**علوم و تکنولوژی محیط زیست، دوره بیست و یکم، شماره یک ، فروردین ماه ۹۸**

# ارزیابی عملکرد مدل های شبکه عصبی مصنوعی و رگرسیون چندگانه در سنجش کربن آلی محلول در آب

**طاهر احمدزاده[1*]**
Taher_ahmadzadeh@yahoo.com
**ناصر مهردادی[2]**
**مجتبی اردستانی[2]**
**اکبر باغوند[2]**

**تاریخ دریافت: ۹۴/۷/۴** **تاریخ پذیرش:۹۴/۱۲/۱۶**

**چکیده**

**زمینه و هدف:** اندازه گیری و پایش کربن آلی در محیط های آبی یکی از شاخص های مهم کیفی در پروژه های مدیریت محیط زیست، پایش کیفی منابع آب و تامین آب شرب است. در این تحقیق، عملکرد مدل شبکه عصبی مصنوعی و مدل رگرسیون غیر خطی چندگانه با هدف سنجش پارامتر کربن آلی در منابع آب با حداکثر ضریب همبستگی محتمل و حداقل تعداد پارامترهای ورودی، مورد مطالعه و بهینه سازی قرار گرفت.

**روش بررسی:** به این منظور مدل اولیه شبکه عصبی مصنوعی و رگرسیون غیر خطی چندگانه با کلیه پارامترهای ورودی برای دستیابی به حداقل پارامترهای مورد نیاز تحت بهینه سازی به روش حذف ترتیبی قرار گرفت.

**یافته ها:** آزمون صحت سنجی مدل بیانگر توافق خوبی میان سنجش کربن آلی محلول و مشاهدات واقعی بوده است. تحلیل نتایج نشان دهنده ی عملکرد قابل قبول مدل شبکه عصبی با درصد خطای متوسط ۷ ٪ و ضریب همبستگی ۰/۹۱ می باشد.

**بحث و نتیجه گیری:** رفتار سنجی نتایج مدل سازی آشکار نمود که هرچند مدل رگرسیون چندگانه با درصد خطای متوسط ۸ ٪ و ضریب هم بستگی ۰/۸۹ عملکرد نسبتاً ضعیف تری داشته است، اما سرعت اجرای بالا و عملکرد بهتر در شرایط بحرانی نشان از قابلیت بالای این مدل در سنجش کربن آلی در منابع آب با دامنه تغییرات کیفی زیاد دارد.

**واژه های کلیدی :** مدل سازی، کربن آلی محلول، کیفیت منابع آب، شبکه عصبی، رگرسیون چندگانه.

---

۱- دانش آموخته دکتری مهندسی محیط زیست، دانشکده تحصیلات تکمیلی محیط زیست، دانشگاه تهران، تهران، ایران *(مسوول مکاتبات).
۲- استاد و عضو هییت علمی مهندسی محیط زیست، دانشکده تحصیلات تکمیلی محیط زیست، دانشگاه تهران، تهران، ایران.

*J.Env. Sci. Tech., Vol 21, No.1, March, 2019*

# Evaluation of Artificial Neural Network and Multiple Nonlinear Regression Modeling for the determination of Dissolved Organic Carbon

**Taher Ahmadzadeh[1]***
*Taher_ahmadzadeh@yahoo.com*
**Naser Mehrdadi[2]**
**Mojtaba Ardestani[2]**
**Akbar Baghvand[2]**

Admission Date:March 6, 2016 Date Received: September 26, 2015

**Abstract**

**Background and Objective:** Monitoring of organic carbon in water resources is a critical quality index in environmental management, water quality monitoring and drinking water projects. In this study, the performance and applicability of artificial neural network and multiple nonlinear regression modeling were investigated and optimized for the prediction of dissolved organic carbon.

**Method:** Optimization was performed using backward elimination method with the highest probable correlation coefficient and minimum number of input parameters.

**Findings:** Model verification showed a good agreement between the predicted organic carbon and actual observations. Results showed the acceptable performance of neural network model with the mean absolute error percentage of 7.6% and correlation coefficient of 0.91.

**Discussion and Conclusion:** Further investigations unveiled that although the multiple regression model, with mean absolute error percentage of 8.4% and correlation coefficient of 0.89, seems to be less appealing but its fast run-time and better performance in critical conditions makes it a better choice for the prediction of organic carbon in aqueous solotions with high range of qualitative changes.

**Key words: Keywords:** Modeling, Dissolved Organic Carbon, Water Resource Quality, Neural Network, Multiple Regression

1- PhD Graduate, Department of Environmental Engineering, Faculty of Environment, University of Tehran, Tehran, Iran *(Corresponding Author).
2- Professor, Department of Environmental Engineering, Faculty of Environment, University of Tehran, Tehran, Iran.

**مقدمه**

از مهم ترین منابع آلودگی که اخیراً به شدت توسعه یافته است پساب صنایع و فعالیت های کشاورزی می باشد که موجب افزایش بار مواد آلی در منابع آب سطحی می گردد (۱). می توان بار مواد آلی در سیستم های آبی را بر حسب کربن آلی کل (TOC[1]) در آب اندازه گیری و بیان کرد. کربن آلی کل وابسته به میزان کربن آلی محلول در آب (DOC[2]) است، هرچند که استفاده ی عبارات DOC و TOC به جای یکدیگر شایع شده است (۲). کربن آلی محلول در آب تخمینی از میزان آلاینده های آلی طبیعی و انسان ساخت را فراهم می آورد و می تواند به عنوان شاخص میزان گسترش آلودگی در منابع آبی مورد مطالعه قرار گیرد (۲). پایش مداوم کربن آلی در منابع آب به عنوان منبع ترکیبات ناخواسته گندزدایی (DBPs[3])، نه تنها برای تولیدکنندگان آب شرب، بلکه برای مصرف کنندگان نیز بسیار حیاتی است (۳). از سوی دیگر کنترل و جبران کربن آلی برای حفظ و افزایش حاصلخیزی خاک و مزید بر آن افزایش نفوذ پذیری خاک و کاهش تبخیر آب بسیار ضروری است (۴).

روش هایی متداول اندازه گیری کربن آلی در آب در معرض خطای اندازه گیری هستند (۵). روش های آزمایشگاهی بسیار دقیق هستند اما به دلیل استفاده از دستگاه های تجزیه گر کربن آلی[4] بسیار پرهزینه بوده و نیاز به کاربر متخصص دارند (۶) و یا به دلیل استفاده از روش های غیر دستگاهی بسیار وقت‌گیر هستند (۵). روش های میدانی عموما سریع و برخط هستند اما به دلیل کاربرد مدل رگرسیون تخمین غلظت کربن آلی بر اساس جذب فرابنفش[5] دقت و صحت را قربانی سرعت می نمایند (۷). بنابراین نیاز به روش جایگزین که دقت و صحت روش های آزمایشگاهی را با سرعت و سادگی همراه نماید وجود دارد.

مسایل واقعی در محیط زیست معمولاً بسیار پیچیده و مشتمل بر چندین مؤلفه و ویژگی محیطی هستند. کاربرد های موفقیت آمیز مدل های مبتنی بر هوش مصنوعی به ویژه مدل شبکه عصبی مصنوعی (ANN[6]) در این گونه مسایل، گواه از قابلیت اطمینان، استواری و انعطاف پذیری آنها دارد (۸). مدل شبکه عصبی به عنوان یکی از مناسب ترین گزینه های مدل سازی در اندازه گیری کیفیت منابع آب، همواره مورد توجه بوده است (۹). کلکارنی و همکارانش در سال ۲۰۱۰ با استفاده از مدل شبکه عصبی به پیش بینی میزان تولید ترکیبات ناخواسته گندزدایی پرداختند (۱۰). در سال ۲۰۱۱، نجاه و همکارانش به انواع مدل های شبکه عصبی در پیش بینی شرایط کیفی منابع آب اشاره نمودند (۱۱). در سال ۲۰۱۲ کینوار و همکارانش برای دستیابی به نتایج دقیق تر در پیش بینی کیفیت آب، اقدام به ساخت مدل تلفیقی شبکه عصبی و مدل کمومتریکس نمودند (۱۲).

در مطالعه حاضر عملکرد مدل شبکه عصبی و مدل رگرسیون غیر خطی چند گانه (MNR[7]) برای غلبه بر معضلات بیان شده در اندازه گیری کربن آلی محلول مورد مقایسه قرار گرفته است. به این منظور سنجش کربن آلی محلول بر اساس پارامترهای کیفی در منابع آب صورت گرفته و با هدف دستیابی به حداکثر دقت بهینه سازی شده است. این قابلیت ها در اکثر موارد منتج از توانایی مدل شبکه عصبی در فراگیری ارتباطات چند متغیره و غیر خطی می باشد (۱۳). به منظور اطمینان از صحت عملکرد مدل شبکه عصبی، نتایج این مدل با مدل رگرسیون غیر خطی چندگانه به عنوان یک مدل تجربی متداول مورد مقایسه قرار گرفته است. روش پیشنهادی به دلیل بهره مندی از دقت و سرعت قابل توجه می تواند به عنوان روش قابل اعتماد تری در راستای پایش و اندازه گیری پارامتر کربن آلی محلول در آب به کار رود.

1- Total Organic Carbon
2- Dissolved Organic Carbon
3- Disinfection By-Products
4- TOC Analyzer
5- UV254 Absorption
6- Artificial Neural Network
7- Multiple Nonlinear Regression

**روش بررسی**

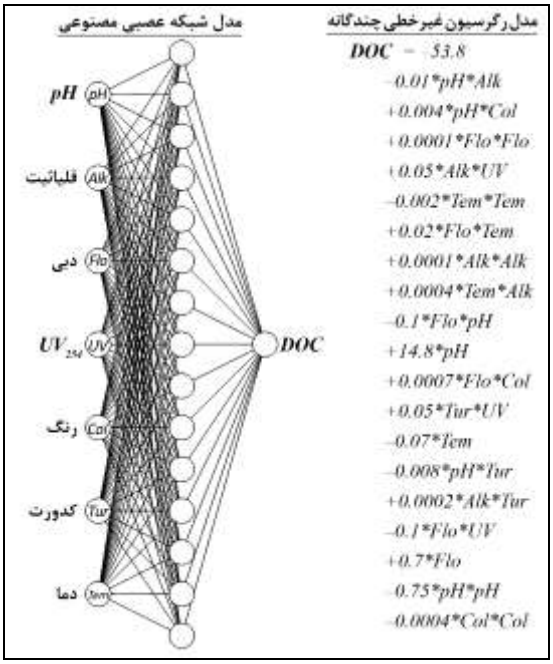
**۱- داده ها**

داده ها شامل پایش یکی از سرشاخه های محلی سفید رود[1] در مختصات "01 '11 °40 شمالی و "59 '20 °85 غربی طی مدت ۶۵۶ روز می باشد. این رود منبع اصلی تامین آب شرب منطقه است. از مجموع ۶۵۶ نمونه، تعداد ۵۶۳ نمونه برای کالیبراسیون و ۹۳ نمونه به منظور صحت سنجی مدل های شبکه عصبی و رگرسیون چندگانه مورد استفاده قرار گرفت.

نمونه برداری روزانه با برداشت دو لیتر از آب رودخانه در یک ظرف پلی اتیلن صورت می گرفت. غلظت کربن آلی محلول در رودخانه توسط دستگاه تجزیه گر کربن آلی (Ionics-Sievers 800 TOC Analyzer, Boulder, CO) اندازه گیری شده است. در این دستگاه نمونه به صورت پیش فرض از فیلتر ۶۰ میکرون (Whatman GF/F) عبور نموده سپس کربن آلی آن به کمک پرسولفات و تابش UV به گاز $CO_2$ اکسید می گردد. $CO_2$ تولید شده نیز به روش هدایت سنجی گازی شناسایی می گردد. میزان جذب UV در nm ۲۵۴ و شدت رنگ در واحد پلاتین-کبالت توسط دستگاه اسپکتروفتومتر (Hach DR/4000, Hach Company, Loveland, CO) اندازه گیری شده است. کدورت توسط دستگاه (Hach SS6/SE Turbidimeter, Loveland, CO) اندازه گیری شد. دما، pH و قلیاییت نیز به روش های استاندارد به صورت روزانه اندازه گیری شده است (۱۴).

**۲- مدل سازی**

دو مدل شبکه عصبی مصنوعی و رگرسیون غیر خطی چندگانه به صورت همزمان مطالعه شد. ساختار اصلی شبکه عصبی شامل سه لایه ی متمایز می باشد؛ لایه ی ورودی اطلاعات که وزن اولیه ی پارامتر ها را تخصیص می دهد، لایه ی پنهان که محل پردازش اطلاعات بوده و لایه ی خروجی که نتایج مدل را ارایه می دهد. هر یک از لایه ها شامل مؤلفه هایی به نام گره[2] می باشند که تعداد آن ها بسته به نوع کاربری متفاوت است (۱۵). گره ها در واقع توابع غیر خطی محدود به مقادیر مرزی بوده که داده های ورودی را به صورت سیگنال اصلاح شده تعدیل وزن می نمایند (۱۷-۱۶). مدل شبکه عصبی پیش تغذیه شونده[3] ساختاری از گره هاست که به وفور در سنجش پارامترهای منابع آب به کار رفته است (۱۹-۱۸). در این مطالعه نیز مدل شبکه عصبی پیش تغذیه شونده با فراگیری پس انتشار خطا[4] و مدل رگرسیون غیر خطی چندگانه با توانایی تحلیل متغیرهای ورودی در بستر نرم افزارهای FANN و ERED به کار گرفته شده اند (۲۳-۲۰). مولفه خروجی هر دو مدل کربن آلی محلول در آب بوده و پارامترهای دبی، دما، pH، قلیاییت، کدورت، رنگ و UV مولفه های ورودی مدل می باشند. تنظیم اولیه با هدف کم ترین خطا در محاسبه مولفه خروجی صورت گرفت (۲۵-۲۴). شکل ۱ ساختار اولیه مدل ها را نمایش می دهد.




**شکل ۱- ساختار اولیه مدل شبکه عصبی مصنوعی (سه لایه با ترکیب ۷:۱۵:۱) و مدل رگرسیون چندگانه (۲۰ عبارت)**

Figure 1. Primary structure of ANN model (layers 7:15:1) and MNR (20 terms)

1-White River
2-Node
3-Feed Forward Neural Network
4-Error Back Propagation

**یافته های تحقیق**

- **بهینه سازی مدل ها**

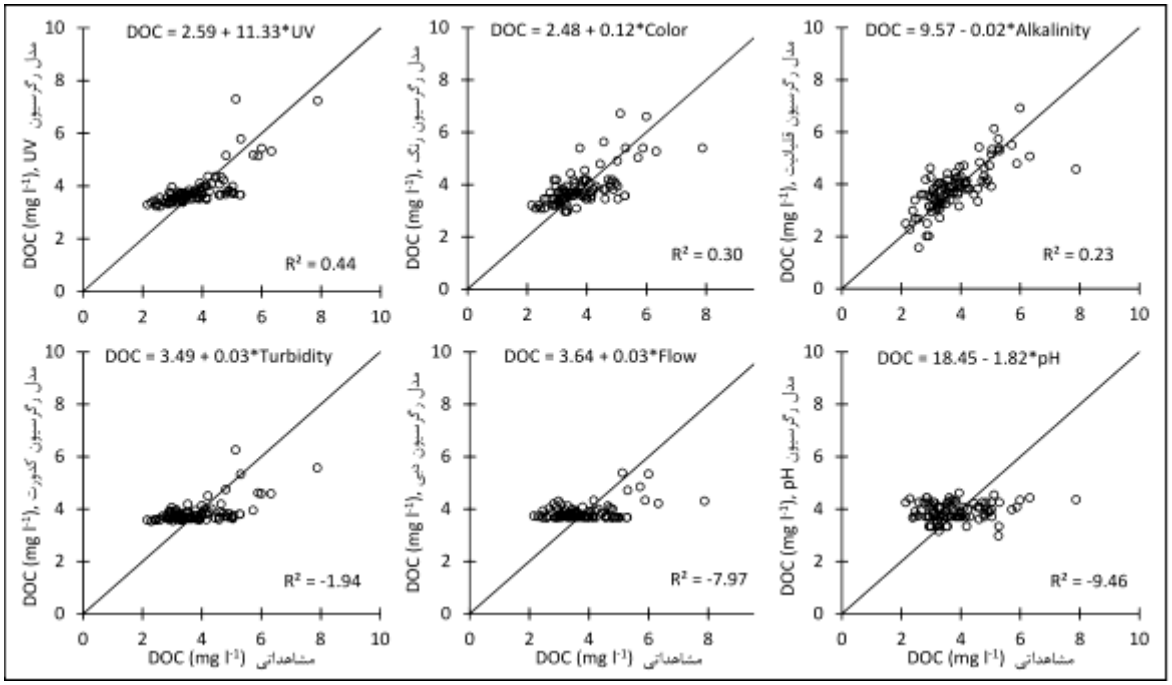
پارامترهای مورد استفاده در مدل های اولیه شامل هشت پارامتر مورد اندازه گیری می باشد که خلاصه مشخصات آماری آن ها در جدول ۱ گزارش شده است.

**جدول ۱- خلاصه مشخصات آماری داده های مورد استفاده در این مطالعه**

Table 1. summary of statistical characteristics of the current study dataset

| مشخصات آماری | کربن آلی($mg\ l^{-1}$) | $UV\ (abs)$ | رنگ($Pt\text{-}Co$) | کدورت($NTU$) | قلیاییت($mg\ l^{-1}$) | $pH$ | دما($°C$) | دبی($m^3\ s^{-1}$) |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| میانگین | ۳/۹ | ۰/۱۲ | ۱۱/۷ | ۱۵/۴ | ۲۵۶/۶ | ۸ | ۱۳/۲ | ۷/۵ |
| بیشینه | ۱۱/۹ | ۰/۸۳ | ۶۶ | ۳۴۴ | ۳۷۰ | ۸/۵ | ۲۶/۷ | ۲۳۷/۸ |
| کمینه | ۲/۲ | ۰/۰۴ | ۲ | ۱ | ۹۲ | ۷/۴ | ۲/۲ | ۰/۵ |
| انحراف معیار | ۱/۲ | ۰/۰۹ | ۷/۶ | ۳۰/۱ | ۴۰/۸ | ۰/۲ | ۶/۷ | ۱۹ |

بهینه سازی مدل و کاهش تعداد پارامترهای ورودی به طور مستقیم در کاهش هزینه آنالیز موثر بوده و همزمان از دقت و صحت کافی برای سنجش پارامتر مورد نظر برخوردار است. رگرسیون خطی به منظور شناسایی موثرترین پارامتر ورودی محاسبه شد. نتایج این محاسبات به صورت نمودارهای هم بستگی (۱:۱) نسبت به میزان کربن آلی مشاهده می شود (شکل ۲).




**شکل ۲- بررسی نحوه ی تاثیر مستقیم پارامترهای ورودی بر کربن آلی محلول در آب به کمک مدل رگرسیون ساده**

Figure 2. Investigation of direct effect of input parameters on DOC with simple regression

ضرایب تشخیص ($R^2$) محاسبه شده به عنوان شاخص می تواند مسیر بهینه سازی مدل شبکه عصبی و رگرسیون چندگانه را تا حدود زیادی مشخص کند. اطلاعات به دست آمده از شکل ۲ نشان دهنده ی تاثیر معنی دار پارامترهای رنگ، جذب $UV_{254}$

و قلیاییت می باشد. به دست آمدن ضریب تشخیص منفی برای پارامترهای pH ، دبی و کدورت، بیانگر عدم امکان وجود هم بستگی خطی مابین پارامترهای مذکور و کربن آلی آب می‌باشد. البته همانطور که در ادامه مشاهده خواهد شد، این به معنای عدم امکان وجود روابط غیر خطی نیست. افزایش دبی در شرایطی که موجب تلاطم در وضع هیدرولیکی جریان گردد موجب افزایش قدرت حمل رسوبات سواحل و بستر رود شده و بالطبع شرایط را برای ورود بار شیمیایی محبوس در رسوبات بستر و سواحل را فراهم می آورد.

بر این اساس بهینه سازی به روش حذف ترتیبی[1] پارامترهای مورد مطالعه در مدل شبکه ی عصبی و حذف متعاقب پارامتر هاذر مدل رگرسیون چند گانه صورت گرفت. معیار اصلی در این روش دستیابی به ساده ترین مدل با بهترین ضریب هم بستگی (R) محتمل بین میزان کربن آلی مشاهداتی و محاسبه شده است.

بنابراین هر یک از مدل ها بارها و بارها با ساختار متفاوت تحت آزمون قرار گرفت و حذف پارامتر ها تا جایی که مدل به حداقل ضریب هم بستگی قابل قبول دست یابد ادامه یافت. نتایج بهینه سازی به همراه مشخصات مدل های اولیه در جدول ۲ گرد آوری شده است. ساختار مدل شبکه عصبی به صورت تعداد گره در لایه های ورودی، پنهان و خروجی، مشخص شده است. ساختار مدل رگرسیون غیر خطی نیز با تعداد عبارات جبری در معادله پاسخ مشخص شده است. به علاوه زمان صرف شده برای اجرا و کالیبراسیون هر مدل بر حسب ساعت بیان شده است.

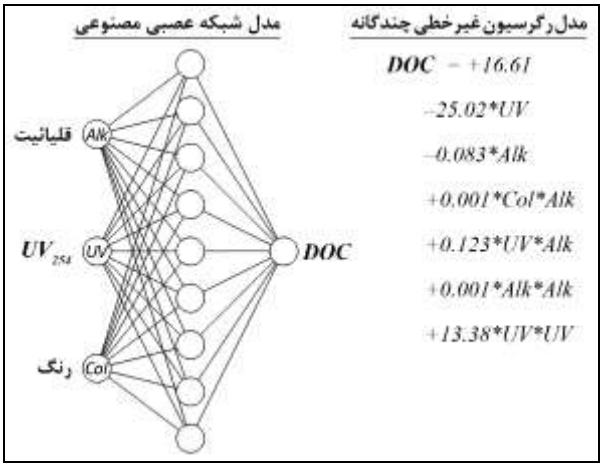
1- Stepwise Elimination
2- Backward Elimination

**جدول ۲- خلاصه مشخصات مدل شبکه عصبی و مدل رگرسیون غیر خطی چندگانه طی مرحله آموزش/کالیبراسیون**

Table 2. summary of the characteristics of ANN and MNL modeling in the training/calibration phase

| مدل | پارامتر تاثیرگذار | ساختار مدل* | توابع انتقال/ توابع جبری | ضریب همبستگی ($R$) | مدت ساخت ($h$) |
|---|---|---|---|---|---|
| ANN اولیه | کلیه پارامترهای ورودی | 8:15:1 | $y=(x/2)/(1+x)+0.5$ | ۰/۹۶ | ۵ |
| MNR اولیه | کلیه پارامترهای ورودی | 20 Terms | $y=\sum(a_i x_j)^k$ | ۰/۹۵ | ۳ |
| ANN بهینه | قلیاییت، رنگ، جذب $UV_{254}$ | 3:9:1 | $y=(0.45x)/(1+0.9x)+0.5$ | ۰/۹۱ | ۴۷ |
| MNR بهینه | قلیاییت، رنگ، جذب $UV_{254}$ | 7 Terms | $y=\sum(a_i x_j)^k$ | ۰/۹۱ | ۸ |

بر این اساس هر دو مدل برای دستیابی به شرایط بهینه نیازمند حداقل سه پارامتر ورودی شامل قلیاییت، رنگ و جذب $UV_{254}$ می باشند. شکل ۳ ساختار بهینه شده ی مدل های شبکه عصبی مصنوعی و مدل رگرسیون چندگانه را نمایش می دهد. در این مدل ها با وجود کاهش پارامتر های تاثیرگذار از هفت به سه مورد، ضرایب هم بستگی هم چنان بالاتر از ۰/۹۱بوده است.

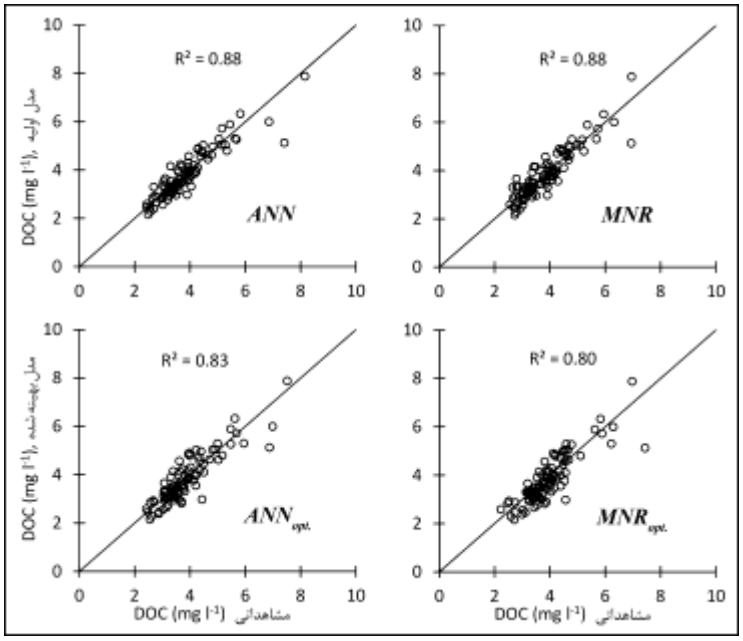



**شکل ۳- ساختار بهینه شده مدل شبکه عصبی (سه لایه با ترکیب ۳:۹:۱) و مدل رگرسیون چندگانه (هفت عبارت)**

Figure 3. Optimal structure of ANN model (layers 3:9:1) and MNR (7 terms)

- **ارزیابی عملکرد مدل ها**

عملکرد، صحت و دقت مدل های اولیه و بهینه شده به کمک آزمون صحت سنجی مورد مطالعه قرار گرفت. در این آزمون ۹۴ نمونه جدید شامل پارامترهای ورودی به مدل های اولیه و بهینه تزریق شده و خروجی مدل با مشاهدات مورد مقایسه قرار گرفت. با توجه به نتایج تقریباً مشابه در مرحله ی کالیبراسیون مدل ها، می توان انتظار داشت که هر دو مدل به پاسخ مشابهی در آزمون صحت سنجی دست یابند. البته این نتیجه می تواند عملکرد مدل ها را با اطمینان بالاتری توجیه نماید. نتایج صحت سنجی مدل ها به صورت نمودار ۱:۱ کربن آلی خروجی مدل در برابر مشاهدات در شکل ۴ ارایه شده است.




**شکل ۴- نمودار همبستگی ۱:۱ کربن آلی محلول محاسباتی در مقایسه با مشاهدات قبل و بعد از بهینه سازی**

Figure 4. The 1:1 correlation graph of the calculated DOC vs observations before and after optimization

بر اساس شکل ۴ مدل های بهینه شده برآورد خوبی از میزان کربن آلی محلول در آب داشته اند. همان طور که مشاهده می-شود سنجش کربن آلی محلول توسط مدل بهینه شبکه عصبی با ضریب تشخیص ۰/۸۳تا حدودی بهتر از نتایج مدل رگرسیون چندگانه با ضریب تشخیص ۰/۸۰ می باشد. با این وجود خلاصه تحلیل نتایج آزمون صحت سنجی مدل های شبکه عصبی و رگرسیون چندگانه با محاسبه میزان خطای محاسباتی و ضرایب هم بستگی و تشخیص به منظور بررسی دقیق تر عملکرد آن ها در جدول ۳ گرد آوری شده است. بر این اساس مدل های اولیه با ضریب هم بستگی برابر با ۰/۹۴ و ضریب تشخیص برابر با ۰/۸۸ از توانایی خوبی در سنجش میزان کربن آلی آب بر اساس هفت پارامتر اثرگذار برخوردار بودند. با این وجود مدل های بهینه شده میانگین درصد خطای مطلق کمتری را از خود نشان دادند. بررسی دقیق تر مدل های بهینه شده حاکی از عملکرد مناسب تر مدل شبکه عصبی در سنجش کربن آلی موجود در آب بر اساس سه پارامتر قلیاییت، رنگ و جذب $UV_{254}$ می-باشد. به علاوه مدل بهینه شده ی شبکه ی عصبی با میانگین درصد خطای برابر با ٪ ۷/۶ بهترین سطح دقت را به خود اختصاص داده است.

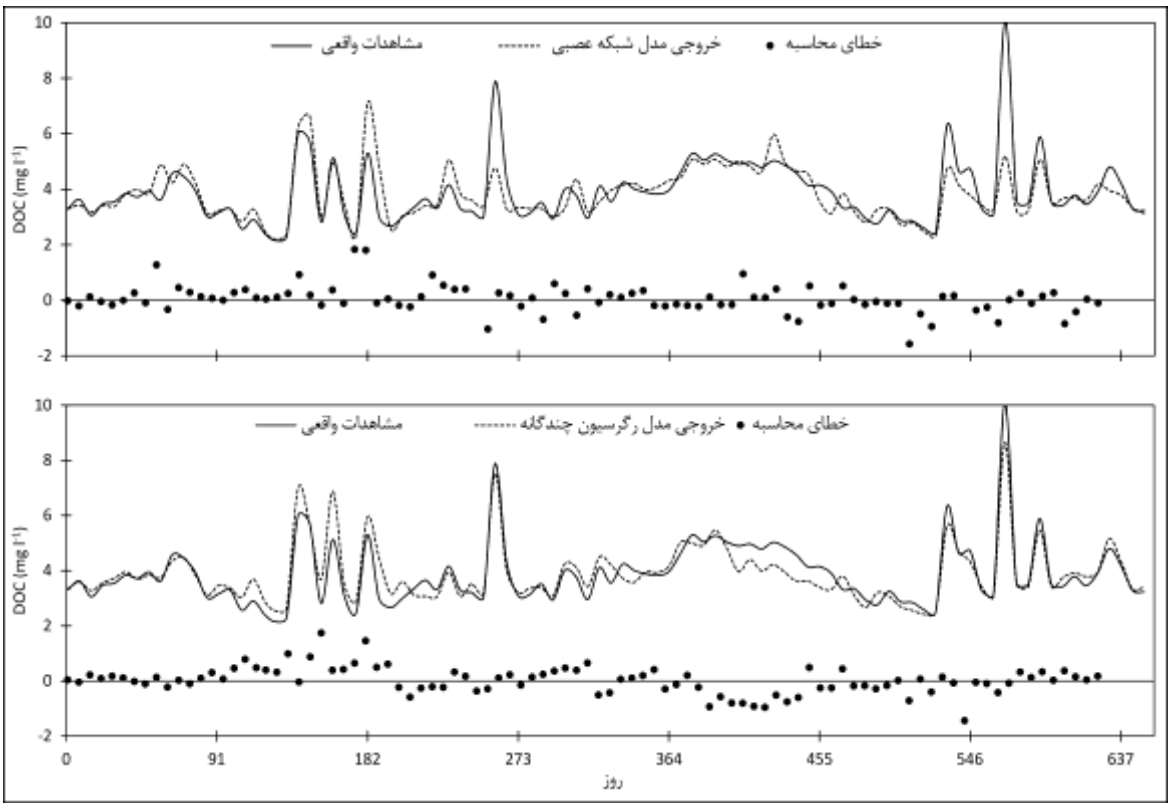
**جدول ۳- نتایج تحلیل آزمون صحت سنجی مدل های رگرسیون چندگانه و شبکه عصبی در ۹۴ نمونه نامتعارف جدید**

Table 3. Validation test results of ANN and MNR for 94 unknown new samples

| مدل | ضریب هم بستگی(R) | ضریب تشخیص($R^2$) | بیشینه خطا | کمینه خطا | جذر میانگین مربعات خطا (RMSE[2]) | میانگین درصد خطای مطلق(MAPE[1]) |
|---|---|---|---|---|---|---|
| ANN اولیه | ۰/۹۴ | ۰/۸۸ | ۱/۸۱ | ۰/۰۰ | ۰/۴۱ | ٪ ۹/۱ |
| MNR اولیه | ۰/۹۴ | ۰/۸۸ | ۱/۸۸ | ۰/۰۰ | ۰/۴۲ | ٪ ۹/۴ |
| ANN بهینه | ۰/۹۱ | ۰/۸۳ | ۱/۵۴ | ۰/۰۲ | ۰/۴۹ | ٪ ۷/۶ |
| MNR بهینه | ۰/۸۹ | ۰/۸۰ | ۱/۹۳ | ۰/۰۱ | ۰/۵۴ | ٪ ۸/۴ |

1- Mean Absolute Percentage Error
2- Root Mean Square Error

با توجه به نتایج فوق، این مسیله مطرح می شود که آیا این مزیت جزیی در عملکرد مدل شبکه عصبی می تواند توجیه قابل قبولی برای اجرای طاقت فرسا و وقت گیر آن باشد؟ برای پاسخ دادن به این پرسش لازم است نگاه دقیق تری به عملکرد مدل ها در واقعیت داشت. به این منظور نمودار روند تغییرات خطای محاسباتی هر دو مدل به همراه مقادیر کربن آلی مشاهداتی و سنجش شده در شکل ۵ نشان داده شده است.




**شکل ۵- نمودار سنجش کربن آلی محلول آب توسط مدل های بهینه شده با ۳ پارامتر ورودی نسبت به مشاهدات واقعی**

Figure 5. Time series graph of DOC prediction with 3 input parameters vs the observed values

همانطور که مشاهده می شود هماهنگی کربن آلی محاسباتی با میزان مشاهدات واقعی در رودخانه بیانگر عملکرد قابل قبول هر دو مدل می باشد. با این وجود عملکرد بهتر مدل شبکه ی عصبی در سنجش نوسانات کوچک کربن آلی به ویژه در نوسانات روزهای ۲۷۳ لغایت ۵۴۶ به خوبی نمایان است. در مقابل، مدل رگرسیون چندگانه در نوسانات شدید کربن آلی به ویژه در نوسانات روزهای ۲۶۰، ۵۳۰، ۵۴۰، ۵۷۰، ۵۹۰ و ۶۳۰ عملکرد بسیار خوبی را از خود نشان داده است. با عنایت به این مطلب که عموماً این نوسانات شدید کیفی آب است که شرایط بحرانی را برای مصارف شرب، آبیاری، پرورش آبزیان و غیره تحمیل می کند، می توان نتیجه گیری کرد که مدل رگرسیون غیر خطی چندگانه گزینه مناسب تری در سنجش کربن آلی محلول برای آب های دارای نوسانات کیفی شدید می باشد.

به منظور مقایسه نتایج حاصل از این تحقیق با کارهای مشابه جدول ۴ با استناد به مطالعات ماتیلاینن و همکارانش به بیان نقاط ضعف و قدرت مدل های مورد استفاده در سایر روش ها با روش پیشنهادی در این مطالعه پرداخته است (۶).

**جدول ۴-مقایسه مدل های مورد استفاده در روش های متداول اندازه گیری کربن آلی محلول با مطالعه حاضر**[‡†]

Table 4. Comparison of applicability of common DOC determination methods vs current study

| # | روش شناسایی | فرایند اصلی | مدل مورد استفاده | دقت | اعتمادپذیری | کاربر دوست | دوستدار محیط زیست | زمان | هزینه |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| ۱ | تیتراسیون مازاد $Cr_2O_7^{2-}$ | اکسایش-دی کرومات | رگرسیون خطی | A | B | C | C | C | A |
| ۲ | طیف سنجی مازاد $Cr_2O_7^{2-}$ | اکسایش-دی کرومات | رگرسیون خطی | A | B | C | C | C | B |
| ۳ | طیف سنجی مادون قرمز $CO_2$ | اکسایش-پرسولفات | رگرسیون خطی | A | C | C | B | B | C |
| ۴ | سنجش هدایت حرارتی $CO_2$ | اکسایش-پرسولفات | رگرسیون خطی | A | C | C | B | B | C |
| ۵ | طیف سنجی فلورسانس | تابش طیفی | رگرسیون خطی | C | B | B | A | B | B |
| ۶ | طیف سنجی $UV_{254}$ | جذب طیفی | رگرسیون خطی | C | B | A | A | A | A |
| ۷ | طیف سنجی $UV_{254}$، رنگ و کدورت | جذب طیفی | رگرسیون غیر خطی | B | A | A | A | A | A |
| ۸ | طیف سنجی $UV_{254}$، رنگ و کدورت | جذب طیفی | شبکه عصبی مصنوعی | A | A | A | A | A | A |

[†] A خوب، B متوسط، C نامناسب [‡] مطالعه حاضر: ردیف های ۷ و ۸

## نتیجه گیری

نتایج این مطالعه می تواند به عنوان روشی سریع و کم هزینه در سنجش کربن آلی محلول در آب بر مبنای سه پارامتر ساده کیفی آب مورد توجه مسیولان پایش کیفی منابع آب، تامین آب شرب عاری از DBP، کشاورزی به ویژه کشت گلخانه ای، هیدروپونیک و آبزی پروری قرار گیرد. برای اولین بار در این مطالعه دو مدل شبکه عصبی مصنوعی و رگرسیون غیر خطی چندگانه با هدف سنجش هرچه صحیح تر پارامتر کربن آلی محلول در آب تحت بررسی و بهینه سازی قرار گرفتند. با حذف پارامترهای کم اثر، مدل های بهینه شده با حداقل سه پارامتر قلیاییت، رنگ و جذب $UV_{254}$ به حداقل ضریب هم بستگی قابل قبول دست یافتند. مقادیر کربن آلی حاصل از سنجش مدل ها در توافق خوبی با مشاهدات واقعی بود. تحلیل نتایج نشان داد که مدل شبکه ی عصبی با کم ترین میانگین درصد خطا و ضریب هم بستگی بالا، از توانمندی خوبی در سنجش پارامتر کربن آلی محلول به ویژه در نوسانات کوچک کیفیت منابع آب برخوردار است. در مقابل، مدل رگرسیون غیر خطی چند گانه با سرعت اجرای بالاتر و همچنین عملکرد بهتر در سنجش کربن آلی محلول در شرایط بحرانی گزینه ی مناسب تری در سنجش کربن آلی منابع آبی دارای تغییرات شدید کیفی می باشد. مضافاً اینکه مدل های ساخته شده می توانند به عنوان ممیزی برای عملکرد صحیح دستگاه های پایش کیفی منابع آب و دستگاه های بسیار گران قیمت تجزیه گر کربن آلی در آزمایشگاه های کنترل کیفی آب و خاک مورد استفاده قرار گیرد. مطالعات آتی می توانند کاربرد مدل های ساخته شده در این مطالعه را در سیستم های پشتیبان تصمیم گیری و مدیریت کیفی منابع آب مورد بررسی قرار دهند.

## تشکر و قدر دانی

نویسندگان مراتب تشکر و قدردانی خود را از آقایان دکتر خلیل فرهادی و مهندس بهمن احمدزاده و هم چنین آزمایشگاه تحقیقاتی کیمیا آب بواسطه پشتیبانی های بی دریغ علمی و مالی اعلام می دارند. هم چنین از آقای دکتر ولک برای تامین داده های مورد نیاز برای آموزش و صحت سنجی مدل بسیار تشکر می گردد.

## Reference

1. Singh K P, Malik A, Mohan D, Sinha S, 2004, Multivariate statistical techniques for the evaluation of spatial and temporal variations in water quality of Gomti River (India)-A case study. Journal of Water Research 38(18):3980–3992.
2. Beckett R, Ranville J, 2006, Natural organic matter. In: Newcombe G Dixon D (eds) Interface Science in Drinking Water Treatment. Elsevier Ltd, pp 299–316.
3. Hou Y, Chu W, Ma M, 2012, Carbonaceous and nitrogenous disinfection by products formation in the surface and ground water treatment plants

using Yellow River as water source. Journal of Environmental Sciences 24(7):1204–1209.
4. Bot A, Benites J, 2005, The importance of soil organic matter Key to drought-resistant soil and sustained food production, FAO Bulletin, 80, Rome, Italy.
5. Visco G, Campanella L, Nobili V, 2005, Organic carbons and DOC in waters: An overview of the international norm for its measurements. Microchemical Journal 79:185–191.
6. Matilainen A, Gjessing E T, Lahtinen T, Hed L, Bhatnagar A, Sillanpää M, 2011, An overview of the methods used in the characterisation of natural organic matter (NOM) in relation to drinking water treatment. Chemosphere 83(11):1431–1442.
7. Hargesheimer E, 2002, Online monitoring for drinking water utilities, American Water Works Assossiation, pp. 427.
8. Khataee A R, Zarei M, Pourhassan M, 2010, Bioremediation of Malachite Green from Contaminated Water by Three Microalgae: Neural networks Modelling. CLEAN – Soil Air Water 38(1):96–103.
9. Bucak I O, Karlik B, 2011, Detection of Drinking Water Quality Using CMAC Based Artificial Neural networks. Ekoloji 20(78):75–81.
10. Kulkarni P, Chellam S, 2010, Disinfection by–product formation following chlorination of drinking water: Artificial neural networks models and changes in speciation with treatment. Science of the Total Environment 408(19):4202–4210.
11. Najah A, El–Shafie A, Karim O A, Jaafar O, El–Shafie A H, 2011, An application of different artificial intelligences techniques for water quality prediction. International Journal of the Physical Sciences 22 (6):5298–5308.
12. Kunwar P S, Gupta S, 2012, Artificial intelligence based modelling for predicting the disinfection by–products in water. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 114:122–131.
13. Yetilmezsoy K, Ozkaya B, Cakmakci M, 2011, Artificial intelligence–based prediction models for environmental engineering. Neural networks World 11(3):193–218.
14. Volk C, Kaplan L A, Robinson J, Johnson B, Wood L, Zhu H W, Le Chevallier M, 2005, Fluctuations of dissolved organic matter in river used for drinking water and impacts on conventional treatment plant performance. Environmental Science and Technology 39(11):4258–4264.
15. Ortiz–Rodríguez J M, Martínez–Blanco M R, Viramontes JMC, Vega–Carrillo H R, 2013, Robust Design of Artificial Neural Networks Methodology in Neutron Spectrometry. In: Suzuki K (ed) Artificial Neural networks–Architectures and Applications. InTech, Rijeka, pp 83–111.
16. Dreyfus G, Martinez J M, Samuelides M, Gordon M B, Badran F, Thiria S, Hérault L, 2002, Reseaux de Neurones – Méthodologie et applications. Eyrolles, Paris.
17. Govindaraju R S, 2000, Artificial neural networks in hydrology. Journal of Hydrologic Engineering 5(2):124–137.
18. Schweitzer R C, Morris J B, 2000, A Tutorial on Neural Networks Using the Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno (BFGS) Training Algorithm and Molecular Descriptors with Application to the Prediction of Dielectric Constants through the Development of Quantitative Structure Property Relationships (QSPRs). United States Army Research Laboratory ARL–TR–2155.

19. Palani S, Liong S, Tkalich P, 2008, An ANN application for water quality forecasting. Marine Pollution Bulletin 56(9):1586–1597.
20. Gemperline P, 2006, Practical guide to chemometrics 2nd edn. CRC, Boca Raton
21. Ahmadzadeh Kokya T, Farhadi Kh, AliMohammad Kalhori A, 2012, Optimized Dispersive Liquid–Liquid Microextraction and Determination of Sorbic Acid and Benzoic Acid in Beverage Samples by Gas Chromatography, Food Anal. Methods. 5:351–358.
22. Nissen S., et al., 2015, FANN, Fast Artificial Neural Network Library, available online at <http://leenissen.dk>, last visited on 23 July 2015.
23. Stephan DD, Werner J, Yeater RP, 2001, Essential regression and experimental design for chemists and engineers, MS Excel Add-in Software Package.
24. Lin T Y, Tseng C H, 2000, Optimum design for artificial neural networks: an example in a bicycle derailleur system. Journal of engineering applications of artificial intelligence 13:3–14.
25. Soong T T, 2004, Fundamentals of probability and statistics for engineers. John Wiley, Sons Inc, New York.