

Estimating Groundwater Nitrate Concentration using Artificial Neural Networks

Amir Hossein Sayyahzadeh^{1*} , Ebrahim Bahadorifar²

1. . Assistant Professor, Department of Civil Engineering, Faculty of Civil Engineering & Architecture, Malayer University, Malayer, Iran
2. . M.Sc. Student in Geotechnical Civil Engineering, Department of Civil Engineering, Faculty of Civil Engineering & Architecture, Malayer University, Malayer, Iran

Abstract

Groundwater contamination by nitrate is a growing global concern. The increasing dependence of human societies on groundwater for urban and agricultural uses requires accurate and continuous prediction of nitrate concentrations in different parts of aquifers. Artificial neural networks are one of the efficient tools for modeling nitrate concentrations in groundwater, but they face challenges in selecting appropriate input variables, optimizing network architecture, and data shortage. In this study, after selecting 16 physical and chemical water quality parameters as network inputs and nitrate as network output, several structures of multilayer perceptron neural networks (60 models) were evaluated. Also, in the network that had the highest correlation coefficient and the lowest root mean square error, sensitivity analysis and data adequacy test were performed. The results showed that the three-layer perceptron neural network is able to predict nitrate concentrations with a correlation coefficient of 0.94 and a root mean square error of 1.3. The results of the sensitivity analysis showed that removing any of the network inputs alone does not have a significant impact on the performance of the network for estimating nitrate concentration. According to the results of the data adequacy test, to achieve a neural network model for proper estimation of groundwater nitrate, at least 220 measurement samples of groundwater nitrate concentration are required in order to achieve the desired accuracy for nitrate estimation.

Review History

Received: Jun 01, 2025

Revised: Jul 13, 2025

Accepted: Aug 04, 2025

Keywords

Nitrate concentration
modeling
aquifer contamination
neural network
architecture design
sensitivity analysis
data adequacy

* Corresponding Author Email: a.sayahzade@malayeru.ac.ir - ORCID: 0000-0003-4651-3816

برآورد غلظت نیترات آب زیرزمینی با استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی

امیر حسین سیاح زاده^{۱*}، ابراهیم بهادری فر^۲

۱. دکترای مهندسی عمران- محیط زیست گروه مهندسی عمران، دانشکده مهندسی عمران و معماری، دانشگاه ملایر، ملایر، ایران.

۲. دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی عمران گروه مهندسی عمران، دانشکده مهندسی عمران و معماری، دانشگاه ملایر، ملایر، ایران.

چکیده

تاریخچه داوری

آلودگی آب زیرزمینی به نیترات یک نگرانی رو به رشد جهانی است. وابستگی روزافزون جوامع بشری به آب زیرزمینی برای مصارف شهری و کشاورزی مستلزم پیش‌بینی دقیق و مستمر غلظت نیترات در نقاط مختلف آب‌خوان‌ها است. شبکه‌های عصبی مصنوعی یکی از ابزارهای کارآمد مدل‌سازی غلظت نیترات در آب‌های زیرزمینی است که البته با چالش‌هایی در خصوص انتخاب متغیرهای ورودی مناسب، بهینه‌سازی معماری شبکه و کمبود داده‌ها مواجه است. در این تحقیق پس از انتخاب ۱۶ پارامتر فیزیکی و شیمیایی کیفی آب به‌عنوان ورودی‌های شبکه و نیترات به‌عنوان خروجی شبکه، ساختارهای متعددی از شبکه‌های عصبی پرسپترون چند لایه (۶۰ مدل) ارزیابی شد. همچنین در شبکه‌ای که دارای بیشترین ضریب همبستگی و کمترین ریشه میانگین مربعات خطا بود، آنالیز حساسیت و آزمون کفایت داده‌ها صورت گرفت. نتایج نشان داد که شبکه عصبی پرسپترون سه لایه قادر است غلظت نیترات را با ضریب همبستگی ۰/۹۴ و با ریشه میانگین مربعات خطا ۱/۳ پیش‌بینی کند. نتایج آنالیز حساسیت نشان داد حذف هیچیک از ورودی‌های شبکه به تنهایی، تاثیر قابل توجهی در عملکرد شبکه جهت تخمین غلظت نیترات ندارد. بر اساس نتایج آزمون کفایت داده‌ها برای دستیابی به یک مدل شبکه عصبی جهت تخمین مناسب نیترات آب‌های زیرزمینی حداقل به ۲۲۰ نمونه اندازه‌گیری از غلظت نیترات آب زیرزمینی نیاز هست تا بتوان به دقت مطلوبی جهت برآورد نیترات رسید.

کلمات کلیدی

مدل‌سازی غلظت نیترات

آلودگی آب‌خوان‌ها

طراحی معماری شبکه عصبی

آنالیز حساسیت

کفایت داده‌ها

۱- مقدمه

نیترات به‌عنوان یکی از شایع‌ترین آلاینده‌های آب‌های زیرزمینی، تهدیدی جدی برای سلامت انسان و اکوسیستم‌های آبی محسوب می‌شود. افزایش غلظت نیترات در آب آشامیدنی با عوارضی نظیر سندروم نوزاد آبی، افزایش خطر سرطان‌های گوارشی و اختلالات تکاملی مرتبط است (Grout et al., 2023; Alizadeh et al., 2024; Stylianoudaki et al., 2022). منشأ اصلی حضور نیترات در آب‌های زیرزمینی، بطور عمده فعالیت‌های کشاورزی (استفاده از کودهای نیتروژنه و فضولات حیوانی)، تخلیه

فاضلاب‌های شهری و صنعتی است (Grout et al., 2023; Stylianoudaki et al., 2022). با توجه به وابستگی جوامع انسانی به منابع آب زیرزمینی جهت تامین آب شرب و کشاورزی به خصوص در مناطق خشک نظیر ایران (Alizadeh et al., 2024)، پایش و پیش‌بینی غلظت نیترات در منابع آب زیرزمینی، به منظور مدیریت پایدار این منابع ضروری است (Maghrebi et al., 2021; Noori et al., 2020; Karimanzira et al., 2023; Lee et al., 2023).

روش‌های مرسوم اندازه‌گیری غلظت نیترات، مبتنی بر

* رایانامه نویسنده مسئول: a.sayahzade@malayeru.ac.ir - ORCID: 0000-0003-4651-3816

کپی‌رایت © ۲۰۲۵. انتشارات دانشگاه تربیت مدرس (TMU Press). این مقاله به‌صورت دسترسی آزاد منتشر شده و تحت مجوز بین‌المللی Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 قرار دارد (https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0). بر اساس این مجوز، شما می‌توانید این مطلب را در هر قالب و رسانه‌ای کپی، بازنشر و بازآفرینی کنید و یا آن را ویرایش و بازسازی نمایید، به شرط آنکه نام نویسنده را ذکر کرده و از آن برای مقاصد غیرتجاری استفاده کنید.



با استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی است که سه نوآوری کلیدی را ارائه می‌دهد:

- بررسی کفایت تعداد نمونه‌های مورد نیاز جهت شبکه عصبی.
- بررسی معماری‌های مختلف شبکه عصبی جهت بهینه‌سازی ساختار شبکه عصبی.
- آنالیز حساسیت ورودی‌های مدل شبکه عصبی به منظور شناسایی مؤثرترین عوامل بر پیش‌بینی غلظت نیترات.

۲- مواد و روش‌ها

۲-۱- منطقه‌ی مورد مطالعه

محدوده مورد مطالعه، آبخوان شهرستان گالوی واقع در ساحل غربی ایرلند (مطابق شکل ۱)، با مساحت ۶۱۴۹ کیلومتر مربع یکی از شهرستان‌های استان کناخت در ایرلند است. شهرگالوی، مرکز این شهرستان می‌باشد. (اداره آمار مرکزی ایرلند^۱).

۲-۲- داده‌های مورد استفاده در شبکه عصبی مصنوعی

داده‌های مورد استفاده در این تحقیق شامل ۴۳۶ نمونه آنالیز پارامترهای کیفی آب آبخوان گالوی می‌باشد که در دوره زمانی سال ۲۰۱۰ تا سال ۲۰۲۰ از ۲۶ حلقه چاه آب در منطقه گالوی اندازه‌گیری شده است. این اطلاعات از ژئوپورتال آژانس حفاظت از محیط‌زیست ایرلند^۲ به دست آمده است. داده‌ها در هر نمونه در واقع مقادیر ۱۷ پارامتر کیفی آب زیرزمینی شامل پ.هاش، دما، اکسیژن محلول، رسانایی، پتانسیل اکسیداسیون و احیاء، کلیفرم‌های مدفوعی، قلیائیت، کدورت، آمونیوم، فسفر کل، فسفر واکنش‌پذیر با مولبیدات، کربن آلی کل، سیلیس، کلراید، فلوراید و سولفات به‌عنوان ورودی‌های مدل شبکه عصبی و غلظت نیترات به‌عنوان خروجی مدل شبکه عصبی می‌باشند. در این پژوهش، ۸۰ درصد داده‌ها جهت آموزش و ۲۰ درصد باقیمانده جهت تست و آزمون مدل بکار گرفته شدند.

ضمناً برای نرمال‌سازی داده‌ها از رابطه ۱ استفاده شد.

$$X_n = \frac{X - X_{min}}{X_{max} - X_{min}} \quad (1)$$

نمونه‌برداری میدانی و آزمایش‌های شیمیایی هستند که اغلب، پرهزینه و زمان‌بر بوده و بطور پیوسته قابل اجرا نیستند. این روش‌ها در مقیاس‌های وسیع جغرافیایی کارایی کمتری داشته و قادر به ارائه پیش‌بینی‌های فوری جهت اخذ به موقع تصمیمات و اقدامات مدیریتی نیستند (Qaderi and Babanezhad, 2017; Tian et al., 2025). از سوی دیگر، مدل‌های فیزیکی-شیمیایی نیز به دلیل پیچیدگی هیدروژئوشیمیایی آبخوان‌ها و وابستگی به پارامترهای ناشناخته، با عدم قطعیت‌های قابل توجهی مواجه‌اند (Trichakis et al., 2011; Darwishe et al., 2017; Karimanzira, 2024).

در دو دهه اخیر، مدل‌های مبتنی بر هوش مصنوعی، به ویژه شبکه‌های عصبی مصنوعی، به‌عنوان راهکاری کارآمد برای مدل‌سازی سیستم‌های غیرخطی و پیچیده مطرح شده‌اند (Banisheikholeslami and Qaderi, 2024; Ebrahimi and Qaderi, 2021; Mousavi et al., 2023). این مدل‌ها با توانایی یادگیری الگوهای پنهان در داده‌های تجربی، امکان پیش‌بینی پارامترهای کیفی آب را بدون نیاز به درک دقیق فرآیندهای فیزیکی زیرسطحی فراهم می‌کنند (Benzer and Benzer, 2018; Mahboobi et al., 2023; Salceda-Gonzalez et al., 2025).

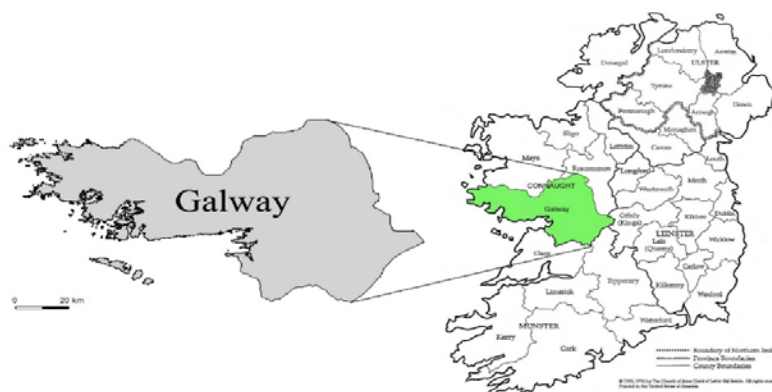
همچنین با توجه به دیگر مزایای شبکه‌های عصبی نظیر قابلیت تطبیق‌پذیری با داده‌های ناقص، مقاومت در برابر نویز و توانایی مدل‌سازی روابط غیرخطی، می‌توان نتیجه گرفت که این ابزار گزینه مناسبی برای پیش‌بینی نیترات در آب‌های زیرزمینی باشند (Benzer and Benzer, 2018; Band et al., 2020; Ostad-Ali-Askari et al., 2017; Lee et al., 2023; Salceda-Gonzalez et al., 2025).

با وجود این پیشرفت‌ها، چالش‌ها در بهینه‌سازی معماری‌های شبکه عصبی مصنوعی، انتخاب متغیرهای ورودی مناسب و تضمین تعمیم‌پذیری مدل در مناطق مختلف همچنان پابرجا هستند. بیش‌برازش، کمبود داده‌ها و نیاز به مجموعه داده‌های آموزشی گسترده از مسائل رایجی هستند که می‌توانند بر عملکرد مدل تأثیر بگذارند (Ebrahimi Ghadi et al., 2018; Karimanzira et al., 2023; Mousavi et al., 2023). پرداختن به این چالش‌ها نیازمند یک رویکرد سیستماتیک برای توسعه مدل، از جمله طراحی دقیق معماری شبکه عصبی و تحلیل حساسیت است.

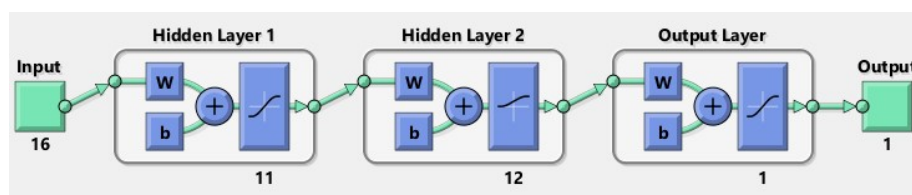
هدف اصلی این مطالعه، توسعه یک چارچوب پیش‌بینی نیترات

¹ Central Statistics Office (Ireland)

² Environmental Protection Agency, Ireland (EPA) Geoportal



شکل ۱: موقعیت جغرافیایی شهرستان گالوی (ایرلند)



شکل ۲: نمایی از یک شبکه عصبی پرسپترون سه لایه با دو لایه مخفی و یک لایه خروجی

۲-۳- معماری شبکه عصبی مصنوعی

در این قسمت ساختارهای متفاوتی از شبکه عصبی پرسپترون چند لایه مورد بررسی قرار گرفت. به بیان دیگر اینکه شبکه عصبی استفاده شده، چه تعداد لایه پنهان داشته باشد و در هر لایه، چه تعداد نرون باشد. همچنین از چه نوع توابع انتقال یا فعال‌سازی در شبکه عصبی استفاده شود.

در این تحقیق ابتدا عملکرد شبکه‌های عصبی با یک لایه پنهان ارزیابی شد و پس از چندین مرحله سعی و خطا، عملکرد شبکه‌های عصبی با دو لایه پنهان ارزیابی شد. با افزایش لایه‌های پنهان به سه لایه، نتایج تغییر محسوسی نکرد. در ادامه، ۶۰ مدل مختلف از شبکه عصبی مصنوعی مورد نظر با دو لایه پنهان و یک لایه خروجی ایجاد شد، سپس با تغییر تعداد نرون‌های هر لایه و تغییر تابع انتقال نرون‌ها، میزان تغییرات ضریب همبستگی^۱ و ریشه میانگین مربعات^۲ خطا^۲ بررسی گردید. در نهایت شبکه‌ای که دارای بیشترین مقدار ضریب همبستگی و کمترین مقدار ریشه میانگین مربعات خطا بود به عنوان شبکه با دقت بیشتر و خطای کمتر انتخاب گردید. در شکل ۲ نمایی از شبکه عصبی پرسپترون انتخاب شده با دو لایه مخفی و یک خروجی نشان داده شده است.

۲-۴- ارزیابی الگوریتم آموزش شبکه عصبی

برای انتخاب بهترین الگوریتم آموزش شبکه و همچنین مقایسه بین الگوریتم‌های مختلف ابتدا سایر پارامترهای مدل شبکه عصبی از جمله ورودی‌های شبکه، تعداد لایه‌های پنهان و تعداد نرون هر لایه ثابت نگاه داشته شد و الگوریتم آموزش مدل شبکه عصبی تغییر داده شد. با توجه به مقادیر بدست آمده برای معیارهای ارزیابی عملکرد شبکه عصبی نظیر ضریب همبستگی، میانگین خطاها، انحراف معیار خطاها و میانگین مربعات خطاها، بهترین الگوریتم آموزش انتخاب شد و از الگوریتم انتخاب شده در ادامه مدل‌سازی استفاده گردید.

۲-۵- تحلیل حساسیت

در مطالعه حاضر، تحلیل حساسیت به روش گام به گام بررسی شده است. در این روش، جهت تحلیل حساسیت شبکه عصبی به پارامترهای ورودی، در هر نوبت با حذف کردن یکی از پارامترهای ورودی مدل، معیارهای خطا و ارزیابی عملکرد شبکه عصبی محاسبه می‌شوند. افزایش یافتن خطا در اثر حذف کردن یک پارامتر و مدل‌سازی بر اساس مابقی پارامترها نشان دهنده اهمیت داشتن آن پارامتر در مدل‌سازی است. پارامتری بیشترین اهمیت را در مدل‌سازی دارد که در اثر حذف شدن آن، مدل در برآورد مقدار خروجی، بیشترین خطا را داشته باشد و بالعکس.

¹ Correlation Coefficient (R)

² Root Mean Square Error (RMSE)

جدول ۱: مشخصات معماری شبکه‌های عصبی با عملکرد بهتر در برآورد غلظت نیترات آبخوان

ردیف	نام مدل	مشخصات معماری شبکه‌های عصبی مصنوعی						معیارهای ارزیابی عملکرد	
		لایه اول		لایه دوم		لایه خروجی		ضریب	ریشه میانگین
		تابع انتقال	تعداد نرون	تابع انتقال	تعداد نرون	تابع انتقال	تعداد نرون	همبستگی	مربعات خطا
۱	ANN-11	tansig	۱۰	logsig	۱۱	tansig	۱	۰.۹۴۴۴	۱.۳۰۷۶
۱	ANN-12	tansig	۱۱	logsig	۱۲	tansig	۱	۰.۹۴۳۵	۱.۳۲۴۹
۱	ANN-14	tansig	۱۱	logsig	۱۰	tansig	۱	۰.۹۴۳۳	۱.۳۱۱۳

۶-۲- بررسی کفایت تعداد داده‌های ورودی شبکه

در بخش ۲.۲ گفته شد که داده‌های مورد استفاده در این تحقیق شامل ۴۳۶ نمونه آنالیز پارامترهای کیفی آب آبخوان گالوی است. در این تحقیق جهت بررسی کفایت تعداد داده‌های ورودی مورد استفاده به ترتیب با حذف ۱۰٪، ۲۰٪، ۳۰٪، ۴۰٪، ۵۰٪ و ... داده‌ها به صورت تصادفی، کفایت تعداد داده‌های ورودی جهت آموزش و آزمون شبکه برای مدل‌سازی غلظت نیترات بررسی گردید.

۳- نتایج و بحث

۳-۱- نتایج مربوط به معماری‌های مختلف شبکه عصبی مصنوعی

در این تحقیق، ۶۰ معماری مختلف شبکه عصبی (با تعداد نرون‌ها و توابع فعال‌سازی مختلف) جهت مدل‌سازی مقدار نیترات در آب‌های زیرزمینی بررسی شد. از بین ۶۰ شبکه عصبی بررسی شده، با توجه به معیارهای ضریب همبستگی و ریشه میانگین مربعات خطا مشخص گردید که سه شبکه دارای عملکرد بهتری می‌باشند، یعنی قادرند، مقدار نیترات آبخوان را با دقت بهتری به شرح جدول ۱ پیش‌بینی نمایند.

نتایج بدست آمده در جدول ۱ نشان می‌دهد در بررسی معماری‌های مختلف شبکه عصبی مصنوعی جهت برآورد غلظت نیترات آب زیرزمینی با استفاده از ۱۶ پارامتر کیفی دیگر آب به‌عنوان ورودی‌های شبکه، بهترین عملکرد با ضریب همبستگی ۰/۹۴ و با ریشه میانگین مربعات خطا ۱/۳، مربوط به شبکه عصبی مصنوعی پرسپترون سه لایه‌ای است که در لایه پنهان اول آن از ۱۰ نرون و تابع فعال‌سازی تنسیگ^۱ (تانژانت هیپربولیک سیگموئید) استفاده شده باشد و در لایه پنهان دوم آن از ۱۱ نرون و تابع

فعال‌سازی لوگسیگ^۲ (لگاریتم سیگموئید) استفاده گردد و تابع فعال‌سازی لایه خروجی سوم با ۱ نرون، تابع تنسیگ باشد.

۲-۳- نتایج مربوط به الگوریتم‌های آموزش

در این بخش، تاثیر نه الگوریتم مختلف آموزش، بر کیفیت آموزش شبکه عصبی انتخاب شده در مرحله قبل (ANN-11) و عملکرد آن بررسی شد. نتایج آنالیز عملکرد شبکه عصبی با هر الگوریتم آموزش، در جدول ۲ آمده است. در این مرحله، تمامی پارامترهای موثر در خروجی مدل شبکه عصبی ثابت بوده و تنها الگوریتم آموزش تغییر کرده است.

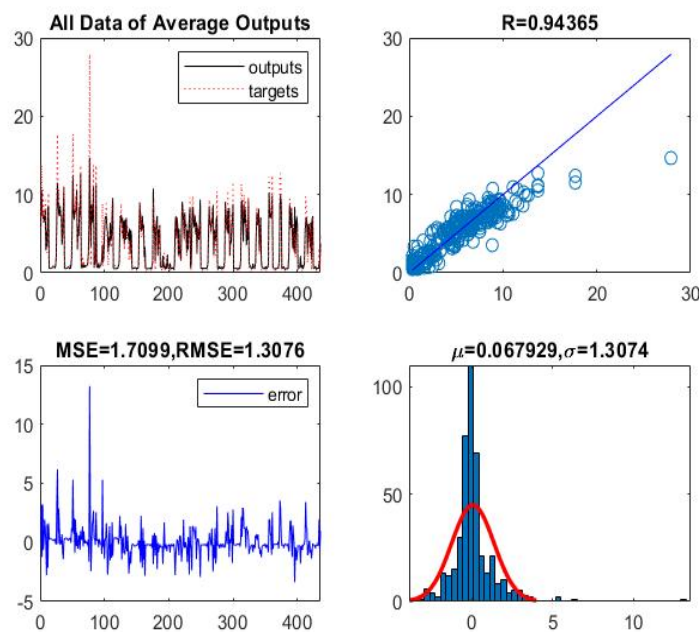
نتایج ارائه شده در جدول ۲ نشان می‌دهد ضریب همبستگی شبکه آموزش یافته با الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوات از تمامی ضرایب همبستگی شبکه آموزش یافته با سایر الگوریتم‌های آموزشی بیشتر است ($R=0.94$). همچنین ریشه میانگین مربعات خطای شبکه آموزش یافته با الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوات از تمامی ریشه‌های میانگین مربعات خطای شبکه آموزش یافته با سایر الگوریتم‌های آموزشی کمتر شده است ($RMSE=1.3076$). بنابراین مشاهده می‌شود الگوریتم لونبرگ-مارکوات دارای نتایج بهتری نسبت به دیگر الگوریتم‌های آموزشی بوده است. از نظر زمان لازم جهت انجام محاسبات الگوریتم‌های آموزش، الگوریتم لونبرگ-مارکوات با مدت زمان ۱۰۲.۷ ثانیه از میانگین زمان بدست آمده از مجموع ۹ الگوریتم موجود (۱۱۰.۷ ثانیه) زمان کمتری را بدست آورده است. در مجموع، با توجه به اهمیت بیشتر معیارهای ضریب همبستگی و ریشه میانگین مربعات خطا نسبت به زمان انجام محاسبات در تحقیق حاضر، الگوریتم لونبرگ-مارکوات به‌عنوان الگوریتم آموزشی مدل شبکه عصبی مصنوعی انتخاب گردید.

² Logsig - Log-sigmoid transfer function

¹ Tansig - Hyperbolic tangent sigmoid transfer function

جدول ۲: ارزیابی عملکرد شبکه عصبی ANN-11 با الگوریتم‌های مختلف آموزش

الگوریتم آموزش	معیارهای ارزیابی عملکرد شبکه					
	R	MSE	RMSE	Mu	Sigma	Elapsed Time (s)
LM	۰.۹۴۳۷	۱.۷۰۹۹	۱.۳۰۷۶	۰.۰۶۷۹	۱.۳۰۷۴	۱۰۲.۷
BFG	۰.۹۱۶۱	۲.۳۴۲۲	۱.۵۳۰۴	-۰.۰۱۹۱	۱.۵۳۲۰	۲۴۱.۸
RP	۰.۸۸۴۱	۳.۲۴۰۸	۱.۸۰۰۱	۰.۰۰۵۵	۱.۸۰۲۲	۳۹.۱
SCG	۰.۸۸۶۶	۳.۰۹۱۹	۱.۷۵۸۳	۰.۰۲۵۰	۱.۷۶۰۲	۴۵.۶
CGB	۰.۸۹۲۱	۲.۹۳۶۵	۱.۷۱۳۶	-۰.۰۵۴۴	۱.۷۱۴۷	۵۴.۴
CGF	۰.۸۸۳۵	۳.۱۷۰۸	۱.۷۸۰۷	-۰.۰۴۵۷	۱.۷۸۲۱	۵۹.۸
CGP	۰.۸۹۸۱	۲.۷۸۴۶	۱.۶۶۸۷	-۰.۰۴۱۶	۱.۶۷۰۱	۵۹.۴
OSS	۰.۹۰۱۴	۲.۶۹۹۴	۱.۶۴۳۰	-۰.۰۲۸۰	۱.۶۴۴۶	۱۵۳.۹
GDX	۰.۸۵۵۷	۳.۹۴۹۹	۱.۹۸۷۴	-۰.۱۳۵۴	۱.۹۸۵۱	۲۴۰.۱



شکل ۳: ارزیابی عملکرد مدل شبکه عصبی: (a) مقادیر خروجی پیش بینی شده و خروجی واقعی را برای هر نمونه (b) مقایسه مقادیر خروجی پیش بینی شده برای هر خروجی واقعی (c) مقدار خطا برای هر نمونه (d) نمودار توزیع فراوانی مقدار خطا

نتایج تحقیقات انجام شده در زمینه پیش‌بینی غلظت نیترات آب‌های زیرزمینی با استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی در جدول ۳ با یکدیگر مقایسه شده است.

شکل ۳ (a)، اختلاف بین مقدار پیش‌بینی شده مدل با مقدار پارامتر هدف (مقادیر موجود) را برای هر نمونه مورد بررسی نشان می‌دهد. در این نمودار، محور افقی نشان‌دهنده تعداد نمونه‌های ورودی است (۴۳۶ نمونه) و محور قائم نشان‌دهنده غلظت نیترات در نمونه مربوطه است.

در ادامه نتایج خروجی شبکه عصبی مصنوعی ANN-11 آموزش یافته با الگوریتم لونیگ مارکوات جهت پیش‌بینی مقدار نیترات آب زیرزمینی در شکل ۳ نشان داده شده است. در این حالت، ضریب همبستگی برابر با ۰.۹۴۳۷ و جذر میانگین مربعات برابر با ۱.۳ بدست آمده که نشان می‌دهد شبکه عصبی مصنوعی ANN-11 با الگوریتم لونیگ مارکوات قادر به پیش‌بینی مقدار نیترات با دقت بالایی می‌باشد. جهت درک میزان دقت بدست آمده در پیش‌بینی مقدار نیترات از این شبکه عصبی مصنوعی، دقت

شکل ۳ (b)، نمایش دیگری از همبستگی بین مقادیر پیش‌بینی شده توسط مدل و مقادیر واقعی اندازه‌گیری شده در محیط است. محور افقی نشان‌دهنده مقادیر واقعی اندازه‌گیری شده و محور قائم نشان‌دهنده مقادیر پیش‌بینی شده توسط مدل می‌باشد. خط با زاویه ۴۵ درجه، مبین ضریب همبستگی کامل ($R=1$) بین مقادیر پیش‌بینی شده و مقادیر واقعی اندازه‌گیری شده است. هر دایره توخالی در واقع مقدار پیش‌بینی شده توسط مدل (روی محور قائم) را به ازای مقدار واقعی اندازه‌گیری شده (روی محور افقی) نشان می‌دهد. پراکندگی کمتر دایره‌ها حول خط با زاویه ۴۵ درجه، مبین همبستگی قابل قبول بین مقادیر پیش‌بینی شده توسط مدل و مقادیر واقعی اندازه‌گیری شده در محیط است.

شکل ۳ (c)، میزان خطای محاسباتی شبکه را برای هر یک از نمونه‌ها نشان می‌دهد، به طوری که نمونه‌های با خطای کمتر، به خط افقی با مقدار خطای صفر نزدیکتر بوده و نمونه‌هایی که دارای خطای بیشتر می‌باشند، فاصله بیشتری از این خط دارند. مقدار ضرایب MSE و RMSE نیز در بالای این تصویر نمایش داده شده است.

شکل ۳ (d)، نمودار توزیع فراوانی مقدار خطا را نشان می‌دهد. در این تصویر، μ میانگین خطاها و σ انحراف معیار خطاها نیز نشان داده شده است. هر چه فراوانی نمونه‌ها در نقطه صفر بیشتر باشد، نشان‌دهنده خطای کمتر شبکه می‌باشد.

جدول ۳: مقایسه دقت نتایج تحقیقات مختلف در پیش‌بینی غلظت نیترات آب‌های زیرزمینی

محل آبخوان	ورودی های شبکه عصبی	RMSE	R ²	منبع تحقیق
آبخوان اراک - ایران	TH و Ca ²⁺ , HCO ₃ ⁻¹ , Na ¹⁺ , Cl ⁻¹ , Mg ²⁺ , EC, pH	۱۰.۴۶	۰.۸۷	Zare et al., 2011
آبخوان غزه - فلسطین	بار نیتروژن، تراکم مسکن در شعاع ۵۰۰ متری اطراف چاه‌ها، عمق چاه، دبی چاه و میزان نفوذ.	۸.۴۳	۰.۹۸	Al-Mahallawi et al, 2012
آب‌های زیرزمینی اصفهان - ایران	EC, Mg ²⁺ , HCO ₃ ⁻¹ , Ca ²⁺ و سختی	۱.۱۷	۰.۹۳	Mousavi and Amiri, 2012
آب‌های زیرزمینی بابل - ایران	هیدروژن‌تولوژی، محتوای نیتروژن خاک، ماده آلی خاک و محتوای کربن خاک	۰.۵۰	۰.۷۲	Ehteshami et al, 2016
حوزه آبخیز یشیل‌ایرماق - ترکیه	چاه نمونه برداری - ماه نمونه برداری - نوع ایستگاه نمونه برداری	۱۴.۸۵	۰.۹۱	Benzer and Benzer, 2018
تمامی آبخوان‌های آلمان	وضعیت اکسیداسیون و احیاء آب‌های زیرزمینی، واحدهای هیدروژن‌تولوژیکی، درصد زمین‌های قابل کشت، غلظت بالقوه نیترات در آب نفوذی به زمین، میانگین نیتروژن مازاد محاسبه شده، درصد پوشش جنگلی	۲۰.۹۰	۰.۵۱	Knoll et al., 2020
حوزه آبخیز مرودشت - ایران	ارتفاع، شیب، انحنای سطح، انحنای پروفیل، بارندگی، عمق پیزومتري، فاصله از رودخانه، فاصله از مناطق مسکونی، سدیم، پتاسیم و شاخص رطوبت توپوگرافی	۴.۲۴	۰.۸۹	Band et al, 2020
دشت کوپایدان - یونان	pH، رسانایی الکتریکی، دمای آب، دمای هوا و سطح آبخوان، درصد کاربری‌های مختلف زمین در شعاع ۱۰۰۰ متری از هر چاه	۱۵.۹۵	۰.۷۰ = NSE	Stylianoudaki et al, 2022
آبخوان بادن - وورتمبرگ - آلمان	خصوصیات هیدروژن‌تولوژیکی بالای آبخوان، نوع خاک، نرخ نفوذ در خاک، طبقه پوشش خاک، ژئولوژی سطح خاک، مناطق هیدروژن‌تولوژیکی، پوشش زمین، محتوای مواد آلی خاک، انواع فعالیت‌های کشاورزی، شاخص ماهواره‌ای پوشش گیاهی زمین، فاصله از آب‌های سطحی،	۱۲.۹۸	۰.۴۳	Karimanzira et al., 2023
حوزه آبخیز نانسان - کره جنوبی	EC, pH, دمای آب، DO و پتانسیل اکسایش-کاهش، سنگ‌شناسی، پوشش زمین و خواص هیدروژن‌تولوژیکی، نوع آبخوان و زهکشی خاک،	۲.۸	۰.۸۰	Lee et al., 2023
آبخوان گالوی - اسپانیا	EC, TOC, DO, pH, دما، پتانسیل اکسایش-کاهش، کلیفرم‌های مدفوعی، قلیانیت، کدورت، آمونیوم، فسفر کل، فسفر واکنش‌پذیر با مولبیدات، سیلیس، کلراید، فلوراید و سولفات	۱.۳	۰.۹۴	تحقیق حاضر

۳-۳- آنالیز حساسیت شبکه عصبی مصنوعی

نتایج تحلیل حساسیت شبکه عصبی مصنوعی ANN-11 نسبت به حذف هر یک از پارامترهای ورودی شبکه در جدول ۴ ارائه شده است. در هر یک از ردیف‌های این جدول، هر اندازه که مقدار ریشه میانگین مربعات خطا بزرگتر باشد و یا مقدار ضریب همبستگی کوچکتر باشد، مبین آن است که با حذف پارامتر ورودی مربوط به آن ردیف، عملکرد مدل شبکه عصبی بیشتر تحت تاثیر منفی قرار گرفته است. به بیان دیگر نقش پارامتر ورودی مربوط به آن ردیف، در برآورد صحیح مقدار غلظت نیترات بیشتر بوده است. بر این اساس با توجه نتایج ارائه شده در جدول ۴، بیشترین تاثیر پارامترهای ورودی شبکه تخمین گر غلظت نیترات به ترتیب مربوط به فلوراید، سیلیس، کلراید، فسفر کل، کدورت، فسفر واکنش پذیر با مولیبدات و سولفات بوده است.

البته از آنجا که در جدول ۴، اختلاف زیادی بین مقادیر ریشه‌های میانگین مربعات خطا و یا مقادیر ضرایب همبستگی مشاهده نمی‌گردد، می‌توان دریافت با حذف هیچیک از ورودی‌های شبکه به تنهایی، تاثیر قابل توجهی در عملکرد شبکه جهت تخمین غلظت نیترات بوجود نخواهد آمد.

۳-۴- نتایج مربوط به بررسی کفایت تعداد داده‌های ورودی شبکه

نتایج حاصل از حذف ۱۰٪، ۲۰٪، ۳۰٪، ۴۰٪، ۵۰٪ و ۶۰٪ از تعداد داده‌های آموزش و آزمون شبکه در جدول ۵ ارائه شده است.

با توجه به نتایج ارائه شده در جدول ۵، مشخص گردید با حذف داده‌ها تا میزان ۵۰٪ تعداد داده‌های اولیه، تغییر محسوسی در دقت نتایج خروجی حاصل نشد. اما با حذف ۶۰٪ داده‌ها با توجه به معیارهای ضریب همبستگی و ریشه میانگین مربعات خطا، دقت پیش‌بینی شبکه عصبی کمتر شد به طوری که با حذف ۶۰٪ داده‌های ورودی، ضریب همبستگی در حدود ۹٪ کاهش یافت و ریشه میانگین مربعات خطا نیز در حدود ۸۲٪ افزایش یافت (نامناسب‌تر شد). پس مشاهده شد با کاهش تعداد داده‌های آموزش و آزمون شبکه تا ۵۰ درصد، نتایج خروجی شبکه مورد نظر تغییر محسوسی نداشته و نشان دهنده کارایی مدل شبکه عصبی با تعداد داده‌های کمتر و همچنین کفایت داده‌های مورد استفاده می‌باشد.

از آنجا که در تحقیق حاضر از ۴۳۶ نمونه جهت آموزش و آزمون شبکه عصبی پرسپترون برای پیش‌بینی مقدار نیترات آب زیرزمینی با استفاده از مقادیر دیگر پارامترهای شیمیایی کیفی آب استفاده شد، می‌توان نتیجه‌گیری نمود که ۵۰٪ از ۴۳۶ نمونه، یعنی حدود ۲۲۰ نمونه هم برای مدل‌سازی غلظت نیترات با شبکه عصبی پرسپترون کافی خواهد بود که توجه به این نتیجه باعث کاهش زمان و هزینه‌های آزمایشگاهی مورد نیاز خواهد شد.

جدول ۴: نتایج حاصل از آنالیز حساسیت مدل شبکه عصبی نسبت به حذف هر یک از پارامترهای ورودی

ردیف	پارامتر حذف شده	RMSE	R
۱	پ.هاش	۱.۴۳۹۶	۰.۹۲۹۵
۲	درجه حرارت	۱.۴۰۴۰	۰.۹۳۳۱
۳	اکسیژن محلول	۱.۴۵۲۱	۰.۹۳۰۸
۴	رسانایی	۱.۴۲۰۶	۰.۹۳۵۹
۵	پتانسیل اکسیداسیون و احیاء	۱.۴۰۷۴	۰.۹۳۱۶
۶	کلیفرم های مدفوع قلیایی	۱.۳۸۲۰	۰.۹۳۷۸
۷	قلیائیت	۱.۴۳۳۹	۰.۹۳۳۴
۸	کدورت	۱.۵۲۲۷	۰.۹۲۷۲
۹	آمونیم	۱.۴۵۲۶	۰.۹۲۹۸
۱۰	فسفر کل	۱.۵۲۱۵	۰.۹۲۱۵
۱۱	فسفر واکنشی مولیبدیت	۱.۵۱۵۷	۰.۹۱۹۸
۱۲	کل کربن آلی	۱.۴۹۸۴	۰.۹۲۵۱
۱۳	سیلیس	۱.۶۱۴۹	۰.۹۰۹۹
۱۴	کلرید	۱.۵۹۷۹	۰.۹۱۸۲
۱۵	فلوراید	۱.۶۴۱۳	۰.۹۰۵۹
۱۶	سولفات	۱.۵۱۶۷	۰.۹۲۲۰

جدول ۵: مقایسه معیارهای ارزیابی عملکرد شبکه در صورت کاهش تعداد داده‌های آموزش و آزمون شبکه

ردیف	درصد داده حذف شده در آموزش و آزمون شبکه	RMSE	R
۱	۰٪	۱.۳۰۷۶	۰.۹۴۳۷
۲	۱۰٪	۱.۳۸۷۱	۰.۹۳۴۱
۳	۲۰٪	۱.۴۰۲	۰.۹۳۷۴
۴	۳۰٪	۱.۴۵۴۷	۰.۹۳۷۱
۵	۴۰٪	۱.۵۰۵۲	۰.۹۳۹۱
۶	۵۰٪	۱.۸۰۴۷	۰.۹۱۴۷
۷	۶۰٪	۲.۳۸۲۰	۰.۸۶۲۳
۸	۷۰٪	۳.۱۴۵۱	۰.۶۹۴۶

۴- نتیجه گیری

حساسیت نشان داد با حذف هیچیک از ورودی‌های شبکه به تنهایی، اثر قابل توجهی در عملکرد شبکه جهت پیش‌بینی غلظت نیترات وجود نخواهد آمد. همچنین برای دستیابی به یک مدل شبکه عصبی جهت تخمین مناسب نیترات آب‌های زیرزمینی حداقل به ۲۲۰ نمونه اندازه‌گیری مستقیم از مقدار نیترات آب زیرزمینی (به عنوان هدف) نیاز هست تا بتوان به دقت مطلوبی جهت برآورد غلظت نیترات رسید.

می‌توان غلظت نیترات در آب‌های زیرزمینی را بر اساس دیگر پارامترهای شیمیایی کیفیت آب که معمولاً اندازه‌گیری و گزارش می‌شود، پیش‌بینی نمود. با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی پرسپترون سه لایه به عنوان یکی از رایج‌ترین شبکه‌های عصبی مصنوعی می‌توان نیترات آب‌های زیرزمینی را با الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوات با دقت خوبی برآورد نمود. نتایج آنالیز

References

- Alizadeh, M., Noori, R., Omidvar, B., Nohegar, A. and Pistre, S., 2024. Human health risk of nitrate in groundwater of Tehran-Karaj plain, Iran. *Scientific Reports*, 14(1), p.7830. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-58290-6>
- Al-Mahallawi, K., Mania, J., Hani, A. and Shahrour, I., 2012. Using of neural networks for the prediction of nitrate groundwater contamination in rural and agricultural areas. *Environmental Earth Sciences*, 65(3), pp.917-928. <https://doi.org/10.1007/s12665-011-1134-5>
- Band, S.S., Janizadeh, S., Pal, S.C., Chowdhuri, I., Siabi, Z., Norouzi, A., Melesse, A.M., Shokri, M. and Mosavi, A., 2020. Comparative analysis of artificial intelligence models for accurate estimation of groundwater nitrate concentration. *Sensors*, 20(20), p.5763. <https://doi.org/10.3390/s20205763>
- Banisheikholeslami, A. and Qaderi, F., 2024. A novel machine learning framework for predicting biogas desulfurization breakthrough curves in a fixed bed adsorption column. *Bioresource Technology Reports*, 25, p.101702. <https://doi.org/10.1016/j.biteb.2023.101702>
- Benzer, S. and Benzer, R., 2018. Modelling nitrate prediction of groundwater and surface water using artificial neural networks. *Politeknik Dergisi*, 21(2), pp.321-325. <https://doi.org/10.2339/politeknik.385434>
- Darwishe, H., Khattabi, J.E., Chaaban, F., Louche, B., Masson, E. and Carlier, E., 2017. Prediction and control of nitrate concentrations in groundwater by implementing a model based on GIS and artificial neural networks (ANN). *Environmental earth sciences*, 76(19), p.649. <https://doi.org/10.1007/s12665-017-6990-1>
- Ebrahimi Ghadi, M., Qaderi, F. and Babanezhad, E., 2019. Prediction of mortality resulted from NO₂ concentration in Tehran by Air Q+ software and artificial neural network. *International Journal of Environmental Science and Technology*, 16, pp.1351-1368. <https://doi.org/10.1007/s13762-018-1818-4>
- Ebrahimi, M. and Qaderi, F., 2021. Determination of the most effective control methods of SO₂ pollution in Tehran based on adaptive neuro-fuzzy inference system. *Chemosphere*, 263, p.128002. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2020.128002>
- Ehteshami, M., Farahani, N.D. and Tavassoli, S., 2016. Simulation of nitrate contamination in groundwater using artificial neural networks. *Modeling Earth Systems and Environment*, 2(1), p.28. <https://doi.org/10.1007/s40808-016-0080-3>
- Grout, L., Chambers, T., Hales, S., Prickett, M., Baker, M.G. and Wilson, N., 2023. The potential human health hazard of nitrates in drinking water: a media discourse analysis in a high-income country. *Environmental health*, 22(1), p.9. <https://doi.org/10.1186/s12940-023-00960-5>
- Karimanzira, D., Weis, J., Wunsch, A., Ritzau, L., Liesch, T. and Ohmer, M., 2023. Application of machine learning and deep neural networks for spatial prediction of groundwater nitrate concentration to improve land use management practices. *Frontiers in Water*, 5, p.1193142. <https://doi.org/10.3389/frwa.2023.1193142>
- Karimanzira, D., 2024. Probabilistic Uncertainty Consideration in Regionalization and Prediction of Groundwater Nitrate Concentration. *Knowledge*, 4(4), pp.462-480. <https://doi.org/10.3390/knowledge4040025>
- Lee, J.M., Ko, K.S. and Yoo, K., 2023. A machine learning-based approach to predict groundwater nitrate susceptibility using field measurements and hydrogeological variables in the Nonsan Stream Watershed, South Korea. *Applied Water Science*, 13(12), p.242. <https://doi.org/10.1007/s13201-023-02043-9>
- Maghrebi, M., Noori, R., Partani, S., Araghi, A., Barati, R., Farnoush, H. and Torabi Haghighi, A., 2021. Iran's groundwater hydrochemistry. *Earth and Space Science*, 8(8), p.e2021EA001793. <https://doi.org/10.1029/2021EA001793>
- Mahboobi, H., Shakiba, A. and Mirbagheri, B., 2023. Improving groundwater nitrate concentration prediction using local ensemble of machine learning models. *Journal of Environmental Management*, 345, p.118782.

- <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2023.118782>
- Mousavi, S.F. and Amiri, M.J., 2012. Modelling Nitrate Concentration of Groundwater Using Adaptive Neural-Based Fuzzy Inference System. *Soil & Water Research*, 7(2).
- Mousavi, M., Qaderi, F. and Ahmadi, A., 2023. Spatial prediction of temporary and permanent hardness concentrations in groundwater based on chemistry parameters by artificial intelligence. *International Journal of Environmental Science and Technology*, 20(6), pp.6665-6684. <https://doi.org/10.1007/s13762-023-04934-5>
- Noori, R., Hooshyaripor, F., Javadi, S., Dodangeh, M., Tian, F., Adamowski, J.F., Berndtsson, R., Baghvand, A. and Klöve, B., 2020. PODMT3DMS-Tool: proper orthogonal decomposition linked to the MT3DMS model for nitrate simulation in aquifers. *Hydrogeology Journal*, 28(3). <https://doi.org/10.1007/s10040-020-02114-0>
- Ostad-Ali-Askari, K., Shayannejad, M. and Ghorbanizadeh-Kharazi, H., 2017. Artificial neural network for modeling nitrate pollution of groundwater in marginal area of Zayandeh-rood River, Isfahan, Iran. *KSCE Journal of Civil Engineering*, 21(1), pp.134-140. <https://doi.org/10.1007/s12205-016-0572-8>
- Qaderi, F. and Babanezhad, E., 2017. Prediction of the groundwater remediation costs for drinking use based on quality of water resource, using artificial neural network. *Journal of Cleaner Production*, 161, pp.840-849. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2017.05.187>
- Salceda-Gonzalez, M., Udawatta, R.P. and Appold, M.S., 2025. Groundwater Nitrate-Nitrite Modeling in a Grazed Hillslope with Agroforestry and Grass Buffers. *Water*, 17(5), p.608. <https://doi.org/10.3390/w17050608>
- Stylianoudaki, C., Trichakis, I. and Karatzas, G.P., 2022. Modeling groundwater nitrate contamination using artificial neural networks. *Water*, 14(7), p.1173. <https://doi.org/10.3390/w14071173>
- Tian, D., Zhao, X., Gao, L., Jiang, T., Liang, Z., Yang, Z., Zhang, P., Wu, Q., Ren, K., Yang, C. and Li, R., 2025. A framework for tracing the sources of nitrate in surface water through remote sensing data coupled with machine learning. *npj Clean Water*, 8(1), pp.1-13. <https://doi.org/10.1038/s41545-025-00473-3>
- Trichakis, I.C., Nikolos, I.K. and Karatzas, G.P., 2011. Artificial neural network (ANN) based modeling for karstic groundwater level simulation. *Water Resources Management*, 25, pp.1143-1152. <https://doi.org/10.1007/s11269-010-9628-6>