



الاداء الافضل لإزالة الطلب على الاكسجين الكيميائي خلال المعالجة المائية لمبيد الأعشاب
التجارية **alazine** و **gesaprim** بواسطة شبكة عصبية مباشرة وعكوسة

**Optimal performance of COD removal during aqueous treatment of alazine
and gesaprim commercial herbicides by direct and inverse neural network**

Y. El. Hamzaoui, J. A. Hernández, S. Silva-Martínez, A. Bassam, A. Álvarez, C.
Lizama-Bahena

تم تطوير طريقة شبكة عصبية اصطناعية مباشرة وعكوسة (ANN) artificial neural network و ((ANNi) inverse artificial neural network) للتنبؤ بإزالة الطلب على الاكسجين الكيميائي ((COD) chemical oxygen demand) خلال تدهور الاعشاب التجارية (alazine و gesaprim) تحت ظروف عملية مختلفة. الترتيب 1-9-9 (9 خلايا عصبية مدخلة، و9 خلايا عصبية كامنة وخلية عصبية مخرج) تعرض توافق ممتاز ($R^2=0.9913$) بين التجربة العلمية ومحاكاة قيمة COD باعتبار دالة hyperbolic tangent sigmoid ودالة linear transfer function في الطبقة الكامنة طبقة الخرج. يبين التحليل الحساس ان جميع مدخلات المتغيرات التي تم دراستها (زمن التفاعل، وpH، وتركيز مبيد الاعشاب والتلوث، والفوق صوتية US، وشدة الضوء فوق البنفسجي UV، و $[TiO_2]_0$ ، و $[K_2S_2O_8]_0$ والاشعاع الشمسي SR) لها تأثير قوي على تقهقر الاعشاب التجارية بدلالة ازالة الطلب على الاكسجين الكيميائي (COD). بالإضافة إلى ان زمن التفاعل هو العامل الاكثر تأثيرا بنسبة اهمية تصل إلى 33.49%، تبعها تركيز مبدئي للمبيد الاعشاب. اجريت تجربة لأداء COD الافضل بواسطة الشبكة العصبية الاصطناعية



المعكوسة، الان، ANNi يمكن ان تحسب افضل معامل غير معروف (زمن التفاعل ÷ للحصول على الـ COD المطلوب. نسبة الخطأ المنخفضة جدا وقصر زمن الحسابات جعل هذه الطريقة جذابة لتطبيق على التحكم عبر الانترنت بعملية الاكسدة المتقدمة ((AOP) Advanced Oxidation Process)) على مدى تدهور مبيد الاعشاب التجارية.

1. مقدمة Introduction

الاستخدام المفرط للأسمدة والمبيدات في الزراعة قد ساهم في تلوث المياه. تمثل مبيدات الاعشاب الفئة الاساسية من المبيدات والمتسببة في وجود الملوثات العضوية بسبب تحللها البيولوجي المنخفض. تتعرض مبيدات الاعشاب إلى عملية حيوية وغير حيوية في التربة مما تتسبب في زيادة نواتج عمليات الايض (التمثيل الغذائي) المعقد كنواتج لعملية التحلل. قد تتسبب نواتج عمليات الايض مشاكل صحية للإنسان لوجودها في المياه الجوفية [1] بتراكيز عالية نسبيا [2]. هذه الحالة اثارت اهتمام بيئي من قبل المجتمع العلمي حول العالم.

في هذه الايام ازداد استخدام مبيدات الاعشاب في الزراعة بشكل ملحوظ في جميع انحاء العالم، بالأخص خلال العقدين الماضيين، وقد ادت هذا إلى ازدياد الاهتمام بالمصير البيئي لهذه المواد لأنها تتحلل بمعدل منخفض نسبيا [3]. مبيدات الاعشاب التجارية مثل alazine (يتألف من atrazine وalachlor) و gesaprim (atrazine) قد تحللت من خلال اندماج كلا من التحلل بالأموح فوق الصوتية sonolysis والتحفيز الضوئي photocatalysis (تحفيز ضوئي صوتي sonophotocatalysis) باستخدام مصدر فوق صوتي بتردد 20 kHz تحت ضوء الأشعة فوق البنفسجية [4]. لقد افادت البحوث العلمية بان عملية التحلل الضوئي لمبيدات الاعشاب التجارية هذه قد ازداد بفعل الامواح فوق الصوتية في وجود محفز TiO_2 مع نواتج تحلل عالية جدا للمركبات النشطة وصلت بشكل خاص لتمعدن كامل في كلا نوعي مبيدات الاعشاب التجارية. علاوة على ان شكل التحلل تم تسجيله من خلال قياس التركيز الموجود في alazine (alachlor) و gesaprim (atrazine) باستخدام HPLC كدالة في زمن التشعيع (بالأموح الصوتية و/أو الضوء). تم احراز ما يزيد عن 80% من التقليل من الطلب على الاكسجين الكيميائي لكل النوعين من مبيدات الاعشاب باستخدام التحفيز الضوئي والصوتي عند زمن تشعيع بلغ 150 دقيقة.

التحلل لكلا من مبيدات الاعشاب التجارية *alazine* و *gesaprim* بعملية التحفيز الضوئي والصوتي هو بصفة عامة معقد بعض الشيء، وهذا بسبب التعقيد في حل المعادلات المشتمة على توازن طاقة التشيع، والتوزيع المكاني للإشعاع الممتص، وتحول الكتلة واليات التحلل بالتحفيز الضوئي والصوتي المتضمنة لأصناف راديكالية (جذور حرة). بسبب اعتماد العملية على عوامل متعددة فان نمذجة هذه العمليات يتضمن الكثير من المشاكل، وظهور سلوكيات غير خطية والتي هي في الحقيقة صعبة الوصف من خلال نموذج رياضي خطي، أي التعامل مع نظام متعدد المتغيرات (multivariate system). انه من الواضح ان هذه المشاكل لا يمكن حلها بترباط متعدد المتغيرات خطي بسيط. على أي حال فان تطوير شبكات عصبية اصطناعية جعل من الممكن ان تستخدم في نمذجة الانظمة المعقدة.

تستخدم الان الشبكات العصبية الاصطناعية (ANN) بشكل واسع في الكثير من مجالات البحث العلمي وتوفر مجموعة من الطرق التي قد تكون مفيدة لتوقع جودة المياه باستخدام معاملات معالجة الماء [5, 6]. على عكس طرق الاحصائيات التقليدية والمعادلة التفاضلية، تعتبر طريقة ANN أداة قوية وفعالة في نمذجة البيانات حيث انها تستطيع ان تفتنص وتمثل بشكل مفصل العلاقات المعقدة بالكثير من المتغيرات، مثل متغيرات الادخال والايخارج. بشكل اساسي فان المزايا المتعلقة بالشبكات العصبية هي انها قادرة على تمثيل كلا من العلاقات الخطية والغير خطية وهي طريقة مبدعة في تعلم العلاقات مباشرة من البيانات المستخدمة في تدريب الشبكة [7, 8]. الشبكة العصبية الاصطناعية ANN لا تتطلب وصف رياضي للظاهرة المتضمنة في العملية، وعليه فانه من الممكن ان تثبت اهميتها في المحاكاة وتوسيع نطاق الكيمياء الضوئية المعقدة وانظمة التحفيز الضوئي الصوتية [9 – 11].

اصبح تطبيق تحليل ANN لحل المشاكل الهندسية البيئية محل اهتمام العديد من البحوث العلمية الكثيرة. لقد افاد كلا من Gob واخرون [5]، و Moraes واخرون [6] بان النمذجة الحركية لعملية معالجة المياه بطريقة كيميائية ضوئية. تصف المقالة العلمية التي نشرت من قبل Lek و Guegan [11] تطبيق ANN كاداة في النمذجة الايكولوجية (البيئية). كما قام كلا من Cinar واخرون [12] بتحديد العلاقة الداخلية والاستجابة لمتغيرات العملية المشاركة في محطات معالجة المياه. لقد قاموا بتحليل سلوك النظام على نطاق واسع لمحطة معالجة رواسب مياه الصرف الصحي باستخدام خريطة الشبكة العصبية ذاتية الترتيب. كما قدم Wen و Vassiliadis [13] نظام تحكم اتوماتيكي لتشغيل عملية معالجة مياه الصرف الصحي بتطبيق تقنيات ذكية اصطناعية هجينة بتحكم في الزمن الفعلي. بالإضافة الى ان ANN طبقت بنجاح في المعالجة البيولوجية لمياه الصرف الصحي [14 – 17]. حديثاً، استخدمت ANN لنمذجة ازالة لون الاكسدة الضوئية لـ BB3



[18]. استخدمت ANN ايضا لنمذجة ازالة الاصباغ بعملية الاكسدة المتقدمة [21 – 19] وللتنبؤ بالطلب على الاكسجين الكيميائي كمؤشر على تلوث النهر [7]. على أي حال، هناك اشارة على القليل من الدراسات على تطبيق ANN في عملية الاكسدة المتقدمة ((AOP) advanced oxidation process) [26 – 22].

حديثا، استمر توسع استخدام الشبكات العصبية لحل مشاكل الهندسة البيئية. في البحث الحالي نناقش فكرتين اساسيتين، الاولى هي استخدام نموذج شبكة عصبية لطبقة تغذية امامية متعددة للتنبؤ بالتخلص من الطلب على الاكسجين الكيميائي خلال تحلل مبيدات الاعشاب التجارية الـ alazine و gesaprim باستخدام معلق ثاني اكسيد التيتانيوم جنبا إلى جنب مع عملية تحفيز ضوئي وصوتي في وجود ضوء اشعة فوق بنفسجية في عملية الاكسدة المتقدمة. على الجانب الاخر، في الكثير من الحالات، عندما نتطلب مخرجات مثالية، فان معاملات الادخال المثالية لا تكون معروفة، لهذا السبب. لقد وجدنا ان الشبكة العصبية الاصطناعية العكوسة تعتبر استراتيجية اساسية لحساب شروط التشغيل المثالية. لهذا تم تطبيق تحليل حساس لنبيين أي المعاملات لها التأثير الاكبر على ازالة الطلب على الاكسجين الكيميائي لكي نصل لأفضل المعاملات بواسطة الشبكة العصبية الاصطناعية العكوسة (ANNi).

2. المواد والطرق Materials and methods

1.2 المواد الكيميائية Chemicals

يشتمل الـ alazine (30/18 LM) على atrazine وalachlor ومستحضرات تشكيل. ويحتوي Gesaprim (90 GDA) على atrazine ومستحضرات تشكيل. تم شراء مبيدات الاعشاب هذه مباشرة من Syngenta Crop Protection Inc. (USA) و Degussa P25) TiO_2 و H_2SO_4 من Sigma- Aldrich بدرجة تحليلية analytical grade. كل المواد الكيميائية المستخدمة لم يجرى عليها تنقية اضافية. تم الحصول على ماء مقطر من Baxter México S.A.



2.2 التجارب العلمية لتحلل مبيد الاعشاب Herbicide degradation experiments

التجهيزات العملية المستخدمة في هذا البحث قد تم وصفها بالتفصيل في مكان اخر [4]. اجريت سلسلة من تجارب التحلل الضوئي لكل مبيد اعشاب باستخدام مفاعل كيميائي ضوئي يعمل بنمط اعادة التدوير باستخدام 250 ml وبمعدل تدفق 5.63 lmin^{-1} (الشكل 1). يحتوي المفاعل الكيميائي الضوئي على خلية امواج فوق صوتية (150 cm^3) تتكون من مجس موجات فوق صوتية (500 W, 20 kHz, Cole Parmer). تم التحكم في درجة حرارة خلية الامواج فوق الصوتية بالماء ومصباح اشعة فوق بنفسجية (15 W, 352 nm, Cole Parmer). تم سحب عينات عند فترات زمنية للتحلل مختلفة وذلك لتحليل تركيز كلا من atrazine وalachlor باستخدام HPLC.

اثناء اخذ العينات اخذت كافة الرعاية لسحب حجم اقل بنسبة 10% من الحجم الكلي. تم فلتره العينات بعد جمعها قبل التحليل. تم تحليل الطلب على الاكسجين الكيميائي (COD) باستخدام الطرق القياسية وانايبب قياسية [27].

3.2 الشبكة العصبية الاصطناعية Artificial neural network

جمعت الخلايا العصبية في طبقات مختلفة ووصلت مع بعضها البعض طبقا للبنية المعمارية المعطاة. كما في الطبيعة، تحدد وظيفة الشبكة العصبية من خلال التوصيلات بين العناصر (الخلايا العصبية)، كل توصيلة بين خليتين عصبيتين تمتلك معامل وزن مرتبط بها. تركيب الشبكة القياسي لوظيفة تقريبية هي طبقات الادراك الحسي المتعددة (او شبكة التغذية الامامية).

غالبا ما تمتلك شبكة التغذية الامامية على طبقة خفية واحدة او اكثر من الخلايا العصبية ذات شكل حرف C (sigmoid) يتبعها طبقة خارجية من خلايا عصبية خطية. الطبقات المتعددة للخلايا العصبية مع وظائف تحويل غير خطية تسمح للشبكة بان تتعلم العلاقات الخطية والغير خطية بين متجهات الادخال والايخراج. تسمح طبقة الاخراج الخطية للشبكة بانتاج قيم خارج المدى من -1 إلى +1 [21]. الرمز المناسب للشبكة يستخدم في شبكات الطبقتين [28]. عدد الخلايا العصبية في طبقات الادخال والايخراج تعطى على التوالي بواسطة عدد متغيرات الادخال والايخراج في العملية تحت الدراسة. في هذا البحث العلمي افترضت تغذية امامية وطبقة ادخال تحتوي على تسعة متغيرات (زمن التفاعل، و pH، وتركيز مبيد الاعشاب، والتلوث،



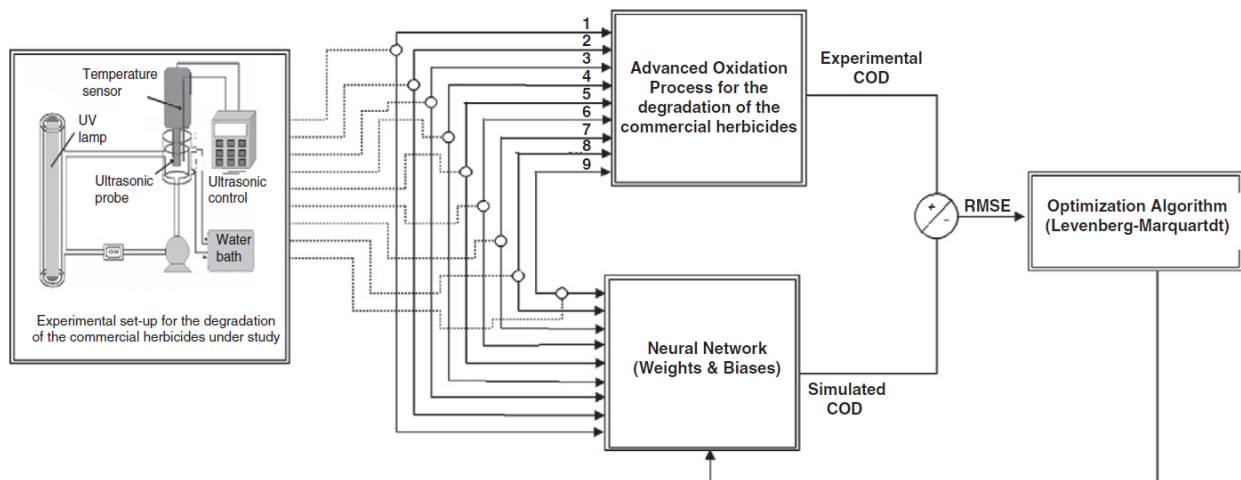
والامواج فوق الصوتية، وشدة ضوء الاشعة فوق البنفسجية، $[TiO_2]_0$ ، و $[K_2S_2O_8]_0$ والاشعاع الشمسي) وتحتوي طبقة الاخراج على متغير واحد هو (COD). من الصعب تحديد العدد الافضل للخلايا العصبية في الطبقات الخفية n_s ، وتعتمد على نوع وتعقيد المهمة. يتم تحديد هذا العدد في العادة بشكل متكرر. كل خلية عصبية في الطبقة الخفية تمتلك انحياز b (قيمة حرجة threshold)، والتي تضاف لوزن المدخلات لتشكيل الخلية العصبية n (المعادلة (1)). هذا المجموع، n ، هو دالة التحويل f .

$$n_1 = Wi_{(1,1)}In_1 + Wi_{(1,2)}In_2 + \dots + Wi_{(1,k)}In_k + b_1 \quad (1)$$

المعاملات المرتبطة مع الطبقة الخفية تكون مجمعة في مصفوفة Wi (الاوزان) و b_1 (الانحيازات). تحسب طبقة الاخراج المجموع الوزني للإشارات المقدمة من خلال الطبقة الخفية، والمعاملات المرتبطة بمجموعة في مصفوفات W_0 و b_2 . باستخدام ترميز المصفوفة، فان مخرجات الشبكة يمكن ان تعطى بالمعادلة (2):

$$Out = g(W_0 \times f(Wi \times In + b_1) + b_2) \quad (2)$$

طبقة الخلايا العصبية الخفية قد تستخدم أي دالة تحويل مشتقة لتوليد مخرجاتها. في هذا البحث، استخدمت hyperbolic tangent sigmoid transfer function (TANSIG) على طبقة خفية مع 9 خلايا عصبية ودالة تحويل خطية (PURELIN) linear transfer function على طبقة الاخراج لـ f و g على التوالي [29]. يعدل النظام الاوزان للتوصيلات الداخلية لتقليل الاخطاء بين شبكة الاخراج والاخراج المستهدف، والذي يمكن تلخيصه على النحو التالي: في البداية خذ مجموعة من الاعداد العشوائية كقيم ابتدائية للأوزان W والانحياز b ،



الشكل 1. المخطط المعماري للشبكة لقيم COD والطريقة المستخدمة لتعليم الشبكة العصبية.

ومن ثم احسب مخرج كل الخلايا العصبية في كل طبقة، مع البدء بطبقة الادخال باستخدام البرنامج التالي:

$$f = TANSIG(W_i * In_k + b1_s) \quad (3)$$

$$f = \frac{2}{1 + \exp[-2*(W_i * In_k + b1_s)]} - 1 \quad (4)$$

$$g = PURELIN(W_o * f + b2_l) \quad (5)$$

$$g = Out_l \quad (6)$$

إذا اعتبرنا دوال التحويل، فإن المعادلة (2) يمكن التعبير عنها على النحو التالي:

$$Out_l = PURELIN\{W_o \times [TANSIG(W_i \times In_k + b1_s)] + b2_l\} \quad (7)$$

حيث s هي عدد الخلايا العصبية في الطبقة الخفية ($S = 9$)، و k هي عدد الخلايا العصبية في طبقة الادخال ($K = 9$)، و l هي عدد الخلايا العصبية في طبقة الاخراج ($l = 1$)، و W_i و W_o و $b1_s$ و $b2_l$ هي الاوزان والانحيازات على التوالي. المعادلة (3) ليست معقدة لانها تتكون من عمليات حسابية بسيطة. لهذا



فانه يمكن ان تستخدم لتطبيقات التقدير على الانترنت للعمليات الصناعية. في هذا البحث، شبكات عصبية اصطناعية متعددة الطبقات امامية التغذية مع طبقة خفية واحدة استخدمت لكافة مجموعات البيانات. تم الحصول على مجموعات قاعدة البيانات من Bahena واخرون [4]. تم تدريب ANN باستخدام برنامج Matlab مع صندوق ادوات ANN.

4.2 تعليم الشبكة العصبية Neural network learning

تعرف خوارزمية التعليم (او التدريب) على انه طريقة تحتوي على معاملات للشبكة قابلة للتعديل (الاوزان والانحيازات)، لتقليل دالة الخطأ (والتي تكون في العادة دالة تربيعية) بين مخرجات الشبكة، لمجموعة من المدخلات المعطاة، والمخرجات الصحيحة (والمعروفة بالفعل). اذا استخدمت اللاخطية السلسلة، فان ميل دالة الخطأ يمكن ان يحسب بواسطة طريقة الانتشار الخلفي الكلاسيكي [30]. لتحديد افضل خوارزمية تدريب بالانتشار الخلفي، تم دراسة عشرة خوارزميات للانتشار الخلفي. بالإضافة إلى استخدام خمسة خلايا عصبية في الطبقة الخفية لكل خوارزميات الانتشار الخلفي. يوضح الجدول 1 مقارنة لمختلف خوارزميات تدريب الانتشار الخلفي. خوارزمية التدريبي Levenberg–Marquardt للانتشار الخلفي قد يمتلك خطأ جذر متوسط المربع بمقدار صغير (RMSE) root mean square error أو على الجانب الاخر، وجدنا ان التدريب باستخدام خوارزمية Levenberg–Marquardt يمكن ان يشتغل بسلاسة في الكمبيوتر بمواصفات ذاكرة موسعة منخفضة (EMS) expanded memory specification، وزمن التدريب اسرع من خوارزميات الانتشار الخلفي الاخرى. لان خوارزمية Levenberg–Marquardt تم تصميمه للوصول إلى سرعة تدريب من الرتبة الثانية بدون الحاجة لحساب مصفوفة Hessian. عندما يكون لدالة الاداء شكل مجموع المربعات (كما هو الحال في تدريب شبكات التغذية الامامية)، فان مصفوفة Hessian يمكن تقريبها على النحو التالي:

$$H = J^T J \quad (8)$$

ويمكن حساب الميل على النحو التالي:



$$g = J^T e \quad (9)$$

حيث z هي مصفوفة Jacobian التي تحتوي على اول مشتقات اخطاء الشبكة بالنسبة للأوزان والانحيازات، و e هي متجه اخطاء الشبكة. يمكن حساب مصفوفة Jacobian من خلال تقنية الانتشار الخلفي القياسية والتي هي اقل تعقيدا من حساب مصفوفة Hessian. تستخدم خوارزمية Levenberg–Marquardt في الشبكة التالية كتحديث:

$$X_{k+1} = X_k - [J^T J + \mu I]^{-1} J^T e \quad (10)$$

عندما يكون المقدار القياسي μ يساوي صفر، فان هذه تكون طريقة نيوتن، باستخدام تقريب مصفوفة Hessian. عندما تكون μ كبيرة، فان هذا يصبح ميل تناقصي بخطوة صغيرة الحجم. تعتبر طريقة نيوتن اسرع واكثر دقة بالقرب من ادنى خطأ، لذا فان الهدف هو الانتقال نحو طريقة نيوتن بأسرع ما يمكن [31، [32]، لذا فان μ تتناقص بعد كل خطوة ناجحة (التناقص في دالة الاداء) وتزداد فقط عندما تعمل الخطوة التجريبية على زيادة دالة الاداء. في هذا السياق، تقل دالة الاداء دائما عند كل تكرار للخوارزمية [33]. لذا تحت تأثير هذا الدافع تم اعتبار خوارزمية Levenberg–Marquardt كخوارزمية تدريب في الدراسة الحالية.

على أي حال، تم قياس اداء نموذج ANN بشكل احصائي من خلال جذر متوسط المربع root mean square error (RMSE) ومعامل الارتداد، والذي تم حسابه مع القيم العملية وتوقعات الشبكة.

الجدول 1 مقارنة لعشرة خوارزميات انتشار خلفي مع خمسة خلايا عصبية في الطبقة المخفية

Backpropagation algorithm	Function	Root mean square error (RMSE)	Epoch	Correlation coefficient (R ²)	Best linear equation
Levenberg–Marquardt backpropagation	trainlm	0.00235001	1000	0.990	Y = 0.990X + 0.306
Batch gradient descent	traingd	0.01657930	2000	0.988	Y = 0.986X + 0.927
Batch gradient descent with momentum	traingdm	0.01982300	2000	0.987	Y = 0.988X + 0.837
Polak–Ribiere conjugate gradient backpropagation	traingcp	0.03267010	2000	0.979	Y = 0.957X + 2.53
Scaled conjugate gradient backpropagation	traingcg	0.48619601	2000	0.974	Y = 1.020X – 0.783
BFGS quasi-Newton backpropagation	trainbfg	0.44944900	2000	0.971	Y = 0.982X + 1.23
Powell–Beale conjugate gradient backpropagation	traingb	0.50820200	2000	0.965	Y = 0.960X + 2.03
One step secant backpropagation	trainoss	0.02753301	2000	0.782	Y = 0.617X + 45.3
Fletcher–Reeves conjugate gradient backpropagation	traingf	0.01756320	2000	0.725	Y = 0.425X + 34.8
Variable learning rate backpropagation	traingdx	0.02039630	2000	0.718	Y = 0.386X + 38



استخدمت هذه الحسابات كمعيار لملائمة وكفاية النموذج (انظر الشكل 1)، والتي تم الحصول عليها على النحو التالي:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\left(\sum_{q=1}^Q (y_{q,pred} - y_{q,exp})^2\right)}{Q}} \quad (11)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{q=1}^Q (y_{q,pred} - y_{q,exp})^2}{\sum_{q=1}^Q (y_{q,exp} - y_m)^2} \quad (12)$$

حيث Q هي عدد نقاط البيانات، و $y_{q,pred}$ هي توقعات الشبكة، و $y_{q,exp}$ هي الاستجابة العملية، و y_m هي متوسط القيم الحقيقية، و q هي مؤشر البيانات.

بناء على ذلك، استخدم $RMSE$ كدالة خطأ تعمل على قياس اداء الشبكة. لهذا فان الشبكة التي تمتلك اقل $RMSE$ و اعلى R^2 تم اختيارها كأفضل نموذج ANN.

5.2 تطوير نموذج الشبكة العصبية الاصطناعية ANN model development

حيث اننا قد ذكرنا من قبل ان متغيرات الادخال لـ ANN كانت زمن التفاعل، و pH ، وتركيز مبيد الاعشاب والتلوث، والامواج فوق الصوتية وشدة الضوء فوق البنفسجي، و $[TiO_2]_0$ ، و $[K_2S_2O_8]_0$ ، والاشعاع الشمسي والطلب على الاكسجين الكيميائي كان هو بمثابة الاستجابة العملية او متغير الاخراج. خصائص متغيرات الادخال والايخراج موضحة في الجدول 2. تحدد طبولوجي الشبكة العصبية الاصطناعية بواسطة عدد الطبقات، وعدد العقد في كل طبقة وطبيعة دوال التحول. ايجاد افضل طبولوجي لـ ANN هو في الاغلب الخطوة الاكثر اهمية في تطوير النموذج [20].

لكي يتم تحديد افضل عدد من الخلايا العصبية في الطبقة المخفية، استخدمت سلسلة من الطوبولوجيات بحيث تم تغيير عدد الخلايا العصبية من 1 إلى 10. تم تدريب كل الشبكات العصبية الاصطناعية باستخدام خوارزمية الانتشار الخلفي (خوارزمية scaled conjugate gradient). تدريب الشبكة هي عملية التي فيها وزن وانحياز التوصيل على الشبكة العصبية الاصطناعية تتكيف من خلال عملية متصلة لمحاكاة البيئة التي تحيط بالشبكة. الهدف الاساسي للتدريب هو تقليل دالة الخطأ (RMSE) بالبحث عن مجموعة اوزان وانحيازات التوصيل التي تجعل الشبكة العصبية الاصطناعية تنتج الخرج الذي يساوي أو قريب للقيم المستهدفة. بمعنى ان خوارزمية الانتشار الخلفي تقلل RMSE بين قيم الخرج الملحوظة والمتوقعة في طبقة الاخراج، من خلال طورين. في الطور الامامية تكون اشارات معلومات الادخال الخارجية عند خلايا الادخال العصبية التي تنتشر للأمام لحساب اشارة معلومات الاخراج عن خلايا الاخراج العصبية.

في الطور الخلفي تم اجراء بعض التعديلات على شدة التوصيل، بالاعتماد على انحياز الاختلاف في اشارات المعلومات الملحوظة والمتوقعة عند خلايا الاخراج العصبية [34].

قواعد بيانات عملية بواسطة Bahena وآخرون [4]، تحتوي على قيم COD مختلفة، تم الحصول عليها من المفاعل الكيميائي الضوئي لتحلل مبيدات الاعشاب التجارية المستخدمة في هذه الدراسة. تم الحصول على مجموعة البيانات العملية عند معاملات مختلفة: زمن التفاعل (0 – 400)، وقيمة pH للمحلول (1 – 5)، وتركيز مبيد الأعشاب (0.1540–0.3090 mM)، والتلوث (0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9 لكل ملوث على التوالي (5 ملوثات هي:alachor و chlorobromuron و atrazine و alazine و gesaprim))، والامواج فوق الصوتية (0–20 kHz)، وشدة ضوء الأشعة فوق البنفسجية (0–352 nm)، والتركيز الابتدائي لـ TiO_2 (0–300 mg/l)، والتركيز الابتدائي لـ $K_2S_2O_8$ (0–13mM) وشدة الاشعاع الشمسي (0–820W/m²). بعد مرور ساعتين من البدء تم تجميع البيانات لمدة 4 ساعات. اجريت التجربة عند شروط ابتدائية مختلفة مع تكرارين على الاقل. وبهذا تم الحصول على قاعدة بيانات مكونة من 275 عينة. هذه البيانات كانت كافية لتدريب وفحص نموذج الشبكة العصبية الاصطناعية ANN. خلاصة معاملات التشغيل موضحة في الجدول 2. قسمت مجموعة البيانات إلى مجموعات فرعية للتدريب والتحقق والفحص، تحتوي كل منها على 138، و69، و69 عينة، على التوالي. مجموعتي التحقق والفحص لتقييم التحقق وقوة نموذج الشبكات اختبرت بشكل عشوائي من البيانات العملية. حيث ان دالة التحويل المستخدمة في الطبقة المخفية كانت على شكل حرفي سي (sigmoid)، فان كل العينات يجب ان يسوى (normalized) في المدى من



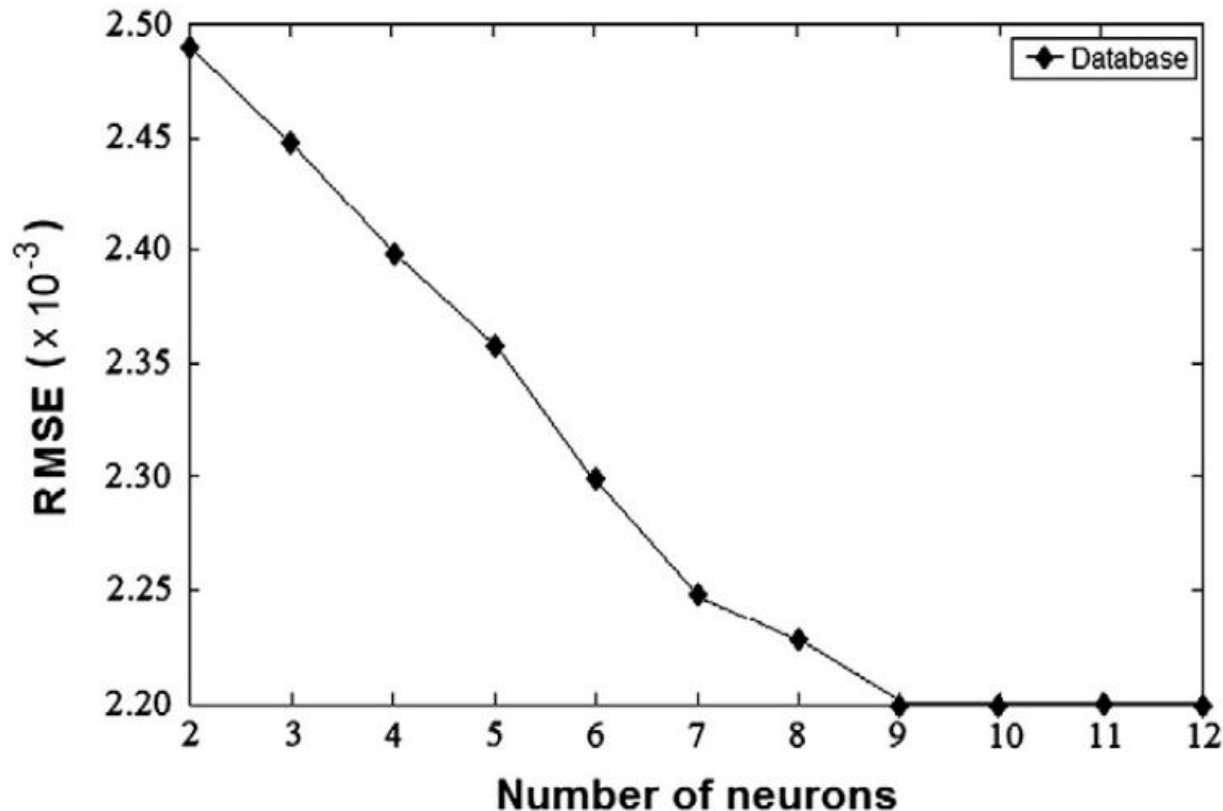
0.1 – 0.9 [10]. بهذا فان كل مجموعات بيانات الادخال X_i (من مجموعات التدريب والتحقق والفحص) تم تحجيمها للقيمة الجديدة x_i على النحو التالي:

$$x_i = 0.8 \left(\frac{X_i - X_{min}}{X_{max} - X_{min}} \right) + 0.1 \quad (13)$$

تم الحصول على الطوبولوجي النهائي بعد 105 تشغيل لـ 1000 تكرار بدأت من اوزان ابتدائية عشوائية. لكل تشغيل، تم حساب خطأ الشبكة مقابل عدد الخلايا العصبية في الطبقة المخفية. يشرح الشكل 2 اخطاء الشبكة مقابل عدد الخلايا العصبية في الطبقة المخفية. لقر وجد ان اداء الشبكة يستقر بعد تضمين 9 خلايا عصبية على الطبقة المخفية (9 – 9 – 1). بالاعتماد على تقريب دالة RMSE، استخدم عدد 9 من الخلايا العصبية في الطبقة المخفية وشبكة عصبية ثلاثية الطبقات امامية التغذية بانتشار خلفي لنمذجة العملية الموضحة في الشكل 3.

الجدول 2. خصائص متغيرات الادخال والايخراج لنموذج ANN.

Variable input layer	Range
Reaction time (min)	0–480
pH	1–5
Initial concentration of herbicide (mM)	0.1540–0.3090
Contaminant	0.1–0.9
US Ultrasound (Khz)	0–20
UV light intensity (nm)	0–352
[TiO ₂] _o (mg/L)	0–300
[K ₂ S ₂ O ₈] _o (mM)	0–13
SR solar radiation (W/m ²)	0–820



الشكل 2. تأثير عدد الخلايا العصبية في الطبقة المخفية على اداء الشبكة العصبية.

3. النتائج والمناقشة Results and discussion

1.3 نموذج الشبكة العصبية المقترح

وجد ان شبكة عصبية بتسعة خلايا عصبية في الطبقة المخفية (تتضمن على 100 معامل: 90 للوزان و10 للانحيازات) هي الاكثر كفاءة في توقع الطلب على الاكسجين الكيميائي. يوضح الشكل 4 مقارنة بين قيم COD العملية والنتيجة عن المحاكاة باستخدام كل البيانات المتوفرة.

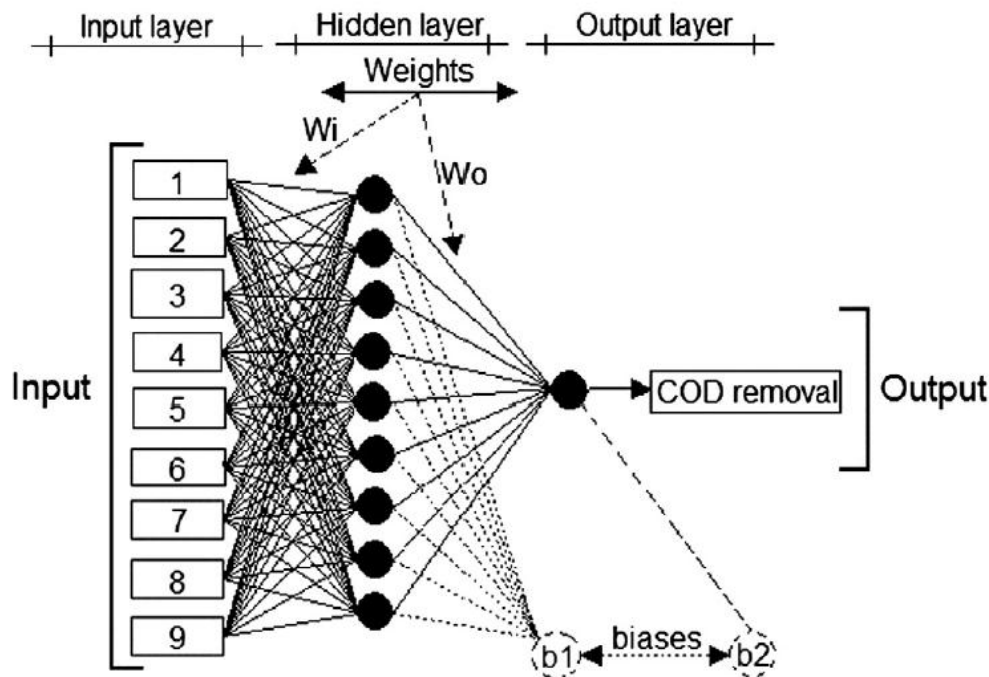
تمت مقارنة البيانات العملية (COD_{EXP}) والبيانات الناتجة عن المحاكاة (COD_{ANN}) بشكل مرضي من خلال نموذج الانحدار الخطي (linear regression model) ($COD_{ANN} = a + bCOD_{EXP}$) وتم الحصول على معامل انحدار $R^2 = 0.9913$. طبقا لـ Verma وآخرون [35, 36] لتحقيق الفحص

الاحصائي للتقاطع والميل، فان القيمة العلوية والقيمة السفلية للتقاطعات يجب ان تحتوي على صفر والقيمة العلوية والقيمة السفلية للميل يجب ان تحتوي على 1.

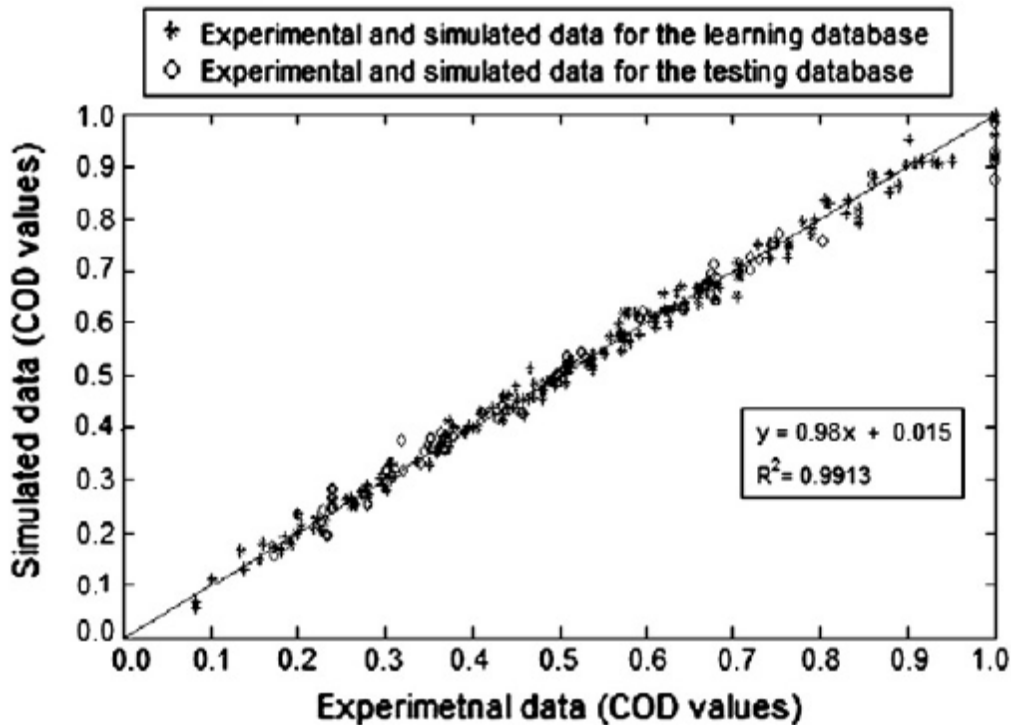
يوضح الجدول 3 حدود مؤشرات الفحص مع الميل يحتوي على 1 والتقاطع يحتوي على صفر. ونتيجة لذلك فان النموذج المفترض اجتاز الفحص مع مستوى ثقة وصل إلى 99%. هذا الفحص مع المعلومات اعلاه تضمن ان نموذج ANN يمتلك مستوى مرضي من الثقة.

يقدم الجدول 4 المعاملات التي تم الحصول عليها (Wi, Wo, b1, and b2) لأفضل مائة للخلايا العصبية التسعة في الطبقة المخفية. استخدمت هذه المعاملات في النموذج المفترض لمحاكاة قيم COD. ونتيجة لذلك فان نموذج ANN المفترض يتبع المعادلة (14):

$$COD = \sum_{s=1}^S \left[W_{o(1,s)} \left(\frac{2}{1 + \exp\left(-2 \left(\sum_{k=1}^K (W_{i(s,k)} I_{n(k)} + b_{1(s)} \right)\right)} - 1 \right) \right] + b_{2(o)} \quad (14)$$



الشكل 3. نموذج للتنبؤ بقيم COD



الشكل 4. مقارنة للقيم العملية والمتوقعة من نموذج ANN للطلب على الاكسجين الكيميائي (Chemical COD Oxygen Demand)

حيث s هي عدد الخلايا العصبية في الطبقة المخفية ($S = 9$)، و k هي عدد المدخلات ($K = 9$) و W و b هما الوزن والانحياز على التوالي.

فيما يلي (المعادلة (15)) تعطي ازالة الطلب على الاكسجين الكيميائي (COD) اثناء تحلل مبيد الاعشاب التجاري *alazine* و *gesaprim* مع الاوزان والانحيازات. على أي حال، قبل تطوير معادلة COD قمنا بتعريف المتغيرات التالية:



- $V_1 = \text{Reaction time}$
 $V_2 = \text{pH}$
 $V_3 = \text{Herbicide concentration}$
 $V_4 = \text{Conta minat}$
 $V_5 = \text{US Ultrasound}$
 $V_6 = \text{UV Light Intensity}$
 $V_7 = [\text{TiO}_2]_0$
 $V_8 = [\text{K}_2\text{S}_2\text{O}_8]_0$
 $V_9 = \text{SR Solar radiation}$

$$\begin{aligned}
 \text{COD} = 2 & \left[\frac{W_{o(1,1)}}{1 + e^{X1}} + \frac{W_{o(1,2)}}{1 + e^{X2}} + \frac{W_{o(1,3)}}{1 + e^{X3}} + \frac{W_{o(1,4)}}{1 + e^{X4}} + \frac{W_{o(1,5)}}{1 + e^{X5}} + \frac{W_{o(1,6)}}{1 + e^{X6}} + \frac{W_{o(1,7)}}{1 + e^{X7}} + \frac{W_{o(1,8)}}{1 + e^{X8}} + \frac{W_{o(1,9)}}{1 + e^{X9}} \right] \dots \quad (15) \\
 & - (W_{o(1,1)} + W_{o(1,2)} + W_{o(1,3)} + W_{o(1,4)} + W_{o(1,5)} + W_{o(1,6)} + W_{o(1,7)} + W_{o(1,8)} + W_{o(1,9)}) + b2_{(1)}
 \end{aligned}$$

حيث

$$X1 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(1,1)}V_1 + W_{i(1,2)}V_2 + W_{i(1,3)}V_3 \dots \\ + W_{i(1,4)}V_4 + W_{i(1,5)}V_5 + W_{i(1,6)}V_6 \dots \\ + W_{i(1,7)}V_7 + W_{i(1,8)}V_8 + W_{i(1,9)}V_9 + b1_{(1)} \end{array} \right) \quad (16)$$

$$X2 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(2,1)}V_1 + W_{i(2,2)}V_2 + W_{i(2,3)}V_3 \dots \\ + W_{i(2,4)}V_4 + W_{i(2,5)}V_5 + W_{i(2,6)}V_6 \dots \\ + W_{i(2,7)}V_7 + W_{i(2,8)}V_8 + W_{i(2,9)}V_9 + b1_{(2)} \end{array} \right) \quad (17)$$

$$X3 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(3,1)}V_1 + W_{i(3,2)}V_2 + W_{i(3,3)}V_3 \dots \\ + W_{i(3,4)}V_4 + W_{i(3,5)}V_5 + W_{i(3,6)}V_6 \dots \\ + W_{i(3,7)}V_7 + W_{i(3,8)}V_8 + W_{i(3,9)}V_9 + b1_{(3)} \end{array} \right) \quad (18)$$

$$X4 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(4,1)}V_1 + W_{i(4,2)}V_2 + W_{i(4,3)}V_3 \dots \\ + W_{i(4,4)}V_4 + W_{i(4,5)}V_5 + W_{i(4,6)}V_6 \dots \\ + W_{i(4,7)}V_7 + W_{i(4,8)}V_8 + W_{i(4,9)}V_9 + b1_{(4)} \end{array} \right) \quad (19)$$

الجدول 3 تقاطع وميل الفحص الاحصائي



COD

(Chemical Oxygen Demand)

a_{lower}	a_{upper}
– 0.0008	0.0304
b_{lower}	b_{upper}
0.9503	1.0011

الجدول 4 الاوزان والانحيازات لنموذج ANN

Wi (s,k)	–0.3166 (1,1)	0.2236 (1,2)	7.2842 (1,3)	2.0881 (1,4)	1.811 (1,5)	3.3471 (1,6)	–1.0447 (1,7)	1.7596 (1,8)	2.0459 (1,9)
	–0.5515 (2,1)	–0.9564 (2,2)	–3.8864 (2,3)	2.0139 (2,4)	–2.867 (2,5)	–1.2945 (2,6)	–0.45 (2,7)	–6.4122 (2,8)	2.1782 (2,9)
	1.4092 (3,1)	–8.0291 (3,2)	–12.0342 (3,3)	15.7374 (3,4)	–3.313 (3,5)	–0.2425 (3,6)	–3.6828 (3,7)	11.6702 (3,8)	–3.6556 (3,9)
	–0.7383 (4,1)	–0.1696 (4,2)	–3.2518 (4,3)	1.2309 (4,4)	–0.3279 (4,5)	–1.0313 (4,6)	–0.541 (4,7)	–2.8458 (4,8)	1.6688 (4,9)
	50.505 (5,1)	–0.1108 (5,2)	6.7242 (5,3)	1.7719 (5,4)	–1.2484 (5,5)	–3.1512 (5,6)	1.6575 (5,7)	–1.4106 (5,8)	–3.0969 (5,9)
	–1.3825 (6,1)	–0.4662 (6,2)	–5.9643 (6,3)	5.8058 (6,4)	0.9334 (6,5)	–2.8553 (6,6)	–1.6653 (6,7)	–3.5912 (6,8)	2.8908 (6,9)
	–29.0201 (7,1)	0.7569 (7,2)	0.4108 (7,3)	0.2687 (7,4)	–0.086 (7,5)	–0.6303 (7,6)	1.0245 (7,7)	–0.7546 (7,8)	–7.7876 (7,9)
	–3.7356 (8,1)	0.0012 (8,2)	0.9109 (8,3)	–0.6673 (8,4)	–0.7864 (8,5)	–1.2263 (8,6)	1.2131 (8,7)	–1.3882 (8,8)	–0.1462 (8,9)
	–5.5039 (9,1)	1.1252 (9,2)	3.23 (9,3)	–2.7131 (9,4)	–0.7353 (9,5)	0.2545 (9,6)	1.9287 (9,7)	–3.0638 (9,8)	1.139 (9,9)
Wo	0.6031	–5.9361	0.6256	7.0453	–6.087	–0.6846	5.127	1.7649	–0.6662
b1 (s)	0.6031 (1,1)	–5.9361 (1,2)	0.6256 (1,3)	7.0453 (1,4)	–6.087 (1,5)	–0.6846 (1,6)	5.127 (1,7)	1.7649 (1,8)	–0.6662 (1,9)
	5.6355 (2)								
	–11.9996 (3)								
	2.6748 (4)								
	–2.4115 (5)								
	1.2615 (6)								
	1.4984 (7)								
	–0.0617 (8)								
	–0.6785 (9)								
b2 (L)	12.9598 (1)								



$$X5 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(5,1)}V_1 + W_{i(5,2)}V_2 + W_{i(5,3)}V_3 \dots \\ + W_{i(5,4)}V_4 + W_{i(5,5)}V_5 + W_{i(5,6)}V_6 \dots \\ + W_{i(5,7)}V_7 + W_{i(5,8)}V_8 + W_{i(5,9)}V_9 + b1_{(5)} \end{array} \right) \quad (20)$$

$$X6 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(6,1)}V_1 + W_{i(6,2)}V_2 + W_{i(6,3)}V_3 \dots \\ + W_{i(6,4)}V_4 + W_{i(6,5)}V_5 + W_{i(6,6)}V_6 \dots \\ + W_{i(6,7)}V_7 + W_{i(6,8)}V_8 + W_{i(6,9)}V_9 + b1_{(6)} \end{array} \right) \quad (21)$$

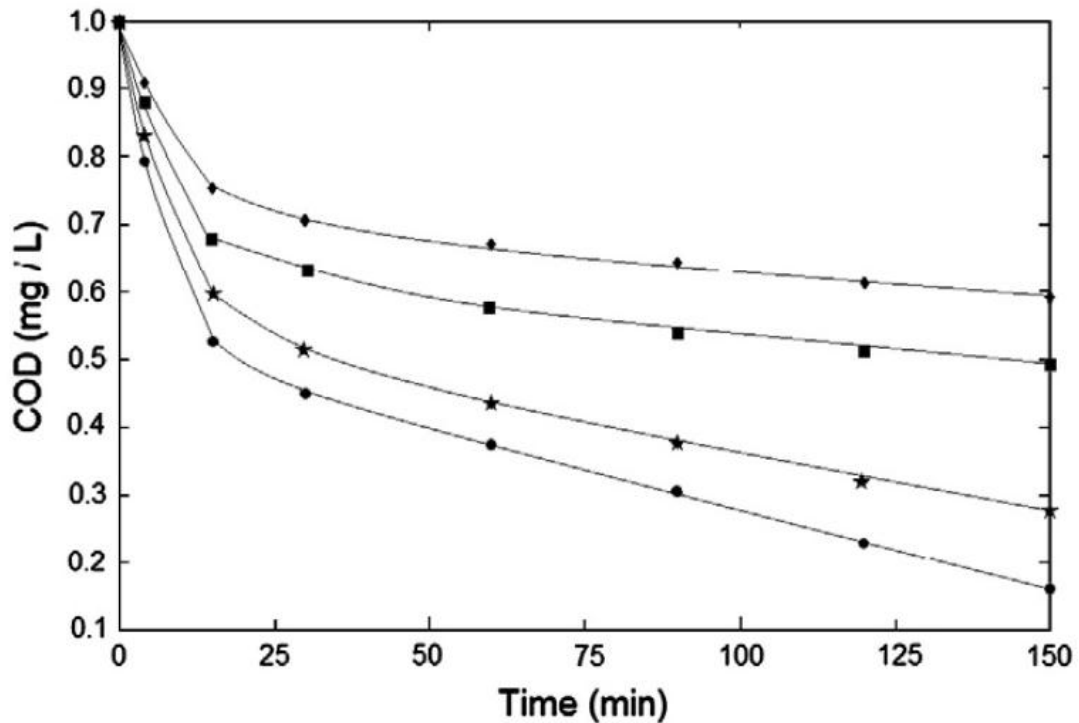
$$X7 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(7,1)}V_1 + W_{i(7,2)}V_2 + W_{i(7,3)}V_3 \dots \\ + W_{i(7,4)}V_4 + W_{i(7,5)}V_5 + W_{i(7,6)}V_6 \dots \\ + W_{i(7,7)}V_7 + W_{i(7,8)}V_8 + W_{i(7,9)}V_9 + b1_{(7)} \end{array} \right) \quad \diamond (22)$$

$$X8 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(8,1)}V_1 + W_{i(8,2)}V_2 + W_{i(8,3)}V_3 \dots \\ + W_{i(8,4)}V_4 + W_{i(8,5)}V_5 + W_{i(8,6)}V_6 \dots \\ + W_{i(8,7)}V_7 + W_{i(8,8)}V_8 + W_{i(8,9)}V_9 + b1_{(8)} \end{array} \right) \quad (23)$$

$$X9 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(9,1)}V_1 + W_{i(9,2)}V_2 + W_{i(9,3)}V_3 \dots \\ + W_{i(9,4)}V_4 + W_{i(9,5)}V_5 + W_{i(9,6)}V_6 \dots \\ + W_{i(9,7)}V_7 + W_{i(9,8)}V_8 + W_{i(9,9)}V_9 + b1_{(9)} \end{array} \right) \quad (24)$$

2.3 التحقق من نموذج ANN المفترض

يصور كلا من الشكلين 5 و6 قدرة النماذج على توقع الطلب على الاكسجين الكيميائي لمبيدات الاعشاب التجارية *alazine* و *gesaprim* عند معاملات مختلفة. تقارن هذه الاشكال نتائج المحاكاة مع البيانات العملية لقواعد بيانات الفحص. من الممكن ان نرى ان النموذج ينجح في توقع النتائج العملية. كما هو متوقع فقد تم الحد من الطلب على الاكسجين الكيميائي الكلي بنسبة تصل إلى 93% و86% بواسطة نموذج تحلل كلا من *Alazine* و *Gesaprim* على التوالي، وهذا متفق مع البيانات العملية التي تم الحصول عليها من عملية التحفيز الضوئي والصوتي والتي تبدو انها طريقة التحلل الاكثر تأثيرا. يبين هذا اهمية الشبكة العصبية الاصطناعية لمحاكاة الطلب على الاكسجين الكيميائي لمبيدات الاعشاب التجارية *alazine* و *gesaprim*.



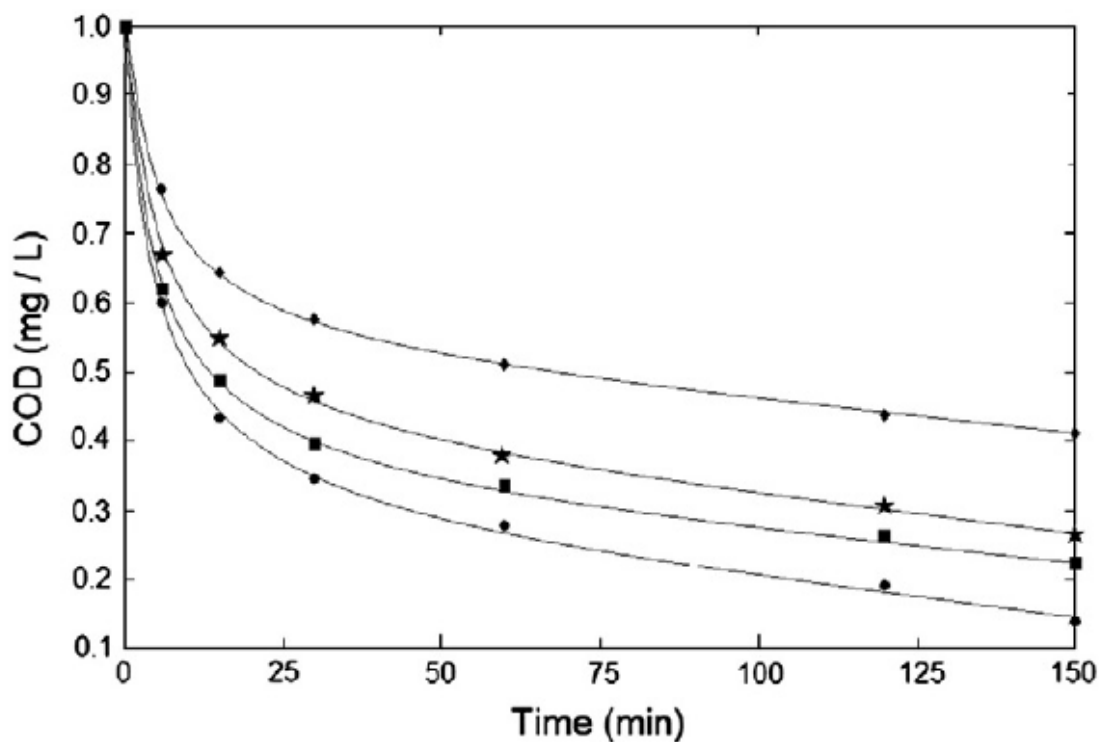
الشكل 5 البيانات العملية ومنحنى المحاكاة الناتج من نموذج COD المفترض للحد من الطلب على الاكسجين الكيميائي لمبيد الاعشاب التجاري alazine. \diamond التحلل الضوئي بالأشعة فوق البنفسجية و* التحلل الصوتي ، + التحفيز الضوئي، و 0 التحفيز الضوئي والصوتي، والخط المتصل هو المتوقع من النموذج.

لا يعتبر هذا النموذج معقدا لان المحاكاة تتم من خلال عملية رياضية بسيطة وعليه فانه من الممكن ان تستخدم للتخمين من خلال الانترنت للتوقع بمعاملات التحلل اثناء معالجة مبيدات الاعشاب التجارية. لهذا تم فحص الشبكة والتحقق منها بواسطة مقارنة قيم المخرجات المتوقعة مع النتائج العملية باستخدام مجموعة مستقلة من البيانات كما هو موضح في الشكلين 5 و6.

لكي يتم تقييم الاهمية النسبية لمتغيرات الادخال استخدمت عمليتي تقييم. الاولى كانت تعتمد على مصفوفة وزن الشبكة العصبية ومعادلة Garson [37]. لقد قدم معادلة تعتمد على تجزئة اوزان التوصيل:

$$I_j = \frac{\sum_{m=1}^{N_h} \left(\left(\frac{|W_{jm}^{ih}|}{\sum_{k=1}^{N_i} |W_{km}^{ih}|} \right) \times |W_{mn}^{ho}| \right)}{\sum_{k=1}^{N_i} \left\{ \sum_{m=1}^{N_h} \left(\frac{|W_{km}^{ih}|}{\sum_{k=1}^{N_i} |W_{km}^{ih}|} \right) \times |W_{mn}^{ho}| \right\}} \quad (25)$$

حيث I_{jis} هي الاهمية النسبية لمتغير الادخال j_{th} على متغير الاخراج، و N_h و N_i هما عدد المدخلات والخلايا العصبية المخفية على التوالي و W هي وزن الاتصال، والرموز العلوية 'i' و 'h' و 'o' تشير إلى خلايا الادخال والمخفية والخراج العصبية على التوالي. لاحظ ان البسط في المعادلة (25) يصف مجاميع النواتج المطلقة للأوزان لكل مدخل. والمقام في المعادلة (25) يمثل



الشكل 6 البيانات العملية ومنحنى المحاكاة الناتج من نموذج COD المفترض للحد من الطلب على الاكسجين الكيميائي لمبيد الاعشاب التجاري alazine. ◇ التحلل الضوئي بالأشعة فوق البنفسجية و * التحلل الصوتي ، و+ التحفيز الضوئي، و o التحفيز الضوئي والصوتي، والخط المتصل هو المتوقع من النموذج.



الجدول 5 الاهمية النسبية لمتغيرات الادخال.

Input variable	Importance %
Reaction time	33.49
pH	2.18
Herbicide concentration	15.66
Contaminate	7.34
US ultrasound	5.05
UV light intensity	6.12
[TiO ₂] _o	3.92
[K ₂ S ₂ O ₈] _o	15.34
SR solar radiation	10.91
Total	100

مجموع كل الاوزان المغذية في الوحدة المخفية، مع اخذ القيم المطلقة. وعليه فان المعادلة (25) يمكن ان تكتب على النحو التالي: للأهمية النسبية لزمن التفاعل:

$$\frac{\frac{|W_{i(1,1)}|}{|W_{i(1,1)}| + |W_{i(1,2)}| + \dots + |W_{i(1,9)}|} \times |W_{o(1,1)}| + \dots + \frac{|W_{i(9,1)}|}{|W_{i(9,1)}| + |W_{i(9,2)}| + \dots + |W_{i(9,9)}|} \times |W_{o(9,1)}|}{\frac{|W_{i(1,1)}|}{|W_{i(1,1)}| + \dots + |W_{i(1,9)}|} \times |W_{o(1,1)}| + \dots + \frac{|W_{i(1,2)}|}{|W_{i(1,1)}| + \dots + |W_{i(1,9)}|} \times |W_{o(9,1)}| + \dots + \frac{|W_{i(1,8)}|}{|W_{i(1,1)}| + \dots + |W_{i(1,9)}|} \times |W_{o(1,1)}| + \dots + \frac{|W_{i(9,9)}|}{|W_{i(9,1)}| + \dots + |W_{i(9,9)}|} \times |W_{o(1,9)}|} \quad (26)$$

بنفس الطريقة، يمكننا ان نجد الاهمية النسبية لمعاملات الادخال الاخرى. على أي حال في هذه الحالة لم نقم بذلك لان ذلك سيجعل هذا المقال كبيرا جدا.

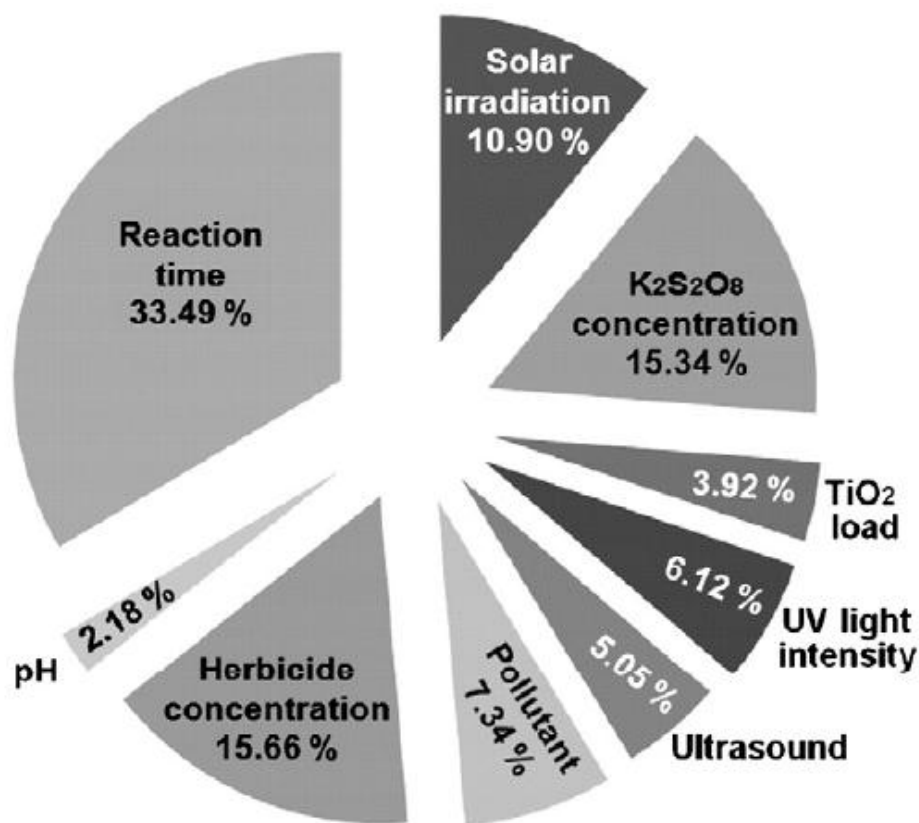
يبين كلا من الجدول 5 والشكل 7 الاهمية النسبية لمتغيرات الادخال التي تم احتسابها بواسطة المعادلة (25). كل المتغيرات لها تأثير قوي على تحلل مبيد الاعشاب بدلالة التخلص من الطلب على الاكسجين الكيميائي. على أي حال، وكما هو متوقع، فان زمن التفاعل بأهمية نسبية بمقدار 33.49% يبدو انها العامل الاكثر تأثيرا في عملية التحلل.

4.3 الاداء الافضل بواسطة الشبكة العصبية الاصطناعية العكوسة (ANNi)

طبقا لنموذج ANN (المعادلة 15)، فانه من الممكن ان تتم محاكاة التخلص من الطلب على الاكسجين الكيميائي اثناء تحلل المبيد التجاري alazine و gesaprim ، عندما تكون معاملات الادخال معروفة بشكل جيد. حيث اننا وجدنا ان زمن التفاعل هو المعامل الاكثر اهمية. لهذا فانه من المهم ان نعرف ما هو زمن

التفاعل الافضل المطلوب في هذه العملية للطلب على الاكسجين الكيميائي المطلوب. نتيجة لذلك قمنا بتطوير استراتيجية لتقدير زمن التفاعل الافضل في عملية التل من الشبكة العصبية الاصطناعية العكوسة (ANNi). الطريقة المفترضة (ANNi) تعكس الشبكة العصبية الاصطناعية (المعادلة (35)). لدينا المعادلة التالية التي تحسب التخلص من الطلب على الاكسجين الكيميائي اثناء عملية تحلل كلا من alazine و gesaprim .

المعلومة الاساسية (الاداء الافضل) للتخلص من الطلب على الاكسجين الكيميائي (COD) اثناء تحلل مبيد الاعشاب alazine و gesaprim ، عند التحكم في المخرجات يتطلب معرفة معاملات الادخال الافضل. يمكن اعتبار ANN المعكوسة كنموذج يعتمد على طريقة التحكم الاشرافي، عمل التحكم يتم من خلال ايجاد معاملات الادخال الغير معروفة من خلال حل مسألة التفضيل للمخرج المطلوب.



الشكل 7. الاهمية النسبية (%) لمتغيرات الادخال على قيمة الطلب على الاكسجين الكيميائي.

تشكلت الشبكة العامة (الموضحة في الشكل 3) بواسطة دالة التحويل TANSIG و PURELIN . ومن ثم اعطيت المخرجات بطريقة خطوة خطوة لـ ANNi وسوف نعرضها فيما يلي لكي نتجنب أي غموض

$$COD = PURELIN \left(\sum_s \left\{ W_{o(1,s)} \cdot \left[TANSIG \left(W_{i(s,k)} \cdot \ln_{(k)} + b1_{(s)} \right) \right] \right\} + b2_{(1)} \right) \quad (27)$$

$$COD = \sum_s \left\{ W_{o(1,s)} \cdot \left[\frac{2}{1 + e^{-2 \cdot (b1_{(s)} + \sum_k W_{i(s,k)} \cdot \ln_{(k)})}} - 1 \right] \right\} + b2_{(1)} \quad (28)$$

يمكن التعبير عن المعادلة (28) مثل المعادلة (29) ومن ثم نحصل على

$$COD = b2_{(1)} - \sum_s W_{o(1,s)} + \sum_s \left[\frac{2 \cdot W_{o(1,s)}}{1 + e^{-2 \cdot (b1_{(s)} + \sum_k W_{i(s,k)} \cdot \ln_{(k)})}} \right] \quad (29)$$

في هذه الخطوة، حصلنا على الدالة التي تعتبر الأفضل للحصول على معاملات الادخال الافضل $\ln_{(k=x)}$

$$Fun(\ln_{(x)}) = b2_{(1)} - \sum_s W_{o(1,s)} + \sum_s \left[\frac{2 \cdot W_{o(1,s)}}{1 + e^{-2 \cdot (W_{i(s,k)} \cdot \ln_{(x)} + \sum_{k \neq x} W_{i(s,k)} \cdot \ln_{(k)} + b1_{(s)})}} \right] \quad (30)$$

حيث x هي قيمة زمن التفاعل المطلوب حسابه. من المهم ان نلاحظ ان هذا الحل التحليلي مع وجود خلية عصبية في نموذج الطبقة المخفية، وقد تم وصفه من قبل [38]. مع انه في هذه الحالة نموذج ANN المفترض يمتلك اكثر من خلية عصبية واحدة في الطبقة المخفية فانه من الضروري استخدام طريقة التفضيل (optimization method) [38 – 41]. استخدمنا في هذه الدراسة طريقة التفضيل لتطبيق الشبكة العصبية الاصطناعية العكوسة مع تسعة خلايا عصبية في الشبكة المخفية. اجريت عملية تفضيل معاملات الادخال بتطبيق خوارزميات Nelder–Mead المبسطة للتفضيل الغير مقيد للدوال الغير خطية [42, 43]. حاولت طريقة Nelder–Mead تقليل المتغيرات المتعددة للدالة الغير خطية باستخدام قيم الدالة فقط، بدون أي معلومات مشتقة $(f : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R})$. طريقة Nelder–Mead هي واحدة من طرق البحث المباشرة، والتي لا تستخدم انحدار عددي او تحليلي.



اجري فحصين مع بيانات مختلفة لإيجاد زمن التفاعل الافضل (t) في شروط مختلفة لشرح امكانية استخدام هذه الطريقة حول ANNi. تمت مقارنة نتائج المحاكاة مع البيانات العملية لفحص دقة ANNi. هذا الخطأ اعطي على النحو التالي:

$$Err = 100 \frac{|\dot{Exp} - Sim|}{Exp} \quad (31)$$

حالة 1. مجموعة المعاملات المتوفرة لعملية التحفيز الضوئي والصوتي لمبيد الاعشاب alazine مع $l=1$ و $s=9$ و $k=9$. الشروط العملية لهذا الفحص ولقيمة ناتج $COD = 0.138 \text{ mg/L}$ المطلوبة مع قيم الادخال، $pH = 2.3$ ، $[Alazine]_o = 0.203 \text{ mM}$ و $Alazine = 0.7$ ، والموجة فوق الصوتية $US = 20 \text{ kHz}$ ، وشدة الضوء فوق البنفسجي $UV = 352 \text{ nm}$ ، و $[TiO_2]_o = 200 \text{ mg/L}$ ، و $(t=?)$ وهو زمن التفاعل المطلوب ايجاده:

$$\begin{aligned} f(t) = & -A + \frac{2W_{o(1,1)}}{1 + e^{(X_1 + 0.6332t)}} + \frac{2W_{o(1,2)}}{1 + e^{(X_2 + 1.103t)}} + \frac{2W_{o(1,3)}}{1 + e^{(X_3 - 2.8184t)}} \dots \\ & + \frac{2W_{o(1,4)}}{1 + e^{(X_4 + 1.4766t)}} + \frac{2W_{o(1,5)}}{1 + e^{(X_5 - 101.01t)}} + \frac{2W_{o(1,6)}}{1 + e^{(X_6 + 2.765t)}} \dots \\ & + \frac{2W_{o(1,7)}}{1 + e^{(X_7 + 58.0402t)}} + \frac{2W_{o(1,8)}}{1 + e^{(X_8 + 7.4712t)}} + \frac{2W_{o(1,9)}}{1 + e^{(X_9 + 11.0078t)}} \end{aligned} \quad (32)$$

حيث



$$A = COD - b2_{(1)} + W_{o(1,1)} + W_{o(1,2)} \dots \\ + W_{o(1,3)} + W_{o(1,4)} + W_{o(1,5)} + W_{o(1,6)} \dots \\ + W_{o(1,7)} + W_{o(1,8)} + W_{o(1,9)} \quad (33)$$

$$X_1 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(1,2)} V_2 + W_{i(1,3)} V_3 + W_{i(1,4)} V_4 \dots \\ + W_{i(1,5)} V_5 + W_{i(1,6)} V_6 + W_{i(1,7)} V_7 \dots \\ + W_{i(1,8)} V_8 + W_{i(1,9)} V_9 + b1_{(1)} \end{array} \right) \quad (34)$$

$$X_2 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(2,2)} V_2 + W_{i(2,3)} V_3 + W_{i(2,4)} V_4 \dots \\ + W_{i(2,5)} V_5 + W_{i(2,6)} V_6 + W_{i(2,7)} V_7 \dots \\ + W_{i(2,8)} V_8 + W_{i(2,9)} V_9 + b1_{(2)} \end{array} \right) \quad (35)$$

$$X_3 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(3,2)} V_2 + W_{i(3,3)} V_3 + W_{i(3,4)} V_4 \dots \\ + W_{i(3,5)} V_5 + W_{i(3,6)} V_6 + W_{i(3,7)} V_7 \dots \\ + W_{i(3,8)} V_8 + W_{i(3,9)} V_9 + b1_{(3)} \end{array} \right) \quad (36)$$

$$X_4 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(4,2)} V_2 + W_{i(4,3)} V_3 + W_{i(4,4)} V_4 \dots \\ + W_{i(4,5)} V_5 + W_{i(4,6)} V_6 + W_{i(4,7)} V_7 \dots \\ + W_{i(4,8)} V_8 + W_{i(4,9)} V_9 + b1_{(4)} \end{array} \right) \quad (37)$$

$$X_5 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(5,2)} V_2 + W_{i(5,3)} V_3 + W_{i(5,4)} V_4 \dots \\ + W_{i(5,5)} V_5 + W_{i(5,6)} V_6 + W_{i(5,7)} V_7 \dots \\ + W_{i(5,8)} V_8 + W_{i(5,9)} V_9 + b1_{(5)} \end{array} \right) \quad (38)$$

$$X_6 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(6,2)} V_2 + W_{i(6,3)} V_3 + W_{i(6,4)} V_4 \dots \\ + W_{i(6,5)} V_5 + W_{i(6,6)} V_6 + W_{i(6,7)} V_7 \dots \\ + W_{i(6,8)} V_8 + W_{i(6,9)} V_9 + b1_{(6)} \end{array} \right) \quad (39)$$

$$X_7 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(7,2)} V_2 + W_{i(7,3)} V_3 + W_{i(7,4)} V_4 \dots \\ + W_{i(7,5)} V_5 + W_{i(7,6)} V_6 + W_{i(7,7)} V_7 \dots \\ + W_{i(7,8)} V_8 + W_{i(7,9)} V_9 + b1_{(7)} \end{array} \right) \quad (40)$$

$$X_8 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(8,2)} V_2 + W_{i(8,3)} V_3 + W_{i(8,4)} V_4 \dots \\ + W_{i(8,5)} V_5 + W_{i(8,6)} V_6 + W_{i(8,7)} V_7 \dots \\ + W_{i(8,8)} V_8 + W_{i(8,9)} V_9 + b1_{(8)} \end{array} \right) \quad (41)$$

$$X_9 = -2 \left(\begin{array}{l} W_{i(9,2)} V_2 + W_{i(9,3)} V_3 + W_{i(9,4)} V_4 \dots \\ + W_{i(9,5)} V_5 + W_{i(9,6)} V_6 + W_{i(9,7)} V_7 \dots \\ + W_{i(9,8)} V_8 + W_{i(9,9)} V_9 + b1_{(9)} \end{array} \right) \quad (42)$$



ومع اوزان وانحيازات في الجدول 4، يمكننا ان نحسب افضل زمن تفاعل للعملية للمخرجات المطلوبة باستخدام برنامج Matlab مع صندوق ادوات التفضيل [29]. المحاكاة بواسطة ANNi وجدت ان قيمة (t) الناتجة هي 146.72 min، بالإضافة الى انه باستخدام المعادلة (31) فان القيمة المحسوبة تمتلك خطأ بمقدار 1.56% بالنسبة للنتيجة العملية. ونتيجة لذلك فان خطأ COD بين القيم العملية والمحاكاة بواسطة ANNi هو 0.72%

حالة 2. مجموعة المعاملات المتوفرة لعملية التحفيز الضوئي لمبيد الاعشاب gesaprim مع $l=1$ و $s=9$ و $k=9$. الشروط العملية لهذا الفحص ولقيمة ناتج $\text{COD} = 0.138 \text{ mg/L}$ المطلوبة مع قيم الادخال $\text{pH} = 2.3$ ، $[\text{Gesaprim}]_0 = 0.193 \text{ mM}$ و $\text{Gesaprim} = 0.9$ ، وشدة الضوء فوق البنفسجي $\text{UV} = 352 \text{ nm}$ ، و $[\text{TiO}_2]_0 = 200 \text{ mg/L}$ ، و $(t=?)$ وهو زمن التفاعل المطلوب ايجاده:

$$g(t) = -B + \frac{2W_{o(1,1)}}{1 + e^{(X_1 + 0.6332t)}} + \frac{2W_{o(1,2)}}{1 + e^{(X_2 + 1.103t)}} + \frac{2W_{o(1,3)}}{1 + e^{(X_3 - 2.8184t)}} \dots$$
$$+ \frac{2W_{o(1,4)}}{1 + e^{(X_4 + 1.4766t)}} + \frac{2W_{o(1,5)}}{1 + e^{(X_5 - 101.01t)}} + \frac{2W_{o(1,6)}}{1 + e^{(X_6 + 2.765t)}} \dots$$
$$+ \frac{2W_{o(1,7)}}{1 + e^{(X_7 + 58.0402t)}} + \frac{2W_{o(1,8)}}{1 + e^{(X_8 + 7.4712t)}} + \frac{2W_{o(1,9)}}{1 + e^{(X_9 + 11.0078t)}} \dots$$
(43)

حيث



$$\begin{aligned}
 B = COD - & b_{2(1)} + W_{o(1,1)} + W_{o(1,2)} \dots \\
 & + W_{o(1,3)} + W_{o(1,4)} + W_{o(1,5)} + W_{o(1,6)} \dots \\
 & + W_{o(1,7)} + W_{o(1,8)} + W_{o(1,9)}
 \end{aligned} \tag{44}$$

$$X_1 = -2 \left(\begin{aligned} & W_{i(1,2)} V_2 + W_{i(1,3)} V_3 + W_{i(1,4)} V_4 \dots \\ & + W_{i(1,5)} V_5 + W_{i(1,6)} V_6 + W_{i(1,7)} V_7 \dots \\ & + W_{i(1,8)} V_8 + W_{i(1,9)} V_9 + b_{1(1)} \end{aligned} \right) \tag{45}$$

$$X_2 = -2 \left(\begin{aligned} & W_{i(2,2)} V_2 + W_{i(2,3)} V_3 + W_{i(2,4)} V_4 \dots \\ & + W_{i(2,5)} V_5 + W_{i(2,6)} V_6 + W_{i(2,7)} V_7 \dots \\ & + W_{i(2,8)} V_8 + W_{i(2,9)} V_9 + b_{1(2)} \end{aligned} \right) \tag{46}$$

$$X_3 = -2 \left(\begin{aligned} & W_{i(3,2)} V_2 + W_{i(3,3)} V_3 + W_{i(3,4)} V_4 \dots \\ & + W_{i(3,5)} V_5 + W_{i(3,6)} V_6 + W_{i(3,7)} V_7 \dots \\ & + W_{i(3,8)} V_8 + W_{i(3,9)} V_9 + b_{1(3)} \end{aligned} \right) \tag{47}$$

$$X_4 = -2 \left(\begin{aligned} & W_{i(4,2)} V_2 + W_{i(4,3)} V_3 + W_{i(4,4)} V_4 \dots \\ & + W_{i(4,5)} V_5 + W_{i(4,6)} V_6 + W_{i(4,7)} V_7 \dots \\ & + W_{i(4,8)} V_8 + W_{i(4,9)} V_9 + b_{1(4)} \end{aligned} \right) \tag{48}$$

$$X_5 = -2 \left(\begin{aligned} & W_{i(5,2)} V_2 + W_{i(5,3)} V_3 + W_{i(5,4)} V_4 \dots \\ & + W_{i(5,5)} V_5 + W_{i(5,6)} V_6 + W_{i(5,7)} V_7 \dots \\ & + W_{i(5,8)} V_8 + W_{i(5,9)} V_9 + b_{1(5)} \end{aligned} \right) \tag{49}$$

$$X_6 = -2 \left(\begin{aligned} & W_{i(6,2)} V_2 + W_{i(6,3)} V_3 + W_{i(6,4)} V_4 \dots \\ & + W_{i(6,5)} V_5 + W_{i(6,6)} V_6 + W_{i(6,7)} V_7 \dots \\ & + W_{i(6,8)} V_8 + W_{i(6,9)} V_9 + b_{1(6)} \end{aligned} \right) \tag{50}$$

$$X_7 = -2 \left(\begin{aligned} & W_{i(7,2)} V_2 + W_{i(7,3)} V_3 + W_{i(7,4)} V_4 \dots \\ & + W_{i(7,5)} V_5 + W_{i(7,6)} V_6 + W_{i(7,7)} V_7 \dots \\ & + W_{i(7,8)} V_8 + W_{i(7,9)} V_9 + b_{1(7)} \end{aligned} \right) \tag{51}$$

$$X_8 = -2 \left(\begin{aligned} & W_{i(8,2)} V_2 + W_{i(8,3)} V_3 + W_{i(8,4)} V_4 \dots \\ & + W_{i(8,5)} V_5 + W_{i(8,6)} V_6 + W_{i(8,7)} V_7 \dots \\ & + W_{i(8,8)} V_8 + W_{i(8,9)} V_9 + b_{1(8)} \end{aligned} \right) \tag{52}$$

$$X_9 = -2 \left(\begin{aligned} & W_{i(9,2)} V_2 + W_{i(9,3)} V_3 + W_{i(9,4)} V_4 \dots \\ & + W_{i(9,5)} V_5 + W_{i(9,6)} V_6 + W_{i(9,7)} V_7 \dots \\ & + W_{i(9,8)} V_8 + W_{i(9,9)} V_9 + b_{1(9)} \end{aligned} \right) \tag{53}$$



طبقا للاوزان والانحيازات الموضحة في الجدول 4، يمكننا ان نحسب افضل زمن تفاعل للعملية للمخرجات المطلوبة وجدت ان قيمة (t) الناتجة هي 119.67 min، بالإضافة الى انه باستخدام المعادلة (31) فان القيمة المحسوبة تمتلك خطأ بمقدار 0.18% بالنسبة للنتيجة العملية. ونتيجة لذلك فان خطأ COD بين القيم العملية والمحاكاة بواسطة ANNi هو 3.94 %

4. الاستنتاج Conclusion

معامل الطلب على الاكسجين الكيميائي لمبيدات الاعشاب التجارية alazine و gesaprim خلال تحللها الضوئي كان متوقعا بنجاح من خلال تطبيق شبكة عصبية ثلاثية الطبقات بتسعة خلايا عصبية في الطبقة المخفية، وباستخدام خوارزمية الانتشار الخلفي. اجريت المحاكاة المعتمدة على نموذج ANN لتقدير سلوك النظام تحت ظروف مختلفة. تبين النتائج التي تم الحصول عليها من نموذج ANN توافق ممتاز مع النتائج العملية: ترابط جيد جدا ($R^2=0.99$) وخطأ صغير ($RMSE=0.000259$).

تم التأكد من مستوى الثقة العالي لنموذج ANN مع تقاطع وميل الفحص الاحصائي (99%). علاوة على ان هذه الورقة العلمية تقدم ايضا طريقة لحساب افضل شروط تشغيلية من ANNi عندما تكون مطلوبة للصحة على افضل النتائج (افضل اداء). في هذه الحالة، تم محاكاة سلوك الطلب على الاكسجين الكيميائي بواسطة شبكة عصبية اصطناعية. يأخذ هذا النموذج بالاعتبار معاملات الادخال المعروفة جيدا: زمن التفاعل و pH وتركيز مبيد الاعشاب والتلوث والامواج فوق الصوتية وشدة الضوء فوق البنفسجي و $[TiO_2]$ و $[K_2S_2O_8]$ والاشعاع الشمسي. طبقا لتحليل الحساسية، وجدنا ان زمن التفاعل هو المعامل الاكثر تأثيرا. لهذا فانه من قيمة الطلب على الاكسجين الكيميائي الافضل كمتغير ادخال، وبالاخذ بعين الاعتبار قيم الادخال المعروفة جيدا والمذكورة اعلاه ما عدا زمن التفاعل، فانه من الممكن ان نقوم بحساب زمن التفاعل الافضل من خلال ANNi، باعتبار ان طريقة Nelder-Mead المبسطة للحصول على افضل الشروط. ومع ذلك فان التحقق الرياضي ل- ANNi قد تم في الحالة 1 والحالة 2.

بالإضافة الى انه بمجرد حساب زمن التفاعل الافضل، فانه من الممكن ان نقدر متغير ناتج اخر. لهذا، فانه باستخدام هذه الطريقة تمكنا من الحصول على أي متغير ادخال غير معروف online. من خلال هذه المرونة يبدو ان من الخائص الاساسية لنظام ANNi هو تعزيز اهميتها العظيمة كأداة للعملية الهندسية. في



الحقيقة، من المهم ان نلاحظ الزمن اللازم لحساب معامل الادخال الافضل (زمن التفاعل) قليل واقل من 0.3s.

وعليه فان افضل ميزة لطريقة ANNi هي بساطة بنيتها وسرعة تقاربها لتوقع افضل المعاملات، وسوف تكون مفيدة للتحكم الافضل من خلال شبكة الانترنت في اطار عمل عملية الاكسدة المتقدمة.

تمت الترجمة في المركز العلمي للترجمة

2012-6-28

www.trgma.com