

Research Paper

مقاله پژوهشی

Examining the Contribution of Wastewater Treatment Plant Features on the Results of Artificial Intelligence-Based Models Using SHAP

بررسی سهم ویژگی‌های تصفیه‌خانه فاضلاب در نتایج مدل‌های هوش مصنوعی با به‌کارگیری SHAP

Vahid Nourani^{1*}, Mahsa Dehghan² and Aida Hosseini Baghanam³

1- Professor, Water Engineering Department, Faculty of Civil Engineering, Tabriz University, Tabriz, Iran.

2- M.Sc. Student, Water Engineering Department, Faculty of Civil Engineering, Tabriz University, Tabriz, Iran.

3- Associate Professor, Water Engineering Department, Faculty of Civil Engineering, Tabriz University, Tabriz, Iran.

*Corresponding Author, Email: nourani@tabrizu.ac.ir

وحید نورانی^{۱*}، مهسا دهقان^۲ و آیدا حسینی بقانام^۳

۱- استادی، گروه آب، دانشکده فنی و مهندسی عمران، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران.

۲- دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه آب، دانشکده فنی و مهندسی عمران، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران.

۳- دانشیار، دکترای تخصصی، گروه آب، دانشکده فنی و مهندسی عمران، دانشگاه تبریز، تبریز، ایران.

*نویسنده مسئول، ایمیل: nourani@tabrizu.ac.ir

Received: 19/01/2025

Revised: 06/04/2025

Accepted: 23/04/2025

© IWWA

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۱۰/۳۰

تاریخ اصلاح: ۱۴۰۴/۰۱/۱۷

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۰۲/۰۳

© انجمن آب و فاضلاب ایران

Abstract

Models can greatly contribute to the optimization and control of treatment processes. The present study investigates the Biological Oxygen Demand (BOD_{eff}) and Chemical Oxygen Demand (COD_{eff}) of the effluent from the Tabriz municipal wastewater treatment plant (WWTP). This plant utilizes an activated sludge process with diffused aeration. Using Artificial Neural Networks (ANN) and Long Short-Term Memory (LSTM) models, daily data from the WWTP are analyzed to assess these key pollution indicators. Prior to modeling, input features are denoised using a Simple Moving Average (SMA) technique. Both linear and nonlinear relationships between features are examined to select optimal model inputs. The conversion factors obtained using ANN and LSTM were 1.66 and 1.65 for BOD to COD, and 1.32 and 1.33 for Total Dissolved Solids (TDS) to Electrical Conductivity (EC), respectively. These values are appropriate and demonstrate the models' accuracy in estimating relationships. Furthermore, to interpret feature importance, the novel and emerging method of Explainable Artificial Intelligence (XAI) are employed. BOD_{eff} and COD_{eff} with a one-day lag, as well as TDS and EC, were identified as high-impact features.

Keywords: Effluent Assessment, Deep Neural Network, Explainable Artificial Intelligence, Tabriz Wastewater Treatment Plant.

چکیده

مدل‌ها می‌توانند تا حد زیادی به بهینه‌سازی و کنترل فرآیندهای تصفیه کمک نمایند. بنابراین با در نظر گرفتن این موضوع، تحقیق حاضر، اکسیژن مورد نیاز بیولوژیکی (BOD_{eff}) و اکسیژن مورد نیاز شیمیایی (COD_{eff}) پساب تصفیه‌خانه فاضلاب شهری تبریز را که تصفیه‌خانه‌ای به روش لجن فعال با هوادهی دیفیوزری می‌باشد، به‌عنوان دو شاخص مهم در بررسی میزان آلودگی، با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی (ANN) و حافظه طولانی کوتاه‌مدت (LSTM) بر پایه داده‌های روزانه مربوط به اطلاعات تصفیه‌خانه، مورد بررسی قرار داده است. ویژگی‌های ورودی قبل از استفاده برای مدل، توسط میانگین متحرک ساده (SMA) حذف نویز شدند؛ سپس با به‌کارگیری دو روش، ارتباط خطی و ارتباط غیرخطی بین ویژگی‌ها بررسی شد و ورودی‌های مدل انتخاب شدند. نتایج ضریب تبدیل با ANN و LSTM برای BOD_{eff} به COD_{eff} به ترتیب ۱/۶۶ و ۱/۶۵ و برای کل جامدات محلول (TDS) به هدایت الکتریکی (EC)، ۱/۳۲ و ۱/۳۳ بوده که مقادیر مناسبی هستند و دقت مدل‌ها را در تخمین روابط نشان می‌دهند. همچنین برای درک اهمیت هر یک از ویژگی‌ها در نتایج به‌دست آمده، از روش جدید و نوظهور هوش مصنوعی توضیح‌پذیر (XAI) مورد استفاده قرار گرفت. BOD_{eff} و COD_{eff} با تأخیر یک روزه، TDS و EC به‌عنوان ویژگی‌های مهم شناسایی شدند.

کلمات کلیدی: ارزیابی پساب، شبکه عصبی عمیق، هوش مصنوعی توضیح‌پذیر، تصفیه‌خانه فاضلاب تبریز.

پیش‌بینی‌ها مهم هستند (Nourani et al., 2022). بنابراین، به‌طور کلی در مدل‌سازی تصفیه‌خانه، ثابت‌شده است که مدل‌های LSTM نسبت به سایر انواع ANN برتری دارند؛ زیرا می‌توانند وابستگی‌های بلندمدت و کوتاه‌مدت را با هم به‌صورت پویا دربرگیرند. درواقع، برای حفظ اطلاعات سری‌های زمانی، استفاده از LSTM که نوعی شبکه عصبی بازگشتی (RNN) است، می‌تواند جایگزین دیگری برای استفاده برای مدل‌سازی سری‌های زمانی باشد. این مطالعات نشان داده‌اند که استفاده از مدل‌های مبتنی بر هوش مصنوعی می‌تواند نتایج رضایت‌بخشی را در پیش‌بینی و تحلیل ویژگی‌های فاضلاب ورودی و پساب خروجی ارائه دهد (Mjalli et al., 2007; Nourani et al., 2023; Pisa et al., 2019). طبق مطالعات جدیدی که در زمینه مقایسه نتایج مدل‌های گوناگون برای مدل‌سازی انواع پارامترهای تصفیه‌خانه صورت‌گرفته است، مدل‌های هوش مصنوعی مبتنی بر یادگیری عمیق از جمله LSTM، توانسته‌اند نتایجی با دقتی بالاتر نسبت به مدل‌های ساده یادگیری ماشین ارائه نمایند (Sheik et al., 2024; El-Rawy et al., 2021).

مدل‌سازی‌های هوش مصنوعی، تاکنون توانسته‌اند نتایج رضایت‌بخشی در انواع مختلفی از زمینه‌های مطالعاتی ارائه دهند؛ ولی به‌دلیل ماهیت جعبه سیاه این مدل‌ها و ساختار غیرشفافی که دارا هستند، فهم خروجی‌های به‌دست آمده از این مدل‌ها کار آسانی نیست. این چالش به‌ویژه زمانی نمایان‌تر می‌شود که کاربران این مدل‌ها، افراد غیرمتخصص در این زمینه هستند که برای فهم و تبیین نتایج این مدل‌ها با مشکلات بیش‌تری روبه‌رو می‌شوند (Vilone and Longo, 2021). مدل‌های شفاف‌تر و قابل‌تفسیر، سبب ایجاد اعتماد به نتایج مدل‌ها و شناسایی خطاها باتوجه به توضیحات مدل می‌شود (Dosilovic et al., 2018; Hassija et al., 2024). فرآیند تفسیر، با داده‌های ورودی در قالب‌های مختلف آغاز شده و از داده‌ها در مدل‌سازی مبتنی بر داده استفاده می‌شود. پس از ایجاد مدل، روش هوش مصنوعی توضیح‌پذیر (XAI)^۵ برای تحلیل، کشف دانش و افزایش تفسیرپذیری آن اعمال می‌شود. در این مرحله، ابزارهایی برای توضیح عملکرد مدل به کاربران ارائه می‌شود تا شفافیت و فهم مدل را بهبود بخشند؛ زیرا این ابزارها نقش مهمی در ارتباط کاربران نهایی با مدل دارند.

دو رویکرد اصلی در حوزه تبیین نتایج مدل‌ها وجود دارد که رویکرد نخست به‌عنوان "مدل-محور" و رویکرد دوم با عنوان "مدل-آگنوستیک" شناخته می‌شود. رویکرد اول شامل تکنیک‌هایی است که به‌طور خاص برای توضیح نتایج مدل‌ها با توجه به معماری ویژه آن‌ها طراحی شده‌اند و رویکرد دوم به

از گذشته تا امروز، آب همواره به‌عنوان منبعی ارزشمند و بی‌بدیل شناخته‌شده است. از سوی دیگر، به‌دلیل کاهش روزبه‌روز منابع آب شیرین، این منابع از اهمیت اقتصادی خاصی برخوردارند (Mjalli et al., 2007). یکی از عوامل ایجاد کننده آلودگی در محیط زیست، افزایش فاضلاب تولیدی به‌دلیل مصرف بی‌رویه آب برای مصارف روزمره از جمله آشامیدن، فعالیت‌های کشاورزی و صنعت، به‌دنبال گسترش شهرنشینی و فعالیت‌های صنعتی بوده است. برای کنترل آلودگی‌های ناشی از فاضلاب و بهره‌برداری مجدد از پساب، احداث تصفیه‌خانه‌های فاضلاب ضروری است. آلودگی میکروبی و شیمیایی آب می‌تواند آسیب‌های گسترده‌ای به محیط زیست و جامعه انسانی وارد کند که جبران آن مستلزم صرف هزینه‌های سنگین خواهد بود (اصول‌دینی و همکاران، ۱۴۰۳). تصفیه‌خانه‌ها با استفاده از فناوری‌های نوین، امکان دفع ایمن پساب‌های تولید شده را فراهم می‌آورند. پس از تکمیل فرآیند تصفیه، بازاستفاده از پساب در مصارف گوناگون غیرخانگی، با توجه به بحران کمبود آب شیرین در ایران، اهمیت چشمگیری در صرفه‌جویی منابع آب دارد.

مدیریت ایمن و مؤثر تصفیه‌خانه‌های فاضلاب می‌تواند با ایجاد یک ابزار مدل‌سازی پیشرفته تحقق یابد که براساس داده‌های تاریخی ویژگی‌های مهم، راندمان سیستم تصفیه را ارزیابی و پیش‌بینی کند (اعلمی و همکاران، ۱۴۰۰). فرآیندهای تصفیه‌خانه‌های فاضلاب ترکیبی از واکنش‌های پیچیده فیزیکی، شیمیایی و زیستی است که اغلب نتایج پیش‌بینی‌ناپذیری دارند. مدل‌سازی این فرآیندها با استفاده از روش‌های سنتی مبتنی بر اصول فیزیکی معمولاً بسیار پرهزینه و زمان‌بر است. به‌همین دلیل، در سال‌های اخیر، رویکردهای مبتنی بر هوش مصنوعی مانند شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN)^۱ و شبکه‌های عصبی عمیق (DNNs)^۲ به‌طور فزاینده‌ای به‌عنوان ابزارهای نوین برای شبیه‌سازی و پیش‌بینی عملکرد تصفیه‌خانه‌ها مطرح شده‌اند. این فناوری‌ها با قابلیت صرفه‌جویی در زمان و هزینه نسبت به روش‌های قدیمی، جایگاه ویژه‌ای پیدا کرده‌اند (Li et al., 2018). مطالعات گوناگونی نشان داده که روش‌هایی مانند ANN و شبکه عصبی حافظه طولانی کوتاه‌مدت (LSTM)^۳ قادرند روابط غیرخطی موجود میان پارامترهای کیفی فاضلاب را با دقت بالایی مدل‌سازی نمایند.

سری‌های زمانی تصفیه‌خانه نیز همانند سری‌های زمانی هیدرولوژیکی عمده‌تاً رفتار فصلی دارند، به این معنی که وابستگی‌های فصلی به اندازه وابستگی‌های کوتاه‌مدت برای

کیفی فاضلاب در تصفیه‌خانه تبریز. در این فرآیند، از الگوریتم‌های معروف شبکه‌های پیشرو (FFNN)^{۱۲} و LSTM به‌عنوان ساختار اصلی مدل‌ها استفاده شد. با توجه به غیرقابل تفسیر بودن این مدل‌ها، از تکنیک SHAP، برای تجسم و تفسیر اثر ویژگی‌ها بر نتایج مدل‌سازی استفاده شد.

۲- مواد و روش‌ها

۲-۱- تصفیه‌خانه مورد مطالعه

برای جمع‌آوری فاضلاب تولیدی و جلوگیری از شیوع آلودگی‌های بیماری‌زا در شهر تبریز که یکی از کلان‌شهرهای مهم در شمال غرب ایران است، یک تصفیه‌خانه پیشرفته فاضلاب در چهار کیلومتری سمت غرب شهر و در جنوب رودخانه آجی‌چای احداث شد (شکل ۱). واحدهای فرآیندهای این تصفیه‌خانه در شکل ۲ نمایش داده شده است. این تصفیه‌خانه که از فناوری هوادهی لجن فعال بهره می‌برد، به‌منظور تصفیه فاضلاب شهری با سه مدول و هرمدول برای تصفیه فاضلاب تولیدی توسط جمعیتی در حدود ۶۱۲ هزار نفر طراحی شده است. هم‌چنین، ۲۰ درصد از ظرفیت آن به تصفیه فاضلاب صنعتی اختصاص یافته است (اصغری و همکاران، ۱۴۰۰). این تأسیسات ظرفیت روزانه‌ای معادل ۷۶۵ مترمکعب دارد و طبق داده‌های تاریخی، میانگین دبی سالانه مجاز آن ۱/۵ مترمکعب بر ثانیه و میانگین دبی واقعی ورودی ۱/۱۵ مترمکعب بر ثانیه است. در شرایط معمول، حداکثر دبی تصفیه‌خانه ۲/۵ مترمکعب بر ثانیه بوده که در روزهای بارانی می‌تواند به ۳/۸ مترمکعب بر ثانیه برسد. میزان اکسیژن مورد نیاز شیمیایی (COD)^{۱۳}، اکسیژن مورد نیاز بیولوژیکی (BOD)^{۱۴} و مواد معلق (SS)^{۱۵} در فاضلاب ورودی به ترتیب ۳۲۰، ۲۵۰ و ۳۵۰ میلی‌گرم در لیتر گزارش شده است (Nourani et al., 2023).

در تصفیه‌خانه تبریز، فرآیند تصفیه فاضلاب شامل مراحل تصفیه فیزیکی، بیولوژیکی و در نهایت عملیات ضدعفونی است. برای انتقال فاضلاب به تصفیه‌خانه، از یک کانال ورودی استفاده می‌شود. فاضلاب پس از هدایت به مخازن ته‌نشینی اولیه و کاهش سرعت جریان، ذرات شن و ماسه با قطر بیش‌تر از ۰/۲ میلی‌متر جدا می‌شوند. در مرحله پایانی تصفیه، از عملیات کلرزنی، برای حذف میکروارگانیسم‌های بیماری‌زا استفاده می‌شود. از هاضم‌های بی‌هوازی در بخش مدیریت لجن برای تثبیت لجن و بسترهای خشک‌کن برای آب‌گیری از لجن تشکیل شده است.

نمونه‌های منفرد از تصفیه‌خانه تبریز در فواصل زمانی مشخص و با استفاده از روش نمونه‌گیری مرکب طی یک دوره معین،

تکنیک‌هایی اشاره دارد که پس از آموزش مدل، می‌توان از آن‌ها برای انواع مختلف مدل‌های هوش مصنوعی استفاده نمود (Adadi and Berrada, 2018; Danesh et al., 2022). در تکنیک‌های مدل-آگنوستیک، روش Shapley که با عنوان (SHAP)^۶ نیز شناخته می‌شود، به‌عنوان یک روش توضیح‌پذیری افزودنی عمل می‌کند و تأثیر هر ویژگی را بر عملکرد کلی مدل مشخص می‌نماید. در این راستا، Park et al. (2022a)، با استفاده از مدل تقویت گرادیان شدید (XGBoost)^۷، غلظت کلروفیل را به‌عنوان شاخصی برای جلبک‌های آب پیش‌بینی کردند. آن‌ها متغیرهای ورودی را با روش‌های اهمیت ویژگی (FI)^۸ و ضریب تورم واریانس (VIF)^۹ انتخاب کردند. نتایج نشان داد که SHAP می‌تواند تفسیرپذیری بهتری از نتایج ارائه دهد. در یک مطالعه دیگر، Park et al. (2022b)، از مدل XGBoost در یک تصفیه‌خانه آزمایشی پس از وقوع اختلالات برای پیش‌بینی بازبانی کیفیت آب استفاده نمودند. اختلالات، زمانی شناسایی می‌شد که کدورت مشاهده شده از حد معین تجاوز می‌کرد. نتایج این تحقیق نشان داد که پیش‌پردازش داده‌های ورودی سبب بهبود نتایج مدل می‌شود. درنهایت، تحلیل SHAP برای تفسیر نتایج مدل به‌کار گرفته شد. (Núñez et al. (2023) با به‌کارگیری روش SHAP، نتایج پیش‌بینی جریان ذوب برف در منطقه خشک شیلی را تفسیر کردند. نتایج حاکی از آن بود که متغیرهای آب و هوایی دارای اهمیت بیش‌تری نسبت به متغیرهای اقلیمی هستند.

Bourahla and Bourahla (2023) یک سیستم کنترل بلادرنگ برای جلوگیری از سرریز فاضلاب با استفاده از اینترنت اشیا و XAI طراحی کردند. در این سیستم، از داده‌های تاریخی برای ساخت مدل‌های پیش‌بینی مبتنی بر هوش مصنوعی به‌کار گرفته شد و داده‌های بلادرنگ برای نظارت و کنترل وضعیت سیستم فاضلاب استفاده شد. پیش‌بینی‌ها با تکنیک SHAP تحلیل شده و در صورت شناسایی رفتار غیرعادی، سیستم فاضلاب فعال می‌شد.

براساس مطالعات انجام‌شده، استفاده از الگوریتم SHAP برای توضیح نحوه تأثیر ویژگی‌های ورودی در مدل‌سازی تصفیه‌خانه فاضلاب با استفاده از مدل‌های مبتنی بر هوش مصنوعی، روشی نوظهور و خلاقانه است که امکان تصمیم‌گیری بهینه برای بهبود کارایی سیستم‌ها را فراهم می‌نماید. هم‌چنین موجب تنظیم بهتر فرآیندهای تصفیه، بهینه‌سازی مصرف انرژی و کاهش هزینه‌های عملیاتی می‌شود.

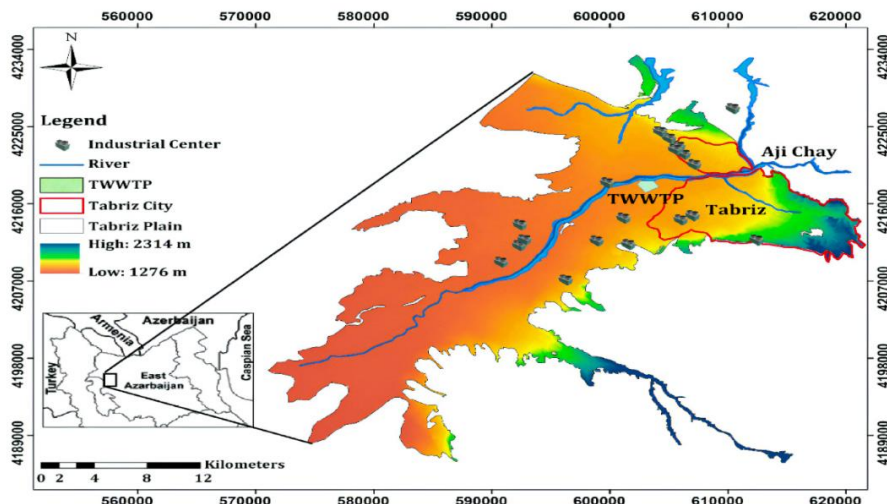
هدف از این تحقیق، استفاده از ضریب همبستگی (CC)^{۱۰} و اطلاعات متقابل (MI)^{۱۱} برای انتخاب ورودی‌های غالب. مدل‌سازی‌های مبتنی بر هوش مصنوعی برای ارزیابی ویژگی‌های

و COD_{eff} (۲۲) که به عنوان ویژگی‌های هدف در فرآیند مدل‌سازی در نظر گرفته شده‌اند، هم‌زمان ثبت شده‌اند. این هم‌زمانی در ثبت داده‌ها برای تحلیل دقیق‌تر و مدل‌سازی بهتر فرآیند تصفیه آب اهمیت دارد. با توجه به این‌که فرآیندهای زیستی در تصفیه‌خانه‌های فاضلاب، به زمان کافی برای تجزیه مواد آلی نیاز دارند، این فرآیندها معمولاً منجر به تغییراتی در شاخص‌هایی مانند BOD و COD می‌شوند که اثرات آن‌ها معمولاً با تأخیر در پساب قابل مشاهده است. علاوه بر این، مقادیر BOD و COD از ثبات نسبی برخوردار بوده و تغییرات آن‌ها به صورت تدریجی و در طول یک دوره تأخیری خاص ظاهر می‌شود. با استناد به تابع خودهمبستگی جزئی (PACF) (۲۳) در شکل ۳ و خاصیت خودرگرسیون فرآیند، تأخیرهای ۱ روزه و ۷ روزه، به دلیل ثبت الگوهای هفتگی، به عنوان مهم‌ترین تأخیرها شناسایی شدند که بیش‌ترین ارتباط را با COD_{eff} و BOD_{eff} دارند. برای روشن‌سازی روند کار، فلوچارت مراحل انجام پژوهش در شکل ۴ نشان داده شده است.

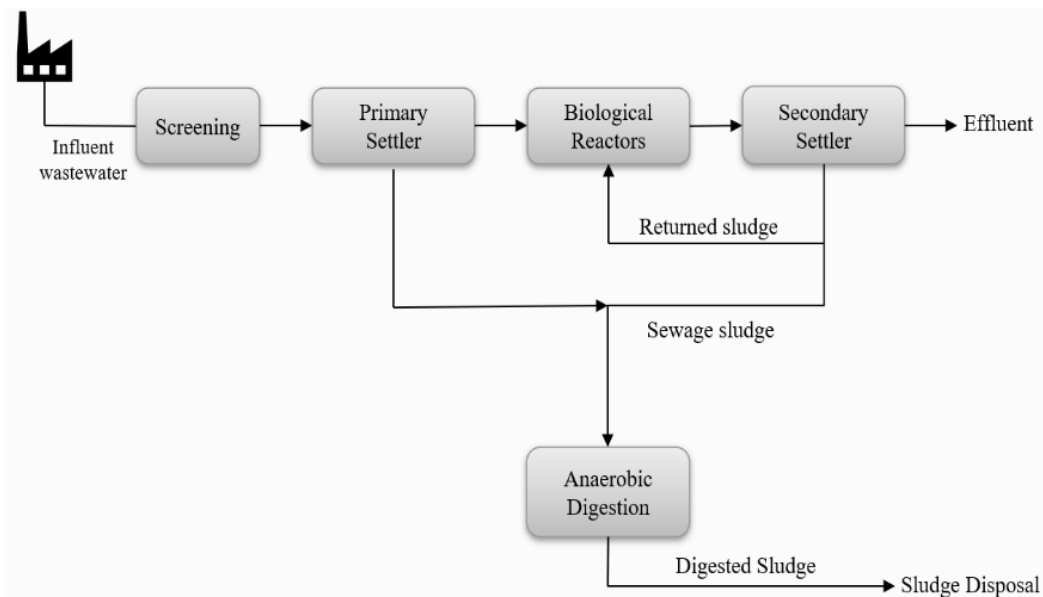
معمولاً ۲۴ ساعته، جمع‌آوری می‌شوند (Nourani et al., 2023). داده‌های مورد استفاده در این مطالعه به صورت روزانه از سال ۱۳۹۷ تا ۱۳۹۹ به کار گرفته شدند. ویژگی‌های ثبت شده مورد استفاده برای مدل‌سازی شامل BOD، COD، کل جامدات معلق (TSS)^{۱۶}، کل جامدات محلول (TDS)^{۱۷}، جامدات معلق فرار (VSS)^{۱۸}، هدایت الکتریکی (EC)^{۱۹}، pH، دمای هوا (T_{air})^{۲۰} و دمای فاضلاب ورودی (T_{inf})^{۲۱} است. ویژگی‌های BOD و COD برای بررسی کیفیت و تعیین شدت آلودگی‌های آلی و شیمیایی در فاضلاب نقش حیاتی دارند و به عنوان معیارهای کلیدی شناخته شده‌اند. این دو پارامتر در تصفیه‌خانه تبریز به طور مستمر و دقیق اندازه‌گیری شده و اطلاعات آن‌ها به عنوان ویژگی‌های هدف در فرآیند انجام مدل‌سازی در این تحقیق انتخاب شدند. نظارت دقیق بر این ویژگی‌ها کمک می‌کند تا سطح آلودگی در فرآیند تصفیه به طور بهینه ارزیابی و کنترل شود. سایر ویژگی‌ها که در فاضلاب ورودی ثبت و برای مدل‌سازی مورد توجه قرار می‌گیرند، از نظر گام زمانی با ویژگی‌های اصلی پساب (BOD_{eff}

جدول ۱- ویژگی‌های آماری داده‌های دریافتی از تصفیه‌خانه تبریز از سال ۱۳۹۷ تا ۱۳۹۹

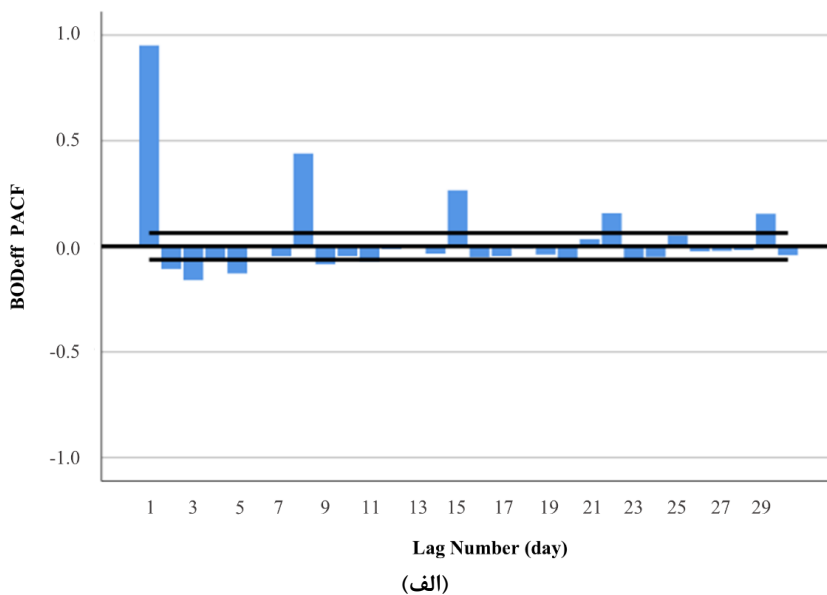
متغیر	واحد	بیشینه	کمینه	میانگین	انحراف معیار
BOD _{inf}	mg/L	۳۲۲/۵	۲۱۰	۲۹۳/۱۹	۱۴/۴۴
COD _{inf}	mg/L	۵۳۲/۵	۳۷۰	۴۸۴/۸۴	۱۹/۹۵
TSS _{inf}	mg/L	۳۲۹	۲۲۰	۲۹۰/۲۸	۱۶/۱۱
TDS _{inf}	mg/L	۱۴۶۹	۹۲۲	۱۱۸۲/۹۷	۶۲/۵۹
VSS _{inf}	mg/L	۲۱۴/۵	۱۲۹	۱۸۰/۷۶	۱۵/۳۹
PH _{inf}	°C	۸/۹۸	۱۱۹۸	۱۵۵۳/۲۲	۸۱/۷۶
EC _{inf}	mg/L	۱۹۴۲	۷/۱۰	۸/۰۲	۰/۲۲
T _{air}	°C	۳۵	-۱۱/۵	۱۲/۱۸	۱۰/۲۴
T _{inf}	°C	۲۶/۸	۱۱/۶	۲۰/۹۹	۲/۸
BOD _{eff}	mg/L	۲۷	۱۷	۲۲/۹۷	۱/۴
COD _{eff}	mg/L	۴۵	۲۶	۳۸/۴۳	۲/۴



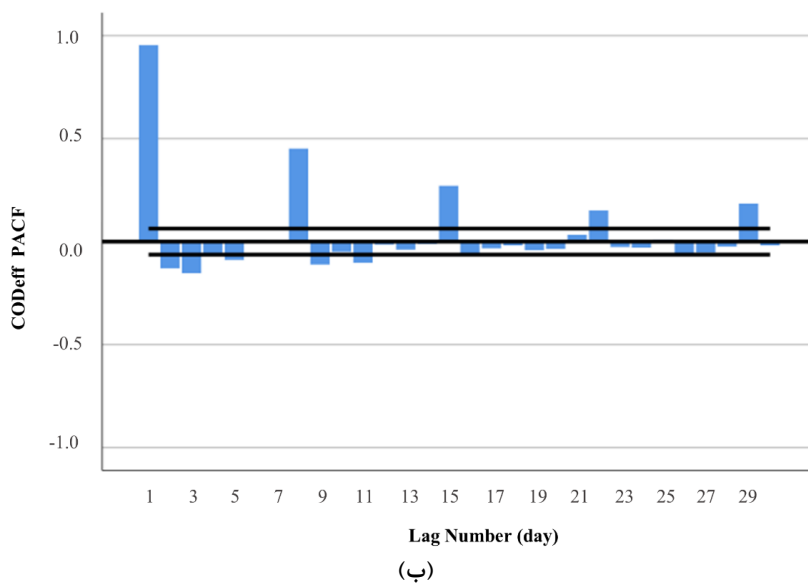
شکل ۱- موقعیت تصفیه‌خانه فاضلاب تبریز بر روی نقشه شهر تبریز (اصغری و همکاران، ۱۴۰۰)



شکل ۲- دیاگرام فرآیندهای تصفیه در تصفیه‌خانه فاضلاب تبریز

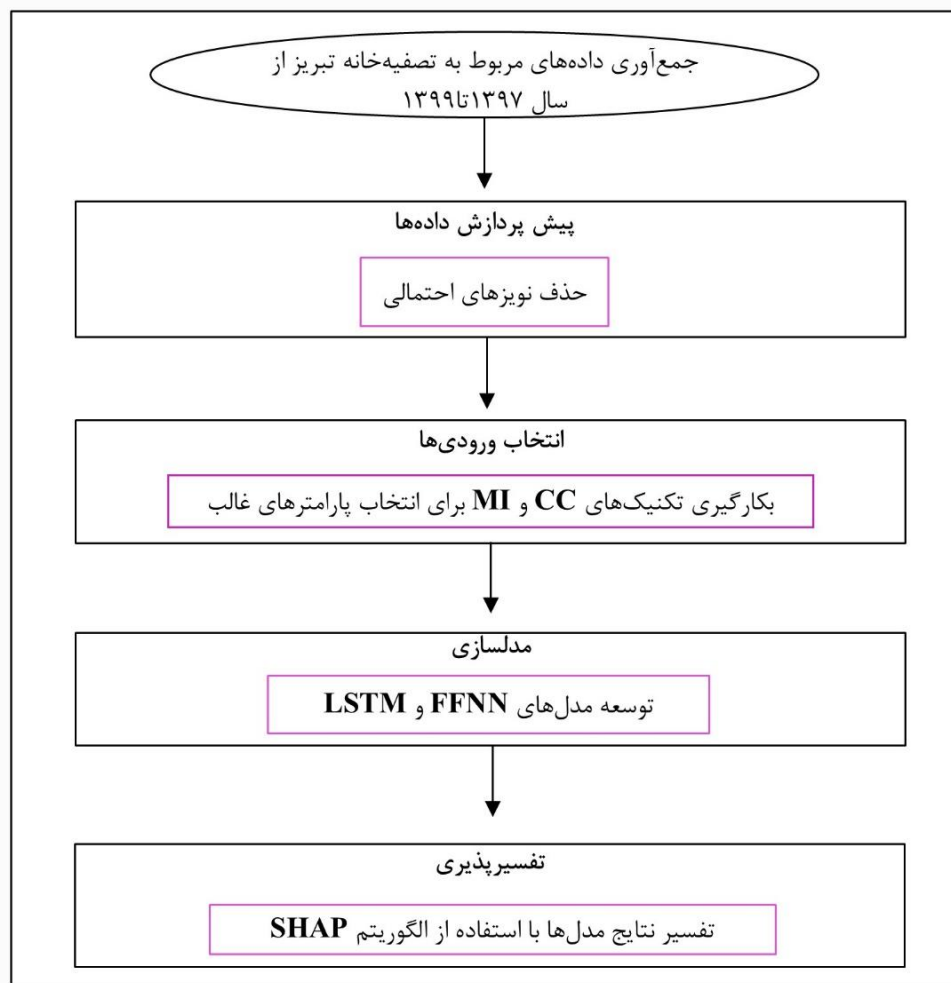


(الف)



(ب)

شکل ۳- نمودار PACF (الف) BODeff؛ و (ب) CODEff در یک دوره تأخیر ۳۰ روزه



شکل ۴- نمایش فلوجارت روش تحقیق

۲-۲- معرفی پارامترهای هدف در مدل‌سازی

۲-۲-۱- اکسیژن مورد نیاز بیولوژیکی (BOD)

BOD معیاری برای سنجش میزان اکسیژن مورد نیاز باکتری‌های هوازی برای تجزیه مواد آلی موجود در فاضلاب است و مقدار آن نشان‌دهنده سطح آلودگی فاضلاب است. BOD_5 میزان اکسیژن مصرفی طی ۵ روز در دمای ۲۰ درجه سانتی‌گراد است که مقدار آن به‌عنوان شاخصی برای کیفیت فاضلاب در نظر گرفته می‌شود. میزان BOD پس‌اب نشان‌دهنده کارایی تصفیه‌خانه در کاهش آلاینده‌های آلی بوده و به‌عنوان شاخصی مهم برای ارزیابی عملکرد فرآیندهای تصفیه مورد استفاده قرار می‌گیرد.

۲-۲-۲- اکسیژن مورد نیاز شیمیایی (COD)

COD میزان اکسیژنی است که برای اکسیداسیون شیمیایی مواد آلی در فاضلاب با استفاده از پتاسیم دی‌کرومات و اسید سولفوریک نیاز است. اندازه‌گیری COD در مراحل مختلف تصفیه‌خانه، به کنترل و بهینه‌سازی فرآیند کمک می‌نماید و با

مقایسه مقادیر ورودی و خروجی، کارایی حذف آلاینده‌ها سنجیده می‌شود. مقادیر بالای COD در پساب‌های تخلیه شده می‌تواند اکسیژن محلول در آب را کاهش داده و حیات آبیان را تهدید کند، بنابراین کنترل آن یکی از اهداف اصلی تصفیه‌خانه‌های فاضلاب است.

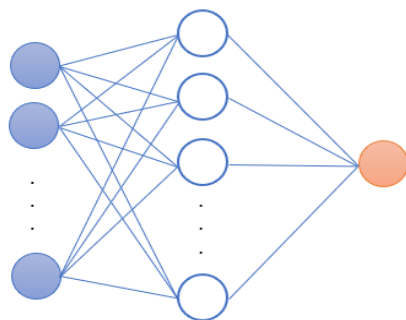
۲-۳- پیش‌پردازش داده‌ها

به‌دلیل وجود نویزهای احتمالی و نوسانات گذرا در داده‌های دریافتی از تصفیه‌خانه فاضلاب در این مطالعه، از روش میانگین متحرک ساده (SMA)^{۲۴} برای حذف نویزهای موجود در داده‌ها استفاده شد. SMA با محاسبه میانگین داده‌ها در یک محدوده زمانی معین، به کاهش این نویزها و نوسانات کمک کرده و داده‌هایی قابل‌اعتمادتر را برای فرآیند مدل‌سازی ارائه می‌دهد. این فیلتر به مدل‌های پیش‌بینی کمک می‌کند تا الگوهای موجود در داده‌ها را با دقت بیشتری شبیه‌سازی نمایند. مقدار SMA با استفاده از معادله (۱) تعیین می‌شود (Svetunkov and Petropoulos, 2018).

$$MI(X, Y) = H(x) + H(Y) - H(X, Y) \quad (5)$$

۲-۵- شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANNs)

از دهه ۱۹۴۰ که توسعه ANN آغاز شد، این شبکه‌ها به‌عنوان ابزارهای محاسباتی برای حل مسائل مختلف در زمینه‌های گوناگون استفاده می‌شوند؛ مانند طبقه‌بندی داده‌ها، شناسایی الگوها و پیش‌بینی پدیده‌های پیچیده و غیرخطی (Huang and Mujumdar, 1993). FFNN یکی از حالت‌های معمول و پر استفاده ANN است (Mjalli et al., 2007). این مدل‌ها با بهره‌گیری از الگوریتم پس‌انتشار خطا (BP) در بسیاری از کاربردهای حوزه محیط‌زیست به‌کار گرفته شده‌اند. در این وضعیت، شبکه با استفاده از فرآیند BP آموزش داده می‌شود و وزن‌های خود را براساس اختلاف بین خروجی پیش‌بینی شده و خروجی واقعی تنظیم می‌کند. این نوع شبکه‌ها از یک لایه ورودی، حداقل یک لایه مخفی و یک لایه خروجی تشکیل شده‌اند که شماتیکی از آن در شکل ۵ نشان داده شده است (Mjalli et al., 2007). نورون‌های موجود در لایه‌ها که به‌عنوان پردازنده عمل می‌کنند، دارای تابع فعال‌سازی هستند و برای تقلید از سلول‌های عصبی مغز انسان طرح‌ریزی شده‌اند. داده‌های ورودی انتخاب شده قبل از فرآیند مدل‌سازی، بعد از ورود به لایه ورودی، در لایه پنهان پردازش شده و در نهایت، نتایج پیش‌بینی شده از طریق لایه خروجی استخراج می‌شوند. در این مطالعه از یک FFNN سه لایه برای مدل‌سازی BODeff و CODeff استفاده شد.



شکل ۵- شماتیکی از یک شبکه عصبی مصنوعی سه لایه

۲-۶- شبکه عصبی حافظه طولانی کوتاه‌مدت مبتنی بر

یادگیری عمیق (LSTM)

برای رفع محدودیت شبکه‌های عصبی سنتی در ذخیره اطلاعات زمانی، معماری RNN با قابلیت یادگیری وابستگی‌های زمانی از طریق ساختار حلقه‌ای طراحی شد. با این حال، پیش از معرفی معماری پیشرفته‌ای به نام LSTM توسط Hochreiter

$$\hat{y}_t = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k y_{t-i} \quad (1)$$

که k : تعداد گام‌های زمانی مورد استفاده در محاسبه SMA، y_t : مقدار واقعی داده در زمان t و \hat{y}_t : پیش‌بینی انجام شده برای همان زمان هستند.

۲-۴- انتخاب ویژگی‌های غالب توسط CC و MI

در مدل‌سازی، به‌کارگیری ابزارهایی مانند ضریب همبستگی و اطلاعات متقابل، نقش مهمی در کاهش تعداد متغیرهای ورودی ایفا می‌کند. این روش‌ها ویژگی‌هایی را گزینش می‌کنند که ارتباط بیش‌تری با نتیجه نهایی دارند. این موضوع به مدل کمک می‌نماید تا الگوهای اساسی را بهتر تشخیص داده و پیش‌بینی‌های دقیق‌تری ارائه کند. ضریب CC بین دو پارامتر یک معیار آماری است که میزان ارتباط خطی بین دو متغیر را نشان می‌دهد و با استفاده از معادله (۲) تعیین می‌شود (نورانی، ۱۳۹۴).

$$CC = \frac{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^N (y_i - \bar{y})^2}} \quad (2)$$

که \bar{x} و \bar{y} : مقادیر میانگین نمونه‌های x و y و N : تعداد نمونه‌ها هستند. مقادیر CC در محدوده -۱ تا ۱ قرار دارند؛ مقادیر نزدیک به -۱ یا ۱ نشان‌دهنده همبستگی قوی، مقادیر نزدیک به صفر، نشان‌دهنده همبستگی ضعیف و مقدار صفر بیانگر عدم وجود همبستگی میان ویژگی‌ها است.

MI یک معیار نظارتی است؛ به این معنا که براساس ارتباط بین ورودی‌ها و خروجی‌ها تعریف می‌شود. این روش برای نخستین بار در سال ۱۹۹۵ در زمینه پردازش تصاویر پزشکی به‌کار گرفته شد و اکنون در بسیاری از حوزه‌های علمی مختلف کاربرد دارد (Viola and Wells Iii, 1997). محاسبه آنتروپی برای یک متغیر با توجه به معادله (۳) محاسبه می‌شود.

$$H(X) = - \sum_{i=1}^N p(x_i) \text{Log}[p(x_i)] \quad (3)$$

که N : تعداد حالت‌های ممکن و P : احتمال هر مقدار ممکن را نشان می‌دهد. برای محاسبه آنتروپی، که سطح وابستگی بین دو متغیر است، از معادله (۴) استفاده می‌شود (Gao et al., 2008).

$$H(X, Y) = - \sum_{i=1}^N \sum_{i=1}^N p(x_i, y_i) \text{Log}[p(x_i, y_i)] \quad (4)$$

در نهایت، محاسبه MI با استفاده از معادله (۵) صورت می‌گیرد (Yang et al., 2000).

$$\tanh(x) = \frac{\sinh(x)}{\cosh(x)} = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (۱۳)$$

مدل سازی LSTM از طریق عملکرد دروازه فراموشی F_t آغاز می شود که وظیفه اصلی آن حذف اطلاعات غیر ضروری از مراحل قبلی است. این فرآیند شامل استفاده از تابع سیگموید برای پردازش ورودی های فعلی و داده های زمانی گذشته است تا مشخص شود چه بخشی از وضعیت قبلی سلول C_{t-1} باید نگه داشته شده و چه بخشی حذف شود. در این مرحله، دروازه ورودی وظیفه دارد تعیین کند کدام بخش از داده های ورودی جدید X_t به وضعیت سلول افزوده شود. ابتدا تابع سیگموید میزان اهمیت داده های جدید را مشخص می کند، در حالی که تابع تانژانت هیپربولیک به این داده ها وزن های مناسبی اختصاص می دهد. پس از این مرحله، اطلاعات پردازش شده از طریق عملیات جمع و ضرب برای به روز رسانی وضعیت سلول ترکیب می شوند. در نهایت، دروازه خروجی نقش خود را ایفا کرده و مشخص می کند که کدام بخش از حافظه سلول به حالت پنهان منتقل شود (Nourani and Behfar, 2021). مدل های LSTM این مطالعه شامل یک لایه ورودی، دو لایه پنهان (یک لایه LSTM برای یادگیری وابستگی های طولانی مدت و یک لایه کاملاً متصل برای بهبود رگرسیون و تعیین خروجی ها) و یک لایه خروجی است. تعداد واحدهای پنهان از طریق آزمون و خطا برای دستیابی به تعادل بهینه بین پیچیدگی و عملکرد مدل انتخاب شد.

(1997) and Schmidhuber and RNN ها قادر به یادگیری وابستگی های بلندمدت نبودند (Nourani and Behfar, 2021). LSTM، توانست مشکل ناپدید شدن و انفجار گرادیان را در RNN های سنتی حل نماید. در شکل ۶، طرح شماتیک یک بلوک حافظه LSTM با پنج واحد پنهان نمایش داده شده است که شامل ساختار زنجیره ای متشکل از بلوک های حافظه تکرارشونده و سه دروازه اصلی است. الگوریتم های مرتبط با یک لایه LSTM نیز از طریق معادلات ارائه شده اند.

$$f_t = \sigma(W_f \cdot [h_{t-1}, X_t] + b_f) \quad (۶)$$

$$i_t = \sigma(W_i \cdot [h_{t-1}, X_t] + b_i) \quad (۷)$$

$$\bar{C}_t = \tanh(W_c \cdot [h_{t-1}, X_t] + b_c) \quad (۸)$$

$$C_t = f_t \times C_{t-1} + i_t \times \bar{C}_t \quad (۹)$$

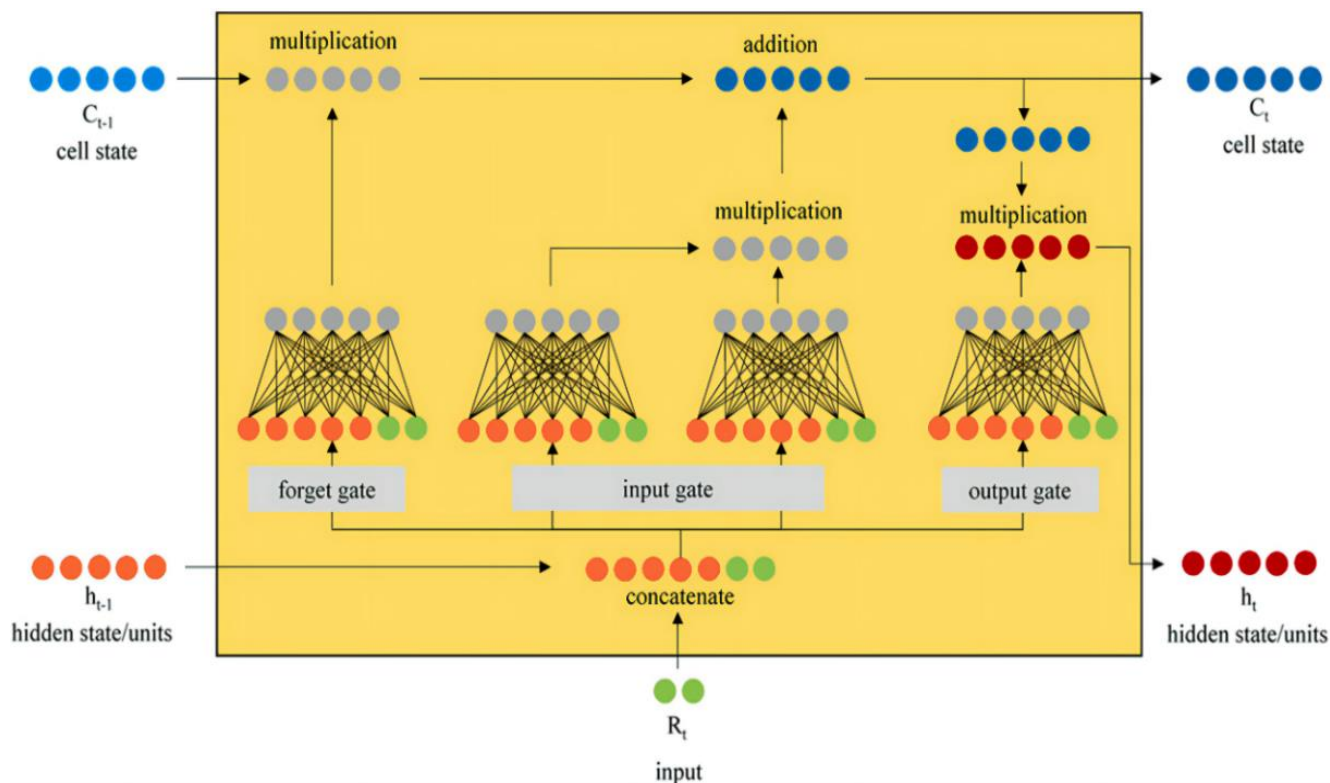
$$o_t = \sigma(W_o \cdot [h_{t-1}, X_t] + b_o) \quad (۱۰)$$

$$h_t = o_t \times \tanh(C_t) \quad (۱۱)$$

تابع استاندارد سیگموید لجستیک (σ) به صورت رابطه (۱۲) تعریف می شود.

$$\sigma(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (۱۲)$$

تابع تانژانت هیپربولیک (\tanh) نیز به صورت رابطه (۱۳) تعریف می شود:



شکل ۶- ساختار بلوک حافظه LSTM با دو بُعد ورودی و پنج واحد پنهان (Nourani and Behfar, 2021)

۲-۷- توضیح افزودنی Shapley (SHAP)

الگوریتم SHAP یکی از روش‌های پیشرفته در حوزه XAI محسوب می‌شود که برای تحلیل و تبیین نتایج مدل‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد. این الگوریتم توسط Shapley (1953) بر پایه مفهوم ارزش SHAP، برگرفته از نظریه بازی‌ها، طراحی شده است. این روش به‌طور عمده برای ارزیابی نقش هر ویژگی در شکل‌گیری نتیجه نهایی مدل طراحی شده است. در چارچوب نظریه بازی‌ها، ارزش SHAP سهم و تأثیر هر بازیکن را در رسیدن به نتیجه نهایی یک بازی نشان می‌دهد (Shapley, 1953). هر ویژگی مدل به‌عنوان یک عامل مستقل در نظر گرفته می‌شود و ارزش SHAP سهم آن ویژگی را در پیش‌بینی نهایی مدل مشخص می‌کند. این روش با بررسی تمامی ترکیب‌های ممکن از ویژگی‌ها، تأثیر هر ویژگی را به‌صورت جداگانه محاسبه می‌نماید. به‌طور خاص، مدل یک‌بار با حضور ویژگی i و یک‌بار بدون حضور آن اجرا می‌شود و اختلاف نتایج به‌دست آمده، میزان اهمیت ویژگی i را نشان می‌دهد. مقدار SHAP برای هر متغیر ورودی از معادله (۱۴) به‌دست می‌آید:

$$\phi_i = \sum_{S \subseteq F \setminus \{i\}} \frac{|S|!(F-|S|-1)!}{|F|!} [g_{S \cup \{i\}}(x_{S \cup \{i\}}) - g_S(x_S)] \quad (14)$$

که n : بیانگر تمام ویژگی‌ها، ϕ_i : مقدار SHAP مربوط به ویژگی i و S : هر زیرمجموعه‌ای از مجموعه کامل ویژگی‌های F به‌جز ویژگی i هستند. مجموعه F شامل تمامی متغیرهای ورودی مدل می‌شود. در معادله (۱۴)، x_S مقادیر متغیرهای موجود در S را بدون در نظر گرفتن ویژگی i نشان می‌دهد؛ درحالی‌که $x_{S \cup \{i\}}$ داده‌هایی را توصیف می‌کند که ویژگی i را نیز شامل می‌شوند. علاوه بر این، $g_S(x_S)$ به پیش‌بینی انجام شده با استفاده از ورودی x_S اشاره دارد. در این پژوهش، از تحلیل SHAP برای کسب درک بهتر از تأثیر متغیرهای ورودی بر خروجی مدل بهره گرفته شد.

۲-۸- معیارهای ارزیابی مدل‌سازی

در این پژوهش، ارزیابی عملکرد مدل با استفاده از ریشه میانگین مربعات خطا (RMSE)^{۲۶} و ضریب تعیین (DC)^{۲۷} که به‌ترتیب براساس معادلات (۱۵) و (۱۶) محاسبه شدند، انجام شد. مقدار DC در بازه $-\infty$ تا 1 و مقدار RMSE در محدوده 0 تا $+\infty$ قرار دارد (Nash and Sutcliffe, 1970).

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \hat{x}_i)^2} \quad (15)$$

$$DC = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \hat{x}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \quad (16)$$

که x_i : مقدار مشاهده شده، \hat{x}_i : مقدار محاسبه شده توسط مدل و \bar{x} : میانگین داده‌های مشاهده شده با تعداد n هستند. در مدل‌سازی، مقادیر شاخص نزدیک به 1 برای DC و مقادیر شاخص نزدیک به صفر برای RMSE موردنظر است.

۳- نتایج و بحث

۳-۱- نتایج مدل‌سازی FFNN و LSTM از طریق انتخاب

ورودی‌های غالب

در مدل‌سازی‌های انجام‌گرفته در این تحقیق، از تکنیک‌های CC و MI برای انتخاب ورودی‌ها استفاده شد. روش CC بر ارزیابی ارتباط خطی تمرکز داشت، درحالی‌که MI روابط غیرخطی بین ویژگی‌های ورودی و هدف را بررسی کرد. BODeff و CODeff با تأخیرهای یک روزه و هفت روزه بر اساس نمودارهای PACF (شکل ۲)، به‌عنوان ورودی مؤثر در تمامی مدل‌سازی‌ها گنجانده شدند. ویژگی‌هایی که اطلاعات آن‌ها از تصفیه‌خانه دریافت شد دارای مقادیر غیرصفر برای CC هستند و این نشان‌دهنده وجود همبستگی بین تمامی ورودی‌ها با ویژگی‌های هدف است. Tinf و Tair دارای همبستگی منفی با پارامترهای هدف هستند؛ زیرا افزایش فعالیت میکروارگانیسم‌ها در فرآیندهای بیولوژیکی در دماهای بالاتر منجر به تجزیه سریع‌تر مواد آلی و کاهش BODeff می‌شوند. دماهای بالا هم‌چنین واکنش‌های شیمیایی را تسریع می‌کنند که می‌تواند دلیلی بر کاهش CODeff باشد. درنهایت بیش‌ترین مقادیر CC و MI به‌عنوان ویژگی‌های ورودی به مدل انتخاب شدند که در جدول ۲ قابل‌مشاهده است.

مدل‌سازی، یک‌بار دیگر با حضور تمامی ویژگی‌های موجود به‌طور هم‌زمان انجام شد تا ترتیب اهمیت ویژگی‌ها و تأثیر آن‌ها بر نتایج با استفاده از الگوریتم SHAP مشخص شود. در این فرآیند مدل‌سازی، ۷۵ درصد از داده‌ها به‌منظور آموزش و ۲۵ درصد باقی‌مانده برای آزمایش شبکه به‌کار گرفته شد. تعداد نورون‌های لایه پنهان و تعداد دوره‌های آموزش در جدول ۲ ارائه شده است. مقادیر بهینه برای هر کدام، از طریق فرآیند آزمون و خطا شناسایی و تنظیم شده‌اند.

جدول ۲- نتایج مدل‌سازی مبتنی بر FFNN و LSTM با ترکیب‌های مختلفی از ورودی‌های انتخاب شده توسط MI و CC

RMSE (mg/lit)		DC		دوره ها و تعداد واحد های مخفی LSTM	RMSE (mg/lit)		DC		دوره و ساختار شبکه FFNN	پارامتر هدف	ورودی‌ها	تکنیک انتخاب ویژگی‌های غالب
آموزش	آزمایش	آموزش	آزمایش		آموزش	آزمایش	آموزش	آزمایش				
۰/۳۱	۰/۲۵	۰/۸۳۱۶	۰/۸۹	۴۰ ۳	۰/۳۱	۰/۲۷	۰/۸۲۵۰	۰/۸۷۱۱	۱۱۰ ۷-۴-۱	BOD _{eff}	BOD inf COD inf BOD eff(t-1) BOD eff(t-7) TSS inf T inf T air	CC
۰/۵۲	۰/۴	۰/۸۳۱۲	۰/۹۱۵۱	۲۰ ۶	۰/۵۵	۰/۴۳	۰/۸۱۱۱	۰/۸۹	۱۱۰ ۷-۵-۱	COD _{eff}	BOD inf COD inf COD eff(t-1) COD eff(t-7) TSS inf T inf T air	
۰/۳	۰/۲۴	۰/۸۴۳۲	۰/۹۰۳۱	۵۰ ۸	۰/۲۸	۰/۲۵	۰/۸۵۵۴	۰/۸۹	۱۱۰ ۷-۶-۱	BOD _{eff}	BOD eff(t-1) BOD eff(t-7) TDS inf E.C inf VSS inf T inf T air	
۰/۴۸	۰/۴	۰/۸۵۴۲	۰/۹۱۲۱	۴۰ ۷	۰/۵۲	۰/۴۲	۰/۸۳	۰/۹۰۳۳	۱۳۰ ۷-۷-۱	COD _{eff}	COD eff(t-1) COD eff(t-7) TDS inf VSS inf E.C inf T inf T air	MI
۰/۳۱	۰/۲۴	۰/۸۲۹۱	۰/۸۹۷۰	۴۰ ۴	۰/۳۲	۰/۲۷	۰/۸۱۴۹	۰/۸۷۱۱	۶۰ ۱۱-۸-۱	BOD _{eff}	BOD inf COD inf BOD eff(t-1) BOD eff(t-7) TSS inf TDS inf E.C inf VSS inf PH inf T inf T air	ALL Features
۰/۵۴	۰/۴۱	۰/۸۱۷۰	۰/۹۰۹۱	۳۰ ۶	۰/۵۳	۰/۴۷	۰/۸۲۱۷	۰/۸۸۰۷	۹۰ ۱۱-۷-۱	COD _{eff}	BOD inf COD inf COD eff(t-1) COD eff(t-7) TSS inf TDS inf E.C inf VSS inf PH inf T inf T air	

TDS در هر میلی‌گرم از فاضلاب و ضرب آن در ضریب تبدیل محاسبه شده، می‌توان تخمینی عملی از محتوای EC فاضلاب به‌دست آورد (Tkachuk, 1977). نتایج ضریب تبدیل برای ANN و LSTM مشابه به‌دست آمد، که نشان دهنده پایداری و دقت هر دو مدل در تخمین رابطه بین پارامترهای ورودی و خروجی است. این مقادیر در محدوده مناسب قرار دارند و بیانگر دقت مدل‌ها در تخمین روابط بین این پارامترها هستند. ضریب تبدیل BOD به COD برابر ۱/۶۶ و ۱/۶۵ نشان می‌دهد که COD تقریباً ۶۶٪ بیش‌تر از BOD است؛ زیرا شامل ترکیبات آلی تجزیه‌ناپذیر نیز می‌شود. همچنین، ضریب تبدیل TDS به EC برابر ۱/۳۲ و ۱/۳۳ است که بیانگر تأثیر یون‌های حل شده بر هدایت الکتریکی است و می‌تواند بسته به ترکیب نمونه‌ها متغیر باشد.

جدول ۳- ضرایب تبدیل به‌دست آمده توسط ANN و LSTM

ضریب تبدیل TDS → EC	ضریب تبدیل BOD → COD	روش
۱/۳۲	۱/۶۶	ANN
۱/۳۳	۱/۶۵	LSTM

۳-۳- توضیح اهمیت ویژگی‌ها

با توجه به ماهیت مدل‌های LSTM و FFNN بررسی نحوه تأثیر دقیق ورودی‌ها بر خروجی‌ها امکان‌پذیر نیست. به‌همین دلیل برای تحلیل اهمیت ویژگی‌های ورودی، نیاز به استفاده از یک الگوریتم مزاد بر مدل‌ها مانند تحلیل SHAP وجود دارد. تصویر نحوه تأثیر هر ویژگی ورودی بر نتایج مدل‌های آموزش دیده با نمودار خلاصه (Summary) SHAP انجام شده است (شکل ۷). همان‌طور که در شکل ۷ قابل مشاهده است، محور x نمایانگر مقادیر SHAP است، که مقادیر مثبت، عامل افزایش‌دهنده پیش‌بینی مدل و مقادیر منفی، عامل کاهش‌دهنده پیش‌بینی مدل می‌شوند. درواقع، مقدار SHAP مثبت یا منفی‌تر در نمودار Summary، نشان‌دهنده تأثیر قوی‌تر آن ویژگی در افزایش یا کاهش پیش‌بینی است. قسمت‌های قرمز و آبی به ترتیب مقادیر بالا و کم ثبت شده از ویژگی‌ها در تصفیه‌خانه را نشان می‌دهند. درواقع نقاط رنگی، نشانگر داده‌های مشاهداتی هستند. در محور y، ویژگی‌ها به ترتیب از بالا به پایین از نظر میزان اهمیت چیده شده‌اند، به طوری که $BOD_{eff}(t-1)$ و $COD_{eff}(t-1)$ به عنوان تأثیرگذارترین ویژگی‌ها در نتایج مدل‌سازی شناخته می‌شوند. با توجه به ماهیت اتورگرسیو این فرآیند و نیاز میکروارگانیسم‌ها به زمان برای انجام فعالیت‌های بیولوژیکی، شرایطی فراهم می‌شود که میکروارگانیسم‌ها فرصت کافی برای اکسیداسیون مواد آلی موجود در فاضلاب داشته باشند. این

بررسی مقادیر به‌دست آمده DC و RMSE (جدول ۲)، نشان می‌دهد که LSTM عملکرد بهتری نسبت به FFNN از خود دارد، که نشان‌دهنده بهبود کلی در نتایج است. به‌دلیل ماهیت غیرخطی تصفیه‌خانه و همچنین ماهیت غیرخطی مدل‌های مورد استفاده، انتخاب ویژگی‌ها با استفاده از تکنیک MI نتایج بهتری نسبت به تکنیک CC ارائه می‌دهد. دلیل این امر، انتخاب ویژگی‌هایی است که دارای همبستگی غیرخطی بالایی با ویژگی‌های هدف در فرآیند مدل‌سازی هستند. کاهش تعداد ورودی‌ها به مدل با به‌کارگیری روش‌های گوناگون، باعث می‌شود که مدل بهتر بتواند آموزش ببیند و سبب بهبود نتایج شود. با مقایسه شکل ۵ و پارامترهای تعیین شده توسط MI، می‌توان نتیجه گرفت ویژگی‌هایی که با استفاده از روش MI برای ورودی برگزیده شده بودند، تا حدودی توسط روش SHAP نیز به‌عنوان ویژگی‌های مهم در مدل نشان داده شدند. درواقع، می‌توان نتیجه گرفت که مناسب‌ترین روش برای انتخاب ورودی در مدل‌ها و فرآیندهایی که ماهیت غیرخطی دارند، روشی است که بتواند ویژگی‌های ورودی را براساس ارتباط غیرخطی بین آن‌ها و ویژگی هدف انتخاب کند. نتایج مدل‌سازی با استفاده از ANN و LSTM نشان داد که دقت مدل‌ها متناسب با توزیع داده‌ها که در جدول ۱ آورده شده است، بوده و معیارهای ارزیابی نشان دادند که مدل‌ها توانسته‌اند با دقت قابل‌قبولی روند تغییرات داده‌های کیفی فاضلاب را پیش‌بینی نمایند. لازم‌به‌ذکر است که مدل‌های ANN و LSTM معمولاً با داده‌های پایدار و کم‌نویز عملکرد بهتری دارند. پراکندگی زیاد داده‌ها باعث می‌شود مدل در یادگیری الگوهای مشخص دچار مشکل شود.

۳-۲- محاسبه ضریب تبدیل با استفاده از مدل‌های

مبتنی بر هوش مصنوعی

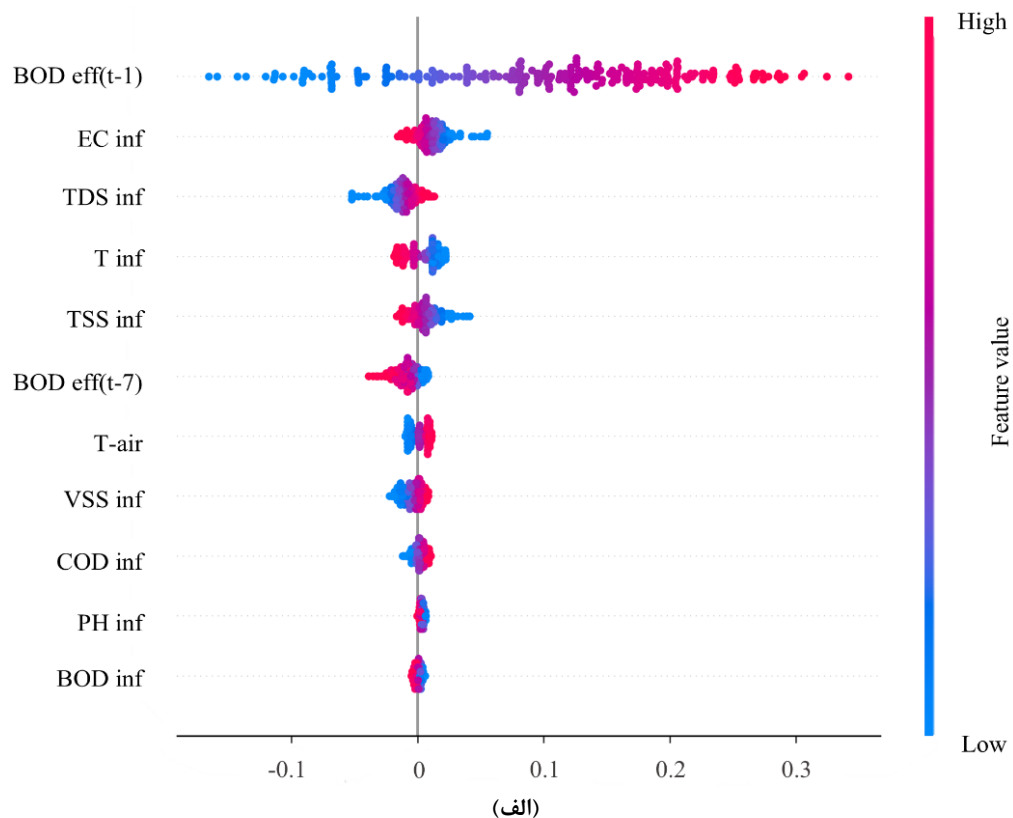
هدف از محاسبه ضریب تبدیل، یافتن یک رابطه تجربی بین متغیرها است. این ضریب می‌تواند به‌عنوان یک معیار ساده برای تخمین یک متغیر بر اساس متغیر دیگر مورد استفاده قرارگیرد. به‌عنوان مثال، اندازه‌گیری این ضریب به‌دلیل این که برخی از پارامترها ممکن است به‌سادگی اندازه‌گیری نشوند یا هزینه و زمان بالایی برای آزمایش داشته باشند، اهمیت دارد.

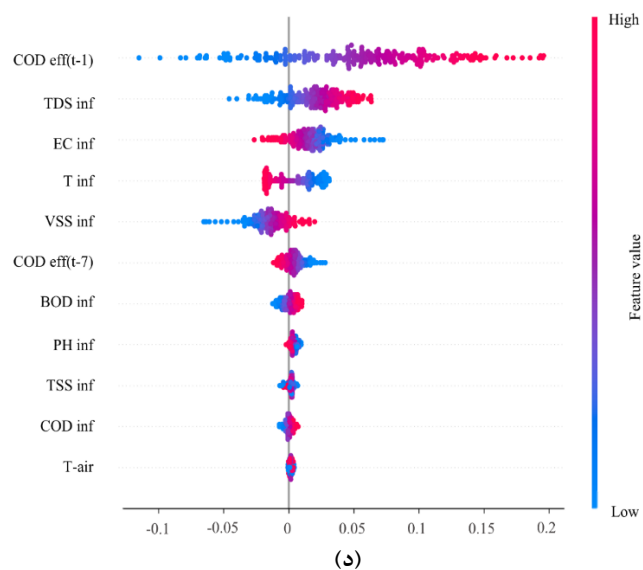
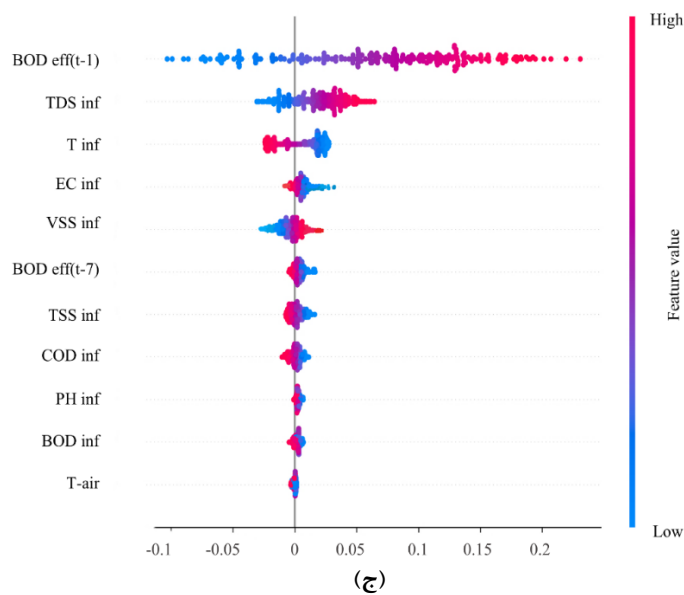
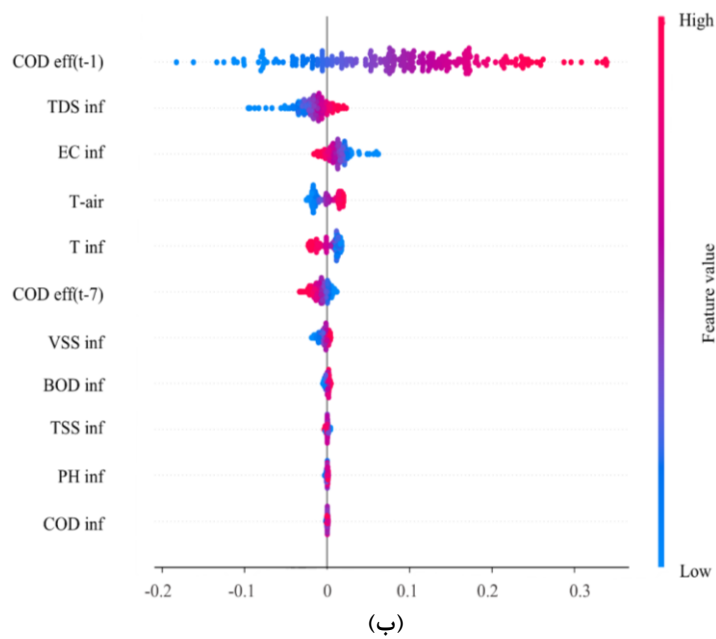
برای تعیین این ضرایب به‌جای استفاده از روابط خطی و تجربی سنتی، بهتر است از مدل‌های مبتنی بر هوش مصنوعی بهره گرفت. این مدل‌ها به‌دلیل قابلیت شناسایی روابط غیرخطی بین متغیرها می‌توانند ضریب تبدیل را با دقت بیشتری تخمین بزنند. نتایج به‌دست آمده برای مقادیر محاسبه شده از ضرایب تبدیل بین پارامترهای BOD و COD، همچنین بین پارامترهای TDS و EC در جدول ۳ ارائه شده است. درواقع، به‌طور مثال، با تعیین مقدار

واکنش‌های شیمیایی مختل شود. کاهش عملکرد این میکروارگانیسم‌ها منجر به کند شدن فرآیند تجزیه مواد آلی شده و در نتیجه، مقادیر BOD و COD کاهش می‌یابد. به‌همین دلیل با افزایش EC، پیش‌بینی‌های مدل نیز کاهش پیدا می‌کند. T_{inf} نیز یکی از عوامل با تأثیر زیاد در خروجی‌های مدل است و تأثیر معکوس دارد؛ به این معنا که با افزایش دما که موجب بالا رفتن فعالیت میکروارگانیسم‌ها می‌شود، فرآیند اکسیداسیون سریع‌تر انجام می‌گیرد و این می‌تواند عاملی برای عدم فرصت لازم برای اکسیژن‌خواهی باشد. مدل LSTM با توجه به این‌که توانایی بالایی در مدل‌سازی داده‌های وابسته به زمان و سری‌های زمانی دارد، عملکرد بهتری در تحلیل تأثیر ویژگی‌های دخیل در مدل‌سازی روابط غیرخطی دارد. در مقابل FFNN بیش‌تر تحت تأثیر ویژگی‌هایی است که تأثیر مستقیم بر روند مدل‌سازی دارند. با توجه به نتایج بالای معیارهای ارزیابی، می‌توان گفت که مدل‌ها الگوهای تغییرات فاضلاب را به‌خوبی پردازش کرده‌اند. بررسی نمودارهای SHAP نشان می‌دهد که مدل تأثیر دما و متغیرهای بیولوژیکی را در نظر گرفته و فعالیت میکروارگانیسم‌ها را به‌درستی درک کرده است. علاوه بر این، از آن‌جا که افزایش یا کاهش دما تأثیر معکوسی بر مقدار پیش‌بینی شده پارامترهای هدف دارد، می‌توان نتیجه گرفت که مدل توانسته است اثر دما بر فعالیت میکروبی را به‌درستی یاد بگیرد.

زمان‌بندی مناسب امکان می‌دهد فرآیندهای بیولوژیکی به‌طور کامل اجرا شوند و مواد آلی به‌شکل مؤثری تجزیه شوند. برای ویژگی‌های $BOD_{eff}(t-1)$ و $COD_{eff}(t-1)$ مشخص شده است که با بالا رفتن مقادیر اندازه‌گیری شده برای این ویژگی‌ها، مقدار SHAP و نیز مقدار پیش‌بینی شده توسط مدل ارتقا می‌یابد. با در نظر گرفتن این موضوع که، عملیات تجزیه مواد آلی توسط میکروارگانیسم‌ها معمولاً در فاصله زمانی کوتاه اتفاق می‌افتد، تأثیر تأخیر یک روزه بیش‌تر از تأخیر هفت روزه در نتایج مدل‌سازی BOD_{eff} و COD_{eff} است.

باتوجه به شکل ۷، TDS، که نشان‌دهنده کل مواد جامد محلول در آب است و شامل یون‌ها، مواد معدنی و آلی بوده و برای ارزیابی کیفیت استفاده می‌شود، به‌عنوان یکی از ویژگی‌هایی است که تأثیر زیادی در مدل‌سازی BOD_{eff} و COD_{eff} دارد. بالا بودن میزان این ویژگی نشان‌دهنده آن است که مقدار زیادی از مواد آلاینده در فاضلاب است و سطح اکسیژن بالایی لازم است تا این مواد آلاینده تجزیه شوند. در نتیجه، با افزایش مقادیر مشاهده‌شده برای این ویژگی، پیش‌بینی‌های مدل نیز روند افزایشی پیدا می‌کنند. با دقت در شکل ۷، می‌توان مشاهده کرد که EC نیز یک ویژگی تأثیرگذار در نتایج به‌دست آمده از مدل‌ها است. افزایش مقدار EC معمولاً نشان‌دهنده وجود مقادیر بالایی از نمک‌ها و یون‌ها است. میکروارگانیسم‌هایی که مسئول تجزیه مواد آلی هستند، ممکن است تحت تأثیر این یون‌ها قرارگیرند و عملیات تجزیه و





شکل ۷- نمودار Summary از SHAP برای مدل‌سازی FFNN: الف) BOD eff; ب) COD eff; و برای مدل‌سازی LSTM: ج) BOD eff; و د) COD eff، شامل تمام ویژگی‌های ورودی

مشخص شدن ویژگی‌های تأثیرگذار در فرآیند پیش‌بینی، این امکان را می‌دهند که با تمرکز بر روی ویژگی‌های مهم از هزینه‌های اضافی برای جمع‌آوری و پیش‌پردازش داده‌ها جلوگیری شود و با شناسایی عوامل آلوده‌کننده مهم از تخلیه پساب آلوده به محیط‌زیست جلوگیری شود و بتوان با تولید پسابی مناسب، از آن در صنایع گوناگون استفاده کرد. اغلب پژوهش‌ها از SHAP برای تفسیر مدل‌های کلاسیک استفاده کرده‌اند، مطالعات کم‌تری به تحلیل مدل‌های LSTM و FFNN در پیش‌بینی متغیرهای تصفیه‌خانه فاضلاب پرداخته‌اند؛ به‌ویژه مطالعاتی که مستقیماً بر پساب تصفیه‌خانه فاضلاب متمرکز باشند. زیرا بیش‌تر تحقیقات مشابه از SHAP، در مدل‌سازی کیفیت آب‌های سطحی یا رودخانه‌ها استفاده کرده‌اند.

لازم‌به ذکر است که یکی از محدودیت‌های این پژوهش، پیچیدگی بالای مدل LSTM در مقایسه با FFNN است که منجر به نیاز به حجم داده‌های بیش‌تر برای آموزش و افزایش زمان پردازش می‌شود. این مسئله می‌تواند کاربرد عملی این مدل را در شرایطی که داده‌های کافی در دسترس نیست یا نیاز به پردازش سریع‌تر وجود دارد، محدود نماید. هم‌چنین این تحقیق بر روی داده‌های تصفیه‌خانه تبریز انجام شده است. بنابراین، ممکن است نتایج آن به سایر تصفیه‌خانه‌ها با شرایط و ترکیب فاضلاب متفاوت قابل‌تعمیم نباشد. در تحقیقات آتی، پیشنهاد می‌شود تأثیرات سایر ویژگی‌های ورودی به تصفیه‌خانه نیز مورد بررسی قرارگیرد. هم‌چنین می‌توان از سایر مدل‌های هوش مصنوعی برای مقایسه نتایج پیش‌بینی شده استفاده شود. می‌توان از تحلیل موجک برای تجزیه سری‌های زمانی به مؤلفه‌های مختلف استفاده کرد و این مؤلفه‌ها به‌عنوان ورودی مدل‌ها به کار گرفته شوند. سپس، از روش SHAP برای تحلیل مؤلفه‌های موجک و از چندین روش توضیح‌پذیری مدل برای افزایش دقت تحلیل ویژگی‌های ورودی استفاده شود.

۵- قدردانی

از جناب آقای دکتر رضا شهیدی زنوز و سازمان آب و فاضلاب تبریز که با همکاری ارزشمند خود در فراهم‌سازی داده‌های مورد نیاز این تحقیق نقش به‌سزایی داشتند، صمیمانه قدردانی و تشکر می‌نمایم.

۶- پی‌نوشت‌ها

- 1- Artificial Neural Network
- 2- Deep Neural Network

از مهم‌ترین اقدامات برای کنترل و مدیریت بخش آب و فاضلاب، پیش‌بینی عملکرد تصفیه‌خانه‌های فاضلاب و عوامل تأثیرگذار بر آن‌ها است. از این‌رو در این پژوهش، برای شناسایی اهمیت ویژگی‌های دخیل در میزان BOD و COD پساب، از مدل‌های FFNN و LSTM برای مدل‌سازی BODeff و CODeff تصفیه‌خانه تبریز استفاده شد. با استفاده از روش SMA، نویزهای احتمالی موجود در داده‌های مورد استفاده حذف شدند. از روش‌های CC و MI استفاده شد تا ورودی‌های غالب برای مدل‌ها از بین سایر ویژگی‌ها انتخاب شوند. ویژگی‌های ورودی با بالاترین میزان CC و MI انتخاب شدند. با توجه به روابط غیرخطی مدل‌های FFNN و LSTM، نتایج حاکی از آن است که انتخاب ورودی با استفاده از روش MI بهتر از روش CC عمل کرد و توانست عملکرد مدل‌سازی BODeff و CODeff را در مرحله آزمایش به‌ترتیب، به‌میزان ۳/۵۵٪ و ۲/۲۷٪ در مدل FFNN و ۵/۱۲٪ و ۲/۶۹٪ در مدل LSTM افزایش دهد. LSTM با در نظر گرفتن گام‌های زمانی قبلی در مدل‌سازی سری زمانی عملکرد بهتری نسبت به FFNN داشت و هم‌چنین کاهش تعداد ویژگی‌ها سبب بهبود نتایج در مقایسه با حضور همه ویژگی‌ها شد.

بررسی نمودارهای SHAP نشان داد، در میان روش‌های مورد استفاده در این تحقیق برای انتخاب ورودی به مدل، روش MI به‌دلیل تطابق بیش‌تری که با ویژگی‌های تعیین‌شده توسط SHAP دارد، مناسب‌تر از روش CC برای انتخاب ورودی به مدل است؛ زیرا روش SHAP با تعیین نوع تأثیر ورودی‌ها پس از مدل‌سازی و این‌که کدام ویژگی باعث کاهش یا افزایش نتیجه پیش‌بینی شده توسط مدل می‌شود، بهتر می‌تواند برای انتخاب ورودی‌های مناسب راهنمایی کند.

برای ارائه تفسیری از مدل‌های جعبه سیاه استفاده شده در تحقیق و بررسی نحوه تأثیرگذاری ویژگی‌های ورودی بر نتایج مدل، از الگوریتم SHAP، که به‌عنوان یکی از روش‌های نوین در حوزه XAI شناخته می‌شود، پس از اجرای مدل‌سازی با در نظر گرفتن تمام پارامترها، استفاده شد. شکل‌های summary نشان داد که BODeff(t-1) و CODeff(t-1) به‌ترتیب، با سهم تقریبی ۵۶٪ و ۵۵٪ در نتایج FFNN، و ۵۰٪ و ۴۰٪ در نتایج LSTM به‌عنوان مهم‌ترین ویژگی‌ها شناسایی شدند که با افزایش مقادیر ثبت شده برای این ویژگی‌ها در تصفیه‌خانه، مقادیر پیش‌بینی مدل‌ها نیز افزایش یافت. هم‌چنین TDS و EC به‌عنوان ویژگی‌های با تأثیر زیاد شناخته شدند که در تصفیه‌خانه برای بهینه شدن عملیات تصفیه و تولید پساب با کیفیت بهتر باید مورد توجه قرارگیرند.

Bourahla, M.Z., and Bourahla, M., (2023), "Sewer systems control using internet of things and explainable artificial intelligence", In: Drias, H., Yalaoui, F., Hadjali, A. (Eds.), *Artificial Intelligence Doctoral Symposium, Communications in Computer and Information Science*, Springer Nature, Singapore, 207-220, https://doi.org/10.1007/978-981-99-4484-2_16.

Danesh, T., Ouaret, R., Floquet, P., and Negny, S., (2022), "Interpretability of neural networks predictions using accumulated local effects as a model-agnostic method", In: *Computer Aided Chemical Engineering*, Elsevier, 1501-1506, <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-95879-0.50251-4>.

Dosilovic, F.K., Brcic, M., and Hlupic, N., (2018), "Explainable artificial intelligence: A survey", *41st International Convention on Information and Communication Technology, Electronics and Microelectronics (MIPRO)*, IEEE, Opatija, 0210-0215, <https://doi.org/10.23919/MIPRO.2018.8400040>.

El-Rawy, M., Abd-Ellah, M.K., Fathi, H., and Ahmed, A.K.A., (2021), "Forecasting effluent and performance of wastewater treatment plant using different machine learning techniques", *Journal of Water Process Engineering*, 44, 102380, <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2021.102380>.

Gao, Z., Gu, B., and Lin, J., (2008). "Monomodal image registration using mutual information based methods", *Image and Vision Computing*, 26, 164-173, <https://doi.org/10.1016/j.imavis.2006.08.002>.

Hassija, V., Chamola, V., Mahapatra, A., Singal, A., Goel, D., Huang, K., Scardapane, S., Spinelli, I., Mahmud, M., and Hussain, A., (2024), "Interpreting black-box models: a review on explainable artificial intelligence", *Cognitive Computation*, 16, 45-74, <https://doi.org/10.1007/s12559-023-10179-8>.

Hochreiter, S., and Schmidhuber, J., (1997), "Long short-term memory", *Neural Computation*, 9, 1735-1780, <https://doi.org/10.1162/neco.1997.9.8.1735>.

Huang, B., and Mujumdar, A.S., (1993), "Use of neural network to predict industrial dryer performance", *Drying Technology*, 11, 525-541, <https://doi.org/10.1080/07373939308916842>.

Li, Z., Peng, F., Niu, B., Li, G., Wu, J., and Miao, Z., (2018), "Water quality prediction model combining sparse auto-encoder and LSTM network", *IFAC-PapersOnLine*, 51, 831-836, <https://doi.org/10.1016/j.ifacol.2018.08.091>.

Mjalli, F.S., Al-Asheh, S., and Alfadala, H.E., (2007), "Use of artificial neural network black-box modeling for the prediction of wastewater treatment plants performance", *Journal of Environmental Management*, 83, 329-338, <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2006.03.004>.

Nash, J.E., and Sutcliffe, J.V., (1970), "River flow forecasting through conceptual models part I: A discussion of principles", *Journal of Hydrology*, 10(3), 282-290, [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(70\)90255-6](https://doi.org/10.1016/0022-1694(70)90255-6).

Nourani, V., and Behfar, N., (2021), "Multi-station runoff-sediment modeling using seasonal LSTM

- 3- Long Short-Term Memory
- 4- Recurrent Neural Network
- 5- Explainable Artificial Intelligence
- 6- Shapley Additive Explanation
- 7- Extreme Gradient Boosting
- 8- Feature Importance
- 9- Variance Inflation Factor
- 10- Correlation Coefficient
- 11- Mutual Information
- 12- Feed Forward Neural Network
- 13- Chemical Oxygen Demand
- 14- Biological Oxygen Demand
- 15- Suspended Solids
- 16- Total Suspended Solids
- 17- Total Dissolved Solids
- 18- Volatile Suspended Solids
- 19- Electrical Conductivity
- 20- Air Temperature
- 21- Influent Temperature
- 22- Effluent BOD and COD
- 23- Partial Autocorrelation Function
- 24- Simple Moving Average
- 25- Back Propagation
- 26- Root Mean Square Error
- 27- Determination Coefficient

۷- مراجع

اصغری، پ.، نورانی، و.، شرقی، ا.، و بهفر، ن.، (۱۴۰۰). "استفاده از مدل ترکیبی برای بهبود عملکرد روش‌های ANN، ANFIS و SVR در تخمین پارامترهای BOD و COD پساب تصفیه‌خانه فاضلاب"، *نشریه مهندسی عمران امیرکبیر*، ۵۳(۱)، ۴۶۸۳-۴۷۰۲، <https://doi.org/10.22060/ceej.2020.18441.6873>.

اصول دینی، ن.، علی، م.، و عبداله‌زاده، م.، (۱۴۰۳). "تأثیر میدان الکتریکی پالسی (PEF) در غیرفعال نمودن عوامل بیولوژیکی در فرآیند پساب تصفیه‌خانه‌های متداول آب"، *علوم و مهندسی آب و فاضلاب*، ۹(۳)، ۴۲-۵۰، <https://doi.org/10.22112/jwwse.2024.422486.1379>.

علمی، م.ت.، حجابی، ن.، نورانی، و.، ناقبیان، س.م.، (۱۴۰۰). "بررسی کارایی روش‌های هوش مصنوعی در پیش‌بینی عملکرد تصفیه‌خانه فاضلاب (مطالعه موردی: تصفیه‌خانه فاضلاب شهر تبریز)"، *نشریه مهندسی عمران امیرکبیر*، ۵۳(۳)، ۱۰۳۳-۱۰۴۸، <https://doi.org/10.22060/ceej.2019.16757.6334>.

نورانی، و.، (۱۳۹۴). *مبانی هیدروانفورماتیک*، انتشارات دانشگاه تبریز، تبریز، ایران.

Adadi, A., and Berrada, M., (2018), "Peeking inside the black-box: a survey on explainable artificial intelligence (XAI)", *IEEE Access*, 6, 52138-52160, <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2018.2870052>.

- Viola, P., and Wells III, W.M., (1997), "Alignment by maximization of mutual information", *International Journal of Computer Vision*, 24(2), 137-154, <https://doi.org/10.1023/A:1007958904918>.
- Yang, H.H., Vuuren, S.V., Sharma, S., and Hermansky, H., (2000), "Relevance of time-frequency features for phonetic and speaker-channel classification", *Speech Communication*, 31, 35-50, [https://doi.org/10.1016/S0167-6393\(00\)00007-8](https://doi.org/10.1016/S0167-6393(00)00007-8).
- This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC-BY) license.
- 
- models", *Journal of Hydrology*, 601, 126672, <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2021.126672>.
- Nourani, V., Khodkar, K., Paknezhad, N.J., and Laux, P., (2022), "Deep learning-based uncertainty quantification of groundwater level predictions", *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, 36(10), 3081-3107, <https://doi.org/10.1007/s00477-022-02181-7>.
- Nourani, V., Zonouz, R.S., and Dini, M., (2023), "Estimation of prediction intervals for uncertainty assessment of artificial neural network based wastewater treatment plant effluent modeling", *Journal of Water Process Engineering*, 55, 104145, <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2023.104145>.
- Núñez, J., Cortés, C.B., and Yáñez, M.A., (2023), "Explainable artificial intelligence in hydrology: Interpreting black-box snowmelt-driven streamflow predictions in an arid andean basin of north-central chile", *Water*, 15(19), 3369, <https://doi.org/10.3390/w15193369>.
- Park, J., Lee, W.H., Kim, K.T., Park, C.Y., Lee, S., and Heo, T.Y., (2022), "Interpretation of ensemble learning to predict water quality using explainable artificial intelligence", *Science of the Total Environment*, 832, 155070, <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2022.155070>.
- Park, J., Ahn, J., Kim, J., Yoon, Y., and Park, J., (2022), "Prediction and interpretation of water quality recovery after a disturbance in a water treatment system using artificial intelligence", *Water*, 14(15), 2423, <https://doi.org/10.3390/w14152423>.
- Pisa, I., Santin, I., Morell, A., Vicario, J. L., and Vilanova, R., (2019), "LSTM-based wastewater treatment plants operation strategies for effluent quality improvement", *IEEE Access*, 7, 159773-159786, <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2019.2950852>.
- Shapley, L.S., (1953), "A value for n-person games", In: Kuhn, H.W., Tucker, A.W., (Eds.), *Contributions to the Theory of Games (AM-28)*, Volume II. Princeton University Press, 307-318, <https://doi.org/10.1515/9781400881970-018>.
- Sheik, A.G., Malla, M.A., Srungavarapu, C.S., Patan, A.K., Kumari, S., and Bux, F., (2024), "Prediction of wastewater quality parameters using adaptive and machine learning models: A South African case study", *Journal of Water Process Engineering*, 67, 106185, <https://doi.org/10.1016/j.jwpe.2024.106185>.
- Svetunkov, I., and Petropoulos, F., (2018), "Old dog, new tricks: A modelling view of simple moving averages", *International Journal of Production Research*, 56(18), 6034-6047, <https://doi.org/10.1080/00207543.2017.1380326>.
- Tkachuk, R. (1977), "Calculation of the nitrogen-to-protein conversion factor", In: *Nutritional Standards and Methods of Evaluation for Food Legume Breeders*, International Development Research Centre (IDRC), Ottawa, 78-81.
- Vilone, G., and Longo, L., (2021), "Notions of explainability and evaluation approaches for explainable artificial intelligence", *Information Fusion*, 76, 89-106, <https://doi.org/10.1016/j.inffus.2021.05.009>.