

УДК 504.064.2.001.18

*Бувич А. Г., Бусловская А. Н., Рахматова А. Ю., Крамаренко А. А.,  
Сергеев А. П., Тарасов Д. А.*  
УрФУ, г. Екатеринбург, Россия

## **Применение искусственных нейронных сетей для прогнозирования и визуализации пространственного распределения химических элементов в поверхностном слое почвы**

### *Аннотация*

Работа посвящена сравнению оценок концентраций поверхностного распределения химических элементов в почве, полученных с применением искусственных нейронных сетей (ИНС), с данными полученными с применением геостатистических методов. Для исследования была выбрана квадратная площадка со стороной 1 м в районе поселка Лимбьяха Ямало-Ненецкого автономного округа вдали от источников загрязнения. На этой площадке были отобраны 100 проб верхнего слоя почвы на глубину 0,05 м. Образцы были проанализированы на рентгенофлуоресцентном спектрометре Innov XX 5000 Olympus. После компьютерного моделирования была выбрана наилучшая структура ИНС для восстановления поверхностного распределения каждого из обнаруженных элементов. Также были получены модели на основе оценок кригинга. Сравнение значений концентрации химических элементов в почве, полученные методами кригинга и ИНС показали, что обученная ИНС дает модели, превосходящие по точности кригинг и в качестве интерполятора и как прогностический метод. Были построены карты распределения поверхностной концентрации химических элементов на основе оценок кригинга и ИНС.

*Ключевые слова:* моделирование, интерполяция, искусственные нейронные сети, кригинг.

1. Моделирование процессов восприятия текстовой и графической информации

*Buevic A. G., Buslovskaya A. N., Rahmatova A. U., Sergeev A. P., Tarasov D. A.*

UrFU, Ekaterinburg, Russia

**Application of artificial neural networks for predicting and visualize the spatial distribution of the chemical elements in the surface layer of the soil**

*Abstract*

The work is devoted to the comparison of the estimates the concentrations of surface distribution of the chemical elements in the soil obtained with the artificial neural networks (ANN) and geostatistical methods (kriging). For the study a square area with a side of 1 m in the Yamal-Nenets Autonomous Okrug, Tyumen region was chosen far from the sources of pollution. In this area 100 cores of topsoil (0.05 m) were sampled. Specimens were analyzed by X-ray fluorescence spectrometer Innov XX 5000. After a computer simulation the best ANN structure for the restoration of the surface distribution of chemical elements in the soil was selected. A comparison of concentration's values of the surface distribution of chemical elements in the soil made by kriging methods and by ANN showed that a trained ANN gives prediction models comparable in accuracy with the kriging as an interpolator and as the forecast method, as well. The maps of the surface distribution of chemical elements on the basis of estimates of kriging and ANN were made.

*Keywords:* modeling, interpolation, artificial neural networks, kriging.

**Введение**

В последние годы широкое распространение получили модели на основе ИНС. В [1] ИНС применены для прогнозирования спроса на электроэнергию в Иордании, с использованием в качестве четырех независимых переменных валового внутреннего продукта, населения, экспорта и импорта. Модель, построенная на основе ИНС, дала достаточно точный прогноз на спрос потребления энергии на данной территории. В исследовании [2] была построена модель с использованием ИНС для анализа и прогнозирования дорожно-транспортных происшествий. В качестве переменных были использованы численность населения, количество дорожно-транспортных средств и

количество аварий. Оценка эффективности выявила преимущество нейронной сети в сравнении с другими статистическими методами. Ряд исследований основан на применении гибридных моделей, включающих ИНС, и сравнении ИНС с другими подходами. Так, в [3] модель с использованием ИНС в совокупности с методом линейной регрессии была использована для прогнозирования исхода футбольного матча. Данная техника дала точность предсказания 90,32 %, что существенно выше, чем у других существующих методов.

Все большее количество исследователей применяют ИНС в экологии, в том числе и в тех областях, где ранее использовали геостатистические методы. Так в [4] ИНС применены для оценки концентрации озона в воздушном бассейне Сиднея, Австралия. Модель обеспечивает более надежные результаты оценки и предлагает более точные прогнозы концентрации озона. ИНС были широко адаптированы и применены на практике исследователями [5] в свете возрастающих опасений по поводу экологических проблем, таких как глобальное потепление, частые явления Эль-Ниньо и аномалии циркуляции атмосферы. Методология, основанная на ИНС была применена для экологического планирования, моделирования и получения высококачественных цифровых карт почв на земле Рейнланд-Пфальц (Германия), площадью около 600 км<sup>2</sup> [6]. Авторы показывают, что подобный подход является экономически эффективным и обеспечивает надежные результаты. ИНС использовались для прогнозирования долговременных изменений свойств почв и развитием таких процессов как деградация или опустынивание, являющихся одними из самых важных задач дистанционного зондирования. В [7] была выполнена оценка предсказательной эффективности четырех различных моделей; в частности, множественной линейной регрессии (MLR), однокомпонентной регрессии (PCR), искусственной нейронной сети (ИНС), и сочетания однокомпонентной регрессии и искусственной нейронной сети (PC-ANN) для прогнозирования и для создания инструмента оценки концентрации мышьяка для Юго-Восточной Азии, включая Камбоджу, Лаос и Таиланд. Результаты моделирования показывают, что

## 1. Моделирование процессов восприятия текстовой и графической информации

среди четырех различных моделей точность предсказания гибридной модели РС-ANN наилучшая. Исследование [8] было проведено с целью разработки моделей сорбции в зависимости от основных свойств почвы с использованием ИНС. В исследовании использовались данные по почвам, собранные на 133 сельскохозяйственных участках по всей Германии. Результаты сравнивались с данными, полученными на основе множественной линейной регрессии (MLR). Характеристики моделей оценивали по среднеквадратичной ошибке, средней ошибке и эффективности моделирования. Было показано, что эффективность ИНС в целом лучше показателей MLR. В [9] производительность модели нейронной сети и множественной линейной регрессии оценивали с использованием набора тестовых данных. Результаты показали, что искусственная нейронная сеть с двумя нейронами в скрытом слое показала более высокую производительность в прогнозировании свойств почвы.

В геостатистике широко используется такой метод как кригинг. Результативность применения кригинга как метода интерполяции зависит от фактической пространственной неравномерности распределения моделируемых загрязнений, что в условиях гетерогенной среды делает применение этого метода интерполяции неэффективной. Для обычного кригинга характерно занижение оценки в точках с высокими значениями и завышение оценки в точках с низкими значениями.

В нашем исследовании сравниваются два подхода – моделирование методом ИНС и геостатистический анализ (кригинг), чтобы оценить и спрогнозировать пространственное распределение химических элементов в верхнем слое почвы на примере небольшой площадки, расположенной вдали от источников загрязнения со сложившейся геологической характеристикой природного ландшафта. Размер выбранного полигона (1,0 м на 1,0 м) позволяет сделать предположение об однородности площадки, что создает идеальные условия для применения крикинга. Тем не менее, авторы предположили, что обученная ИНС даже в таких условиях будет способна строить модели сопоставимые по точности с геостатистическими.

## 1. Методы

Площадка для отбора проб почвы размером  $1 \times 1 \text{ м}^2$  была выбрана на ненарушенной природной территории вдали от источников загрязнения на расстоянии около 60 км от города Новый Уренгой недалеко от пос. Лимбяха на берегу озера Ямулимоянто (рис. 1).

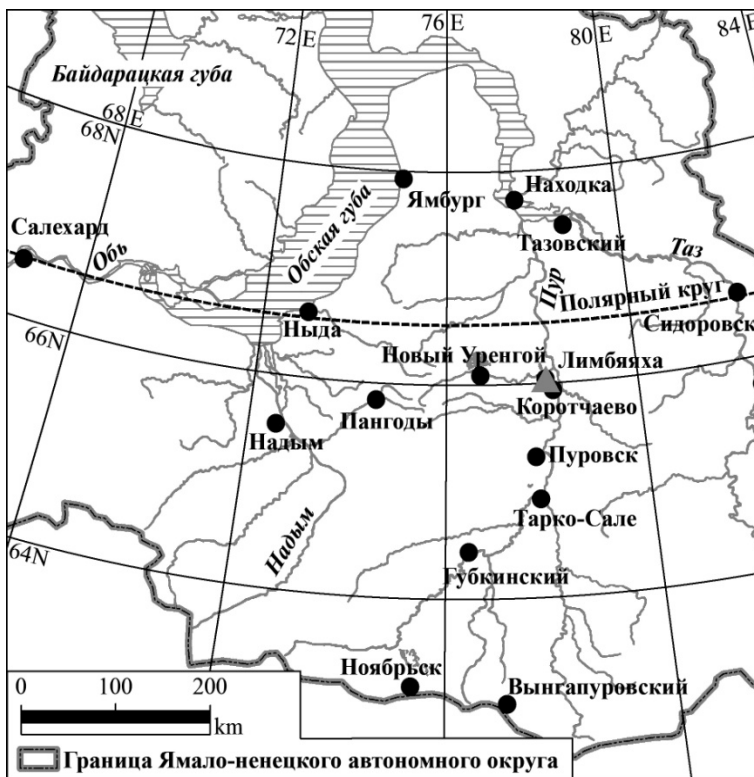


Рис. 1. Карта-схема места исследования

Площадка была разделена на 100 клеток размером 0.1 м на 0.1 м. Почвенные образцы из центра клетки отбирались на

## 1. Моделирование процессов восприятия текстовой и графической информации

глубину 0,05 м цилиндрическим пробоотборником из нержавеющей стали диаметром 0,05 м. Образцы почвы были упакованы в двойные полиэтиленовые пакеты. Внутренний пакет был маркирован уникальным идентификатором пробы.

Для анализа проб был выбран метод рентгенофлуоресцентного анализа. Этот метод не требует сложной пробоподготовки и дорогостоящих реактивов и позволяет анализировать образцы многократно.

Высушенные пробы, помещенные в тонкий полиэтиленовый пакет, были проанализированы на спектрометре INNOV X X5000 Olympus с использованием режима «Горный Плюс», подходящего для экологических исследований, который позволяет использовать для анализа лучи различной мощности (10–50 кэВ). Экспозиция каждого образца составляла 60 секунд. Каждый образец анализировался 10 раз. Для дальнейшей работы использовалось среднее значение.

Для настоящего исследования был выбран многослойный перцептрон с алгоритмом обучения Левенберга–Марквардта. Такие сети состоят из множества сенсорных элементов, образующих входной слой; один или несколько скрытых слоев нейронов и один выходной слой. Алгоритм обучения Левенберга–Марквардта считается одним из лучших нелинейных оптимизационных алгоритмов, известных на сегодняшний день [10].

Методы интерполяции были реализованы с использованием приложения ArcGIS, а ИНС обучались с помощью инструмента «нейронные сети» в приложении MATLAB.

На первом этапе, была выбрана сетевая модель для построения распределения каждого элемента, содержащегося в образце. На вход подавались координаты измеренных точек, на выход – концентрации элементов в этих точках, полученные в результате рентгенофлуоресцентного анализа. Для поиска оптимальной структуры нейронной сети использовался скрипт, написанный авторами в среде MATLAB, который перебирал сетевые модели с заданной архитектурой, пока не была найдена модель с самым высоким коэффициентом корреляции для каждого элемента. Если коэффициент корреляции оказывался

меньше, чем заранее заданное значение ( $r = 0,8$ ), сетевые параметры изменялись, и процедура повторялась снова. В предыдущем исследовании [11] авторы показали, что оптимальная модель ИНС для данной площадки должна содержать три скрытых слоя. Таким образом, менялось только общее количество нейронов в скрытых слоях и число нейронов в каждом слое. В результате была выбрана нейронная сеть с наибольшим коэффициентом корреляции для каждого элемента (табл. 2).

На втором этапе, используя программное обеспечение ArcGIS, были построены распределения концентраций для каждого элемента при помощи ординарного кригинга на основе данных рентгенофлуоресцентного анализа.

На третьем этапе, для сравнения предсказательной способности методов, с помощью функции «создать подмножество» Geostatistical Analyst в ArcGIS Esri выборка была случайно разделена на две подвыборки – тренировочную и тестовую в соотношении 70/30. Тренировочную подвыборку (70 точек) использовали в качестве обучающего множества. Затем значения концентраций каждого элемента были предсказаны кригингом и ИНС на тестовой подвыборке (30 точек).

Для оценки эффективности моделей были использованы три индекса, средняя абсолютная ошибка (MAE), среднеквадратичная ошибка (RMSE) и относительная среднеквадратичная ошибка (RRMSE), которые вычислялись следующим образом:

## 1. Моделирование процессов восприятия текстовой и графической информации

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |x_{\text{mod } i} - x_i|}{n};$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_{\text{mod } i} - x_i)^2}{n}};$$

$$RRMSE = \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{\left(\frac{x_{\text{mod } i} - x_i}{x_i}\right)^2}{n}};$$

где  $x_{\text{mod } i}$  предсказанная концентрация (ИНС, кригинг),  $x_i$  измеренная концентрация,  $n$  количество точек.

## 2. Результаты

В таблице 1 приведены элементы, обнаруженные в образцах почвы РФ-анализом и основные статистические данные об измеренной концентрации этих элементов на исследуемой площадке. Концентрации измеренных элементов имеют правый перекося (кроме Si и Ni) и имеют как островершинный (лептокуртический) (Cr, Ti, V, Mn, Fe, Zr) так и плосковершинный (платикуртический) (Si, K, Ni) вид распределения.



Таблица 1

## Описательная статистика исследуемой площадки

	Si	K	Ti	Fe	V	Cr	Mn	Zr	Ni
Min (минимум)	395940	10196	1978	1389	683,3	384,3	189,7	31,9	68,7
Max (максимум)	461050	31715	7090	5696	892,4	573,8	469,4	350,5	103,2
Mean (среднее)	429500	18897	3319	3055	774,5	460,3	295,6	119,5	86,75
SD (стандартное отклонение)	13403	5625	854,7	799,1	38,98	34,57	47,38	64,02	6,976
CV (коэффициент вариации)	0,03	0,30	0,26	0,26	0,05	0,08	0,16	0,54	0,08
Skewness (скошенность)	-0,032	0,589	1,21	0,489	0,285	0,477	0,819	1,089	- 0,117
Kurtosis (куртозис)	2,609	2,373	5,625	3,288	3,406	3,328	4,11	4,144	2,505
Median (медиана)	438540	17607	3219	2972	773	457,5	289,1	110,4	87,4

## 1. Моделирование процессов восприятия текстовой и графической информации

Таблица 2 показывает наилучшие структуры ИНС для каждого элемента с максимальным коэффициентом корреляции, полученные с помощью компьютерной симуляции.

Таблица 2

### Структуры ИНС и коэффициенты корреляции

Многослойный перцептрон для 100 точек									
	Si	K	Ti	Fe	V	Cr	Mn	Zr	Ni
Структура*	22-16-22	20-16-20	22-16-20	20-16-20	20-16-20	20-16-20	20-12-16	20-16-20	22-16-20
max CC**	0,81	0,93	0,90	0,91	0,89	0,86	0,87	0,91	0,80
Многослойный перцептрон для 70 точек									
Структура	22-16-18	22-16-18	22-16-18	22-16-18	22-16-18	22-16-18	22-16-18	22-16-18	22-16-14
max CC	0,81	0,87	0,86	0,90	0,82	0,87	0,87	0,92	0,89

\* Структура 22-16-22 означает, что ИНС имеет 3 скрытых слоя со следующим количеством нейронов: 22 в первом слое, 16 во втором и 22 в третьем;

\*\* max CC – максимальный коэффициент корреляции для данного элемента, достигнутый при помощи компьютерной симуляции.

В таблице 3 приведены показатели для сравнения точности интерполяции и предсказания расчетных концентраций элементов на исследуемой площадке для моделей кригинга и ИНС.

Таблица 3

### Индексы оценки точности прогнозирования концентрации элементов

Для модели по 100 точкам										
Метод	Индекс	Si	K	Ti	Fe	V	Cr	Mn	Zr	Ni
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Кригинг	RRMSE	0,03	0,24	0,23	0,22	0,05	0,07	0,14	0,50	0,09
ИНС	RRMSE	0,02	0,14	0,14	0,11	0,02	0,04	0,08	0,28	0,05
Кригинг	RMSE мг/кг	13023	3981	756,4	655,2	39,55	32,81	41,42	52,89	7,44
ИНС	RMSE мг/кг	756,2	210,3	40,57	37,52	1,92	17,63	2,38	3,04	0,45

Окончание табл. 3

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
Кригинг	MAE мг/кг	10697	3134	564,4	502,8	31,61	26,16	32,05	38,51	6,15
ИНС	MAE мг/кг	3356	1043	210,2	174,7	8,85	10,14	13,50	13,85	2,11
Для модели по 30 точкам										
Метод	Индекс	Si	K	Ti	Fe	V	Cr	Mn	Zr	Ni
Кригинг	RRMSE	0,02	0,25	0,27	0,26	0,05	0,06	0,18	0,66	0,08
ИНС	RRMSE	0,02	0,25	0,19	0,16	0,04	0,06	0,11	0,38	0,07
Кригинг	RMSE мг/кг	6543	1024	26,8	29,29	15,72	4,16	6,27	19,08	11,34
ИНС	RMSE мг/кг	949,0	420,7	63,84	52,60	3,35	24,73	3,28	4,55	0,57
Кригинг	MAE мг/кг	8192	3183	692,9	615,6	31,29	24,28	42,98	47,92	5,22
ИНС	MAE мг/кг	3868	1658	269,1	219,5	13,97	11,11	14,22	16,77	2,60

Индекс MAE значительно ниже для ИНС для всех моделируемых элементов в модели, построенной по 100 образцам. Для прогностической модели, обученной на 70 и построенной по 30 образцам, MAE также оказался значительно ниже, чем для кригинга для всех моделируемых элементов. Индекс RMSE также существенно ниже при использовании ИНС для всех моделируемых элементов в обеих моделях. Индекс RRMSE почти идентичен для моделей, при этом ошибки ИНС немного меньше для всех моделируемых элементов.

Таким образом, можно утверждать, что обученные ИНС подходят для моделирования пространственного распределения химических элементов, как в качестве интерполятора, так и в качестве прогностической модели. Для исследуемой площадки ИНС дает модели, сравнимые или превосходящие по точности прогнозирования кригинг для всех моделируемых элементов. Кроме того, ИНС более функциональны, позволяя-

## 1. Моделирование процессов восприятия текстовой и графической информации

ют предсказать пространственное распределение примесей и расположение источников эмиссии в гетерогенной среде урбанизированных территорий.

На рисунке 2 показано распределение концентрации хрома на поверхности исследуемой площадки, полученное на основе ординарного кригинга и обученных ИНС.

### YNAO, Limbyayaha Soil survey, 2013

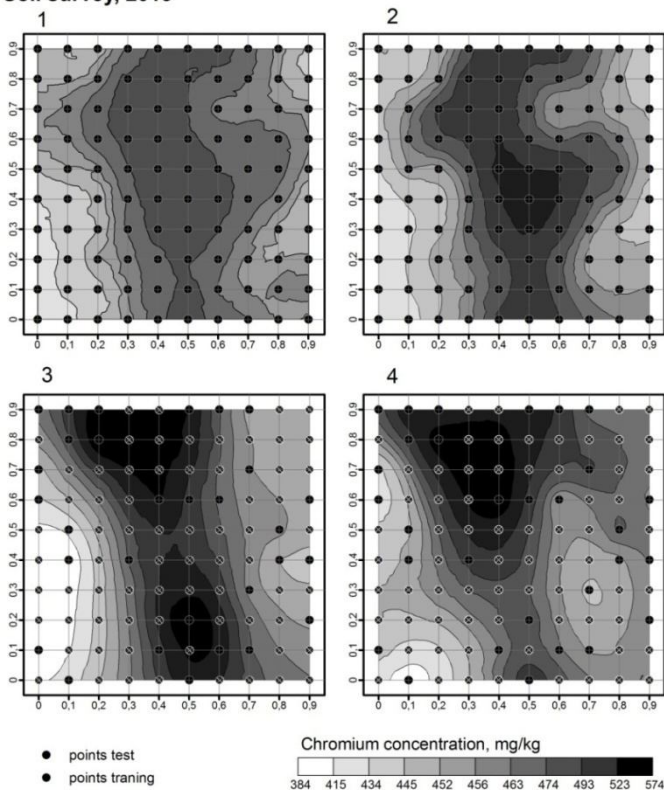


Рис. 2. Прогноз концентрации  $C_r$ , используя (1) ординарный кригинг (построенный по 100 точкам), (2) ИНС (построенный по 100 точкам), (3) ординарный кригинг (построенный по 30 точкам), (4) ИНС (построенный по 30 точкам)

### 3. Заключение

Предположение, что обученные ИНС будут давать модели сопоставимые или превосходящие по точности прогнозирования геостатистические методы даже в однородной среде, подтверждено в настоящем исследовании для всех моделируемых элементов. Авторы считают, что в гетерогенной среде урбанизированных территорий модели на основе нейронных сетей будут способны указать на источники воздействия, определить их интенсивность, выявить характерный геохимический спектр выбросов и прогнозировать их влияние на окружающую среду. Кроме того, применение гибридной модели ИНС-Кригинг [12], в которой ошибки ИНС оцениваются кригингом, может повысить точность предсказания распределения химических элементов в депонирующих средах.

### Список литературы

1. AbuAl Foul. Forecasting Energy Demand in Jordan // Topics in Middle Eastern and African Economies 14 (2012). P. 473–478.
2. Ogwueleka F. N., Sanjay Misra, Ogwueleka T. C., L. Fernandez-Sanz. An Artificial Neural Network Model for Road Accident Prediction // Acta Polytechnica Hungarica 11 (5). 2014.
3. Anyama, Oscar Uzoma, Igiri, Chinwe Peace. An Application of Linear Regression // International Journal of Engineering Research & Technology (IJERT) № 4 (01) .2015. P. 457–461.
4. H. Wahid, Q. P. Ha, H. Duc, M. Azzi. Neural network-based meta-modelling approach // Applied Soft Computing. 2013. № 13. P. 4087–4096.
5. Liu ZeLin, Peng ChangHui, Xiang WenHua, Tian DaLun, Deng XiangWen, Zhao MeiFang. Application of artificial neural networks // Chinese Science Bulletin. 2010. № 34. P. 3853–3863.
6. Thorsten Behrens, Helga Forster, Thomas Scholten, Ulrich Steinrucken, Ernst-Dieter Spies, Michael Goldschmitt. Digital soil mapping using artificial neural network // Journal of Plant Nutrition and Soil Science. 2005. № 168. P. 1–13.

1. Моделирование процессов восприятия текстовой и графической информации
7. Kyung Hwa Cho, Suthipong Sthiannopkao, Yakov A. Pachepsky, Kyoung-Woong Kim, Joon Ha Kim. Prediction of contamination potential // *Water research*. 2011. № 45. P. 5535–5544.
8. Ihuaku Anagu, Joachim Ingwersen, Jens Utermann, Thilo Streck. Estimation of heavy metal sorption // *Geoderma*. 2009. №152. P. 104–112.
9. F. Sarmadian, R. Taghizadeh Mehrjardi. Modeling of Some Soil Properties Using Artificial Neural Network // *Global Journal of Environmental Research*. 2008. № 1. P. 30–35.
10. Воронов И.В., Политов Е.А., Ефременко В.М. Обзор типов искусственных нейронных сетей и методов их обучения // *Вестник КузГТУ*, 2007. № 3. С. 38–42.
11. Применение искусственных нейронных сетей для восстановления геохимических полей поверхностного слоя почвы на примере малой площадки / Бувич А. Г., Некурящих А. А., Сергеев А. П., Баглаева Е. М., Медведев А. Н., Сергеева М. В. // *Экологические системы и приборы*, 2014. № 11. С. 15–23.
12. Fuqiang Dai, Qigang Zhou, Zhiqiang Lv, Xuemei Wang, Gangcai Liu. Spatial prediction of soil organic matter content integrating artificial neural network and ordinary kriging in Tibetan Plateau // *Ecological Indicators*. 2014. № 45. P. 184–194.