

Małgorzata Kabsch-Korbutowicz, Małgorzata Kutylowska

Zastosowanie sztucznych sieci neuronowych do prognozowania zmian mętności wody w procesie koagulacja/ultrafiltracja

Separacja membranowa należy do bardzo szybko rozwijających się technik stosowanych w inżynierii środowiska, zwłaszcza w układach oczyszczania wody i ścieków. Jednocześnie coraz częściej zastosowanie w technologii oczyszczania wody znajdują procesy zintegrowane (hybrydowe), w których połączenie typowych technologii oczyszczania wody z metodami niekonwencjonalnymi umożliwi osiągnięcie lepszego stopnia usunięcia zanieczyszczeń, czego przykładem może być układy łączące koagulację i filtrację membranową [1]. Pomimo znaczącego rozwoju w ostatnich latach procesów hybrydowych i metod określania ich parametrów procesowych (dawka koagulantu, zużycie energii, metody płukania), pozostało jeszcze do rozwiązania wiele problemów związanych z przewidywaniem jakości wody oczyszczonej, m.in. zależnie od sposobu przeprowadzenia eksperymentu oraz zastosowanej metody modelowania. Do tego celu mogą być wykorzystane sztuczne sieci neuronowe (SSN), gdyż modelowanie matematyczne za ich pomocą pozwala na ograniczenie czasochłonnych i drogich badań laboratoryjnych, mających na celu doświadczalne określenie parametrów ilościowych i jakościowych procesów technologicznych.

Przesyłanie informacji w sztucznych sieciach neuronowych imituje zachowanie się ludzkiego systemu nerwowego [2]. Neurony, z których składa się sieć, są jednostkami przetwarzania danych. Sztuczna sieć neuronowa oblicza wartości wyjściowe na podstawie informacji podanych na wejściu do sieci. Pierwszy model sztucznego neuronu stworzyli McCulloch i Pitts w 1943 r. [3], według których sygnały wyjściowe z neuronu wyrażone są za pomocą równania:

$$y_i = f\left(\sum_{j=1}^N w_{ij}x_j + b_i\right), \quad i, j = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

Funkcja opisana równaniem (1) jest nazywana funkcją aktywacji, która jest odpowiedzialna za przesyłanie informacji. Model ten jest bardzo prosty i od 1943 r. prace nad sztucznymi sieciami neuronowymi rozwijały się dosyć szybko, czego konsekwencją jest obecnie możliwość ich wykorzystania w modelowaniu wielu procesów dynamicznych. Poszczególne połączenia między neuronami mają określone, przyjęte na początku *a priori*, wartości wag, które są modyfikowane w procesie uczenia sieci. Znanych

jest wiele typów SSN, ale obecnie najbardziej popularnym rodzajem sieci neuronowej jest perceptron wielowarstwowy z jedną warstwą wejściową, jedną (lub więcej) warstwą ukrytą i pojedynczą warstwą wyjściową. Atrakcyjność stosowania SSN związana jest głównie z możliwością aproksymacji dowolnych nieliniowości. Do stworzenia modelu sieci nie jest konieczna znajomość postaci funkcji opisującej modelowaną zmienną. Ponadto sztuczne sieci neuronowe dosyć łatwo adaptują się do zmiennych warunków środowiskowych [4]. Ponieważ modelowanie za pomocą sztucznych sieci neuronowych jest uznawane za podejście typu „czarna skrzynka”, dlatego nie jest możliwe określenie *a priori* optymalnej architektury sieci. Do odpowiedniej struktury sieci – w celu rozwiązania konkretnego zagadnienia inżynierskiego – dochodzi się metodą prób i błędów.

Znanych jest wiele przykładów zastosowania symulacji matematycznych wykorzystujących SSN do prognozowania wartości zmiennych parametrów. Oczyszczanie wody w procesach membranowych jest dziedziną, w której modelowanie za pomocą SSN jest bardzo popularne. Wykorzystując modele SSN, oparte na ilościowych równaniach opisujących relacje pomiędzy zmiennymi procesowymi, można przewidywać stopień usunięcia naturalnych związków organicznych na poliamidowych membranach nano-filtracyjnych i w procesie odwróconej osmozy [5]. Stopień usunięcia substancji humusowych i zjawisko blokowania membran ultrafiltracyjnych były prognozowane przy użyciu najpopularniejszego algorytmu uczenia sieci – metody wstecznej propagacji błędów [6]. SSN wykorzystano także do przewidywania wartości parametrów pracy instalacji odwróconej osmozy do odsalania wody [7]. Strumień filtratu i stopień usunięcia soli posłużyły jako informacje wejściowe do sieci.

Bardzo ciekawe podejście do prognozowania poboru wody przedstawiono w monografii [8], w której porównano stochastyczne metody prognozowania poboru wody z miejskich sieci wodociągowych z wynikami modeli sztucznych sieci neuronowych. Ze względu na dużą zmienność szeregów czasowych poboru wody, SSN okazały się obiecującym narzędziem do prognozowania krótkoterminowego.

Modelowanie odzysku energii z przetwornika ciepła wykorzystywanego w zakładzie oczyszczania wody zostało zaproponowane w pracy [9], w której porównano model termodynamiczny z modelem sztucznej sieci neuronowej. Oba modele wykazały wystarczającą zbieżność wyników pomiarów i symulacji. Rozwiązanie problemu omówionego w tym opracowaniu, z punktu widzenia konieczności dbania o zasoby energetyczne, jest bardzo istotne i dające wiele nadziei na przyszłość.

Sztuczne sieci neuronowe wykorzystano także do opisu procesu ekstrakcji rozpuszczalnikowej pierwiastków z grupy lantanowców [10]. Sztuczna inteligencja znalazła również zastosowanie w modelowaniu stężeń zanieczyszczeń w stacjach monitoringu powietrza [11].

W szeroko pojętej dziedzinie inżynierii środowiska sztuczne sieci neuronowe są dosyć często wykorzystywane jako nowoczesne narzędzie matematyczne, mogące zastąpić żmudne obliczenia i kosztowne pomiary laboratoryjne. Z uwagi na brak jednoznacznych informacji na temat przewidywania zmian mętności wody oczyszczonej w procesie koagulacja/ultrafiltracja, w niniejszej pracy podjęto problem modelowania zmian mętności wody oczyszczonej w zintegrowanym procesie wykorzystującym zanurzone membrany ultrafiltracyjne firmy Zenon.

Badania pilotowe oczyszczania wody infiltracyjnej

Badania technologiczne wykonano na Uniwersytecie Technicznym w Dreźnie. Przeprowadzono je na instalacji pilotowej oczyszczającej wodę infiltracyjną pochodzącą z ujęcia brzegowego zasilanego wodami Łaby [12,13]. Ujmowana woda charakteryzowała się bardzo małą mętnością (nawet $<0,4$ NTU), a jej pH wahało się w granicach $6,7\div 7,1$. Zawartość rozpuszczonego węgla organicznego w ujmowanej wodzie wynosiła $1,3\div 2,0$ gC/m³. Celem badań laboratoryjnych było określenie wpływu wstępnego oczyszczania wody w zintegrowanym procesie koagulacja/ultrafiltracja na skuteczność usuwania cis-1,2 dichloroetenu (DCE) podczas adsorpcji na granulowanym węglu aktywnym. DCE jest lotnym rozpuszczalnikiem używanym w różnych procesach produkcyjnych. Związek ten może też być produktem beztlenowych przemian tetrachloroetenu i trichloroetenu. Może on występować zarówno w wodach powierzchniowych, jak i podziemnych, stwierdzono także jego obecność w wodzie infiltracyjnej [12]. Zawartość DCE w ujmowanej wodzie będącej przedmiotem badań wynosiła $0,3\div 7,5$ mg/m³. Ze względu na fakt, iż obecność naturalnych związków organicznych w oczyszczanej wodzie zmniejsza skuteczność adsorpcji DCE [14], ich wcześniejsze usunięcie (np. w procesie koagulacja/ultrafiltracja) może znacząco poprawić końcową jakość wody.

Pilotowa instalacja ultrafiltracyjna była wyposażona w trzy zanurzone kapilarne moduły ultrafiltracyjne ZeeWeed 500c i została szczegółowo omówiona w pracy [12]. Koagulant w ilości 1 gAl/m³ dodawany był do wody przed zbiornikiem procesowym. Flokulacja zachodziła w u-rurce o średnicy 6-krotnie większej niż przewód doprowadzający. Czas przetrzymania w tym urządzeniu wynosił 9 min, co umożliwiło wytworzenie kłaczków pokoagulacyjnych. Następnie woda była doprowadzana do zbiornika z membranami zanurzonymi. Rozmiar porów membrany o granicznej rozdzielczości (cut-off) wynoszącej 200 kDa był równy $0,04$ μm. Całkowita powierzchnia filtracyjna membran wynosiła 60 m². Podczas ultrafiltracji we włóknach membranowych wytwarzano podciśnienie w zakresie $15\div 50$ kPa. Cykl pracy modułów składał się z 20-min. filtracji ze stałym strumieniem $2,4$ m³/h, po którym następowało płukanie w odwrotnym kierunku strumieniem filtratu wynoszącym $3,3$ m³/h przez 30 s. Gdy ciśnienie transmembranowe (podciśnienie) osiągnęło wartość około 50 kPa (po 6÷12 tyg. pracy), zastosowano chemiczne czyszczenie membran kwasem solnym i/lub cytrynowym. Podczas czyszczenia elementy instalacji były dezynfekowane podchlorynem sodu.

Wyniki badań przeprowadzonych na stacji pilotowej posłużyły do stworzenia modeli sztucznych sieci neuronowych, a następnie ich weryfikacji.

Założenia architektury sztucznych sieci neuronowych do modelowania zmian mętności wody

Mętność wody jest wskaźnikiem jakościowym, więc do jego prognozy wykorzystano – jako dane wejściowe – główne zmienne jakościowe strumienia zasilającego. Takie podejście wydaje się być uzasadnione, gdyż zmiany temperatury i pH wody mają niewątpliwą wpływ na skuteczność procesu ultrafiltracji, a w związku z tym także na jakość filtratu. Podczas koagulacji poprzedzającej proces ultrafiltracji powstawały kłaczkowe mające znaczenie w określaniu mętności wody po całym procesie oczyszczania wody infiltracyjnej. Wszystkie parametry odniesiono do warunków normalnych ($293,15$ K).

Dokładność prognozowania parametru wyjściowego ze sztucznej sieci neuronowej zależy w dużej mierze od liczby zmiennych będących sygnałami na wejściu do sieci. Podczas tworzenia właściwej architektury sieci ważne jest, aby w rezultacie otrzymać funkcję opisującą przewidywany parametr o bardzo dobrym dopasowaniu do danych zmierzonych. Modelowanie zmian mętności wody po hybrydowym procesie koagulacja/ultrafiltracja zostało przeprowadzone z wykorzystaniem programu Statistica 8.0.

Stworzono różne modele sieci neuronowych, w których zmiennymi wejściowymi były następujące wskaźniki jakościowe i parametry procesowe: mętność wody infiltracyjnej (M_s), mętność wody po procesie koagulacji tuż przed zbiornikiem procesowym (M_{kg}), mętność wody w zbiorniku procesowym (M_{zb}), ciśnienie transmembranowe (ΔP), rzeczywisty strumień filtratu (J), pH wody w zbiorniku procesowym (pH_{zb}) oraz temperatura wody w zbiorniku procesowym (T_{zb}). Skuteczność zmniejszenia mętności wody (R_m) była modelowanym sygnałem wyjściowym z sieci. Podczas wyboru zmiennych wejściowych kierowano się również łatwością ich pomiaru, co niewątpliwie jest zaletą, gdyż w takiej sytuacji zastosowanie modelu i prognozowanie w oparciu o dane z innej instalacji staje się łatwiejsze. Należy jednak pamiętać, iż wykorzystanie modelu na innej instalacji jest możliwe tylko przy założeniu, że procesy tam zachodzące są identyczne.

Podczas tworzenia modelu sztucznej sieci neuronowej parametry wejściowe zmieniały się w następujących zakresach:

$$\begin{aligned} M_s &= 0,10 \div 0,31 \text{ NTU}, \\ M_{kg} &= 0,50 \div 0,89 \text{ NTU}, \\ M_{zb} &= 57,20 \div 487,00 \text{ NTU}, \\ \Delta P &= 23,72 \div 24,11 \text{ kPa}, \\ T_{zb} &= 285,31 \div 285,52 \text{ K}, \\ pH_{zb} &= 6,85 \div 6,91, \\ J &= 1,28 \div 1,30 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{d}. \end{aligned}$$

Zmierzony sygnał wyjściowy (R_m) wahał się w granicach $0,4615 \div 0,8710$. Podczas prognozowania wartości wejściowe zmieniały się w następujących zakresach:

$$\begin{aligned} M_s &= 0,10 \div 0,31 \text{ NTU}, \\ M_{kg} &= 0,22 \div 0,91 \text{ NTU}, \\ M_{zb} &= 12,76 \div 98,30 \text{ NTU}, \\ \Delta P &= 23,75 \div 24,19 \text{ kPa}, \\ T_{zb} &= 285,31 \div 285,52 \text{ K}, \\ pH_{zb} &= 6,85 \div 6,90, \\ J &= 1,28 \div 1,30 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{d}. \end{aligned}$$

Zmierzony sygnał wyjściowy (R_m) wahał się w granicach $0,5385 \pm 0,8710$.

Eksperymentalną skuteczność zmniejszenia mętności wody wyznaczono na podstawie wyników pomiarów mętności filtratu (M_p) z zależności:

$$R_m = 1 - \left(\frac{M_p}{M_s} \right) \quad (2)$$

Analiza dotycząca struktury sztucznych sieci neuronowych obejmowała następujące zagadnienia:

– wybór podzbiorów: wykorzystano losową metodę próbkowania; do uczenia sieci (do stworzenia modeli sztucznych sieci neuronowych) użyto 30 danych, z czego 50% wybrano do trenowania sieci, 25% do testowania i 25% do walidacji; prognozę za pomocą najlepszej sieci dokonano na zbiorze 20 danych,

– typ sieci neuronowej: do analiz wybrano jedynie jeden rodzaj sieci – perceptron wielowarstwowy (MLP P-U-K), uważany obecnie [15,16] za najbardziej odpowiedni do zadań regresyjnych, opisany za pomocą P-neuronów wejściowych, U-neuronów ukrytych oraz K-neuronów wyjściowych,

– minimalna liczba neuronów ukrytych: w celu zachowania odpowiednich i wiarygodnych warunków brzegowych, ustalono najniższą liczbę neuronów ukrytych na poziomie 2,

– maksymalna liczba neuronów ukrytych: w celu zachowania odpowiednich i wiarygodnych warunków brzegowych, ustalono najwyższą liczbę neuronów ukrytych na poziomie 35; przyjęcie większej liczby neuronów mogłoby spowodować przeuczenie sieci, co w konsekwencji prowadziłoby do otrzymania funkcji o zbyt dużym dopasowaniu i charakteryzującej się brakiem zdolności uogólniania,

– funkcje aktywacji w warstwach ukrytej i wyjściowej: w zastosowaniach inżynierskich bardzo istotne jest, aby stosowany opis matematyczny nie był zbyt skomplikowany, dlatego też podczas tworzenia struktury sztucznych sieci neuronowych przewidujących wartość R_m zastosowano typowe funkcje aktywacji poszczególnych neuronów; wybrano proste w opisie matematycznym funkcje aktywacji: liniową, logistyczną, wykładniczą i tangens hiperboliczny,

– metody uczenia: podczas uczenia zastosowano następujące algorytmy – zmiennej metryki-BFGS (metoda *quasi*-Newtona), najszybszego spadku, skalowane gradienty sprzężone,

– liczba epok uczenia: w celu uzyskania wiarygodnych rezultatów, liczba epok wahała się w przedziale 1÷218.

Dyskusja wyników

Biorąc pod uwagę przyjęte założenia, stworzono 20 modeli sztucznych sieci neuronowych, których główne parametry po procesie uczenia przedstawiono w tabeli 1. Spośród wszystkich modeli wybrano pięć struktur sieci (*), charakteryzujących się najmniejszym bezwzględnym błędem średniokwadratowym modelu. Jakość uczenia określana była jako współczynnik korelacji pomiędzy danymi doświadczalnymi a wynikami symulacji uzyskanymi za pomocą modelowania. W każdym modelu sieci wykorzystano funkcję błędu uczenia, obliczonego jako suma kwadratów. Za pomocą wybranych modeli dokonano prognozy skuteczności zmniejszenia mętności wody (R_{mp}). Następnie wybrano jeden optymalny model, którego prognoza była najlepsza, tzn. uzyskano najmniejszy bezwzględny i względny błąd średniokwadratowy prognozy. Uzyskane wyniki przedstawiono w tabeli 2.

Tabela 1. Główne parametry wybranych struktur sztucznych sieci neuronowych
Table 1. Major parameters of the structures chosen for the artificial neural networks

Typ sieci neuronowej	Jakość uczenia	Błąd uczenia	Liczba epok uczenia	Funkcja aktywacji warstwa ukryta	Funkcja aktywacji warstwa wyjściowa	Bezwzgl. błąd średniokwadratowy	Wzgl. błąd średniokwadratowy %	Współcz. korelacji	Współcz. determinacji
MLP 7-12-1	0,5517	0,002353	1	logistyczna	logistyczna	$9,02 \cdot 10^{-2}$	12,83	0,5202	0,2706
MLP 7-21-1	0,9623	0,000181	55	liniowa	logistyczna	$5,89 \cdot 10^{-2}$	8,38	0,7901	0,6242
MLP 7-16-1	0,7801	0,001136	3	liniowa	wykładnicza	$7,10 \cdot 10^{-2}$	10,10	0,7534	0,5676
MLP 7-5-1	0,8100	0,000848	69	logistyczna	wykładnicza	$5,72 \cdot 10^{-2}$	8,14	0,7928	0,6285
MLP 7-6-1*	0,9453	0,000306	10	tanh	tanh	$4,58 \cdot 10^{-2}$	6,51	0,8838	0,7811
MLP 7-35-1	0,9442	0,000306	12	tanh	wykładnicza	$6,07 \cdot 10^{-2}$	8,63	0,7908	0,6253
MLP 7-23-1	0,7468	0,002310	16	logistyczna	logistyczna	$8,95 \cdot 10^{-2}$	12,73	0,7666	0,5877
MLP 7-7-1	0,9562	0,000205	14	liniowa	logistyczna	$5,48 \cdot 10^{-2}$	7,80	0,8307	0,6900
MLP 7-31-1*	0,9314	0,000435	28	logistyczna	tanh	$4,70 \cdot 10^{-2}$	6,68	0,8922	0,7960
MLP 7-29-1	0,7237	0,001127	4	liniowa	tanh	$6,32 \cdot 10^{-2}$	9,00	0,7515	0,5648
MLP 7-16-1	0,9506	0,000228	13	wykładnicza	liniowa	$6,36 \cdot 10^{-2}$	9,04	0,7332	0,5377
MLP 7-28-1	0,7723	0,001038	4	wykładnicza	liniowa	$6,04 \cdot 10^{-2}$	8,60	0,7563	0,5720
MLP 7-18-1*	0,9559	0,000209	10	tanh	liniowa	$5,28 \cdot 10^{-2}$	7,52	0,8250	0,6807
MLP 7-9-1*	0,8396	0,000739	4	tanh	liniowa	$5,22 \cdot 10^{-2}$	7,43	0,8252	0,6809
MLP 7-34-1	0,9425	0,000264	15	wykładnicza	wykładnicza	$6,49 \cdot 10^{-2}$	9,23	0,7199	0,5182
MLP 7-4-1	0,7433	0,001056	4	wykładnicza	wykładnicza	$6,08 \cdot 10^{-2}$	8,65	0,7734	0,5982
MLP 7-14-1	0,8164	0,000806	4	tanh	liniowa	$5,49 \cdot 10^{-2}$	7,82	0,8144	0,6632
MLP 7-11-1*	0,9586	0,000194	218	tanh	logistyczna	$5,35 \cdot 10^{-2}$	7,61	0,8348	0,6969
MLP 7-4-1	0,7335	0,001090	4	liniowa	tanh	$6,24 \cdot 10^{-2}$	8,87	0,7636	0,5830
MLP 7-30-1	0,8785	0,002855	41	logistyczna	liniowa	$6,27 \cdot 10^{-2}$	8,92	0,8373	0,7010

Tabela 2. Wyniki prognozowania mętności wody oczyszczonej
Table 2. Results of forecasting the turbidity of treated water

Typ sieci neuronowej	Bezwzględny błąd średniokwadratowy	Względny błąd średniokwadratowy %	Skuteczność zmniejszenia mętności (R_{mp})	Współczynnik korelacji	Współczynnik determinacji
MLP 7-6-1	$8,14 \cdot 10^{-2}$	11,08	0,5007+0,8277	0,8210	0,6741
MLP 7-31-1	$8,97 \cdot 10^{-2}$	12,20	0,4985+0,8271	0,7830	0,6132
MLP 7-18-1	$9,19 \cdot 10^{-2}$	12,51	0,5120+0,9162	0,7174	0,5146
MLP 7-9-1	$5,12 \cdot 10^{-2}$	6,97	0,6150+0,8826	0,8438	0,7120
MLP 7-11-1	$7,32 \cdot 10^{-2}$	9,97	0,6067+0,8437	0,7141	0,5099

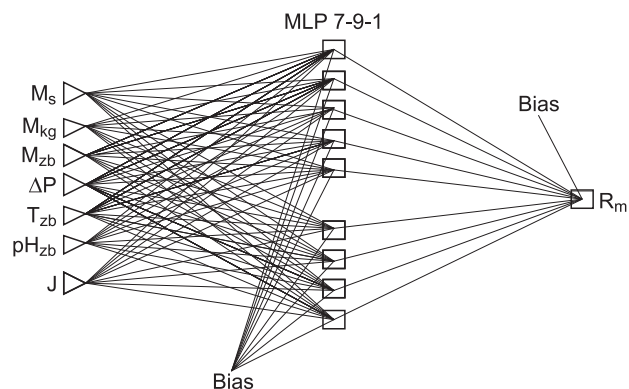
Analiza danych przedstawionych w tabelach 1 i 2 wskazuje, że wyniki modelowania z inżynierskiego punktu widzenia były zadowalające, gdyż względne błędy średniokwadratowe modelu w przypadku pięciu optymalnych struktur sieci wyniosły około 7%. Podczas prognozowania błąd ten równy był 6,97%, co oznacza, że wybrana optymalna architektura sztucznej sieci neuronowej w prawidłowy sposób podaje wyniki prognozy z zupełnie innego zbioru danych niż ten, na którym przeprowadzono jej trenowanie.

W wybranych modelach sztucznych sieci neuronowych algorytm zmiennej metryki, który wykorzystuje kwadratowe przybliżenie funkcji celu w sąsiedztwie znanego rozwiązania, okazał się najwłaściwszy. Celem stosowania tej metody jest wyznaczenie kierunku zmierzającego do minimum funkcji celu [17]. Aby prawidłowo określić ten kierunek, należy wyznaczyć wartość gradientu i dodatnio-określonego hesjanu w punkcie ostatniego znanego rozwiązania. Jednakże określenie hesjanu jest skomplikowane, więc wyznaczana jest w zamian za to macierz odwrotna przybliżonego hesjanu $V_k = [G(w_k)]^{-1}$. Ze względu na to, że metoda ta wykorzystuje założenia algorytmu Newtona i jest jego modyfikacją, często nazywana jest metodą *quasi-Newtona*. Najskuteczniejszą formułę rekurencyjnego wyznaczania macierzy V opracowali Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS). Metoda ta jest często używana ze względu na niewrażliwość na wszelkiego rodzaju niedokładności minimalizacji. Ponadto warunek o dodatniej określoności hesjanu w każdym kroku minimalizacji daje pewność o spełnieniu warunku $g(w_k) = 0$, który odpowiada za prawidłowe spełnienie założeń optymalizacji. Obecnie algorytm ten jest uznawany za jedną z najlepszych technik optymalizacji funkcji wielu zmiennych, jednakże skuteczne działanie tego algorytmu zostało sprawdzone [18] w przypadku sieci o niewielkiej liczbie wag.

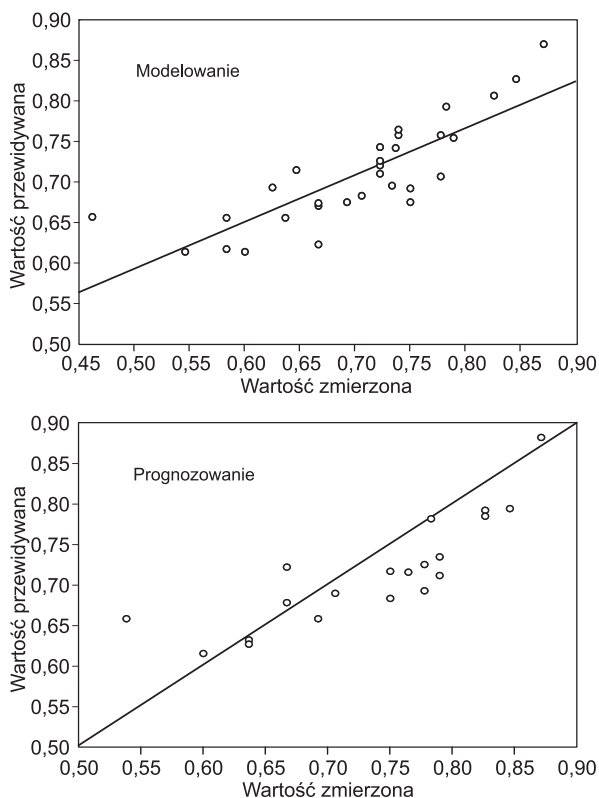
W sieci MLP 7-9-1, uznanej za najlepiej przewidującą parametr wyjściowy, zastosowano funkcję aktywacji: tangens hiperboliczny i liniową. Tangens hiperboliczny – podobnie jak w przypadku funkcji logistycznej – jest to krzywa S-kształtna. Wartości wyjściowe wahają się w zakresie $(-1, +1)$. Właściwości symetryczne powodują, że często działa ona lepiej niż funkcja logistyczna. Jest to konsekwencją pojawiania się sygnałów o wartościach różnych od zera (dodatnie lub ujemne). Natomiast zastosowanie funkcji liniowej powoduje bezpośrednie przekazanie na wyjście łącznej wartości pobudzenia neuronu. Na rysunku 1 przedstawiono schemat wybranej sieci neuronowej MLP 7-9-1 z dziewięcioma neuronami ukrytymi.

Neurony warstwy ukrytej są bardzo ważnymi elementami sieci. Możliwe jest jedynie założenie z góry ich liczby, natomiast zjawiska zachodzące w tej warstwie są nadal nieznanne. Nie istnieją zasady, które umożliwiłyby *a priori*

wyznaczenie właściwej w przypadku danego problemu liczby neuronów ukrytych. Jednakże rozmiar wektora warstwy ukrytej ma wpływ na czas obliczeń, a przede wszystkim na wymaganą zbieżność modelu. Czasami zbyt duża liczba neuronów ukrytych prowadzi do przetrenowania sieci, a w związku z tym model traci zdolności generalizacji. Z drugiej strony, jeśli neuronów jest zbyt mało, sieć generuje wyniki niesatysfakcjonujące z punktu widzenia zbieżności z danymi pomiarowymi. W związku z tym konieczne jest znalezienie tzw. złotego środka. Ponadto w procesie uczenia sieci neuronowej bardzo istotne są wartości wag połączeń między poszczególnymi neuronami. Oczywiście jest, że podczas trenowania sieci neurony zajmują różne pozycje aktywacji. W wybranym modelu sieci MLP 7-9-1 niektóre neurony wykazywały się większą aktywnością niż inne. Ujemne wartości połączeń mogą świadczyć o mniejszym znaczeniu danego neuronu. Połączenie pomiędzy wartością M_s a neuronem ukrytym numer 8 okazało się najsilniejsze, gdyż jego waga wynosiła 0,9805, natomiast połączenie między neuronem ukrytym numer 4 a wartością wyjściową było najsłabsze, ponieważ wartość wagi równała się $-1,067$. W opisywanej sieci również wartość tak zwanego przesunięcia (bias) odgrywała znaczącą rolę. Wartość tego progno na wejściu zawsze jest równa 1, co pozwala w właściwy sposób stymulować pracę całego modelu, natomiast w trakcie trenowania sieci wagi pomiędzy progiem a pozostałymi neuronami podlegają normalnemu procesowi uczenia. Zaskakujące jest, że tylko 4 epoki uczenia wystarczyły, aby optymalny model dawał właściwe prognozy współczynnika zmniejszenia mętności wody oczyszczonej. Na rysunku 2 przedstawiono zależność między przewidywaną i zmierzoną skutecznością zmniejszenia mętności wody w procesie modelowania i prognozowania w przypadku modelu MLP 7-9-1.



Rys. 1. Architektura sztucznej sieci neuronowej wykazującej najmniejsze błędy w prognozowaniu
Fig. 1. Architecture of the artificial neural network characterized by the least errors in forecasting



Rys. 2. Zależność między zmierzoną a przewidywaną mętnością wody oczyszczonej
Fig. 2. Relation between the measured and predicted turbidity of treated water

Analiza danych przedstawionych na rysunku 2 oraz w tabelach 1 i 2 prowadzi do wniosku, że pomimo uzyskania małej wartości błędu względnego modelu i prognozy (przy wybranej optymalnej strukturze SSN), korelacja między wartościami eksperymentalnymi a przewidywanymi nie była zadowalająca, gdyż wynosiła w obu przypadkach około 80%. W zbiorze modelowym (30 danych) minimalna skuteczność zmniejszenia mętności wyniosła 87,09%, natomiast podczas prognozy (20 danych) jedynie 61,50%. Mogło być to związane ze stosunkowo niewielkim rozmiarem wektora wejściowego. Prawdopodobnie zwiększenie liczby przypadków wejściowych w sposób jednoznaczny przełożyłoby się na uzyskanie mniejszego rozrzutu pomiędzy wartościami zmierzonymi a prognozowanymi. Obecnie dąży się do udoskonalania procesów zintegrowanych oczyszczania wody, co skutkuje coraz to większą liczbą bardzo dokładnych danych pomiarowych. W związku z tym, jeśli sieć neuronowa będzie trenowana na wektorze danych doświadczalnych o większym rozmiarze, to z dużym prawdopodobieństwem można się będzie spodziewać w miarę zbieżnych rezultatów modelowania i prognozowania, co przełoży się na uzyskanie lepszego dopasowania wartości doświadczalnych i przewidywanych. Brak idealnej zgodności świadczy jedynie o tym, że nie należy bezgranicznie ufać wynikom modelowania i czasami należy do nich podejść sceptycznie. Co nie zmienia faktu, że SSN są obiecującym narzędziem ułatwiającym matematyczne modelowanie dynamicznie zmieniających się w czasie parametrów procesowych. Niewątpliwie mętność wody po hybrydowym procesie koagulacja/ultrafiltracja należy do wskaźników zmieniających się w sposób trudny do jednoznacznego przewidzenia, co czyni modelowanie tej zmiennej przy użyciu sztucznych sieci neuronowych zadaniem koniecznym.

Wnioski

◆ Prognozowanie za pomocą sztucznych sieci neuronowych mętności wody oczyszczonej w zintegrowanym procesie koagulacja/ultrafiltracja jest użyteczne i może być zaproponowane jako alternatywna metoda modelowania jakości filtratu w tym procesie.

◆ Sieć wykazująca najmniejsze błędy średniokwadratowe w prognozowaniu została opisana następującymi parametrami: neurony warstwy ukrytej (9) i wyjściowej (1), aktywowane odpowiednio przez funkcje tangens hiperboliczny i liniową, przy czym metoda uczenia wykorzystywała zasady zmiennej metryki. W przypadku tej sieci współczynnik korelacji wynosił 84,38%.

◆ Rozrzut między wartościami zmierzonymi a prognozowanymi może wynikać ze zbyt małej liczby danych uczących. Z tego względu sugeruje się jednak wykorzystanie większej bazy pomiarowej podczas tworzenia optymalnego modelu sztucznej sieci neuronowej.

◆ Raz stworzona sieć neuronowa może być wielokrotnie wykorzystana w celu przewidywania mętności wody oczyszczonej w zintegrowanym procesie koagulacja/ultrafiltracja z użyciem membran zanurzonych, przy założeniu występowania identycznych warunków procesowych.

Autorki dziękują grupie naukowej z Uniwersytetu Technicznego w Dreźnie pod kierownictwem profesora Wolfganga Uhla, a zwłaszcza Andre Lerch i Susanne Müller; za udostępnienie wyników badań laboratoryjnych do modelowania parametrów procesowych za pomocą sztucznych sieci neuronowych, oraz fundatorom stypendium Agricola, dzięki któremu możliwe było zgromadzenie danych pomiarowych.

LITERATURA

1. W. ADAMSKI, K. MAJEWSKA-NOWAK: Zastosowanie reaktorów wielofunkcyjnych do oczyszczania wody. *Ochrona Środowiska* 2010, vol. 32, nr 1, ss. 3–8.
2. R. TADEUSIEWICZ: Sieci neuronowe. Akademicka Oficyna Wydawnicza RM, Warszawa 1993.
3. W. McCULLOCH, W. PITTS: A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *Bulletin of Mathematical Biophysics* 1943, Vol. 5, pp. 115–133.
4. W. CIEŻAK, Z. SIWOŃ, J. CIEŻAK: Zastosowanie sztucznych sieci neuronowych do prognozowania szeregów czasowych krótkotrwałego poboru wody w wybranych systemach wodociągowych. *Ochrona Środowiska* 2006, vol. 28, nr 1, ss. 39–44.
5. V. YANGALI-QUINTANILLA, A. VERLIEFDE, T. KIM, A. SADMANI, M. KENNEDY, G. AMY: Artificial neural network models based on QSAR for predicting rejection of neutral organic compounds by polyamide nanofiltration and reverse osmosis membranes. *Journal of Membrane Science* 2009, Vol. 342, pp. 251–262.
6. M. AL-ABRI, N. HILAL: Artificial neural network simulation of combined humic substance coagulation and membrane filtration. *Chemical Engineering Journal* 2008, Vol. 141, pp. 27–34.
7. D. LIBOTTEAN, J. GIRALT, F. GIRALT, R. RALLO, T. WOLFE, Y. COHEN: Neural network approach for modeling the performance of reverse osmosis membrane desalting. *Journal of Membrane Science* 2009, Vol. 326, pp. 408–419.
8. Z. SIWOŃ, J. ŁOMOTOWSKI, W. CIEŻAK, P. LICZNAR, J. CIEŻAK: Analizy i prognozowanie rozbiórów wody w systemach wodociągowych. Polska Akademia Nauk, Komitet Inżynierii Lądowej i Wodnej, Instytut Podstawowych Problemów Techniki, Warszawa 2008.

9. J. HERNANDEZ, R. ROMERO, D. JUAREZ, R. ESCOBAR, J. SIQUEIROS: A neural network approach and thermodynamic model of waste energy recovery in a heat transformer in a water purification process. *Desalination* 2009, Vol. 243, pp. 273–285.
10. M. ANITHA, H. SINGH: Artificial neural network simulation of rare earths solvent extraction equilibrium data. *Desalination* 2008, Vol. 232, pp. 59–70.
11. S. HOFMAN: Zastosowanie sieci neuronowych w modelowaniu regresyjnym stężeń zanieczyszczeń powietrza. Wydawnictwo Politechniki Częstochowskiej, Częstochowa 2004.
12. S. MÜLLER, W. UHL: Influence of hybrid coagulation–ultrafiltration pretreatment on trace organics adsorption in drinking water treatment. *Journal of Water Supply: Research and Technology – AQUA* 2009, Vol. 58, pp. 170–180.
13. A. WÖLLNER: Untersuchungen zur Ultrafiltration von Uferfiltrat sowie deren Auswirkung auf eine nachfolgende Aktivkohlefiltration. Master's thesis, Institute for Urban Water Management, Dresden University of Technology, Dresden 2004.
14. A. JODŁOWSKI, K. ŚMIGIELSKA: Zastosowanie szybkiego testu mikrokolumnowego do oceny wpływu naturalnych substancji organicznych na skuteczność usuwania zanieczyszczeń z wody na węglu aktywnym. *Ochrona Środowiska* 2007, vol. 29, nr 4, ss. 23–27.
15. X. ZENG, D. YEUNG: Hidden neuron pruning of multilayer perceptrons using a quantified sensitivity measure. *Neurocomputing* 2006, Vol. 69, pp. 825–837.
16. W. CIEŻAK, Z. SIWOŃ, J. CIEŻAK: Modelowanie poboru wody w osiedlach mieszkaniowych. *Ochrona Środowiska* 2008, vol. 30, nr 2, ss. 23–28.
17. S. OSOWSKI: Sieci neuronowe do przetwarzania informacji. Oficyna Wydawnicza Politechniki Warszawskiej, Warszawa 2000.
18. A. KOSTOPOULOS, T. GRAPSA: Self-scaled conjugate gradient training algorithms. *Neurocomputing* 2009, Vol. 72, pp. 3000–3019.

Kabsch-Korbutowicz, M., Kutylowska, M. Artificial Neural Networks – A Viable Option for Predicting Changes in Water Turbidity after Treatment by Coagulation/Ultrafiltration. *Ochrona Srodowiska* 2010, Vol. 32, No. 2, pp. 15–20.

Abstract: Artificial neural network modeling is widely used in water treatment technology as an alternative method to deal with functions of several variables. In the study reported on in this paper consideration was given to the possibilities of using artificial neural networks to predict the turbidity of infiltration water after treatment by the integrated coagulation/ultrafiltration process. To forecast the turbidity of the permeate it seemed advisable to create different structures of the multilayer perceptrone with one

hidden layer. Raw water turbidity, water turbidity after coagulation, transmembrane pressure, permeate flux, water temperature and water pH were adopted as input signals. One neuron at the output of the network described the value of the turbidity retention coefficient. It has been demonstrated that the neural network of the parameters MLP 7-9-1 was characterized by the least mean-square error in forecasting. For this network the coefficient of correlation equaled 84.38%. Simulation results have revealed that the convergence with experimental data was sufficiently good (although not ideal).

Keywords: Artificial neural networks, water treatment, turbidity, coagulation, ultrafiltration, submerged membranes.