

*В.С. Валиев, Д.В. Иванов, Д.Е. Шамаев, Р.Р. Хасанов*

*Институт проблем экологии и недропользования АН РТ, podrost@mail.ru*

## СОЗДАНИЕ «ЦИФРОВЫХ ДВОЙНИКОВ» В РАМКАХ ЦИФРОВОЙ ТРАНСФОРМАЦИИ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО МОНИТОРИНГА

На примере оценки содержания тяжелых металлов в донных отложениях водных объектов предложен подход, обеспечивающий эффективную технологию хранения, сопровождения и оценки информации, получаемой в процессе мониторинга окружающей среды, а также алгоритм ее цифровизации с построением модели типа «цифровой двойник». Показано, что комплексное использование подобных моделей позволит в перспективе перейти к моделированию состояния природных объектов в целом.

*Ключевые слова:* цифровые двойники; нейронные сети; качество воды; донные отложения; тяжелые металлы.

DOI: <https://doi.org/10.24852/2411-7374.2022.3.30.34>

### Введение

Основным трендом последнего десятилетия в развитии научных методологий прикладных экологических исследований и природопользования явилось активное использование современных высоких технологий и IT решений, уже зарекомендовавших себя в других сферах. Поиск решения проблем взаимодействия фундаментальных и прикладных исследований на фоне развития компьютерных технологий позволил мировому научному сообществу сформулировать новые подходы как к решению экологических вопросов, в том числе к реализации эффективного экологического мониторинга. В их основе лежат представления о возможности тотальной цифровизации (виртуализации) окружающего мира с целью построения его глобальных моделей. Несмотря на то, что сама концепция активно используется в современной утопической парадигме трансгуманизма (Fischer, 2018; Pedrot, 2018), возможности ее реализации самодостаточны и вписываются в общий вектор развития научной мысли. Именно с этих позиций следует рассматривать цифровую трансформацию экологических исследований, которая обозначена в Распоряжении Правительства РФ от 08.12.2021 г. № 3496-р. В нем четко расставляются приоритеты основных направлений научных исследований в области экологического мониторинга до 2030 г., важнейшими из которых названы: внедрение технологий искусственного интеллекта, активное использование беспилотных летательных аппаратов, систем дистанционного зондирования Земли, получение и использо-

вание в экологической отрасли больших данных (Big Data), разработка моделей «цифровых двойников» (Digital Twins).

Особый интерес и множество дискуссий вызывают у специалистов вопросы разработки «цифровых двойников». Понятие «цифровой двойник» в рамках научных дискуссий появилось относительно недавно, с появлением автоматизированных систем непрерывного контроля и развитием технологии «интернета вещей» (Internet of Things), особенно популярно оно среди европейских и американских исследователей (Blair, 2021; Christian et al., 2021). При этом рассматриваются два уровня этого понятия – прикладной (технологический) и концептуальный (Jiang et al., 2021). В простейшем случае, цифровой двойник процесса – это его математическая модель, связанная с реальным процессом непрерывным цифровым потоком данных. Именно эта связь отличает технологию Digital Twins от традиционного моделирования систем. Если на прикладном уровне предлагаемые решения Digital Twins принимаются и широко используются во многих научных областях, то концептуальный уровень вызывает множество дискуссий и теоретических вариаций. На прикладном уровне «цифровым двойником» обозначается процесс или объект, динамика состояния которого полностью смоделирована математически, а все важные его показатели оцифрованы, построены соответствующие модели, которые просчитывают все возможные состояния объекта. Эти виртуальные состояния сопоставляются с состоянием реального процесса или объ-

екта, при необходимости модель корректируется (дообучается). Таким образом, реальный объект и его виртуальная модель наблюдаются одновременно, но в любой момент, на любом этапе развития процесса можно заглянуть в будущее цифрового двойника и получить представление о перспективах реального объекта. Считается, что такой прогноз, сделанный с помощью цифрового двойника, значительно более точный, чем прогноз, полученный традиционными методами (Rodriguez, Frahm, 2021).

На концептуальном уровне вызывает вопросы сама возможность получения цифрового двойника в отрыве от реального прототипа. В частности, не вполне ясно, какова должна быть степень детализации информации об объекте, чтобы считать оставшуюся неопределенность достаточно малой для того, чтобы модель функционировала в качестве двойника даже при относительно краткосрочном разрыве связи с прототипом. Концепция «цифровых двойников» предусматривает построение виртуальной копии реального объекта (процесса), информация о котором теоретически может содержаться в бесконечном числе переменных, и даже в этом случае невозможно достоверно оценить, достаточно ли точно модель воспроизводит реальный объект. На практике решают эти проблемы, используя хоть и большое, но ограниченное (достаточное) число основных переменных, объединяемых необходимым числом сравнительно простых математических описаний, однако при этом значения используемых переменных непрерывно обновляются за счет новых данных о состоянии реального объекта (Moser et al., 2021). Чаще всего в качестве парадигмы такой модели используется многослойный перцептрон, на основе которого структурируются нейронные сети, которые, в свою очередь, могут структурироваться в нейросетевые каскады.

Таким образом, ключевой особенностью «цифровых двойников» является использование больших данных и неразрывная связь со своими реальными прототипами. «Цифровой двойник» постоянно корректирует и уточняет свое состояние (обучается) за счет непрерывно обновляемой информации, обеспечивая актуальный статус модели.

В рамках исследований по результатам мониторинга водных объектов Республики Татарстан проанализирована возможность использования информации о накоплении и перераспределении тяжелых металлов (ТМ) в донных отложениях для построения «цифровых двойников» водных объектов.

## Материалы и методы исследования

Для решения поставленной цели была сформирована специализированная база данных, содержащая сведения о физико-химическом составе донных отложений различных типов водных объектов – рек, озер, водохранилищ (4638 записей). В результате первичной оценки данных был установлен ряд закономерностей и выделены ключевые особенности накопления в донных отложениях подвижных (извлекаемых ацетатно-аммонийным буфером с pH 4.8) форм ТМ – Cd, Pb, Co, Cu, Ni, Zn, Cr, Mn, Fe (Иванов, Валиев, Шамаев, 2020; Валиев, Хасанов, Шамаев, 2021).

Установлено, что регрессионные модели, связывающий уровень ТМ и показатели состава и свойств донных отложений, эффективны в определенных диапазонах значений и сочетаний факторов. Это означает, что для правильной оценки и прогнозирования загрязнения необходимо моделировать ситуацию отдельно в пределах предварительно выделенных групп (кластеров) данных. Такие группы составили образцы донных отложений с различным содержанием органического вещества и пелитовых (<0.01 мм) частиц: 1) водотоки с содержанием пелита <30%; 2) водотоки с содержанием пелита  $\geq 30\%$ ; 3) водоемы с содержанием пелита <30%; 4) водоемы с содержанием пелита  $\geq 30\%$ ; 5) водные объекты с содержанием органического вещества в донных отложениях  $\geq 30\%$ .

Еще одним необходимым условием является учет показателей донных отложений, которые оказывают определяющее влияние на формы нахождения и уровень содержания ТМ, включая pH среды.

В результате был построен каскад регрессионных моделей, рассчитывающих содержание подвижных форм ТМ в зависимости от концентраций их валовых форм и сочетания факторов подвижности (Валиев и др., 2022).

## Результаты и их обсуждение

Подготовленный информационный массив был структурирован и разбит на последовательные блоки, необходимые для построения «цифрового двойника» содержания подвижных форм ТМ в донных отложениях. Структура «цифрового двойника» и схема взаимодействия разных блоков представлена на рисунке 1.

Функционал разработанной схемы реализуется следующим образом.

На вход системы подается цифровой поток данных, периодичность которого определяется природой моделируемого процесса. Для донных

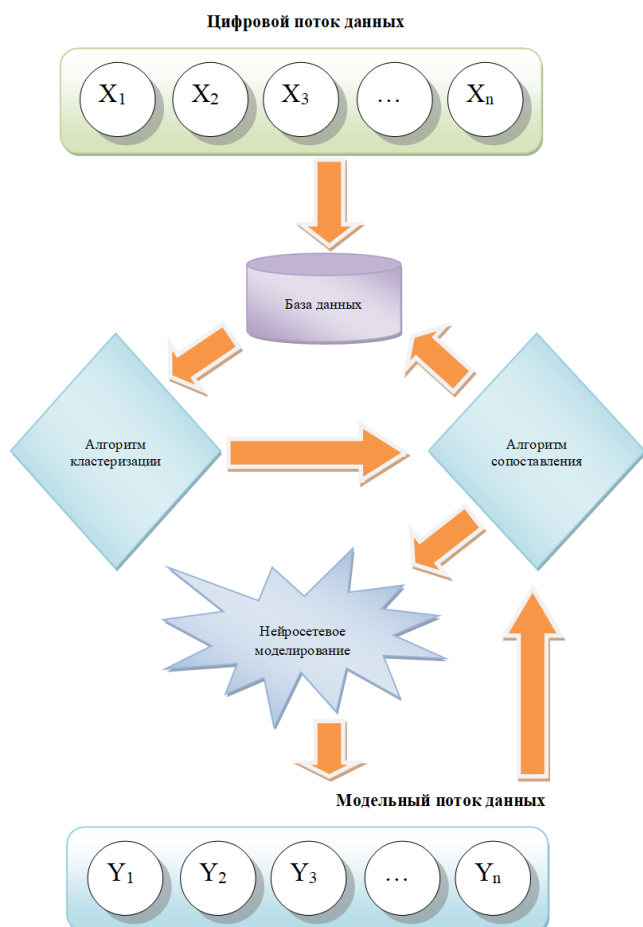


Рис. 1. Структурная схема «цифрового двойника» процессов формирования подвижных форм ТМ в донных отложениях

Fig. 1. Block diagram of the «digital twin» of the processes of formation of mobile forms of metals in sediments

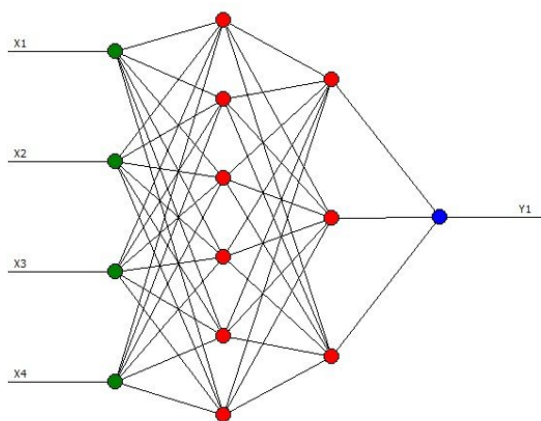


Рис. 2. Архитектура нейросетей, формирующих модельный поток

Fig. 2. Architecture of neural networks that form a model flow

отложений строгая периодичность не является критически важной. В данном случае использован интервал в 1 год. Поток данных включает сведения о содержании в конкретном образце

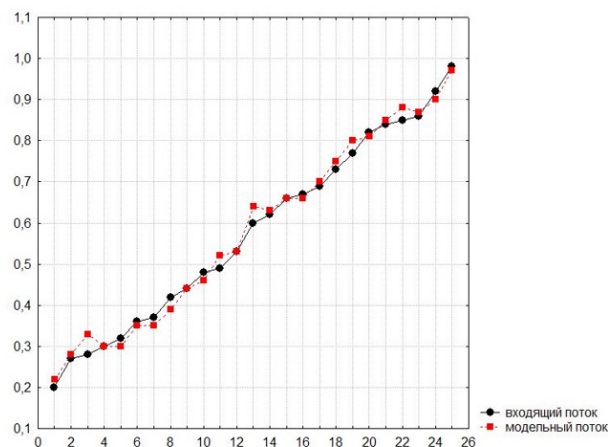


Рис. 3. Сопоставление реальных (входящий поток) и рассчитанных (модельный поток) значений, выстроенных по возрастанию

\* представлена одна пара рядов потока  
Fig. 3. Comparison of real (incoming flow) and calculated (model flow) values, arranged in ascending order

\* one pair of flow rows is shown

донных отложений: органического вещества (%), по потерям при прокаливании), доли фракций  $<0.01$  мм (%), значение pH водной вытяжки, содержание валовых и подвижных форм ТМ (мг/кг), а также сведения, кодирующие время и место отбора образца и тип водного объекта (водоём/водоток). Все данные поступают в базу данных, где структурируются и хранятся.

Далее данные проходят сортировку с помощью алгоритма кластеризации, разделяющего данные по группам (5 групп с разными комбинациями диапазонов значений факторов подвижности). Распределение данных осуществляется с помощью дискриминантного анализа по весам разделительных функций.

Из распределенных по группам (кластерам) данных с помощью алгоритма сопоставления формируются тестовые и обучающие («учитель») массивы, а также производится контроль обучения нейросетей и сопоставление реальных и смоделированных концентраций подвижных форм ТМ.

Нейросетевое моделирование подвижности ТМ в донных отложениях осуществляется с помощью специально построенных нейронных сетей, реализующих множественный регрессионный анализ. Для каждой группы, выделенной на этапе кластеризации, строится 9 нейросетей (по каждому металлу отдельно) схожей архитектуры (рис. 2). Парадигмой нейросетей является многослойный перцептрон (Multilayer Perceptron, MLP), с числом входных нейронов 4, двумя скрытыми слоями с 9 нейронами и одним выходом. Функция



активации нейронов скрытых слоев – гиперболический тангенс:

$$y = \frac{e^{2x} - 1}{e^{2x} + 1}$$

На вход подаются нормализованные значения органического вещества (X1), пелитовой фракции (X2), pH (X3), валовой формы металла (X4). На выходе формируется значение содержания подвижной формы этого металла (Y1).

В результате работы нейросетей формируется выходной модельный поток данных, включающий рассчитанные значения подвижных форм ТМ. Полученные данные сопоставляются с данными «учителя» и загружаются в специальные поля базы данных, контроль качества моделирования осуществляется графической визуализацией рядов данных обоих потоков, либо расчетом средней ошибки расхождения значений (рис. 3).

Цифровой двойник считается созданным, если ошибка расхождения между рядами потоков снижается с каждым циклом итераций и удовлетворяет требуемым значениям при первичной обработке новых данных.

### Заключение

Таким образом, по результатам исследования был сформирован алгоритм цифровизации данных геохимического мониторинга донных отложений с построением модели типа «цифровой двойник». Подобные модели являются перспективной и эффективной технологией хранения, сопровождения и оценки мониторинговой информации, а их комплексное использование позволит перейти к моделированию состояния более сложных систем и природных объектов в целом.

### Список литературы

1. Валиев В.С., Хасанов Р.Р., Шамаев Д.Е. Автоматизация обработки первичных данных мониторинга качества вод и донных отложений поверхностных водных объектов // Российский журнал прикладной экологии. 2021. №3. С. 30–35. DOI: 10.24852/2411-7374.2021.3.30.35.
2. Валиев В.С., Шамаев Д.Е., Хасанов Р.Р., Маланин В.В. Подвижность тяжелых металлов в донных отложениях и особенности интерпретации ее изменчивости // Российский журнал прикладной экологии. 2022. №2. С. 61–68. <https://doi.org/10.24852/2411-7374.2022.2.61.67>.
3. Иванов Д.В., Валиев В.С., Шамаев Д.Е. Апробация методики оценки уровня загрязнения донных отложений тяжелыми металлами и нефтепродуктами с использованием региональных нормативов их фонового содержания // Российский журнал прикладной экологии. 2020. №3. С. 40–45. DOI: 10.24411/2411-7374-2020-10025.
4. Blair G.S. Digital twins of the natural environment // *Patterns*. 2021. Vol. 2, iss. 10. 100359. DOI: 10.1016/j.patter.2021.100359.

5. Christian A., Moser A., Baganz F., Hass V.C. Digital twins for bioprocess control strategy development and realization // *Advances in biochemical engineering / biotechnology*. 2021. V. 177. P. 63–94. DOI: 10.1007/10\_2020\_151.

6. Fischer H. Mythanalysis of transhumanism // *Journal international de bioethique et ethique des sciences*. 2018;29(3). P. 204–231. DOI: 10.3917/jibes.293.0204.

7. Jiang Y., Yin S., Li K., Luo H., Kaynak O. Industrial applications of digital twins // *Philosophical translations. Series a mathematical, physical and engineering sciences*. 2021. V. 379, iss. 2207. 20200360. DOI: 10.1098/rsta.2020.0360.

8. Moser A., Appl C., Bruning S., Hass V.C. Mechanistic mathematical models as a basis for digital twins // *Advances in biochemical engineering / biotechnology*. 2021. V. 176. P. 133–180. DOI: 10.1007/10\_2020\_152.

9. Pedrot P. Transhumanism: a utopia to deconstruct // *Journal international de bioethique et ethique des science*. 2018. V. 29, №3–4. P. 126–134. DOI: 10.3917/jibes.293.0126.

10. Rodriguez T.H., Frahm B. Digital seed train twins and statistical methods // *Advances in biochemical engineering / biotechnology*. 2021. V. 176. P. 97–131. DOI: 10.1007/10\_2020\_137.

### References

1. Valiev V.S., Khasanov R.R., Shamaev D.E. Avtomatizaciya obrabotki pervichnyh dannyh monitoringa kachestva vod i donnyh otlozhenij poverhnostnyh vodnyh ob'ektov [Automation of processing of primary data for monitoring the quality of waters and bottom sediments of surface water bodies] // *Rossijskij zhurnal prikladnoj ekologii* [Russian journal of applied ecology]. 2021. No 3. P. 30–35. DOI: 10.24852/2411-7374.2021.3.30.35.
2. Valiev V.S., Shamaev D.E., Khasanov R.R., Mаланин V.V. Podvizhnost' tyazhelyh metallov v donnyh otlozheniyah i osobennosti interpretacii ee izmenchivosti [Mobility of heavy metals in bottom sediments and features of interpretation of its variability] // *Rossijskij zhurnal prikladnoj ekologii* [Russian journal of applied ecology]. 2022. No 2. P. 61–68. <https://doi.org/10.24852/2411-7374.2022.2.61.67>.
3. Ivanov D.V., Valiev V.S., Shamaev D.E. Aprobaciya metodiki ocenki urovnya zagryazneniya donnyh otlozhenij tyazhelymi metallami i nefteproduktami s ispol'zovaniem regional'nyh normativov ih fonovogo soderzhaniya [Approbation of the methodology for assessing the level of pollution of bottom sediments with heavy metals and oil products using regional standards for their background content] // *Rossijskij zhurnal prikladnoj ekologii* [Russian Journal of Applied Ecology] 2020. No 3. P. 40–45. DOI: 10.24411/2411-7374-2020-10025.
4. Blair G.S. Digital twins of the natural environment // *Patterns*. 2021. Vol. 2, iss. 10. 100359. DOI: 10.1016/j.patter.2021.100359.
5. Christian A., Moser A., Baganz F., Hass V.C. Digital twins for bioprocess control strategy development and realization // *Advances in biochemical engineering / biotechnology*. 2021. Vol. 177. P. 63–94. DOI: 10.1007/10\_2020\_151.
6. Fischer H. Mythanalysis of transhumanism // *Journal international de bioethique et ethique des sciences*. 2018;29(3). P. 204–231. DOI: 10.3917/jibes.293.0204.
7. Jiang Y., Yin S., Li K., Luo H., Kaynak O. Industrial applications of digital twins // *Philosophical translations. Series a mathematical, physical and engineering sciences*. 2021. Vol. 379, iss. 2207. 20200360. DOI: 10.1098/rsta.2020.0360.
8. Moser A., Appl C., Bruning S., Hass V.C. Mechanistic mathematical models as a basis for digital twins // *Advances in biochemical engineering / biotechnology*. 2021. Vol. 176. P. 133–180. DOI: 10.1007/10\_2020\_152.
9. Pedrot P. Transhumanism: a utopia to deconstruct // *Journal international de bioethique et ethique des science*. 2018. Vol. 29,

No 3–4. P. 126–134. DOI: 10.3917/jibes.293.0126.

10. Rodriguez T.H., Frahm B. Digital seed train twins and statistical methods // *Advances in biochemical engineering / biotechnology*. 2021. Vol. 176. P. 97–131. DOI: 10.1007/10\_2020\_137.

---

---

**Valiev V.S., Ivanov D.V., Shamaev D.E., Khasanov R.R. Creation of «digital twins» within the digital transformation of environmental monitoring.**

Based on the example of assessing the content of heavy metals in sediments, an approach is proposed that provides an effective technology for storing, maintaining and evaluating information obtained in the process of monitoring the environment, as well as an algorithm for its digitalization with the construction of a «digital twin» type model. It is shown that the complex use of such models will allow in the future to move to modeling the state of natural objects as a whole.

*Keywords:* digital twins; neural networks; water quality; sediments; heavy metals.

Раскрытие информации о конфликте интересов: Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов / Disclosure of conflict of interest information: The author claims no conflict of interest

**Информация о статье / Information about the article**

Поступила в редакцию / Entered the editorial office: 11.07.2022

Одобрено рецензентами / Approved by reviewers: 27.07.2022

Принята к публикации / Accepted for publication: 05.08.2022

**Информация об авторах**

Валиев Всеволод Сергеевич, старший научный сотрудник, Институт проблем экологии и недропользования АН РТ, 420087, Россия, г. Казань, ул. Даурская, 28, E-mail: podrost@mail.ru.

Иванов Дмитрий Владимирович, кандидат биологических наук, зам. директора по научной работе, Институт проблем экологии и недропользования АН РТ, 420087, Россия, г. Казань, ул. Даурская, 28, E-mail: water-rf@mail.ru.

Шамаев Денис Евгеньевич, младший научный сотрудник, Институт проблем экологии и недропользования АН РТ, 420087, Россия, г. Казань, ул. Даурская, 28, E-mail: ds1991n@gmail.com.

Хасанов Рустам Равилевич, младший научный сотрудник, Институт проблем экологии и недропользования АН РТ, 420087, Россия, г. Казань, ул. Даурская, 28, E-mail: rustamkhasanov88@gmail.com.

**Information about the authors**

Vsevolod S. Valiev, Senior Researcher, Research Institute for Problems of Ecology and Mineral Wealth Use of Tatarstan Academy of Sciences, 28, Daurskaya st., Kazan, Russia, 420087, E-mail: podrost@mail.ru.

Dmitrii V. Ivanov, Ph.D. in Biology, Deputy Director, Research Institute for Problems of Ecology and Mineral Wealth Use of Tatarstan Academy of Sciences, 28, Daurskaya st., Kazan, Russia, 420087, E-mail: water-rf@mail.ru.

Denis E. Shamaev, Junior Researcher, Research Institute for Problems of Ecology and Mineral Wealth Use of Tatarstan Academy of Sciences, 28, Daurskaya St., Kazan, Russia, 420087, E-mail: ds1991n@gmail.com.

Rustam R. Khasanov, Junior Researcher, Research Institute for Problems of Ecology and Mineral Wealth Use of Tatarstan Academy of Sciences, 28, Daurskaya St., Kazan, Russia, 420087, E-mail: rustamkhasanov88@gmail.com.