

تخمین ضریب توزیع خاک-آب فلزات سنگین با کاربرد شبکه‌های عصبی مصنوعی

امین فلامکی^{۱*} و مهناز اسکندری^۲

*۱) استادیار؛ گروه مهندسی عمران؛ دانشگاه پیام نور؛ ایران؛ نویسنده مسئول مکاتبات: a_falamaki@pnu.ac.ir
 ۲) دانش آموخته دکتری خاکشناسی؛ دانشگاه آزاد اسلامی؛ واحد علوم و تحقیقات؛ گروه خاکشناسی؛ تهران؛ ایران

تاریخ دریافت: ۱۳۹۱/۰۱/۱۹ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۱/۰۶/۳۰

چکیده

آلودگی منابع آب و خاک یکی از چالش‌های مهم استفاده بهینه از این منابع در سرتاسر جهان است. ضریب توزیع (K_d) نه تنها یک پارامتر کاربردی در مدل‌سازی انتقال آلاینده‌ها در خاک است، بلکه در ارزیابی ریسک آلودگی منابع آب و خاک نیز کاربرد دارد. مدل‌های پارامتریک، معمول‌ترین روش کمی برای تخمین K_d هستند. لیکن معمولاً ضریب همبستگی این مدل‌ها اندک است. درحالی‌که مقدار تخمینی این پارامتر می‌تواند باعث اشتباه قابل توجه در پیش‌بینی مهاجرت آلاینده‌ها در آبخوان و یا انتخاب روش پایش محیط آلوده شود. هدف از این پژوهش، بررسی توانایی شبکه‌های عصبی مصنوعی در مدل‌سازی ضریب توزیع فلزات سنگین و بهبود دقت تخمین آن بود. بدین منظور، سه نوع شبکه عصبی پرسپترون چند لایه (MLP)، توابع پایه شعاعی (RBF) و شبکه‌های سلسله مراتبی (HN) و دو فلز سنگین کروم و کادمیوم، برای مدل‌سازی انتخاب شدند. ابتدا داده‌های جمع‌آوری شده به دو دسته آموزش و آزمون تفکیک شدند که یک دسته برای آموزش شبکه‌ها بکار رفت و با دسته دیگر دقت شبکه‌های تمیم یافته ارزیابی شد. بهترین هندسه شبکه نیز با روش آزمون و خطا بدست آمد. نتایج مدل‌سازی برای فلز کروم نشان داد که هر دو شبکه MLP و RBF، بسیار توانمند عمل کرده‌اند و برتری نسبی در تخمین K_d با شبکه MLP بوده است. هرچند تعداد داده‌های کاربردی برای آموزش شبکه‌ها زیاد نبود (حداقل ۹ و حداکثر ۱۶ داده)، لیکن نتایج نشان داد که این تعداد کم برای مدل‌سازی کفایت می‌کند. این یافته گامی موثر در تخمین K_d است چراکه افزون‌بر زمان‌بر و هزینه‌بر بودن اندازه‌گیری مستقیم آن، در هر پروژه نیز معمولاً تعداد اندکی نمونه در اختیار است. نتایج مدل‌سازی تخمین $K_d(Cd)$ با شبکه‌های عصبی مصنوعی نیز نشان‌دهنده برتری شبکه MLP در مدل‌سازی بود. این شبکه‌ها توانستند مقدار ضریب همبستگی بین مقادیر واقعی و پیش‌بینی شده را به طور قابل توجهی افزایش دهند و از ۰/۳۷ در مدل پارامتریک برازش داده شده به داده‌ها، به ۰/۶۳ برسانند.

واژه‌های کلیدی: شبکه‌های عصبی مصنوعی؛ ضریب توزیع آب-خاک؛ کادمیوم؛ کروم

مقدمه

ناشناخته بودن برخی مکانیسم‌های حاکم، بسیار پیچیده است. یکی از پارامترهای مهم که باعث افزایش عدم قطعیت در مدل‌های شبیه‌سازی می‌شود، مقدار ضریب توزیع یا تفکیک^۱ است (Carlon et al., 2004). ضریب توزیع آب-خاک به نسبت میان مقدار آلاینده جذب شده به مقدار آن در حالت محلول و در شرایط برقراری تعادل در محیط گفته می‌شود (Carlon et al., 2004). این ضریب

یکی از چالش‌های مهم به‌ویژه در مناطق خشک و نیمه-خشک، حفاظت منابع آب و خاک از آلودگی است. یکی از راه‌های کمی ارزیابی آلاینده‌ها در منابع آب و خاک، مدل‌های تحلیل ریسک به شمار می‌روند. در کاربرد این مدل‌ها نیاز به پیش‌بینی رفتار و چگونگی انتقال یک آلاینده از منبع انتشار تا محیط دریافت آن است. لیکن شبیه‌سازی انتشار آلاینده‌ها در محیط متخلخل خاک و آبخوان به دلیل

¹ - partition (or distribution) coefficient

نمی‌شوند، بلکه قادرند مقدار جذب آلاینده را در یک دامنه از تغییرات شرایط محیطی که برای ایجاد رابطه پارامتریک بکار رفته‌اند، توصیف کنند. البته این روابط آماری دلایل و چگونگی جذب آلاینده‌ها را در نظر نگرفته و به مکانسیم توزیع آلاینده در فاز جامد ارتباطی ندارند (USEPA, 1999a). تاکنون پژوهش‌های متعددی برای تخمین ضریب توزیع آلاینده‌ها بر پایه ویژگی‌های خاک و محلول با کاربرد رگرسیون چند متغیره انجام شده است (Carlson et al., 2004). از میان این پژوهش‌ها می‌توان به مطالعه Sauve و همکاران (۲۰۰۰)، برای تخمین K_d برخی فلزات، Carlson و همکاران (۲۰۰۴)، برای تخمین K_d سرب، Garcia و همکاران (۲۰۰۹)، برای تخمین مقدار K_d تعدادی از عناصر رادیواکتیو مانند Cd, Co, Ni, Se, Sb, Pu و Vandenhove, Am و همکاران (۲۰۰۹)، برای تخمین مقدار K_d نیکل، Gil-Garcia و همکاران (۲۰۱۱)، برای تخمین مقدار K_d رادیواستراسیم و Gong و همکاران (۲۰۱۲)، برای تخمین ضریب توزیع سه نوع مختلف آنتی-بیوتیک، اشاره کرد.

گروه سوم مدل‌های جذب ایزوترم هستند. این مدل‌ها زمانی که بار آلاینده بسیار بیشتر از مکان‌های جذب در دسترس است، به کار می‌روند (Falamaki, 2013). دو مدل معروف از این گروه ایزوترم فرندلیخ^۱ و لانگمویر^۲ هستند. این مدل‌ها ضریب توزیع را تنها به غلظت محلول وابسته دانسته و سایر ویژگی‌ها را در نظر نمی‌گیرند (USEPA, 1999b). از این گروه می‌توان به پژوهش Staunton (2004) اشاره کرد که از ایزوترم فرندلیخ برای تخمین K_d نیکل استفاده کرده است.

آخرین دسته از مدل‌های تخمین ضریب توزیع، مدل‌های مکانیستیک هستند. این مدل‌ها بر وابستگی K_d به غلظت آلاینده، غلظت یون‌های رقیب در جذب، تغییر بارهای سطح جاذب و توزیع ذرات در محلول تأکید دارند. البته در

مقدار جذب آلاینده در خاک را کنترل کرده و تخمین آن به پیش‌بینی سرنوشت آلاینده‌ها در کوتاه‌مدت و بلندمدت پس از رخداد آلودگی کمک می‌کند (Gil-Garcia et al., 2011). در واقع ساده‌ترین و پرستفاده‌ترین روش تخمین تأخیر در حرکت آلاینده‌ها بر پایه ضریب توزیع است. به کمک K_d می‌توان بسیاری از مکانیسم‌های شیمیایی و فیزیکی موثر در دیرآیی آلاینده‌ها را که تحت تأثیر مکانیسم‌های متعدد است، در نظر گرفت (USEPA, 1999a). اندازه‌گیری این پارامتر بصورت آزمایشگاهی یا میدانی انجام می‌شود. لیکن پژوهشگران نشان داده‌اند، مقداری که برای K_d در نظر گرفته می‌شود می‌تواند منجر به خطای قابل‌توجهی در پیش‌بینی اثر مهاجرت آلاینده‌ها در محیط متخلخل و در انتخاب روش پایش محیط آلوده شود (Falamaki, 2013).

تاکنون پژوهشگران متعدد، مدل‌های مختلف برای تخمین K_d ارائه کرده‌اند. این مدل‌ها را می‌توان به چهار گروه کلی تفکیک کرد (USEPA, 1999b): دسته اول مدل‌های ضریب توزیع ثابت هستند. در این مدل‌ها، مقدار K_d برابر با مقدار ماده جذب شده در واحد جرم خاک نسبت به مقدار ماده‌ای که در محلول در حالت تعادل باقی مانده است، در نظر گرفته می‌شود. از محدودیت‌های این مدل‌ها در نظر نداشتن برخی ویژگی‌های خاک-آب مانند مقدار pH یا غلظت یونی محلول است، چراکه با تغییر این عوامل مقدار ضریب توزیع می‌تواند تغییر کند. از آنجا که مقدار K_d محاسبه شده نشان‌دهنده توزیع آلاینده‌ها در فاز محلول و جامد برای یک شرایط معین است، پرواضح است که این مدل‌ها کارایی خود را در شرایط ناهمگون محیط طبیعی از دست می‌دهند.

دسته دوم مدل‌های پارامتریک هستند که در آنها ضریب توزیع به صورت تابعی از برخی ویژگی‌های مستقل فاز جامد و محلول در نظر گرفته می‌شود (USEPA, 1999b). بنابراین برخلاف روش مقدار ثابت K_d ، مدل‌های پارامتریک به یک مجموعه شرایط ثابت محیطی محدود

¹ Freundlich isotherm

² Langmuir isotherm

موردی می‌تواند منجر به خسارت‌های غیر قابل جبران به محیط‌زیست شود (USEPA, 1999a).

مواد و روش‌ها

داده‌های مورد استفاده

در این پژوهش به منظور امکان‌سنجی استفاده از ANN در مدلسازی تغییرات ضریب K_d فلزات سنگین در خاک و تأثیر هندسه شبکه در بازدهی، از نتایج ارائه شده در پژوهش‌های گذشته استفاده شد. نتایج تحقیقات Rai و همکاران (۱۹۸۸) برای مدلسازی تغییرات ضریب توزیع کروم (VI) در خاک به کار رفت. در پژوهش آن‌ها مقادیر K_d کروم و برخی ویژگی‌های خاک در افق‌های زیر سطحی سه نوع خاک به نام‌های کنوما^۲، پاکولت^۳ و کلاودلند^۴ اندازه‌گیری شده است. ویژگی‌های خاک شامل واکنش خاک، بافت، سطح ویژه، ظرفیت تبادل کاتیونی، محتوای کربن آبی و غیر آبی، مینرالوژی رس و آهن قابل استخراج بوده است. بر پایه نتایج Rai و همکاران، همچنین سایر پژوهش‌های انجام شده روی این فلز (USEPA, 1999a)، واکنش خاک نقش کلیدی در تعیین مقدار K_d دارد و این مسأله در pHهای کمتر خاک، بیشتر مشخص است. در pHهای کمتر، مقدار K_d در خاک‌های مختلف بسیار متفاوت و دامنه تغییرات آن وسیع است. درحالی‌که با نزدیک شدن به pH برابر با هشت به نظر می‌رسد ضریب توزیع کروم در خاک‌ها به سمت یک عدد همگرا می‌شود. افزون بر واکنش خاک، وجود برخی آنیون‌های رقیب مانند سولفات‌ها و کربنات‌ها در خاک باعث کاهش مقدار K_d نسبت به مقدار آن در شرایط غیر رقابتی می‌شود. در نهایت با ارزیابی ارتباط ضریب توزیع کروم با ویژگی‌های متعدد خاک، Rai و همکاران نشان دادند که K_d کروم (VI) تابعی از مقدار pH، منفی لگاریتم درصد کربن ($-\log C$) و منفی لگاریتم مقدار سولفات محلول خاک ($-\log S$) بر حسب میلی‌گرم در لیتر است. بنابراین در این پژوهش نیز این سه

محیط پیچیده و ناشناخته طبیعی خاک با سطوح بسیار نامنظم کانی‌هایش، کاربرد این مدل‌ها به ندرت میسر شده است (USEPA, 1999b). از این گروه می‌توان به پژوهش Gil-Garcia و همکاران (۲۰۱۱)، برای تخمین مقدار K_d رادیواسترانسیم بر پایه روابط مکانیستیک حاکم بر جذب این عنصر، اشاره کرد.

مرور مطالعات گذشته نشان می‌دهد که پرکاربردترین مدل‌های تخمین K_d روش‌های پارامتریک هستند. لیکن یکی از مشکلات معمول این مدل‌ها، دقت اندک آماره‌های اعتبارسنجی مانند ضریب همبستگی آن‌هاست (Falamaki, 2013). بنابراین نیاز به مدل‌هایی برای بهبود پیش‌بینی مقدار K_d ضروری به نظر می‌رسد. هدف از این پژوهش، بررسی امکان استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN)، در بهبود تخمین مقدار ضریب توزیع بود. همچنین، افزون بر بررسی توانایی ANN در تخمین K_d و مقایسه نتایج آن با روابط پارامتریک، تأثیر هندسه شبکه‌های عصبی بر افزایش بازدهی آن‌ها نیز بررسی شد. دو فلز کروم (VI) و کادمیوم که از آلاینده‌های مهم زیست‌محیطی به شمار می‌روند، برای مدلسازی در نظر گرفته شدند. این دو فلز به دلیل کاربرد بسیار در صنایع مختلف، به وفور موجب آلودگی خاک و آب‌های زیرزمینی شده‌اند. ترکیبات کروم در رنگ‌سازی، آبکاری، چرم‌سازی و صنایع محافظ چوب بکار برده می‌شوند. مقادیر کمتر کروم در صنایعی چون نساجی، گل حفاری، جوهر ماشین‌های کپی، تصفیه آب، سیستم‌های خنک کننده، نوارهای مغناطیسی و کاتالیست‌ها بکار می‌رود. وضعیت اکسیداسیون کروم تخلیه شده در محیط به عوامل متعددی وابسته است. کروم (III) بدلیل داشتن خاصیت جامد تقریباً خنثی، در داخل خاک‌ها و رسوبات تجمع یافته و غیر قابل تجزیه است. بیشترین کاربرد کادمیوم نیز در صنایعی مثل باتری‌های نیکل-کادمیوم، رنگ‌های کادمیومی، پوشش کادمیوم، آلیاژهای آن و ترکیبات الکترونیکی است. این فلز بسیار سمی بوده و در

² Kenoma

³ Pacolet

⁴ Cloudland

¹ Artificial Neural Network

مدلسازی ضریب توزیع با شبکه‌های عصبی مصنوعی در این پژوهش، سه نوع متداول از ANN برای تخمین مقدار ضریب توزیع کروم و کادمیوم استفاده شد. در ادامه ویژگی‌های این شبکه‌ها به طور مختصر توضیح داده شده است.

شبکه عصبی پرسپترون چند لایه (MLP)^۱: یکی از بهترین شبکه‌های عصبی مصنوعی برای حل مسائل پیچیده و غیرخطی، شبکه‌های MLP با آموزش تحت سرپرستی و الگوریتم پس‌انتشار^۲ خطا می‌باشند (Ellis et al., 1995). در حالت کلی، شبکه‌های MLP واجد سه لایه ورودی، پنهان و خروجی بوده که در هر لایه تعدادی واحد پردازش‌گر به نام نرون^۳ وجود دارد (نوابیان و همکاران، ۱۳۸۳). هر نرون، خروجی وزن‌دار شده از نرون قبلی را دریافت کرده و از یک تابع فعال‌سازی یا آستانه عبور می‌دهد. این توابع می‌توانند از انواع مختلف مانند سیگموئیدی، گوسی، خطی و باینری باشند.

مبنای آموزش این شبکه‌ها، تغییر وزن اتصالات به منظور رسیدن به خروجی مطلوب است. بدین‌گونه که نخست الگویی به شبکه ارائه و سپس خروجی آن محاسبه می‌شود. با مقایسه این خروجی با مقدار واقعی، میزان خطا برای اصلاح وزن‌های شبکه محاسبه می‌گردد (نوابیان و همکاران، ۱۳۸۳). سپس خطا به درون شبکه انتشار یافته و وزن‌ها دوباره تنظیم می‌شوند. این چرخه تا حداقل شدن جمع مربعات خطا ادامه می‌یابد (Ellis et al., 1995). زمانی یک شبکه را تعمیم‌یافته می‌پندارند که با کاربرد داده‌هایی که از قبل به شبکه معرفی نشده‌اند (داده‌های آزمایش) مقدار خطای پیش‌بینی قابل قبول باشد. بنابراین در مدلسازی با این شبکه‌ها از ابتدا باید داده‌ها را به دو دسته داده‌های آزمایش و آموزش تفکیک کرد. الگوی آموزش باید تا حد امکان کل فضای داده‌ها را پوشش دهد.

ویژگی به عنوان ورودی‌های مدل شبکه عصبی مصنوعی به منظور برآورد مقدار K_d کروم، انتخاب شدند.

به منظور مدلسازی تغییرات ضریب جذب کادمیوم، از داده‌های گزارش شده توسط آژانس حفاظت محیط‌زیست آمریکا استفاده شد (USEPA, 1999a). در این گزارش بر پایه جمع‌آوری نتایج پژوهش‌های پیشین، برای ۱۷۴ نمونه مختلف خاک، مقدار K_d کادمیوم به همراه برخی ویژگی‌های دیگر خاک‌ها ارائه شده است. این ویژگی‌ها شامل واکنش خاک (برای ۱۷۴ نمونه)، مقدار رس (در ۶۲ نمونه خاک)، ظرفیت تبادل کاتیونی (۲۲ نمونه خاک) و اکسیدهای آهن و آلومینیوم (در ۱۶ نمونه خاک) می‌باشند. سپس با برقراری رگرسیون خطی میان ضریب تغییرات کادمیوم و این ویژگی‌های خاک، ضریب همبستگی آن‌ها بررسی و به عنوان معیاری برای انتخاب متغیرهای مستقل مناسب به کار رفته است. این آزمون نشان داد که واکنش خاک بیشترین همبستگی را با لگاریتم ضریب تغییرات کادمیوم دارد. تلاش پژوهش‌گران برای بهبود ضریب همبستگی با استفاده از رگرسیون چند متغیره و افزودن سایر ویژگی‌ها، ناموفق بوده است. سرانجام بهترین رابطه برآورد مقدار $K_d(Cd)$ در خاک‌های مختلف به صورت زیر بدست آمد و همانطور که اشاره شد نشان می‌دهد مهم‌ترین عامل در تخمین ضریب توزیع این فلز، مقدار واکنش خاک است:

$$K_{d(Cd)} = -0.54 + 0.45 (pH) \quad (1)$$

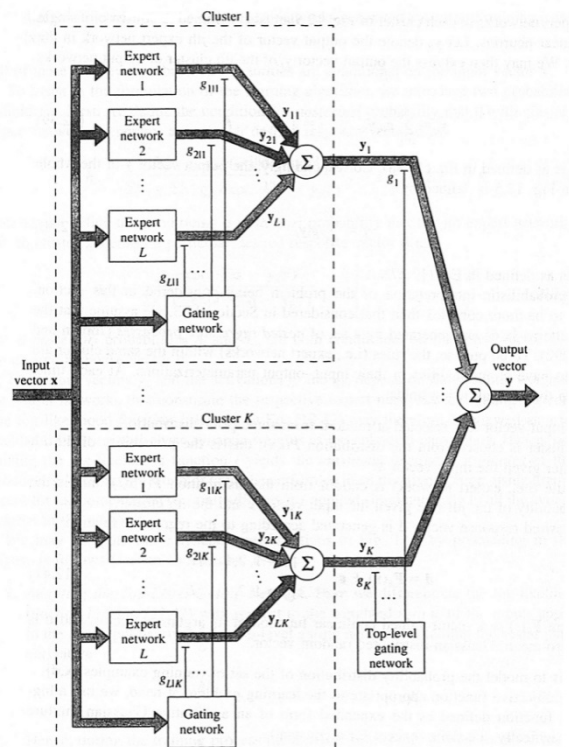
هرچند ممکن است دو نمونه خاک در یک pH معین واجد مقادیر کاملاً متفاوتی از K_d باشند، لیکن همانطور که ذکر شد، افزودن سایر متغیرها برای بهبود این رابطه موثر نبوده است. بنابراین در این پژوهش نیز با انتخاب pH به عنوان متغیر ورودی و کاربرد نتایج گزارش شده در این ۱۷۴ نمونه خاک، شبکه عصبی مورد نظر برای تخمین ضریب توزیع کادمیوم طراحی شد. پس از اخذ نتایج از مدل ارائه شده بر پایه ANN، نتایج این مدل با رگرسیون ارائه شده توسط USEPA (1999a)، مقایسه شد.

¹ Multi Layer Perceptrone

² Back propagation

³ Neuron

است که هر کدام یک شبکه خبره هستند. هر خوشه شامل L شبکه خبره تطابق‌پذیر است. شبکه‌های عصبی با کاربرد نرم‌افزار مطلب (۷) برنامه‌نویسی شدند.



شکل ۱- شبکه سلسله‌مراتبی (Haykin 1994)

سنجش آماری نتایج

به منظور ارزیابی اعتبار شبکه‌های پی‌ریزی شده برای تخمین مقدار ضریب توزیع فلز کروم، از تحلیل خطاهای باقیمانده و اختلاف بین مقادیر اندازه‌گیری و پیش‌بینی شده استفاده شد. آماره‌های لازم برای این کار حداکثر خطا (ME)، میانگین ریشه دوم خطا (RMSE)، ضریب تبیین (CD)، کارایی مدل‌سازی (EF)، و ضریب باقیمانده (CRM) بودند. تعریف ریاضی این آماره‌ها به صورت زیر است (Zarei et al., 2009):

$$ME = \max |P_i - O_i| \quad (2)$$

$$RMSE = \left[\frac{\sum_{i=1}^n (P_i - O_i)^2}{n} \right]^{0.5} \frac{100}{O} \quad (3)$$

برای محاسبه تعداد لایه پنهان و نرون‌های هر لایه رابطه خاصی وجود ندارد (نوییان و همکاران، ۱۳۸۳). بنابراین برای دست‌یافتن به بهترین ساختار ANN در هر مسأله مدل‌سازی نیاز به آزمون ساختارهای متعدد است.

شبکه عصبی RBF^۱: طراحی یک شبکه عصبی با آموزش تحت سرپرستی می‌تواند به روش‌های متفاوتی انجام شود. الگوریتم پس انتشار خطا در طراحی شبکه‌های MLP یک روش بهینه‌سازی از نوع تخمین تصادفی به شمار می‌رود. در شبکه‌های RBF روش دیگری برای آموزش شبکه به کار می‌رود که می‌توان آن را تخمین با برازش منحنی دانست. در این روش، آموزش شبکه به معنی یافتن سطحی در فضای چند بعدی است که بهترین تطابق را با داده‌های آموزش داشته باشد. در این صورت تعمیم شبکه به مفهوم به کار بردن این سطح برای درون‌یابی داده‌های آزمایش است.

شبکه‌های سلسله‌مراتبی (HN)^۲: به نظر می‌رسد ذهن انسان در مسائل ادراکی، نخست موضوعات را به صورت گروه‌بندی شده و سپس به صورت سطوح مختلف در یک گروه تشخیص می‌دهد. این مسأله نشان می‌دهد که حافظه انسان حین یادآوری به صورت سلسله‌مراتبی جستجو می‌کند و بدین‌گونه سازماندهی می‌شود (Haykin 1994). ایده شبکه‌های سلسله‌مراتبی نیز به همین دلیل وارد فضای ANN شد. در دنیای واقعی برای حل مسائل ویژه نیاز به افراد خبره است. در حل مسائل پیچیده نیز ممکن است یک شبکه عصبی عمومی قادر به یافتن جواب مطلوب نباشد (Shi et al., 1998). در چنین شرایطی می‌توان از شبکه‌های HN که بصورت مدولار هستند استفاده کرد. یک شبکه مدولار متشکل از چند مدول شبکه عصبی است که هر کدام در پیش‌بینی یک الگوی خاص خبره می‌باشند. هر مدول به طور جداگانه آموزش و آزمایش می‌شود. سپس همه مدول‌ها با یکدیگر جمع شده و یک سیستم واحد را ایجاد می‌کنند (مانند شکل ۱). هر شبکه شامل K خوشه

¹ Radial Basis Functions

² Hierarchical Network

گیری شده در هر دو مدل استفاده شد. معادله میانگین خطای نسبی به صورت زیر است:

$$MRE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\frac{K_{di}^{predict} - K_{di}^{measured}}{K_{di}^{measured}} \right) \times 100 \quad (7)$$

نتایج و بحث

همانطور که گفته شد برای یافتن بهترین ساختار شبکه‌های عصبی، تعداد زیادی ANN با هندسه متفاوت به صورت سعی و خطا آزمون شدند. ملاک انتخاب شبکه‌ها، پارامترهای آماری بود که خروجی پیش‌بینی شده را با مقدار واقعی آن مقایسه می‌کردند. خلاصه‌ای از ویژگی‌های مناسب‌ترین شبکه‌های عصبی برای تخمین مقدار K_d کروم (VI) در جدول‌های ۱ و ۲ ارائه شده است. شبکه‌های ۱، ۲ و ۳ در جدول ۱ از نوع MLP با چهار و دو نرون به ترتیب در لایه‌های پنهان اول و دوم و یک نرون در لایه خروجی هستند. شبکه‌های ۵، ۶ و ۷ شبکه‌های RBF هستند که در آن‌ها تابع تبدیل فضای ورودی به پنهان غیرخطی و از لایه پنهان به خروجی خطی بوده است. تعداد داده‌های آموزش شبکه‌ها در خاک‌های کنوما، پاکولت و کلاودلند به ترتیب برابر با ۹، ۱۴ و ۱۶ داده و تعداد داده‌های آزمایش به ترتیب ۶، ۶ و ۷ داده بوده است. برای مقایسه عملکرد شبکه‌های MLP و RBF در تخمین مقدار $K_{d(Cr)}$ ورودی‌ها و خروجی‌های تمام شبکه‌ها یکسان در نظر گرفته شد. بهترین نتایج تخمین ضریب توزیع کروم (VI) با شبکه‌های سلسله‌مراتبی نیز از شبکه‌های ۸، ۹ و ۱۰ بدست آمد که پاره‌ای از خصوصیات آن‌ها در جدول ۲ ارائه شده است. تمام شبکه‌های HN معرفی شده در این جدول، واجد دو خوشه با دو مدول خبره در هر خوشه هستند. در هر مدول نیز دو نرون قرار دارد. در شبکه‌های ۸a و ۸b مقدار K_d و در شبکه‌های ۸c و ۸d لگاریتم طبیعی K_d به عنوان خروجی در نظر گرفته شده است. همانطور که در جدول ۲ مشخص است، تفاوت شبکه‌های سلسله‌مراتبی در نحوه آموزش آن‌هاست. این آموزش یا بر پایه داده‌های ورودی

$$CD = \frac{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2}{\sum_{i=1}^n (P_i - \bar{O})^2} \quad (4)$$

$$EF = \frac{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2 - \sum_{i=1}^n (P_i - O_i)^2}{\sum_{i=1}^n (O_i - \bar{O})^2} \quad (5)$$

$$CRM = \frac{\sum_{i=1}^n O_i - \sum_{i=1}^n P_i}{\sum_{i=1}^n O_i} \quad (6)$$

که در آن‌ها، P_i مقدار پیش‌بینی شده، O_i مقدار اندازه‌گیری شده (مشاهده شده)، n تعداد نمونه‌های به کار رفته و \bar{O} مقدار متوسط مقادیر O است. حداکثر مقدار EF برابر یک است. حداقل مقدار ME، RMSE و CD صفر است. EF و CRM می‌توانند مقادیر منفی داشته باشند. مقدار زیاد ME نشان‌دهنده بدترین حالت کارکرد مدل است، در حالی که مقدار زیاد RMSE نشان می‌دهد که برآورد بیش از حد و یا کمتر از حد مدل در مقایسه با مشاهدات (اندازه‌گیری‌ها) چقدر است. آماره CD نسبت پراکندگی را بین مقادیر پیش‌بینی شده و اندازه‌گیری شده نشان می‌دهد. آماره EF مقادیر پیش‌بینی‌ها را با میانگین اندازه‌گیری‌ها مقایسه می‌کند. مقدار منفی EF بیانگر آن است که میانگین مقادیر اندازه‌گیری شده، برآوردی بهتر از مقادیر پیش‌بینی شده دارد. آماره CRM نشانگر تمایل مدل برای بیش‌برآوردی و یا کم‌برآوردی، در مقایسه با اندازه‌گیری‌ها است. چنانچه تمام مقادیر اندازه‌گیری شده و برآورد شده با هم برابر باشند، مقدار عددی این آماره‌ها برابر است با: $ME=0$ ، $RMSE=0$ ، $CD=1$ ، $EF=1$ و $CRM=0$ (Zarei et al., 2009).

برای مقایسه نتایج حاصل از مدل ANN با روش پارامتریک در مدلسازی $K_{d(Cd)}$ ، از ضریب همبستگی (r)، خطای استاندارد (SE)، میانگین ریشه دوم خطا و میانگین خطای نسبی (MRE) بین مقادیر پیش‌بینی شده و اندازه-

های MLP و RBF در برآورد مقدار $K_{d(Cr)}$ نسبت به شبکه‌های HN از نظر تمام آماره‌ها به وضوح مشخص است. این مسأله هم در مورد داده‌های آموزش و هم برای داده‌های آزمون شبکه‌ها صادق است. در خاک کنوما شبکه MLP در تخمین داده‌های آموزش بهتر از سایر شبکه‌ها عمل کرده است. حال آنکه آماره‌ها نشان می‌دهند که در تخمین داده‌های آزمون، شبکه RBF بر MLP چیره شده است.

است و یا ممکن است بر پایه خروجی هر خوشه انجام شده باشد. مقایسه جدول‌های ۱ و ۲ نشان می‌دهد که مدت زمان لازم برای آموزش شبکه‌های MLP و RBF بسیار کمتر از شبکه‌های سلسله مراتبی است و از این نظر بر شبکه‌های HN برتری دارند. سنجش اعتبار شبکه‌های مدلسازی شده در تخمین ضریب توزیع کروم سه نوع خاک پاکولت، کلاودلند و کنوما در جدول ۳ ارائه شده است. بر پایه این جدول برتری شبکه-

جدول ۱- خلاصه ویژگی‌های مناسب‌ترین شبکه‌های MLP و RBF

ردیف	ANN	نوع خاک	NTS	NSS	NHN1	NHN2	NON	نسبت K_d / K_d
۱	MLP	Kenoma	۹	۶	۴	۲	۱	۱/۰۷
۲	MLP	Pacolet	۱۴	۶	۴	۲	۱	۱۱/۸۸
۳	MLP	Cloudland	۱۶	۷	۴	۲	۱	۵/۵۵
۵	RBF	Kenoma	۹	۶	۳	۰	۱	۰/۲۲
۶	RBF	Pacolet	۱۴	۶	۹	۰	۱	۰/۲۲
۷	RBF	Cloudland	۱۶	۷	۱۶	۰	۱	۰/۷۱۱

^۱ NTS = تعداد داده‌های آموزش، ^۲ NSS = تعداد داده‌های آزمون، ^۳ NHN1 = تعداد نرون‌ها در اولین لایه پنهان
^۴ NHN2 = تعداد نرون‌ها در دومین لایه پنهان، ^۵ NON = تعداد نرون‌ها در لایه خروجی

بیش برآورد و نه کم برآورد بوده است. نتایج آماره‌ها در مورد شبکه‌های HN نشان‌دهنده ضعف این شبکه‌ها نسبت به دو نوع دیگر در تخمین K_d کروم است. حتی این نوع شبکه‌ها برای برخی مقادیر اندک ضریب توزیع، مقدار منفی پیش‌بینی کردند. در خاک کلاودلند، بهترین نتایج را شبکه‌های RBF و MLP به ترتیب با کاربرد داده‌های آموزش و آزمون، داشته‌اند. در این خاک هم شبکه‌های HN ضعیف‌تر از دو نوع دیگر در تخمین K_d عمل کرده‌اند.

نگاهی به آماره‌ها با کاربرد داده‌های آزمون نشان می‌دهد که با وجود برتری نسبی شبکه‌های RBF، لیکن هر دو شبکه MLP و RBF مدل‌هایی قدرتمند در تخمین K_d کروم هستند. مقدار منفی CRM در هر دو شبکه نشان می‌دهد که این مدل‌ها در پیش‌بینی ضریب توزیع کروم کمی بیش-برآورد هستند. در خاک پاکولت، بهترین نتایج را شبکه MLP با کاربرد داده‌های آموزش و آزمون، ارائه داده است. مقدار CRM برابر صفر حاکی از این است که مجموع مقادیر پیش‌بینی شده با مجموع مقادیر واقعی برابر است. در نتیجه مدل نه

جدول ۲- خلاصه ویژگی‌های شبکه‌های سلسله‌مراتبی

شماره	نام	نوع خاک	توصیف شبکه	نرخ یادگیری	زمان اجرا (S)
۸a	HN 1	Kenoma	خروجی: K_H و آموزش Top level gating با داده‌های ورودی انجام شد	۰/۰۱	۱۱۷۰
۸b	HN 2	Kenoma	خروجی: K_H و آموزش Top level gating با خروجی هر خوشه انجام شد	۰/۰۰۱	طولانی
۸c	HN 3	Kenoma	خروجی: $Ln(K_H)$ و آموزش Top level gating با داده‌های ورودی انجام شد	۰/۰۱	۲۱۸۰
۸d	HN 4	Kenoma	مانند شبکه ۸c اما با زمان آموزش بیشتر	۰/۰۱	۴۳۶۰
۹a	HN 5	Pacolet	خروجی: K_H و آموزش Top level gating با داده‌های ورودی انجام شد	۰/۰۱	۶۸۳۵
۹b	HN 6	Pacolet	خروجی: $Ln(K_H)$ و آموزش Top level gating با داده‌های ورودی انجام شد	۰/۰۱	۶۸۳۵
c۹	HN 7	Pacolet	مانند شبکه ۹b اما با زمان آموزش بیشتر	۰/۰۱	طولانی
۱۰a	HN 8	Cloudland	خروجی: K_H و آموزش Top level gating با خروجی هر خوشه انجام شد	۰/۰۱	طولانی
۱۰b	HN 9	Cloudland	خروجی: $Ln(K_H)$ و آموزش Top level gating با داده‌های ورودی انجام شد	۰/۰۱	طولانی

در اینجا نیز هر دو شبکه MLP و RBF در تخمین مقدار K_H قدرتمند ظاهر شدند که برتری نسبی با شبکه MLP بود. نکته حائز اهمیت اینکه شبکه‌های HN که پیش از این با کاربرد داده‌های هر خاک به طور مستقل به خوبی عمل نکرده بودند، با داده‌های کلی بسیار بهتر از پیش پاسخ دادند. این مسأله می‌تواند ناشی از افزایش تعداد فضای نمونه برای آموزش شبکه باشد. در نتیجه مدل‌های خبره توانسته‌اند به بهترین صورت خود را با الگوی ارائه شده، هماهنگ نمایند. از دیگر طرف، در مقایسه با کاربرد داده‌های خاک‌ها به‌طور مستقل، قدرت تخمین شبکه‌های MLP و RBF در حالت کلی کاهش یافته است و بیانگر آن است که در شرایطی که فضای نمونه آموزشی پیچیده‌تر و مرتبط با انواع مختلف خاک باشد، شبکه‌های HN در تخمین خروجی می‌توانند توانمندتر باشند. شبکه‌های عصبی مناسب که با آزمون و خطا، نتایج قابل قبول‌تری در تخمین ضریب توزیع کادمیوم ارائه داده‌اند عبارت بودند از: RBF، MLP با ساختار $10 \times 10 \times 1$ ، MLP با ساختار $10 \times 5 \times 1$ و MLP با ساختار $10 \times 5 \times 1$ به ترتیب تعداد

نکته قابل توجه این است که بر پایه نتایج جدول ۳، برای آموزش شبکه‌ها حداقل نه داده (خاک کنوما) و آزمون آن‌ها حداقل شش داده (خاک‌های کنوما و پاکولت) برای عملکرد مناسب شبکه‌های MLP و RBF کفایت می‌کند. نظر به اینکه اندازه‌گیری مستقیم مقدار ضریب توزیع در خاک زمان‌بر و هزینه‌بر بوده و معمولاً در هر پروژه تعداد اندکی نمونه در دست خواهد بود، لذا این نتیجه گامی بسیار موثر در تخمین ضریب توزیع است. اگرچه بهتر است مقدار K_H برای هر نوع خاک با توجه به شرایط ویژه آن به طور مستقل محاسبه شود، لیکن داشتن یک رابطه کلی برای تخمین ضریب توزیع در مراحل اولیه بررسی امکان‌پذیر است. محیط آلوده نیز بسیار کاراست. بنابراین با ادغام داده‌های هر سه نمونه خاک، توانایی هر سه شبکه در تخمین K_H در حالت کلی نیز بررسی شد. از ۵۸ داده در دسترس، ۴۴ داده برای آموزش و ۱۴ داده برای آزمایش شبکه‌ها بکار رفت. نتایج اعتبار سنجی مدل کلی نیز در جدول ۳ ارائه شده است.

تأثیر تعداد لایه‌های پنهان و نرون‌ها چندان قابل توجه نیست. در شبکه‌های MLP پس از اعمال کل داده‌ها، مقدار میانگین خطای نسبی از ۱۸۶ درصد در مدل ریاضی به کمتر از ۱۰۰ درصد کاهش یافته که نشان‌دهنده برتری این مدل در پیش‌بینی نسبت به مدل ریاضی است.

نرون در لایه خروجی، لایه‌های پنهان و لایه ورودی. نتایج حاصل از کاربرد این شبکه‌ها با مدل ریاضی ارائه شده توسط USEPA (1999a) مقایسه شد که در جدول ۴ ارائه شده است. این جدول نشان می‌دهد که شبکه‌های MLP کمترین میانگین خطای نسبی را دارند. همچنین، با توجه به یکسان بودن میانگین خطای نسبی در شبکه‌های MLP،

جدول ۳- نتایج اعتبارسنجی مدل‌های طراحی شده بر پایه شبکه‌های عصبی مصنوعی در خاکهای مختلف

CRM	EF	CD	RMSE	ME	نوع شبکه	نوع داده	نوع خاک
۰	۱/۰۰	۱/۰۰	۰/۷۸	۰/۱۸	MLP	آموزش	کنوما
۰	۰/۹۹	۱/۰۰	۵/۷۲	۱/۵۵	RBF		
۰	۰/۹۹	۱/۱۵	۷/۵۰	۱/۵۳	HN 1		
-۰/۰۰۴	۰/۹۸	۱/۲۰	۹/۰۷	۱/۸۲	HN 2		
-۰/۰۰۲	۰/۹۱	۱/۱۲	۱۱/۰۹	۶/۳۵	HN 3		
-۰/۰۲۳	۰/۹۸	۰/۸۷	۱۰/۲۲	۲/۷۶	HN 4		
-۰/۰۸	۰/۹۹	۰/۹۵	۱۰/۷۵	۱/۵۶	MLP	آزمون	کنوما
-۰/۰۴	۰/۹۹	۱	۷/۷۴	۰/۸۹	RBF		
۰	۰/۹۷	۰/۹۳	۱۵/۴۵	۲/۶۱	HN 1		
۰	۰/۹۶	۰/۹۱	۱۷/۵۴	۳/۰۵	HN 2		
-۰/۱۰	۰/۹۸	۰/۶۹	۲۳/۳۷	۱/۶۶	HN 3		
-۰/۰۲	۰/۹۹	۱/۰۹	۸/۴۸	۱/۲۸	HN 4		
۰	۱/۰۰	۱/۰۰	۰/۵۱	۲/۱۳	MLP	آموزش	پاکولت
۰	۱/۰۰	۱/۰۰	۰/۷۳	۲/۱۰	RBF		
-۰/۱۵	۰/۷۶	۰/۵۰	۳۷/۶۳	۴۷۵/۲۱	HN 6		
۰/۰۲	۰/۹۳	۰/۴۶	۲۰/۵۹	۳۳۵/۳۲	HN 7		
۰	۱/۰۰	۱/۰۰	۰/۴۵	۱/۲۳	MLP	آزمون	پاکولت
۰/۰۲	۱/۰۰	۱/۰۰	۳/۲۹	۹/۱۵	RBF		
-۰/۳۴	۰/۱۵	۰/۳۳	۸۸/۶۲	۱۵۲/۴۸	HN 6		
-۰/۱۴	۰/۵۹	۰/۷۱	۶۱/۸۴	۶۹/۳۳	HN 7		
۰	۱/۰۰	۱/۰۰	۰/۱۳	۱/۳۰	MLP	آموزش	پاکولت
۰	۱/۰۰	۱/۰۰	۰	۰	RBF		
۰/۰۷	۰/۹۴	۰/۹۲	۲۴/۰۵	۳۴۳	HN 8		
۰/۰۱	۱/۰۰	۱/۰۶	۹/۰۲	۱۰۴/۱۰	HN 9		
۰	۱/۰۰	۱/۰۰	۰/۲۵	۱/۹۲	MLP	آزمون	کلودلند
۰	۱/۰۰	۰/۹۹	۱/۳۳	۱۸/۹۰	RBF		
۰/۱۷	۰/۹۳	۰/۷۲	۲۷/۰۳	۲۹۴/۸۰	HN 8		
۰/۰۱	۰/۹۹	۱/۰۳	۵/۱۷	۵۷/۱۶	HN 9		
-۰/۰۷	۰/۹۹	۰/۹۳	۵/۳۴	۲/۶۷	MLP	آزمون	مدل کلی
-۰/۱۰	۰/۹۵	۰/۸۹	۷/۶۷	۱۹/۴۵	RBF		
-۰/۰۸	۰/۹۰	۰/۸۰	۱۰/۵۶	۲۵/۰۳	HN		

استفاده از شبکه عصبی نسبت به مدل ریاضی در مواردی حتی به کمتر از نصف کاهش یافته است. به عنوان نمونه

نتایج مشابهی برای مقدار خطای استاندارد دیده می‌شود. خطای استاندارد در پیش‌بینی ضریب توزیع کادمیوم با

به توانمندی آن‌ها در مدل‌سازی در شرایط غیرخطی، قابل انتظار بوده است. این شبکه‌ها توانسته‌اند مقدار ضریب همبستگی را بین مقادیر واقعی و مقادیر پیش‌بینی شده از ۰/۳۷ در مدل ریاضی EPA به ۰/۶۱ تا ۰/۶۹ برسانند.

خطای استاندارد کلیه داده‌ها با استفاده از مدل ریاضی ۴۷۵ است که استفاده از یک شبکه MLP 10x5x3x1 می‌تواند آن را به ۱۹۷ کاهش دهد.

در جدول ۴ مشخص است که شبکه‌های عصبی ضریب همبستگی بزرگتری نسبت به مدل ریاضی دارند که با توجه

جدول ۴- مقایسه دقت مدل‌های شبکه عصبی مصنوعی با مدل پارامتریک در تخمین Kd(Cd)

MLP 10x5x3x1	MLP 20x10x1	MLP 10x5x1	RBF	مدل پارامتریک	آماره	نوع داده
۱۵/۵۵	۱۵/۹۰	۱۵/۴۹	۱۳/۴۰	۲۰/۶۸	میانگین ریشه دوم خطا	داده‌های آموزش
۲۱۰	۲۰۶	۲۳۵	۳۰۴	۵۱۹	خطای استاندارد (SE)	
۰/۶۳۶	۰/۶۱۳	۰/۶۲۸	۰/۷۱۲	۰/۳۶۶	ضریب همبستگی	
۹۵	۱۰۱	۹۶	۱۳۹	۱۹۹	متوسط خطای نسبی (%)	
۷/۲۸	۷/۴۸	۷/۲۸	۹/۶۰	۸/۸۳	میانگین ریشه دوم خطا	داده‌های آزمون
۱۲۷	۱۴۰	۱۳۱	۲۹۶	۲۱۲	خطای استاندارد (SE)	
۰/۶۰	۰/۵۷	۰/۶۰	۰/۵۶	۰/۴۱	ضریب همبستگی	
۱۰۵	۱۰۲	۱۰۸	۱۵۲	۱۳۰	متوسط خطای نسبی (%)	
۱۴/۳۵	۱۴/۶۶	۱۴/۲۴	۱۲/۷۰	۱۹	میانگین ریشه دوم خطا	رطوبت داده‌ها
۱۹۷	۱۹۵	۲۱۸	۳۰۲	۴۷۵	خطای استاندارد (SE)	
۰/۶۳	۰/۶۱	۰/۶۳	۰/۶۹	۰/۳۷	ضریب همبستگی	
۹۷	۱۰۱	۹۸	۱۴۱	۱۸۶	متوسط خطای نسبی (%)	

مدلسازی انتشار آلودگی در محیط خاک و آبخوان با توجه به کاهش زمان اجرا، سودمند به نظر می‌رسد. شبکه‌های سلسله‌مراتبی در پیش‌بینی مقادیر اندک ضریب توزیع ضعیف عمل کردند و ممکن است برای آن‌ها مقادیر منفی نیز تخمین زنند. لیکن با افزایش داده‌های ورودی و همچنین پیچیده‌تر شدن الگوی آموزش، این شبکه‌ها نتایج امیدوارکننده‌ای در اختیار می‌گذارند. البته با طولانی شدن زمان آموزش شبکه‌ها، دقت آن‌ها در تخمین نیز افزایش می‌یابد. استفاده از لگاریتم K_d نیز دقت شبکه‌های HN و زمان لازم برای آموزش آنها را بهبود می‌بخشد. نتایج استفاده از ANN در پیش‌بینی مقدار ضریب توزیع کادمیوم نشان‌دهنده برتری این شبکه‌ها نسبت به روش‌های پارامتریک بود. ضریب همبستگی میان مقادیر پیش‌بینی

نتیجه‌گیری

تاکنون شبکه‌های عصبی مصنوعی در گره‌گشایی بسیاری از مشکلات زیست‌محیطی موفق بوده‌اند. در مدلسازی ضریب توزیع نیز ANN ممکن است به رفع محدودیت‌های روش‌های مرسوم آماری غلبه کند. به همین سبب، در این پژوهش به بررسی امکان استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی در تخمین ضریب توزیع دو فلز پرکاربرد کروم و کادمیوم که از مهم‌ترین آلاینده‌های منابع آب و خاک به شمار می‌روند، پرداخته شد. نتایج پژوهش نشان داد که شبکه‌های عصبی MLP و RBF ابزاری قدرتمند در مدلسازی تغییرات K_d این فلزات هستند. زمان آموزش شبکه‌های RBF برای پیش‌بینی $K_{d(Cr)}$ کمتر از شبکه‌های MLP بود. بنابراین کاربرد این شبکه‌ها در نرم‌افزارهای

- soil physicochemical properties. *Chemosphere* 89: 825-831.
- Haykin, S. 1994. *Neural networks*. New York: Macmillan College Publishing Co. 696 p.
- Rai, D., Zachara, J.M., Eary, L.E., Ainsworth, C.C., Amonette, J.E., Cowan, C.E., Szelmeczka, R.W., Resch, C.T., Schmidt, R.L., Girvin, D.C. and Smith, S.C. 1988. Chromium reactions in Geological Materials. EPRI-EA-5741. Electric Power Research Institute, Palo Alto, California.
- Sauve, S., Hendershot, W. and Allen, H.E. 2000. Solid-solution partitioning of metals in contaminated soils: dependence on pH, total metal burden and organic matter. *Environmental Science and Technology* 34 (7): 1125-1131.
- Shi, J., Ortigao, J.A.R. and Bai, j. 1998. Modular neural networks for predicting settlements during tunneling. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, ASCE*, 124(5): 389-395.
- Staunton, S. 2004. Sensitivity analysis of the distribution coefficient, K_d , of nickel with changing soil chemical properties. *Geoderma* 122: 281-290.
- United States Environmental Protection Agency, 1999a. Understanding variation in partition coefficient, K_d values, Volume II: Review of Geochemistry and Available K_d Values for Cadmium, Cesium, Chromium, Lead, Plutonium, Radon, Strontium, Thorium, Tritium (3H) and Uranium. USEPA, Office of Air and Radiation EPA 402-R-99-004B, Washington, USA. 326 p.
- United States Environmental Protection Agency, 1999b. Understanding variation in partition coefficient, K_d values, Volume I: The K_d model, methods of measurement and application of chemical reaction codes. USEPA, Office of Air and Radiation EPA 402-R-99-004A, Washington, USA. 212 p.
- Vandenhove, H., Van Hees, M., Olyslaegers, G. and Vidal, M. 2009. Proposal for new best estimates for the soil solid-liquid distribution coefficient and soil-to-plant transfer of nickel. *Journal of Environmental Radioactivity* 100: 342-347.
- Zarei, G., Homae, M., Liaghat, A. 2009. Modeling transient evaporation from descending shallow groundwater table based on Brooks-Corey retention function. *Water Resources Management* 23(14): 2867-2876.
- شده و واقعی حاصل از مدل شبکه عصبی، حدود دو برابر و میانگین خطای نسبی آن حدوداً نصف مدل ریاضی بود. این نتایج نشان می‌دهد هرچند استفاده از ANN پیچیده‌تر از معادلات رگرسیونی است، لیکن برتری که در تخمین K_d نشان دادند، استفاده از آن‌ها را توجیه می‌نماید. بویژه که در استفاده از ANN نیاز به داشتن داده‌های نرمال و عدم هم‌راستایی میان داده‌ها نیست که از محدودیت‌های مدل-های پارامتریک به شمار می‌روند.

فهرست منابع

نوابیان، م.، لیاقت، ع. و همایی، م. ۱۳۸۳. برآورد سریع هدایت آبی اشباع خاک با استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی. دومین کنفرانس ملی دانشجویی منابع آب و خاک، دانشکده کشاورزی، دانشگاه شیراز.

- Carlson, C., Dalla Valle, M. and Marcomini, A. 2004. Regression models to predict water-soil heavy metals partition coefficients in risk assessment studies. *Environmental Pollution* 127: 109-115.
- Ellis, G.W., Yao, C., Zhao, R. and Penumadu, D. 1995. Stress-strain modeling of sands using artificial neural networks. *Journal of Geotechnical Engineering, ASCE*, 121(5): 429-435.
- Falamaki, A. 2013. Artificial neural network application for predicting soil distribution coefficient of nickel. *Journal of Environmental Radioactivity* 115: 6-12.
- Gil-García, C., Rigol, A. and Vidal, M. 2011. The use of hard- and soft-modelling to predict radiostrontium solid-liquid distribution coefficients in soils. *Chemosphere* 85: 1400-1405.
- Gil-Garcia, C., Tagami, K., Uchida, S., Rigol, A. and Vidal, M. 2009. Proposal of new best estimates for radionuclide solid-liquid distribution coefficients in soils. Part 3. Miscellaneous of radionuclides (Cd, Co, Ni, Zn, I, Se, Sb, Pu, Am, and others). *Journal of Environmental Radioactivity* 100: 342-347.
- Gong, W., Liu, X., He, H., Wang, L. and Dai, G. 2012. Quantitatively modeling soil-water distribution coefficients of three antibiotics using



Predicting soil–water distribution coefficients of heavy metals using artificial neural networks

Amin Falamaki^{1*} and Mahnaz Eskandari²

1*) Department of Civil Engineering; Payame Noor University, PO Box 19395-3697, Tehran, Iran,
Corresponding author email: a_falamaki@pnu.ac.ir

2) Department of Soil Science, Science and research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

Received: 08-04-2012

Accepted: 21-09-2012

Abstract

Contamination of soil and water resources is a major concern for optimal use of these resources worldwide. The so-called distribution coefficient (K_d) is an applied parameter not only for modeling contaminant transport in soil but also for risk analysis of soil and water resources contamination. The most common quantitative model for estimating K_d is parametric method. The correlation coefficient of this model is usually low, however, the predicted K_d values may cause significant inaccuracy in predicting the impacts of contaminant migration or site-remediation options. The objective of this study was to investigate application of artificial neural networks (ANN) for improving K_d prediction of heavy metals. Consequently, three ANN types including multi layer perceptron (MLP), radial basis function (RBF) and hierarchical networks (HN) and two heavy metals of Chromium (VI) and cadmium were used for modeling purposes. The collected data were first divided into two training and test groups. The first group was used to train ANN and the second to evaluate generalized ANN models. The most suitable geometry of networks were obtained with trial and error procedure. The results of modeling $K_{d(Cr)}$ revealed that both MLP and RBF networks are reasonable tools, but MLP was more accurate than RBF. Although the applied input data for training networks were not so much (at least 9 and the maximum of 16), but they were sufficient for modeling $K_{d(Cr)}$. This finding is a promising result because direct measurement of K_d is expensive and time consuming. Further, usually limited numbers of available data are existing in each case. The results of predicting $K_{d(Cd)}$ approved the preferences of MLP for modeling purposes. The ANN model can significantly enhance the correlation coefficient between predicted and measured data from 0.37 of parametric method to 0.63.

Keywords: Artificial neural networks; cadmium; chromium; soil–water distribution coefficient