

# Pembinaan Penderia pH Gentian Optik Pintar Berasaskan Reagen Terpegun dan Rangkaian Neural Tiruan (ANN)

*Faiz Bukhari Mohd Suah*

*Musa Ahmad*

*Abdul Mutalib Md Jani*

*Mohd Nasir Taib*

*Penderia pH gentian optik berasaskan reagen terpegun dan pengoptimuman rangsangannya menggunakan rangkaian neural tiruan (artificial neural network, ANN) telah dibangunkan dalam kajian ini. Penunjuk pH iaitu bromotimol biru (BTB) telah dipilih sebagai reagen. Reagen ini telah dipegunkan di atas kopolimer Amberlite XAD 7 dengan kaedah jerapan. Teknik spektroskopi pantulan digunakan untuk pencirian reagen yang terpegun di atas Amberlite XAD 7. Penggunaan ANN dalam pengoptimuman rangsangan penderia pH gentian optik berasaskan reagen yang dipegunkan di atas Amberlite XAD 7 ini telah berjaya melebarkan julat rangsangan linear penderia dari julat yang terhad (pH 6.00-8.00 bagi BTB) kepada julat yang lebih baik iaitu pH 2.00-11.50. Pengoptimuman rangsangan penunjuk pH ini tidak dapat dilakukan untuk keseluruhan julat pH 1.00-14.00 kerana masalah pelunturan kimia terhadap reagen yang dipegunkan. Ralat purata bagi penentuan pH bagi larutan yang tidak diketahui adalah 0.03 unit pH untuk BTB terpegun pada Amberlite XAD 7.*

## Pengenalan

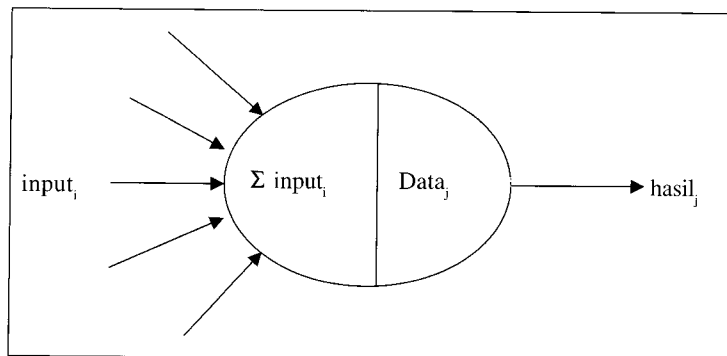
Sehingga kini, penderia kimia merupakan bidang penyelidikan yang menarik minat ramai para penyelidik kerana penggunaannya yang meluas di dalam pelbagai bidang. Bidang-bidang seperti perubatan, kawalan proses industri, kejuruteraan, analisis kimia dan pemantauan alam sekitar merupakan di antara bidang-bidang yang memerlukan penderia kimia untuk menjalankan operasinya. Sebenarnya penderia adalah alat yang menukarkan isyarat parameter kimia atau fizikal kepada isyarat elektrik atau isyarat optik (Nylander 1985). Musa et al. (2000) pula menakrifkan penderia kimia umumnya merupakan alat yang bertindak secara selektif terhadap perubahan kepekatan analit tertentu dalam media persekitarannya dan berupaya merakam perubahan kepekatan ini sama ada dalam bentuk isyarat elektrik, optik dan sebagainya. Edmonds (1988) menyatakan di

antara parameter fizikal yang biasa dikaji atau dipantau adalah seperti suhu, tekanan, kesan magnetik serta kelembapan manakala parameter kimia yang menjadi pilihan untuk dikaji adalah seperti kesan kekuatan ionik, kemolaran dan kesan surfaktan.

Perkembangan yang pesat dalam teknologi gentian optik telah menyumbang kepada satu lagi teknologi baru iaitu penderia kimia gentian optik. Musa (1989) telah menakrifkan penderia kimia gentian optik sebagai satu alat yang dapat mengukur parameter optik secara berterusan dengan kebolehlungan yang tinggi. Penderia kimia jenis ini mempunyai kemampuan untuk melakukan pengesanan dalam julat penentuan yang luas merangkumi komponen organik dalam fasa tertentu, anion, kation dan gas. Perkembangan yang pesat ini telah bermula sejak dari tahun 1980-an lagi. Namun teknologi ini tidak dapat berkembang dengan pesat tanpa bantuan serta sokongan daripada teknologi lain seperti teknologi sains bahan, instrumentasi elektronik dan pemrosesan isyarat.

Di antara penderia kimia gentian optik yang mendapat perhatian dalam bidang kimia analisis ini adalah penderia pH gentian optik (Wolfbeis 2000). Kepentingan daripada pengukuran pH di dalam pelbagai kajian saintifik telah menyebabkan penderia pH gentian optik menjadi pilihan untuk digunakan secara meluas. Kebolehan dan kelebihan penderia pH gentian optik seperti bebas daripada gangguan elektrik, alatan yang kecil serta mudah alih, aplikasi untuk penderiaan jarak jauh dan pengukuran secara *in vivo* telah menambahkan lagi cara pengukuran nilai pH selain daripada kaedah konvensional menggunakan elektrod kaca.

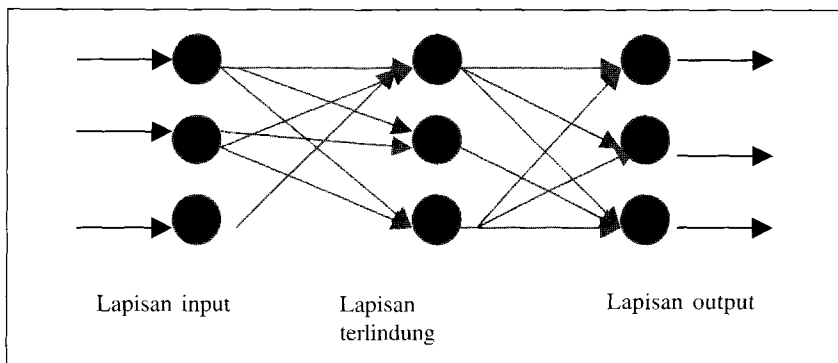
ANN adalah satu model matematik yang berasaskan kepada sistem neuron manusia. Wasserman (1989) telah menakrifkan ANN sebagai satu sistem komputer yang dibina oleh sebilangan elemen pemrosesan (juga dikenali sebagai neuron) yang bersambungan antara satu sama lain dan memproses maklumat dengan keadaan dinamikanya bergantung kepada rangsangan input masukan. Neuron tiruan yang merupakan unit asas kepada jaringan ini ditunjukkan di dalam Rajah 1.



Rajah 1 : Struktur Satu Neuron Tiruan

## *Pembinaan Penderita pH Gentian Optik Pintar Berasaskan Reagen Terpegun dan Rangkaian Neural Tiruan (ANN)*

Jaringan ANN berupaya untuk meniru dan melakukan tugas yang kompleks seperti yang dijalankan oleh otak manusia. Ia berupaya untuk mengingati sesuatu dan mampu digunakan untuk pencaman corak, penentuan data, pengelasan data dan pemprosesan isyarat (Swerdlow 1995). Model tiruan ini adalah jauh lebih ringkas jika dibandingkan dengan neuron otak manusia yang mempunyai 13 trilion neuron sedangkan ANN hanya terdiri daripada jaringan beberapa neuron sahaja. Secara amnya struktur ANN terdiri daripada beberapa lapisan neuron. Model ringkas ANN ditunjukkan dalam Rajah 1.6. Model ini mempunyai lapisan input yang berfungsi menerima input, lapisan terlindung yang memproses input dan lapisan output yang berfungsi untuk mengeluarkan isyarat yang terhasil.



Rajah 2: Struktur Ringkas ANN dengan Arkitektur Tiga Lapis

Setiap neuron dalam jaringan bersambungan dengan neuron jirannya dan mempunyai koefisien sambungan yang tinggi (Kateman 1993). Setiap sambungan neuron mempunyai pemberat tersendiri dan neuron output turut mempunyai nilai tersendiri. Apabila input diberikan kepada jaringan ANN, input ini akan dibawa melalui fungsi pemberat setiap neuron pada setiap lapisan jaringan sehingga kepada neuron output (Zupan dan Gasteiger 1991). Kemudian kesemua aktiviti pemberat ini akan dijumlahkan di setiap neuron output dan satu bacaan dikeluarkan oleh neuron output tersebut.

Dalam kajian ini, penderita pH gentian optik berasaskan reagen terpegun iaitu kopolimer XAD 7 telah dibina dengan pengoptimuman rangsangannya pula dihasilkan dengan menggunakan ANN. Selain itu, ANN juga digunakan untuk membina satu sistem pintar bagi penderita pH gentian optik yang dibina ini.

## **Eksperimen**

Bahan kimia yang digunakan dalam kajian ini digunakan terus tanpa penulenan lanjut. Air suling yang digunakan adalah air suling termyahion yang diperolehi daripada alat penyahion air (Barnstead Pure Water).

## **Penyediaan Larutan**

Bagi tujuan pemegunan penunjuk, larutan reagen penunjuk pH dipekatkan. Sebanyak 0.1 g bromotimol biru (BTB) dilarutkan dalam pelarut etanol 20% dalam keialang 5.0 ml. larutan ini kemudiannya dituras dan seterusnya disimpan dalam botol penunjuk. Larutan penimbal dari pH 1.00 sehingga 14.00 dengan selang 0.5 unit pH disediakan berdasarkan kaedah dalam buku "Chemist's Ready Reference Handbook" (Dean 1989). Semua larutan penimbal disediakan pada suhu bilik iaitu 27°C.

## **Pemegunan Reagen Penunjuk pH di atas Penyokong XAD 7**

Kopolimer XAD 7 (2.0 g) dibasuh dengan air nyahion dan etanol (10 ml) untuk memastikan ia benar-benar bersih dari bendasing dan tiada ion-ion lain terjerap pada permukaannya. Lima titis reagen penunjuk BTB dititiskan ke dalam bikar tersebut dan dikacau selama empat jam dengan pengacau magnet. Selepas pengacauan, campuran tersebut dibiarkan selama 24 jam. Akhir sekali penunjuk BTB yang telah dipegunkan di atas XAD 7 tersebut dibasuh sekali lagi dengan air nyahion bagi memastikan penunjuk yang tidak terjerap dengan kuat tertanggal daripada penyokong tersebut. Setelah dikeringkan dalam desikator, penyokong dengan reagen penunjuk terpegun disimpan di dalam botol.

## **Pencirian Reagen Penunjuk pH Terpegun di atas Penyokong XAD 7**

Reagen BTB yang terpegun di atas penyokong XAD 7 dicirikan dengan menggunakan spektrofotometer gentian optik (Ocean Optics). Penggunaan spektrofotometer gentian optik ini adalah berasaskan kepada spektroskopi pantulan bersumberkan lampu tungsten halogen. Gentian optik jenis silika pula digunakan untuk memandu cahaya pantulan daripada prob gentian optik kepada pengesan foto dan sebaliknya.

Teknik di mana reagen penunjuk pH direndam dalam larutan air nyahion untuk menyingkirkan sebarang penunjuk pH yang tidak terjerap pada penyokong XAD 7 digunakan (Alabbas et al. 1996). Prob gentian optik dicelup ke dalam larutan penimbal pH 1.00-14.00 dalam bikar 20 ml bagi mendapatkan spektrum pantulan reagen terpegun tersebut. Bacaan pH turut dipantau dengan menggunakan meter pH (Stanford model 182). Selepas setiap pengukuran pantulan pH diukur dan direkodkan, prob gentian optik tersebut dicelup ke dalam bikar yang mengandungi air nyahion sebanyak tiga kali. Prosedur ini adalah untuk memastikan prob dan reagen terpegun tersebut adalah bersih daripada larutan penimbal yang terdahulu sebelum pengukuran pantulan pH seterusnya dijalankan. Langkah ini diteruskan sehingga semua pengukuran pH selesai dijalankan. Spektrum pantulan pH dengan reagen BTB terpegun diukur pada panjang gelombang 320-1000 nm.

## **Struktur dan Latihan ANN**

Sejumlah 30 bacaan spektrum pantulan bagi pH 1.00-14.00 telah diambil dan dicatatkan. Bacaan spektrum pantulan reagen terpegun ini dibahagikan kepada tiga bahagian utama iaitu bagi tujuan melatih jaringan, mengesahkan jaringan yang telah dilatih dan akhir sekali untuk menguji jaringan yang telah dipilih tersebut sama ada ia sesuai digunakan untuk menentukan nilai pH bagi larutan penimbal yang tidak diketahui.

Sistem jaringan tiga lapisan suapan-hadapan yang mempunyai satu lapisan neuron terlindung telah digunakan dan proses latihan jaringan dilakukan dengan algoritma BP bagi tujuan memproses data. Lapisan input terdiri daripada beberapa neuron yang mewakili keamatan pantulan yang dicerap pada panjang gelombang berlainan daripada setiap spektrum. Pemilihan bilangan neuron input bagi tujuan latihan jaringan adalah berdasarkan kepada beberapa ciri penting yang terdapat pada spektrum seperti puncak maksimum, titik isobestik dan keamatan minimum (ia perlu mewakili hampir keseluruhan spektrum tersebut). Bagi lapisan neuron terlindung pula, jaringan yang mempunyai 3 hingga 17 bilangan neuron terlindung dipertimbangkan dan pemilihan bilangan neuron yang sesuai untuk jaringan yang dibina dilakukan dengan kaedah cuba jaya. Jaringan yang memberikan ralat jumlah kuasadua (sum square error, SSE) yang paling rendah setelah proses latihan turut dipertimbangkan dan digunakan bagi aplikasi terakhir. Manakala satu neuron output (mewakili nilai pH yang akan ditentukan) digunakan dalam tujuan latihan jaringan ini.

Latihan dan simulasi jaringan dilakukan menggunakan program Matlab 5.4 (Demuth & Beale 1998) yang dijalankan di bawah pemproses Intel Pentium (IV) yang mengandungi 132 MB RAM. Fungsi sigmoid yang digunakan bagi mengaktifkan neuron terlindung adalah seperti yang telah dicadangkan oleh Taib dan Narayanaswamy (1997). Manakala parameter yang digunakan bagi tujuan latihan jaringan telah ditetapkan seperti ditunjukkan dalam Jadual 1.

Jadual 1: Parameter yang digunakan dalam Proses Latihan Jaringan

Parameter	Nilai
Bilangan ulangan latihan maksimum	40,000 dan 100,000
Ralat jumlah kuasadua (SSE) sasaran	0.02
Kadar latihan jaringan	0.01
Had bagi pemberat	- 0.1, +0.1

Proses latihan dan pengoptimuman jaringan dilakukan dengan melatih jaringan sehingga 40,000 ulangan dan perkembangan SSE di antara output yang diramal oleh ANN dan yang diukur direkodkan. Pemilihan jaringan yang terbaik adalah berdasarkan kepada beberapa siri ujian termasuklah nilai SSE terendah.

kesan penambahan ulangan latihan kepada jaringan dengan meningkatkan bilangan ulangan kepada 100,000 ulangan, pemeriksaan terhadap ralat proses menentusah dan ralat ujian jaringan dengan data daripada spektrum yang tidak diketahui.

Jaringan yang terpilih kemudiannya digunakan bagi tujuan aplikasi simulasi di mana pengukuran spektrum baru diambil, diproses, dibandingkan dengan data dari latihan ANN dan ditukar secara terus kepada nilai pH. Simulasi ini turut dilakukannya dengan menggunakan program Matlab.

## **Keputusan dan Perbincangan**

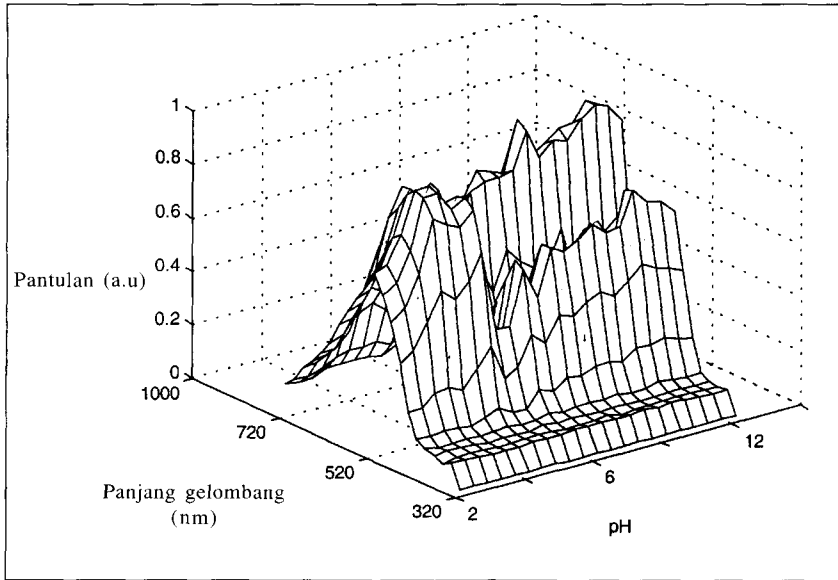
Dalam kajian ini, penunjuk pH BTB dipegunkan di atas penyokong kopolimer XAD 7. Pegungan reagen dilakukan secara jerapan kimia yang melibatkan interaksi hidrofobik. Penunjuk yang terpegun di atas penyokong XAD 7 ini seterusnya digunakan sebagai fasa penerima dalam cadangan pembinaan penerima kimia berasaskan gentian optik yang boleh digunakan untuk pengesanan pH.

Penjerapan fizikal penunjuk BTB di atas penyokong matrik XAD 7 merupakan langkah terpenting dalam pembinaan penerima pH gentian optik. Fry dan Bobbitt (2001) menyatakan bahawa hampir semua penerima pH gentian optik yang dibina sejak dari tahun 1980-an menggunakan teknik pegungan yang tertentu untuk penyokong XAD 7. Pada masa yang sama, penunjuk BTB yang digunakan adalah berbalik secara kimia (Alabbas et al. 1996) dan ia merupakan salah satu daripada faktor utama pemilihan penunjuk yang hendak digunakan dalam kajian ini.

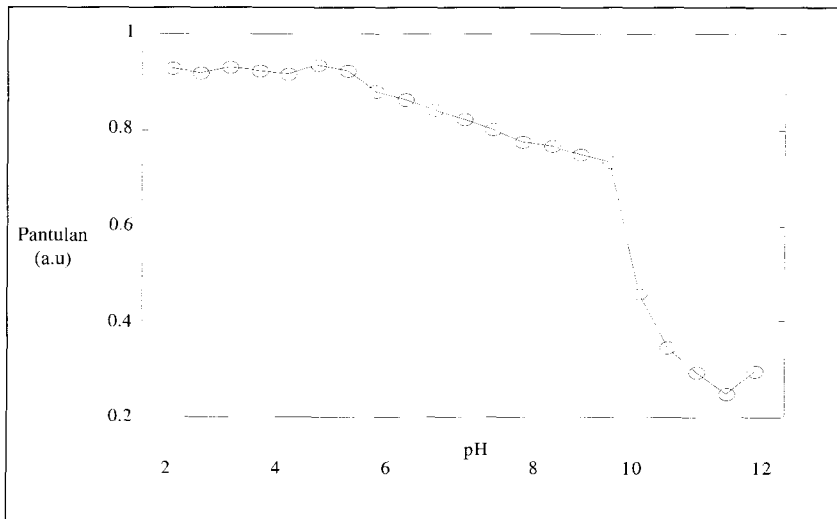
Rajah 3 menunjukkan graf 3D spektrum pantulan penerima pH gentian optik berasaskan reagen BTB terpegun di atas penyokong XAD 7 pada nilai pH yang berlainan. Spektrum pantulan pada pH 1.00-2.00 dan 12.00-14.00 tidak dapat dicerap kerana penunjuk BTB terpegun mengalami masalah kelunturan kimia pada julat pH tersebut, yang menyebabkan proses pengukuran pH dengan menggunakan prob ini tidak dapat dilakukan. Pada medium berasid, hanya satu puncak keamatan sahaja yang dicerap iaitu pada panjang gelombang 600-800 nm dan julat pH 2.00-5.50. Puncak keamatan pantulan ini ditunjukkan dengan jelas oleh perbezaan kontur yang dapat diperhatikan dalam rajah ini. Apabila pH meningkat, puncak keamatan pantulan tunggal ini berpecah di atas dua puncak utama dalam julat pH 6.00-12.00 tetapi masih berada dalam julat panjang gelombang yang sama iaitu 600-800 nm. Apabila prob dicelupkan ke dalam larutan berbes, perubahan warna dapat diperhatikan dengan jelas iaitu daripada warna kuning kepada biru gelap pada julat pH 6.00-7.50. Perubahan warna yang dicerap ini adalah menyamai perubahan warna yang diperolehi apabila larutan BTB digunakan untuk penentuan pH di mana perubahan keamatan serapan berlaku pada julat pH 6.00-7.50 (Musa et al. 2001).

Keamatan pantulan maksimum reagen BTB terpegun berlaku pada panjang gelombang 700 nm (Rajah 4). Apabila spektrum pantulan BTB terpegun

*Pembinaan Penderia pH Gentian Optik Pintar Berasaskan Reagen Terpegun dan Rangkaian Neural Tiruan (ANN)*



Rajah 3: Spektrum Keamatan Pantulan 3D untuk Penunjuk BTB Terpegun di atas Penyokong XAD 7 pada pH 2.00-12.00



Rajah 4: Rangsangan Penunjuk BTB Terpegun pada Nilai pH yang Berbeza Sebelum Dilatih dengan ANN. Isyarat Pantulan Diukur pada Panjang Gelombang 700 nm

dibandingkan dengan keamatan serapan BTB dalam larutan (Musa et al. 2001), dapat diperhatikan bahawa keamatan serapan BTB dalam larutan berlaku pada panjang gelombang 616.0 nm manakala keamatan pantulan maksimum penunjuk BTB yang terpegun berlaku pada panjang gelombang 700 nm dengan keamatan yang lebih rendah. Perubahan keamatan pantulan ini dikaitkan dengan perubahan yang berlaku di atas struktur pengikatan kimia penunjuk BTB yang terpegun di atas XAD 7 yang mengalami proses penceraian molekul penunjuk (Moreno et al. 1990). Pemerhatian dan perubahan dalam pemegungan penunjuk BTB di atas penyokong siri Amberlite XAD 2 juga pernah dicerap oleh Andres dan Sevilla (1991).

Pada panjang gelombang 700 nm, bacaan keamatan pantulan berubah apabila nilai pH berubah seperti ditunjukkan dalam Rajah 4. Namun, julat linear pH yang diperolehi masih lagi terhad iaitu hanya pada julat pH 5.00-8.00. Hasil yang diperolehi ini menepati dengan julat perubahan BTB dalam larutan iaitu 6.00-7.60 yang dilaporkan oleh Musa et al. (2001). Manakala bagi julat pH 9.00-12.00 pula, bacaan keamatan pantulan menurun dengan drastik sekali. Perkara ini mungkin menerangkan kesan pelunturan penunjuk pH BTB yang terpegun di atas XAD 7. Rajah 3 dan 4 menunjukkan ciri ketidaklinearan yang tinggi dalam rangsangan penerima pH gentian optik ini. Oleh itu, ANN telah dipilih dalam kajian ini untuk digunakan bagi memproses isyarat rangsangan input-output penerima berdasarkan di atas kemampuannya untuk membina model perkaitan di antara data yang tidak linear dalam bidang kimia analisis (Blank & Brown 1993).

### **Pengoptimuman Julat Rangsangan Penerima pH Berasaskan Penunjuk BTB Terpegun dengan Menggunakan ANN**

Sejumlah 28 data spektrum pengukuran diambil bacaannya di antara julat pH 2.00-12.00 dan digunakan sebagai data untuk memproses isyarat penerima ini. Rangsangan daripada setiap pH digunakan sebagai data input di atas jaringan yang akan dibina. Parameter latihan ANN yang digunakan adalah sama seperti yang telah digunakan sebelum ini (Faiz et al. 2001 & Musa et al. 2001). Walaupun spektrum pantulan penunjuk terpegun BTB direkodkan di antara panjang gelombang 320-1000 nm, hanya sembilan panjang gelombang sahaja i.e 600, 625, 650, 675, 700, 725, 750, 775 dan 800 nm dipilih sebagai data input di atas jaringan yang hendak dibina. Panjang gelombang ini dipilih kerana variasi ketara terhadap nilai rangsangan penerima berlaku dalam julat panjang gelombang 600-800 nm. Selain itu, rangsangan penerima pada panjang gelombang terpilih ini turut mewakili hampir keseluruhan spektrum sebenar rangsangan penerima pH ini.

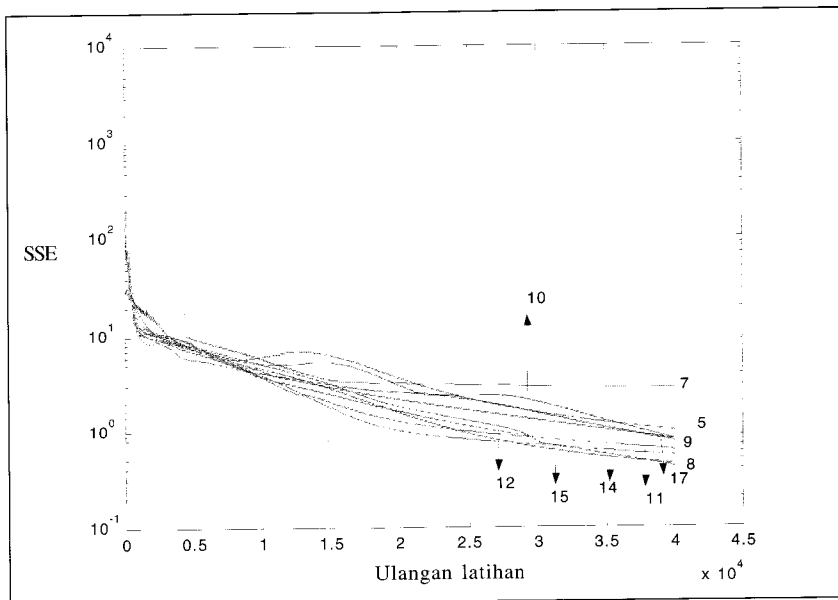
Sampel data yang terpilih kemudiannya dibahagikan kepada tiga bahagian secara rawak iaitu untuk tujuan latihan jaringan (19 data), kalibrasi (5 data) dan untuk penentuan larutan penimbal yang tidak diketahui menggunakan jaringan terlatih (4 data). Data bagi tujuan latihan jaringan merangkumi pengukuran pH dalam julat pH 2.00-11.50 iaitu terdiri daripada data spektrum yang direkodkan



*Pembinaan Penderia pH Gentian Optik Pintar Berasaskan Reagen Terpegun dan Rangkaian Neural Tiruan (ANN)*

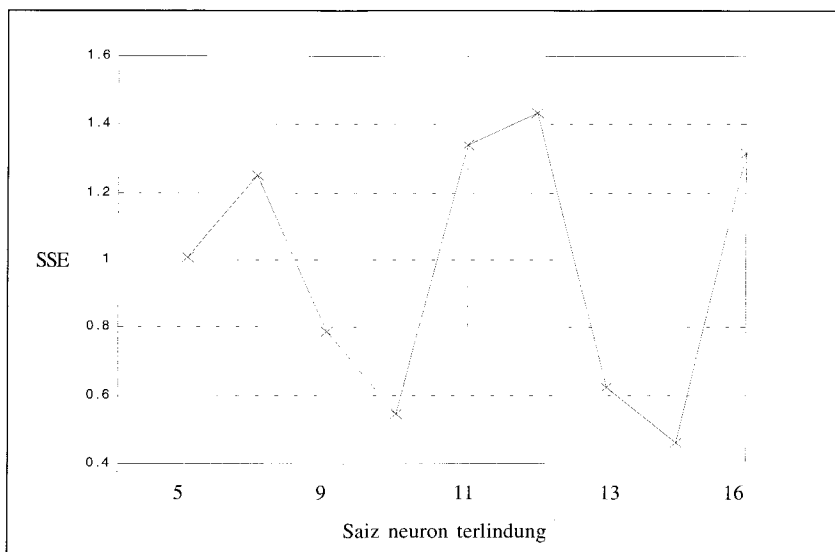
pada nilai pH: 2.00, 2.50, 3.00, 3.50, 4.50, 5.00, 5.50, 6.00, 6.50, 7.00, 7.50, 8.00, 8.50, 9.00, 9.50, 10.00, 10.50, 11.00 dan 11.50. Pada masa yang sama, data bagi tujuan kalibrasi jaringan dan penentuan pH larutan penimbal yang tidak diketahui menggunakan jaringan terlatih masing-masing terdiri daripada data daripada spektrum yang direkodkan pada nilai pH: 2.55, 4.00, 6.05, 7.55 dan 10.05 (bagi kalibrasi) dan 3.55, 7.25, 9.60 dan 12.00 (bagi penentuan pH larutan penimbal yang tidak diketahui).

Bagi memproses isyarat rangsangan penderia pH gentian optik ini, arkitektur ANN yang dibina dimodelkan dengan mempunyai sembilan neuron dalam lapisan input, satu neuron dalam lapisan output dan lima hingga 16 neuron dalam lapisan terlindung. Jaringan dengan lapisan terlindung yang mempunyai 5, 7, 9, 11, 12, 13, 14, 15 dan 16 neuron digunakan bagi tujuan latihan jaringan. Sembilan neuron yang digunakan dalam lapisan input adalah mewakili data keamatan pantulan pada sembilan panjang gelombang yang dipilih manakala satu neuron di lapisan output mewakili nilai pH yang menjadi matlamat dalam ujikaji ini. Bilangan neuron dalam lapisan terlindung dioptimumkan menggunakan kaedah cubajaya sehingga ralat yang boleh diterima terhasil pada penghujung setiap latihan jaringan. Rajah 5 menunjukkan graf SSE melawan ulangan latihan bagi 5, 7, 9, 11, 12, 13, 14, 15 dan 16 neuron dalam lapisan terlindung dan 40,000 ulangan latihan. Daripada graf ini, dapat diperhatikan bahawa kesemua jaringan terlatih ini menghasilkan



Rajah 5: Graf Perubahan Nilai SSE bagi Jaringan dengan 40,000 Ulangan Latihan bagi Penunjuk BTB Terpegun. Nombor Menunjukkan Jumlah Neuron Terlindung yang Digunakan

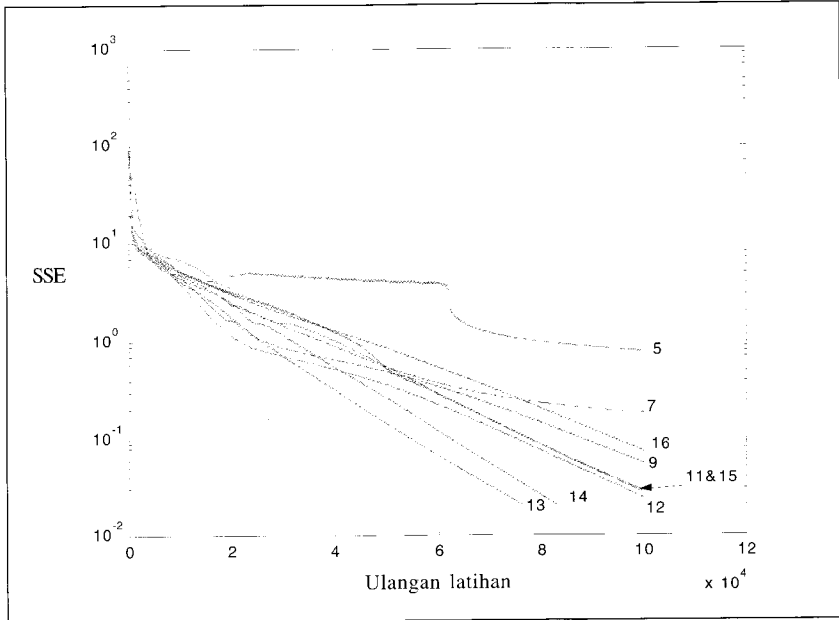
nilai SSE kurang daripada 1.5 unit. Jaringan terlatih yang mempunyai 15 neuron terlindung memberikan nilai SSE yang paling rendah iaitu 0.463067 manakala jaringan dengan 13 neuron terlindung menghasilkan nilai SSE yang paling tinggi iaitu 1.432780 unit. Plot perubahan SSE bagi jaringan yang mempunyai bilangan neuron terlindung dan 40,000 ulangan latihan adalah seperti dalam Rajah 6. Walaubagaimanapun, graf SSE bagi 12 dan 13 neuron terlindung didapati hampir bertindih antara satu sama lain (Rajah 5). Keputusan latihan menunjukkan jaringan terlatih dengan 12 neuron terlindung menghasilkan SSE yang lebih rendah pada penghujung 40,000 ulangan latihan iaitu 1.340700 unit berbanding dengan 1.432780 unit bagi jaringan terlatih dengan 13 neuron terlindung.



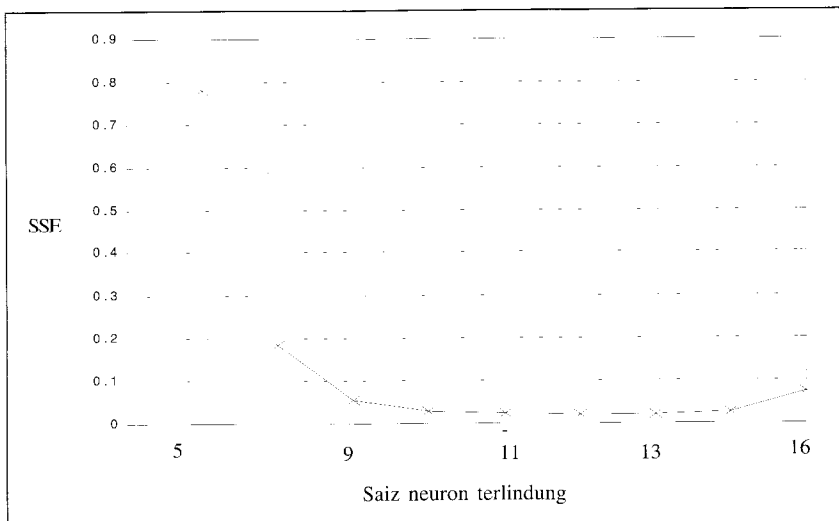
Rajah 6: Plot SSE bagi Jaringan dengan Bilangan Neuron Terlindung yang Berbeza Selepas 40,000 Ulangan Latihan

Kesan penambahan ulangan latihan terhadap kebolehan pencaman corak dan penentuan jaringan terbaik turut dijalankan dalam kajian ini menggunakan kaedah yang sama seperti yang telah dicadangkan oleh Taib et al. (1996). Dalam kajian ini, semua jaringan yang telah dilatih dengan ulangan latihan sebanyak 40,000 dilatih kembali ulangan sebanyak 100,000 ulangan (Rajah 7). Latihan pada 100,000 ulangan didapati menghasilkan nilai SSE yang lebih rendah bagi setiap jaringan terlatih. Semua nilai SSE bagi setiap jaringan terlatih berada di antara julat  $10^{-2}$  dan  $10^1$  kecuali bagi jaringan terlatih yang menggunakan 5 neuron terlindung. Rajah 8 menunjukkan plot SSE bagi setiap jaringan terlatih yang mempunyai bilangan neuron yang berbeza selepas 100,000 ulangan latihan. Jaringan yang mempunyai 13 neuron terlindung menghasilkan SSE terendah

*Pembinaan Penderia pH Gentian Optik Pintar Berasaskan Reagen Terpegun dan Rangkaian Neural Tiruan (ANN)*



Rajah 7: Graf Perubahan Nilai SSE Bagi Jaringan dengan 100,000 Ulangan Latihan bagi Penunjuk BTB Terpegun. Nombor Menunjukkan Jumlah Neuron Terlindung yang Digunakan



Rajah 8: Plot SSE Melawan Jaringan dengan Bilangan Neuron Terlindung yang Berbeza Selepas 100,000 Ulangan Latihan bagi BTB Terpegun

iaitu 0.019997 unit manakala jaringan dengan 5 neuron terlindung menghasilkan SSE tertinggi iaitu 0.780666 unit. Graf latihan bagi jaringan yang mempunyai 11 dan 15 neuron terlindung hampir bertindih di antara satu sama lain, tetapi statistik latihan menunjukkan jaringan terlatih dengan 15 neuron terlindung memberikan nilai SSE yang lebih rendah iaitu 0.027151 unit berbanding dengan 0.028338 unit bagi jaringan terlatih dengan 11 neuron terlindung. Oleh kerana kepersisan dan kejituan output diutamakan dalam pembinaan penerima pH gentian optik yang pintar, latihan dengan 100,000 ulangan dipilih kerana ia memberikan keputusan pencaman corak yang lebih tepat dan konsisten.

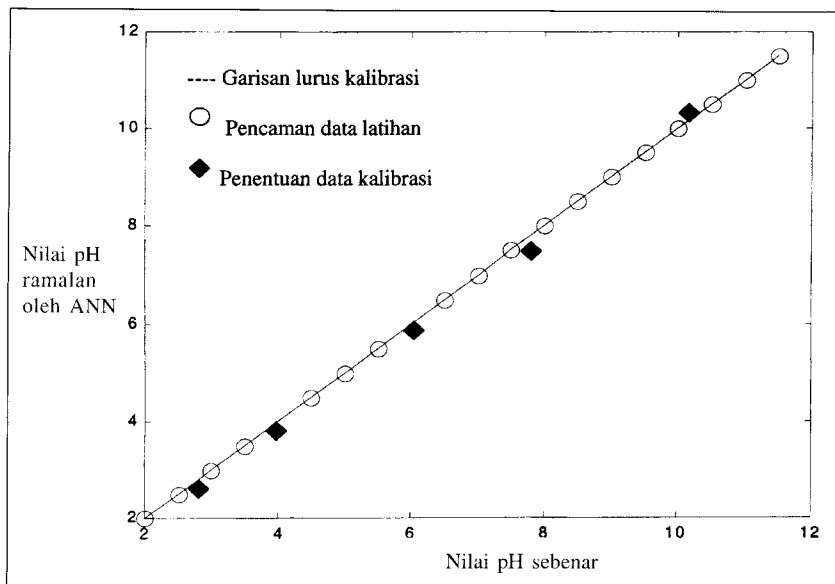
Namun begitu, untuk memastikan jaringan terlatih yang dipilih dapat digunakan untuk menentukan nilai pH dalam aplikasi yang sebenar, pemilihan jaringan terlatih yang terbaik tidak hanya bergantung di atas kebolehannya untuk melakukan pencaman corak sahaja. Despagne dan Massart (1998) mencadangkan bahawa ulangan latihan yang berbeza perlu dilakukan untuk melihat kesan penambahan ulangan latihan di atas jaringan terlatih tersebut. Oleh itu, semua jaringan terlatih dalam kajian ini diuji dengan memberikan data yang diambil daripada lima spektrum kalibrasi iaitu pada pH 2.55, 4.00, 6.05, 7.55 and 10.05 untuk mengesahkan kebolehan pencaman corak jaringan tersebut. Semua jaringan terlatih ini dinilai keupayaannya secara menguji dengan data kalibrasi yang terletak dalam julat latihan jaringan tersebut iaitu nilai pH yang dinyatakan di atas. Seperti ditunjukkan dalam Jadual 2, jaringan terlatih dengan 12 neuron terlindung memberikan keputusan penentuan nilai pH yang terbaik di mana ralat kalibrasi purata yang dicatat ialah 0.03 unit pH. Jaringan terlatih yang mengandungi 15 dan 16 neuron terlindung memberikan ralat kalibrasi purata yang paling tinggi iaitu 0.29 dan 0.21 unit pH masing-masingnya. Keputusan penentuan pH yang cemerlang ini turut membuktikan bahawa jaringan terlatih dapat membuat ramalan dengan baik kerana perkaitan data input-output yang diproses oleh jaringan hampir tepat bagi data input yang tidak pernah digunakan dalam melatih jaringan. Walaupun sebanyak 100,000 ulangan latihan digunakan untuk melatih jaringan dan nilai ini boleh dikatakan banyak, namun kesemua jaringan terlatih ini memberi keputusan yang hampir tepat serta tiada masalah terlebih padan dalam kajian ini. Masalah terlebih padan dapat dilihat terjadi apabila nilai pH yang ditentukan oleh jaringan terlatih adalah sangat jauh berbeza dengan nilai pH sebenar. Masalah terlebih padan dan terlebih latihan merupakan dua masalah yang perlu diambil kira semasa melatih jaringan dan masalah ini telah dibincangkan dengan lebih terperinci oleh Tetko et al. (1995).

Daripada keputusan di atas, boleh dilihat bahawa jaringan terlatih dengan 12 neuron terlindung memberikan arkitektur terbaik untuk menghasilkan keputusan penentuan nilai pH yang tepat dan jitu. Arkitektur ini turut berjaya mengoptimumkan julat linear penerima pH berasaskan BTB terpegun dari julat pH yang sempit iaitu 5.00-8.00 kepada julat pH yang lebih besar (2.00-11.50) seperti yang ditunjukkan dalam Rajah 9. Walaupun graf kalibrasi yang diperolehi tidak sepenuhnya sempurna, namun ANN tetap berupaya untuk memadankan

Jadual 2: Keupayaan Ramalan oleh ANN dengan Bilangan Neuron Terlindung Berlainan bagi Penderia pH Berasaskan BTB Terpegun di atas XAD 7

Neuron terlindung	Nilai sebenar pH 2.55		Nilai sebenar 4.00		Nilai sebenar pH 6.05		Nilai sebenar pH 7.55		Nilai sebenar pH 10.55		* Ralat kalibrasi purata
	ramalan	ralat	ramalan	ralat	ramalan	ralat	ramalan	ralat	ramalan	ralat	
5	2.60	0.05	4.23	0.23	6.17	0.12	7.34	0.21	10.72	0.17	0.16
7	2.63	0.08	4.05	0.05	6.12	0.07	7.46	0.09	10.42	0.13	0.08
9	2.51	0.04	4.11	0.11	5.96	0.09	7.49	0.06	10.57	0.02	0.06
11	2.49	0.06	3.97	0.03	6.09	0.04	7.44	0.11	10.61	0.06	0.06
12	2.59	0.04	4.02	0.02	6.03	0.03	7.58	0.03	10.54	0.01	0.03
13	2.64	0.09	4.47	0.47	6.29	0.24	7.66	0.11	10.59	0.04	0.19
14	2.77	0.22	4.42	0.42	6.14	0.09	7.79	0.24	10.63	0.08	0.19
15	2.86	0.31	4.51	0.51	5.86	0.19	7.48	0.07	10.19	0.36	0.29
16	2.61	0.06	4.38	0.38	5.68	0.37	7.59	0.04	10.74	0.19	0.21

\*Ralat kalibrasi purata = | Nilai ramalan pH – Nilai sebenar pH | / 5



Rajah 9: Graf Pencaman Data Latihan dan Kalibrasi oleh Jaringan yang Mempunyai 12 Neuron Terlindung bagi Penunjuk BTB Terpegun

data dengan ralat kalibrasi yang kecil. Jaringan terlatih dengan 12 neuron terlindung juga berjaya untuk menentukan bacaan pH 2.55, 4.00 dan 10.55 dengan hampir tepat. Adalah sukar untuk menentukan nilai pH ini menggunakan kaedah kalibrasi konvensional kerana semua nilai pH ini terletak di luar julat rangsangan linear pH berasaskan BTB terpegun iaitu pH 5.00-8.00 (Rajah 4).

### Penentuan Nilai pH bagi Larutan yang Tidak Diketahui

Jaringan terlatih dengan 12 neuron terlindung kini boleh digunakan untuk menentukan nilai pH bagi larutan penimbal yang tidak diketahui. Penentuan pH dilakukan dengan memberikan data keamatan pantulan daripada empat spektrum larutan penimbal yang baru iaitu pH 3.55, 7.25, 9.60 dan 12.00 kepada jaringan terlatih. Hasil penentuan ini ditunjukkan dalam Jadual 3. Jaringan terlatih ini didapati telah berjaya menentukan nilai pH dengan baik dan ralat penentuan tertinggi yang dicatat ialah 0.06 unit pH bagi pengukuran larutan penimbal pH 12.00. Keputusan ini memang telah dijangkakan kerana pH larutan penimbal ini berada di luar julat latihan jaringan tersebut (pH 2.00-11.50). Selain daripada itu, keputusan ini turut menunjukkan ralat penentuan yang rendah bagi data daripada tiga spektrum larutan penimbal yang berada dalam julat latihan jaringan (pH 3.55, 7.25 dan 9.60) dengan purata 0.02 unit pH. Secara keseluruhannya ralat penentuan purata bagi larutan penimbal yang tidak diketahui ini adalah rendah dengan ralat

*Pembinaan Penderia pH Gentian Optik Pintar Berasaskan Reagen Terpegun dan Rangkaian Neural Tiruan (ANN)*

**Jadual 3: Penentuan Nilai untuk Larutan Penimbal yang Tidak Diketahui dengan Menggunakan Jaringan dengan 12 Neuron Terlindung**

pH sebenar	pH ramalan	Ralat (pH)
3.55	3.53	0.02
7.25	7.24	0.01
9.60	9.63	0.03
12.00	11.94	0.06

Ralat ramalan purata = 0.03 pH.

ramalan purata 0.03 unit pH sahaja. Daripada kajian ini, arkitektur ANN dengan bilangan neuron 9: 12: 1 didapati boleh digunakan untuk menentukan nilai pH larutan penimbal yang tidak diketahui nilai pHnya. Selain itu, arkitektur ini boleh juga digunakan sebagai sistem pintar untuk memproses isyarat penderia pH gentian optik berasaskan reagen BTB terpegun di atas XAD 7.

## **Kesimpulan**

Keputusan yang diperolehi dalam kajian ini membuktikan bahawa Amberlite XAD 7 adalah penyokong kopolimer yang sangat sesuai digunakan untuk memegunkan penunjuk BTB bagi pembinaan penderia pH gentian optik. Penggunaan ANN yang dilatih dengan algoritma BP telah berjaya memproses rangsangan penderia pH gentian optik ini walaupun data rangsangan yang diberikan di atas jaringan menunjukkan ketidaklinearan yang tinggi. Arkitektur jaringan terlatih yang mengandungi 9 neuron dalam lapisan input, 12 neuron dalam lapisan terlindung dan satu neuron dalam lapisan output didapati sangat sesuai bagi digunakan dalam memproses rangsangan penderia pH gentian optik berasaskan penunjuk BTB terpegun. Dapat diperhatikan jaringan terlatih ini sangat cekap dalam menentukan rangsangan output penderia (nilai pH) dengan hanya 0.03 unit pH ralat ramalan purata dicatat (Jadual 3). Kelebihan utama penggunaan ANN dalam memproses isyarat penderia pH gentian optik adalah pengoptimuman julat linear rangsangan penderia pH. ANN berjaya mengoptimumkan julat linear rangsangan penderia daripada pH 5.00-8.00 kepada julat yang lebih besar iaitu pH 2.00-11.50 yang merangkumi hampir keseluruhan julat pH (pH 1.00-14.00). Hanya masalah pelunturan penunjuk BTB terpegun pada medium asid dan bes kuat menjadi penghalang di atas matlamat utama kajian iaitu untuk mengoptimumkan julat linear di atas keseluruhan julat pengesanan pH.

## Rujukan

- Alabbas, S.H. Ashworth, D.C. Bezzaa, B. Momin, S. A. & Narayanaswamy, R. (1996). Factors affecting the response time of an optical-fibre reflectance pH sensor. *Sens. Actuators A*. **51**: 129-134.
- Andres, R. T. & Sevilla, F. III (1991). Fibre-optic reflectometric study on acid-base equilibria of immobilized indicators: effect of the nature of immobilizing agents. *Anal. Chim. Acta*. **251**: 165-169.
- Blank, T.B. & Brown, S.D. (1993). Data processing using neural networks. *Anal. Chim. Acta*. **277**: 273-282.
- Dean, J. A (pnyt.) (1989). *Chemist Ready Reference Handbook*. New York: McGraw-Hill.
- Demuth, H. & Beale, M. (1998). *Matlab: Neural Network Toolbox version 3*, Worthing, UK. The MathsWorks Inc. Rapid Data.
- Despagne, F. & Massart, D. L. (1998). Neural network in multivariate calibration. *Analyst*. **123**: 157R-183R.
- Edmonds, T. E. (1988). *Chemical Sensors*. New York: Chapman & Hall.
- Faiz Bukhari Mohd Suah, Musa Ahmad & Mohd Nasir Taib (2001b). Extending the response range of bromophenol blue pH indicator using an artificial neural network. *Msian. J. Chem.* **3**(1): 29-34.
- Fry, D. R. & Bobbitt, D. R. (2001). Investigation of dynamically modified optical-fiber sensor for pH sensing at the extremes of the pH scale. *Microchem. J.* **69**: 123-133.
- Kateman, G. & Smits, J. R. M. (1993). Colored information from a black box? Validation and evaluation of neural networks. *Anal. Chim. Acta*. **277**: 179-188.
- Moreno, M. C. Jimenez, M. Conde, C. P. & Camara, C. (1990). Analytical performance of an optical pH sensor for acid-base titration. *Anal. Chim. Acta*. **230**: 35-40.
- Musa Ahmad, Faiz Bukhari Mohd. Suah & Mohd. Nasir Taib (2001). Penggunaan artificial neural network untuk pengoptimuman julat rangsangan pH penunjuk bromotimol biru. *Msian. J. Anal. Sci.* **7**(1): 121-128.
- Musa Ahmad (1989). Penderia kimia gentian optik. *Bul. Kim.* **4**(2): 52-60.
- Nylander, C. (1985). Chemical and biological sensor. *J. Phys. E: Sci. Instrum.* **18** (9): 736-749.



*Pembinaan Penderia pH Gentian Optik Pintar Berasaskan Reagen Terpegun dan Rangkaian Neural Tiruan (ANN)*

- Taib, M. N. & Narayanaswamy, R. (1997). Multichannel calibration technique for optical fibre chemical sensor using artificial neural network. *Sens. Actuators. B* **38-39**: 365-370.
- Taib, M. N. Andres, R. & Narayanaswamy, R. (1996). Extending the range of optical fibre pH sensor using an artificial neural network. *Anal. Chim. Acta.* **330**: 31-41.
- Tetko, I. V. Livingstone, D. J. & Luik, A. I. (1995). Neural network studies I: comparison of overfitting and overtraining. *J. Chem. Inf. Comp. Sci.* **35**: 826-841.
- Wasserman, P. D. (1989). *Neural Computing: Theory and practise*. New York: Van Nostrand Reinhold.
- Wolfbeis, O. S. (2000). Fiber-optic chemical sensors and biosensors. *Anal. Chem.* **72**: 81R-89R.
- 

FAIZ BUKHARI MOHD SUAHA, Fakulti Sains Gunaan, Universiti Teknologi MARA (UiTM), Cawangan Perlis, Kampus Arau, 02600 Arau, Perlis

MUSA AHMAD, Pusat Pengajian Sains Kimia, Fakulti Sains dan Teknologi, Universiti Kebangsaan Malaysia (UKM), 43600 Bangi, Selangor

ABDUL MUTALIB MD JANI, Fakulti Sains Gunaan, Universiti Teknologi MARA (UiTM), Cawangan Perlis, Kampus Arau, 02600 Arau, Perlis

MOHD NASIR TAIB, Fakulti Kejuruteraan Elektrik, Universiti Teknologi MARA (UiTM), 40450 Shah Alam, Selangor