

Use of neural networks in the geochemical data interpretation

Anwendung neuronaler Netzwerke zur Interpretation geochemischer Daten

Uporaba nevronske mreže za interpretacijo geokemičnih podatkov

Примена на невронски мрежи во интерпретација на геохемиски податоци

GORAZD ŽIBRET, Ljubljana; ROBERT ŠAJN, Ljubljana; JASMINKA ALIJAGIĆ, Ljubljana; TRAJČE STAFILOV, Skopje

Key words: neural networks, data interpretation, clustering, classification, function approximation, multilayer perceptron.

Abstract

Aim of the study is to represent some interpretation methods in geochemistry using an artificial neural networks technology. Four simple case studies are presented. The first case is the modelling of the Zn concentration in the attic dust in the Celje (Slovenia) area applying a multilayer perceptron with a back propagation learning algorithm. The second case study includes a classification problem. By means of a neural network, a classification of different sampling media (such as attic dust, soil, and alluvial sediments) will be made according to their chemical composition. The third case studies a clustering problem where the geochemical classification of chemical elements in Mežica (Slovenia) has been performed. In the last case study, the modelling of a trace element contamination in soil samples taken at Kavadarci (Macedonia) by the multilayer perceptrons method has been compared with the kriging interpolation method.

Zusammenfassung

Der Aufsatz behandelt vier Fallstudien für die Anwendung künstlicher neuronaler Netzwerke zur Interpretation geochemischer Daten. Im ersten Fall wird eine relativ einfache räumliche Interpolation zur Erklärung des Zn-Gehaltes in der Nachbarschaft der auflässigen Zinkhütte in Celje (Abb. 1) diskutiert. Die Interpolation erfolgte auf der Basis eines Multilayer-Perzeptrons, das über eine Recall-Lernphase an 118 Probenahmeorten für den Hüttenstaub „geeicht“ wurde. Das Ergebnis wurde mit der herkömmlichen Methode zur Konstruktion geochemischer Karten, dem Kriging, verglichen (Abb. 2). Auf den mittels neuronaler Netze konstruierten Karten ist erkennbar, dass die topographische Höhe einen entscheidenden Einfluss auf die Prognose des Zinkgehaltes hat. Das entspricht Beobachtungen, nach denen die Konzentrationen über der Zone der Temperaturinversion mit der Höhe extrem abnehmen. Dieses Problem kann mit Hilfe von Krigingverfahren nicht bearbeitet werden. Ein weiteres Phänomen, das aus den mit neuronalen Netzwerken erzeugten Karten erkennbar, aber durch Kriging-Interpolation nur schwer zu simulieren ist, besteht in der Berücksichtigung des vorherrschenden Westwindes. Einen Nachteil neuronaler Netzwerke stellt das Auftreten eines Rauschens in den fertigen Karten dar, welches möglicherweise nicht durch die geschilderten Phänomene bedingt ist.

Im zweiten Beispiel wird eine Klassifizierung untersucht. Verschiedene natürliche Kompartments des Celje-Gebietes (Abb. 1) wie Boden, alluviale Sedimente und Hüttenstaub wurden auf der Grundlage der in ihnen enthaltenen Spurenelemente mit Hilfe neuronaler Netzwerke klassifiziert. Die Lernphase des Netzwerkes (Abb. 3) basierte auf 121 Proben Hüttenstaub, 129 Boden- und 95 Sedimentproben. Ferner wurden der Lernmatrix 180 Muster mit Zufallswerten beigelegt. Die Typen der Probenahmemedien wurden durch die drei output-Neuronen repräsentiert. Die Ergebnisse hingegen sind mit Hilfe von 37 Mustern bewertet worden, die nicht in die Lernmatrix eingefügt worden waren. Das Netzwerk reflektiert die 37 Muster korrekt. Damit wurde belegt, dass das Netzwerk in der Lage ist, Muster mit zufälligen Werten zu erkennen.

Als drittes Beispiel wird die Bestimmung geochemischer Gruppen mittels selbst-organisierender Karten (SOM) behandelt. Dazu wurden die Daten einer geochemischen Probenahmekampagne für Boden und Hüttenstaub in Mežica (Abb. 1) verwendet. Es sollte ermittelt werden, welche Spurenelemente in der Umwelt Folge berg- und hüttenmännischer Aktivitäten in der Vergangenheit, eisenverarbeitender Tätigkeit und schließlich des natürlichen Untergrundes sind, also des Einflusses karbonatischer sowie von Eruptiv- und metamorphen Gesteinen. Die geochemischen Assoziationen lassen sich aus der Matrix des output-Netzes ablesen (Abb. 4), in dem verwandtere Elemente eine ähnlichere Verteilung gegenüber Elementen, die weiter voneinander entfernt sind, aufweisen (Abb. 5). Damit wurden fünf chemische Assoziationen identifiziert: eine Assoziation der anthropogenen Kontamination, eine solche der Karbonatgesteine, eine Gruppe spurenelementführender Minerale, eine Assoziation felsischer Eruptiv- und metamorpher Gesteine sowie die Gruppe der Kationen.

Im letzten Fall sind die geochemischen Karten des Gebietes von Kavadarci in Makedonien (Abb. 1) modelliert worden. Er ähnelt der ersten Fallstudie, aber er unterscheidet sich auch von ihr. Eine geochemische Assoziation der Elemente As, Sb und Tl wurde in den alluvialen Sedimenten der Flüsse Crna und Vardar gefunden. Sie ist Ergebnis der Erosion des anstehenden Gesteins wie auch bergbaulicher Aktivitäten in der Vergangenheit. Mittels Kriging lässt sich nur eine sehr ungenügende Interpretation konstruieren, in der extrem hohe Gehaltswerte „Bullaugeneffekte“ erzeugen. Hohe Werte besonderer Spurenelemente als Folge natürlicher Prozesse konnten nicht gefunden werden. In die neuronalen Netzwerke wurden folgende Parameter einbezogen: geographische Lage und topographische Höhe, geologische Situation, Flächennutzung und Hangneigung. Gegenüber dem Kriging ergaben die neuronalen Netzwerke eine deutlich bessere Verallgemeinerung (Abb. 6 bis 8).

Povzetek

V prispevku smo avtorji poskusili na kratko predstaviti 4 primere uporabe nevronske mreže pri obdelavi geokemičnih podatkov. Prvi primer je precej enostavna prostorska interpolacija na primeru vsebnosti cinka v okolici opuščene topilnice cinka v Celju (slika 1). Interpolacija je bila narejena na podlagi večslojnega perceptrona, kateri je bil naučen po metodi vzvratnega učenja na 118 vzorčnih točkah podstrešnega prahu. Narejena je tudi primerjava z običajno uporabljenimi metodami za izris kart – krigiranjem (slika 2). Pri karti, narejeni z nevronske mreže vidimo, da ima nadmorska višina velik vpliv na napovedano vsebnost cinka, kar ustreza z opazovanji, saj vsebnosti cinka na višini, ki je višja, kot je običajna višina temperaturnega obrata, znatno padejo. S krigiranjem tega pojava ni moč zajeti. Drug viden pojav, ki se je odrazil pri izrisu karte z uporabo nevronske mreže, in ga je zelo težko pravilno simulirati s krigiranjem, pa je vpliv prevladujočih zahodnih vetrov. Slaba stran uporabe nevronske mreže pa je pojav šuma pri končni karti, ki najverjetneje ni povezan s pojavom.

Drugi primer je primer razvrščanja, kjer smo z nevronske mreže razvrščali vzorčne materiale Celjskega območja (slika 1), in sicer tla, aluvialni sediment ter podstrešni prah, na podlagi vsebnosti prvov v njih. Mrežo (slika 3) smo naučili na podlagi 121 analiz podstrešnih prahov, 129 analiz tal ter 95 analiz aluvialnih sedimentov. Dodatno smo v učno matriko vključili še 180 primerov naključnih vrednosti. Tip materiala so predstavljali trije izhodni nevroni, rezultate pa smo kontrolirali s 37 primeri, ki niso bili vključeni v učno matriko. Nevronska mreža je pravilno razporedila vseh 37 primerov. Sposobna je bila zaznati tudi primere z naključnimi vrednostmi.

Tretji primer je primer določevanja geokemičnih združb z uporabo samoorganizacijskih mrež. Pri tem smo uporabili podatke iz geokemičnega vzorčenja tal in podstrešnega prahu na območju Mežice (slika 1). Poizkušali smo ugotoviti, kateri elementi v okolju so posledica delovanja rudnika in topilnice, kateri elementi so posledica delovanja železarne, in katere so naravne združbe elementov (vpliv karbonatnih, magmatskih in metamorfih kamnin). Geokemične združbe smo prebrali iz popolnoma naučene matrike izhodnih nevronov (slika 4), pri čemer imajo bližnji elementi bolj podobno razporeditev, kot elementi, ki so dlje narazen (slika 5). Na takšen način smo določili 5 geokemičnih združb, in sicer združbo onesnaženja, združbo karbonatnih elementov, združbo elementov težkih mineralov, združbo elementov kislinskih magmatskih in metamorfih kamnin ter združbo kationov, ki tvorijo topne minerale.

Zadnji primer pa je izris geokemičnih kart na primeru Kavadarcev v Makedoniji (slika 1). Primer je sicer podoben prvemu primeru, kljub vsemu pa se zelo razlikuje. Ugotovljena geokemična združba As-Sb-Tl je zastopana v aluvialnih sedimentih reke Crne in Vardar, kar je posledica erozije matičnih kamnin in delovanja Sb-As rudnika Alšar južno od obravnavanega območja. Uporaba krigiranja je povzročila povsem neprimerno interpretacijo, saj so opazni učinki ekstremnih vrednosti, ki se odražajo v t.i. »bikovih očeh«. Povišane vsebnosti elementov zaradi naravnih procesov ni vidna. Pri uporabi nevronske mreže smo upoštevali položaj in nadmorsko višino, geologijo, rabo tal ter naklon pobočja. Rezultati, dobljeni z nevronske mreže, so podali bistveno boljše generalizacije, kot krigiranje (slike 6, 7 in 8).

Апстракт

Во трудот авторите се обидуваат на кратко да претстават 4 примери на примена на невронските мрежи при обработка на геохемиски податоци. Првиот пример е прилично едноставна просторна интерполација на примерот на содржината на цинк во околината на напуштена топилница на цинк во Цеље (слика 1). Интерполација е направена врз основа на повеќеслоен перцептрон, кој е научен по методот на повратно учење на 118 точки од кои се земени примероци од поткровна прашина. Исто така, применет е и вообичаениот метод за припрема на карти –

со кригирање (слика 2). На картите подготвени со невронските мрежи, може да се види дека надморска височина има големо влијание врз предвидените содржини на цинк, што одговара со најденото, дека содржината на цинкот на повисоките новаа, каде вредноста на температурата е обратна, значително се намалуваат. Со кригирањето овој феномен не може да бидат забележан. Друга видлива појава која има влијание при изработката на картите со користење на невронските мрежи, и е многу тешко тоа правилно да се симулира со кригирање, е влијанието на доминантните западни ветрови. Слаба страна на невронските мрежи е појавата на шум на финалните карти, која најверојатно не е поврзана со некој феномен.

Друг пример е примерот на класификација, каде со невронски мрежи е извршена класификација на материјалите од земените примероци од областа на Цеље (слика 1), како што е почва, алувијален седимент и поткровна прашина, врз основа на содржината на елементите во нив. Мрежата (слика 3) е научена врз основа на анализа на 121 примерок од поткровна прашина, 129 примероци почва и 95 примероци од алувијални седименти. Покрај тоа, во матрицата се вклучени и 180 случајни вредности. Видот на материјалот е претставен со три излезни неврони, резултатите се проверени со 37 примери кои не се вклучени во матрицата. Невронската мрежа правилно ги распредели сите 37 примери. Беше во можност да ги детектира и примерите со случајните вредности.

Третиот пример е пример на утврдување на геохимиски групи со примена на самоорганизирани мрежи. При тоа се употребени податоците од геохимиските примероци на почви и поткровна прашина во околината на Межице (слика 1). Направен е обид да се утврди кои елементи присутни во животната средина се како резултат на работата на рудникот и топилницата, кои елементи се резултат на работата на железарницата, а кои се природни групи на елементи (влијание на карбонатните, магматските и метаморфните карпи). Геохимиските групи се одредени со пополнување на научената матрица на излезните неврони (слика 4), при што сличните елементи имаат посоодветна распределба од елементите кои се поразлични (слика 5). На овој начин се идентификувани пет геохимиски групи, антропогена група, група на карбонатни елементи, група на елементи на тешки минерали, група на елементи на киселите магматски и метаморфни карпи и група катјони кои формираат растворливи минерали.

Последниот пример се однесува на изготвување на геохимиски карти на примерот на Кавадарци во Македонија (слика 1). Овој пример е многу сличен на првиот случај, но сепак, се чини дека значително се разликува. Геохимиската асоцијација As-Sb-Tl е застапена во алувијалните седименти на реките Црна Река и Вардар и е како резултат на ерозија на матичните карпи и работата на Sb-As рудникот Алшар кој се наоѓа јужно од испитуваната област. Примената на кригирањето дава сосема несоодветна интерпретација, бидејќи се забележани ефекти на екстремни вредности, кои се рефлектираат во т.н. “бикови очи”. Зголемените вредности на содржините на елементи како резултат на природните процеси не се видливи. Со примена на невронските мрежи, усогласени се положбата и надморската височина, геологијата, употребата на земјиштето и аголот на наклонот. Резултатите добиени со невронските мрежи даваат значително многу подобра генерализација отколку оние добиени со кригирање (слики 6, 7 и 8).