

МЕТОДОЛОГИЯ И МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЙ

УДК 504.064.2.001.18

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЫЛИ В СНЕГОВОМ ПОКРОВЕ РЕЖЕВСКОГО РУДНОГО РАЙОНА МЕТОДАМИ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ И ГЕОСТАТИСТИКИ

© 2017 г. А.Г. Бувечич, А.Н. Медведев, А.П. Сергеев, Д.А. Тарасов, К.Л. Антонов

*Институт промышленной экологии Уральского отделения Российской академии наук (ИПЭ УрО РАН),
ул. С. Ковалевской, д. 20, г. Екатеринбург, 620219 Россия.
E-mail: iie@ecko.uran.ru*

Поступила в редакцию 05.10.2016 г.

Создание моделей, основанных на ограниченном наборе входных данных, которые способны точно предсказать распределение загрязняющих веществ, — важная задача в экологических исследованиях. В работе сравниваются два подхода: искусственные нейронные сети (многослойный перцептрон (MLP) и обобщенно-регрессионная нейронная сеть (GRNN)) и геостатистика (кригинг и кокригинг) для прогнозирования распределения концентрации пыли в снеговом покрове вокруг действующего карьера Сафьяновского медноколчеданного месторождения (Средний Урал, Режевской рудный район) и в районе действия выбросов Режевского никелевого завода. Для оценки эффективности моделей были использованы три индекса: средняя абсолютная ошибка (MAE), средняя квадратическая ошибка (RMSE) и относительная — корень среднеквадратичной ошибки (RRMSE). Модели, основанные на искусственных нейронных сетях, показали более высокую точность. С учетом всех индексов наиболее точной оказалась модель GRNN, в которую в качестве входных параметров для моделирования входили координаты точек отбора проб и расстояние до вероятного источника эмиссии. Построены карты распределения поверхностной концентрации пыли в снеговом покрове на основе оценок геостатистики и искусственных нейронных сетей.

Ключевые слова: искусственные нейронные сети, кригинг, кокригинг, снеговой покров, моделирование.

ВВЕДЕНИЕ

Эффективный способ оценки текущего загрязнения территории — снеговая съемка, несущая информацию о количестве и составе загрязняющих веществ, выпавших за время залегания снегового покрова [7]. Основной показатель уровня загрязнения атмосферы изучаемой территории по сравнению с фоновым по результатам снеговой съемки — показатель «взвешенные вещества (пыль)». Это интегральный показатель, характеризующий общую техногенную нагрузку на воздушную среду рассматриваемой территории. Однако снеговая съемка — трудоемкий процесс, что не позволяет производить ее с достаточной подробностью, поэтому при оценке уровня загрязнения приходится опираться на ограниченный объем данных. Учитывая, что моделирование и прогнозирование реальных процессов, происходящих в атмосфере, сами по себе трудные задачи из-за их нелинейности и высокой

пространственной неоднородности, необходимо использовать новые подходы.

На современном этапе развития вычислительной техники нейронные сети предоставляют метод моделирования, позволяющий воспроизводить сложные зависимости; в частности, для задач, которые не могут быть решены аналитически, трудно поддаются формализации, и для решения которых линейные модели не подходят. В последние годы значительное количество публикаций в ведущих мировых научных журналах посвящены успешному применению искусственных нейронных сетей (ИНС) для моделирования различных процессов экологической направленности. Авторы исследований успешно применяют ИНС для прогнозирования глобальных и локальных климатических изменений [18], загрязнения подземных вод [13], исследования поведения и прогнозирования распространения животных [15, 17]. Ряд публикаций [10, 12]

посвящен сравнению различных методов моделирования (множественный регрессионный анализ, нелинейные динамические алгоритмы) и ИНС, причем авторы отмечают преимущества последнего. Часть работ [11, 14] посвящена поиску оптимальной структуры ИНС, алгоритмам обучения ИНС и преодолению недостатков, присущих данному методу моделирования [16].

Искусственные нейронные сети часто используются в исследованиях, связанных с загрязнением атмосферного воздуха, прогнозированием различных метеорологических процессов. Так, в работе [8] предлагается подход, основанный на оценке нейронной сетью пространственного распределения концентраций загрязняющих веществ на базе данных, собранных на станциях мониторинга. Методология показала более надежные результаты оценки и более точные прогнозы по сравнению с качественной детерминированной моделью, которая принимается регулирующими органами для прогнозирования концентраций во времени и пространстве, а также для разработки природоохранной политики. Модели на основе ИНС [5] прогнозируют ежедневные концентрации загрязнения воздуха на различных наземных уровнях. Результаты показывают хорошее согласие между фактическими и предсказанными концентрациями CO , PM_{10} , NO , NO_2 , NO_x , SO_2 , H_2S и O_3 , а значения коэффициента детерминации (R^2) для всех моделей ИНС превысили 0.70. В работе [3] модели на основе ИНС показали высокую эффективность при использовании ограниченного числа измерений для прогнозирования содержания твердых частиц PM_{10} и общего содержания взвешенных частиц.

Несмотря на успешное использование ИНС в этой области, выбор архитектуры и типа сети – трудоемкая задача при разработке модели для практической ситуации, и как у любого метода существуют свои преимущества и проблемы [4]. Сравнению разных типов ИНС с другими широко применяющимися подходами посвящено значительное количество работ. Так, в [6] перцептрон с одним скрытым слоем оказался наилучшей прогнозной моделью в сравнении с моделью, основанной на множественной линейной регрессии. В [9] указано, что ИНС дали наименьшую среднеквадратическую ошибку при прогнозировании качества атмосферного воздуха по индексу API по сравнению с авторегрессионными интегрированными моделями скользящей средней (ARIMA) и нечеткими временными рядами.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Снеговая съемка проведена в период максимального влагозапаса в снеге в марте 2015 г. Всего было отобрано 47 проб. Точки опробования на исследуемой территории размещены вокруг действующего карьера Сафьяновского медноколчеданного месторождения и на линии, условно соединяющей Режевской никелевый завод, центр медного карьера и д. Заболотье, ориентированной согласно господствующей розе ветров в зимний период (рис. 1).

Фактическое расположение точек определялось при проведении опробования непосредственно на месте, исходя из необходимости отбора проб на участках с ненарушенным (по визуальным признакам) снежным покровом. Пробы снега отбирались в соответствии с РД 52.04. 186-89 “Руководство по контролю загрязнения атмосферы”. Анализу подвергался весь вертикальный разрез снежного покрова за исключением нижних 2–3 см (во избежание загрязнения проб частицами почвы). Пробы отбирались методом квадратного конверта со стороной 2 м (4 керны по углам конверта и 1 в центре). Размеры конверта изменялись в зависимости от размеров найденного участка с ненарушенным снежным покровом. Доведение массы пробы до величины, достаточной для проведения химического анализа (не менее 3 кг), производилось добавлением кернов снега, отобранных внутри конверта. Отобранные пробы упаковывались в двойные полиэтиленовые пакеты, на каждом из которых ставился номер пробы в соответствии со схемой пробоотбора, и регистрировались в полевом журнале с указанием ситуационных особенностей положения точки отбора. Для обеспечения сохранности проб от таяния (при возможном повышении температуры воздуха) последние укладывались плотной упаковкой в короба из гофрокартона, которые заклеивались, маркировались и передавались для проведения химического анализа в аналитическую лабораторию ОАО “Сафьяновская медь”. Для моделирования использовались значения концентрации пыли в пробах снега (табл. 1).

В качестве входных параметров для моделей использовались координаты точек опробования, а для нейронных сетей и кокригинга – еще и расстояние до вероятного источника эмиссии. Кроме Режевского никелевого завода и медного карьера на исследуемой территории нет других значительных источников эмиссии.

Модели обозначаются следующим образом: сокращенное название ИНС, в скобках входные

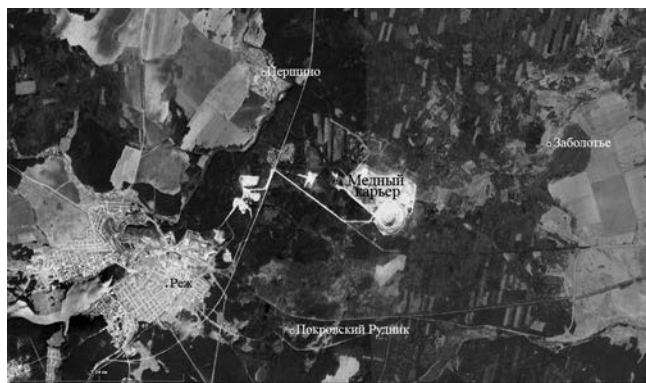


Рис. 1. Карта района отбора проб снега.

параметры модели. Например, $MLP(x, y)$ означает модель на основе многослойного персептрона с прямым распространением сигнала и методом обучения Левенберга – Марквардта, входные параметры которой – координаты точки опробования; а $GRNN(x, y, dist)$ – модель на основе обобщенно-регрессионной нейронной сети, входные параметры которой – это координаты точки опробования и расстояние до вероятного источника эмиссии (труба Режевского Никелевого завода).

Существует несколько типов кригинга, включая простой кригинг, ординарный, универсальный, индикаторный и др. Наиболее применимый – ординарный кригинг. В ординарном кригинге среднее значение считается постоянным, но оно неизвестно. Кроме того, ординарный кригинг при использовании для локальной оценки не требует постоянства среднего по всей зоне оценивания; предполагается, что среднее постоянно только в окрестности точки оценивания. Число данных, использующихся при оценке, и значения весовых коэффициентов могут меняться в зависимости от местоположения

оцениваемой точки. Данные выбираются из некоторой окрестности точки оценивания. Размер и форма этой окрестности зависят от исходных данных: предлагается использовать зону, ориентированную в соответствии с эллипсом корреляции. Уменьшение окрестности позволяет получать более вариабельную (менее сглаженную) оценку. Веса ординарного кригинга получают из уравнения кригинга, используя вариограмму. Несмещенная оценка вариограммной функции – половина среднеквадратического различия между значениями пар данных. Вариограмма характеризует степень различия данных в зависимости от расстояния между ними. Чем ближе значения данных (меньше разница между ними), тем больше значение вариограммы [2].

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, и некоторые методы требуют, чтобы данные подчинялись закону нормального распределения.

Многослойный персептрон с прямым распространением сигнала и методом обучения Левенберга – Марквардта (Levenberg–Marquardt) состоит из входного слоя, одного скрытого слоя и выходного слоя. Правило обучения используется для настройки весов и смещений персептрона так, чтобы приблизить значение выхода к целевому значению. Существует большое количество передаточных функций: пороговая, логистическая, линейная, гиперболический тангенс, линейная ограниченная, радиально-базисная и другие.

Таблица 1. Исходные значения концентраций пыли в снеговом покрове

№ точки опробования	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
Концентрация пыли, мг/л	384	781	452	375	215	236	161	89	228	113	51	113	86	62	91	61
№ точки опробования	17	18	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32
Концентрация пыли, мг/л	57	45	40	71	154	121	119	210	174	90	109	91	214	95	189	221
№ точки опробования	33	34	35	36	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	
Концентрация пыли, мг/л	144	163	235	147	207	208	627	721	1011	406	448	624	469	566	190	

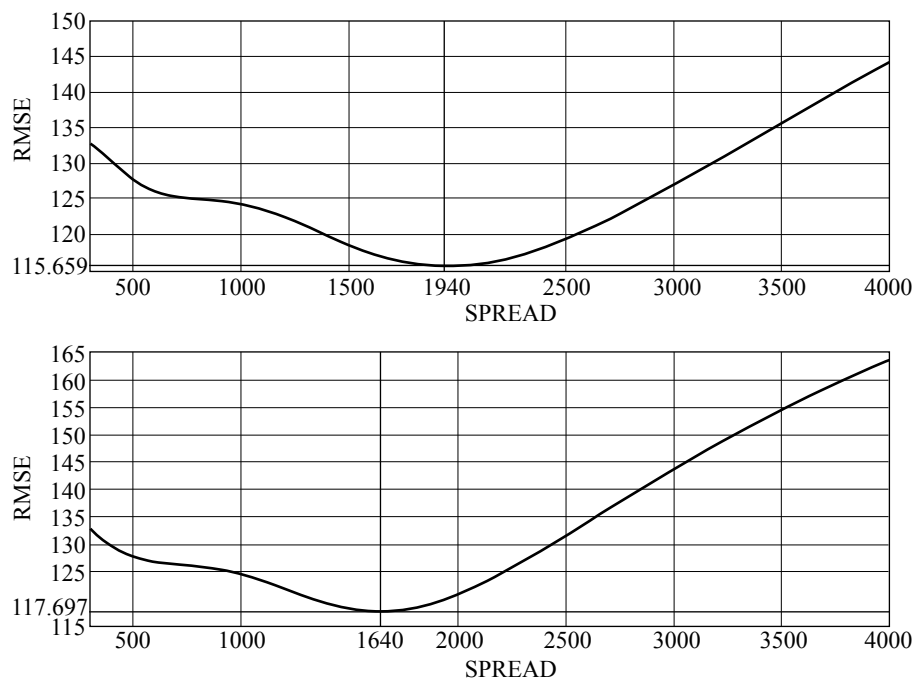


Рис. 2. Выбор параметра SPREAD для сети GRNN.

Как правило, передаточные функции всех нейронов в сети фиксированы, а веса являются параметрами сети и могут изменяться. Ошибка для конкретной конфигурации сети определяется путем прогона через сеть всех имеющихся наблюдений и сравнения реально выдаваемых выходных значений с желаемыми (целевыми) значениями. Все такие разности суммируются в функцию ошибок, значение которой и есть ошибка сети.

Обобщенно-регрессионные нейронные сети (GRNN) предназначены для решения задач обобщенной регрессии, анализа временных рядов и аппроксимации функций. Характерная особенность этих сетей – очень высокая скорость их обучения [1].

Программирование ИНС проводилось в среде MATLAB® с использованием GUI интерфейса. Использовался многослойный персептрон, входной слой которого – координаты точек отбора проб, скрытый слой состоял из нескольких нейронов, и выходной слой представлял концентрацию пыли в соответствующей пробе. Выбор количества нейронов в скрытом слое осуществлялся по наименьшей среднеквадратической ошибке предсказания содержания пыли. Количество нейронов варьировалось от 1 до 20. Качество обучения сети проверялось по коэффициенту корреляции и среднеквадратической ошибке между результатом работы сети и обучающим набором

данных. Многослойный персептрон с 7-ю нейронами в скрытом слое обеспечивал минимальную величину среднеквадратической ошибки для тренировочного набора данных. Дальнейшее исследование проводилось для нейронной сети с 7-ю нейронами в скрытом слое.

Для обучения сети GRNN и предсказания значений в тестовом наборе данных был использован MATLAB. Параметр *SPREAD* характеризует аппроксимационные свойства GRNN сети и влияет на точность интерполяции. Если параметр влияния *SPREAD* мал, то радиальная базисная функция характеризуется резким спадом, и диапазон входных значений, на который реагируют нейроны скрытого слоя, оказывается малым. С увеличением параметра *SPREAD* наклон радиальной базисной функции становится более гладким, и в этом случае уже несколько нейронов реагируют на значения вектора входа. Тогда на выходе сети формируется вектор, соответствующий среднему нескольких целевых векторов, соответствующих входным векторам обучающего множества, близких к данному вектору входа. Чем больше значение параметра *SPREAD*, тем большее число нейронов участвует в формировании среднего значения, и в итоге генерируемая сетью функция становится более гладкой. Для подбора параметра *SPREAD* использовалась среднеквадратическая ошибка между предсказанными значениями в тестовом наборе данных и их

Таблица 2. Описательная статистика снеговых проб исследуемого района

	Кол-во проб	Среднее	Медиана	Min	Max	Дисперсия	SD	Skewness	Kurtosis
Концентрация пыли, мг/л	47	248.1	173.8	39.8	1011	48464	220.1	1.7	2.5

реальными значениями для каждого местоположения. В данном исследовании значение параметра *SPREAD* 1940 обеспечивает минимальную среднеквадратическую ошибку интерполяции (115.7) для модели GRNN (x, y) и *SPREAD* 1640 обеспечивает минимальную среднеквадратическую ошибку интерполяции (117.7) для модели GRNN ($x, y, dist$) (рис. 2).

Распределения концентраций пыли в снеговом покрове при помощи ординарного кригинга и ординарного кокригинга на основе данных химического анализа были построены с использованием программного обеспечения ArcGIS.

Для сравнения предсказательной способности методов с помощью функции “создать подмножество” Geostatistical Analyst в ArcGIS Esri выборка была разделена на две подвыборки: тренировочную и тестовую в соотношении 50/50. Разделение выполнено через одну геопозицию таким образом, что нечетные точки стали тренировочной подвыборкой, четные – тестовой. Тренировочную подвыборку (23 точки) использовали в качестве обучающего множества. Затем значения концентраций пыли были предсказаны кригингом, кокригингом, MLP и GRNN на тестовой подвыборке (24 точки).

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

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

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

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

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

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В табл. 1 представлены исходные значения концентраций пыли в снеговом покрове, полученные в результате химического анализа.

В табл. 2 представлена описательная статистика значений концентрации пыли в снеговых пробах. Значения имеют правый перекокс и островершинный (лептокуртический) вид распределения.

В табл. 3 приведены показатели для сравнения точности моделей и предсказания расчетных концентраций элементов на исследуемой территории.

С учетом всех индикаторов наиболее точной оказалась модель на основе обобщенно-регрессионной нейронной сети, входные параметры которой включали координаты точки отбора пробы и расстояние до вероятного источника эмиссии GRNN ($x, y, dist$). Индексы RMSE и MAE для модели на основе многослойного перцептрона, на вход которой подавались только координаты MLP (x, y), оказались существенно меньше, чем для других моделей. При этом индекс RRMSE был значительно выше. При добавлении в модель MLP информации о расстоянии до вероятного источника эмиссии индекс RRMSE значительно понизился, а индексы RMSE и MAE выросли. Модели на основе кригинга и кокригинга

Таблица 3. Индексы оценки точности моделей

Модели	RMSE	RRMSE	MAE
MLP(x, y)*	86.2	0.72	72.8
MLP($x, y, dist$)	117.6	0.49	86.7
GRNN(x, y)	117.7	0.50	81.1
GRNN($x, y, dist$)	115.7	0.49	80.3
Кригинг	124.6	0.49	81.8
Кокригинг	124.6	0.49	81.8

* В скобках указаны входные параметры модели: x, y – координаты точки опробования, $dist$ – расстояние до вероятного источника эмиссии.

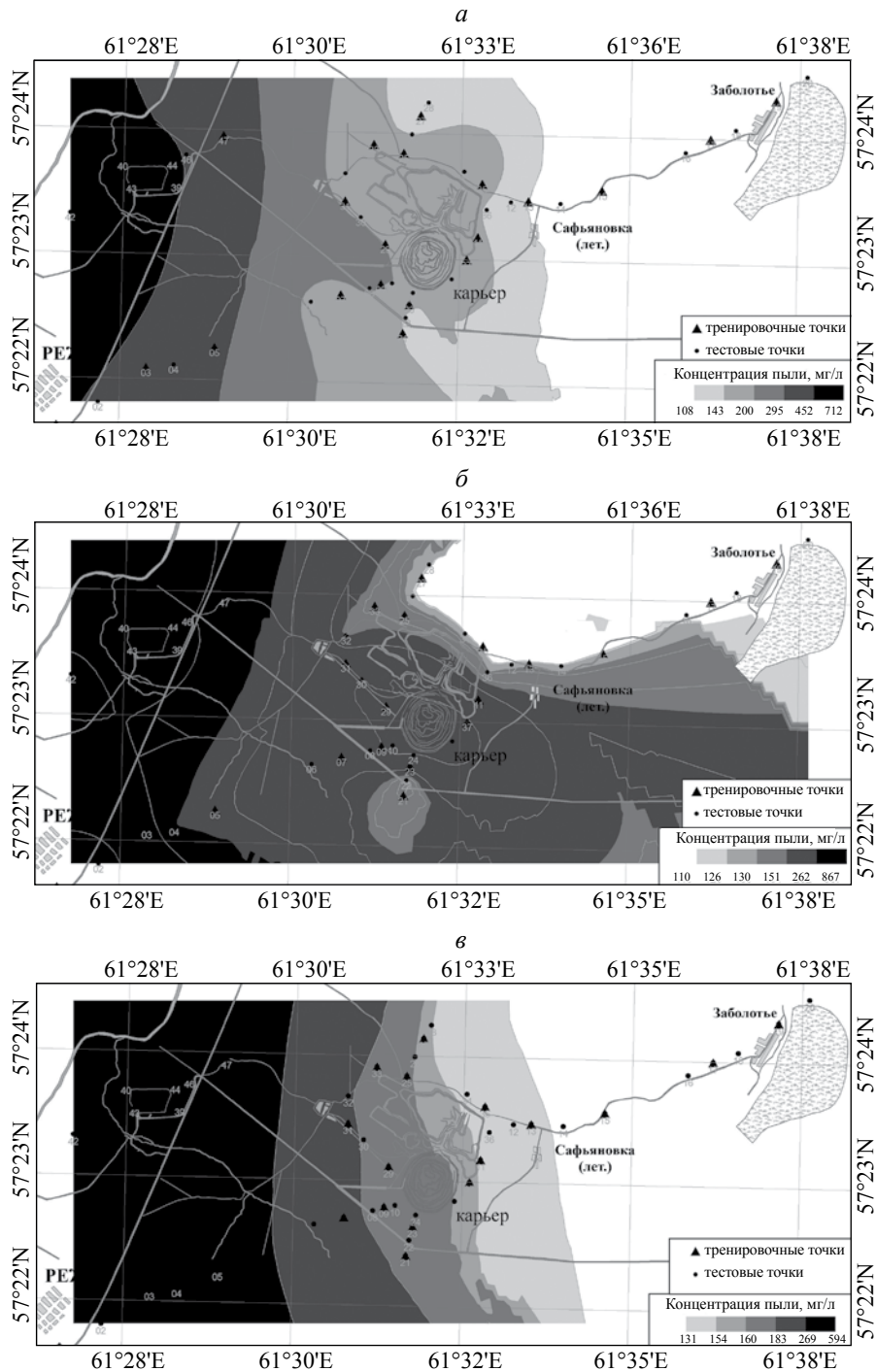


Рис. 3. Распределение концентрации пыли в снеговом покрове на основе: *a* – кокригинга, *б* – модели искусственной нейронной сети MLP(x, y), *в* – искусственной нейронной сети GRNN($x, y, dist$).

показали сопоставимую с нейронными сетями точность прогноза по индексам RRMSE и MAE, но индекс RMSE у геостатистических методов был существенно выше. Результаты ошибок кригинга и кокригинга оказались одинаковыми.

На рис. 3 показаны распределения концентрации пыли в снеговом покрове на основе оценок различных моделей, а на рис. 4 – распределение ошибок (невязок) соответствующих моделей.

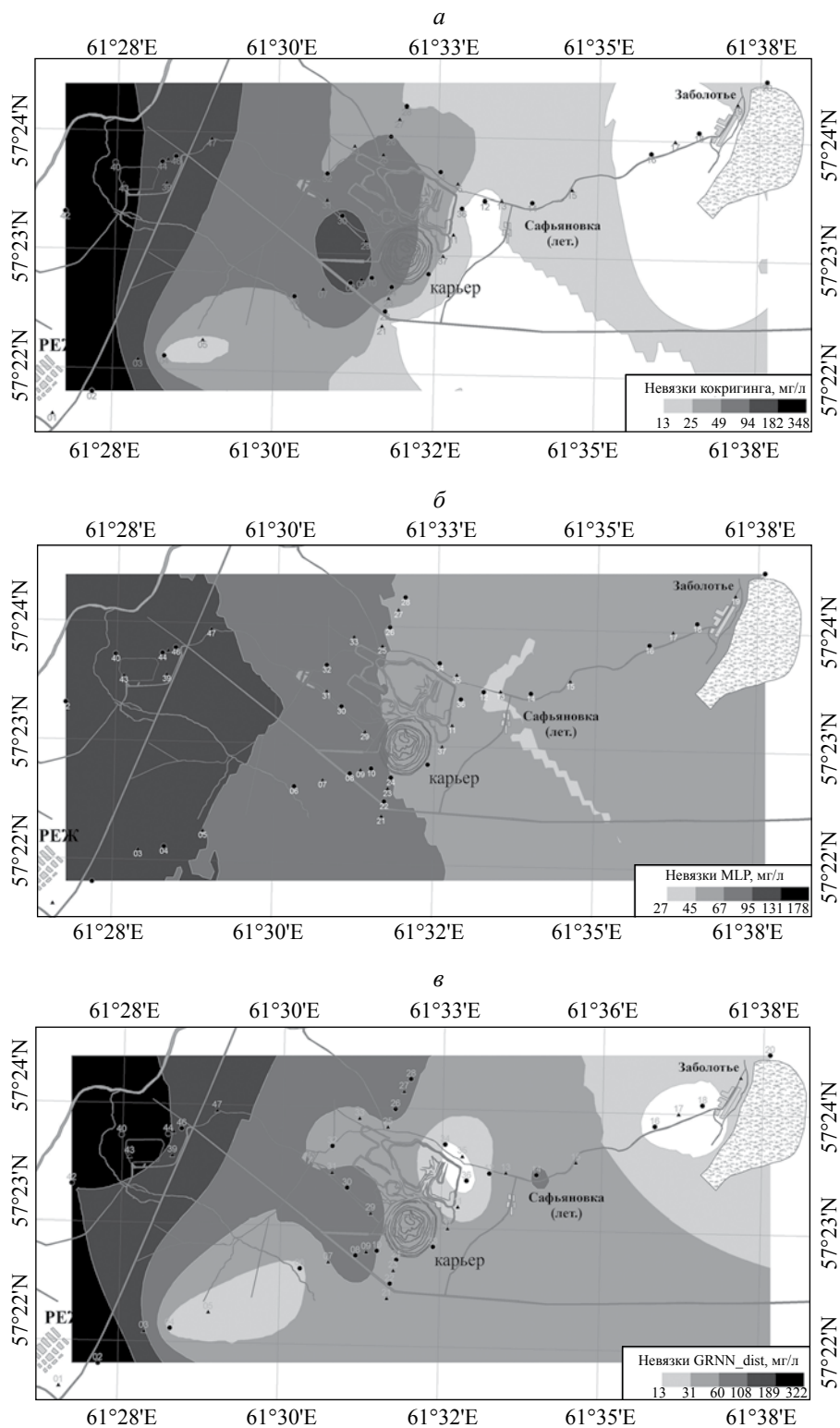


Рис. 4. Распределение невязок модели на основе: *a* – кокринга, *б* – модели искусственной нейронной сети MLP(x, y), *в* – искусственной нейронной сети GRNN($x, y, dist$).

ВЫВОДЫ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Модели на основе искусственных нейронных сетей оказались пригодными для прогнозирования распределения концентрации пыли в снеговом покрове при ограниченном количестве точек опробования. По точности предсказания они превзошли геостатистические методы.

Добавление информации о расстоянии до вероятного источника эмиссии повысило точность модели на основе GRNN, для модели MLP (x , y , $dist$) индекс RRMSE также оказался значительно ниже. Однако индекс RMSE для модели MLP (x , y , $dist$), напротив, увеличился. Вероятнее всего, это связано с тем, что модель MLP (x , y) точно предсказывала значения в точках, где концентрация пыли в пробах относительно велика, в случае относительно низких значений концентраций пыли в пробах точность модели MLP (x , y) была ниже.

При добавлении новой информации о расстоянии до вероятного источника эмиссии модель MLP стала точнее предсказывать значения в точках с относительно низкой концентрацией пыли и хуже в точках с высокой концентрацией. На точность прогнозирования у геостатистических методов новая информация не повлияла. Вероятно, это связано с малым количеством точек опробования либо с характером расположения точек отбора снеговых проб.

В дальнейшем планируется при помощи ИНС решить обратную задачу – имея картину распределения загрязнения найти вероятные источники выбросов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. 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.
2. Демьянов В.В., Савельева Е.А. Геостатистика: теория и практика / Под ред. Р.В. Арутюняна. М.: Наука, 2010. 327 с.
3. Alkassabeh Mouhammad, Sheta Alaa F., Faris Hossam, Turabieh Hamza. Prediction of PM10 and TSP Air Pollution Parameters by ANN // Middle-East Journal of Scientific Research. 2013. No. 14(7). P. 999–1009.
4. Ahmad Sheikh Saeed, Aziz Neelam, Ejaz Madiha, Tahir Ali Shah Muhammad. Integration of GIS and ANN for prediction of Ozone Concentration // International Journal Of Computational Engineering Research. 2012. No. 2(2). P. 568–574.
5. Baawain S. Mahad, Al-Serhi S. Aisha. Systematic Approach for the Prediction of Ground-Level Air Pollution // Aerosol and Air Quality Research, 2014. No. 14. P. 124–134.
6. Bandyopadhyay G., Chattopadhyay S. Single hidden layer artificial neural network models versus multiple linear regression model in forecasting the time series of total ozone // International Journal of Environmental Science and Technology. 2007. No 1. P. 141–149.
7. Chukanov V.N., Sergeev A.P., Ovchinnikov S.M., Medvedev A.N. Diagnostics of snow-cover contamination with soluble and insoluble metal impurities // Russian Journal of Non-destructive Testing, 2006. No. 42. P. 630–636.
8. Gevrey M., Dimopoulos I., Lek S. Two-way interaction of input variables in the sensitivity analysis of neural network models // 3rd Conference of the International-Society-for-Ecological-Informatics (ISEI), Rome, Italy. 2006. V. 195. P. 43–50.
9. Haizum Abd Rahman Nur, Hisyam Lee Muhammad, Talib Latif Moh. Air polluting index // Journal Teknologi (Sciences & Engineering). 2013. No. 63(2). P. 59–64.
10. Helama S., Makarenko N.G., Karimova L.M. et al. Dendroclimatic transfer functions revisited: Little Ice Age and Medieval Warm Period summer temperatures reconstructed using artificial neural networks and linear algorithms // Annalesgeophysicae. 2009. Vol. 27. P. 1097–1111.
11. Ozesmi S.L., Tan C.O., Ozesmi U. Methodological issues in building, training, and testing artificial neural networks in ecological applications // 3rd Conference of the International-Society-for-Ecological-Informatics (ISEI), Rome, Italy. 2006. V. 195. P. 83–93.
12. Sahoo G.B., Schladow S.G., Reuter, J.E. Forecasting stream water temperature using regression analysis, artificial neural network, and chaotic non-linear dynamic models // J. of hydrology. 2009. V. 378. P. 325–342.
13. Shaker R., Tofan L., Bucur M., et al. Network modelling approach applied to Dobrogea, Romania // J. of environmental protection and ecology. 2010. V. 11. P. 337–348.
14. Tosh Colin R., Ruxton Graeme D. The need for stochastic replication of ecological neural networks // Philosophical transactions of the royal society B: biological sciences. 2007. V. 362. P. 455–460.
15. Tracey, Jeff A., Zhu, Jun, Crooks, Kevin R. Modeling and inference of animal movement using artificial neural networks // Environmental and ecological statistics. 2011. V. 18. P. 393–410.
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. Watts Michael J., Worner S.P. Comparing ensemble and cascaded neural networks that combine biotic and abiotic variables to predict insect species distribution // Ecological informatics. 2008. V. 3. P. 354–366.
18. 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. Voronov, I.V., Politov, E.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]. *Vestnik KuzGTU*, 2007, no. 3, p. 38–42 (in Russian).
2. Dem'yanov, V.V., Savel'eva, E.A. *Geostatistika: teoriya i praktika* [Geostatistics: theory and practice]. Arutyunyan, R.V., Ed. Moscow, Nauka, 2010. 327 p. (in Russian).
3. Alkasassbeh Mouhammad, Sheta Alaa F., Faris Hossam, Turabieh Hamza. Prediction of PM10 and TSP Air Pollution Parameters by ANN. *Middle-East Journal of Scientific Research*. 2013. No. 14(7). P. 999–1009.
4. Ahmad Sheikh Saeed, Aziz Neelam, Ejaz Madiha, Tahir Ali Shah Muhammad. Integration of GIS and ANN for prediction of Ozone Concentration. *International Journal of Computational Engineering Research*, 2012, no. 2(2), pp. 568–574.
5. Baawain S. Mahad, Al-Serih S. Aisha. Systematic approach for the prediction of ground-level air pollution. *Aerosol and Air Quality Research*, 2014, no. 14, pp. 124–134.
6. Bandyopadhyay, G., Chattopadhyay, S. Single hidden layer artificial neural network models versus multiple linear regression model in forecasting the time series of total ozone. *International Journal of Environmental Science and Technology*, 2007, no. 1, pp. 141–149.
7. Chukanov, V.N., Sergeev, A.P., Ovchinnikov, S.M., Medvedev, A.N. Diagnostics of snow-cover contamination with soluble and insoluble metal impurities. *Russian Journal of Nondestructive Testing*, 2006. no. 42, pp. 630–636.
8. Gevrey, M., Dimopoulos, I., Lek, S. Two-way interaction of input variables in the sensitivity analysis of neural network models. Proceedings of the 3rd Conference of the International Society for Ecological Informatics (ISEI), Rome, Italy, 2006, vol. 195, pp. 43–50.
9. Haizum Abd Rahman Nur, Hisyam Lee Muhammad, Talib Latif Moh. Air polluting index. *Journal Teknologi (Sciences & Engineering)*, 2013, no. 63(2), pp. 59–64.
10. Helama, S., Makarenko, N.G., Karimova, L.M. et al. Dendroclimatic transfer functions revisited: Little Ice Age and Medieval Warm Period summer temperatures reconstructed using artificial neural networks and linear algorithms. *Annalesgeophysicae*, 2009, vol. 27, pp. 1097–1111.
11. Ozesmi, S.L., Tan, C.O., Ozesmi, U. Methodological issues in building, training, and testing artificial neural networks in ecological applications. Proceedings of the 3rd Conference of the International Society for Ecological Informatics (ISEI), Rome, Italy, 2006, vol. 195, pp. 83–93.
12. Sahoo, G.B., Schladow, S.G., Reuter J.E. Forecasting stream water temperature using regression analysis, artificial neural network, and chaotic non-linear dynamic models. *Journal of hydrology*. 2009. V. 378. P. 325–342.
13. Shaker, R., Tofan, L., Bucur, M. et al. Network modelling approach applied to Dobrogea, Romania. *Journal of environmental protection and ecology*, 2010, vol. 11, pp. 337–348.
14. Tosh, Colin R., Ruxton, Graeme D. The need for stochastic replication of ecological neural networks. *Philosophical transactions of the royal society B: biological sciences*. 2007, vol. 362, pp. 455–460.
15. Tracey, Jeff A., Zhu, Jun, Crooks, Kevin R. Modeling and inference of animal movement using artificial neural networks. *Environmental and ecological statistics*, 2011, vol. 18, pp. 393–410.
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. Watts Michael J., Worner, S.P. Comparing ensemble and cascaded neural networks that combine biotic and abiotic variables to predict insect species distribution. *Ecological informatics*, 2008, vol. 3, pp. 354–366.
18. 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.

MODELING OF SPATIAL DISTRIBUTION OF DUST IN THE SNOW COVER IN REZHEVSKOI ORE DISTRICT BY ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS AND GEOSTATISTICS

A.G. Buevich, A.N. Medvedev, A.P. Sergeev, D.A. Tarasov, K.L. Antonov

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

The limited set of data for predicting the distribution of pollutants poses a serious problem in environmental studies. In the work, two neural (multilayer perceptron (MLP) and generalized regression neural network (GRNN) as well as two geostatistical techniques (kriging and cokriging) were compared to predict the distribution of dust concentration in the snow cover in the area of the working copper quarry near Rezh town, Russia. The snow survey was carried out in the period with the maximum moisture content in snow in March 2015. Totally, 47 samples were collected. The sampling points in the study area are located around the operating copper quarry Safianovskii and on the line connecting the conditional Rezhevskoi nickel plant, the center of the copper quarry and Zabolote village oriented according to the wind rose prevailing in winter. The actual location of points was determined during the test on the spot proceeding from the need of sampling in areas with the intact snow cover.

At the first stage, the network models with the best structure for constructing the distribution of dust concentration were chosen. Next, the dust concentration distribution using ordinary kriging and ordinary cokriging based on data of the chemical analysis was built.

At the second stage, in order to compare the predictability of methods, the sample was subdivided into two subsets, i.e., the test and the training subsamples in the ratio of 50/50. In the division, the odd sub-sample points become training, and the even numbers become test. The training subsample (23 points) was used as a training set. Then, the dust concentrations values were predicted by kriging, cokriging, MLP and GRNN to test subsample (24 points). The coordinates of sampling points and the distance to the likely emission source (for neural networks and cokriging) were used as input parameters.

To evaluate the adequacy of different interpolation methods, three validation indices were used, i.e., the mean absolute error (MAE), root mean square error (RMSE), and relative root mean square error (RRMSE). Taking all indicators into account, the most accurate model was based on generalized regression neural network, which includes the coordinates of the sampling point and the distance to the probable source of the emissions as the input parameters (GRNN (x, y, dist)). RMSE and MAE indices for the model based on multilayer perceptron, which were fed to the input of coordinates only MLP (x, y), were significantly lower than for other models. However, RRMSE index was significantly higher. This is likely due to the fact that the model MLP (x, y) accurately predicted values at the points, where the dust concentration in the samples is relatively large. In the case of relatively low levels of dust concentration in the samples, the model accuracy was low. Models based on kriging and cokriging showed the comparable with neural networks forecast accuracy by RRMSE and MAE index, but the RMSE index for the geostatistical methods was significantly higher.

The models based on artificial neural networks were useful to predict the distribution of dust concentration on a limited number of sampling points. According to the prediction accuracy, they exceeded the geostatistical methods. Adding information about the distance to the probable source of emission has raised the accuracy of ANN-based models, but the prediction accuracy of geostatistical methods was not affected. Probably it is due to the small number of sampling points.

Key words: *artificial neural networks, kriging, cokriging, snow cover, modeling.*