медицинской экологии в Украине (взгляд токсиколога) // Совр. проб. токсикологии. 1998. № 1. С. 5-8.
- Трахтенберг И.М., Сова Р.Е., Шефтель В.О., Оникиенко Ф.А.** Проблемы нормы в токсикологии. – М.: Медицина, 1991. – 208 с.
- Ту Дж., Гонсалес Р.** Принципы распознавания образов. – М.: Мир, 1978. – 410 с.
- Тьюки Дж.** Анализ результатов наблюдений. Разведочный анализ. – М.: Мир, 1981. – 693 с.
- Тюрин Ю.Н., Макаров А.А.** Анализ данных на компьютере. – М.: Финансы и статистика, 1995. – 384 с.
- Уинстон П.** Искусственный интеллект. – М.: Мир, 1980. – 520 с.
- Уиттекер Р.** Сообщества и экосистемы. – М.: Прогресс, 1980. – 328 с.
- Умнов А.А.** Математическая модель биотического круговорота в озерной системе // Гидробиол. журн. 1972. Т. 8. Вып. 5. С. 5-13.

- Умнов А.А.** Математическая модель биотического круговорота вещества и энергии, происходящего в загрязненной реке // Биологические процессы и самоочищение на загрязненном участке реки (на примере Верхнего Днепра). – Минск: БГУ, 1973. С 157-190.
- Умнов А.А.** Применение статистических методов для оценки параметров эмпирических уравнений, описывающих взаимосвязь между энергетическим обменом и массой тела животного // Журн. общ. биол. 1976. Т. 37. № 1. С. 71-86.
- Умнов А.А.** Использование математических моделей для оценки экологического состояния водоемов (на примере экосистемы Невской губы) // Экологическое состояние водоемов и водотоков бассейна реки Невы. – СПб.: СПбНЦ РАН, 1996. С. 155-186.
- Уморин П.П.** Оценка интенсивности выедания инфузориями водорослей и бактерий // Зоол. журн. 1983. № 3. С. 325-330.
- Уникальные экосистемы** солоноватых карстовых озер Среднего Поволжья. – Казань: Изд-во Казан. Ун-та, 2001. – 256 с.
- Унифицированные методы** исследования качества вод. Ч. 3. Методы биологического анализа вод. – М.: Изд-во СЭВ, 1977. – 175 с.
- Уоссермен Ф.** Нейрокомпьютерная техника. – М.: Мир, 1992. – 184 с.
- Уотермен Д.** Руководство по экспертным системам. – М.: Мир, 1980. – 384 с.
- Урбах В.Ю.** Математическая статистика для биологов и медиков. – М.: Изд-во АН СССР, 1963. – 323 с.
- Урбах В.Ю.** Дискриминантный анализ и его применение в биологической систематике и медицинской диагностике // Применение математических методов в биологии. Вып. 3. – Л.: 1964. С. 67-87.
- Урманцев Ю.А.** Что может дать биологу представление объекта как системы в системе объектов того же рода? // Журн. общ. биол. 1978. Т. 39. № 5. С. 699-718.
- Федеральный закон от 10.01.2002 г. № 7-ФЗ "Об охране окружающей среды" / Принят Государственной Думой 20 декабря 2001 года, одобрен Советом Федерации 26 декабря 2001 года. - 31 с.**
- Федоров В.Д.,** Устойчивость экологических систем и ее измерение // Изв. АН СССР. Сер. биол. 1974. № 3. С. 402-415.
- Федоров В.Д.** Заметки о парадигме вообще и экологической парадигме в частности // Вести. МГУ. Сер. биол. 1977а. № 3. С. 8-22.
- Федоров В.Д.** Проблемы оценки нормы и патологии состояния экосистем // Научные основы контроля качества поверхностных вод по гидробиологическим показателям. - Л.: 1977б. С. 6-12.
- Федоров В.Д., Гильманов Т.Г.** Экология. – М.: МГУ, 1980. – 464 с.
- Федоров В.Д., Максимов В.Н., Сахаров В.Б.** Количественный способ оценки внешних воздействий на экологические системы // Человек и биосфера. – М.: МГУ, 1980. Вып. 5. С. 12-23.
- Федоров В.Д., Сахаров В.Б., Левич А.П.** Количественные подходы к проблеме оценки нормы и патологии экосистем // Человек и биосфера. – М.: МГУ, 1982. Вып. 6. С. 3-42.
- Финогенова Н.П.** Значение олигохет как индикаторов загрязненных вод // Методы биологического анализа пресных вод. – Л.: ЗИН АН СССР, 1976. С. 51-59.
- Флейс Дж.** Статистические методы для изучения таблиц долей и пропорций. – М.: Финансы и статистика, 1989. – 319 с.
- Флейшман Б.С.** Системные методы в экологии // Статистические методы анализа почв, растительности и их связи. – Уфа: БФАН СССР, 1978. С. 7-28.
- Флейшман Б.С.** Основы системологии. – М.: Радио и связь, 1982. – 368 с.
- Флейшман Б.С.** Системология, системотехника и инженерная экология // Кибернетика и ноосфера. – М.: Наука, 1986. С. 97-110.
- Флейшман Б.С., Брусиловский П.М., Розенберг Г.С.** О методах математического моделирования сложных систем // Системные исследования. Ежегодник. – М.: Наука, 1982. С. 65-79.
- Фогель Л., Оуэнс А., Уолли М.** Искусственный интеллект и эволюционное моделирование. – М.: Мир, 1969. – 230 с.
- Фомин Г.С.** Вода. Контроль химической, бактериальной и радиационной безопасности по международным стандартам. Энциклопедический справочник. – М.: Протектор, 1995. – 624 с.
- Фомин Я.А., Тарловский Г.Р.** Статистическая теория распознавания образов. – М.: Радио и связь, 1986. – 264 с.
- Форошук В.П.** Водоохранная деятельность и экологическое нормирование качества водной среды // Гидробиол. журн. 1989. Т. 25. № 1. С. 36-41.
- Форрестер Дж.** Антиинтуитивное поведение сложных систем // Современные проблемы кибернетики. – М.: Знание, 1977. С. 9-25.
- Форрестер Дж.** Мировая динамика. – М.: Наука, 1978. – 167 с.
- Фрей Т.Э.-А.** О математико-фитоценологических методах классификации растительности: Автореф. дис. ... докт. биол. наук. – Тарту: ТартГУ, 1967. – 32 с.
- Фруммин Г.Т.** Экологически допустимые уровни воздействия металлами на водные экосистемы // Биол. внутр. вод. 2000. № 1. С. 125-134.

- Фрумин Г.Т., Баркан Л.В.** Комплексная оценка загрязненности Ладожского озера по гидрохимическим показателям // Водн. ресурсы. 1997. Т. 24. № 3. С. 315-319.
- Фу К.** Структурные методы в распознавании образов. – М.: Мир, 1977. – 320 с.
- Фукс В.** По всем правилам искусства. Точные методы в исследованиях литературы, музыки и изобразительного искусства // Моль А., Фукс В., Касслер М. Искусство и ЭВМ. – М.: Мир, 1975. – 556 с.
- Хайлов К.М.** Системный подход в экологии // Системные исследования. – М.: Наука, 1970. С. 118-122.
- Хальд А.** Математическая статистика с техническими приложениями. – М.: Изд. иностр. лит., 1956. – 664 с.
- Хан Г., Шапиро С.** Статистические модели в инженерных задачах. – М.: Мир, 1969. – 396 с.
- Хант Э.** Искусственный интеллект. – М.: Мир, 1978. – 558 с.
- Харман Г.** Современный факторный анализ. – М.: Статистика, 1972. – 486 с.
- Хатчинсон Д.** Лимнология. – М.: Прогресс, 1969. – 592 с.
- Хлебович Т.В.** Значение инфузорий в оценке степени загрязнения вод // Методы биологического анализа пресных вод. – Л.: ЗИН АН СССР, 1976. С. 59-68.
- Хованов Н.В.** Математические основы теории шкал измерения качества. – Л.: ЛГУ, 1982. – 185 с.
- Хокс Х.А.** Биологический контроль качества речной воды // Научные основы контроля качества поверхностных вод по гидробиологическим показателям. Тр. Советско-английского семинара. – Л.: Гидрометеоздат, 1977. С. 172-178.
- Холлендер М., Вулф Д.А.** Непараметрические методы статистики. – М.: Финансы и статистика, 1983. – 518 с.
- Хьюбер П.** Робастность в статистике. – М.: Мир, 1984. – 304 с.
- Хэтч Т.** Значение допустимых пределов воздействия опасных веществ, присутствующих в воздухе рабочей зоны, рассматриваемое в аспекте предупреждения профессиональных заболеваний // Бюлл. ВОЗ. 1973. Т. 47. № 2. С. 153-161.
- Царегородцев В.Г., Погребная Н.А.** Нейросетевые методы обработки информации в задачах прогноза климатических характеристик и лесорастительных свойств ландшафтных зон // Методы нейроинформатики (сборник научных трудов). – Красноярск: КрГТУ, 1998. С. 65-110.
- Цейтлин Н.А.** Применение методов математической теории эксперимента в содовой промышленности. – М.: НИИТЭХИМ, 1984. – 37 с.
- Цейтлин Н.** Из опыта аналитического статистика. / Адрес в Интернет <http://people.freenet.de/nzarchiv/buecher/> или <http://matstat.gmxhome.de/>
- Цимдинь П.А.** Коловратки как биоиндикаторы сапробности // Гидробиол. журн. 1979. Т. 15. № 4. С. 63-67.
- Ципилева Т.А.** Методы автоматической классификации в сжатии экологической информации // Алгоритмическое и информационное обеспечение систем экоинформации. – Томск: СО АН СССР, 1989. С. 23-61.
- Цыпкин Я.З.** Адаптация и обучение в автоматических системах. – М.: Наука, 1968. – 399 с.
- Цыпкин Я.З.** Основы информационной теории идентификации. – М.: Наука, 1984. – 520 с.
- Цыплаков А.А.** Некоторые эконометрические методы. Метод максимального правдоподобия в эконометрии, Новосибирск: Изд-во НГУ, 1997. 129 с. / Адрес в Интернет <http://www.nsu.ru/ef/tsy/ecmr/study.htm>
- Чайковский Ю.В.** Познавательные модели, плюрализм и выживание // Путь. 1992. № 1. С. 62-108.
- Человек. Медико-биологические данные.** – М.: Знание, 1977. – С. 36-40.
- Чернов Ю.И.** Понятие "животное население" и принципы геоэкологических исследований // Журн. общ. биологии. 1971. Т. 32. № 4. С. 425-438.
- Чернов Ю.И.** Природная зональность и животный мир суши. – М.: Мысль, 1975. – 222 с.
- Черп О.М., Виниченко В.Н., Хотулёва М.В. и др.** Экологическая оценка и экологическая экспертиза – М.: СоЭС – Методический центр «Эколайн», 2000. Адрес в Интернет www.cci.glasnet.ru/mc/books/eiabook
- Чертопруд М.В.** Модификация метода Пантле-Букка для оценки загрязнения водотоков по качественным показателям макробентоса // Водн. ресурсы. 2002. Т. 29. № 3. С. 337-342.
- Чупров А.А.** Основные проблемы теории корреляции. – М.: Госиздат, 1960. – 176 с.
- Шайтура С.В.** Геоинформационные системы и методы их создания. – М.: 1998. – 252 с.
- Шакин В.В.** Выбор критериев классификации в методе собственных подпространств // Математическая обработка медико-биологической информации. – М.: Наука, 1976. С. 103-115.
- Шакин В.В.** Биосистемы в экстремальных условиях // Журн. общ. биол. 1991. Т. 52. № 6. С. 784-792.
- Шафаревич И.Р.** Доклад на собрании Японского математического общества от 28 сентября 1993 г. Адрес в Интернет <http://www.doktor.u/doktor/biometr/naukoved/mathem.htm>
- Шварц С.С.** Популяционная структура биоценоза // Изв. АН СССР. Сер. биол. 1971. № 4. С. 485-493.
- Шеннон К.** Математическая теория связи / Работы по теории информации и кибернетике. – М.: Ин. литер., 1963. С. 243-332.
- Шестакова Г.А., Стрельцов А.Б., Логинов А.А. и др.** Система регионального биологического мониторинга (на примере Калужской области) // Вопросы географии и геоэкологии. – Калуга: 1998. Вып. 2. С. 75-88.
- Шитиков В.К., Зинченко Т.Д., Головатюк Л.В.** Математические аспекты оценки патологии экосистем на примере зообентоса малых рек Самарской области // Малые реки: Современное экологическое состоя-

ние, актуальные проблемы. (Тез. Межд. науч. конф. Россия, г.Тольятти, 23-27 апреля 2001г.). – Тольятти: ИЭВБ РАН, 2001. С. 230.

- Шитиков В.К., Зинченко Т.Д., Головатюк Л.В.** Нейросетевые методы оценки качества поверхностных вод по гидробиологическим показателям // Изв. СамНЦ РАН. 2002. Т. 4. № 2. С. 280-289.
- Шитиков В.К., Коппа Ю.В., Курляндский Б.А., Тихонов В.Н.** Прогнозирование токсикологических показателей химических веществ методом самоорганизации моделей // Автоматика. 1986. № 4. С. 85-87.
- Шитиков В.К., Тихонов В.Н., Быков С.Т., Ковалев А.Ф.** Статистический анализ и нормальность распределения выборок в токсиколого-гигиенических исследованиях // Гигиена и санит. 1985. № 3. С. 61-62.
- Шмальгаузен И.И.** Рост и дифференцировка // Рост животных. – М.: АН СССР, 1935. С. 74-84.
- Шмальгаузен И.И.** Кибернетические вопросы биологии. – Новосибирск: Наука, 1968. – 396 с.
- Шмидт В.М.** Биометрический метод в ботанической систематике // Ботан. журн. 1964. Т. 49. № 1. С. 315-324.
- Шноль С.Э.** Герои, злодеи, конформисты российской науки. – М.: КРОН-ПРЕСС, 2001. – 875 с.
- Штабский Б.М.** Об оценке кумулятивных свойств вредных веществ по В.Н. Тихонову и В.К. Шитикову // Гигиена и санит. 1985. № 1. С. 70-73.
- Штабский Б.М.** О концепции дифференцированных во времени ПДК вредных веществ в связи с проблемой санитарной охраны водоемов // Гигиена и санит. 1986. № 11. С. 57-60.
- Штабский Б.М., Каган Ю.С.** К оценке кумулятивных свойств химических веществ по индексу и стандартизованному коэффициенту кумуляции // Гигиена и санит. 1974. № 3. С. 65-67.
- Шуберт Р.** Основные принципы методов биоиндикации // Изучение загрязнения окружающей природной среды и его влияния на биосферу: Матер. 3 заседания Междунар. рабочей группы по проекту № 14 МАБ ЮНЕСКО. – Л., 1986. С. 112-122.
- Шустер Г.** Детерминированный хаос: Введение. – М.: Мир, 1988. – 240 с.
- Щукарев С.А.** Попытка общего обзора грузинских вод с геохимической точки зрения // Труды Гос. ин-та курортологии. – М.: Медиздат, 1934. Т.4.
- Щукин И.С.** Общая геоморфология. – М.: МГУ, 1964. Т. 2. – 564 с.
- Экологическая оценка.** Пособие для преподавателей (UNEP Environmental Impact Assessment Training Resource Manual) / Программа ООН по окружающей среде (UNEP) . Пер. РОО "Эколайн" и Центра подготовки и реализации инвестиционных проектов (ЦППИ) Адрес в Интернет <http://cci.glasnet.ru/mc/books/eiamanual/index.html>
- Экологический мониторинг.** Методы биомониторинга / Под ред. Д.Б. Гелашвили. – Н. Новгород: ННГУ, 1995. Вып. 1. – 190 с.
- Экологическое районирование** пресноводных во-доемов. – Рыбинск: ИБВВ АН СССР, 1990. Вып. 62(65). – 176 с.
- Экологическое состояние** бассейна реки Чапаевка в условиях антропогенного воздействия (Биологическая индикация). - Тольятти: ИЭВБ РАН, 1997. – 337 с.
- Элти Д., Кумбс М.** Экспертные системы: концепции и примеры. – М.: Финансы и статистика, 1987. – 191 с.
- Эрроусмит Д., Плейс К.** Обыкновенные дифференциальные уравнения. Качественная теория с приложениями. – М.: Мир, 1986. – 243 с.
- Эшби У.Р.** Введение в кибернетику. – М.: Ин. литер., 1959. – 432 с.
- Эшби У.Р.** Несколько замечаний // Общая теория систем. – М.: Мир: 1966. С. 171-178.
- Эшби У.Р.** Математические модели и анализ на вычислительных машинах функций центральной нервной системы // Автоматика. 1967. № 1. С. 57.
- Яглом А.М., Яглом И.М.** Вероятность и информация. – М.: Наука, 1973. – 512 с.
- Яковлев В.А.** Методы оценки качества вод по зообентосу озера Имандра // Мониторинг природной среды Кольского Севера. – Апатиты, 1984. С. 39-50.
- Яковлев В.А.** Оценка качества поверхностных вод Кольского Севера по гидробиологическим показателям и данным биотестирования (практические рекомендации). – Апатиты, 1988. – 27 с.
- Яковлев В.А.** Оценка степени закисления поверхностных вод северо-восточной части Фенноскандии по зообентосу // Водн. ресурсы. 1998. Т. 25. № 2. С. 244-251.
- Яковлев В.А.** Формирование размерной структуры сообществ зообентоса северо-восточной части Фенноскандии в зависимости от природных условий и антропогенных факторов // Тезисы докладов 8 съезда Гидробиологического общества РАН. Том 1. – Калининград, 2001. С. 320-321.
- Ястребов А.Б.** Методы изучения мозаичности растительного покрова с применением ЭВМ. – Л.: ЛГУ, 1991. – 200 с.
- Andrewartha H.G., Birch L.C.** The Distribution and Abundance of Animals. – Chicago: Univ. Press, 1954. – 782 p.
- Bertalanffy L. fon.** Basic concepts in quantitative biology of metabolism // Helgol and Wiss. Meeresuntersuch, 1964. V. 9. № 1. P. 5-34.
- Bishop C.** Neural Networks for Pattern Recognition. – Oxford: University Press, 1995. – 432 p.
- Boysen-Yensen P.** Valiation of the Limfyjord // I-Rep. Dan bion. sta. 1919. V. 26. № 1. P. 1-44.
- Breiman L., Friedman J.H., Olshen R.A., Stone C.J.** Classification and regression trees. – Monterey, CA: Wadsworth & Brooks/Cole Advanced Books & Software, 1984. – 358 p.

Canter L.W. Environmental Impact Assessment. 2nd Ed. – NY.: McGraw-Hill, 1996. – 587 p.
Constandse-Westermann T.S. Coefficients of Biological Distance. – N.Y.: Humanities Press, 1972. – 142 p.

- Critical loads* for sulphur and nitrogen (Report from a Workshop held at Stokhoster, Sweden, March 19-24, 1988) / Miljo rapport, 1988 – Copenhagen: Nordic Council of Ministers, 1988. Vol. 15.
- Czekanowski J.* Objectiv kriterien in der ethologie // Korrespondenz-blatt der Deutschen Gesellschaft fur Anthropologie, Ethnologie, und Urgeschichte, 1911. 42. S. 1-5.
- Dawkins R.* The Selfish Gene. – NY.: Oxford University Press, 1976. – 112 p.
- Dubois D.M.* A model of patchines for prey-predator plankton populations // Ecol. Modeling. 1975. № 1. P. 67-80.
- Efroimson M.A.* Multiple regression analysis // Mathematical Methods for Digital Computers. 1960. V. 1. P. 191-203.
- Goldberg D.E.** Genetic Algorithms. – Reading, MA: Addison Wesley, 1989. – 236 p.
- Goodall D.W.* Objective methods for the classification of vegetation. III. An essay in the use of factor analysis // Austral. J. Bot. 1954. V. 2. № 3. P. 304-324.
- Goodall D.W.* The continuum and individualistic association // Vegetatio. 1963. V. 11. № 5-6. P. 297-316.
- Goodall D.W.* Numerical classification // Handbook of Vegetation Science. Pt. 5. - The Hague: Dr. W.Junk, 1973. P. 105-156.
- Gower J.C., Ross G.J.* Minimum spanning trees and single linkage cluster analysis // Appl. Stat. 1969. V. 18. № 1. P. 54-64.
- Gray J.* Detecting pollution induced changes in communities using the lognormal distribution of individuals among species // Mar. Pollut. Bull. 1981. V. 12. № 5. P. 173-176.
- Guidelines for drinking-water* quality. – Geneva: World Health Organization. Vol. 1 – Recommendations. 1983; Vol. 2 – Health Criteria and Other Supporting Information. 1984.
- Heatwole H.* The concept of the econe, a fundamental ecological unit // Trop. Ecol. 1989. V. 30. № 1. P. 13-19.
- Hill M.O.* DECORANA and TWINSpan, for ordination and classification of multivariate species data: a new edition, together with supporting programs, in FORTRAN 77. – Huntingdon: Inst. Of Terrestrial Ecology, 1979. – 58 p.
- Hill M.O., Bunce R., Show M.* Indicator species analysis, a divisive polithetic method of classification, and its application to a survey of native pinewoods in Scotland // J. Ecol. 1975. V. 63. № 9. P. 721-727.
- Hopfield J.J.* Neural networks and physical systems with emergent collective computational abilities // Proc. Nat. Acad. Sci. USA. 1982. Vol. 79. P.2554-2558. Адрес в Интернет http://www-windows-1251.edu.yar.ru/russian/misc/eco_page/bioind/index.html
- Hunt E.B., Marin J., Stone P.J.* Experiments in Induction. – NY.: Academic Press, 1966. – 247 p.
- Kershaw K.A.* Quantitative and Dynamic Plant Ecology. Ed. 2. – London, 1974. – 308 p.
- Kohonen T.* Self-organized formation of topologically correct feature maps // Biological Cybernetics. 1982. № 43. P. 59-69.
- Kolkwitz R., Marsson M.* Grundsätze für die biologische Beurteilung des Wassers nach seiner Flora und Fauna // Mitteil. aus der königl. Prüfungskommission für Wasserbesorg. und Abwasserbes. 1902. H. 1. S. 33.
- Kownacki A.* Taxocens of Chironomidae in streams of the Polish High Tatra, Mts // Acta Hydrobiol. 1971. V. 13. № 2. P. 439-463.
- Lim R.K., Runk K.G., Glass H.G., Soaje-Echague F.* A method for the evolution of cumulative by the determination of acute and subchronic median effective doses // Arch. Inter. Pharm. Ther. 1961. V. 130. P. 336-352.
- Lindeman R.L.* The trophic-dynamic aspect of ecology // Ecology. 1942. V. 23. № 4. P. 399-418.
- Lindman H. R.* Analysis of variance in complex experimental designs. – San Francisco: W. H. Freeman & Co., 1974.
- Loh W.-Y., Shih Y.-S.* Split selection methods for classification trees // Stat. Sinica, 1997. V. 7. P. 815-840.
- MacArthur R.H.* On the relative abundance of bird species // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. 1957. V. 45. P. 293-295.
- Machine Learning*, Neural and Statistical Classification / Ed. D. Mitchie et al. – Ellis Horwood, Chichester, UK, 1994. - 304 p.
- Manahan S.E.* Environmental Chemistry. – NY.: Lewis Publishers, 1994. – 789 p.
- Margalef R.* Temporal succession and spatial heterogeneity in phytoplankton // Perspectives in Marine Biology. – Berkeley: Univ. of California Press, 1958. P. 323-347.
- Margalef R.* Perspectives in Ecological Theory. – Chicago: Univ. Press, 1968. – 123 p.
- McIntosh R.P.* Matrix and plexus techniques // Handbook of Vegetation Science. Pt. 5. – The Hague: Dr. W. Junk, 1973. P. 157-221.
- Murthy S.* Automatic construction of decision trees from data: A Multi-disciplinary survey // Data Mining and Knowledge Discovery (Kluwer Academic Publishers, USA). 1998. V. 2. № 4. P. 345 - 389 p.
- Parzen E.* On the estimation of probability density function and the mode // Ann. Math. Stat. 1962. V. 33. P. 1065-1076.

- Pielou E.C.** Shannon's formula as a measure of species diversity: its use and misuse // Amer. Natur. 1966. V. 100. P. 463-465.
- Pielou E.C.** Ecological Diversity. – NY.: Gordon & Breach Sci. Publ., 1975. – 165 p.
- Poroikov V.V., Filimonov D.A., Borodina Yu.V. et al.** Robustness of Biological Activity Spectra Predicting by Computer Program PASS for Noncongenetic Sets of Chemical Compounds // J. Chem. Inform. Comput. Sci. 2000. V. 40. № 6. P. 1349.
- Quinlan J.R.** C4.5: Programs for Machine learning. – San Mateo: Morgan Kaufmann Publishers, 1993. – 302 p.
- Rosenberg D.M.** Freshwater biomonitoring and Chironomidae // Neth. J. Aquat. Ecol. 1993. V. 26. № 2-4. P. 101-122.
- Rozenberg G.S.** Expert systems "REGION" and "RESERVOIR" as instruments of simulation of diffuse pollution of large-scale ecosystems and reservoirs // Proceeding of the Second International IAWQ Specialized Conference on Diffuse Pollution. – Brno: Prague (Czech Repub.), 1995. Part 1. P. 72-77.
- Rozenberg G.S., Krestin S.V.** System of analytical models of processes of eutrophication in the reservoir (block approach) // Programme and Abstracts. 3rd International Conference on Reservoir Limnology and Water Quality. – Ceske Budejovice (Czech Republic), 1997. P. 151.
- Rozenberg G.S., Shitikov V.K.** Expert systems "REGION" as instruments of simulation of large-scale ecosystems and reservoirs // Экологические проблемы бассейнов крупных рек: Тез. докл. Междунар. конф. – Тольятти: ИЭАББ РАН, 1993. С. 264.
- Shannon C.B., Weaver W.** The Mathematical Theory of Communication. – Urbana (Illinois): Univ. of Illinois Press, 1963. – 345 p.
- Simpson E.H.** Measurement of diversity // Nature (London). 1949. V. 163. № 4148. P. 668.
- Sládeček V.** The future of the saprobity system // Hydrobiologia. 1965. V. 25. № 3-4.
- Sládeček V.** System of water quality from the biological point of view. // Arch. Hydrobiol., Beiheft., Ergebnisse der Limnol. 1973. Bd 7. S. 1-218.
- Sokal R., Sneath P.** Principles of Numerical Taxonomy. - San Francisco: W.H. Freeman, 1963. - 573 p.
- Steele J.H.** The structure of marine ecosystems. – Cambridge (Massachusetts): Harv. Univ. Press, 1974. – 110 p.
- Tansley A.G.** The use and abuse of vegetation concepts and terms // Ecology. 1935. V. 16. P. 248-307.
- Tryon R.C.** Cluster Analysis. – NY.: McGraw-Hill, 1939.
- Vittikh V.A.** Engineering theories as a basis for integrating deep engineering knowledge // Artificial Intel. in Engin. 1997. V. 1. P. 25-30.
- Ward J.H.** Hierarchical grouping to optimize an objective function // J. Amer. Statist. Assoc. 1963. V. 58. № 301. P. 236-244.
- West G.B., Brown J.H., Enquist B.J.** The fourth dimension of life: fractal geometry and allometric scaling of organisms // Science. 1999. V. 284. P. 1677-1679.
- Westhoff V., van der Maarel E.** The Braun-Blanquet approach // Classification of Plant Communities. – The Hague: Dr. W.Junk, 1978. P. 287-399.
- Zadeh L.** Fuzzy Sets // Information and Control. 1965. V. 8. № 3. P. 338-353.
- Zinchenko T.D.** Long-term (30 years) dynamics of chironomidae (*Diptera*) fauna in the Kuibyshev water reservoir associated with eutrophication processes // Netherlands J. of Aquatic Ecology. 1992. V. 26. № 2-4. P. 533-542.