ایجاد توابع انتقالی برای بهبود تخمین ظرفیت تبادل کاتیونی با استفاده از سطح ویژه

حسین بیات[1]، ناصر دواتگر[2]
1- استادیار گروه خاکشناسی دانشگاه بوعلی سینا-همدان
2- استادیار گروه خاکشناسی مؤسسه تحقیقات برنج کشور
h.bayat@basu.ac.ir

چکیده
یافتن متغیرهایی که جهت ایجاد توابع انتقالی استفاده شده و بدون صرف هزینه اظافی موجب بهبود تخمین CEC گردد حائز اهمیت است. در این تحقیق رس، سیلت، شن، کربن آلی، pH و CEC برای 1662 نمونه خاک اندازه گیری شد. منحنی دانه بندی با استفاده از اجزای بافت خاک مدلسازی گردید. سطح ویژه بر اساس منحنی دانه بندی محاسبه و برای بهبود تخمین CEC با روش شبکه های عصبی استفاده شد. استفاده از سطح ویژه موجب بهبود صحت و قابلیت اعتماد تخمین CEC گردید. با انجام گروهبندی داده ها با روش تجزیه خوشه بندی، سطح ویژه موجب افزایش قابل توجه بهبود تخمین CEC گردید.

کلمات کلیدی: توابع انتقالی، سطح ویژه، شبکه های عصبی مصنوعی، ظرفیت تبادل کاتیونی

مقدمه

ظرفیت تبادل کاتیونی (CEC)[1] یکی از خصوصیات مهم خاک می باشد که در پایگاههای اطلاعاتی- داده ای مربوط به خاک مورد نیاز بوده (مانریکو و همکاران، 1991) و به عنوان یک متغیر ورودی در مدل های زیست محیطی مورد استفاده قرار می گیرد (کلر و همکاران، 2001). اندازه گیری مستقیم CEC وقت گیر، پر هزینه و مشکل است. به همین دلیل از توابع انتقالی (PTFs)[2] برای تخمین ان استفاده می کنند (گسلر و همکاران، 1995). پارامتر های متفاوتی مانند رس، ماده آلی، pH، سیلت، شن، مقادیر آهن و آلومینیوم و کل باز های قابل تبادل (مانریکو و همکاران، 1991)، سطح ویژه (SSA)[3]، و دیگر متغیر ها برای تخمین CEC مورد استفاده قرار گرفته اند.
علیرغم تحقیقات زیادی که برای تخمین CEC از داده های سهل الوصول انجام شده است، یافتن متغیر هایی که بدون صرف هزینه اضافی موجب بهبود تخمین CEC گردد، همچنان به عنوان یک سؤال باقیمانده است. در این راستا استفاده ازSSA ذرات معدنی خاک با توجه به اندازه و شکل ذرات و استفاده از آن به عنوان یک متغیر ثانویه در توابع انتقالی شاید موجب بهبود تخمین CEC گردد. بنابراین هدف از این مطالعه محاسبه SSA ذرات معدنی خاک بر اساس اندازه و شکل انها و استفاده از آن به عنوان ورودی برای تخمین CEC می باشد.

[1] . Cation exchange capacity
[2] . Pedotransfer functions
[3] . Specific surface area

مواد و روش ها

در این تحقیق از 1662 داده خاک مربوط به استان گیلان از بانک اطلاعات آزمایشگاه شیمی خاک موسسه تحقیقات برنج کشور استفاده گردید. متغیرهای اندازه گیری شده عبارت بودند از: pH خاک در گل اشباع، کربن آلی، رس، سیلت، شن و ظرفیت تبادل کاتیونی. برای شبیه سازی منحنی کامل توزیع اندازه ذرات خاک در بیست گروه جرمی از داده های محدود شن، سیلت، رس و مدل اسکاگز و همکاران (2001) استفاده گردید. سپس سطح ویژه کل ذرات معدنی محاسبه شد. برای محاسبه سطح ویژه ذرات رس به شکل پولکی و ذرات سیلت و شن به شکل کروی فرض شدند (هیلل، 1998). بر اساس محاسبه سطح ویژه دو متغیر کمکی حاصل شد: سطح ویژه کل بخش معدنی خاک (TSS) و حاصلضرب سطح ویژه بخش رس در کسر جرمی ان (SS1).

برای ایجاد توابع انتقالی ابتدا متغیر ها استاندارد شدند. در مرحله اول و برای کل داده ها توابع انتقالی (مدل ها) با استفاده از شبکه های عصبی مصنوعی از نوع پرسپترون چند لایه با یک لایه پنهان و چهار تا شش نرون مخفی برای تخمین CEC ایجاد شدند. از مجموع داده ها 1100 داده برای آموزش و 562 داده برای معتبرسازی بصورت تصادفی انتخاب شدند. متغیر های شن، سیلت، رس، pH و کربن آلی به عنوان تخمینگر استفاده شدند و مدل اول (PTF1) ایجاد گردید. برای ایجاد مدل دوم (PTF2) متغیر های کمکی محاسبه شده شامل TSS و SS1 نیز علاوه بر تخمینگر های PTF1 به عنوان ورودی مدل مورد استفاده قرار گرفتند.

در مرحله دوم جهت افزایش بهبود تخمین CEC، کل داده ها از طریق تجزیه خوشه بندی به هشت گروه تقسیم شدند. روش وارد[1] با مربع فاصله اقلیدسی برای تجزیه کلاستر از طریق نرم افزار SPSS (SPSS Inc, 1994) مورد استفاده قرار گرفت. هر دو PTF1 و PTF2 برای هر گروه بصورت مجزا ایجاد گردید.

برای مقایسه صحت و قابلیت اعتماد PTF1 و PTF2 به ترتیب در مجموعه داده های آموزش و معتبر سازی از آماره های ریشه دوم میانگین مربعات خطا (RMSE)[2] ، معیار اطلاعات آکایک (AIC)[3] ، و بهبود نسبی (RI)[4] استفاده شد. از آنجا که هیچ کدام از معیارهای فوق معنی دار بودن تفاوت دقت مدل را از نظر اماری مشخص نمی کنند، برای این منظوراز آماره مرگان-گرنجر-نیوبلد (MGN)[5] (دیبولد و ماریانو، 2002) استفاده گردید.

نتایج و بحث

در این تحقیق صحت[6] و قابلیت اعتماد[7] به ترتیب معیاری از میزان یا درجه تشابه داده های اندازه گیری شده و پیش بینی شده برای مجموعه داده های آموزش و معتبرسازی هستند. در مجموعه کل داده ها استفاده از متغیر های کمکی سطح ویژه یعنی TSS و SS1 به عنوان تخمینگر در PTF2 علاوه بر متغیر های ورودی PTF1 موجب بهبود معنی دار صحت تخمین CEC گردید (جدول 1)، ولی این بهبود برای قابلیت اعتماد ناچیز بود که معنی دار نگردید. استفاده از TSS و SS1 در هردو مرحله آموزش و معتبرسازی موجب کاهش AIC و RMSE گردید و صحت و قابلیت اعتماد

[1] . Ward
[2] . Root mean squared error
[3] . Akaike information criterion
[4] . Relative improvement
[5] . Morgan-Granger-Newbold
[6] . Accuracy
[7] . Reliability

تخمین CEC را به ترتیب 1/17 و 0/64 درصد بهبود بخشید. سطح ویژه دارای رابطه بسیار نزدیک با CEC است، به گونه ای که می توان گفت یکی از عوامل کنترل کننده CEC می باشد (تنگ و همکاران، 1999). به همین دلیل استفاده از متغیر های مربوط به سطح ویژه صحت و قابلیت اعتماد PTF2 را افزایش داد (جدول 1).

در تمامی هشت گروه استفاده از TSS و SS1 برای ایجاد PTF2 موجب بهبود قابل توجه و معنی دار صحت و قابلیت ان نسبت به PTF1 گردید (جدول 2). نمس و همکاران (2003) نتیجه گیری کردند که توابع انتقالی حاصل از مجموعه داده های کوچک و خاص یک خاک یا یک ناحیه، اگر در دسترس باشد، بهتر از داده های زیاد و عمومی است. تامپسون و همکاران (1989) نیز دریافتند که در خاک های آیووا کربن آلی و SSA 89 درصد از تغییرات CEC را توجیه کردند. استفاده از TSS و SS1 موجب بهبود صحت مدل ها بین 2/2 تا 24/2 درصد گردید که به جز در سه گروه در بقیه گروه ها معنی دار بود. این تاثیر در قابلیت اعتماد بیشتر بوده و موجب بهبود 4/3 تا 55/6 درصدی گردید که بجز C8 در بقیه گروه ها معنی دار بود (جدول 2). این نتایج نشان می دهد که گروهبندی موجب بهبود تاثیر TSS و SS1 بر تخمین CEC گردیده است.

جدول 1. نتایج تخمین CEC برای مرحله آموزش و معتبرسازی کل داده ها

	آموزش		معتبرسازی	
	PTF1	PTF2	PTF1	PTF2
AIC[a]	3981	3955	1982	1974
RMSE	6/10	6/03	5/82	5/78
RI		1/17		0/64
MGN		3/54*		1/24

[a]. AIC، معیار اطلاعات آکایک، RMSE، ریشه دوم میانگین مربعات خطا، RI، بهبود نسبی و MGN، آماره مرگان-گرنجر-نیوبلد.

*. وجود تفاوت معنی دار (در سطح 5 درصد) بین PTF1 و PTF2.

جدول 2. نتایج تخمین CEC برای مرحله آموزش و معتبرسازی هشت گروه داده ها

		آموزش				معتبرسازی			
		n[a]	RMSE	RI	MGN	n	RMSE	RI	MGN
C1	PTF1	۲۰۰	۴/۹			۱۴۰	۱۰/۸		
	PTF2		۴/۱	۱۶/۲	۴/۴۰*		۴/۸	۵۵/۶	۱۴/۰۶*
C2	PTF1	۱۲۰	۴/۹			۷۶	۸/۴		
	PTF2		۴/۱	۱۶/۲	۳/۲۸*		۵/۵	۳۴/۲	۶/۵۰*
C3	PTF1	۹۰	۳/۳			۳۴	۷/۰		
	PTF2		۲/۵	۲۳/۹	۳/۸۲*		۴/۷	۳۳/۰	۵/۰۱*
C4	PTF1	۱۶۰	۳/۱			۸۷	۴/۰		
	PTF2		۲/۸	۸/۶	۳/۸۳*		۳/۸	۵/۴	۱/۹۶*
C5	PTF1	۹۰	۱/۶			۳۹	۴/۷		
	PTF2		۱/۵	۷/۶	۱/۸۵		۳/۶	۲۳/۶	۲/۷۴*
C6	PTF1	۲۰۰	۴/۲			۱۰۳	۶/۶		
	PTF2		۴/۱	۲/۲	۱/۱۹		۶/۳	۴/۳	۲/۱۷*
C7	PTF1	۱۱۰	۳/۲			۵۲	۵/۸		
	PTF2		۳/۰	۸/۰	۱/۷۳		۵/۰	۱۳/۵	۲/۴۳*
C8	PTF1	۱۱۰	۵/۳			۵۱	۷/۷		
	PTF2		۴/۰	۲۴/۲	۴/۹۱*		۶/۱	۲۰/۲	۱/۸۸

[a]. n، تعداد نمونه و C1 تا C8 گروه های یک تا هشت. برای توضیح بقیه پارامترها به جدول 1 مراجعه شود.

*. وجود تفاوت معنی دار (در سطح 5 درصد) بین PTF1 و PTF2.

نکته حائز اهمیت در این تحقیق این است که محاسبه مقادیر سطح ویژه از روی منحنی توزیع اندازه ذرات شبیه سازی شده از مدل اسکاگز و همکاران (2001) و با استفاده از داده های محدوده شن، سیلت و رس انجام شده است. در واقع برای بدست آوردن مقادیر سطح ویژه اندازه گیری اضافی انجام نشده و یا هزینه مازاد نیز صرف نشده است. بنابراین تنها با مدلسازی توزیع اندازه ذرات خاک، محاسبه سطح ویژه و استفاده از ان به عنوان ورودی علی رغم وجود متغیر های شن، سیلت و رس در مدل، تخمین CEC به مقدار قابل توجهی بهبود داده شد. بر پایه بررسی انجام شده از منابع علمی داخلی وخارجی در هیچ تحقیقی این نکته بررسی نشده است، که می تواند به عنوان گامی مهم در بهبود تخمین CEC بشمار آید.

نتیجه گیری

استفاده از سطح ویژه موجب بهبود صحت و قابلیت اعتماد تخمین CEC گردید. با انجام گروهبندی داده ها با روش تجزیه خوشه بندی، تاثیر سطح ویژه بر بهبود صحت و قابلیت اعتماد تخمین CEC افزایش قابل توجهی یافت. اهمیت نتایج حاصل در این تحقیق این است که بدون صرف هزینه مازاد صحت و قابلیت اعتماد تخمین CEC افزایش یافته است، که می تواند گام مهمی در ایجاد توابع انتقالی محسوب شود.

منابع

Amini M, Abbaspour KC, Khademi H, Fathianpour N, Afyuni M, and Schulin R, 2005. Neural network models to predict cation exchange capacity in arid regions of Iran. European Journal of Soil Science 56: 551-559.

Diebold FX, and Mariano RS, 2002. Comparing predictive accuracy. Journal of Business and Economic Statistics 20: 134-144.

Gessler PE, Moore ID, McKenzie NJ, Ryan PJ, 1995. Soil landscape modelling and spatial prediction of soil attributes. International Journal of Geographical Information Systems 9: 421–432.

Hepper EN, Buschiazzo DE, Hevia GG, Urioste A, and Antón L, 2006. Clay mineralogy, cation exchange capacity and specific surface area of loess soils with different volcanic ash contents. Geoderma 135: 216-223.

Hillel D, 1998. Environmental soil physics. Academic Press, PP. 771.

Keller A, Von Steiger B, Van der Zee SEATM, and Schulin R, 2001. A stochastic empirical model for regional heavy-metal balances in agroecosystems. Journal of Environmental Quality 30: 1976-1989.

Manrique LA, Jones CA, and Dyke PT, 1991. Predicting cation-exchange capacity from soil physical and chemical properties. Soil Science Society of America Journal 55: 787-794.

Skaggs TH, Arya LM, Shouse PJ, and Mohanty BP, 2001. Estimating particle-size distribution from limited soil texture data. Soil Science Society of America Journal 65: 1038-1044.

SPSS Inc, 1994, SPSS Professional Statistics: Chicago, SPSS Inc.

Theng BKG, Ristori GG, Santi CA, and Percival HJ, 1999. An improved method for determining the specific surface areas of topsoils with varied organic matter content, texture and clay mineral composition. European Journal of Soil Science 50: 309-316.

Thompson ML, Zhang H, Kazemi M, and Sandor JA, 1989, Contribution of organic matter to cation exchange capacity and specific surface area of fractionated soil materials. Soil Science 148: 250-257.