

---

---

МЕТОДОЛОГИЯ  
И МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЙ

---

---

УДК 504.064.2.001.18

ИСКУССТВЕННЫЕ НЕЙРОННЫЕ СЕТИ И ГЕОСТАТИСТИКА  
В ПРОГНОЗИРОВАНИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ  
НА ФОНОВОЙ ПЛОЩАДКЕ

© 2017 г. А. Г. Бувич\*, А. П. Сергеев\*, Д. А. Тарасов\*, А. Ю. Рахматова\*\*, А. А. Крамаренко\*\*

\*Институт промышленной экологии Уральского отделения Российской академии наук (ИПЭ УрО РАН),  
ул. С. Ковалевской, д. 20, г. Екатеринбург, 620002 Россия. E-mail: iie@esko.uran.ru

\*\*Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «УрФУ имени первого Президента России Б.Н. Ельцина»,  
ул. Мира, д. 19, г. Екатеринбург, 620002 Россия.

Поступила в редакцию 1.12.2015 г.

После исправления 08.06.2016 г.

Работа посвящена применению искусственных нейронных сетей (ИНС) для восстановления поверхностного распределения химических элементов в почве и сравнению оценок концентраций, полученных с применением ИНС и геостатистических методов: кригинга и кокригинга. Для исследования выбрана квадратная площадка со стороной 1 м в районе пос. Лимбьяха Ямало-Ненецкого автономного округа вдали от источников загрязнения. На площадке отобраны 100 проб верхнего слоя почвы на глубину 0.05 м. Образцы проанализированы на рентгенофлуоресцентном спектрометре Innov XX 5000 Olympus. После компьютерного моделирования была выбрана наилучшая структура ИНС для восстановления поверхностного распределения каждого из обнаруженных анализом химических элементов. Также получены модели на основе оценок кригинга и кокригинга. Сравнение значений концентрации химических элементов в почве, полученных методами кригинга, кокригинга и ИНС, показали, что обученная ИНС дает модели, превосходящие по точности геостатистические методы и как интерполятор, и как прогностический метод. Построены карты распределения поверхностной концентрации химических элементов на основе оценок кригинга, кокригинга и ИНС.

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

## ВВЕДЕНИЕ

Существуют две основные группы методов интерполяции: детерминированные и геостатистические [2]. Среди последних методов наиболее широко используемый – кригинг [17]. Кригинг обладает значительными преимуществами в прогнозировании загрязнения почвы по сравнению с детерминированными методами интерполяции [12, 15, 18]. Тем не менее результативность применения кригинга зависит от фактической пространственной неравномерности распределения моделируемых загрязнений, но в условиях гетерогенной среды применение этого метода интерполяции неэффективно. Кокригинг – это усовершенствованный метод моделирования поверхности, который может быть использован для

улучшения качества интерполяции поверхности для одной переменной путем учета значений других переменных, при условии наличия пространственной корреляции между этими переменными. Кокригинг предполагает, что данные относятся к стационарному стохастическому процессу, а некоторые методы требуют, чтобы данные подчинялись закону нормального распределения. Для обычного кригинга характерны занижение оценки в точках с высокими значениями и завышение оценки в точках с низкими значениями показателя. Картина прогноза получается более сглаженная и менее вариабельная. В отличие от кригинга кокригинг дает менее сглаженную оценку, тем самым он позволяет улучшить оценку высоких значений. В [13] сравниваются два геостатистических подхода на примере про-

странственного прогноза свойств почвы с учетом атрибутов рельефа. Эффективность предсказания обычного кригинга и универсального кригинга была сравнительно низкой. Напротив, модели, полученные кокригингом, продемонстрировали высокую точность прогноза.

В последние годы широкое распространение получили модели на основе искусственных нейронных сетей (ИНС). Все большее количество исследователей применяют ИНС в экологии, в том числе и в тех областях, где ранее использовали геостатистические методы. Так, в [16] 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 [19] 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> [7]. Авторы показывают, что подобный подход экономически эффективен и обеспечивает надежные результаты. ИНС использовались для прогнозирования долговременных изменений свойств почв и развития таких процессов, как деградация или опустынивание, являющихся одними из самых важных задач дистанционного зондирования. В [5] представлена методика скрининга данных и последующего применения ИНС в области дистанционного зондирования.

Ряд исследований основан на применении гибридных моделей, включающих ИНС, и сравнении ИНС с другими подходами. Так, в [9] 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 среди четырех моделей точность предсказания гибридной модели PC-ANN наилучшая. Исследование [6] было проведено с целью разработки моделей сорбции в зависимости от основных свойств почвы с использованием ИНС. В исследовании ис-

пользовались 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 [14] производительность моделей нейронной сети и множественной линейной регрессии оценивали с использованием набора тестовых данных. Результаты показали, что искусственная нейронная сеть с двумя нейронами в скрытом слое обладала более высокой производительностью при прогнозировании свойств почвы.

В некоторых работах сравниваются различные типы ИНС и алгоритмов их обучения. Так, в [11] сравнивается производительность двух подходов ИНС: многослойный перцептрон (MLP) и самоорганизующиеся карты Кохонена (SOM), на примере цифровой картографии почв в Португалии и Испании. Авторы показывают, что лучшее исполнение ИНС получается с моделью MLP независимо от преобразования данных и метода отбора проб. Работа [8] посвящена сравнению традиционных методов обучения ИНС: обратного распространения, Левенберга-Маквардта, квази-Ньютона, генетических алгоритмов и т.д. Результаты эксперимента показывают, что новый алгоритм “дифференциальная эволюция”, относящийся к классу стохастических алгоритмов оптимизации и использующий некоторые идеи генетических алгоритмов, во многих практических случаях имеет более высокую точность и лучшую производительность, чем традиционные алгоритмы обучения.

В нашем исследовании сравниваются два подхода: геостатистический анализ (кригинг, кокригинг) и моделирование методом ИНС, 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 × 1.0 м) позволяет сделать предположение об однородности площадки, что создает идеальные условия для применения геостатистических методов (кригинг, кокригинг). Тем не менее авторы предположили, что обученная ИНС даже в таких условиях будет способна строить модели, сопоставимые по точности с геостатистическими.

## МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Площадка для отбора проб почвы размером 1 м<sup>2</sup> выбрана на ненарушенной природной территории вдали от источников загрязнения на расстоянии около 60 км от г. Новый Уренгой недалеко от пос. Лимбьяха на берегу оз. Ямулимояганто (рис. 1). Согласно карте растительного состава, разработанной в Институте географии Сибири и Дальнего Востока СО РАН, в районе исследования преобладающие типы растительности – багульниково-ерниково-лишайниковый на буграх и осоково-сфагновый в мочажинах. На самой площадке растительный покров был представлен несколькими видами мхов и лишайников и почти отсутствовал. Тип почв в районе исследуемой площадки – торфянисто-мелкоподзолисто-глеевая иллювиально-гумусовая песчаная. Площадка была разделена на 100 клеток размером 0.1 × 0.1 м.

Почвенные образцы из центра клетки отбирались на 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, не требующий сложной пробоподготовки и дорогостоящих реактивов и позволяющий анализировать образцы многократно.

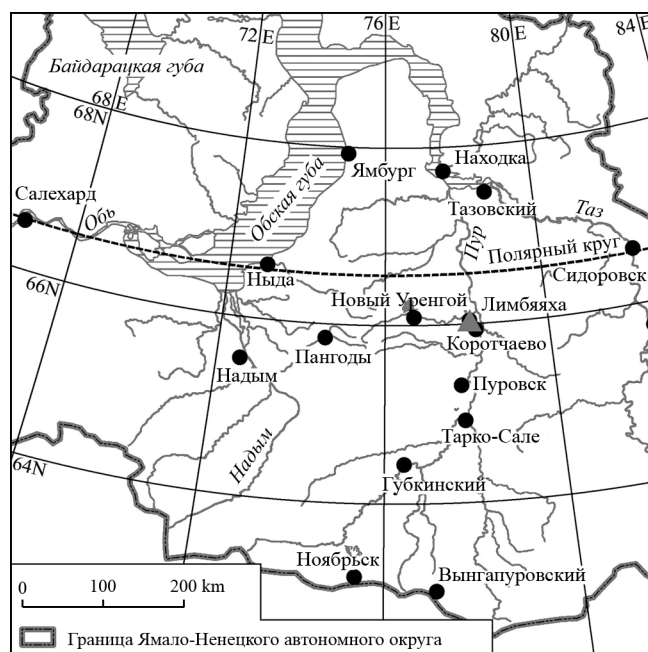


Рис. 1. Место отбора проб почвы.

Высушенные пробы анализировались на спектрометре INNOV X X5000 Olympus с использованием режима “Горный Плюс”, подходящего для экологических исследований и позволяющего использовать для анализа лучи различной мощности (10–50 кэВ). Экспозиция каждого образца составляла 60 с. Каждый образец анализировали 10 раз. Для дальнейшей работы использовано среднее значение.

Существует множество типов ИНС. Каждый из них имеет свои особенности и является оптимальным решением для различных задач. Для настоящего исследования 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 [3].

Методы интерполяции 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 подавали координаты измеренных точек, на выход – концентрации элементов в этих точках, полученные в результате рентгенофлуоресцентного анализа. Для поиска оптимальной структуры нейронной сети использован 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 [1] 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.

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

**Таблица 1.** Среднеквадратичные ошибки при оценке кокригинга основной переменной (Cr) с использованием дополнительных наборов переменных

Количество дополнительных переменных	Основная и дополнительные переменные	RMSE (среднеквадратичная ошибка)
1	Cr – Ti	29.62
1	Cr – Mn	29.79
1	Cr – Fe	31.30
1	Cr – Zr	29.41
2	Cr – Ti – Mn	28.25
2	Cr – Ti – Fe	29.17
2	<b>Cr – Ti – Zr</b>	<b>28.02</b>
2	Cr – Mn – Fe	29.52
2	Cr – Mn – Zr	28.34
2	Cr – Fe – Zr	29.26
3	Cr – Ti – Mn – Fe	28.17
3	Cr – Ti – Fe – Zr	28.03
3	Cr – Mn – Fe – Zr	28.27

\*Жирным шрифтом выделена наилучшая оценка по среднеквадратичной ошибке (RMSE) и соответствующая структура модели кокригинга.

При наличии нескольких переменных для кокригинга требуется количество вариограмм, равное квадрату этого числа. Такое количество моделей сильно усложняет получение приемлемой модели, поэтому важно отобрать только те элементы, которые приведут к улучшению окончательной оценки [3].

Выбор дополнительных наборов переменных для кокригинга показан на примере переменной Cr. В табл. 1 показаны значимые коэффициенты корреляции Cr с другими элементами.

В представленном случае худшая оценка среднеквадратической ошибки связана с элементом Fe (Cr – Fe RMSE = 31.30 и Cr – Mn – Fe RMSE = 29.52) (см. табл. 1). Наилучшую оценку по RMSE показало совместное использование элементов Ti и Zr, которые имеют максимальную корреляцию с Cr среди остальных элементов. Такой же подход – включение в модель двух элементов, имеющих максимальный коэффициент корреляции с моделируемым элементом, – использован при выборе дополнительных наборов переменных при кокригинге для других моделируемых элементов. Следует заметить, что использование при оценке кокригингом более трех переменных приводит к ухудшению качества получаемой модели [4].

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, ИНС и кокригингом на тестовой подвыборке (30 точек).

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

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

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

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

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

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В табл. 2 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 перекосяк (кроме Si и Ni) и как островершинный (лептокуртический) (Cr, Ti, V, Mn, Fe, Zr), так и плосковершинный (платикуртический) (Si, K, Ni) вид распределения.

Таблица 3 показывает наилучшие структуры ИНС для каждого элемента с максимальным коэффициентом корреляции, полученные с помощью компьютерной симуляции.

В табл. 4 приведены показатели для сравнения точности интерполяции и предсказания расчетных концентраций элементов на исследуемой площадке для трех моделей: кригинга, кокригинга и ИНС. Индекс MAE значительно ниже для

**Таблица 2.** Описательная статистика исследуемой площадки

	Si	K	Ti	Fe	V	Cr	Mn	Zr	Ni
Min (минимум)	395 940	10 196	1978	1389	683.3	384.3	189.7	31.9	68.7
Max (максимум)	461 050	31 715	7090	5696	892.4	573.8	469.4	350.5	103.2
Mean (среднее)	429 500	18 897	3319	3055	774.5	460.3	295.6	119.5	86.75
SD (стандартное отклонение)	13 403	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)	438 540	17 607	3219	2972	773	457.5	289.1	110.4	87.4

**Таблица 3.** Структуры ИНС и коэффициенты корреляции

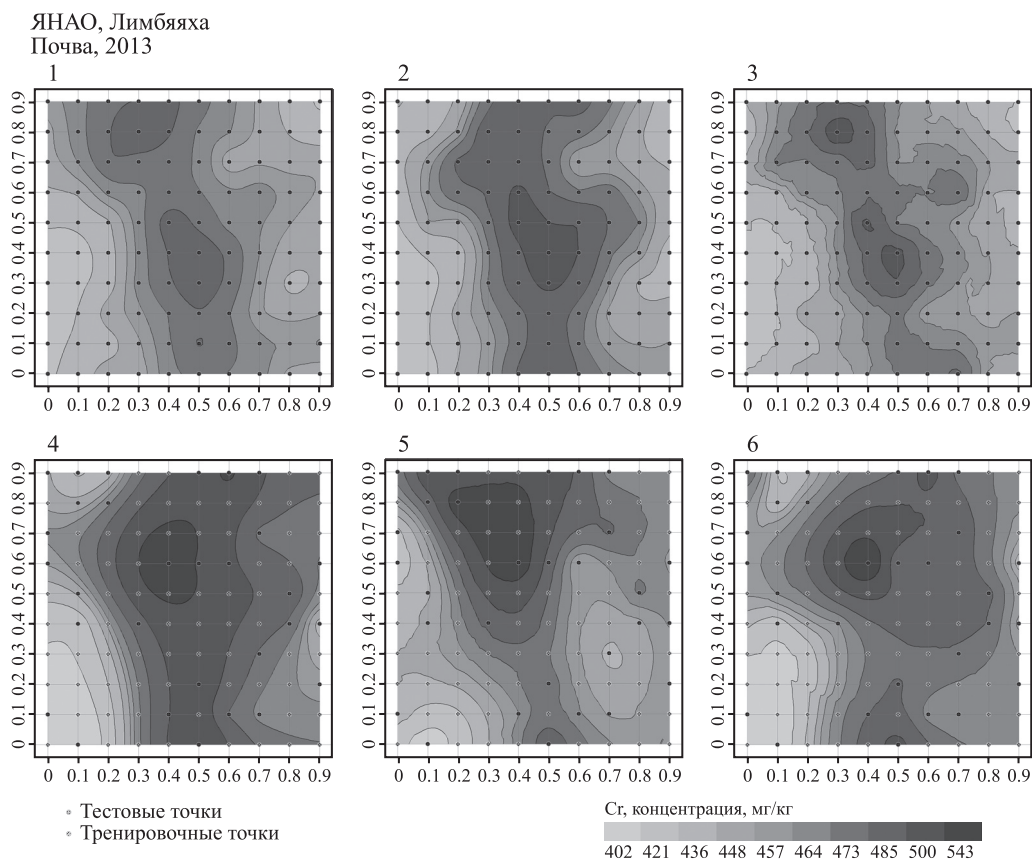
Многослойный перцептрон для 100 точек									
	Si	K	Ti	Fe	V	Cr	Mn	Zr	Ni
Структура*	22-16-22	20-16-20	22-16-20	20-16-20	20-16-20	20-16-20	20-12-16	20-16-20	22-16-20
max CC**	0.81	0.93	0.90	0.91	0.89	0.86	0.87	0.91	0.80
Многослойный перцептрон для 70 точек									
Структура	22-16-18	22-16-18	22-16-18	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.

**Таблица 4.** Индексы оценки точности прогнозирования концентрации элементов

Для модели по 100 точкам										
Метод	Индекс	Si	K	Ti	Fe	V	Cr	Mn	Zr	Ni
Кригинг	RRMSE	0.03	0.24	0.23	0.22	0.05	0.07	0.14	0.50	0.09
Кокригинг	RRMSE	0.03	0.22	0.15	0.16	0.05	0.06	0.09	0.30	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
Кокригинг	RMSE, мг/кг	1262	387.5	47.46	45.25	3.88	2.77	2.76	3.35	0.75
ИНС	RMSE, мг/кг	756.2	210.3	40.57	37.52	1.92	17.63	2.38	3.04	0.45
Кригинг	MAE, мг/кг	10 697	3134	564.4	502.8	31.61	26.16	32.05	38.51	6.15
Кокригинг	MAE, мг/кг	10 355	3012	352.0	361.4	31.40	21.91	21.68	24.42	6.14
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
Кокригинг	RRMSE	0.03	0.25	0.24	0.26	0.06	0.06	0.17	0.67	0.08
ИНС	RRMSE	0.02	0.26	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
Кокригинг	RMSE, мг/кг	4647	258.5	27.89	202.4	14.13	11.00	8.16	22.32	11.26
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
Кокригинг	MAE, мг/кг	8363	3151	634.4	604.6	33.14	21.90	42.67	48.41	5.22
ИНС	MAE, мг/кг	3868	1658	269.1	219.5	13.97	11.11	14.22	16.77	2.60



**Рис. 2.** Прогноз концентрации  $C_g$  по методу: ординарного кригинга, построенный по: 1—100 точкам, 4—30 точкам; ИНС, построенный по: 2—100 точкам, 5—30 точкам; ординарного кокригинга, построенный по: 3—100 точкам, 6—30 точкам.

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 и кокригинга для всех моделируемых элементов. Индекс RMSE также существенно ниже при использовании ИНС для всех моделируемых элементов в обеих моделях. Результаты ошибок кригинга и кокригинга оказались примерно одинаковыми. Ошибки кокригинга для большинства элементов немного ниже, чем кригинга. Индекс RRMSE почти идентичен для всех 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 геостатистические методы (кригинг и кокригинг) для всех моделируемых элементов. Кроме того, ИНС более функциональны, позволяют предсказать пространственное распределение примесей и рас-

положение источников эмиссии в гетерогенной среде урбанизированных территорий.

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

## 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 [10], в которой ошибки ИНС оцениваются кригингом, повышает точность предсказания распределения химических элементов в депонирующих средах.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бувич А.Г., Некурящих А.А., Сергеев А.П., Баглаева Е.М., Медведев А.Н., Сергеева М.В. Применение искусственных нейронных сетей для восстановления геохимических полей поверхностного слоя почвы на примере малой площадки // Экологические системы и приборы, 2014. № 11. С. 15–23.
2. Бувич А.Г., Сафина А.М., Сергеев А.П., Вараксин А.Н., Медведев А.Н. Анализ статистических зависимостей распределения загрязняющих веществ в поверхностном слое почвы урбанизированных территорий с применением математических моделей (LUR метод) // Геоэкология. 2015. № 3. С. 268–279.
3. 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.
4. Демьянов В.В., Савельева Е.А. Геоestatистика: теория и практика / Под ред. Р.В. Арутюняна. М.: Наука, 2010. 327 с.
5. Amato Filippo, Havel Josef, Gad Abd-Alla, El-Zeiny Ahmed Mohamed. Remotely Sensed Soil Data Analysis // ISPRS Int. J. Geo-Inf. 2015. V. 4. P. 677–696.
6. Anagu Ihuaku, Ingwersen Joachim, Utermann Jens, Streck Thilo. Estimation of heavy metal sorption // Geoderma. 2009. No. 152. P. 104–112.
7. Behrens Thorsten, Forster Helga, Scholten Thomas, Steinrucken Ulrich, Spies Ernst-Dieter, Goldschmitt Michael. Digital soil mapping using artificial neural network // J. Plant Nutrition and Soil Science. 2005. No. 168. P. 1–13.
8. Bui Tam Ngoc, Hasegawa Hiroshi. Training ANN Using Modification of Differential Evolution Algorithm // International J. of Machine Learning and Computing. 2015. No. 5(1). P. 1–6.
9. Cho Hwa Kyung, Sthiannopkao Suthipong, Pachepsky A. Yakov, Kim Kyoung-Woong, Kim Ha Joon. Prediction of contamination potential // Water res. 2011. No. 45. P. 5535–5544.
10. Dai Fuqiang, Zhou Qigang, Lv Zhiqiang, Wang Xuemei, Liu Gangcai. Spatial prediction of soil organic matter content integrating artificial neural network and ordinary kriging in Tibetan Plateau // Ecological Indicators. 2014. No. 45. P. 184–194.
11. Freire Sergio, Fonseca Ines, Brasil Ricardo, Tenedorio A. Jose. Using Artificial Neural Networks for Digital Soil Mapping // AGILE2013 – Leuven, May 14–17, 2013.
12. Liu X.M., Zhao K.L., Xu J.M., Zhan M.H., Si B., Wang F. Spatial variability of soil organic matter and nutrients in paddy fields at various scales in southeast China // Environ. Geol. 2008. No. 53. P. 1139–1147.
13. Odeh I.O.A., McBratney A.B., Chittleborough D.J. Further results on prediction of soil properties // Geoderma. 1995. No. 67. P. 215–226.
14. Sarmadian F., Mehrjardi Taghizadeh. Modeling of Some Soil Properties Using Artificial Neural Network // Global Journal of Environmental Research. 2008. No. 1. P. 30–35.
15. Sergeev A.P., Baglaeva E.M., Antonov K.L., Medvedev A.N., Rakhmatova A. Y. Anomalies of chromium surface distribution in urban soils from subarctic region of Russia // 15th International multidisciplinary scientific geoconference SGEM 2015. Water Resources. Forest, Marine and Ocean Ecosystems. Conference proceedings, V. II Soils, Forest Ecosystems, Marine and Ocean Ecosystems. 18–24 June, 2015, Bulgaria. P. 27–34.
16. Wahid H., Ha Q.P., Duc H., Azzi M. Neural network-based meta-modelling approach // Applied Soft Computing. 2013. No. 13. P. 4087–4096.
17. Webster R., Oliver M. Geostatistics for Environmental Scientists // John Wiley & Sons, Chichester. 2001. P. UL1–UL9.
18. Worsham L., Markewitz D., Nibbelink N. Incorporating spatial dependence into estimates of soil carbon contents under different land covers // Soil Sci. Soc. Am. 2010. J. 74. P. 635–646.
19. Ze Lin Liu, Chang Hui Peng, Wen Hua Xiang, Da Lun Tian, Xiang Wen Deng, Mei Fang Zhao. Application of artificial neural networks // Chinese Science Bulletin. 2010. No. 34. P. 3853–3863.

## REFERENCES

1. Buevich, A.G., Nekuryashchikh, A.A., Sergeev, A.P., Baglaeva, E.M., Medvedev, A.N., Sergeeva, M.V. *Primenenie iskusstvennykh neyronnykh setei dlya vosstanovleniya geokhimicheskikh polei poverkhnostnogo sloya pochvy na primere maloi ploschadki* [Application of artificial neural networks to restore geochemical fields of topsoil by the example of a small plot]. *Ekologicheskie sistemy i pribory*, 2014, no. 11, pp. 15–23 (in Russian).
2. Buevich, A.G., Safina, A.M., Sergeev, A.P., Varaksin, A.N., Medvedev, A. N. *Analiz statisticheskikh zavisimostei raspredeleniya zagryaznyayuschikh veshchestv v poverkhnostnom sloe pochvy urbanizirovannykh territorii s primeneniem matematicheskikh modelei (LUR metod)* [Analysis of the statistical dependence in the distribution of pollutants in the surface soil layer of urban areas with the applications of mathematical models (LUR method)], *Geoekologiya*, 2015, no. 3, p. 268–279 (in Russian).
3. Voronov, I.V., Politov, Ye.A., Efremenko, V. M. *Obzor tipov iskusstvennykh neyronnykh setei i metodov ikh obucheniya* [Overview of the types of artificial neural networks and methods of teaching them]. *Vestnik KuzGTU*, 2007, no. 3, pp. 38–42 (in Russian).
4. Demyanov, V.V., Savel'eva E. A. *Geostatistika: teoriya i praktika* [Geostatistics: theory and practice], R. V. Arutyunyan, Ed., Moscow: Nauka, 2010. 327 p. (in Russian).

5. Amato, F., Havel, J., Gad, A., El-Zeiny, A. Remotely Sensed Soil Data Analysis. *ISPRS Int. J. Geo-Inf.*, 2015, vol. 4, pp. 677–696 (in Russian).
6. Anagu, I., Ingwersen, J., Utermann, J., Streck, T. Estimation of heavy metal sorption. *Geoderma*, 2009, no. 152, pp. 104–112 (in Russian).
7. Behrens, T., Forster, H., Scholten, T., Steinrucken, U., Spies, E.-D., Goldschmitt, M. Digital soil mapping using artificial neural network. *Journal of Plant Nutrition and Soil Science*, 2005, no. 168, pp. 1–13 (in Russian).
8. Bui Tam Ngoc, Hasegawa Hiroshi. Training ANN using modification of differential evolution algorithm. *International J. of machine learning and computing*, 2015, no. 5(1), pp. 1–6 (in Russian).
9. Cho Hwa Kyung, Sthiannopkao Suthipong, Pachepsky A. Yakov, Kim Kyoung-Woong, Kim Ha Joon. Prediction of contamination potential. *Water research*, 2011, no. 45, pp. 5535–5544.
10. Dai Fuqiang, Zhou Qigang, Lv Zhiqiang, Wang Xuemei, Liu Gangcai. Spatial prediction of soil organic matter content integrating artificial neural network and ordinary kriging in Tibetan Plateau. *Ecological Indicators*. 2014, no. 45, pp. 184–194.
11. Freire Sergio, Fonseca Ines, Brasil Ricardo, Tenedorio A. Jose. Using Artificial Neural Networks for Digital Soil Mapping. *AGILE2013*, Leuven, May 14–17, 2013.
12. Liu, X.M., Zhao, K.L., Xu, J.M., Zhan, M.H., Si, B., Wang, F. Spatial variability of soil organic matter and nutrients in paddy fields at various scales in southeast China. *Environ. Geol.*, 2008, no. 53, pp. 1139–1147.
13. Odeh, I.O.A., McBratney, A.B., Chittleborough, D.J. Further results on prediction of soil properties. *Geoderma*, 1995, no. 67, pp. 215–226.
14. Sarmadian F., Mehrjardi Taghizadeh. Modeling of some soil properties using artificial neural network. *Global Journal of Environmental Research*, 2008, no. 1, pp. 30–35.
15. Sergeev, A.P., Baglaeva, E.M., Antonov, K.L., Medvedev, A.N., Rakhmatova, A. Yu. Anomalies of chromium surface distribution in urban soils from subarctic region of Russia. 15th International multidisciplinary scientific geoconference SGEM 2015. Water Resources. Forest, Marine and Ocean Ecosystems. Conference proceedings, V. II. Soils, Forest Ecosystems, Marine and Ocean Ecosystems. 18–24 June, 2015, Bulgaria, pp. 27–34.
16. Wahid, H., Ha, Q.P., Duc, H., Azzi, M. Neural network-based meta-modelling approach. *Applied Soft Computing*, 2013, no. 13, pp. 4087–4096.
17. Webster, R., Oliver, M. *Geostatistics for Environmental Scientists*. John Wiley & Sons, Chichester, 2001, pp. ULI–UL9.
18. Worsham, L., Markewitz, D., Nibbelink, N. Incorporating spatial dependence into estimates of soil carbon contents under different land covers. *Soil Sci. Soc. Am.*, 2010, vol. 74, pp. 635–646.
19. Ze Lin Liu, Chang Hui Peng, Wen Hua Xiang, Da Lun Tian, Xiang Wen Deng, Mei Fang Zhao. Application of artificial neural networks. *Chinese Science Bulletin*, 2010, no. 34, pp. 3853–3863.



## ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS AND GEOSTATISTICS IN PREDICTING THE DISTRIBUTION OF THE CHEMICAL ELEMENTS AT THE BACKGROUND TEST PLOT

A. G. Buevich<sup>1</sup>, A. P. Sergeev<sup>1</sup>, D. A. Tarasov<sup>1</sup>, A. Yu. Rakhmatova<sup>2</sup>, A. A. Kramarenko<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Institute of Industrial Ecology, Ural Branch, Russian Academy of Sciences, ul. S. Kovalevskoi 20, Yekaterinburg, 620219 Russia. E-mail: iie@ecko.uran.ru*

<sup>2</sup>*Ural Federal University, ul. Mira 19, Yekaterinburg, 620002 Russia.*

The study compares two approaches to geostatistical analysis (kriging, cokriging) and ANN for evaluating and forecasting the spatial distribution of chemical elements in the topsoil by the example of a small area in natural geological landscape. The size of the selected test plot (1.0 × 1.0 m) allows assuming its homogeneity, thus providing suitable conditions for the application of geostatistical analysis. However, the authors believed that even under such conditions the trained ANN will give prediction models comparable in accuracy with the geostatistical methods.

The test plot was split into 100 cells. Soil cores were sampled to a depth 0.05 m by stainless steel cylindrical sampling device with a diameter of 0.05 m. For the analysis of soil specimens, the X-ray fluorescence spectrometry was chosen. First, the network model for constructing the distribution of each element contained in the specimen was selected. A multilayer perceptron with Levenberg-Marquardt training algorithm was chosen for this study. Next, concentration distributions for each element using ordinary kriging and ordinary cokriging based on data of X-ray fluorescence analysis by Esri ArcGIS geostatistical software were built.

Second, in order to compare the predictability of two methods, the sample was randomly divided using the “create subset” function of Geostatistical Analyst in Esri ArcGIS in two sub-sets, i.e., the test and the training in the ratio of 30 : 70. The training sub-set (70 specimens) was used as the learning set. Then the concentration value of each element was returned by ANN, kriging, and cokriging by the test sub-set (30 specimens).

Three validation indices were used to evaluate the performance of different interpolation methods: the mean absolute error (MAE), root mean square error (RMSE), and relative root mean square error (RRMSE). The MAE, which indicates the extent to which the process leads to an error, was lower with ANN for all modeled elements for the model built on all 100 specimens and for the prediction model trained on 70 and built on 30 specimens. However, RMSE was much lower with ANN for all modeled elements in both prediction models. Ordinary kriging and cokriging showed approximately similar results. RRMSE was almost identical for all modeled elements, but still a bit lower with ANN for the both prediction models.

The assumption that the trained ANN will give prediction models comparable in accuracy with the kriging even in the homogeneous medium is fully confirmed in the present study for all modelled elements.

**Key words:** *artificial neural networks, kriging, cokriging, soil, modeling, interpolation.*