



جامعة قاصدي مرباح ورقلة



كلية الرياضيات و علوم المادة

قسم الفيزياء

مذكرة ماستر أكاديمي

مجال : علوم المادة

شعبة: فيزياء

تخصص : فيزياء المواد

من إعداد الطالبة : دبلوي هدى

العنوان:

تصنيف الهيدريدات والتنبؤ بطاقة تشكلها باستخدام  
آلة المتجهات الداعمة SVM وإنحدار متجه الداعم SVR

نوقشت علنا بتاريخ: 2023/06/19

أمام اللجنة المكونة من:

رئيسا	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	أستاذ مساعد أ	بوراس ناصر
مناقشا	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	أستاذ تعليم عالي	بن مبروك لزهري
مشرفا	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	أستاذ محاضر أ	عياط زهية
مشرف مساعد	جامعة قاصدي مرباح ورقلة	أستاذ مساعد ب	بن هجيرة عبد الرحمان

2023/2022



## الاهداء

بسم الله الرحمن الرحيم  
صلى الله على سيدنا وحبينا محمد وعلى آله وصحابه واتباعه وسلم تسليما كثيرا .

( وآخر دعواهم أن الحمد لله رب العالمين )

أهدي هذا العمل المتواضع

إلى أبي العطف (أحمد) قدوتي، ومثلي الأعلى في الحياة ؛ فهو من علمني كيف أعيش بكرامة وشموخ .

شكرا يا أجمل انسان وقفت بجانبني من زمان وأعطيتني كل الحب والحنان  
أنت أعظم أب ومعك أشعر بالأمان.

لو بيدي العمر لأعطيك ومع كل هذا فحقت لن أوفيك أبي الغالي أطال الله عمرك.

إلى أمي الحنونة (عائشة) لا أجد كلمات يمكن أن تمنحها حقها،  
فهي ملهمة الحب وفرحة العمر، ومثال التفاني والعطاء.

أطال الله في ضياء عمرها

إلى إخوتي.... سندي وعضدي ومشاطري أفراحي وأحزاني حفظهم وراعهم الله



## الشكر والعرفان

الحمد لله رب العالمين والصلاة والسلام على أشرف الأنبياء  
والمرسلين سيدنا محمد وعلى آله وصحبه ومن تبعهم إلى يوم الدين وبعد:

فإني أشكر الله تعالى على فضله حيث أتاح لي إنجاز هذا العمل بفضلته لله الحمد أولاً وأخيراً.

ثم أشكر أولئك اللذين مدوا لي يد المساعدة خلال هذه الفترة، وفي مقدمتهم أستاذتي المشرفة عياض زهير  
التي لم تدخر جهداً في مساعدتي، وكانت تحثني على البحث وترغبني فيه وتقوي عزيمتي  
عليه فلما من الله الاجر ومنى كل التقدير حفظها الله  
ومتعباً بالصحة والعافية والتفجع بعلمها.

كما أشكر الاستاذين هجيرة عبد الرحمن على تعاونهم معنا واتمنى له مزيد من النجاح.

والشكر موصول إلى أعضاء لجنة المناقشة الاستاذة بوراس ناصر

رئيساً وأستاذة التعليم العالي بن مبروك لوهير "مناقشة على قبول مناقشة هذه المذكرة وإخراجها في أمسي حله وعلى كل  
مقرحات المقدمة والشكر موصول أيضاً إلى رئيس قسم الفيزياء الذين أثروا رصيدنا العلمي والمعرفي

وإلى جميع أساتذة قسم الفيزياء

# المحتوى

الاهداء

شكر و عرفان

i.....	المحتوى
iv.....	قائمة الأشكال
v.....	قائمة الجداول
1.....	المقدمة العامة
2.....	قائمة المراجع:
2.....	الفصل الاول: عموميات حول الهيدروجين وهيدريدات المعادن.....
3.....	1.I المقدمة <b>Introduction</b> :.....
3.....	2.Iنبذة تاريخية عن الهيدروجين <b>Difinition of hydrogen</b> :.....
4.....	3.I إنتاج الهيدروجين <b>Hydrogen Production</b> :.....
4.....	13.I إنتاج الهيدروجين عن طريق التحليل الكهربائي للماء :.....
5.....	23.I إنتاج الهيدروجين عن طريق الطاقة الأحفورية:.....
5.....	33.I إنتاج الهيدروجين من الغاز الطبيعي:.....
5.....	43.I إنتاج هيدروجين عن طريق إعادة تشكيل البخار :.....
6.....	53.I إنتاج الهيدروجين عن طريق الأكسدة الجزئية:.....
6.....	63.I إنتاج الهيدروجين عن طريق الفحم :.....
6.....	4.I نقل الهيدروجين <b>Transport Hydrogen</b> :.....
8.....	5.I تخزين الهيدروجين <b>Hydrogen Storage</b> :.....
8.....	15.I تخزين الهيدروجين على شكل غاز <b>Gaseous Storage</b> :.....
8.....	25.I تخزين الهيدروجين على شكل سائل <b>Liquid Storage</b> :.....
9.....	35.I تخزين الهيدروجين على شكل صلب <b>Solid Storage</b> :.....
9.....	135.I عن طريق الامتزاز <b>Adsorption</b> :.....
9.....	235.I عن طريق الامتصاص العكوس <b>Absorption</b> :.....



9.....	6.I الهيدريدات Hydrides :
10.....	1.6.I الهيدريدات الأيونية Ionic Hydrides :
10.....	2.6.I الهيدريدات التساهمية Covalent Hydrides :
11.....	3.6.I الهيدريدات المعدنية Metal Hydrides :
11.....	4.6.I أنواع هيدريدات المعادن :
12.....	5.6. I هيدريدات عناصر الترابيات النادرة:
14.....	الخلاصة :
15.....	قائمة المراجع:
18.....	الفصل الثاني: عموميات على التعلم الآلي
19.....	1.II المقدمة:
19.....	2.II مقدمة تاريخية عن الذكاء الاصطناعي :
20.....	3.II تعريف الذكاء الاصطناعي Definitions of Artificial Intelligence
20.....	4.II أنواع الذكاء الاصطناعي :
20.....	II 1-4- التعلم تحت الاشراف Supervised Learning :
21.....	II 1-1-4 التصنيف classification :
22.....	II 2-1-4 الانحدار: regression
23.....	II 2-4- تعلم غير خاضع للإشراف unsupervised :
23.....	II 3.4. التجميع Clustering :
23.....	II 5. التعلم المعزز Reinforcement Learning :
24.....	II 6. آلة المتجهات الداعمة Support Vector Machine :
24.....	II 7. وظائف النواة Kernel Functions :
24.....	II 1.7. النواة الخطية Linear Kernel :
25.....	II 2-7- نواة متعددة الحدود Polynomial Kernel :
25.....	II 3.7. نواة غاوس Kernels Gaussian or Radial Basis Function (RBF) :

26.....	II-4-7- sigmoid : نواة السيغمويد
26.....	II-8- انحدار متجه الداعم :support vector regression
26.....	II-9. عملية التدريب :Training process
27.....	II-10. الضبط الناقص :Underfitting
27.....	II-11. الضبط الزائد (الملائمة الزائدة) :Over-fitting
28.....	: الخلاصة
29.....	: قائمة مراجع
31.....	الفصل الثالث: النتائج والمناقشة
30.....	III-1.مقدمة:
30.....	III-2.جمع ومعالجة البيانات :
31.....	III-3.مقاييس التقييم :Evaluation Metrics
31.....	III-1.3. المقاييس ذات الصلة بالتصنيف Classification Related Metrics
31.....	III-1.1.3. دقة التصنيف : classification Accuracy
31.....	III-2.1.3. الاسترجاع :Recall
32.....	III-2.3. مقاييس ذات الصلة بالانحدار: Regression Related Metrics
32.....	III-1.2.3. معامل التحديد : R <sup>2</sup> Coefficient of determination
33.....	III-2.2.3. مقياس متوسط الخطأ التربيعي :MSE Mean Squared Error
33.....	III-3.2.3. التحقق المتقاطع :Cross-Validation
34.....	III-4. النموذج المعتمد:
34.....	III-5. النتائج والمناقشة:
37.....	: الخلاصة
38.....	: قائمة المراجع
39.....	: خلاصة عامة
40.....	: الملخص

## قائمة الأشكال

- الشكل (1-I) : نظائر الهيدروجين ..... 4
- الشكل (2-I) : يوضح التحليل الكهربائي..... 5
- الشكل (3-I) : أطوال (بكيلومتر) شبكات نقل الهيدروجين عالميا..... 7
- الشكل (4-I) : الحد الأقصى للهيدروجين في شبكات نقل الغاز الطبيعي ببعض الدول..... 8
- الشكل (5-I) : آلية الامتصاص و الامتزاز..... 9
- الشكل (6-I) : الهيدروجين في الهيدريدات المعدنية..... 10
- الشكل (8-I) : المواقع البينية الرباعية والثمانية الوجوه للبنية المكعبة مركزة الوجوه a (مواقع بينية رباعية الوجوه و b مواقع بينية ثمانية الوجوه)..... 13
- الشكل (1-II) : البنية الاساسية للتعلم الخاضع للإشراف..... 20
- الشكل (2-II) : سير عمل التصنيف في التعلم الخاضع للإشراف..... 22
- الشكل (3-II) : أنواع الانحدار..... 23
- الشكل (4-II) : يوضح نواة دالة الخطية..... 25
- الشكل (5-II) : الضبط الناقص..... 27
- الشكل (6-II) : الضبط الزائد..... 28
- الشكل (1-III) : dataset head..... 30
- الشكل (2-III) : استخدام التحقق المتقاطع لتقسيم البيانات الى 4 أجزاء..... 33
- الشكل (3-III) : متوسط الارجاع (Average Recall) لمختلف النوى (kernel)..... 35
- الشكل (4-III) : نتائج استخدام مقياس التحقق المتقاطع لنواة الدالة الخطية linear..... 36
- الشكل (5-III) : نتائج استخدام مقياس التحقق المتقاطع لنواة دالة متعددة الحدود Poly..... 36
- الشكل (6-III) : نتائج استخدام مقياس التحقق المتقاطع لنواة دالة الغاوسي RBF..... 37
- الشكل (7-III) : نتائج استخدام مقياس التحقق المتقاطع لنواة دالة سيني Sigmoid..... 37

## قائمة الجداول

- الجدول (1-I) : الخصائص فيزيائية لغاز الهيدروجين ..... 3
- الجدول (2-I) : قائمة انواع مركبات الهيدريدات و البنية البلورية الموافقة لكل نوع ..... 11
- الجدول (1-III) : قيم دقة التصنيف لكل نواة..... 34
- الجدول (2-III) : مقياس معامل التحديد ( $R^2$ ) ومقياس متوسط الخطأ التربيعي (MSE) لكل النوى..... 35



## المقدمة العامة

## المقدمة العامة

يعتبر التغيير المناخي من أحد أكثر التحديات العالمية خلال السنوات الماضية وتزداد الحاجة لمواجهة التحويل المناخي مع استمرار النمو السكاني وزيادة الانبعاثات، حيث أصبح من الضروري أكثر من أي وقت مضى اعتماد إطار اقتصادي لخفض مستويات انبعاثات الغازات الدفيئة و غازات الاحتباس الحراري في الغلاف الجو [1]. من المهم ملاحظة أن الهيدروجين يمكن أن يحل محل الوقود الأحفوري لجميع هذه الأغراض دون انبعاث ثاني أكسيد الكربون. حيث أنه ناقل طاقة محايد للكربون، تتوقع معظم سيناريوهات إزالة الكربون أن يلعب الهيدروجين دورًا مهمًا في تحقيق صافي انبعاثات صفرية بحلول منتصف القرن. على سبيل المثال، تتوقع وكالة الطاقة الدولية والوكالة الدولية للطاقة المتجددة أن يفي الهيدروجين بنسبة 12-13% من الطلب النهائي على الطاقة بحلول عام 2050، ارتفاعًا من الصفر تقريبًا اليوم [2].

تعد عملية تخزين الهيدروجين على هيئة هيدرات معدنية هي الطريقة الأكثر أمانًا وتوفر العديد من المزايا [3]، فمن بين المركبات المعدنية التي لديها القدرة على تخزين الهيدروجين تحت ظروف مناسبة من درجة حرارة وضغط نذكر الترابيات النادرة. إذ أن هذه العناصر ليست نادرة، أي أن بعضها الأكثر انتشار في الطبيعة مثل الرصاص، وقد احتفظت بتسميتها هذه مع أنها تصنف اليوم باسم العناصر اللانثانيدية نسبة إلى أول عناصرها وهو اللانثانيوم (La) كما يشار إليها أحيانًا باسم العناصر الانتقالية الداخلية، وتتميز هذه العناصر مختلف من الخصائص المتشابهة وهذا يعود لوجود المحط الذري  $4f$  بمداراته الفرعية السبعة التي تتسع إلى 14 إلكترون مع احتمالية انتقال الإلكترونات فيما بينها ويتميز هذا الأخير بعدم دخوله في تكوين الروابط الالكترونية [4].

يشهد العالم في الوقت الحاضر تطورًا متسارعًا وتطبيقًا متزايدًا لأنظمة الذكاء الاصطناعي (AI) في عدة مجالات وذلك بإجراءات الكمبيوتر والتي تحاكي اتخاذ القرارات البشرية استنادًا إلى التجارب والبيانات التي تم التعرف عليها.

إذ يعد التعلم الآلي (ML) مجموعة فرعية من الذكاء الاصطناعي تمكن أجهزة الكمبيوتر باستخلاص الاستنتاجات من البيانات. يعتبر نموذج خوارزمية التعلم الآلي المتجه الداعم (SVM) support vector regression أهم الخوارزميات المستخدمة في أغلب التطبيقات تعلم الآلة من أجل التصنيف [5]، ونموذج انحدار المتجه الداعم Support Vector Regression (SVR) يعتبر من نماذج التعلم الآلي ونماذج الاحصائية والذي يستعمل للتنبؤ بقيم الهدف المستمرة، ولديه مجموعة واسعة من التطبيقات [6].

في هذه المذكرة سنتطرق بعد المقدمة العامة إلى الفصل الأول والذي يشمل فكرة عن كيفية إنتاج الهيدروجين وتخزينه في حالة السائلة والصلبة والغازية وسنركز على هيدريدات معدنية. ثم بعد ذلك سنعرض الفصل الثاني والذي يحتوي على بعض المفاهيم الأساسية حول التعلم الآلي ومختلف التقنيات المتعلقة بها. أما بالنسبة الفصل الثالث فسنعرض من خلاله نتائج المتحصل عليها لتصنيف الهيدريدات باستخدام خوارزمية التعلم الآلي المتجه الداعم (SVM) support vector regression, والتنبؤ بطاقة تشكيلها بإستعمال خوارزمية انحدار المتجه الداعم (SVR) Support Vector Regression.

### قائمة المراجع:

- [1] Latroche, Michel, et al. "Hydrogen storage in the giant-pore metal–organic frameworks MIL-100 and MIL-101." *Angewandte Chemie* 118.48 (2006): 8407-8411.
- [2] Liu, Haifeng, et al. "A perspective on the overarching role of hydrogen, ammonia, and methanol carbon-neutral fuels towards net zero emission in the next three decades." *Energies* 16.1 (2022): 280.
- [3] M. Bououdina, D. Grant, and G. Walker. *Int. J. Hydrogen Energy* 31, 177 (2006)
- [4] Long, Keith R., et al. *The principal rare earth elements deposits of the United States: A summary of domestic deposits and a global perspective.* Springer Netherlands, 2012
- [5] Cervantes, Jair, et al. "A comprehensive survey on support vector machine classification: Applications, challenges and trends." *Neurocomputing* 408 (2020): 189-215.
- [6] Melki, Gabriella, et al. "Multi-target support vector regression via correlation regressor chains." *Information Sciences* 415 (2017): 53-69.

**الفصل الاول:**

**عموميات حول الهيدروجين  
وهيدريدات المعادن**

## 1.1 المقدمة Introduction:

قد يعتبر الهيدروجين بمثابة وقود المستقبل و ناقل واعد للطاقة البديلة لكثرة وفرته في الطبيعة، ومن هنا أهتم العلماء في محاولة إدخاله حيز مجال الطاقات المتجددة كونه مصدر طاقة نظيفة وغير ملوث آمن بيئيا كما أنه من أخف العناصر ويحتوي علي كثافة طاقة عالية ولا يطلق غازات ضارة عند حرقه أو إنتاجه، ومن هنا يسعى الباحثون حاليا لدراسة كيفية طرق فعالة إنتاج الهيدروجين ونقله بأقل تكلفة من أجل استعمالات متعددة منها، ومنه يمكن تخزين الهيدروجين بطرق مختلفة منها تحت ضغط مرتفع وعلي شكل سائل تحت درجة حرارة مبردة وعلى السطح أو داخل المواد السائلة والصلبة بالأخص الترابيات النادرة عن طريق الأمتصاص وتسمى المركبات الناتجة بالهيدريدات [1].

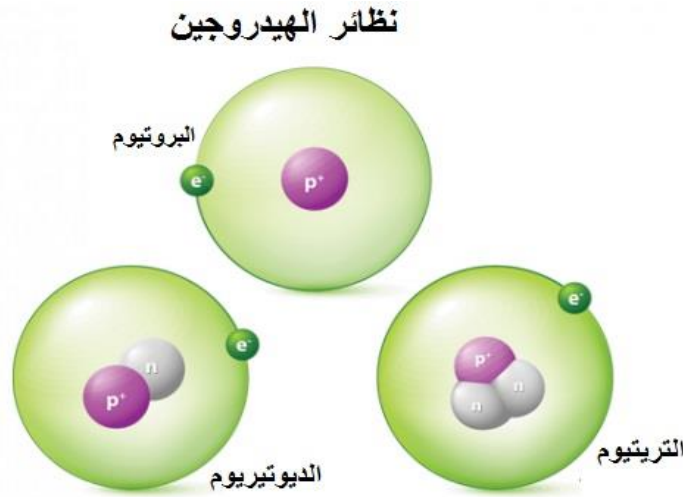
## 2.I نبذة تاريخية عن الهيدروجين Difinition of hydrogen:

أكتشف الهيدروجين من طرف العالم الإنجليزي هنري كافندش في عام 1766، هو عنصر كيميائي رمزه H عدده ذري 1 و يقع في الجدول الدوري ضمن عناصر الدورة الأولى وفق عناصر المجموعة الأولى يكون أكثر نظائر، فهو غاز لا لون له ولا طعم ولا رائحة وغير سام وهو من أخف العناصر الموجودة في الطبيعة، كتلته الحجمية  $\rho = 0.09g/l$  [2]، و يتألف هيدروجين في مداره علي إلكترون واحد سالب مرتبط بنواة الذرة والتي تحتوي علي بروتون وحيد موجب فقط دون وجود النيوترونات، لها نظام بلوري سداسي. ولقد لخصت الخصائص الفيزيائية للهيدروجين في الجدول التالي (1.I) [3].

الجدول (1.I) : الخصائص فيزيائية لغاز الهيدروجين

الخاصية	القيمة
الصيغة الجزيئية	H2
طاقة الربط H-H	436 kj
نقطة الانصهار	21.15k
نقطة الغليان	14.02k
طاقة التأين	13.06 Ev
الكتلة الذرية	1 u.m.a
الكتلة الحجمية في شروط نظامية	0.09/m3.Kg

يشكل غاز الهيدروجين بنسبة 75% من كتلة الكون [4] وكثافته تقل عن كثافة الهواء بنحو 14 مرة. كما أن الهيدروجين يوجد علي شكل جزيئي وذلك بدخوله برابطة تساهمية في بنية الماء ومعظم المركبات العضوي، كما يتواجد له ثلاثة نظائر رئيسية الموضحة في الشكل(1.I) وهي البروتيوم رمز H الديتيريوم رمز D والتريتيوم رمز T [5].



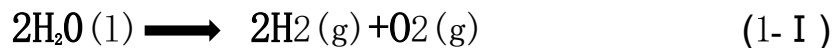
الشكل (1-I) : نظائر الهيدروجين

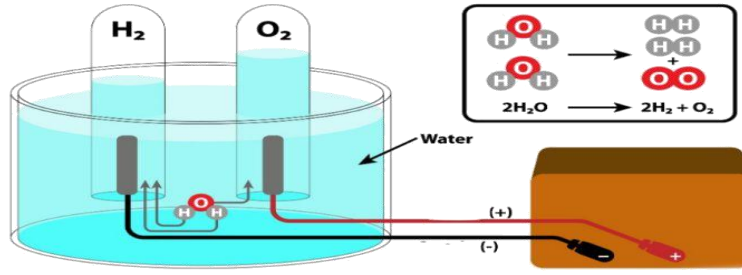
### 3.I إنتاج الهيدروجين Hydrogen Production:

يمكن انتاج والحصول علي الهيدروجين من خلال استخلاصه من عدد كبير من المصادر وبطرق مختلفة نذكر منها:

#### 1.3.I إنتاج الهيدروجين عن طريق التحليل الكهربائي للماء :

تتم عملية التحليل الكهربائي عن طريق تمرير تيار كهربائي بين قطبين كهربائيين مغموسين في الماء (كما هو موضح في الشكل(2.I) والذي يؤدي إلى كسر الروابط الكيميائية بين الأكسجين والهيدروجين في الماء، حيث نلاحظ تجمع غاز الهيدروجين في المصعد، إذ يعتبر من النواتج وفق المعادلة التالية :





### الشكل (2-1) : يوضح التحليل الكهربائي

تعتبر طريقة التحليل الكهربائي للماء طريقة قديمة بسيطة إلا أن هذه الطريقة مكلفة ماديا بسبب استهلاك كميات كبيرة من الطاقة الكهربائية، ومن أجل تقليل كمية الكهرباء المستهلكة في هذه العملية يتم إجرائها تحت درجات حرارة عالية [6].

في حالة إذا كانت هذه الطريقة تعتمد على الكهرباء من مصدر متجدد بدون انبعاثات كربونية المتجددة (والذي يعتبر الخيار الامثل للبيئة) مثل الطاقة الشمسية أو طاقة الرياح فإن الهيدروجين الناتج يسمى بالهيدروجين الاخضر، أما إذا كانت الكهرباء من محطات الطاقة النووية فإنه يعرف بالهيدروجين الأصفر [7].

### 3.3.I إنتاج الهيدروجين عن طريق الطاقة الأحفورية:

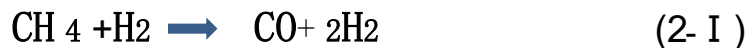
تعتمد هذه الطريقة لإنتاج الهيدروجين علي المواد الاحفورية كالفحم الحجري والغاز الطبيعي بنسبة 99% [8] إذ يعد المصدر الرئيسي الأكثر استخداما لإنتاجه بتطبيق عدة طرق الهيدروكربونية المختلفة.

### 3.3.I إنتاج الهيدروجين من الغاز الطبيعي:

يمكن انتاج الهيدروجين بعدة طرق من الغاز الطبيعي منها:

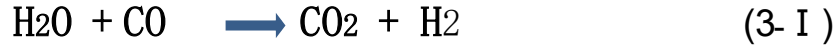
### 4.3.I إنتاج هيدروجين عن طريق إعادة تشكيل البخار:

يتم تسخين غاز الميثان في درجة حرارة تتراوح ما بين 700 و1000 درجة مئوية [9]، في وجود بخار الماء ومحفز النيكل وفق معادلة التفاعل التالية:



و هذا التفاعل يؤدي الى تفكك جزيئات الميثان ليعطي غاز الاصطناع فهو خليط من غازي أول أكسيد الكربون و الهيدروجين، كما يتولد هيدروجين إضافي عن طريق أكسدة الكربون المنتج مع الماء [10].

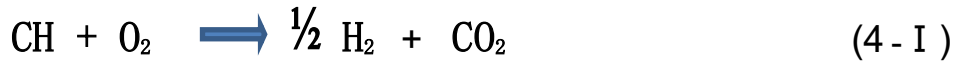




حيث ينتج من هذه الطريقة حوالي 9 إلى 12 طنا من ثنائي أكسيد الكربون مقابل كل طن من إنتاج هيدروجين [11] أي أن الإنبعاثات الكربونية عالية جدا، والهيدروجين الناتج يسمى بالهيدروجين الرمادي.

### 5.3.I إنتاج الهيدروجين عن طريق الأكسدة الجزئية:

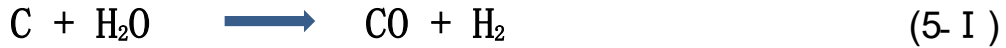
تتم هذه الطريقة بأكسدة جزئية هيدروكربونات من خلال حرق خليط من الوقود والأوكسجين في درجة حرارة تتراوح ما بين 1200 الى 1500 درجة مئوية مع ضغط عالي من 20 إلى 90 بار [12]، و ويتم وفق المعادلة التالية:



و ينتج عن هذا الاحتراق غاز الهيدروجين وثنائي اوكسيد الكربون.

### 6.3.I إنتاج الهيدروجين عن طريق الفحم :

يعد استخلاص هيدروجين عن طريق تغوير الفحم من أقدم الطرق، حيث تتم هذه العملية بتسخين الفحم إلى درجة حرارة تتراوح ما بين 800 إلى 1300 درجة مئوية [13] في أثناء تحكم في كمية الحرارة أو البخار الموجود في التفاعل يتم تحويل الفحم (الكربون) إلى غاز الهيدروجين وغاز أوكسيد الكربون كما هو مبين في المعادلة التالية:



والهيدروجين الناتج بهذه الطريقة تسمى بالهيدروجين الاسود [14].

### 4.I نقل الهيدروجين Transport Hydrogen:

تتم عمليات نقل الهيدروجين وتوزيعه على شكل هيدروجين بعدة طرق مختلفة حيث أنها قيد التطوير والتحسين، أي أنها توجد حاليا طرق الاكثر شيوعا لنقل وتسليم الهيدروجين النقي منها كغاز في الشبكات الانابيب المخصصة وغاز عالي ضغط في مقطورات الانابيب أو كسائل مبرد في الصهاريج، كما يوجد ناقلات بديلة عبر الامونيا والهيدروجين السائل وناقلات الهيدروجين العضوية السائلة (LOHCs) لنقل الهيدروجين بكميات كبيرة ولمسافات بعيدة [15].

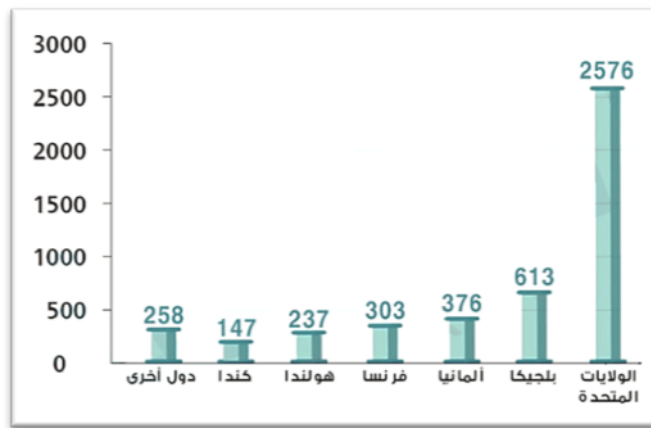
إذ يتم نقل الهيدروجين علي هيئة أمونيا طريقة الامثل نتيجة انخفاض تكاليف النقل، حيث تبلغ تجارة أمونيا 10% من الانتاج العالمي كما أن جاهزية البنية التحتية أكثر من 120 ميناء عالميا ويقدر سوق أمونيا بـ 183 مليون طن سنويا تدعم استخدامها في نقل الهيدروجين [16]، حيث تتميز الامونيا بـ3 مزايا تجعلها حلا أفضل لتصدير الهيدروجين، تصل كثافة طاقة أمونيا إلى 15.6 ميغا جول /لتر مقارنة مع 5.6 ميغا جول /لتر للهيدروجين السائل عند ضغط قيمته 70 ميغا باسكال [17].

للأمونيا الخضراء قدرة علي دفع عملية ازالة الكربون في حد ذاتها من قطاع النقل خاصة الوسائل التي يصعب كهربتها كقطاع الشحن البحري [18].

يعد نقل الهيدروجين باستخدام تقنية ناقلات الهيدروجين العضوية السائلة (LOHC) لمسافات طويلة وتتم هذه الطريقة بدمج غاز الهيدروجين كيميائيا من خلال عملية معالجة التولوين ونقله الي سائل ليتوافق مع البنية التحتية الحالية [19].

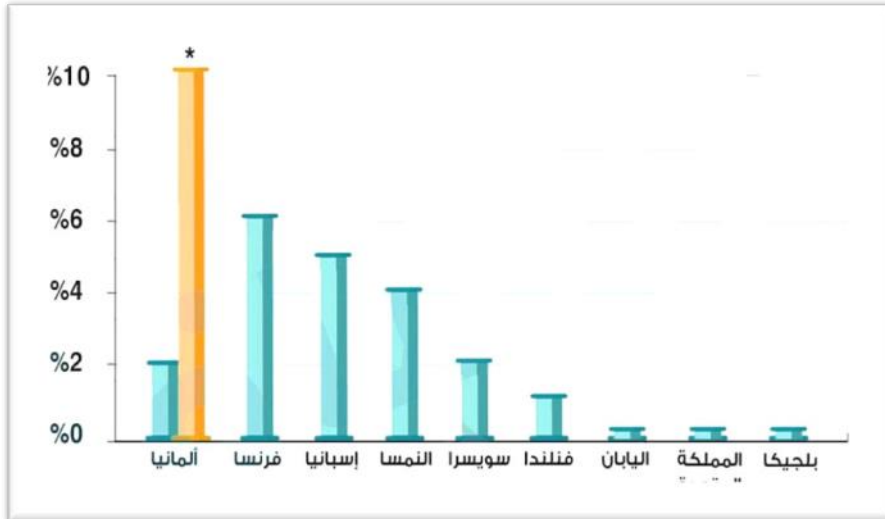
تدرس الجزائر حاليا نقل الهيدروجين وتصديره الي الخارج عبر خطوط الانابيب الغاز الطبيعي من مناطق الانتاج الي مناطق الاستهلاك حيث يعتبر تحديا كبيرا من الناحية الاقتصادية لارتفاع تكلفة نقله الي مسافات طويلة بسبب القيمة المتدنية للطاقة، وذلك باستغلال المقطورات وفي هذه الحالة يمكن نقله إما في حالة السائلة أو الغازية تحت ضغط مرتفع، أو النقل باستخدام الناقلات بعد تحويل الهيدروجين الي أمونيا الي الاسواق البعيدة حيث تعد هذه الطريقة الافضل لنقل كميات كبيرة من الهيدروجين وخاصة أنها قد تستعمل نفسها طريقة تخزين له.

عالميا يوجد شبكات تعمل على نقل وتوزيع الهيدروجين لكن تقتصر على ربط مواقع الانتاج بالقطعات المستهلكة له في مناطق صناعية محددة، وترجع ملكيتها الي شركات منتجة للهيدروجين التي تستخدمها لنقله الي المنشآت الصناعية مصانع البترو كيمياويات وصافي التكرير ويقع أكبر قسم شبكات توزيع ونقل في الولايات المتحدة الامريكية التي تصل مجموع اطوالها الي 2600 كلم، بينما تتوزع شبكات الاخرى في قليل من الدول الاوروبية ويبلغ الطول الاجمالي لشبكات النقل والتوزيع نحو 4510 كلم عالميا [20]، كما يوضح الشكل التالي (3-I) أطوال شبكات نقل هيدروجين عالميا.



الشكل (3-I) : أطوال (بكيلومتر) شبكات نقل الهيدروجين عالميا.

تختص عالميا الشركات المشغلة لشبكات نقل و توزيع الغاز الطبيعي بإنشاء مستوى كمية الهيدروجين فيه وتحقيق المواصفات المطلوبة لبعض القطاعات حيث تتفاوت الدول فيما بينها وفق نسبة الهيدروجين المسموح بها محليا في خليط الغاز، تتراوح النسبة بين 2 و 6 %، حيث تبلغ 10% في ألمانيا لكن في حدود، أي المناطق التي لا توجد فيها محطات للغاز الطبيعي المضغوط المرتبطة بالشبكة [20]، يوضح الشكل (4-I) الحد الاقصى لهيدروجين في شبكات نقل الغاز الطبيعي.



الشكل (4-1) : الحد الأقصى للهيدروجين في شبكات نقل الغاز الطبيعي ببعض الدول.

## 5.I تخزين الهيدروجين Hydrogen Storage:

يعتبر الهيدروجين من أخف العناصر وله وزن جزيئي صغير جدا فإن تسريه من الأنابيب والخزانات سهل إذا أستعمل كوقود للنقل أو لتوليد الطاقة مثلا. وأحد أهداف اقتصاد الهيدروجين هو إيجاد طرق فعالة وقليلة التكلفة لتخزينه وأغلب الأبحاث الحالية تهدف إلى تخزينه علي شكل مادة حاملة للطاقة خفيفة الوزن من أجل تطبيقات مختلفة. وتوجد عدة طرق لتخزين الهيدروجين نذكر منها:

### 1.5.I تخزين الهيدروجين على شكل غاز Gaseous Storage:

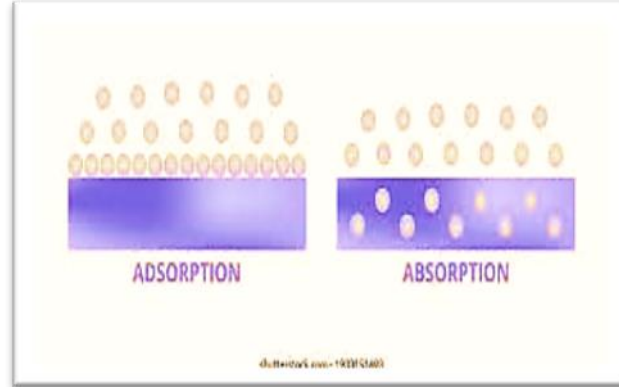
طريقة تخزين هيدروجين على شكل غاز من أبرز التكنولوجيات البسيطة وأكثرها شيوعا وتكون هذه العملية داخل صهاريج أو حاويات وأسطوانات غاز، و قد تم تطوير الصهاريج المركبة الخفيفة الوزن لتحتمل ضغوط تصل إلى 850 bar، تم الوصول وتحقيق أقصى ضغط لتعبئة الحاويات حوالي 1094 bar، وتوجد طريقة أخرى لتخزين الهيدروجين الغازي كالغاز المبرد في درجات حرارة المنخفضة مما يحسن من كثافة الطاقة في الغاز [21].

### 2.5.I تخزين الهيدروجين على شكل سائل Liquid Storage:

تعد طريقة تخزين هيدروجين على شكل سائل مبرد الأكثر استخداما ويتم ذلك في درجة حرارة أقل من الصفر و التي تقدر حوالي بـ  $-253^{\circ}\text{C}$ ، أو تخزينه كمتكون في سوائل أخرى كمحاليل  $\text{NaBH}$  أو سوائل عضوية قابلة للشحن أو أمونيا اللامائية، تقدر كثافة هيدروجين سائل ب  $370.8 \text{ m/kg}$  عند ضغط  $13 \text{ bar}$  وعند وصوله نقطة الحرجة ( $240^{\circ}\text{C}$ ) يبدأ بتغيير طوره من الغاز إلى السائل [22].

### 3.5.I تخزين الهيدروجين علي شكل صلب Solid Storage :

هناك طريقتان لتخزين هيدروجين بالمادة الصلبة على حسب طريقة ارتباطه, كما هو موضح في الشكل (5.I) هما:



الشكل (5-I) : آلية الامتصاص و الامتزاز

### 1.3.5.I. عن طريق الامتزاز Adsorption :

طريقة الامتزاز هي ظاهرة فيزيائية أو كيميائية ناتجة عن تراكم جزيئات أو ذرات المادة الممتصة (هيدروجين) مكونة طبقة جديدة على سطح المادة الصلبة الماصة، فيتم الربط لجميع الذرات مع بعضها البعض وتكون الذرات في قلب المادة محاطة بذرات أخرى يمكن عموماً تثبيت الهيدروجين على معظم الأسطح الصلبة لكن الامتزاز يكون خاصة على الأسطح الكربونية [23].

### 2.3.5.I. عن طريق الامتصاص العكوس Absorption :

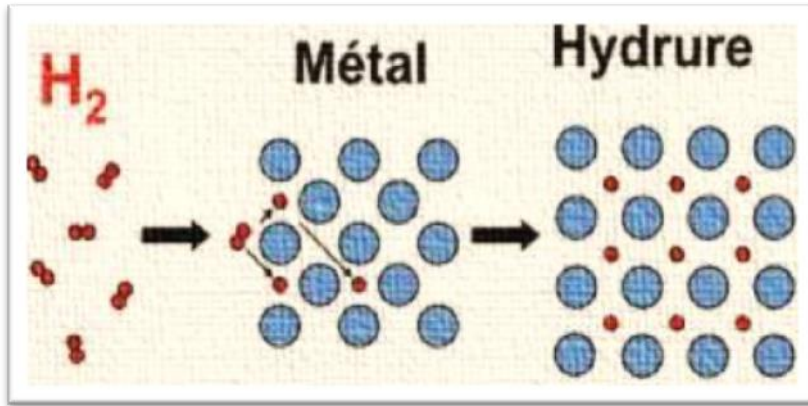
الامتصاص العكوس وهو امتصاص وتحرير الهيدروجين وفق شروط محددة من ضغط ودرجة حرارة حيث يوجد ما لا يقل عن خمسين عنصراً معدنياً في الجدول الدوري يمكنها من تخزين الهيدروجين بهذه الطريقة وتسمى المركبات الناتجة بالهيدريدات. [24]

### 6.I. الهيدريدات Hydrides :

يطلق أسم الهيدريدات علي مركبات كيميائية تحتوي علي هيدروجين وتوجد علي شكل سبائك لها القدرة علي تخزين هيدروجين علي شكل ذرات داخل شبكتها البلورية بدلا من جزيئات في المواقع البينية [22] كما هو مبين في الشكل (6.I)، ويحدث تفاعل بين العنصر والهيدروجين وفق المعادلة التالية :



حيث :

**X**=معامل**M**=معدن

الشكل(6-I) : الهيدروجين في الهيدريدات المعدنية.

تصنف الهيدريدات وفق طبيعة الارتباط الرئيسي [26] بين الهيدروجين والعنصر من مجموعة الجدول الدوري للعناصر :

### 1.6.I الهيدريدات الأيونية Ionic Hydrides :

تتكون الهيدريدات الأيونية نتيجة ارتباط الهيدروجين مع عناصر ذات الكهروسلبية الضعيفة وتمثل العناصر القلوية، حيث يحدث تفاعل مباشر بين الهيدروجين وهذه المعادن لإنتاج هيدريدات هذه العناصر. وهذه الهيدريدات لها درجات انصهار مرتفعة ما بين 300 و700 درجة مئوية [27] ومصهورها يوصل التيار الكهربائي.

### 2.6.I الهيدريدات التساهمية Covalent Hydrides :

تتكون الهيدريدات التساهمية نتيجة ارتباط الهيدروجين مع عناصر ذات الكهرو سلبية العالية وتركيبها  $\text{XH}_{(n)}$  حيث  $(n)$  رقم المجموعة في الجدول الدوري للعناصر. وتمتاز هذه الهيدريدات بأنها لينة ولها درجات منخفضة من حيث الانصهار والغليان والتطاير وعدم القدرة على توصيل التيار الكهربائي [27].

**3.6.I الهيدريدات المعدنية Metal Hydrides:**

يتم امتصاص ذرات الهيدروجين بواسطة معادن نقية و سبائك بعد تسخينه في درجة حرارة وضغط معين فيرتبط بالشبكة البلورية محتلا المواقع البينية الرباعية أو ثمانية الاوجه ومنه يسمح بحدوث تفاعل ماص للحرارة وهو تفاعل عكوس وذلك لامتناسه حرارة، تمتلك الهيدريدات المعدنية عدة خصائص منها [28]:

- كثافة هيدروجينية عالية.
- اللمعان و التوصيل الكهربائي القوي وصلابتها.
- توجد معادن لديها قدرة علي امتصاص واطلاق الهيدروجين في درجة حرارة الغرفة.
- لها خصائص فيزيائية متغيرة .

**4.6.I أنواع هيدريدات المعادن :**

إن عنصر الهيدروجين شديد التفاعل مع غالبية المعادن والمركبات المعدنية تحت ضغط ودرجة حرارة مرتفعة، حيث يتم اختيار العناصر التي لها تقارب أفضل مع الهيدروجين (الهيدريدات المستقرة) ويتم دمجها مع العناصر ذات التقارب المنخفض للهيدروجين (الهيدريدات الغير مستقرة) والمركب الناتج يكون هيدريدا وسطيا ذي خصائص أفضل [29]. في الجدول (2.I) مثلا يحتوي علي بعض عائلات مركبات هيدريدات المعادن وبنيتها.

جدول(2.I) : قائمة انواع مركبات الهيدريدات و البنية البلورية الموافقة لها.

البنية البلورية	مثال	أنواع مركبات الهيدريدات
مكعب CsCl أو CrB	TiFe , ZrNi	AB
سداسي أو مكعب	ZrV <sub>2</sub> , ZrMn <sub>2</sub> , TiMn <sub>2</sub>	AB <sub>2</sub>
سداسي	CeNi <sub>3</sub> , YFe <sub>3</sub>	AB <sub>3</sub>
سداسي	LeNi <sub>5</sub>	AB <sub>5</sub>
مكعب	Mg <sub>2</sub> Ni , Ti <sub>2</sub> Ni	A <sub>2</sub> B
سداسي	Y <sub>2</sub> Ni <sub>7</sub> , Ti <sub>2</sub> Ni	A <sub>2</sub> B <sub>7</sub>

### I. 5.6. هيدريدات عناصر الترابيات النادرة:

تقع سلسلة الترابيات النادرة (اللانثيدات) في المجموعة السادسة في الجدول الدوري تتضمن 17 عنصرا كما مبين في الشكل (7.1) [30]، و هي عناصر سميت قديما "المعادن الترابية النادرة" ولكن مع الوقت أكتشف أن هذه العناصر ليست نادرة إذ أن بعضها أكثر انتشارا في الطبيعة من الرصاص، وقد وسمت قبل بداية القرن التاسع عشر بالندرة وارتفاع ثمنها نظرا لصعوبة استخراجها وتحضيرها، ولم يهتم بها إلا قلة من العلماء. ونظرا لتطبيقاتها المتنوعة تضافرت الجهود تدريجيا وازداد اهتمام علماء بهذه الاتربة من أجل فصلها عن بعضها البعض من جهة وتبيين خواصها الفيزيائية والكيميائية عناصر الترابيات النادرة هي عبارة عن معادن قلوية ثقيلة ناعمة براقعة وتتفاعل كيميائيا.

1	2											13	14	15	16	17	18		
1	H											He							
2	3	4											5	6	7	8	9	10	
	Li	Be											B	C	N	O	F	Ne	
3	11	12											13	14	15	16	17	18	
	Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar	
4	19	20	21	22	23	24	25	26	27	28	29	30	31	32	33	34	35	36	
	K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr	
5	37	38	39	40	41	42	43	44	45	46	47	48	49	50	51	52	53	54	
	Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe	
6	55	56	57	72	73	74	75	76	77	78	79	80	81	82	83	84	85	86	
	Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn	
7	87	88	89	104	105	106	107	108	109	110	111	112	113	114	115	116	117	118	
	Fr	Ra	Ac	Rf	Db	Sg	Bh	Hs	Mt	Ds	Rg	Uub	Uut	Uuq	Uup	Uuh	Uus	Uuo	
6	زمرة اللانثانات			58	59	60	61	62	63	64	65	66	67	68	69	70	71		
7	زمرة الأكتينيدات			90	91	92	93	94	95	96	97	98	99	100	101	102	103		
				Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr		

عناصر الأتربة النادرة

### الشكل (7-I) : الجدول الدوري مع عناصر من المعادن والأتربة النادرة.

يتم تصنيف عناصر الترابيات النادرة وذلك حسب العدد الذري الى خفيفة من اللانثانوم (La) عدده الذري 57 الى الاربيوم (Eu) الذي عدده الذري 63 وتوجد في القشرة الارضية، واخرى ثقيلة من الكادلنيوم (Gd) عدده الذري 64 الى التيتيوم (Lu) والتي تكون داخل وشاح الارض.

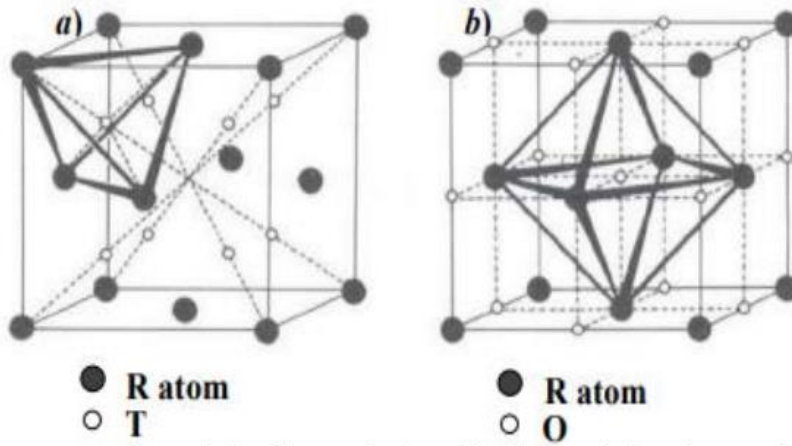
تمتلك ترابيات النادرة العديد من الخصائص الكيميائية المتشابهة ويرجع ذلك بملء المدار 4f بمدراته الفرعية السبعة التي تتسع لـ 14 إلكترونات وإمكانية انتقال الإلكترونات فيما بينها، عناصر الترابيات النادرة بشكل عام هي ثلاثية التكافؤ ولكن توجد بعض العناصر لها تكافؤات أخرى [31].

التركيب البلوري لعناصر الترابيات النادرة هو نظام بلوري سداسي مركز الوسط، معادا السيريوم (Ce) والساماريوم (Sm) والاوروبيوم (Eu) والايتريوم (Yb) فهي تبلور في نظام بلوري سداسي.



تتميز عناصر الترابيات النادرة بأنها معادن براقية شبيهة بالفضة، مرنة، تزداد صلابتها بزيادة العدد الذري وذات قوة مغناطيسية. وتعتبر الصين أكبر منتج لعناصر الترابيات النادرة من الانتاج العالمي وتأتي في المركز الاول لسنة 2022 بعد ما زاد انتاجها من 140 الف طن في عام 2021 الى 168 ألف طن في 2022 كما توجد هذه المعادن في دول أخرى مثل الولايات المتحدة الامريكية استراليا والهند والبرازيل وبعض دول آسيا [32].

يمكن تخزين الهيدروجين بشكل ذرات داخل الشبكة البلورية لعناصر الترابيات النادرة في الفراغات المواقع البينية الرباعية أو ثمانية الأوجه تتشكل هيدريدات الترابيات النادرة كما هو موضح في الشكل (8-I) تحت درجة حرارة وضغط معين حيث يحدث تفاعل بين العنصر والهيدروجين تتشكل هيدريدات قياسية (RHy) أو هيدريدات غير قياسية ( $0 < y < 3$ ) [33].



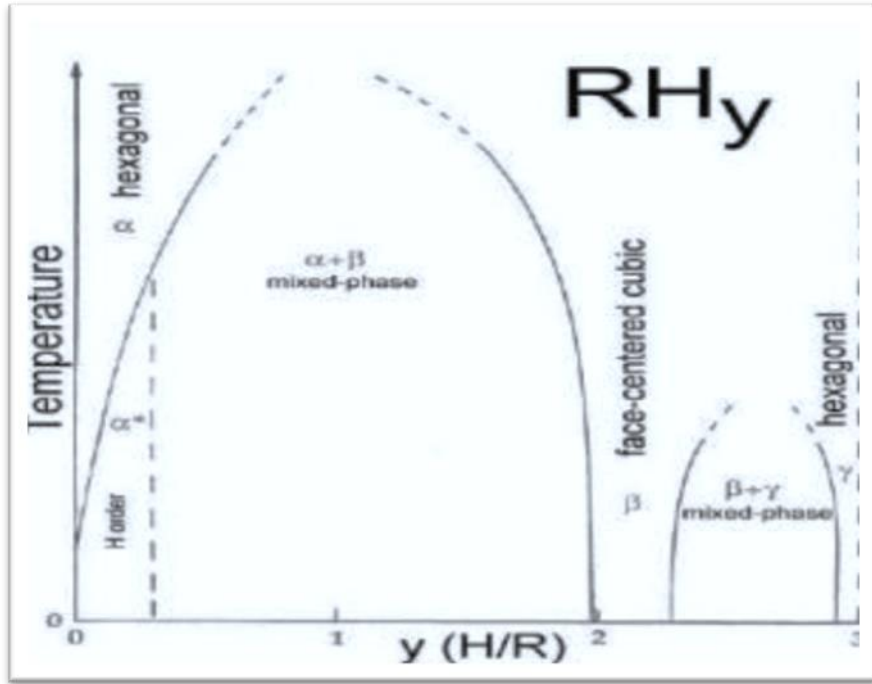
الشكل (8-I) : المواقع البينية الرباعية والثمانية الوجوه للبنية المكعبة ممرزة الوجوه a (مواقع بينية رباعية الوجوه و bمواقع بينية ثمانية الوجوه)

تشكل هيدريدات ترابيات النادرة من ثلاثة أطوار رئيسية بنى مختلفة كما يوضحه الشكل (9-I) [34]:

**طور  $\alpha$** : تتشكل ذرات الترابيات النادرة (R) شبكة سداسية الشكل وتشغل ذرات الهيدروجين المواقع البينية رباعية السطوح (T) بتراكيز منخفضة ( $y < 0.1$ )، اذ يمثل هذا الطور محلول صلب.

**طور  $\beta$**  : هذا الطور يمثل تشكل ذرات الترابيات النادرة الشبكة البلورية المكعبة الممرزة الاوجه (FCC) في أثناء أن الهيدروجين يملأ المواقع البينية رباعية السطوح لهذه الشبكة، ويسمى بنثائي الهيدريد  $RH_2$ .

**طور  $\gamma$**  : في هذا الطور الهيدروجين يشغل كل المواقع البينية (الرباعية وثمانية الاوجه) وتكون ذرات المعدن شبكة سداسية حيث يعتبر هذا الطور ثلاثي الهيدريد [35].



الشكل(9-1) : يمثل مخطط اطوار في هيدريدات ترابييات النادرة.

الخلاصة :

تعرفنا من خلال هذا الفصل على الهيدروجين وأنواعه وطرق نقله وتخزينه في حالاته (الصلبة والسائلة والغازية)، كما تعرفنا على أنواع هيدريدات المعادن والترايبات النادرة التي لديها القدرة على تخزين الهيدروجين تحت ظروف معتدلة من درجة حرارة والضغط.

## قائمة المراجع:

- [1] Megret, O., Hubert, L., Calbry, M., Trably, E., Carrère, H., Garcia-Bernet, D., & Bernet, N. (2015). Production d'hydrogène à partir de déchets: Etat de l'art et potentiel d'émergence (Doctoral dissertation, Réseau Coopératif de Recherche sur les Déchets et l'Environnement).
- [2] Zohuri, Bahman. "Hydrogen energy." *Cryogenics and Liquid Hydrogen Storage: Challenges and Solutions for a Cleaner Future*; Springer: New York, NY, USA (2019): 121-139.
- [3] Krebs, Robert E. *The history and use of our earth's chemical elements: a reference guide*. Greenwood Publishing Group, 2006.
- [4] Hoffmann, Peter. *Tomorrow's Energy, revised and expanded edition: Hydrogen, Fuel Cells, and the Prospects for a Cleaner Planet*. MIT press, 2012
- [5] Souers, P. Clark. *Hydrogen properties for fusion energy*. Univ of California Press, 1986.
- [6] سمير سعدون مصطفى، بلاد عبد الله ناصر، محمود خضر سليمان. كتاب الطاقة البديلة مصادرها وإستخدامها. دار اليازوري العلمية. (2012).
- [7] Arcos, Jose M. Marín, and Diogo MF Santos. "The Hydrogen Color Spectrum: Techno-Economic Analysis of the Available Technologies for Hydrogen Production." *Gases* 3.1 (2023): 25-46.
- [8] Nikolaidis, Pavlos, and Andreas Poullikkas. "A comparative overview of hydrogen production processes." *Renewable and sustainable energy reviews* 67 (2017): 597-611.
- [9] McCay, Mary Helen, and Shahin Shafiee. "Hydrogen: An energy carrier." *Future Energy*(Third Edition). Elsevier, 2020. 475-493.
- [10] Chau, Kevin, Abdoulaye Djire, and Faisal Khan. "Review and analysis of the hydrogen production technologies from a safety perspective." *International Journal of Hydrogen Energy* 47.29 (2022): 13990-14007.
- [11] Howarth, Robert W., and Mark Z. Jacobson. "How green is blue hydrogen?." *Energy Science & Engineering* 9.10 (2021): 1676-1687.
- [12] Kumar, Shashi, Surendra Kumar, and Jitendra K. Prajapati. "Hydrogen production by partial oxidation of methane: modeling and simulation." *International Journal of Hydrogen Energy* 34.16 (2009): 6655-6668.
- [13] Yürüm, Y. "Hydrogen production methods." *NATO ASI SERIES E APPLIED SCIENCES* 295 (1995): 15-15.
- [14] Ji, M.; Wang, J. Review and comparison of various hydrogen production methods based on costs and life cycle impact assessment.

- [15] Zhang, Tongtong, et al. "Hydrogen liquefaction and storage: Recent progress and perspectives." *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 176 (2023): 113204.
- [16] Saygin, Deger, et al. "Ammonia Production from Clean Hydrogen and the Implications for Global Natural Gas Demand." *Sustainability* 15.2 (2023): 1623.
- [17] Kurien, Caneon, and Mayank Mittal. "Utilization of green ammonia as a hydrogen energy carrier for decarbonization in spark ignition engines." *International Journal of Hydrogen Energy* (2023).
- [18] Egerer, Jonas, et al. "The economics of global green ammonia trade—"Shipping Australian wind and sunshine to Germany".*" Applied Energy* 334 (2023): 120662.
- [19] Niermann, Matthias, et al. "Liquid organic hydrogen carriers (LOHCs)—techno-economic analysis of LOHCs in a defined process chain." *Energy & Environmental Science* 12.1 (2019): 290-307.
- [20] d'Amore-Domenech, Rafael, et al. "On the bulk transport of green hydrogen at sea: Comparison between submarine pipeline and compressed and liquefied transport by ship." *Energy* (2023): 126621.
- [21] Tzimas, Evangelos, et al. "Hydrogen storage: state-of-the and future perspective." *EU Commission, JRC Petten, EUR 20995EN* (2003).
- [22] Züttel, Andreas. "Hydrogen storage methods." *Naturwissenschaften* 91 (2004): 157-172.
- [23] Zhou, Li. "Progress and problems in hydrogen storage methods." *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 9.4 (2005): 395-408.
- [24] Franzky, Shannon. "High-pressure 825 bar hydrogen storage." *Fuel Cells Bulletin* 2002.9 (2002): 9-10.
- [25] M. M. H. Bhuiya, A. Kumar, K. J. Kim. *Int. J. Hydrogen Energy* 40, 2231 (2015).
- [26] A. W. C. Van den Berg and C. O. Areán. *Chem. Commu.* 6, 668 (2008).
- [27] Dematteis, Erika Michela, et al. "Hydrogen storage in complex hydrides: past activities and new trends." *Progress in Energy* 4.3 (2022): 032009
- [28] Von Colbe, Jose Bellosta, et al. "Application of hydrides in hydrogen storage and compression: Achievements, outlook and perspectives." *international journal of hydrogen energy* 44.15 (2019): 7780-7808.
- [29] Mostafa Tazi 'Modification du banc d'essai utilisé pour évaluer les performances d'un réservoir d'hydrogène à base d'hydruure métallique 'L'UNIVERSITÉ DU QUÉBEC À TROIS-RIVIÈRES 'Avril 2009.

[30] عبد المجيد البلخي كيميائ المعادن الانتقالية الكيمياء اللاعضوية 3 جامعة دمشق (1993).

- 
- [31] Hoshino, M., K. Sanematsu, and Y. Watanabe. "REE mineralogy and resources." Handbook on the physics and chemistry of Rare Earths 49 (2016): 129-291.
- [32] Ganguli, Rajive, and Douglas R. Cook. "Rare earths: A review of the landscape." MRS Energy & Sustainability 5 (2018).
- [33] M. M. H. Bhuiya, A. Kumar, K. J. Kim. Int. J. Hydrogen Energy 40, 2231 (2015).
- [34] A. Boukraa., Thèse de doctorat, université d'Orsay, France, (1994).
- [35] H. Shaked, Westlake D. G. n Faber J., Mueller M. H. et Jr., Phys. Rev. B, Vol. 30, No. 1, (1984).

**الفصل الثاني:**  
**عموميات على التعلم الآلي**

## 1.11 المقدمة:

يشهد العالم تطور تكنولوجيا في مختلف مجالات الحياة، منها التعلم الآلي حيث أصبح في عصرنا الحالي جزء من حياة البشرية و الانسانية وإذ أنه يعد فرع من الذكاء الاصطناعي أي جعله محاكات للذكاء البشري، حيث يهدف هذا الي تطوير علم الكمبيوتر والانظمة الذكية للتعلم والتكيف بشكل ذاتي من خلال تطبيق البيانات (بيانات التدريب) حيث يعتمد علي تقنيات إحصائية الذكاء الاصطناعي وهو يمثل الجزء الاساسي من الذكاء الاصطناعي المعتمد علي البيانات .

يركز التعلم الآلي علي قدرة الحاسوب على الاستدلال بشكل ذاتي انطلاقا من البيانات المتوفرة وذلك باستخدام الخوارزميات والموديلات الرياضية يتم تعلم النماذج والمفاهيم منها واستخدامها لاتخاذ القرارات والتوقعات القائمة على المعرفة المستفادة، أي هو مجموعة من التقنيات والادوات المستخدمة في الحوسبة الذكية لتدريب الحواسيب علي القيام بالمهام والتنبؤات واتخاذ القرارات [1]، ويدخل في عدة مجالات مثل الطب والتمويل والتسويق والفيزياء ومن دوافعه اختصار الوقت لظاهر معينة ما أو تقليل من القدرات الحسابية.

## 2.11 مقدمة تاريخية عن الذكاء الاصطناعي :

لقد مر الذكاء الاصطناعي بعدة مراحل منذ بدايته الي يومنا هذا و أول من جاء بفكرة الذكاء الاصطناعي العالم الرياضيات ورائد الحاسوب البريطاني الآن تورينج (alan turin) أعلن عنها في عام 1950، في وقت ما يكون هناك آلة يمكنها مضاهاة الذكاء البشري، حيث اخترع اختبار إذا اجتازه الجهاز يصنف الي أنه ذكي وكان الاختبار عبارة عن مجموعة أجهزة يطرح من قبل شخص يعلم بالحكم وتوجه لشخص آخر في آن واحد، اذا نجح الحاسوب منه يستطيع السائل من تمييز الآلة عن الشخص بالإجابات [2]، تم اقتراح الذكاء الاصطناعي رسميا و ذلك بتصميم أجهزة حاسوب ذكية ماثلة للذكاء البشري والذي تتكون شبكة من خلايا عصبية

(network of neurons).

تم تطوير أول شبكة اصطناعية في 1954 وفي أوائل العقد الاول من القرن الحادي والعشرون كانت هذه الشبكات العصبية لديها قدرة على تنفيذ المهام بما فيها التعرف على الوجوه والاشياء الاخرى من البيانات ومنها تحقيق نظام قوي [2].

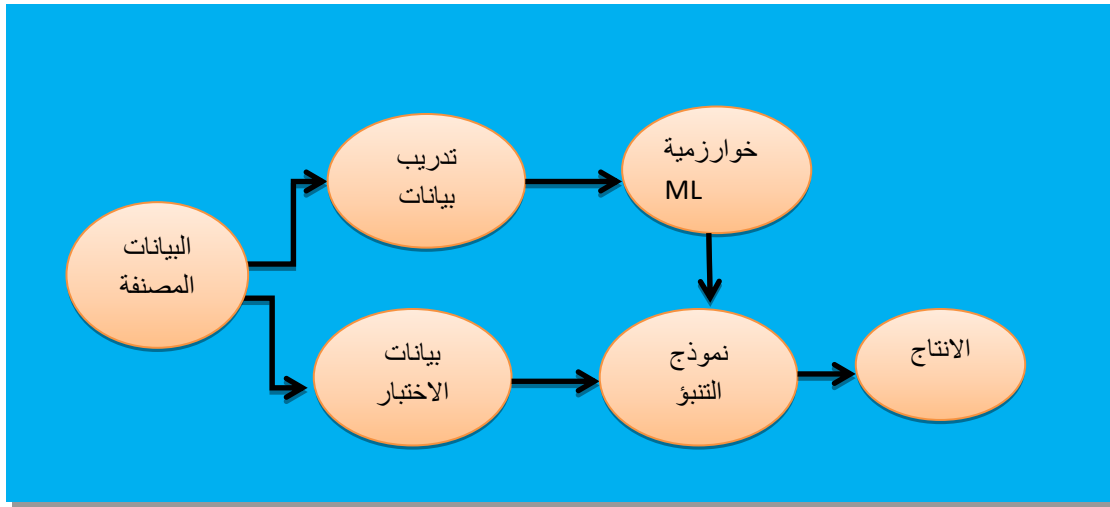
اطلق مصطلح الذكاء الاصطناعي في 1956 حيث أصبح الاكثر انتشارا وذلك بسبب زيادة حجم البيانات والتحسينات في طاقة الحوسبة والتخزين، وفي التسعينات من القرن الماضي اهتمت وزارة الدفاع الامريكية في تدريب أجهزة الكمبيوتر علي محاكاة المنطق الانساني [3].



## 3.II تعريف الذكاء الاصطناعي Definitions of Artificial Intelligence

هي تكنولوجيا حديثة تستعمل من أجل محاكات الآلات والبرامج الحاسوبية للذكاء البشري وتمدها بالقدرة على التعلم وذلك يعتبر من أهم فوائد هذه التقنيات في تقديم الكثير من الوقت والجهد.

ويتطلب تصنيع الآلات مرتبطة بالذكاء الاصطناعي الى متخصصين وتقنيات عالية جدا، حيث يواجه المبرمجون مشاكل لتطبيق الذكاء الاصطناعي وتتضمن برجة أجهزة الكمبيوتر لبعض السمات كالتعلم، التخطيط، النطق، حل المشاكل والقدرة على تحريك الاشياء وغيرها.



الشكل (1-II) : البنية الأساسية للتعلم الخاضع للإشراف.

## 4.II أنواع الذكاء الاصطناعي :

ينقسم الذكاء الاصطناعي الى ثلاثة أقسام رئيسية وفق ما يتمتع به من قدرات تبدأ من رد فعل البسيط الى الإدراك التفاعل الذاتي :

### II-4-1- التعلم تحت الاشراف Supervised Learning :

التعلم الخاضع للإشراف هي أحد الفئات الرئيسية في تعلم الآلة، في خوارزميات التعلم الآلي ML في كل حالة لمجموعة بيانات معينة يتم تمثيله باستخدام نفس مجموعة الميزات، يمكن أن تكون هذه الميزات ثنائية أو قاطعة أو مستمرة بطبيعتها إذا تم تصنيف الحالات، فإن هذا النوع من التعلم يسمى التعلم الخاضع للإشراف [5]، يتضمن التعلم الخاضع للإشراف تدريب النموذج على البيانات المصنفة واختبارها على البيانات غير مسماة تبدأ هندستها المعمارية الأساسية بجمع مجموعة بيانات، ومن ثم يتم

تقسيم مجموعة البيانات الى بيانات اختبار وتدريب وبعد ذلك تتم معالجة البيانات مسبقا يتم ادخال الميزات المستخرجة في خوارزمية ثم يتم تدريب النموذج علي تعلم الميزات المرتبطة بكل ميزة، أخيرا يتم تزويد النموذج ببيانات الاختبار ويقوم النموذج المذكور بعمل تنبؤات على بيانات الاختبار من خلال توفير التسميات المتوقعة [5] كما هو موضح في الشكل (1.II) البنية الاساسية للتعلم الخاضع للإشراف:

ويمكن تصنيف التعلم الخاضع للإشراف عن النحو التالي :

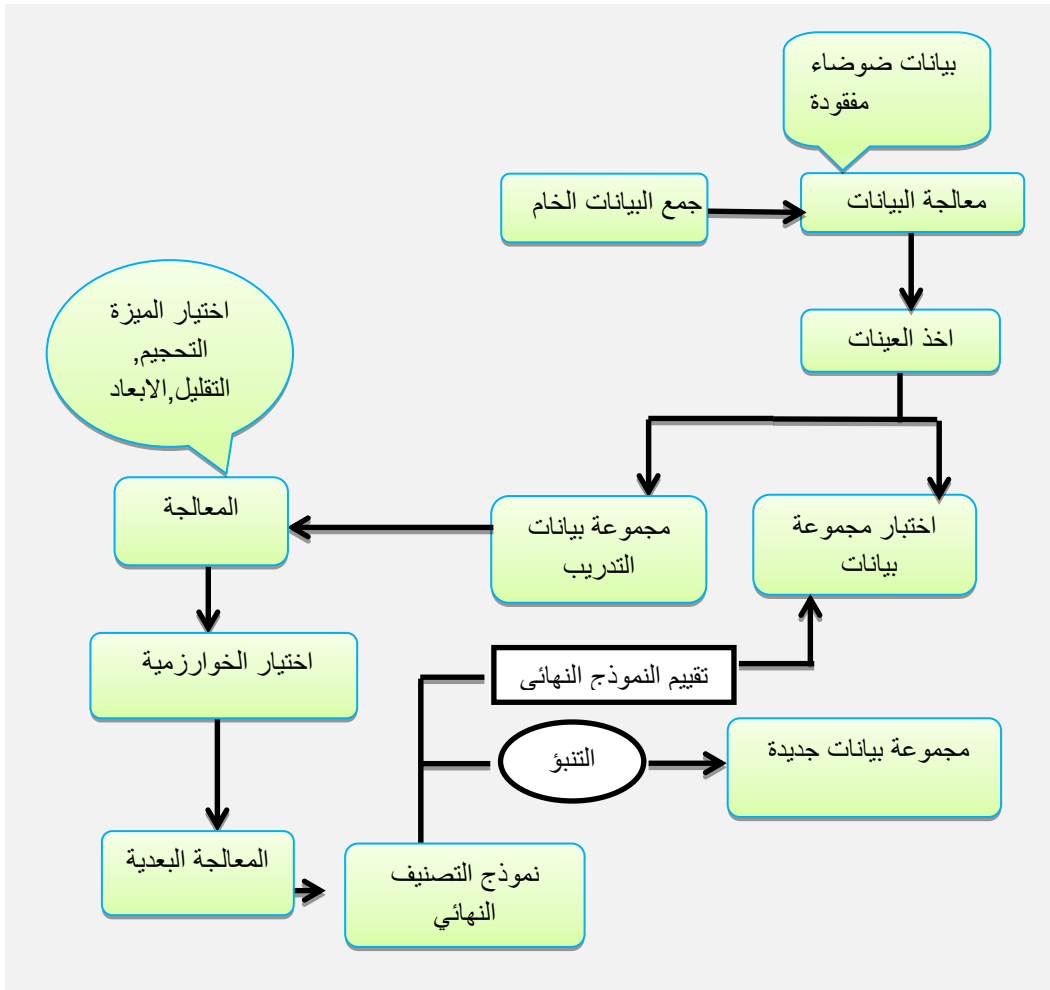
## II-4-1-1-التصنيف classification:

في التصنيف يتنبأ النموذج بقيمة غير معروفة (مجموعة المخرجات) بناء علي المجموعة من القيم المعروف (مجموعة من المدخلات) [5]، عندما يكون الناتج في شكل فئوي يشار إلى المشكلة على أنها تصنيف واحد [6]، بشكل عام في التصنيف يتم تصنيف مثيلات مجموعة بيانات وفقا للفئات المحددة، يمكن تطبيق التصنيف على مجموعات بيانات المهيكلة وغير المهيكلة بعض المصطلحات المستخدمة في التصنيف هي: وضع التصنيف، تصنيف الخوارزمية والميزة، تتعلم خوارزمية التصنيف التي يشار إليها بدلا من ذلك باسم مصنف، من مجموعة بيانات تدريب وتعين كل نقطة بيانات جديدة الى فئة معينة. في المقارنة يستخدم نموذج التصنيف وظيفة رسم الخرائط، والتي يتم استنتاجها من خلال النموذج المذكور من مجموعة بيانات تدريب للتنبؤ بتسمية الفئة لبيانات الاختبار أخيرا.

تم توضيح عملية التصنيف في الشكل التالي (2.II) جمع البيانات والمعالجة المسبقة هي الخطوات الاولى في بناء نموذج التصنيف. المعالجة المسبقة هي عملية تنقية البيانات عن طريق التخلص من الضوضاء والتكرارات. تستخدم العديد من التقنيات لمعالجة البيانات مسبقا. من بينها "القوة الغاشمة" هي ابسط التقنيات والأكثر شيوعا، ثم يتم تقسيم البيانات الى مجموعات تدريب واختبار باستخدام تقنية التحقق المتبادل. المرحلة التالية هي تدريب النموذج باستخدام تسميات الفصل في Python، تحتوي حزمة scikitLearn علي وظيفة تسمى "تحويل المناسب (X,Y)" التي تحدد X(بيانات الادخال) إلى Y (المصنقات) لغرض إعداد المصنف. الخطوة الثالثة هي التنبؤ بفئة مجموعة البيانات الجديدة أو تسميتها أخيرا، يتم تقييم خوارزمية التصنيف باستخدام بيانات الاختبار.

هناك نوعان من التصنيف: ثنائي ومتعدد التصنيف [6] يتم استخدام التصنيف الثنائي عندما تكون النتيجة ثنائية أو

تتكون من فئتين علي سبيل المثال في عملية الكشف عن الغموض يتنبأ النموذج بما إذا كانت الجمل غامضة أو لا ونتيجة لذلك هناك نوعان فقط من النتائج الفئات المحتملة، يشار إلى هذا باسم التصنيف الثنائي ومع ذلك فإن التصنيف متعدد العلامات يتكون من توزيع الفئات.

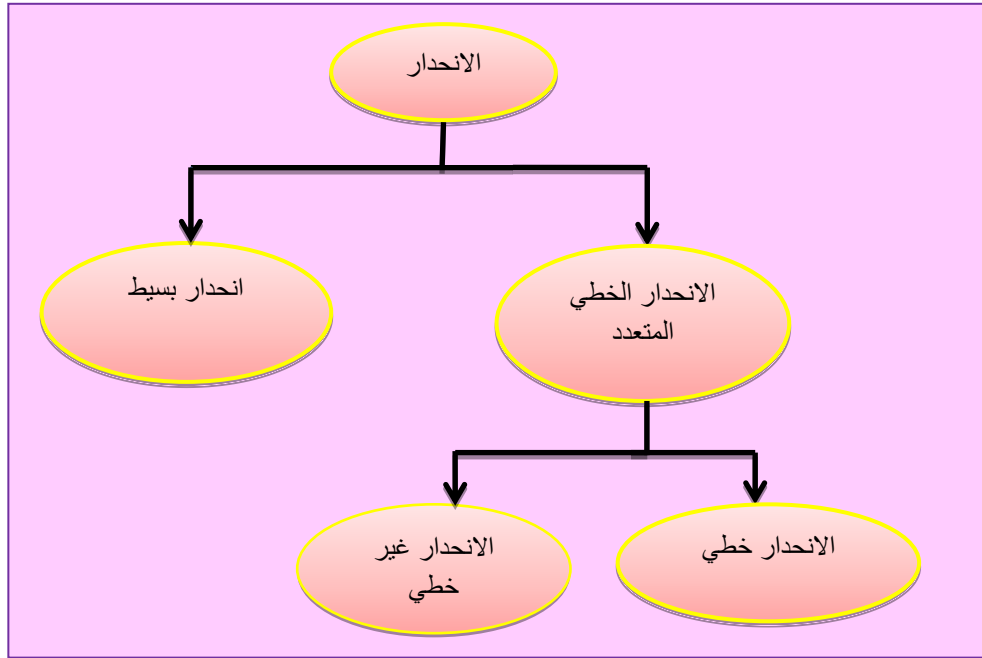


الشكل(II-2) : سير عمل التصنيف في التعلم الخاضع للإشراف

## II 2-1-4- الانحدار: regression

الانحدار هو أسلوب تعلم خاضع للإشراف يسمح باكتشاف الارتباطات بين المتغيرات والتنبؤ بالقيم المستمرة بناء على هذه المتغيرات عندما يكون الناتج مستمرا يشار الي المشكلة على انها انحدار [6] واحد.

التصنيف هو عملية التنبؤ بالتسميات المنفصلة للمداخلات حيث من جهة اخرى يهتم الانحدار بالتنبؤ بالقيم المستمرة وينقسم الانحدار إلى فئتين رئيسيتين: خطي بسيط متعدد كما هو موضح في الشكل(II.3) الانحدار الخطي البسيط يتم رسم خط مستقيم لتحديد العلاقة بين المتغيرين (Y و X) في المقابل يشمل الانحدار متغيرات متعددة وينقسم كذلك الي خطي وغير خطي.



الشكل(II-3) : أنواع الانحدار.

## II 2-4-2 تعلم غير خاضع للإشراف Unsupervised :

يحدث التعلم غير خاضع للإشراف في التعلم الآلي عندما لا يكون هناك تسمية للبيانات أو تصنيف لها. تتمثل المهمة في فرز المعلومات غير المجمعة وفقا لأوجه التشابه والاختلاف التي لا توجد طريق، بمعنى آخر يجب أن تجد الآلة أنماطا وهيكل مخفية في الملفات البيانات غير مسماة، لهذا يطلق عليه اسم غير خاضع للإشراف، لأنه لا يوجد دليل لتعليم الآلة ما الذي تبحث عنه، ولكن يمكنها فرز البيانات والعثور على نماذج مستقلة ومقنعة.

### 3.4.II التجميع Clustering :

التجميع هو عملية تخصص عينات البيانات لعدد محدد من المجموعات بحيث يكون لنقاط البيانات التي تنتمي إلى المجموعة (العنقود) خصائص متشابهة، بعبارات أبسط لا تعد المجموعات أكثر من تجميع نقاط البيانات بحيث تكون المسافة بين النقاط البيانات داخل المجموعات في حدها الأدنى، الهدف من تحليل المجموعة (من الناحية المثالية) هو العثور على مجموعات التي تكون فيها العينات داخل كل مجموعة متساوية تماما، بينما تختلف كل مجموعة عن بعضها البعض [7].

## 5.II التعلم المعزز Reinforcement Learning :

التعليم المعزز يحل المشكلة بشكل مختلف، يعتمد التعلم المعزز على التفاعل مع البيئة، تتعلم الخوارزمية التفاعل مع البيئة ومن خلال آلية التغذية الراجعة والتجارب السابقة، يسعى إلى حل المشكلات بنفس الطريقة التي يمثل بها البشر في الحياة، وتتعلم

كيفية تصحيح السلوك على الوجود أو غياب المكافآت، الهدف هو العثور على سلسلة من النماذج العمل التي تم اختبارها ومقارنتها بجميع أنواعها، هذا النوع غير مطلوب من التعلم مجموعة بيانات تعليمية بمعنى آخر، إنه ليس تعلمًا خاضع للإشراف ولا تعلمًا غير خاضع للإشراف [8].

يقصد به أن الخوارزمية تتعلم من تلقاء نفسها ومن أخطائها.

## 6.II. آلة المتجهات الداعمة Support Vector Machine :

آلة المتجهات الداعمة هي إحدى الخوارزميات تعلم الآلة وهي نماذج تعلم خاضعة للإشراف مع خوارزميات التعلم المرتبطة والتي تحلل البيانات من أجل التصنيف والتي يرمز لها عادة بـ SVM. وهي عبارة عن أسلوب يجمع بين النظرية الاحصائية والتعليم الموجه، طورت من قبل الباحث فابنيك vapnik عام 1998. تعتمد خوارزمية آلة المتجهات الداعمة على فكرة تحويل البيانات إلى نمط جديد بشكل يميز البيانات في فضاء أعلى من فضاءها حيث يمكننا من خلاله فصل البيانات وتصنيفها [9].

## 7.II. وظائف النواة Kernel Functions:

تستخدم مجموعة من التقنيات المعروفة باسم طرق kernel في التعلم الآلي لمعالجة التصنيف والانحدار ومشكلات التنبؤ الأخرى. لقد تم بناؤها حول فكرة النواة، وهي وظائف تقيس مدى تشابه نقطتي بيانات مع بعضهما البعض في مساحة مميزة عالية الأبعاد.

تُستخدم الفرضية الأساسية لطرق Kernel لتحويل بيانات الإدخال إلى مساحة مميزة عالية الأبعاد، مما يجعل من الأسهل التمييز بين الفئات أو إنشاء تنبؤات. تستخدم طرق Kernel وظيفة kernel لتعيين البيانات ضمنياً في مساحة المميزة، بدلاً من حساب مساحة المميزة يدوياً [10].

## 1.7.II. النواة الخطية Linear Kernel:

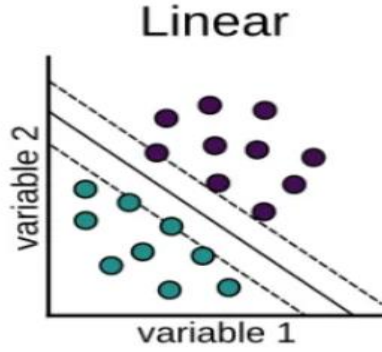
النواة الخطية هي نوع من وظيفة النواة المستخدمة في التعلم الآلي، بما في ذلك SVMs آلة المتجهات الداعمة Support Vector Machine، إنها أبسط دالة نواة وأكثرها استخداماً، ويحدد حاصل الضرب النقطي بين متجهات الإدخال في مساحة المميزة الأصلية [11].

يمكن تعريف النواة الخطية على النحو التالي:

$$k(x, x') = (x, x') \quad (1. II)$$

حيث  $x'$  هي قيمة متنبأ بها و  $x$  هي قيمة حقيقة [8].

عند استخدام نواة خطية في SVM، فإن حدود القرار هي مستوى خطي مفترط يفصل بين الفئات المختلفة في مساحة الميزة. يمكن أن تكون هذه الحدود الخطية مفيدة عندما تكون البيانات قابلة للفصل بالفعل عن طريق حدود القرار الخطي أو عند التعامل مع البيانات عالية الأبعاد، حيث قد يؤدي استخدام وظائف النواة الأكثر تعقيداً إلى التخصيص الزائد، كما موضحة في الشكل (4.II) [11].



الشكل (4-II) : يوضح نواة دالة الخطية.

## II-7-2- نواة متعددة الحدود Polynomial Kernel:

نواة دالة متعددة الحدود هي نوع من وظيفة النواة المستخدمة في التعلم الآلي مثل (SVM) آلة المتجهات الداعمة Support Vector Machine إنها دالة نواة غير خطية تستخدم وظائف متعددة الحدود لنقل بيانات الإدخال إلى مساحة مميزة ذات أبعاد أعلى [11]. تعريف واحد للنواة كثير الحدود هو:

$$k = (x, x') = (x, x')^d \quad (2. II)$$

حيث:  $x$  هي قيمة حقيقية و  $x'$  هي قيمة متنبأ بها و  $d$  هي درجة كثيرة الحدود. [8]

## II.3.7 نواة غاوس (RBF) Kernels Gaussian or Radial Basis Function:

نواة دالة الاساس الشعاعي RBF (Gaussian or Radial Basis Function) هي دالة نواة شائعة تستخدم في التعلم الآلي لا سيما في آلة متجهات الداعمة (Kernels Support Vector Machines). وهي دالة نواة غير خطية ترسم بيانات الإدخال إلى مساحة مميزة ذات أبعاد أعلى باستخدام دالة غاوسي [11].

حيث تعطى نواة دالة الاساس الشعاعي RBF (Gaussian or Radial Basis Function) تعرف بالعلاقة التالية:

$$k(x_i, x_j) = \exp(-\gamma \|x_i - x_j\|^2) \quad (3. II)$$

حيث  $\gamma > 0$ , وفي بعض الاحيان تعرف  $\gamma$  ب:

$$\gamma = 1/2\sigma^2$$

و  $\|xi - xj\|^2$  هي Euclidean distance المسافة الاقليدية التربيعية بين مصفوفتين من الخصائص [8]

## II-7-4- نواة السيبي sigmoid :

تعمل دالة نواة السيبي (sigmoid) على تحويل مدخلاتها، والتي تمكن القيم في المجال، إلى مخرجات تقع على الفاصل الزمني (0,1) لهذا السبب غالباً ما يطلق علي دالة نواة السيبي (sigmoid) دالة سحق squashing function إنه يسحق أي إدخال في النطاق (-inf,inf) إلى بعض القيمة في النطاق (0,1)[11]:

$$\text{sigmoid}(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)} \quad (4.II)$$

حيث تعتبر  $x$  في التعلم الآلي بشكل عام مجموعاً مرجحاً [8].

## II-8- انحدار متجه الداعم support vector regression :

تعد خوارزمية التعلم الآلي لتحليل الانحدار (Support Vector Regression)، والتي تتضمن التنبؤ بالقيم العددية المستمرة ويرمز لها عادة ب SVR.

من خلال خوارزمية انحدار متجه الداعم، فإن الهدف هو ملائمة خط الانحدار الذي يفصل البيانات بشكل أفضل إلى فئتين، حيث تمثل إحدى الفئات المتغير المستهدف بينما تمثل الفئة الأخرى الأخطاء المتبقية. يمثل خط الانحدار هذا المستوى الفائق الذي يزيد الهامش بين المتغير الهدف و الأخطاء المتبقية. يتم تعريف الهامش على أنه المسافة بين المستوى الفائق وأقرب نقاط بيانات، تسمى متجهات الدعم. التعامل مع العلاقات غير خطية بين المتغيرات المستقلة والتابعة، يمكنها أيضاً التعامل مع القيم المتطرفة بشكل فعال [12].

## II.9. عملية التدريب Training process :

التحدي الرئيسي في التعلم الآلي هو اننا يجب أن نكون جيدين مع الادخالات الجديدة وليس فقط تلك التي دربنا نموذجنا عليها وبطبيعة الحال، يطلق على المدخلات التي لم يتم مراعاتها حتى الآن اسم التعميم.

عادة أثناء تدريب نموذج التعلم الآلي، يمكننا الوصول الى مجموعة التدريب ويمكننا حساب مقياس خطأ في مجموعة التدريب يسمى خطأ التدريب [13].



قبل بدء عملية التدريب، عادة تقسم البيانات إلى مجموعة تدريب ومجموعة اختبار. يتم استخدام مجموعة التدريب في تدريب النموذج، هذه المجموعة هي التي يتعلم منها النموذج. مجموعة اختبار هي مجموعة عشوائية لا تقدم الى النموذج أثناء التقييم.

بعد تدريب النموذج المعتمد بنجاح، يتم استخدام النموذج لإجراء تنبؤات من البيانات في مجموعة الاختبار. تستخدم هذه التنبؤات لحساب مقاييس التقييم. يوصى بالتأكد من أن جميع الاهداف ممثلة بشكل كاف في مجموعة التدريب ومجموعة الاختبار.

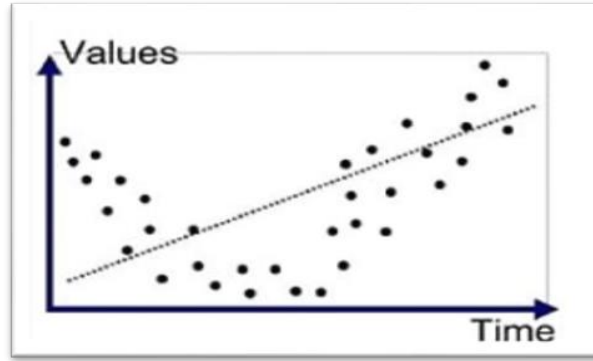
عادة ما يتم تقسيم البيانات بطريقتين وهو:

بطريقة تلقائية: حيث يقسم النظام البيانات ذات العلامات بين مجموعة التدريب والاختبار وفقا للنسب المئوية المختارة. النسبة المئوية الموصى بها للتقسيم هي 80% للتدريب و20% للاختبار.

بطريقة يدوية: يمكن هذا الأسلوب المستخدمين من تحديد التعبيرات التي يجب أن تنتمي إلى المجموعة [14].

## 10.II. الضبط الناقص Underfitting:

يحدث هذا عندما يفشل التعلم الآلي في تعلم بيانات التدريب بشكل صحيح (دقة منخفضة) بعض أسباب عدم التطابق ما يحدث في الشبكات العصبية هو وجود نموذج صغير أو استخدام مجموعة بيانات نموذجية خطية (خصائص مجموعة البيانات معقدة) سبب آخر هو بيانات الصاخبة (تحتوي على ملصقات غير صحيحة). كما هو موضح في الشكل (5.II) [15].

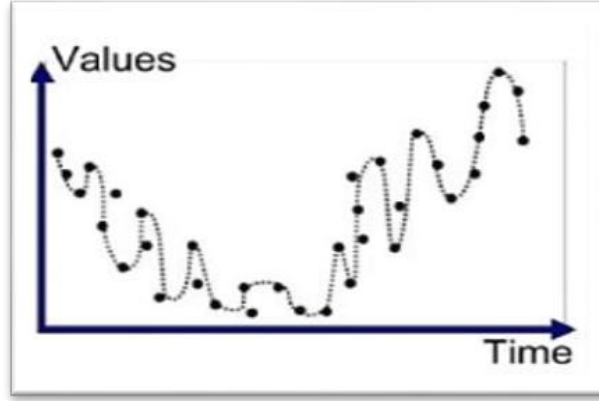


الشكل (5-II) : الضبط الناقص.

## 11.II. الضبط الزائد (الملائمة الزائدة) Over-fitting:

في هذه الحالة يوفر نموذج التعلم الآلي دقة التنبؤ عالية على بيانات التدريب، كما هو موضح في الشكل (6.II) لكن دقة التنبؤ تقل مع اختبار النموذج على بيانات غير منشورة (البيانات غير موجودة أثناء التدريب)، مصطلح آخر يستخدم

لوصف المبالغة في التركيب هو "خطأ في التعميم" المبالغة في التدريب عندما يكون النموذج قريبا من بيانات التدريب على البيانات ليست كلها خيارات مدخلات. يجب أن يتمتع النموذج الجيد بدقة تدريب جيدة وبيانات أخرى، بعبارة أخرى (يجب أن يكون الأمر كذلك يمكن تعميمه)، السبب الرئيسي للإفراط في التعلم هو أيضا استخدام نموذج كبير (مستويات كثيرة جدا) لمجموعة بيانات صغيرة [15].



الشكل (II-6) : الضبط الزائد.

#### الخلاصة :

تعرفنا في هذا الفصل على التعلم الآلي وأقسامه وايضا العديد من التقنيات التي نحتاجها لبناء نموذج التنبؤ الخاص بنا، وطريقة دمج مجموعة البيانات لتدريب نموذج التعلم الآلي. وتطرقنا أيضا إلى خوارزمية التعلم الآلي المتجه الداعم support vector regression (SVM) والتي تعتبر من أهم الخوارزميات المستخدمة في أغلب التطبيقات تعلم الآلة وتعرفنا على المفاهيم المستخدمة فيها مثل وضائف النواة وهي تقنية تستخدم في معالجة التصنيف والانحدار ومشكلات التنبؤ الأخرى بالإضافة إلى كيفية فصل البيانات الخطية وغير خطية. وكذلك خوارزمية التعلم الآلي انحدار المتجه الداعم Support Vector Regression (SVR) والتي تستخدم من أجل تحليل الانحدار والتي تتضمن التنبؤ بالقيم العددية المستمرة.

## قائمة مراجع:

- [1] Kulkarni, Parag. Reinforcement and systemic machine learning for decision making. Vol. 1. John Wiley & Sons, 2012
- [2] Hodges, Andrew. Alan Turing and the Turing test. Springer Netherlands, 2009
- [3] Chouard, Tanguy, and Liesbeth Venema. "Machine intelligence." *Nat.* 521.7553 (2015): 435.
- [5] Muhammad, I., & Yan, Z., "Supervised Machine Learning Approaches A Survey," *ICTACT Journal on Soft Computing*, Vol.5, No.3, 2015
- [6] Sen, P. C., Hajra, M., & Ghosh, M., "Supervised classification algorithms in Machine Learning: A survey and review," *Emerging technology in modelling and graphics*, Springer, pp.99-111, 2020
- [7] <https://ar.fondoperlaterra.org/07/06/03/06/2023/>
- [8] د. علاء طعيمة, تعلم الآلة وعلم البيانات, الاساسيات, المفاهيم والخوارزميات والادوات, كلية علوم الحاسوب والتكنولوجيا المعلومات جامعة القادسية العراق. 2022
- [9] Suykens, Johan AK, and Joos Vandewalle. "Least squares support vector machine classifiers." *Neural processing letters* 9 (1999): 293-300
- [10] Patle, Arti, and Deepak Singh Chouhan. "SVM kernel functions for classification." 2013 *International Conference on Advances in Technology and Engineering (ICATE)*. IEEE, 2013.
- [11] Suykens, Johan AK, et al. "A support vector machine formulation to PCA analysis and its kernel version." *IEEE Transactions on neural networks* 14.2 (2003): 447-450.
- [12] Awad, Mariette, et al. "Support vector regression." *Efficient learning machines: Theories, concepts, and applications for engineers and system designers* (2015): 67-80.
- [13] Salima BENBOUZID and Bilal KIR. Prediction of some physical properties of metallic glasses using Machine Learning PhD thesis, University of Kasdi Merbah Ouargla. 2022
- [14] <https://learn.microsoft.com/2023/06/19>
- [15] Abderrahmane BENHADJIR. Judd-Ofelt parameters: Bayesian inference and deep learning approach. PhD thesis. 2021



**الفصل الثالث:**  
**النتائج والمناقشة**

**1.III مقدمة:**

سنتطرق في هذا الفصل إلى الجانب العملي للدراسة والذي سوف نقوم فيه بإستعمال خوارزمية آلة المتجهات الداعمة Support Vector Machine (SVM) من أجل تصنيف الهيدريدات وطريقة خوارزمية إنحدار المتجه الداعم support vector regression (SVR) من أجل التنبؤ بطاقة تشكل الهيدريدات من أجل تقييم نموذج المعتمد وذلك بإستعمال قاعدة البيانات لمواد تخزين الهيدروجين.

**2.III جمع ومعالجة البيانات :**

استخدمنا في هذه الدراسة قاعدة البيانات لمواد تخزين الهيدروجين التي تديرها وزارة الطاقة الامريكية ([/http://ieahydrogen.org](http://ieahydrogen.org)) [22] كمساهمة في اتفاقية تنفيذ الهيدروجين لووكالة الطاقة الدولية، قاعدة البيانات هذه متاحة بشكل مفتوح يمكن الوصول إليها بإستخدام الرابط ([/http://hydrogenmaterialssearch.govtools.us](http://hydrogenmaterialssearch.govtools.us)) حيث جزء منها يظهر في الشكل (1-III). يقدر عدد المعلومات المستعملة في هذا العمل إنطلاقاً من قاعدة البيانات هذه بـ 367 معلومة مرجع [1].

Material_Class	Hydrogen_Weight_Percent	Heat_of_Formation_kJperMolH2	Temperature_oC	Pressure_Atmospheres_Absolute	Entropy_of_Formation_Jp
Th2Al	A2B	0.8	130.0	500.0	0.001
Ti2Cu	A2B	2.2	130.0	500.0	0.120
Zr2Cu	A2B	1.3	144.0	600.0	0.003
Zr2Ni	A2B	1.3	183.0	604.0	0.003
Mg2Ni	A2B	3.6	64.5	299.0	3.200

الشكل (1-III) : dataset head-

تصنف قاعدة بيانات الهيدريدات التي تم استخدامها في هذا العمل إلى ثماني فئات :

سبائك المغنسيوم (Mg alloys)، هيدريدات معقدة (Complex hydrides)، سبائك المحاليل الصلبة (solid solution alloys)، المركبات بين المعادن  $A_2B$  (intermetallic compounds)، مركبات بين المعادن  $AB_2$  (intermetallic compounds)، المركبات المعدنية  $AB_5$  (intermetallic compounds).

### 3.III. مقاييس التقييم Evaluation Metrics:

يعتبر تقييم نماذج التعلم الآلي من بين أهم المراحل لبناء نموذج ذو كفاءة وفعالية عالية، وقد تم اقتراح عدة مقاييس لتقييم نماذج التعلم الآلي، حيث أن هناك طرق مختلفة لتقييم نموذج التصنيف وأخرى لتقييم نموذج الانحدار.

### 1.3.III. المقاييس ذات الصلة بالتصنيف Classification Related Metrics

في هذا العمل قد اعتمدنا مقياسين فقط لتقييم نموذج التصنيف وهما كالتالي:

#### 1.1.3.III. دقة التصنيف classification Accuracy :

يمكن أن تكون دقة التصنيف أسهل المقاييس التي يمكن تحيلها ويتم تعريفها على أنها عدد التنبؤات الصحيحة مقسومة على العدد الاجمالي للتنبؤات. مقياس الدقة (Accuracy) الذي يعرف على أنه :

عدد التنبؤات التصنيف الصحيحة مقسوما على العدد الاجمالي للتنبؤات هذا هو [2]:

$$\text{الدقة (Accuracy)} = \frac{\text{تنبؤات صحيحة}}{\text{تنبؤات صحيحة} + \text{تنبؤات غير صحيحة}}$$

#### 2.1.3.III. الاسترجاع Recall:

مقياس الاسترجاع (Recall) هو مقياس لنماذج التصنيف (Classification models) يجيب على السؤال التالي:

عندما كانت الحقيقة الأساسية (ground truth) هي الفئة الايجابية (positive class)، ما هي النسبة المئوية للتنبؤات التي يحددها النموذج بشكل صحيح على أنها فئة إيجابية حيث الصيغة هي:

$$\text{مقياس الاسترجاع (Recall)} = \frac{\text{الاجباب الحقيقي}}{\text{الاجباب الحقيقي} + \text{السلبية الخاطئة}}$$

حيث:

- الايجابي الحقيقي (true positive) يعني أن النموذج تنبأ بالفئة الايجابية بشكل صحيح
  - تعني السلبية الخاطئة (false negative) أن النموذج تنبأ عن طريق الخطأ بالفئة السلبية (negative class).
- أي أنه يمكن تعريفه على أنه جزء من العينات من فئة يتم توقعها بشكل مناسب بواسطة نموذج [2].

### 2.3.III مقاييس ذات الصلة بالانحدار: Regression Related Metrics

المقاييس المستخدمة لتقييم نموذج الانحدار يجب أن تكون قادرة على العمل على مجموعة من القيم المستمرة. سنتطرق في

هذا العمل إلى مقياسين و هما:

#### 1.2.3.III معامل التحديد $R^2$ : Coefficient of determination

معامل التحديد هو مقياس لتقدير دقة معامل الانحدار ويرمز له بـ  $R^2$  وذلك لأنه يساوي مربع معامل الارتباط البسيط.

ومعامل التحديد يعطى بالعلاقة التالية:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i' - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i' - \hat{y}_i)^2} \quad (1.III)$$

حيث:

$y_i$ : هي القيمة الفعلية *actual value*

$y_i'$  هي قيمة المتوقعة *predicted value*

$\hat{y}_i$  هي متوسط جميع القيم الفعلية *average of the actual value*

يأخذ معامل التحديد قيم بين 0 و 1 أي أنه

$R^2 = 1$ : هذا يعني أن خط الانحدار يمر بالضبط عبر جميع نقاط البيانات، وهو أمر مستحيل في السيناريوهات .

$R^2 = 0$ : هذا يعني أن خط الانحدار يمر عبر خط المتوسط

$R^2$ : تساوي قيمة سالبة، مما يعني أن خط الانحدار ينتج خطأ أكثر من الخط المتوسط ويمكن أن تكون أحد أسباب الحصول

على قيم سالبة هو تطبيق الانحدار الخطي على البيانات غير الخطية للغاية.

ومنه يمكن استنتاج أنه كلما كانت قيمة معامل التحديد  $R^2$  قريبة من الواحد فإن النتائج تعتبر جيدة [2].



### III.2.2.3 MSE : Mean Squared Error مقياس متوسط الخطأ التربيعي

يعتبر "متوسط الخطأ التربيعي" المقياس الأكثر شيوعاً المستعمل في مشاكل الانحدار، يوجد أساساً متوسط الخطأ التربيعي بين قيم المتوقعة والفعلية .

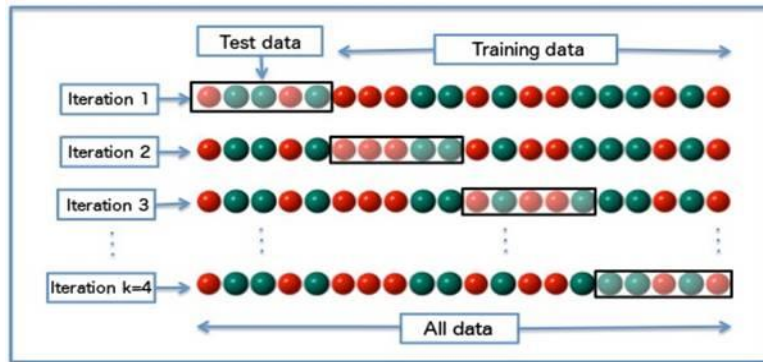
$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (2.III)$$

أي أنه كلما كانت قيمة متوسط الخطأ التربيعي MSE تقترب من الصفر تكون النتائج جيدة [2].

### III.3.2.3 التحقق المتقاطع Cross-Validation :

يعتبر تحقق المتقاطع آلية لتقدير مدى التعميم الجيد للنموذج على البيانات الجديدة عن طريق اختبار النموذج مقابل مجموعة فرعية واحدة أو أكثر من البيانات غير المتداخلة التي تم حجبها من مجموعة التدريب [2]. يستخدم التحقق المتقاطع عادة إذا كانت البيانات القليلة أين يمكن الاختبار على البيانات.

عادة تقسم البيانات الى مجموعات تدريب، تحقق، واختبار، تستخدم مجموعة التدريب لتدريب النموذج، ومجموعتي التحقق والاختبار للتحقق من النتائج على بيانات لم يسبق رؤيتها من قبل. الطريقة التقليدية هي تقسيم البيانات إلى قسمين، تدريب واختبار 20%-80%، وأحياناً تختلف هذه النسب، فيمكن أن تكون 30%-70% أو 10%-90%.



الشكل (III-2) : استخدام التحقق المتقاطع لتقسيم البيانات الى 4 أجزاء.

بينما في التحقق المتقاطع فيمكن تقسيم البيانات إلى أكثر من قسمين، مثلاً يمكن عمل أربعة تقسيمات كما مبين في الشكل (III.2) أو أي عدد آخر من التقسيمات. هذه الأقسام يطلق عليها أجزاء (Folds) وهناك العديد من الاستراتيجيات لعملها. في هذا العمل نعتمد على استراتيجية واحدة وهي استراتيجية الإبقاء على واحد (Leave One Out)، حيث في هذه

الحالة لكل نقطة من البيانات التي لدينا نقوم ببناء نموذج باستخدام كل النقاط الأخرى ثم اختباره على هذه النقطة بحيث أخذنا عدد التقسيمات يساوي الى خمسة تقسيمات.

### 4.III. النموذج المعتمد:

في هذا العمل قمنا باستخدام خوارزمية آلة المتجهات الداعمة (Support Vector Machine SVM) من أجل تصنيف الهيدريدات، وخوارزمية دعم ناقلات الانحدار (SVR) من أجل التنبؤ بقيمة تشكل الهيدريدات بتطبيق كلا من النواة خطية (linear)، النواة متعددة (poly)، نواة وظيفة الاساس الشعاعي الغاوسي (RBF)، والنواة السيني (Sigmoid).

الجدول(1.III) : قيم دقة التصنيف لكل نواة.

kernel	Linear	Poly	RBF	Sigmoid
Accuracy	0.569	0.356	0.456	0.332

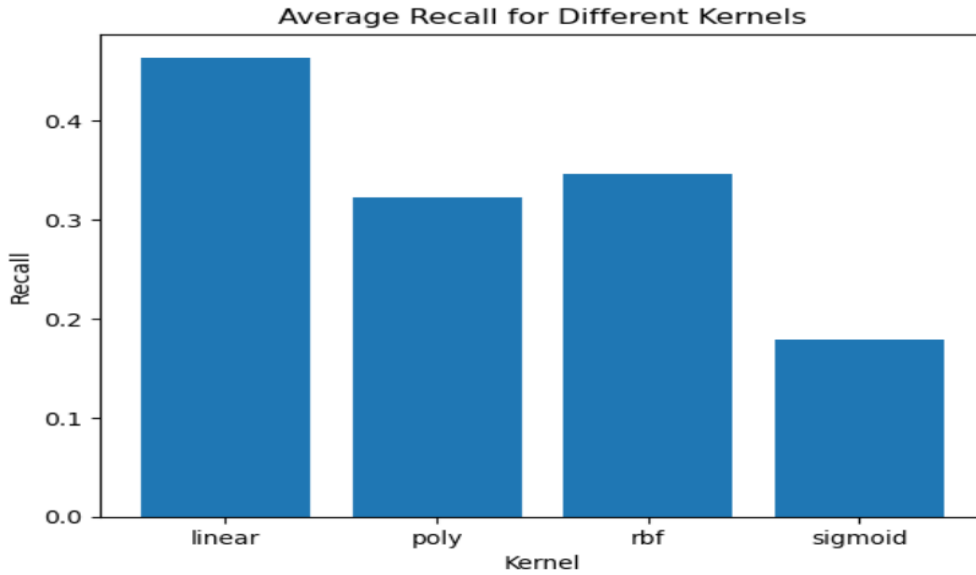
### 5.III. النتائج والمناقشة:

قمنا بتدوين قيم دقة التصنيف للنموذج المعتمد في هذا العمل في الجدول (1.III). انطلاقاً من هذا الجدول نلاحظ أن أعلى قيمة لدقة التصنيف كانت لنواة الخطية (linear) والتي تقدر بـ 0.569، بينما أقل قيمة فكانت لنواة السيني (Sigmoid) والتي تقدر بـ 0.332.

وبما أن مقياس الدقة غير كافي فقمنا بإستعمال مقياس الاسترجاع (Recall) والنتائج المتحصل عليها موضحة في الشكل (3-III). كما هو ملاحظ في الشكل (3.III) فإن أعلى قيمة لمتوسط الارجاع تكون عند تطبيق نواة خطية (linear kernel)، بينما أقل قيمة له كانت عند تطبيق نواة سيني (kernel Sigmoid).

بالنسبة للتنبؤ بطاقة تشكل الهيدريدات، فإن القيم المتحصل عليها لكل من مقياس معامل التحديد ( $R^2$ ) ومقياس متوسط الخطأ التربيعي (MSE) لكل الأنوية مدونة في الجدول (2.III). إنطلاقاً من الجدول (2.III) وجدنا أن النواة الخطية

(linear) تأخذ أعلى قيمة لمقياس معامل التحديد  $R^2$  والتي تقدر بـ 0.999 بينما أقل قيمة لهذا المقياس فهي المتحصل عليها بتطبيق نواة سيني (Sigmoid) والتي تقدر بـ -0.189.



الشكل(III-3) : متوسط الارجاع (Average Recall) لمختلف النوى (kernel).

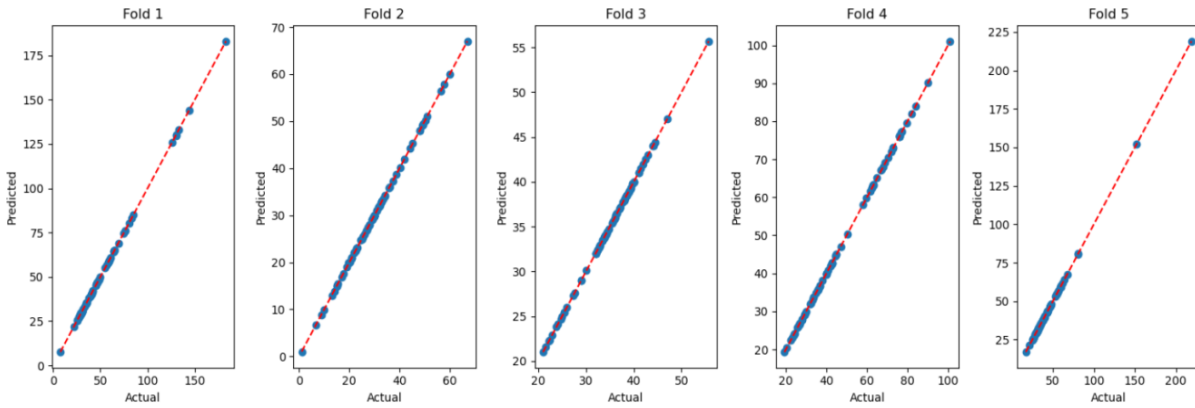
أما بالنسبة لمقياس متوسط الخطأ التربيعي (MSE) فنجد ان نواة سيني(Sigmoid) تأخذ أعلى قيمة والتي تقدر بـ 621.893، بينما أقل قيمة لهذا المقياس كانت للنواة الخطية (Linear).

الجدول(III.2): مقياس معامل التحديد ( $R^2$ ) ومقياس متوسط الخطأ التربيعي (MSE) لكل النوى.

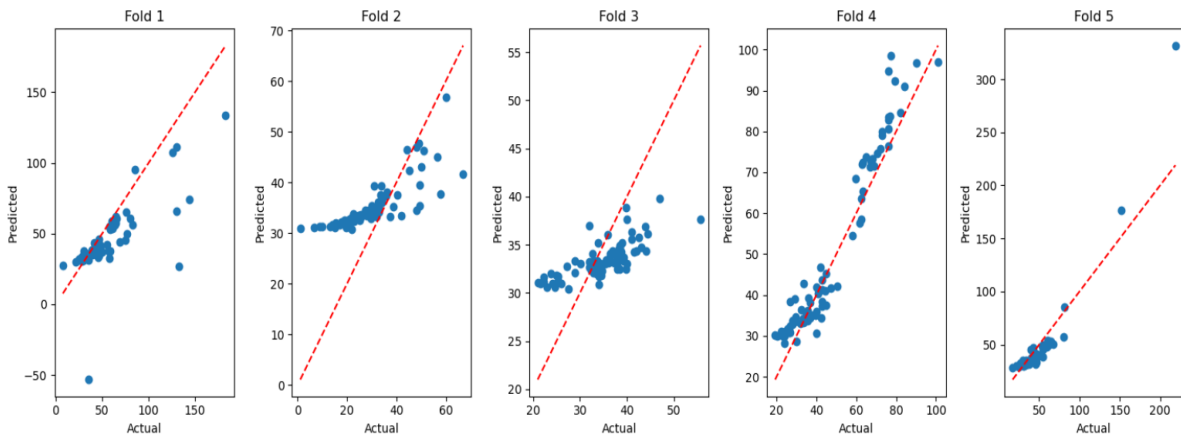
	$R^2$	MSE
<b>Linear</b>	0.999	0.002
<b>Poly</b>	0.537	182.858
<b>RBF</b>	0.349	327.351
<b>Sigmoid</b>	-0.189	621.893

بناء على ما ذكرنا سابقا فإنه يمكن القول بأن أداء نواة الدالة الخطية (Linear) أعطت أحسن نتيجة بالمقارنة مع بقية النوى نظرا لوصولها أعلى قيمة لدقة التصنيف (56.9%)، لمتوسط الارجاع (Average Recall)، لمعامل التحديد

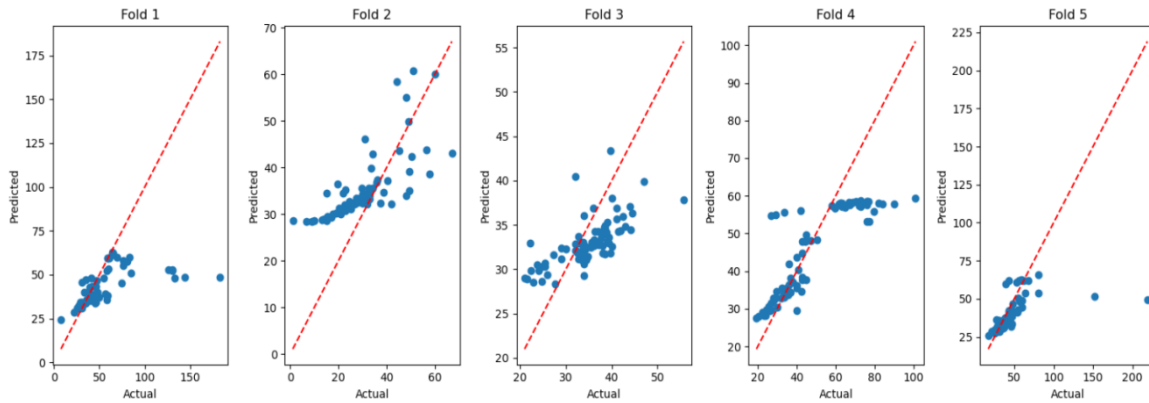
$R^2$ ، وأقل قيمة لمتوسط الخطأ التربيعي (MSE)، وذلك لأنه من المتفق عليه أنه كلما كان  $R^2$  قريبا للواحد فإن نتائج تعتبر جيدة أما بالنسبة MSE أنه كلما اقترب للصفر تكون النتائج أحسن.



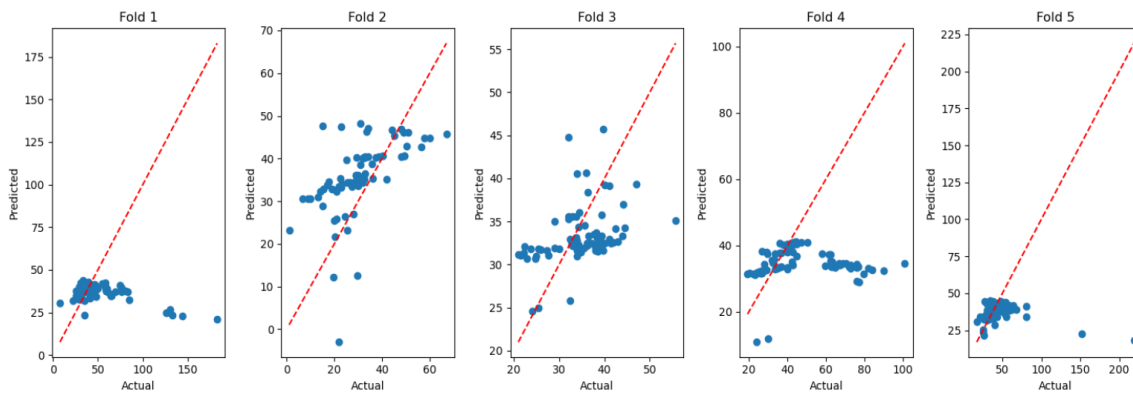
الشكل(III-4) : نتائج استخدام مقياس التحقق المتقاطع لنواة الدالة الخطية linear.



الشكل(III-5) : نتائج استخدام مقياس التحقق المتقاطع لنواة دالة متعددة الحدود Poly



الشكل(III-6) : نتائج استخدام مقياس التحقق المتقاطع لنواة دالة الغاوسي RBF



الشكل(III-7) : نتائج استخدام مقياس التحقق المتقاطع لنواة دالة سيني Sigmoid.

أما بالنسبة الى مقياس التحقق المتقاطع لكل الأنوية فهو موضح في الأشكال (III-4)، (III-5)، (III-6)، و(III-7). انطلاقا من هذه الاشكال نلاحظ أن القيم المتوقعة كانت متلائمة بصفة جيدة مع القيم الحقيقية باستخدام نواة الدالة الخطية linear مقارنة بباقي النوى.

الخلاصة:

قمنا في هذا الفصل بإستخدام آلة المتجهات الداعمة Support Vector Machine (SVM) من أجل تصنيف الهيدريدات وطريقة انحدار متجه الداعم support vector regression (SVR) من أجل التنبؤ بقيمة طاقة تشكل الهيدريدات. ومن أجل تقييم النموذج المعتمد قمنا باستعمال كلا من المقاييس ذات الصلة بالتصنيف Classification

Related Metrics فقد اعتمدنا مقياسين دقة التصنيف classification Accuracy ودقة الاسترجاع Recall، وكلا من مقياس ذات الصلة بالانحدار Regression Related Metrics وقد اعتمدنا مقياس معامل التحديد  $R^2$  ومقياس متوسط الخطأ التربيعي MSE. وكان اداء نواة الدالة الخطية linear أحسن من النوى الاخرى أما أداء نواة دالة سيني Sigmoid فهو الاسوأ. مما يعني أن النموذج المستعمل له دقة عالية في تصنيف الهيدريدات وقدرة كبيرة للتنبؤ بقيمة طاقة تشكل الهيدريدات.

### قائمة المراجع:

- [1] Rahnama, Alireza, Guilherme Zepon, and Seetharaman Sridhar. "Machine learning based prediction of metal hydrides for hydrogen storage, part II: Prediction of material class." International Journal of Hydrogen Energy 44.14 (2019): 7345-7353.
- [2] د. علاء طعيمة، التعلم الآلي والتعلم العميق وعلم البيانات، كلية علوم الحاسوب والتكنولوجيا المعلومات جامعة القادسية العراق. 2022.

خلاصة عامة

يمكن استخدام الهيدروجين كوقود بديل نظيف إذا كان من الممكن تخزينه ونقله بأمان وكفاءة. هيدريدات المعادن ( $MH_x$ ) هي مواد المرشحة لتخزين الهيدروجين وبتكليف تركيبها الكيميائية وينيتها تسمح بشكل مناسب وبمستوى عال من تخزين الهيدروجين تحت درجة حرارة وضغط معينين. وبالتالي هناك حاجة إلى طريقة سريعة ومثمرة لتحديد المعادن تخزين الهيدروجين الأكثر كفاءة بناء على الخصائص المرغوبة، لهذا ظهرت إمكانية استخدام التعلم الآلي بكفاءة وفعالية لتحديد فئة المواد بناء على الخصائص المرغوبة لأي هيدريد معدني. في هذا العمل قمنا بتطبيق مقاييس نماذج التعلم الآلي وخوارزمية التعلم الآلي المتجه الداعم آلة المتجهات الداعمة (SVM) Support Vector Machine من أجل تصنيف هيدريدات المعادن بناء على خصائصها، حيث وجدنا أن أداء نواة الدالة الخطية (Linear) حققت أعلى دقة للتصنيف وأعلى قيمة لمقياس الاسترجاع (Recall)، وطريقة إحدار متجه الداعم (SVR) support vector regression من أجل التنبؤ بطاقة تشكل الهيدريدات حيث أنه باستخدام نواة الدالة الخطية (Linear) تحصلنا على أعلى قيمة لمعامل التحديد  $R^2$  وأقل قيمة مقياس متوسط الخطأ التربيعي MSE. مما يعني أن النموذج المستعمل له دقة عالية في تصنيف هيدريدات وقدرة كبيرة للتنبؤ بقيمة طاقة تشكل الهيدريدات.



## الملخص:

مع السعي وراء الهيدروجين الأخضر أصبحت أنظمة الطاقة المتجددة الهجينة القائمة على الهيدروجين محورا لتطوير صناعة الهيدروجين، حيث أن هيدريدات المعادن مواد مرشحة لتخزين الهيدروجين وبتكليف تركيبها الكيميائي وبنيتها تسمح بشكل مناسب وبمستوى عالي من تخزين الهيدروجين تحت درجة حرارة والضغط معينين. وبالتالي هناك حاجة إلى طريقة سريعة لتحديد سبائك تخزين الهيدروجين الأكثر كفاءة بناء على الخصائص المرغوبة، لهذا ظهرت إمكانية استخدام التعلم الآلي بكفاءة وفعالية لتحديد فئة المواد بناء على الخصائص المرغوبة لأي هيدريد معدني. في هذا العمل قمنا بإستعمال SVM من أجل تصنيف الهيدريدات ووجدنا أن أداء نواة الدالة الخطية Linear حققت أعلى دقة للتصنيف وأعلى قيمة لمقياس الاسترجاع Recall، أما من أجل التنبؤ بطاقة تشكل الهيدريدات فقد استعملنا طريقة انحدار متجه الداعم حيث تحصلنا على أعلى قيمة لمعامل التحديد  $R^2$  وأقل قيمة لمتوسط الخطأ التربيعي MSE بإستخدام نواة الدالة الخطية. مما يعني أن النموذج المستعمل له دقة عالية في تصنيف الهيدريدات وقدرة كبيرة للتنبؤ بقيمة طاقة تشكل الهيدريدات.

الكلمات المفتاحية: الهيدروجين، هيدريدات المعادن، التعلم الآلي، آلة المتجهات الداعمة، انحدار متجه الداعم.

## Abstract:

With the pursuit of green hydrogen, hydrogen-based hybrid renewable energy systems have become a focus for the development of the hydrogen industry, as metal hydrides are candidate materials for hydrogen storage, and by adapting their chemical composition and structure allows appropriate and high level of hydrogen storage under a certain temperature and pressure. Thus, there is a need for a rapid method to select the most efficient hydrogen storage alloys based on the desired properties. Therefore, the possibility of using machine learning efficiently and effectively appears to determine the class of materials based on the desired properties of any metal hydrides. In this work, we used SVM to classify the hydrides and we found that the performance of the linear function kernel achieved the highest classification accuracy and the highest value of the Recall scale, while in order to predict the formation energy of the hydrides we used the support vector regression method where we got the highest value of the coefficient of determination  $R^2$  and the lowest value In the mean squared error (MSE) measure using the linear function kernel. This means that the used model has a high accuracy in classifying hydrides and a great ability to predict the energy value of hydride formation.

Key words: Hydrogen, Metal Hydrides, Machine Learning, Support Vector Machine (SVM), Support Vector Regression (SVR).

## Résumé:

Avec la poursuite de l'hydrogène vert, les systèmes d'énergie renouvelable hybrides à base d'hydrogène sont devenus un axe de développement de l'industrie de l'hydrogène, car les hydrures métalliques sont des matériaux candidats pour le stockage de l'hydrogène et, en adaptant leur composition chimique et leur structure, permettent de manière appropriée et à un niveau élevé de stockage d'hydrogène sous une certaine température et pression. Ainsi, il existe un besoin d'une méthode rapide pour sélectionner les alliages de stockage d'hydrogène les plus efficaces en fonction des propriétés souhaitées. Par conséquent, la possibilité d'utiliser l'apprentissage automatique de manière efficace et efficace semble déterminer la classe de matériaux en fonction des propriétés souhaitées de tout hydrure métallique. Dans ce travail, nous avons utilisé SVM pour classer les hydrures et nous avons constaté que les performances du noyau de la fonction linéaire atteignaient la précision de classification la plus élevée et la valeur la plus élevée de la mesure de rappel, tandis que pour prédire l'énergie de formation des hydrures, nous avons utilisé le support méthode de régression vectorielle où nous avons obtenu la valeur la plus élevée du coefficient de détermination  $R^2$  et la valeur la plus faible Dans la mesure de l'erreur quadratique moyenne (MSE) en utilisant le noyau de la fonction linéaire. Cela signifie que le modèle utilisé a une grande précision dans la classification des hydrures et une grande capacité à prédire la valeur énergétique de la formation des hydrures.

Les mots clés: l'hydrogène, Hydrures métalliques, Apprentissage automatique, les machines à vecteurs de support (SVM), La régression par Machines à Vecteurs de Support (SVR).