

Горбийчук М.И., д-р техн. наук, проф.
Ивано-Франковский национальный университет нефти и газа, Украина
Шуфнарнович М.А., ассистент
Ивано-Франковский национальный медицинский университет, Украина

Участники конференции, Национального первенства по научной аналитике

МЕТОД КАРТОГРАФИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПОЧВ НА ОСНОВЕ ТЕОРИИ НЕЙРОСЕТЕЙ

Разработан метод математического моделирования загрязнения почв на основе теории нейросетей. Данный метод дает возможность автоматизировать процесс картографического моделирования путем построения действительных значений изолиний концентраций металлов в почвах исследуемой территории. На основе данного метода разработан алгоритм определения предельно-допустимых концентраций в почве для любой территории.

Ключевые слова: математическое моделирование, нейронные сети, экология, загрязнение почв, гранично-допустимые концентрации.

Method of mathematical modeling of soil contamination on the basis of the theory of neural networks. This method makes it possible to automate the process of cartographic modeling by constructing the actual values of isolines of concentrations of metals in the soils of the study area. Based on this method, the algorithm determining the maximum allowable concentration in the soil for any territory.

Keywords: mathematical modeling, neural networks, ecology, pollution of soil, boundary-allowable concentrations.

Для оценки пригодности почв выращивать на них экологически чистую продукцию используют эколого-техногеохимические карты [1] распространения того или иного химического элемента. Они строятся путем нанесения на карту местности линий изоконцентраций химических элементов, загрязняющих почвы. Недостатком такого метода является то, что он дает представление лишь о средних значениях концентраций, полученных с определенным шагом. Чем подробная такая карта, тем меньше шаг изоконцентраций и тем больший объем фактического материала необходим для ее построения. Кроме того, есть опасность пропуска амплитудив концентраций, что может привести к искажению эколого-техногеохимической карты.

Метод математического моделирования дает возможность автоматизировать процесс картографического моделирования изучаемой территории.

Целью математического моделирования было нахождение зависимости между концентрацией химического элемента и координатами отбора соответствующих проб

$$C_i = f(X, Y) \quad (1)$$

где C_i – концентрация химического элемента в почве, мг/кг;

X и Y – координаты точек отбора проб.

Анализ существующих способов аппроксимации зависимости (1) – метода наименьших квадратов [2], группового учета аргументов [3] и с помощью нейросетей [4] показал, что наибольшего внимания заслуживает способ функционального приближения к (1) с использованием теории нейросетей.

В общем случае сложившуюся задачу

(1) можно свести к реализации некоторого сложного функционального многомерного преобразования [5]. В результате отражения $(X, Y) \rightarrow C_i$, необходимо обеспечить формирование адекватных выходных сигналов в соответствии со всеми примерами обучающей выборки и со всеми возможными входными сигналами, которые не вошли в обучающую выборку. Второе условие значительно затрудняет формирование обучающей выборки. В общем случае эта задача не решена, но в каждом конкретном случае можно найти ее частичное решение.

В основе решения задачи функционального приближения (1) лежит теорема Хехт-Нильсена, которая доказывает возможность аппроксимации экспериментальных данных функцией многих переменных, достаточно общего вида с помощью двухслойной нейросети с прямыми полными связями. Такая сеть имеет n нейронов во входном слое, $2n + 1$ нейрон в скрытом слое с заранее известными функциями активации (например, сигмоидальными) и m нейронов в выходном слое с неизвестными функциями активации.

Эта теорема является неконструктивной, поскольку она определяет только представление любой многомерной функ-

ции нескольких переменных с помощью нейросети фиксированного размера. Неизвестными остаются характеристики функции активации скрытого слоя и вид функции активации нейронов выходного слоя.

На практике требования теоремы Хехт-Нильсена в функции активации удовлетворяют следующим образом. В нейронах скрытого слоя используют сигмоидальные функции, а для нейронов выходного слоя выбирают линейные функции активации. В процессе обучения индивидуально для каждого нейрона определяют его параметры [6].

Одна из проблем, которая может возникнуть во время обучения нейросети – это неприятие. Суть этой проблемы в том, что сеть может быть достаточно хорошо обученная на учебной последовательности, т.е. среднее квадратическое отклонение между выходом сети и экспериментальными данными имеет очень малое значение, но, когда представлены новые данные, что не входят в обучающую последовательность, погрешность становится большой. Один из способов устранения неприятия – это увеличение размерности нейросети. Другой способ – это регуляризация сети [4]. Исследования показали, что регуляри-

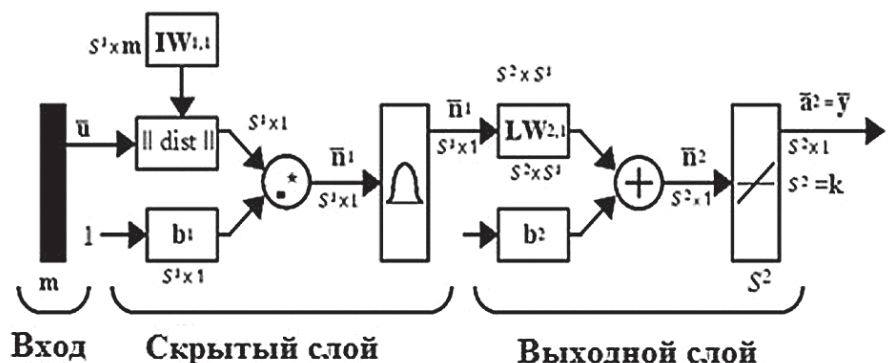


Рис. 1. Радиальная нейросеть для аппроксимации зависимости (1)

зация значительно уменьшает невосприимчивость сети, но при этом возрастают затраты времени на ее обучение.

С точки зрения устранения невосприимчивости более эффективны радиальные сети [7], которые, в отличие от сетей с обратным распространением, требуют большего количества нейронов.

Основой радиальных сетей является функция *radbas* (Radial Basis Neuron)

$$radbas(n) = \exp(-n^2) \quad (2)$$

Сигнал n является скалярным произведением величины $\bar{w} \cdot \bar{x}^T$ на сетевое смещение b , где $\bar{w} = [w_{1,1}, w_{1,2}, \dots, w_{i,k}]$ матрица-строка весов нейрона, а \bar{x} - вектор-строка значений входных величин x_i . Итак,

$$n = radbas(\|\bar{w} \cdot \bar{x}\| \cdot b), \quad (3)$$

где $\|\bar{w} \cdot \bar{x}\|$ - функция весов расстояния между векторами обозначается как *dist*.

Функция *radbas* (n) имеет единицу, когда ее вход - ноль, т.е. нейрон, работает как детектор что выдает единицу каждый раз, когда векторы \bar{w} и \bar{x} ортогональны.

Радиальная сеть для аппроксимации результатов эксперимента показана на рис. 1. Она состоит из двух слоев - скрытого и выходного. Выходом скрытого слоя есть величина $\bar{a}^{(i)}$, которая генерируется функцией *radbas*

$$\bar{a}^{(i)} = radbas(\|IW^{(i,1)} \cdot \bar{u}\| \cdot \bar{b}^{(i)}) \quad (4)$$

где через $\| \|$ обозначено функцию *dist*. Вектор смещения $\bar{b}^{(i)}$ и выход *dist* поэлементно перемножаются, так что на выходе первого слоя получаем вектор $\bar{a}^{(i)}$.

На выходе второго слоя (исходного) как функцию активации взято линейную функцию - *purelin* ($\bar{a}^{(2)}$), т.е.

$$\bar{y} = purelin(LW^{(2,1)} \bar{a}^{(1)} + b^{(2)}) \quad (5)$$

На рис. 1 приняты следующие обозначения: $IW^{(i,1)}$ - матрица входного слоя нейросети; $LW^{(i,1)}$ - матрица слоя, где i - номер слоя, а $i-1$ - номер векторного входа для i слоя; s^1, s^2 - размерности входных векторов (матриц).

В работе [8] проведен анализ нейросетей с учетом неприятия. В результате выявлено, что лучшей является обобщенная регрессионная нейросеть, которая относится к классу радиальных нейросетей.

Метод картографического моделирования рассмотрим на примере загрязне-

ния почв ртутью на территории Галицкого района Ивано-Франковской области [9].

Рис. 3 отражает результаты аппроксимации зависимости (1) с помощью радиальной нейросети. На вход сети подавались координаты точек отбора проб, которые были приведены в безразмерных величинах, по следующим формулам:

$$x_i = \frac{X_i - X_{min}}{X_{max} - X_{min}}, \quad (6)$$

$$y_i = \frac{Y_i - Y_{min}}{Y_{max} - Y_{min}}, \quad (7)$$

где X_i, Y_i - координаты i -той пробы, $i = 1, N$;

X_{min}, Y_{min} - минимальное значение координат X_i и Y_i ;

X_{max}, Y_{max} - максимальное значение координат X_i та Y_i .

N - количество проб отбора.

Как обучающая последовательность, использовались значения концентраций ртути в почве $C_{Hg}^{(i)}$, которые определялись по результатам анализа проб с координатами X_i, Y_i . Величины $C_{Hg}^{(i)}$, также были приведены к безразмерному виду

$$z_i = \frac{C_{Hg}^{(i)} - C_{Hg}^{(min)}}{C_{Hg}^{(max)} - C_{Hg}^{(min)}}. \quad (8)$$

Последним этапом построения модели является проверка ее на адекватность, суть которой является проверка полученной модели на пригодность для решения задачи по конечному результату. Как критерий адекватности использовано коэффициент корреляции полученных за моделью и действительных значений концентраций ртути [3].

На рис. 2, а отображаются экспериментальные значения Z_i и значения Z_i^* , полученные в соответствии с моделью. Изменение концентрации ртути (в относительных единицах) как функции координат X и Y , показано на рис. 3, б, с которого видно, что пространственная поверхность имеет ярко выраженные пики, а это свидетельствует о неоднородности распределения ртути в почвах Галицкого района. Результаты проверки на адекватность полученной модели предоставлены на рис. 2, в. Для данного случая $K_Z = 0,9899$, что свидетельствует о высокой степени сходимости экспериментальных значений и значений, полученных в соответствии с моделью.

Для определения концентрацию ртути в почве необходимо по карте местности определить ее координаты и по формулам (6) и (7) вычислить безразмерные значения координат X_i и Y_i , которые являются входом нейросети.

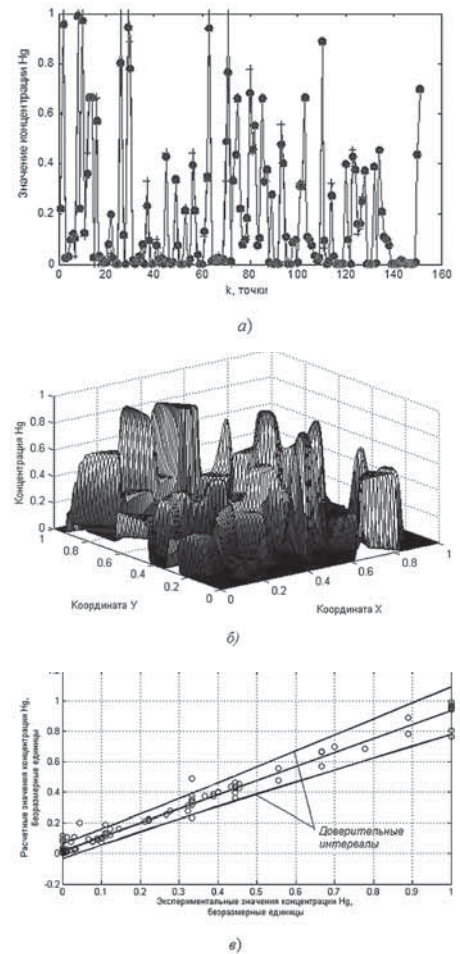


Рис. 2. Результаты математического моделирования содержания ртути в почве

На ее выходе получим концентрации ртути Z_i^* в безразмерных единицах. Используя формулу (8), определяем содержание ртути в почве в размерных единицах ($мг/кг$)

$$C_{Hg}^{(i)} = C_{Hg}^{(min)} + z_i^* (C_{Hg}^{(max)} - C_{Hg}^{(min)})$$

Полученное значение $C_{Hg}^{(i)}$ позволяет определить anomalous содержание ртути в выбранной местности Галицкого района

$$C_{Hg}^{(a)} = C_{Hg}^{(i)} - C_{Hg}^{(k)} - C_{Hg}^{(f)}, \quad (9)$$

где $C_{Hg}^{(k)}$ - среднее содержание ртути в (кларк)[10];

$C_{Hg}^{(f)}$ - среднее содержание ртути в почве (фон).

Разработанную методику можно использовать для определения anomalous содержания в почвах и других элементов таких, как Pb, As, Cu, F, Mn и других.

Метод оценки содержания элементов в почвах дает возможность автоматизировать процесс картографического моделирования путем построения действи-



Рис. 3 Линии изоконцентраций ртути в почвах

тельных значений изолиний концентраций, а не их средних значений. При этом количество таких линий неограничено. Это дает возможность получить точные, а значит и объективные эколого-техногехимические карты. Как пример, на рис. 3 показаны линии изоконцентрации ртути, которые нанесены на карту Галицкого района.

Литература:

1. Адаменко О. М., Рудько Г. І., Консевич Л. М. Екологічне картування. – Івано-Франківськ: Полум'я, 2003. – 584 с.
2. Ермаков С. М., Жиглявский А. А. Математическая теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1987. – 320 с.
3. Справочник по типовым про-

граммам моделирования. / А. Г. Ивахненко, Ю. В. Коппа, В. С. Степашко и др.; под ред. А. Г. Ивахненко. – К.: Техника, 1980. – 184 с.

4. Круглов В.В., Борисов В.В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика. – М.: Горячая линия - Телеком, 2001. – 382 с.

5. Нейроинформатика. / А. Н. Горбань, В. Л. Дунин-Барковский, Кидрин А. Н. и др. – Новосибирск: Наука. Сибирское предприятие РАН, 1998. – 296 с.

6. Горбійчук М. І. Метод оцінки екологічної ситуації Галицького району на базі теорії нейромереж. / Горбійчук М. І., Пендерещкий О. В., Шуфнарівич М. А. // Науковий вісник ІФНТУНГ. – м. Івано-Франківськ, 2008. - №1(17). – С.159-163.

7. Осовский С. Нейронные сети для обработки информации. / Пер. с польского. – М.: Финансы и статистика, 2004. – 344 с.

8. Горбійчук М. І., Когутяк М. І., Ковалів С. О. Ідентифікація статичних характеристик технологічних об'єктів на базі нейромереж. // Вимірювальна та обчислювальна техніка в технологічних процесах. – 2002. - № 9 (том 2). – С. 139 – 145.

9. Пендерещкий О. В. Екологія Галицького району. Монографія. - Івано-Франківськ: Нова зоря, 2004. – 198с.

10. Виноградов А. П. Среднее содержание элементов в земной коре. // Геохимия. – 1962. - № 7. – С. 555-557.

