Zastosowanie sztucznych sieci neuronowych do klasyfikacji jakości wody

Application of Artificial Neural Networks for Water Quality Classification

1. Opis problemu

Woda odgrywa kluczową rolę w prawidłowym funkcjonowaniu organizmu człowieka. Jest nie tylko podstawowym środowiskiem dla procesów życiowych, ale także niezbędnym substratem wielu reakcji biochemicznych. Uczestniczy w transporcie składników odżywczych, metabolitów, tlenu oraz dwutlenku węgla. Ponadto pełni istotne funkcje regulujące i ochronne, wspierając utrzymanie homeostazy organizmu, w tym stałej temperatury ciała. Ze względu na swoje znaczenie dla zdrowia i życia, dostęp do bezpiecznej, zdatnej do spożycia wody jest jednym z priorytetów w dziedzinie zdrowia publicznego i ochrony środowiska.

Problem jakości wody pitnej stanowi jedno z największych wyzwań współczesnego świata. Zanieczyszczenie wody może prowadzić do poważnych zagrożeń zdrowotnych, takich jak choroby wywołane przez toksyczne związki chemiczne, bakterie czy wirusy. Dlatego skuteczne monitorowanie jakości wody oraz identyfikacja czynników wpływających na jej bezpieczeństwo są niezwykle ważne. Celem tego projektu jest klasyfikacja wody pod kątem jej zdatności do spożycia przy użyciu sztucznych sieci neuronowych. Projekt zakłada budowę modelu predykcyjnego, który, na podstawie parametrów chemicznych i biologicznych, będzie klasyfikował wodę jako bezpieczną (is_safe = 1) lub niebezpieczną (is_safe = 0). Zestaw używany projekcie pochodzi platformy danych W (https://www.kaggle.com/datasets/eissaislam/waterquality). Dane dotyczą oceny jakości wody i zawiera szeroki zakres parametrów: 21 zmiennych każda po 1838 obserwacji.

Zmienne chemiczne (dotyczące stężeń różnych substancji chemicznych):

- aluminium
- ammonia
- arsenic
- barium
- cadmium
- chloramine
- chromium
- copper
- flouride
- lead
- nitrates
- nitrites
- mercury
- perchlorate
- radium
- selenium
- silver
- uranium

Zmienne biologiczne (informacje o obecności bakterii i wirusów):

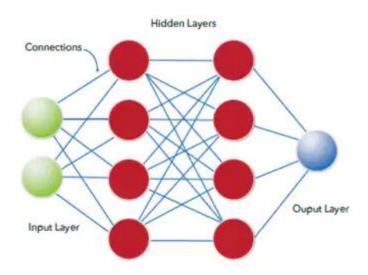
- bacteria
- viruses

Wskaźnik bezpieczeństwa:

- *is_safe* - przyjmuje wartość 1 dla wody uznanej za bezpieczną do spożycia i 0 dla wody niebezpiecznej, na podstawie zmierzonych parametrów

2. Teoria

Sztuczne sieci neuronowe (ang. Artificial Neural Networks, ANN) to jedna z najważniejszych technik uczenia maszynowego, inspirowana biologicznymi procesami zachodzącymi w mózgu. Wykorzystują one strukturę zbudowaną z połączonych ze sobą węzłów, nazywanych neuronami, do modelowania złożonych zależności i wzorców w danych. ANN są szeroko stosowane w różnych dziedzinach, takich jak analiza obrazu, rozpoznawanie mowy, predykcja szeregów czasowych czy klasyfikacja danych. Podstawowy model sztucznego neuronu, zaproponowany przez McCullocha i Pittsa w 1943 roku, opisuje działanie neuronu jako sumę ważoną wejść. Wynik sumowania jest przekształcany za pomocą funkcji aktywacji, co decyduje o tym, czy sygnał zostanie przekazany dalej.



Na powyższej grafice przedstawiono podstawową strukturę sztucznej sieci neuronowej. Składa się ona z trzech rodzajów warstw:

1. Warstwa wejściowa

Odpowiada za przyjmowanie danych wejściowych, takich jak cechy opisujące obserwacje. Liczba neuronów w tej warstwie odpowiada liczbie cech w zbiorze danych. Każdy neuron z warstwy wejściowej przesyła dane do każdego neuronu w warstwie ukrytej.

2. Warstwy ukryte

Składają się z wielu neuronów, które przetwarzają dane wejściowe, wykrywając ukryte wzorce i zależności. Tutaj przede wszystkim zachodzi proces uczenia się oraz identyfikacja zależności liniowych i nieliniowych. Liczba warstw ukrytych oraz liczba neuronów w każdej warstwie są parametrami architektury sieci. Im sieć zawiera więcej warstw ukrytych, tym głębsze zależności może znaleźć.

3. Warstwa wyjściowa

Produkuje wynik działania sieci, który może być wartością liczbową (w przypadku regresji) lub klasą (w przypadku klasyfikacji). Wynik wyjściowy zależy od przekształceń dokonanych w poprzednich warstwach sieci.

Połaczenia

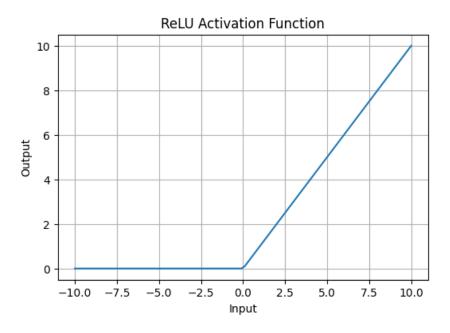
Każdy neuron z warstwy wejściowej i ukrytych jest połączony z każdym neuronem w kolejnej warstwie. Połączenia te mają przypisane wagi, które są modyfikowane w procesie uczenia sieci.

Funkcje aktywacji:

- Funkcja ReLU (Rectified Linear Unit)

$$ReLU(x) = max(0, x)$$

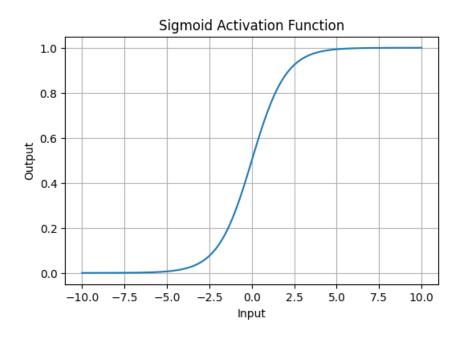
ReLU zwraca wartość wejściową, jeśli jest ona dodatnia, a w przeciwnym razie zwraca 0.



- Funkcja sigmoidalna

$$Sigmoid(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$$

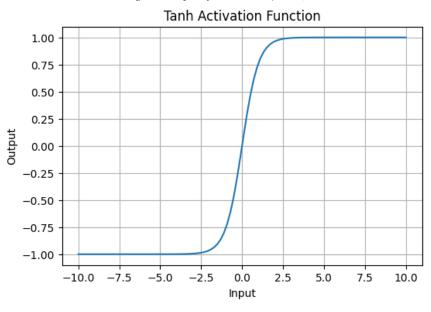
Jej zakres wartości mieści się w przedziale (0,1), co pozwala na interpretację wyników jako prawdopodobieństwa.



- Funkcja tangensa hiperbolicznego (tanh)

$$Tanh(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}$$

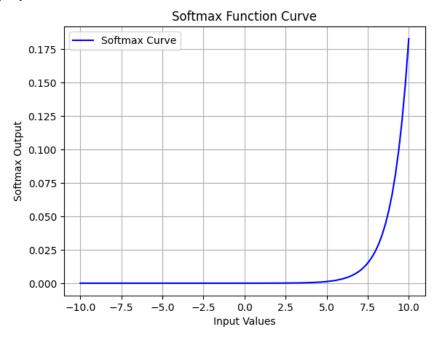
Tanh przekształca wartość wejściową w przedział (-1,1).



- Funkcja softmax

$$Softmax(x_i) = \frac{e^{x_i}}{\sum_j e^{x_j}}$$

Funkcja przekształca wektor wejściowy w wektor wartości w przedziale (0,1) które sumują się do 1.



3. Przegląd literatury

Tytuł publikacji: "Water Quality Classification Using an Artificial Neural Network (ANN)" Autorzy: Khadijah Sulaiman, Lokman Hakim Ismail, Mohd Adib Mohammad Razi, Mohd Shalahuddin Adnan, Rozaida Ghazali

Źródło: IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 2019

Artykuł opisuje wykorzystanie sztucznej sieci neuronowej (ANN) do klasyfikacji jakości wody w Malezji. Dane obejmowały sześć parametrów: pH, całkowite zawieszone ciała stałe (TSS), tlen rozpuszczony (DO), chemiczne zapotrzebowanie na tlen (COD), biologiczne zapotrzebowanie na tlen (BOD) oraz amoniak. Klasyfikację przeprowadzono na podstawie standardów INWQS, dzieląc wody na klasy od I do V. Dane poddano normalizacji i podzielono na zbiory treningowe (80%) i testowe (20%). ANN osiągnęła 80% dokładności klasyfikacji z RMSE wynoszącym 0.468, wskazując na skuteczność tej metody w ocenie jakości wody. Model jest prosty, adaptacyjny i odpowiedni do zarządzania jakością wody. Publikacja pokazuje, że sztuczne sieci neuronowe mogą być skutecznie wykorzystane do klasyfikacji danych środowiskowych, takich jak parametry jakości wody

Tytuł publikacji: "An Artificial Neural Network Model for Water Quality and Water Consumption Prediction"

Autorzy: Furqan Rustam, Abid Ishaq, Sayyida Tabinda Kokab, Isabel de la Torre Diez, Juan Luis Vidal Mazón, Carmen Lili Rodríguez, Imran Ashraf

Źródło: Water 2022, 14, 3359. https://doi.org/ 10.3390/w14213359

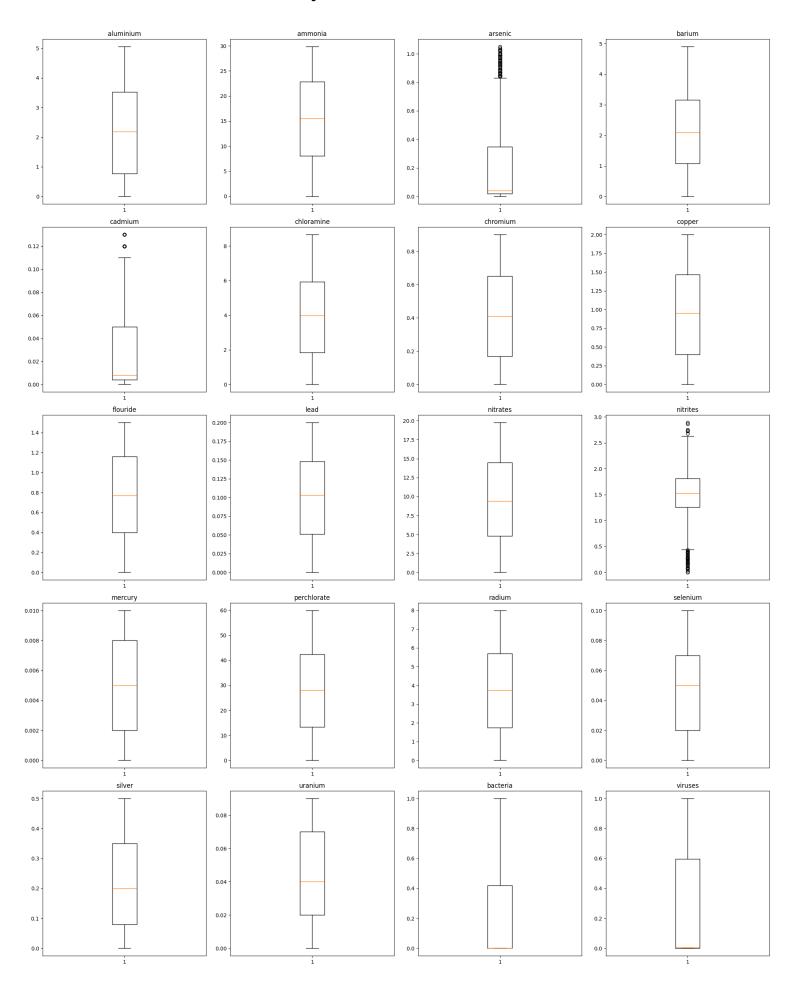
W owym artykule również zaprezentowano prostą architekturę sieci neuronowej (ANN) do klasyfikacji jakości wody. Pod uwagę brany jest wariant złożony z jednej ukrytej warstwy, warstw aktywacyjnych (ReLU) oraz warstw dropout, które redukują nadmierne dopasowanie. Model skutecznie radzi sobie z nierównowagą klas, zapewniając dobrą wydajność dla obu klas (*is_safe=0* i *is_safe=1*). Osiągnął wysoką dokładność wynoszącą 96%, przewyższając wyniki uzyskane przez inne algorytmy, takie jak drzewa decyzyjne (95%) czy regresja logistyczna (90%). W porównaniu z metodami wykazał lepsze wyniki zarówno w dokładności, jak i odporności na problem niezrównoważonego zbioru danych.

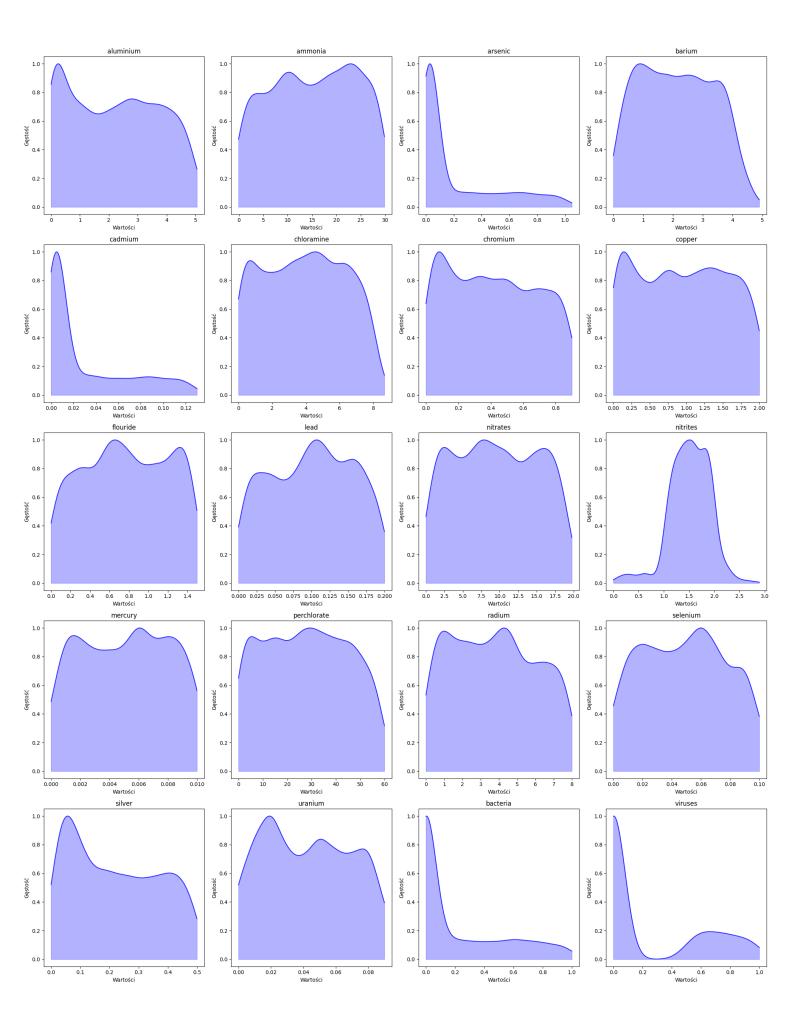
Tytuł publikacji: "Artificial Neural Network (ANN)-Based Water Quality Index (WQI) for Assessing Spatiotemporal Trends in Surface Water Quality—A Case Study of South African River Basins"

Autorzy: Talent Diotrefe Banda, Muthukrishnavellaisamy Kumarasamy Źródło: Water 2024, 16(11), 1485; https://doi.org/10.3390/w16111485

W badaniu opracowano model sztucznej sieci neuronowej (ANN) do oceny jakości wody powierzchniowej w basenach rzecznych RPA. Model wykorzystuje 13 zmiennych wyjaśniających (m.in. stężenie NH3, Cl, pH, SO4) oraz wielowarstwową strukturę sieci neuronowej (13-5-1), z trzema warstwami neuronów: wejściową, ukrytą i wyjściową. Dane pochodzą z 416 próbek zebranych w latach 2014–2018 w sześciu lokalizacjach w regionie KwaZulu-Natal. Wyniki sieci neuronowej osiągnęły wysoką skuteczność: MAE = 0.521, współczynnik determinacji R² = 0.970 oraz MSE = 0.479. Wyniki wskazują na zdolność modelu do precyzyjnego odwzorowania wyników wskaźnika jakości wody (WQI) dla analizowanych basenów rzecznych. Można stwierdzić, że sztuczne sieci neuronowe (ANN) są solidnymi i praktycznymi narzędziami analitycznymi do oceny jakości wody powierzchniowej.

4. Analiza zmiennych





Większość parametrów chemicznych, takich jak aluminium, amoniak, chrom, selen czy uran, wykazuje niewielką zmienność, co oznacza, że stężenia tych substancji w wodzie są stosunkowo jednorodne w analizowanych próbkach. Arsen i azotyny cechują się dużą liczbą wartości odstających, co wskazuje na obecność próbek z wysokim poziomem tych zanieczyszczeń. Na wykresach gęstości arsenu i kadmu można zauważyć, że rozkłady tych zmiennych są silnie skośne, z dominacją próbek o niskich stężeniach, ale z kilkoma wyjątkami. Ołów i rtęć mają relatywnie wąskie rozkłady, co sugeruje, że ich obecność w wodzie jest mniej zróżnicowana. Na wykresach gęstości ich rozkłady są również bardziej skupione, co potwierdza tę obserwację. Substancje takie jak nadchlorany i rad charakteryzują się szerokim zakresem wartości. Zmienna bakterie wykazuje asymetryczny rozkład, co oznacza, że większość próbek wody ma niskie poziomy zanieczyszczenia bakteriami, ale istnieją przypadki, w których stężenie jest wysokie. Wirusy mają rozkład z dominującymi niskimi wartościami.

5. Analiza wpływu parametrów

Badania nad modelem przeprowadzono dla różnych konfiguracji parametrów sieci neuronowych, przedstawionych w tabeli. Dla każdej kombinacji liczby warstw, liczby neuronów oraz rodzaju funkcji aktywacji przeprowadzono pięciokrotne powtórzenia eksperymentów, co umożliwiło uśrednienie wyników i ocenę wpływu losowości na skuteczność modelu.

Liczba warstw	Liczba neuronów	Rodzaj funkcji aktywacji
1	4	Relu
2	8	Sigmoid
3	16	Tanh
4	32	Softmax

Zestaw danych został podzielony na dwie grupy:

- Grupa treningowa: obejmująca 80% próbek, wykorzystywana do uczenia modelu,
- **Grupa testowa**: stanowiąca 20% próbek, przeznaczona do oceny skuteczności modelu na nieznanych wcześniej danych.

Analiza dla przypadku o parametrach:

Liczba warstw: 1Liczba neuronów: 4

• Rodzaj funkcji aktywacji: relu

W tej konfiguracji zaprezentowano wykresy związane z pierwszym z pięciu powtórzeń eksperymentu.

LOSS train:

Epoki	Powtórzenie 1	Powtórzenie 2	Powtórzenie 3	Powtórzenie 4	Powtórzenie 5
1.	0.684912	0.74136	0.746582	0.742777	0.731177
10.	0.597101	0.601169	0.599104	0.650814	0.602868
20.	0.469374	0.472352	0.484783	0.579631	0.498972
30.	0.39424	0.403924	0.415066	0.51163	0.431964
40.	0.343943	0.362121	0.374098	0.453082	0.387343
50.	0.306167	0.332891	0.347239	0.404641	0.35566

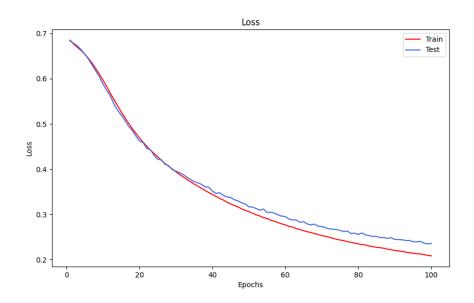
60.	0.276985	0.276985		0.365424	0.331576
70.	0.253139	0.292631	0.311692	0.331381	0.312533
80.	0.234963	0.276194	0.298274	0.303719	0.296036
90.	0.220209	0.26273	0.285618	0.280967	0.282681
100.	0.208472	0.251819	0.272052	0.26201	0.271166

Wartość funkcji straty w pierwszej epoce wahała się od 0,6849 do 0,7466. Wraz z postępem treningu odnotowano systematyczny spadek straty. Po 10 epokach wynosiła ona średnio około 0,610, a po 50 epokach oscylowała w granicach 0,306–0,404. W ostatniej, setnej epoce, wartości straty były najniższe i mieściły się w przedziale od 0,208 do 0,272. To pokazuje, że model efektywnie uczył się na zbiorze treningowym, co skutkowało stopniowym zmniejszaniu straty.

LOSS test:

Epoki	Powtórzenie 1	Powtórzenie 2	Powtórzenie 3	Powtórzenie 4	Powtórzenie 5
1.	0.682826	0.726502	0.747562	0.702352	0.72145
10.	0.588866	0.593802	0.602841	0.635551	0.594186
20.	0.462202	0.477452	0.491068	0.564021	0.496711
30.	0.395567	0.415296	0.432355	0.501341	0.440304
40.	0.351555	0.379852	0.396719	0.452385	0.406304
50.	0.316736	0.35545	0.376441	0.410455	0.381339
60.	0.295378	0.336809	0.362455	0.374395	0.36113
70.	0.273372	0.320676	0.35177	0.346825	0.347283
80.	0.255753	0.303341	0.340349	0.323004	0.336551
90.	0.244558	0.290816	0.325954	0.302857	0.324636
100.	0.235591	0.281655	0.315497	0.287824	0.317622

Na zbiorze testowym zaobserwowano podobną tendencję spadkową. Na początku, w pierwszej epoce, wartości straty były zbliżone do tych na zbiorze treningowym, wynosząc od 0,6828 do 0,7476. Wraz z kolejnymi epokami następowało stopniowe obniżanie się funkcji straty. Po 50 epokach wartości wynosiły od 0,316 do 0,410, a po 100 epokach zmniejszyły się do zakresu 0,235–0,317. Wyniki wskazują na poprawę działania modelu również na danych testowych, co sugeruje, że nie dochodziło do nadmiernego przeuczenia.



W obu przypadkach, zarówno na zbiorze treningowym, jak i testowym, wartość funkcji straty systematycznie maleje wraz ze wzrostem liczby epok. Zauważyć można, że wartości funkcji straty dla danych testowych (linia niebieska) są nieznacznie wyższe niż dla danych treningowych (linia czerwona) w większości epok. Te drobne różnice sugerują, że model skutecznie generalizuje i nie napotyka istotnych problemów związanych z dopasowaniem do danych testowych.

ACCURACY train:

Epoki	Powtórzenie 1	Powtórzenie 2	Powtórzenie 3	Powtórzenie 4	Powtórzenie 5
1.	0.5802721	0.5197279	0.5156463	0.4911565	0.5285714
10.	0.7564626	0.7013605	0.7564626	0.7054422	0.7455782
20.	0.8251701	0.8231293	0.8163265	0.7693878	0.8156463
30.	0.844898	0.8469388	0.8360544	0.8054422	0.8346939
40.	0.8666667	0.8537415	0.8455782	0.8414966	0.8489796
50.	0.8836735	0.8714286	0.8591837	0.8612245	0.8578231
60.	0.9	0.8823129	0.8687075	0.8768707	0.8666667
70.	0.9061224	0.8891156	0.8734694	0.8884354	0.8721088
80.	0.914966	0.8959184	0.8816327	0.9	0.8809524
90.	0.922449	0.9047619	0.8836735	0.9068027	0.8857143
100.	0.9258503	0.9095238	0.8931973	0.9108844	0.8938776

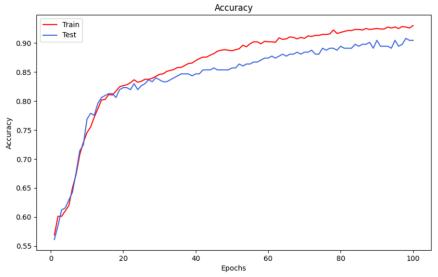
W pierwszej epoce dokładność modelu była stosunkowo niska i wahała się między 0,491 a 0,580. Po 10 epokach osiągnęła wartości w zakresie od 0,701 do 0,756, co oznaczało zauważalną poprawę predykcji modelu. Po 50 epokach dokładność była znacznie wyższa, osiągając od 0,858 do 0,884, co wskazuje na stabilizację procesu uczenia. W ostatniej, setnej epoce dokładność osiągnęła wartości od 0,894 do 0,926, co świadczy o dobrym dopasowaniu modelu do danych treningowych.

ACCURACY test:

Epoki	Powtórzenie 1	Powtórzenie 2	Powtórzenie 3	Powtórzenie 4	Powtórzenie 5
1.	0.5612245	0.547619	0.4863946	0.5306122	0.5068027
10.	0.7687075	0.6836734	0.7482993	0.744898	0.7619048
20.	0.8231292	0.8129252	0.8265306	0.7959183	0.8231292
30.	0.8367347	0.8197279	0.8231292	0.8197279	0.8231292
40.	0.8469388	0.8265306	0.8129252	0.8333333	0.8265306
50.	0.8571429	0.8333333	0.8231292	0.8469388	0.8197279
60.	0.8741497	0.8537415	0.8333333	0.8605442	0.8367347
70.	0.8843538	0.8605442	0.8503401	0.8639456	0.8469388
80.	0.8945578	0.877551	0.8537415	0.8673469	0.8537415
90.	0.9047619	0.8911564	0.8537415	0.8809524	0.8571429
100.	0.9047619	0.8945578	0.8639456	0.8843538	0.8673469

W pierwszej epoce dokładność była nieco niższa niż na zbiorze treningowym (od 0,486 do 0,561). Jest to oczekiwane, ponieważ model na początku lepiej radzi sobie z danymi, na których się uczy. Po 10 epokach dokładność znacznie wzrosła, osiągając przedział od 0,684 do 0,769. W kolejnych epokach dokładność na zbiorze testowym systematycznie rosła, chociaż wolniej niż na zbiorze treningowym. Po 50 epokach znajdowała się w zakresie od 0,820 do 0,857. W ostatniej epoce (100) dokładność testowa wynosiła od 0,864 do 0,905, co wskazuje na dobry

model. Pomimo nieco niższych wyników w porównaniu do zbioru treningowego, różnica była niewielka, co świadczy o braku nadmiernego dopasowania.



W pierwszych epokach dokładność jest niska zarówno dla zbioru treningowego, jak i testowego, ale szybko rośnie w miarę postępu treningu. Dokładność na zbiorze testowym jest nieco niższa niż na treningowym przez cały czas trwania treningu, co jest typowe i wskazuje na dobrą generalizację modelu. Różnica między krzywymi pozostaje niewielka, co sugeruje, że model nie jest przetrenowany.

MAE train:

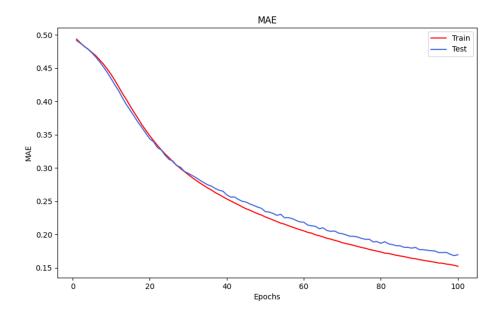
Epoki	Powtórzenie 1	Powtórzenie 2	Powtórzenie 3	Powtórzenie 4	Powtórzenie 5
1.	0.493728	0.480175	0.490021	0.510197	0.502129
10.	0.440402	0.432345	0.444166	0.474675	0.446371
20.	0.348569	0.344811	0.364368	0.429461	0.372316
30.	0.289995	0.293174	0.30638	0.382068	0.318546
40.	0.253476	0.253476		0.342215	0.28226
50.	0.226428	0.238484	0.247669	0.306547	0.256327
60.	0.205544	0.221461	0.231144	0.277599	0.23725
70.	0.187646	0.207234	0.218427	0.251907	0.221965
80.	0.173742	0.195265	0.208867	0.230099	0.209588
90.	0.16232	0.185623	0.199944	0.212881	0.199341
100.	0.152199	0.176945	0.190297	0.197957	0.190528

W pierwszej epoce MAE na zbiorze treningowym wynosił od 0,480 do 0,510, co wskazuje na umiarkowane błędy modelu na początkowym etapie treningu. MAE sukcesywnie maleje, co odzwierciedla poprawę jakości predykcji modelu. Po 10 epokach spadł do przedziału 0,432–0,475. Po 50 epokach MAE osiągnął wartości w zakresie od 0,226 do 0,307. Widać, że szybkość spadku błędu wyraźnie zmniejsza się po 30–50 epokach. W setnej epoce MAE wynosił od 0,152 do 0,198, co wskazuje na precyzyjne przewidywania modelu na danych treningowych.

MAE test:

Epoki	Powtórzenie 1	Powtórzenie 2	Powtórzenie 3	Powtórzenie 4	Powtórzenie 5
1.	0.491598	0.483102	0.503606	0.496886	0.504375
10.	0.434132	0.425323	0.445454	0.466759	0.439937
20.	0.343839	0.344485	0.366676	0.421302	0.368143
30.	0.291936	0.298232	0.314251	0.378717	0.319523
40.	0.259503	0.259503		0.343393	0.288835
50.	0.234403	0.250998	0.262104	0.311437	0.266603
60.	0.218472	0.236426	0.248514	0.282605	0.249514
70.	0.201167	0.223864	0.239093	0.260999	0.236097
80.	0.186725	0.211397	0.231297	0.241255	0.22655
90.	0.17729	0.202516	0.22123	0.224493	0.216848
100.	0.169574	0.195122	0.21346	0.212283	0.210233

W pierwszej epoce MAE wynosił od 0,483 do 0,504, co jest porównywalne z wartościami na zbiorze treningowym. Wraz z postępem treningu MAE systematycznie maleje, osiągając po 10 epokach wartości w zakresie 0,425–0,467. Po 50 epokach MAE spada do przedziału od 0,234 do 0,311. Widać, że różnica między zbiorami treningowym a testowym pozostaje niewielka. W setnej epoce MAE osiągnął wartości od 0,170 do 0,213, co wskazuje na dobrą generalizację modelu i wysoka jakość przewidywań również na zbiorze testowym.



MAE dla zbioru testowego jest tylko nieznacznie wyższe niż dla zbioru treningowego. Model skutecznie minimalizuje średni błąd bezwzględny zarówno na danych treningowych, jak i testowych. Ostateczne wartości MAE po 100 epokach wskazują na precyzyjne przewidywania.

MSE train:

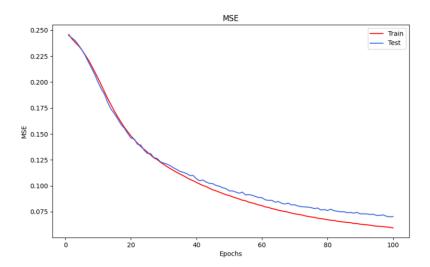
Epoki	Powtórzenie 1	Powtórzenie 2	Powtórzenie 3	Powtórzenie 4	Powtórzenie 5
1.	0.245899	0.271125	0.273536	0.273475	0.266461
10.	0.203422	0.206835	0.204246	0.229108	0.206065
20.	0.148187	0.150322	0.154175	0.195652	0.160508
30.	0.120698	0.123844	0.128013	0.166121	0.134347
40.	0.103264	0.109123	0.113352	0.141505	0.117979
50.	0.090641	0.099391	0.104592	0.12242	0.106905
60.	0.08089	0.092111	0.098296	0.107261	0.098794
70.	0.073002	0.086366	0.093265	0.094747	0.092635
80.	0.067337	0.080815	0.088992	0.085318	0.087006
90.	0.062968	0.076603	0.084882	0.077561	0.082794
100.	0.059455	0.073426	0.080399	0.071637	0.079024

W pierwszej epoce MSE na zbiorze treningowym wynosił od 0,246 do 0,274, co odzwierciedla stosunkowo duże błędy na początku procesu treningu. Po 10 epokach MSE spada do przedziału 0,203–0,229, co wskazuje na poprawę predykcji modelu już na wczesnym etapie treningu. W 50. epoce MSE osiąga wartości w zakresie 0,090–0,122, co pokazuje stały trend redukcji błędu. Po 100 epokach MSE na zbiorze treningowym zmniejsza się do przedziału 0,059–0,080. Ostateczne wartości wskazują na wysoki stopień dopasowania modelu do danych treningowych.

MSE test:

Epoki	Powtórzenie 1	Powtórzenie 2	Powtórzenie 3	Powtórzenie 4	Powtórzenie 5
1.	0.244864	0.264564	0.275359	0.254353	0.262963
10.	0.199675	0.203537	0.20618	0.221682	0.201903
20.	0.146039	0.15353	0.157032	0.188326	0.159376
30.	0.1219	0.129951	0.13501	0.160973	0.137611
40.	0.106657	0.117984	0.123042	0.140927	0.125047
50.	0.095115	0.110091	0.11709	0.124745	0.116183
60.	0.088504	0.104028	0.113353	0.111666	0.109453
70.	0.08161	0.098777	0.110511	0.101812	0.104706
80.	0.07621	0.092951	0.107248	0.093919	0.101115
90.	0.072949	0.088822	0.102562	0.087443	0.097237
100.	0.070308	0.085907	0.099202	0.082734	0.094819

W pierwszej epoce MSE wynosił od 0,245 do 0,275, co jest porównywalne z wynikami na zbiorze treningowym. Po 10 epokach MSE spada do zakresu 0,199–0,222. Wyniki wskazują na poprawę modelu także na danych testowych. Po 50 epokach MSE wynosi od 0,095 do 0,125. Widać, że tempo spadku błędu zaczyna się zmniejszać w tej fazie treningu. W setnej epoce MSE na zbiorze testowym osiąga wartości od 0,070 do 0,099. To wskazuje na stabilne działanie modelu na danych testowych



Model skutecznie minimalizuje MSE zarówno na danych treningowych, jak i testowych. Ostateczne wartości MSE po 100 epokach są niskie, co wskazuje na dobre przewidywania i wysoką jakość modelu.

Wpływ parametrów na skuteczność działania sieci:

Aby zbadać wpływ różnych parametrów, takich jak liczba warstw, liczba neuronów oraz rodzaj funkcji aktywacji na skuteczność działania sieci neuronowej, przeprowadzono symulacje modelu, w których zmieniano jeden z tych parametrów, przy jednoczesnym utrzymaniu pozostałych na stałym poziomie. Dla każdego z parametrów rozważono cztery różne wartości. Każde ustawienie parametrów zostało poddane pięciokrotnemu powtórzeniu eksperymentu, a w tabelach zaprezentowano średnie wyniki z setnej epoki dla badanych wskaźników: LOSS, Accuracy, MSE oraz MAE.

Liczba neuronów: 4 Rodzaj funkcji aktywacji: relu

Liczba warstw	1		2	2	3	3	4	1
	Train	Test	Train	Test	Train	Test	Train	Test
Accuracy	0.9067	0.8830	0.9136	0.8823	0.9288	0.9095	0.9397	0.9211
Loss	0.2531	0.2876	0.2490	0.2863	0.1877	0.2236	0.1681	0.2127
MAE	0.1816	0.2001	0.1667	0.1865	0.1192	0.1360	0.1015	0.1261
MSE	0.0728	0.0866	0.0693	0.0851	0.0538	0.0667	0.0470	0.0632

Wraz ze wzrostem liczby warstw, dokładność (Accuracy) na zbiorze treningowym systematycznie rośnie. Na zbiorze testowym również obserwujemy poprawę accuracy. Strata (Loss) na zbiorze treningowym zmniejsza się wraz ze wzrostem liczby warstw. Podobny trend występuje na zbiorze testowym. Mniejsza strata wskazuje, że model z większą liczbą warstw lepiej przewiduje wyniki. Średni błąd absolutny spada wraz ze wzrostem liczby warstw zarówno dla danych testowych jak i treningowych. Analogiczny trend występuje w średnim błędzie kwadratowym. Zwiększenie liczby warstw poprawia wyniki we wszystkich parametrach zarówno na zbiorze treningowym, jak i testowym. Dodawanie warstw zwiększa złożoność modelu, co poprawia jego zdolność do uchwycenia wzorców w danych. Jednak zbyt wiele warstw mogłoby prowadzić do przetrenowania.

Liczba warstw: 1

Rodzaj funkcji aktywacji: relu

Liczba neuronów	4		8	3	1	6	3	2
	Train	Test	Train	Test	Train	Test	Train	Test
Accuracy	0.9067	0.8830	0.9335	0.9129	0.9475	0.9293	0.9578	0.9429
Loss	0.2531	0.2876	0.1993	0.2337	0.1601	0.1980	0.1305	0.1703
MAE	0.1816	0.2001	0.1440	0.1626	0.1188	0.1388	0.0994	0.1192
MSE	0.0728	0.0866	0.0563	0.0687	0.0441	0.0574	0.0350	0.0485

Wraz ze wzrostem liczby neuronów, dokładność (Accuracy) na zbiorze treningowym rośnie. Na zbiorze testowym również obserwujemy poprawę. Strata (Loss) maleje wraz ze wzrostem liczby neuronów. Analogiczny spadek strat obserwujemy na zbiorze testowym. Średni błąd absolutny spada wraz ze wzrostem liczby neuronów dla danych testowych i treningowych. Średni błąd kwadratowy maleje wraz ze wzrostem liczby neuronów. Podobny spadek obserwujemy na zbiorze testowym. Wzrost liczby neuronów w pojedynczej warstwie poprawia wyniki we wszystkich parametrach zarówno na zbiorze treningowym, jak i testowym. Wyniki na danych testowych poprawiają się proporcjonalnie do wyników na danych treningowych.

Liczby warstw: 1 Liczba neuronów: 4

Rodzaj funkcji aktywacji	Relu		Sigmoid		Tanh		Softmax	
	Train	Test	Train	Test	Train	Test	Train	Test
Accuracy	0.9067	0.8830	0.8667	0.8367	0.8920	0.8687	0.8948	0.8737
Loss	0.2531	0.2876	0.3428	0.3696	0.2773	0.3206	0.3115	0.3395
MAE	0.1816	0.2001	0.2458	0.2589	0.1857	0.2085	0.2274	0.2412
MSE	0.0728	0.0866	0.1019	0.1134	0.0816	0.0995	0.0884	0.1003

Funkcja Relu osiąga najwyższą dokładność na zbiorze treningowym i testowym. Natomiast funkcja sigmoidalna wykazuje najniższą dokładność dla danych testowych i treningowych. Funkcje tanh i softmax mają podobne wyniki w parametrze accuracy. Najniższy loss na zbiorach treningowym i testowym uzyskuje funkcja Relu, a najwyższy funkcja sigmoidalna. Zarówno MAE, jak i MSE, funkcja ReLU wykazuje najniższe wartości, podczas gdy funkcja sigmoidalna osiąga najwyższe. Funkcja aktywacji Relu jest najlepszym wyborem w tym przypadku, zapewniając najwyższą dokładność, najniższy loss oraz błędy (MAE, MSE).

6. Podsumowanie

Przeprowadzone badanie pokazało znaczenie doboru liczby warstw, liczby neuronów oraz funkcji aktywacji w procesie modelowania. Wzrost złożoności sieci, poprzez zwiększenie liczby neuronów lub warstw, przyczynił się do poprawy jakości predykcji. Zastosowanie funkcji aktywacji ReLU okazało się najskuteczniejsze, co potwierdza jej popularność w zadaniach klasyfikacyjnych. Ostateczne modele osiągnęły wysoki poziom precyzji.

Podobnie jak w publikacji "An Artificial Neural Network Model for Water Quality and Water Consumption Prediction", w naszym badaniu uzyskano dokładność powyżej 0,9, osiągając prawie tak samo dobre wyniki. Podsumowując, projekt pokazał, że sztuczne sieci neuronowe mogą być skutecznym narzędziem w ocenie jakości wody, dostarczając automatycznych i precyzyjnych predykcji na podstawie zmierzonych parametrów chemicznych i biologicznych. Wdrożenie takich technologii może stanowić istotne wsparcie w rozwiązywaniu globalnych wyzwań związanych z dostępem do czystej i bezpiecznej wody pitnej.

7. Bibliografia

https://developers.google.com/machine-learning/crash-course/neural-networks/activation-

functions?hl=pl

https://www.geeksforgeeks.org/activation-functions-neural-networks/https://www.sas.com/pl_pl/insights/analytics/neural-networks.html

https://www.kaggle.com/datasets/eissaislam/waterquality