

УДК 504.06+004.032.26

М.А. Шуфнарів, к. т. н.

Івано-Франківський національний медичний університет, Україна

КАРТОГРАФІЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ВАЖКИХ МЕТАЛІВ В ҐРУНТАХ НА ОСНОВІ НЕЙРОМЕРЕЖ

Розроблено метод математичного моделювання забруднення ґрунтів важкими металами на основі теорії нейромереж, що автоматизує процес картографічного моделювання шляхом побудови дійсних значень ізоліній концентрацій металів, що містяться в ґрунтах досліджуваної території.

Ключові слова: математичне моделювання, нейромережі, картографічне моделювання, важкі метали, ґрунти

М.А. Shufnarovich

CARTOGRAPHIC MODELING OF DISTRIBUTION OF HARD METALS IN SOIL BASED ON NEURAL NETWORKS

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.

Key words: mathematical modeling, neural networks, cartographic modeling, hard metals, soils

Для оцінки придатності ґрунтів до вирощувати на них екологічно-чистих продуктів харчування використовують еколого-техногеохімічні карти розповсюдження того чи іншого важкого металу. Вони будуються шляхом нанесення на карту досліджуваної місцевості ліній ізоконцентрацій важких металів, що забруднюють ґрунти. Недоліком такого методу є те, що він дає уявлення лише про середні значення концентрацій, отриманих з певним кроком. Чим детальніша така карта, тим менший крок ізоконцентрацій і тим більший обсяг фактичного матеріалу необхідний для її побудови. Окрім того, є небезпека пропустити альтитуди концентрацій, що може привести до спотворення еколого-техногеохімічної карти.

Метою математичного моделювання є знаходження залежності між концентрацією важкого металу і координатами відбору відповідних проб

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

де C_i – концентрація важкого металу в ґрунті, мг/кг;

X і Y - координати точок відбору проб.

Аналіз існуючих способів апроксимації (метод найменших квадратів, метод групового урахування аргументів, нейронні мережі) показав, що найбільшої уваги функціонального наближення до (1) заслуговує теорія нейромереж [1].

В результаті відображення $C_i = f(X, Y)$ необхідно забезпечити формування адекватних вихідних сигналів у відповідності із всіма прикладами навчальної вибірки і зі всіма можливими вхідними сигналами, які не ввійшли до навчальної вибірки. Друга умова значно ускладнює формування навчальної вибірки. В загальному випадку ця задача не розв'язана, але в кожному конкретному випадку можна знайти її часткове вирішення.

В основі розв'язку задачі функціонального наближення (1) лежить теорема Хехт-Нільсена, яка доказує можливість апроксимації експериментальних даних функцією багатьох змінних, достатньо загального вигляду за допомогою двошарової нейромережі з прямими повними зв'язками. Така мережа має n нейронів у вхідному шарі, $2n+1$ нейрон в прихованому шарі з наперед відомими функціями активації (наприклад, сигмоїдальними) і m нейронів у вихідному шарі з невідомими функціями активації.

Ця теорема є неконструктивною, оскільки вона визначає тільки представлення будь-якої багатовимірної функції кількох змінних за допомогою нейромережі фіксованого розміру. Невідомими залишаються характеристики функції активації прихованого шару та вид функції активації нейронів вихідного шару.

На практиці вимоги теореми Хехт-Нільсена до функцій активації задовольняють наступним чином. В нейронах прихованого шару використовують сигмоїдальні функції, а для нейронів вихідного шару вибирають лінійні функції активації. В процесі навчання індивідуально для кожного нейрона визначають його параметри.

Одна із проблем, що може виникнути під час навчання нейромережі – це неприйняття. Суть цієї проблеми в тому, що мережа може бути досить добре навчена на навчальній послідовності, тобто середньоквадратичне відхилення між виходом мережі і експериментальними даними має дуже мале значення, але, коли нові дані представлені, що не входять до навчальної послідовності, похибка стає великою. Один із способів усунення неприйняття – це збільшення розмірності нейромережі. Інший спосіб – це регуляризація мережі [1]. Дослідження показали, що регуляризація значно зменшує несприйнятливості мережі, але при цьому зростають затрати часу на її навчання.

З точки зору усунення несприйнятливості більш ефективними є радіальні мережі [2], які, на відміну від мереж зі зворотним поширенням, вимагають більшої кількості нейронів.

В роботі [3] проаналізовані можливості різних нейромереж як апроксиматорів залежностей типу (1). За основу такого аналізу було взято точність відтворення нейромережею функціональних залежностей $f(x)$. Проведений аналіз нейромереж з врахуванням неприйняття нейромережі, тобто мережа навчалась на заданих вузлах апроксимації; потім обчислювались значення функції $f(x)$ у вузлах, які не співпадають з навчальними вузлами. У результаті такого аналізу виявлено, що найкращою є узагальнена регресійна нейромережа, яка належить до класу радіальних нейромереж.

Отже, на вхід нейромережі подавались координати точок відбору проб, які були приведені до безрозмірних величин, за такими формулами

$$x_i = \frac{X_i - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}}, \quad (2)$$

$$y_i = \frac{Y_i - Y_{\min}}{Y_{\max} - Y_{\min}}, \quad (3)$$

де X_i, Y_i - координати i - тої проби, $i = \overline{1, N}$;

X_{\min}, Y_{\min} - мінімальні значення координат X_i та Y_i ;

X_{\max}, Y_{\max} - максимальні значення координат X_i та Y_i ;

N - кількість проб відбору.

Отже, навчена узагальнена радіальна нейромережа дає можливість визначити концентрацію важкого металу у ґрунті для будь-якої точки досліджуваної території. Для цього необхідно за картою місцевості визначити її координати і за формулами (2) і (3) обчислити безрозмірні значення координат x_i і y_i , які є входом нейромережі. На її виході отримаємо концентрації важкого металу z_i^* у безрозмірних одиницях. Визначаємо вміст важкого металу у ґрунті у розмірних одиницях (мг/кг) за формулою:

Отримане значення $C_{Hg}^{(i)}$ дає можливість визначити аномальний вміст важкого металу у вибраній місцевості.

Розроблену методику можна використати для визначення аномального вмісту у ґрунтах важких металів таких як Pb, As, Cu, F, Mn та інших.

Метод картографічного моделювання розглянутий на прикладі забруднення ґрунтів ртуттю на території Галицького району Івано-Франківської області рис. 1 [4].



Останнім етапом побудови моделі є перевірка її на адекватність, суть якої є перевірка отриманої моделі на придатність для розв'язку задачі за кінцевим результатом. Як критерій адекватності використано коефіцієнт кореляції. Для випадку, що розглядається $K_{zz} = 0,918$, що свідчить про високу степінь збіжності експериментальних значень z_i до значень z_i^* , які отримані у відповідності з моделлю.

Розроблений метод оцінки вмісту важких металів у ґрунтах дає можливість автоматизувати процес математичного моделювання шляхом побудови дійсних значень ізоліній концентрацій, а не їх середніх значень. При цьому кількість таких ліній необмежена. Це дає можливість отримати точніші, а значить і об'єктивніші еколого-техногеохімічні карти.

ЛІТЕРАТУРА

1. Круглов В.В., Борисов В.В. Искусственные нейронные сети. Теория и практика. – М.: Горячая линия - Телеком, 2001. – 382 с.
2. Осовский С. Нейронные сети для обработки информации. / Пер. с польского. – М.: Финансы и статистика, 2004. – 344 с.
3. Горбійчук М. І., Когутяк М. І., Ковалів Є. О. Ідентифікація статичних характеристик технологічних об'єктів на базі нейромереж. // Вимірювальна та обчислювальна техніка в технологічних процесах. – 2002. - № 9 (том 2) . – С. 139 – 145.
4. Горбійчук М. И. Метод картографического моделирования загрязнения почв на основе теории нейросетей / М. И. Горбійчук, М. А. Шуфнарович / The third Planet from Sun: Modern Theories and Research Practice in the Field of Earth and Space sciences: Materials digest of the L International Research and Practice Conference and I stage of the Championship in Earth and Space sciences, London, May 21 – 26, 2013. London, 2013 – С. 131 – 135.