



Evaluation the efficiency of machine learning boosting methods for estimating the water quality index of the Zayandeh Rood River

Elham Fazel Najafabadi¹ | Mohammad Shayannejad²

1. Corresponding Author, Department of Water Science and Engineering, College of Agriculture, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran. E-mail: efazel@ut.ac.ir.

2. Department of Water Science and Engineering, College of Agriculture, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran. E-mail: shayannejad@ut.ac.ir.

Article Info

Article type: Research Article

Article history:

Received: March. 16, 2025

Revised: May. 6, 2025

Accepted: May. 12, 2025

Published online: July. 2025

Keywords:

Water Quality Characteristics,
Zayandeh Rood River,
Machine Learning Models,
GB,
XGBoost

ABSTRACT

Regarding climate change, global warming, and the reduction of water resources, surface water quality is of great interest to river engineers as surface water is one of the most important water resources in the world. Since the most widely used water quality index is the WQI index, the goal and importance of this research are to model the WQI using two machine learning boosting methods in the Zayandeh Rood River, Gradient Boosting and XGBoost. First, based on water quality data, the water quality index (NSFWQI) was calculated, and then, for modeling, input data including water quality characteristics of 8 stations over 31 years and the calculated WQI were used. In this study, the model was coded in the Google Colab environment, and 80% of the data was used in the training phase and the remaining 20% in the evaluation phase. Based on the results of the evaluation criteria of coefficient of determination (R^2), mean absolute error (MAE), maximum error (ME), mean square error (MSE), root mean square error (RMSE), and normalized root mean square error (NRMSE), the optimal model was selected. The results of the study showed that in all stations except one station among the models used, the GB performed better than the XGBoost according to the model evaluation criteria. The results also showed that to save time and cost, and also to optimally manage water quality characteristics, the selection of the number 3 series, in which three characteristics are used to estimate the WQI, was the best combination.

Cite this article: Fazel Najafabadi, E., & Shayannejad, M. (2025). Evaluation the efficiency of machine learning reinforcement methods for estimating the water quality index of the Zayandeh Rood River., *Iranian Journal of Soil and Water Research*, 56 (5), 1355-1378. <https://doi.org/10.22059/ijswr.2025.392173.669906>

© The Author(s).

Publisher: The University of Tehran Press.

DOI: <https://doi.org/10.22059/ijswr.2025.392173.669906>



EXTENDED ABSTRACT

Introduction

With the increase in population and the decrease in water resources, the pollution of water resources, especially surface water resources, has received more and more attention. The most widely used water quality index is NSFQWI, which has been used and studied in numerous studies (Mahrouyan et al. 2021, Zamani-Ahmadm Mahmoodi et al. 2021, Aghaee et al. 2020, Khalife and Khoshnazar 2018). Since several quality parameters affect this index, the estimation and calculation of this index have always faced challenges. With the advancement of metadata science and artificial intelligence, the use of machine learning models can be useful in accurately estimating the water quality index, especially when limited data is available. In research, various machine learning methods have been used to provide an optimal model for estimating the water quality index, including Khoi et al. (2022), Rahaman et al. (2024), Lin et al. (2024), and Palabıyık and Akkan (2024) noted. Considering that the Zayandeh Rood River is vital in the central plateau of Iran, it is important to detect and estimate its water quality index. Also, given the unavailability of some data at some stations, the present study can be a solution to this problem by examining the ability of two algorithms, Gradient Boosting and Extreme Gradient Boosting, in estimating the water quality index (WQI).

Method

This research was conducted on 8 stations of the Zayandeh Rood River. The dataset used in this study included water quality data from 8 stations: Shahrokh Castle, Zayandeh Rood Dam, Zamankhan Bridge, Cham-Aseman Dam, Kaleh Bridge, Diziche, Lanej, and Musian, measured monthly over 31 years (1991 to 2022). These data included (EC), (TDS), (pH), (TH), (Cl^-), (Mg^{2+}), (Na^+), (Ca^{2+}), (SO_4^{2-}), and (HCO_3^-) as target features for estimating the water quality index (WQI). To calculate the water quality index in this study, the NSFQWI index was used, which is one of the first and most widely used indices for the overall assessment of water quality status (Alexakis et al. 2016, Sutadian et al. 2016) and is classified into five classes: very bad, bad, moderate, good, and excellent. In this study, Machine learning models (GB and XGBoost) were used to predict the water quality index (WQI) based on selected features, and coding was done in Google Colab using the Python programming language. The evaluation criteria for presenting the best model were R^2 , MAE, ME, MSE, RMSE, and NRMSE. Uncertainty analysis and cross-validation analysis were also performed.

Results

Since different water quality variables do not contribute equally to forming WQI values, it is possible to identify several determinant variables that reflect the water quality status without losing key information. In this study, the importance of the variables was identified by the SHAP method. Based on this analysis, the importance of the variables was obtained as follows: EC, TDS, TH, pH, HCO_3^- , Mg^{2+} , SO_4^{2-} , Cl^- , Na^+ , and Ca^{2+} . Based on this arrangement, six series were defined, and the aforementioned models were used for these series to estimate the water quality index. The results of this study showed that in 7 stations, the GB model, and in only one station, the XGB model, is recommended for estimating the water quality index. Also, among the defined series, series number 3 has the highest frequency in different stations as the optimal series, and this series can be introduced as the recommended series. In this series, three parameters have been used to estimate the water quality index. Comparison with previous research showed that Ejaz et al. (2024) and Sidek et al. (2024) also introduced the GB model as the best model for estimating water quality index in their research. The commonality of the mentioned research with the present research was the use of anions such as Cl^- , cations such as K^+ , and features such as TDS and pH.

Conclusions

In this study, two augmented machine learning models were used to estimate the NSFQWI water quality index. The findings of this study showed that the GB algorithm performed best at seven stations. The coefficient of determination was in the range of 0.999-0.802, and the RMSE index was in the range of 0.112-0.201. The results of the feature importance analysis showed that the features EC, TDS, TH, and HCO_3^- were the most important, respectively. The study of different series introduced three key features, EC, TDS, and TH, in predicting the water quality index. Therefore, since the goal of artificial intelligence is to reduce time and cost in studies, by replacing 3 features instead of 10 features, a proper prediction of the Water Quality Index (WQI) can be achieved. The findings of this study will help water managers and policymakers in efficiently calculating water quality indices for rivers and streams. This is achieved by reducing

computational time, lowering costs, and monitoring polluted stations. However, it is important to acknowledge several limitations of this study, primarily related to the selection of physicochemical variables and limited sampling locations. The research can be expanded with a larger number of sampling locations and a wider range of physicochemical variables to predict the water quality index of the Zayandeh Rood River.

Author Contributions

“Conceptualization, E.F. and M.Sh.; methodology, E.F.; software, M.Sh.; validation, E.F., M.Sh.; formal analysis, E.F.; investigation, E.F.; resources, E.F.; data curation, E.F.; writing—original draft preparation, E.F.; writing—review and editing, M.Sh.. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.”

Data Availability Statement

Data available on request from the authors

Ethical considerations

The authors avoided data fabrication, falsification, plagiarism, and misconduct.

Conflict of interest

The author declares no conflict of interest.

ارزیابی کارایی روش‌های شتاب‌دهنده یادگیری ماشین به منظور تخمین شاخص کیفی آب رودخانه
زاینده‌رودالهام فاضل نجف‌آبادی^۱ | محمد شایان‌نژاد^۲^۱. نویسنده مسئول، گروه علوم و مهندسی آب، دانشکده کشاورزی، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان، ایران. رایانامه: efazel@iut.ac.ir^۲. گروه علوم و مهندسی آب، دانشکده کشاورزی، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان، ایران. رایانامه: shayannejad@iut.ac.ir

اطلاعات مقاله	چکیده
نوع مقاله: مقاله پژوهشی	باتوجه به پدیده تغییر اقلیم، گرمایش کره زمین و کاهش منابع آب، کیفیت آب‌های سطحی به‌عنوان یکی از مهم‌ترین منابع آبی در جهان مورد توجه مهندسين رودخانه قرار دارد. از آنجاکه پرکاربردترین شاخص سنجش کیفیت آب شاخص WQI است؛ هدف و اهمیت این تحقیق مدل‌سازی شاخص کیفیت آب به کمک دو روش شتاب‌دهنده یادگیری ماشین Gradient Boosting و XGBoost در رودخانه زاینده‌رود انجام گرفته است. در این تحقیق ابتدا بر اساس داده‌های کیفیت آب، شاخص کیفیت آب (NSFWQI) محاسبه، و در ادامه به‌منظور مدل‌سازی، از داده‌های ورودی شامل ویژگی‌های کیفی آب ۸ ایستگاه در یک دوره ۳۱ ساله و همچنین شاخص کیفیت آب محاسبه شده رودخانه استفاده شد. در این تحقیق برای مدل‌سازی در محیط برنامه‌نویسی پایتون کدنویسی شده، و در مرحله آموزش ۸۰ درصد داده‌ها و در مرحله ارزیابی ۲۰ درصد باقی‌مانده مورد استفاده قرار گرفت. بر اساس نتایج معیارهای ارزیابی ضریب تعیین R^2 ، میانگین قدرمطلق خطا MAE، حداکثر خطا ME، میانگین مربعات خطا MSE، جذر میانگین مربعات خطا RMSE و جذر میانگین مربعات خطای نرمال شده NRMSE مدل بهینه انتخاب شد. نتایج تحقیق نشان داد که در تمام ایستگاه‌ها به جز یک ایستگاه از بین مدل‌های استفاده شده، مدل GB باتوجه به معیارهای ارزیابی مدل عملکرد بهتری نسبت به مدل XGBoost برخوردار بوده است. همچنین نتایج نشان داد که برای صرفه‌جویی در زمان و هزینه و همچنین مدیریت بهینه ویژگی‌های کیفیت آب، انتخاب سری شماره ۳ که در آن از سه ویژگی به‌منظور برآورد شاخص کیفیت آب (WQI) استفاده می‌شود، بهترین ترکیب بوده است.
واژه‌های کلیدی: ویژگی‌های کیفیت آب، رودخانه زاینده‌رود، مدل‌های یادگیری ماشین، GB XGBoost	

استناد: فاضل نجف‌آبادی، الهام؛ شایان‌نژاد، محمد (۱۴۰۴). ارزیابی کارایی روش‌های تقویتی یادگیری ماشین به‌منظور تخمین شاخص کیفی آب رودخانه زاینده‌رود،

مجله تحقیقات آب و خاک ایران، ۵۶ (۵)، ۱۳۷۸-۱۳۵۵. <https://doi.org/10.22059/ijswr.2025.392173.669906>

© نویسندگان.

ناشر: مؤسسه انتشارات دانشگاه تهران.

DOI: <https://doi.org/10.22059/ijswr.2025.392173.669906>

مقدمه

رودخانه‌ها از اجزای کلیدی نظام‌های طبیعی و انسانی هستند که نقش اساسی در تأمین منابع آب ایفا می‌کنند. با این حال، اثرات تغییر اقلیم و همچنین افزایش جمعیت و توسعه اجتماعی-اقتصادی و شهرنشینی، اثرات فعالیت‌های انسانی، و تغییر کاربری اراضی در آلودگی منابع آب از جمله تخلیه فاضلاب صنعتی، فاضلاب خانگی، زهکشی کشاورزی و فاضلاب آبی‌پروری تشدید شده که خطر تخریب کیفیت آب‌های سطحی و زیرزمینی را بیشتر کرده است (Gao et al., 2023; Panagopoulos, 2022; Panagopoulos and Giannika, 2022; Goodarzi et al. 2023a,b; Goodarzi et al. 2022). بنابراین، ارزیابی مؤثر شرایط کیفی آب، شناسایی و کمی‌سازی منابع آلودگی برای بهینه‌سازی اولویت‌های مدیریت منابع آب و شفاف‌سازی وظایف برای کنترل آلودگی، توجه جامعه مهندسی رودخانه را به خود جلب کرده است (Uddin et al. 2022, Gholizadeh et al. 2016). در همین حال، با افزایش داده‌های پایش رودخانه‌ای و توسعه سریع فناوری اطلاعات و هوش مصنوعی، تقاضای فزاینده‌ای برای بهینه‌سازی روش‌های تحلیلی وجود دارد. شاخص کیفیت آب (WQI) مهم‌ترین شاخص در زمینه طبقه‌بندی کیفیت آب‌های سطحی و زیرزمینی است. در محاسبه این شاخص از یک فرمول عددی برای تبدیل ویژگی‌های کیفیت آب به اعداد، استفاده شده و در نتیجه نمایشی از وضعیت کلی کیفیت آب ارائه می‌کند (Ocampo-Icaga 2007). این شاخص‌ها ابزارهای ساده اما قدرتمندی برای ارزیابی کیفیت آب هستند که با استفاده از مدل‌های ریاضی، طیفی از شرایط کیفیت آب، از ضعیف تا عالی را طبقه‌بندی می‌کنند (Horton 1965). طبقه‌بندی کیفیت آب با استفاده از WQI به محققان اجازه می‌دهد تا تأثیرات ناشی از آلاینده‌ها را ارزیابی کنند. چندین شاخص کیفیت آب در سراسر جهان ارائه شده که در بین آنها شاخص کیفیت آب بنیاد ملی بهداشت (NSFWQI) به دلیل دقت نسبتاً بالاتر، سادگی، کاربرد وسیع و دسترسی آسان به ویژگی‌های مورد نیاز، بهترین شاخص در نظر گرفته می‌شود (Matta et al. 2020, Javid et al. 2014, Omid and Shariati 2021).

پیشینه پژوهش

Sadeghi et al. (2015) وضعیت کیفی آب رودخانه زرین گل را با استفاده از NSFWQI و IRWQI ارزیابی کردند. نتایج این تحقیق نشان داد هر دو شاخص، طبقه‌بندی کیفیت آب متوسطی را با مقادیر NSFWQI از ۵۰ تا ۷۰، و مقادیر IRWQI از ۴۵ تا ۷۰ ارائه کردند. Alizadeh et al. (2017) کیفیت آب رودخانه‌های کرج و کن را با استفاده از NSFWQI، IRWQI و WQI ارزیابی کردند. شاخص NSFWQI کیفیت آب را از بد تا متوسط، شاخص IRWQI کیفیت را از خیلی بد تا نسبتاً خوب و شاخص WQI کیفیت را خوب طبقه‌بندی کرد. با وجود این تناقضات، ارزیابی کلی نشان داد که آب هر دو رودخانه برای مصارف شرب و کشاورزی مناسب است. Khalife and Khoshnazar (2018) برای ارزیابی کیفیت آب در ۱۶ ایستگاه در حاشیه رودخانه زربینه‌رود در چهارفصل استفاده کرد. نتایج نشان داد که هیچ یک از ایستگاه‌ها در دسته‌های خیلی خوب یا خیلی بد قرار نداشتند و تنها ایستگاه ۱۶ در بهار به‌عنوان بد طبقه‌بندی شد. Aghaee et al. (2020) کیفیت آب رودخانه چیل چای را با استفاده از شاخص IRWQI ارزیابی کرد. یافته‌های آنها حاکی از وضعیت نسبتاً خوب کیفیت آب در بالادست بود که به تدریج در پایین‌دست بدتر شد. روند تغییرات نشان داد درحالی که آب برای کاربردهای کشاورزی مناسب تلقی می‌شد، استانداردهای تجویز شده برای مصرف آب آشامیدنی را برآورده نمی‌کرد. Mahrouyan et al. (2021) کیفیت آب رودخانه شاهرود را با استفاده از NSFWQI ارزیابی کردند. نتایج نشان داد که کیفیت آب در ایستگاه ۱ در تابستان خوب است، درحالی که سایر ایستگاه‌ها کیفیت متوسطی از خود نشان دادند. در زمستان، ایستگاه‌های ۱ و ۴ کیفیت آب خوبی را نشان دادند، درحالی که برای ایستگاه‌های باقی‌مانده کیفیت آب متوسطی نشان داده شد. به‌طور کلی، کیفیت آب رودخانه شاهرود در حد خوب تا متوسط طبقه‌بندی شد. Zamani-Ahmadmashmoodi et al. (2021) در مطالعه خود از NSFWQI و سیستم اطلاعات جغرافیایی (GIS) برای ارزیابی توزیع مکانی کیفیت آب در رودخانه پیر غار استفاده کردند. نتایج این تحقیق نشان داد که شرایط کیفیت آب در طبقه متوسط تا خوب برای همه ایستگاه‌ها، با بالاترین مقدار 78 NSFWQI در ایستگاه اول و کمترین مقدار ۶۶ در ایستگاه پنجم بود. افزایش بار آلودگی در پایین‌دست ایستگاه سراب، منجر به بدتر شدن کیفیت آب گردید. Rahman et al. (2024) در تحقیق خود شاخص کیفیت آب CCME (WQI) را به‌عنوان یک ابزار ارزشمند برای ساده‌کردن و پیش‌بینی کیفیت آب در ارتباط با داده‌های واقعی در لحظه (RTWQ) استفاده نمودند. این محققین اظهار داشتند که شاخص کیفیت آب می‌تواند برای برقراری ارتباط نتایج RTWQ در مکان‌هایی که تحت تأثیر شهرنشینی و مناطق شهری قرار نگرفته استفاده شود، درحالی که استفاده از آن در مکان‌های تأثیر گرفته از شهرنشینی باید با احتیاط همراه باشد. Luo et al. (2024) در مطالعه خود از ۱۷ پارامتر کیفیت آب که به‌صورت ماهانه از ۹ ایستگاه پایش ملی در شهر Nanning چین،

از ژانویه ۲۰۲۱ تا مارس ۲۰۲۳ جمع‌آوری شده، به‌منظور تجزیه و تحلیل شاخص کیفیت آب (WQI) استفاده کردند. نتایج این تحقیق نشان داد که میانگین WQI برای منطقه تعیین‌شده ۹۴/۱ و محدوده این شاخص در ایستگاه‌های پایش در بازه ۹۳/۲۲ تا ۹۶/۴۴ قرار گرفت. نتایج حاصل کیفیت آب را به‌عنوان "عالی" طبقه‌بندی کرد. همچنین نتایج WQI نوسانات فصلی را نشان داد که در بهار و زمستان به اوج خود رسیده، درحالی‌که در تابستان و پاییز کاهش یافت. (Niknam et al. (2025) در تحقیق خود به بررسی و پیش‌بینی سری زمانی ماهانه یک شاخص تک متغیری کیفیت آب رودخانه دز با استفاده از ده پارامتر کیفیت آب از سال ۲۰۱۰ تا ۲۰۲۰ پرداختند. در این تحقیق از مدل ARIMA که در بین مدل‌های پرکاربرد برای پیش‌بینی سری‌های زمانی رتبه‌بندی می‌شود؛ و پنج مدل یادگیری عمیق شامل Simple_RNN، LSTM، CNN، GRU و MLP استفاده گردید. نتایج مقایسه‌ها نشان داد که مدل‌های یادگیری عمیق بهتر از مدل ARIMA عمل کرده است. (Tiwari et al. (2025) با نمونه‌برداری منظم آب از هشت ایستگاه بر روی رودخانه‌های Yamuna، Ganga، Prayagraj در هند، به ارزیابی تغییرات ویژگی‌های فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی و ارزیابی خطرات ناشی از فلزات سنگین برای سلامتی در این رودخانه‌ها پرداخت. نتایج با استانداردهای آب آشامیدنی ایجاد شده توسط دفتر استانداردهای هند (BIS) و سازمان بهداشت جهانی (WHO) مقایسه شد. در این تحقیق شاخص کیفیت آب (WQI) کاهش قابل توجه کیفیت آب را در ایستگاه‌های S2 (Ganga) و S8 (Yamuna) نشان داد. مطالعات مشابهی در رودخانه‌های دیگر در آسیا (Matta et al. 2020، Hamadan 2016)، و همچنین در اروپا و آفریقا (Alexakis 2022، de Almeida et al. 2018، Panagopoulos et al. 2022) انجام شده است. باوجود افزایش سطح نگرانی‌های بین‌المللی در مورد کیفیت آب در سیستم‌های رودخانه‌ای، چالش‌های خاص مدیریت منابع آب در ایران، به‌ویژه در مورد آلودگی آب، به طور کامل مورد مطالعه قرار نگرفته است.

دزفولی و همکاران (۲۰۱۷) به طبقه‌بندی کیفی آب رودخانه کارون بر اساس کمترین ویژگی‌های کیفی پرداختند. نتایج مطالعه آنها نشان داد که روش شبکه عصبی با استفاده از ویژگی‌های کدورت، کلی فرم مدفوعی، و کل مواد جامد با ضریب تعیین ۹۰/۷۸ توانست به‌خوبی به طبقه‌بندی کیفی آب پردازد. (Khalili et al. (2021) کیفیت آب رودخانه تالار مازندران را با استفاده از ترکیب شاخص‌های کیفیت آب ارزیابی کرده، و از مدل رگرسیون چندمتغیره استفاده نمودند. (Soleimanpour et al. (2018) با استفاده از مدل طبقه‌بندی و رگرسیون درختی نشان داد که دو ویژگی کل جامدات محلول و مقدار کلسیم مؤثرترین عامل کیفیت آب آشامیدنی دشت کازرون هستند. در تحقیق دیگری (Al-Mukhtar and Al-Yaseen (2019) از سه مدل مختلف تکنیک‌های هوش مصنوعی شامل سیستم استنتاج فازی مبتنی بر شبکه عصبی تطبیقی (ANFIS)، شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN)، و مدل رگرسیون چندگانه (MLR) به‌منظور پیش‌بینی و تخمین TDS و EC استفاده کردند. نتایج این تحقیق نشان داد که ANFIS نسبت به سایر روش‌های ارزیابی کارایی بالاتری نشان داده و بهترین تناسب را با داده‌های اندازه‌گیری شده نشان داد. در هند (Tripathi and Singal (2019) برای انتخاب ویژگی مؤثر در شاخص کیفیت آب از روش تحلیل مؤلفه اصلی استفاده کرده و شاخص جدیدی توسعه دادند. این محققین اظهار داشتند که این عمل باعث صرفه‌جویی در زمان و هزینه شده است. (Chen et al. (2020) به تحلیل مقایسه‌ای عملکرد پیش‌بینی کیفیت آب سطحی در چین پرداخته و با استفاده از مدل‌های مختلف یادگیری ماشین به شناسایی ویژگی‌های کلیدی آب پرداختند. این محققین برای پایش کیفیت آب در آینده و ارائه هشدار به‌موقع کیفیت آب، از مدل‌های درخت تصمیم، جنگل تصادفی، و جنگل آبشار عمیق استفاده کردند. تحقیقی توسط (Sattari et al. (2021) بر روی رودخانه آلاداغ کشور ترکیه انجام شد که در این تحقیق هدف طبقه‌بندی کیفیت آب سطحی برای مصارف آبیاری و کشاورزی با استفاده از روش‌های داده‌کاوی بود. نتایج نشان داد که در طبقه‌بندی مبتنی بر USSL، روش‌های داده‌کاوی دارای یک خطا، و طبقه‌بندی بر اساس روش ویلکاکس بدون خطا بوده است. در جنوب غربی نیجریه (Oladipo et al. (2021) روش منطق فازی را با روش‌های شاخص کیفیت آب مقایسه کردند. این محققین BOD₅ را به‌عنوان ویژگی‌ای با تأثیر بیشتر برای ارزیابی کیفیت آب سطحی معرفی کردند. (Khan et al. (2022) مطالعه خود را بر اساس رگرسیون مؤلفه اصلی و رویکرد طبقه‌بندی‌کننده تقویت گرادیان، کیفیت آب را طبقه‌بندی و پیش‌بینی کردند. این محققین رویکرد طبقه‌بندی‌کننده تقویت گرادیان را با دقت طبقه‌بندی ۱۰۰٪ به‌عنوان روش برتر معرفی کردند. همچنین (Khoi et al. (2022) به‌منظور پیش‌بینی شاخص کیفیت آب در رودخانه لایوونگ ویتنام از مدل‌های یادگیری ماشین استفاده کرده و نشان دادند که مدل XGBoost با ریشه میانگین مربعات خطا برابر با ۰/۱۰۷ عملکرد خوبی در پیش‌بینی WQI داشته است. همچنین (Yusri et al. (2022) به طبقه‌بندی کیفیت آب با استفاده از روش ماشین بردار پشتیبان و XGBoost پرداختند. این محققین یک الگوریتم طبقه‌بندی کیفیت آب ایجاد کرده و نتیجه گرفتند که مدل XGBoost با دقت ۹۴ درصد در مقایسه با مدل SVM کارایی بهتری داشته است.

Rahaman et al. (2024) چهار الگوریتم یادگیری ماشین شامل DNN، GBM، GLM، و RF را به‌منظور پیش‌بینی شاخص کیفیت آب (WQI) به کار بردند. نتایج نشان داد که الگوریتم GLM مؤثرترین الگوریتم برای پیش‌بینی شاخص کیفیت آب، و BOD، EC، COD، کدورت و سختی کل پارامترهای مؤثر در پیش‌بینی کیفیت آب سطحی بودند. Xu et al. (2024) با استفاده از داده‌های ۱۷ ایستگاه در امتداد رودخانه وودینگ از سال ۲۰۱۷ تا ۲۰۲۱، و با کاربرد مدل‌های RF، SVM، EN، و XGBoost به پیش‌بینی شاخص کیفیت آب (WQI) در طول فصول خشک و مرطوب پرداختند. نتایج نشان داد که مدل RF برای فصل خشک و مدل SVM برای فصل مرطوب نتایج بهتری ارائه کرد. Basha et al. (2024) با استفاده از چهار مدل یادگیری ماشین (RF، XGBoost، KNN و NB) برای پیش‌بینی و کلاس‌بندی شاخص کیفیت آب در رودخانه Albanian Shkumbini پرداختند. نتایج نشان داد که مدل XGBoost با دقت ۹۸٪/۶۱ بهترین مدل جهت پیش‌بینی شاخص کیفیت آب بوده و پارامترهای BOD، HCO_3^- و TP مهم‌ترین پارامترها در این برآورد شناسایی شد. Ramya et al. (2024) با استفاده از ۱۰۹۶ داده به ارزیابی الگوریتم‌های یادگیری ماشین RF، SVM، LR، DT، MLP، GB، NB، Bagging، AdaBoost، QDA، XGBoost و CATBoost در برآورد شاخص WQI پرداخته‌اند. نتایج این تحقیق نشان داد که همه مدل‌ها نتایج رضایت‌بخشی داشته اما GB به بالاترین دقت ۹۹٪/۶۴ رسیده است. Singh et al. (2024) تحقیق خود را بر روی رودخانه‌های هندوستان و با کاربرد ۵ الگوریتم یادگیری ماشین انجام دادند. این محققین نشان دادند که شاخص کیفیت آب (WQI) را می‌توان با داشتن تنها سه ورودی به مدل GBT با شاخص ارزیابی بالای ۸۰ درصد تخمین زد. همچنین نتایج این تحقیق نشان داد که با داشتن دو ویژگی ورودی به مدل‌های RF، GBT، و ANN می‌توان به دقت قابل‌قبولی در تخمین WQI دست‌یافت. Lin et al. (2024) با کاربرد الگوریتم‌های ترکیبی یادگیری ماشین LGB-Pearson و LGB-Spearman در منطقه رودخانه‌ای کره جنوبی نشان دادند که الگوریتم ترکیبی LGB دقت بالاتری در برآورد و پیش‌بینی شاخص کیفیت آب (WQI) دارد. Palabıyık and Akkan (2024) با برداشت ۱۲ ویژگی در ۵ ایستگاه بر روی رودخانه Aksu و کاربرد ۲ روش نوظهور MLR و MLP-ANN و سه الگوریتم یادگیری ماشین NN، SVR و GPN به پیش‌بینی شاخص کیفیت آب WQI پرداختند. نتایج این تحقیق نشان داد که روش‌های نوظهور MLR و MLP-ANN الگوریتم‌های قدرتمندی در این برآورد هستند.

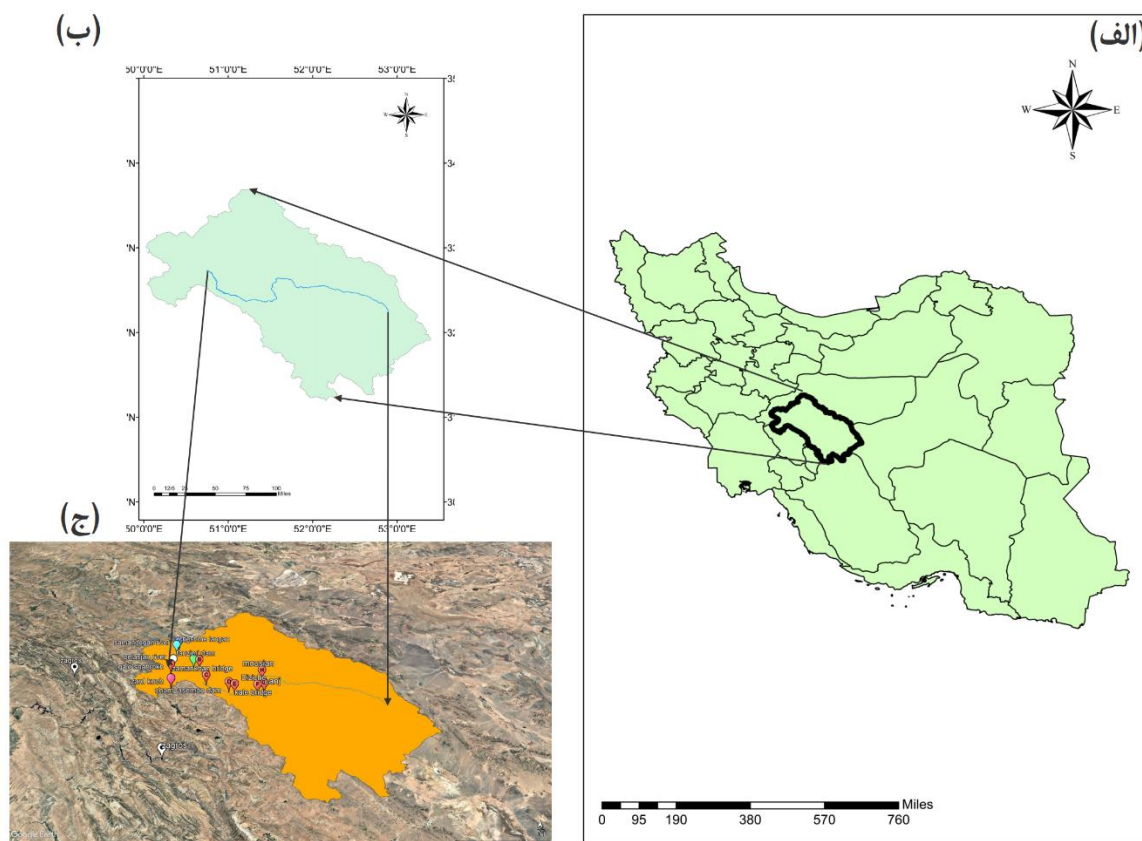
باتوجه به اینکه رودخانه زاینده‌رود رودخانه‌ای حیاتی و مهم در فلات مرکزی ایران بوده و از چندین شهر و استان عبور کرده، آب شرب، کشاورزی و صنعت را فراهم می‌کند، اهمیت تشخیص و برآورد شاخص کیفی آب این رودخانه بسیار ضروری است. استفاده از روش‌های معمول برآورد شاخص کیفی آب نیازمند داده‌های متنوع کیفی آب در بازه‌های زمانی قابل‌توجه است؛ و باتوجه به اینکه در برخی ایستگاه‌های هیدرومتری موجود بر روی این رودخانه داده‌های بلندمدت در دسترس نیستند، لذا به‌منظور پر کردن این خلأ از روش‌های پیشرفته‌تر و هوش مصنوعی استفاده می‌شود. بررسی تحقیقات پیشین نشان داد که استفاده از روش‌های یادگیری ماشین به‌منظور برآورد شاخص کیفیت آب از بین رودخانه‌های کشور ایران بر روی رودخانه تالار و حوزه سد سفیدرود انجام شده است (Kamyab-Talesh et al. 2019, Bui et al. 2020)؛ بنابراین همچنان خلأ استفاده از روش‌های یادگیری ماشین به‌منظور برآورد شاخص کیفیت آب در رودخانه زاینده‌رود وجود دارد. مطالعه روش‌های یادگیری ماشین بر روی رودخانه زاینده‌رود بسیار محدود بوده و از جمله آنها می‌توان به مطالعه برآورد ورودی به سد زاینده‌رود و برآورد پارامتر کیفی TDS اشاره کرد (Tizro et al. 2021, Akbari Osmavandani et al. 2024)؛ لذا تاکنون مطالعه‌ای در رابطه با برآورد شاخص کیفی آب (WQI) بر روی رودخانه زاینده‌رود انجام نشده است. از آنجاکه روش‌های یادگیری متنوعی در منابع استفاده شده‌اند؛ باتوجه به توانایی بالای روش‌های شتاب‌دهنده (Boosting) در برآورد پارامترها، هدف مطالعه حاضر بررسی توانایی دو الگوریتم Gradient Boosting و Extreme Gradient Boosting در برآورد شاخص کیفیت آب (WQI) است. علاوه بر استفاده از روش‌های شتاب‌دهنده یادگیری ماشین، در این تحقیق با استفاده از آنالیز اهمیت ویژگی‌ها (Feature Importance) به ارائه ترکیبی با تعداد کمتر ویژگی‌ها به جای استفاده از تمامی پارامترهای ورودی در محاسبه و برآورد شاخص کیفیت آب پرداخته شد که این امر منجر به صرفه‌جویی در زمان و هزینه می‌گردد.

روش‌شناسی پژوهش

منطقه مورد مطالعه

رودخانه زاینده‌رود ۴۰۰ کیلومتر طول داشته و یکی از رودهای مهم آسیا به شمار می‌رود. این رودخانه از دامنه‌های شرقی زاگرس و کوه‌های مرتفع زرد کوه بختیاری سرچشمه گرفته و پس از طی مسیر در استان‌های چهارمحال بختیاری و اصفهان به باتلاق گاوخونی در ۱۳۷

کیلومتری جنوب اصفهان می‌ریزد. در طول مسیر این رودخانه ارتفاع از ۴۵۵ متر تا ۸۶۱۱ متر متغیر بوده و به دلیل چنین تنوع ارتفاعی، آب‌وهوا در داخل حوضه تغییر می‌کند. دامنه بارندگی سالانه ۱۰۰-۲۰۰ میلی‌متر است که به دلیل تلاطم در عرض جغرافیایی میانی غربی رخ می‌دهد (شکل ۱).

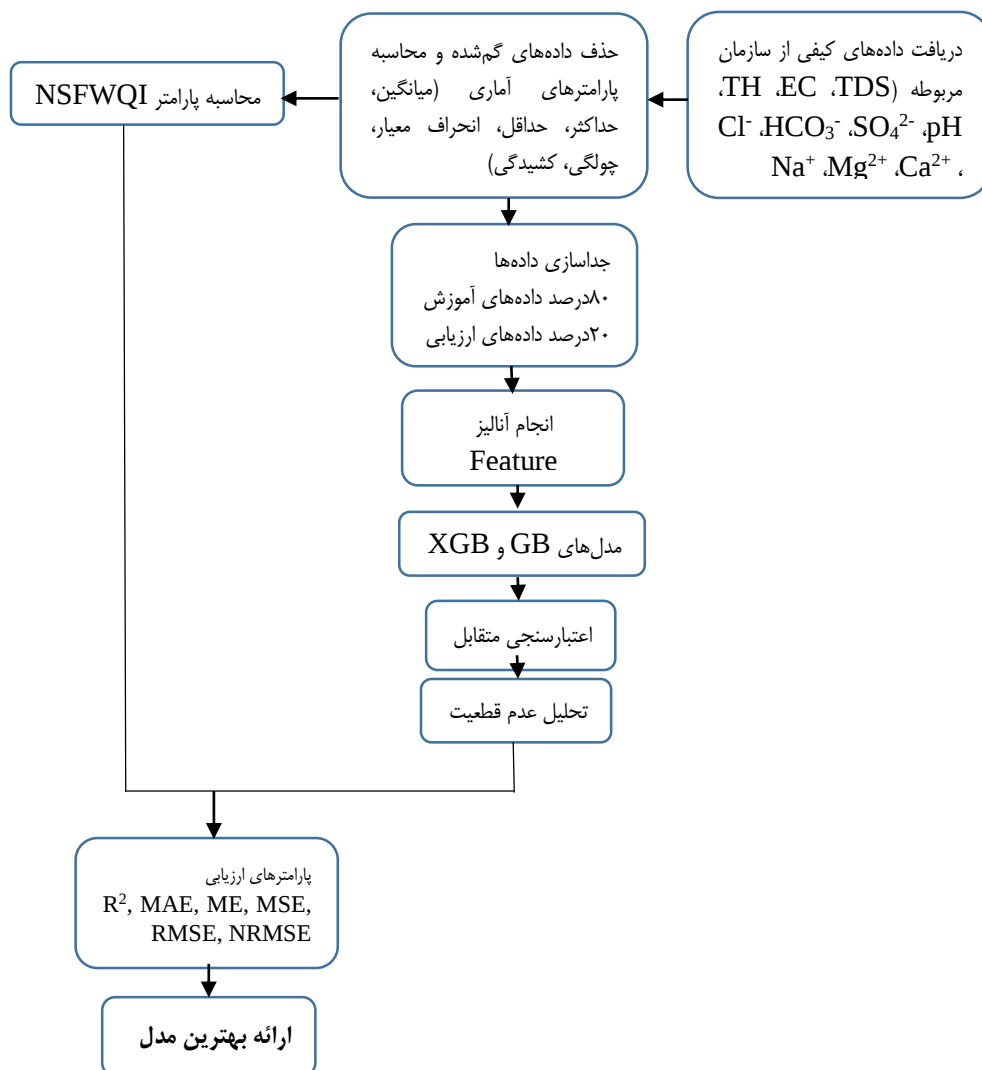


شکل ۱- موقعیت جغرافیایی منطقه مورد مطالعه (الف) کشور ایران، (ب) حوزه زاینده‌رود، (ج) ایستگاه‌های مورد مطالعه

رویکرد کلی مورد استفاده در این تحقیق شامل جمع‌آوری داده‌ها، تفسیر داده‌ها و کاربرد مدل‌های یادگیری ماشین، در شکل ۲ ارائه شده است.

مجموعه داده‌های استفاده شده در این تحقیق شامل داده‌های کیفیت آب ۸ ایستگاه قلعه شاهرخ، سد تنظیمی زاینده‌رود، پل زمانخان، سد چم آسمان، پل کله، دیزیچه، لنج و موسیان در دوره ۳۱ ساله (۱۳۷۰ تا ۱۴۰۱) بوده که در طول دوره مذکور به صورت روزانه و ناپیوسته برداشت شده، به عبارتی در هر ماه یک یا دو روز داده‌برداری انجام شده است. این داده‌ها از سازمان آب منطقه‌ای شهرستان اصفهان گرفته شده، و روش نمونه‌برداری بر اساس دستورالعمل نمونه‌برداری آب سازمان مدیریت و برنامه‌ریزی کشور (نشریه ۲۷۴) است. البته لازم به ذکر است که در برخی ایستگاه‌ها تعداد سال‌های کمتری داده‌ها در دسترس بودند. مشخصات ایستگاه‌ها در جدول ۱ ارائه شده است.

این داده‌ها شامل هدایت الکتریکی (EC)، کل مواد جامد محلول (TDS)، pH، سختی کل (TH)، کلر (Cl⁻)، منیزیم (Mg²⁺)، سدیم (Na⁺)، کلسیم (Ca²⁺)، سولفات (SO₄²⁻)، و بی‌کربنات (HCO₃⁻) به عنوان ویژگی‌های هدف برای برآورد شاخص کیفی آب (WQI) بودند.



شکل ۲- نمودار مفهومی روش انجام تحقیق

جدول ۱: مشخصات ایستگاه‌های استفاده شده در تحقیق حاضر

کد ایستگاه	نام ایستگاه	رودخانه	X-UTM	Y-UTM	ارتفاع (متر)	طول جغرافیایی	عرض جغرافیایی
۰۰۳-۴۲	قلعه شاهرخ	زاینده‌رود	۴۴۹۲۶۱	۳۶۱۳۶۹۶	۲۰۷۷	۵۰/۴۵۸۹	۳۲/۶۵۹۷
۰۰۷-۴۲	سد تنظیمی	زاینده‌رود	۴۷۹۷۰۰	۳۶۲۰۰۶۷	۱۹۶۲	۵۰/۷۸۳۳۷۸	۳۲/۷۱۸۱۹۱
۰۰۹-۴۲	پل زمانخان	زاینده‌رود	۴۹۰۰۵۰	۳۵۹۵۷۳۵	۱۸۵۹	۵۰/۸۹۴۰۸۲	۳۲/۴۹۸۸۳۶
۰۱۰-۴۲	چم آسمان	زاینده‌رود	۵۲۰۲۳۲	۳۵۸۱۷۵۶	۱۷۲۴	۵۱/۲۱۵۰۷۱	۳۲/۳۷۲۵۹۰
۰۱۱-۴۲	پل کله	زاینده‌رود	۵۲۱۴۵۱	۳۵۸۲۵۱۷	۱۷۱۵	۵۱/۲۲۸۰۴۶	۳۲/۳۷۹۴۳۲
۰۵۰-۴۲	دیزیچه	زاینده‌رود	۵۴۸۸۷۱	۳۵۸۱۷۴۷	۱۶۵۱	۵۱/۵۱۹۵۰۱	۳۲/۳۷۱۶۲۲
۰۴۹-۴۲	لنج	زاینده‌رود	۵۵۲۴۳۰	۳۵۸۴۱۸۹	۱۶۴۸	۵۱/۵۵۷۴۶۷	۳۲/۳۹۳۴۸۹
۴۵۹-۴۲	موسیان	زاینده‌رود	۵۴۹۳۸۶	۳۶۰۴۵۲۹	۱۶۰۰	۵۱/۵۲۶۱۷۰	۳۲/۵۷۷۱۱۰

محاسبه شاخص WQI

شاخص WQI یکی از شاخص‌های پرکاربرد برای تعیین کیفیت شیمیایی آب‌های سطحی و زیرزمینی است که روش‌های متفاوتی برای محاسبه آن در تحقیقات ارائه شده است. در این تحقیق شاخص NSFQI استفاده شده که یکی از اولین و پرکاربردترین شاخص‌ها برای ارزیابی کلی وضعیت کیفیت آب بوده (Alexakis et al. 2016، Sutadian et al. 2016) و بر اساس جدول ۲ در پنج رده خیلی بد، بد، متوسط، خوب و عالی طبقه‌بندی می‌شود (Effendi and Wardiatno 2015; Yadav et al. 2010; Tiwari et al. 2022).

شاخص NSFQI از طریق رابطه زیر محاسبه شده است (Tiwari et al. 2022):



$$NSFWQI = \sum_{i=1}^n q_i w_i \quad \text{رابطه ۱}$$

که در رابطه بالا w_i وزن نسبی هر ویژگی کیفی آب بر اساس اهمیت آن برای آب آشامیدنی است (مجموع w_i ها برابر با ۱ است). وزن هر ویژگی با استفاده از دستورالعمل ارائه شده توسط سازمان محیط‌زیست ایران و اهمیت هر ویژگی برای آب آشامیدنی در جدول ۳ ارائه شده است.

همچنین q_i رتبه‌بندی کیفیت هر ویژگی مشخص و نسبت مقدار واقعی به مقدار استاندارد آب آشامیدنی است (Tiwari et al. 2022):

$$q_i = \frac{c_i}{s_i} \times 100 \quad \text{رابطه ۲}$$

که c_i مقدار اندازه‌گیری شده ویژگی، و s_i مقدار استاندارد ویژگی مورد نظر است.

جدول ۲- طبقه‌بندی NSFWQI

مقدار NSFWQI	کیفیت آب
۲۵-۰	خیلی بد
۵۰-۲۶	بد
۷۵-۵۱	متوسط
۹۰-۷۶	خوب
۱۰۰-۹۱	عالی

جدول ۳: ویژگی‌های کیفیت آب و وزن ویژگی‌ها برای NSFWQI

وزن‌های اصلی				وزن‌های اصلاح شده			
شماره	ویژگی	وزن	شماره	ویژگی	وزن	استاندارد	
۱	اکسیژن محلول	۰/۱۷	۱	pH	۰/۰۵	۸/۵	
۲	pH	۰/۱۱	۲	هدایت الکتریکی $\mu\text{S}/\text{cm}$	۰/۰۹۶	۱۵۰۰	
۳	اکسیژن‌خواهی بیولوژیکی	۰/۱۱	۳	کل جامدات محلول mg/lit	۰/۱	۵۰۰	
۴	دما	۰/۱۰	۴	سولفات mg/lit	۰/۱	۲۵۰	
۵	فسفات	۰/۱۰	۵	بیکربنات mg/lit	۰/۱	۱۲۰	
۶	نیتрат	۰/۱۰	۶	کلر mg/lit	۰/۱	۲۵۰	
۷	کدورت	۰/۰۸	۷	کلسیم mg/lit	۰/۱۴۵	۷۵	
۸	کل جامدات	۰/۰۷	۸	منیزیم mg/lit	۰/۱۵	۵۰	
۹	کلیفرم مدفوعی	۰/۱۶	۹	سدیم mg/lit	۰/۱	۲۰۰	
			۱۰	سختی mg/lit	۰/۰۵۹	۵۰۰	
	کل	۱		کل	۱		

مدل‌های یادگیری ماشین

مدل‌های یادگیری ماشین (ML) به دلیل توانایی آن‌ها در ایجاد روابط پیچیده بین ویژگی‌های ورودی و متغیرهای هدف، به طور گسترده در مدل‌سازی استفاده شده‌اند. در این مطالعه، از مدل‌های ML برای پیش‌بینی شاخص کیفی آب (WQI) بر اساس ویژگی‌های انتخاب‌شده استفاده و کدنویسی در فضای ابری گوگل کولب با زبان برنامه‌نویسی پایتون انجام گردید (<https://colab.research.google.com/>). باتوجه به توصیه‌های تحقیقات پیشین، مجموعه‌آزمون (اعتبارسنجی) متشکل از ۲۰ درصد داده‌ها بود که به صورت تصادفی و با استفاده از الگوریتم موجود در کتابخانه sklearn پایتون انتخاب گردید، درحالی که ۸۰ درصد باقی‌مانده برای آموزش استفاده شد (Ramya et al. 2024, Sidek et al. 2024). اعتبارسنجی در این تحقیق به سه روش انجام گردید: در شیوه اول از ۲۰ درصد داده‌های ورودی به منظور بررسی اعتبار مدل آموزش‌یافته استفاده گردید. در روش دوم با استفاده از روش اعتبارسنجی متقابل داده‌ها به ۵ دسته تقسیم شده و ۵ بار مدل اجرا و میزان خطا محاسبه گردید. در شیوه سوم تحلیل عدم قطعیت انجام شد. از مزایای مدل‌های یادگیری ماشین می‌توان به این موارد اشاره نمود: قابلیت استفاده در مواقعی که ارتباط بین پارامتر خروجی و پارامترهای ورودی نامشخص است، صرفه‌جویی در زمان و هزینه، قابلیت استفاده برای حجم بالای داده‌ها (که در این شرایط روش‌های برنامه‌نویسی کلاسیک قابلیت استفاده نداشته و یا در صورت

استفاده نیاز به ابررایانه است). عیب استفاده از روش‌های یادگیری ماشین نیز بیش برآزش یا کم برآزش دادن روش‌های مذکور است که در شرایط داده کم همراه با دامنه تغییرات زیاد رخ می‌دهد.

روش‌های شتاب‌دهنده (Boosting Methods) یادگیری ماشین تقویت‌کننده روش‌های ضعیف یادگیری ماشین هستند. شتاب دادن تا زمانی که تابع خطا به حداقل مقدار خود برسد ادامه می‌یابد؛ بنابراین یک روش شتاب‌دهنده شامل سه بخش است: تابع ضرر، روش یادگیری ضعیف، و مدل تجميع‌کننده نتایج یادگیری ماشین ضعیف. دو روش معروف شتاب‌دهنده عبارت‌اند از Gradient Boosting (GB) و Extreme Gradient Boosting (XGBoost). روش GB که در ابتدا توسط برایمن (۲۰۰۱) ایجاد شد، یک روش مجموعه متوالی است و در آن یادگیرندگان ضعیف، معمولاً درختان تصمیم، به طور مکرر برای تصحیح خطاهای مدل قبلی اضافه می‌شوند. بر اساس تحقیقات قبلی، GB مدلی است که داده‌های ناهمگن را به خوبی مدیریت کرده و در پیش‌بینی‌های بسیار دقیق مهارت دارد (Polikar, 2021; Wu et al. 2020; Bentejac et al. 2012). روش (XGBoost) پیشنهاد شده توسط (Chen and Guestrin 2016)، یک نسخه بهینه از Gradient Boosting است که چندین پیشرفت از جمله منظم‌سازی، و هرس درختان کارآمد در آن اعمال شده است. این ویژگی‌ها مقیاس‌پذیری، دقت و کارایی محاسباتی مدل را بهبود می‌بخشد. XGBoost از پردازش موازی پشتیبانی کرده و به دلیل توانایی آن در مدیریت داده‌های با ابعاد بالا و الگوهای پیچیده، شناخته شده است. ویژگی نامبرده این مدل را به گزینه‌ای برای مدل‌سازی پیش‌بینی‌کننده تبدیل می‌کند. در هر دو روش از درخت تصمیم‌گیری به عنوان روش یادگیری ضعیف استفاده می‌شود، سپس بر اساس نتایج درخت تصمیم‌گیری یک درخت تصمیم‌گیری جدید ایجاد و خطای آن محاسبه می‌گردد. این عمل تا حداقل شدن خطا ادامه می‌یابد.

اهمیت و انتخاب ویژگی

مدل‌های یادگیری ماشین متغیرها یا ویژگی‌های ورودی را با تخصیص امتیازها یا وزن‌های اهمیت بر اساس محاسبات داخلی آن‌ها ارزیابی می‌کنند (Siham et al. 2021). این امتیازات نشان‌دهنده میزان تأثیر هر متغیر ورودی بر پیش‌بینی‌های مدل است. انتخاب ویژگی‌های ورودی نقشی محوری در پایداری و انعطاف‌پذیری مدل پیش‌بینی دارد. با بررسی و انتخاب مناسب متغیرهای ورودی مرتبط، می‌توان ثبات مدل‌ها را افزایش داده و از پیش‌بینی‌های ثابت و قابل اعتماد در سناریوهای مختلف اطمینان حاصل کرد (Gültekin and Sakar, 2018). Hameed et al., 2017; Singha et al., 2021). در این تحقیق آنالیز اهمیت ویژگی توسط روش SHapley Additive (SHAP) انجام شد. آنالیز SHAP مبتنی بر تئوری بازی‌ها و برای توضیح خروجی هر مدل یادگیری ماشین بوده، همچنین اثرگذاری هر یک از ویژگی‌ها را بر روی پارامتر هدف مشخص می‌کند. بر اساس آنالیز انجام شده ویژگی‌ها اولویت‌بندی شده و ۶ ترکیب تعریف گردید. سپس مدل‌های یادگیری ماشین برای هر ترکیب و برای همه ایستگاه‌ها اجرا و مقادیر WQI پیش‌بینی‌شده به دست آمد. به منظور اعتبارسنجی، مقادیر پیش‌بینی‌شده WQI با مقادیر اندازه‌گیری‌شده از معیارهای ارزیابی استفاده شد.

معیارهای ارزیابی

در این تحقیق از ۶ معیار ارزیابی استفاده شد که در ادامه ارائه گردیده است (Malone et al. 2017, Fonseca et al. 2024, Salami and Ehteshami 2015, Box et al. 2015, Kalin and Isik, 2010).

ضریب تعیین (R^2)

معیار R^2 نسبت واریانس در متغیر هدف را که توسط مدل توضیح داده شده، اندازه‌گیری می‌کند. این معیار به این صورت تعریف می‌شود:

$$R^2 = 1 - \left[\frac{\sum_{i=1}^n (TP_{actual,i} - TP_{pred,i})^2}{\sum_{i=1}^n (TP_{actual,i} - \text{mean}(TP_{actual}))^2} \right] \quad \text{رابطه ۳}$$

مقدار R^2 از صفر تا ۱ متغیر است، مقدار بیشتر نشان‌دهنده تناسب بهتر مدل با داده‌هاست. مقدار برابر با ۱ نشان‌دهنده یک تناسب کامل است، درحالی‌که مقدار نزدیک به صفر نشان می‌دهد که مدل در گرفتن واریانس در داده‌ها ناموفق بوده است.

میانگین قدرمطلق خطا (MAE)

این معیار میانگین بزرگی خطاهای پیش‌بینی را کمی می‌کند. مقادیر کوچک‌تر MAE دقت بهتر را نشان داده، و مقدار نزدیک‌تر به صفر ایده‌آل در نظر گرفته می‌شود.

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |TP_{actual,i} - TP_{pred,i}|}{n} \quad \text{رابطه ۴}$$

حداکثر خطا (ME)

این معیار حداکثر مقدار تفاوت بین ویژگی واقعی و پیش‌بینی شده را به دست داده، و مقدار نزدیک به صفر ایده‌آل در نظر گرفته می‌شود:

$$ME = \max |TP_{actual,i} - TP_{pred,i}| \quad (\text{رابطه ۵})$$

میانگین مربعات خطا (MSE)

خطای میانگین مربعات یا MSE، فاصله خط رگرسیونی را با مجموعه‌ای از نقاط داده اندازه‌گیری می‌کند. اگر مدل یادگیری ماشین بدون خطا باشد، MSE برابر با صفر خواهد بود. میانگین مربع خطا (MSE) اغلب زمانی استفاده می‌شود که هدف جریمه بیشتر خطاهای بزرگ‌تر نسبت به خطاهای کوچک‌تر باشد.

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^n (TP_{actual,i} - TP_{pred,i})^2}{n} \quad (\text{رابطه ۶})$$

جذر میانگین مربعات خطا (RMSE)

یک معیار استاندارد برای اندازه‌گیری خطا بین مقادیر پیش‌بینی شده و واقعی در رگرسیون است. این معیار به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (TP_{actual,i} - TP_{pred,i})^2}{n}} \quad (\text{رابطه ۷})$$

مقادیر کمتر RMSE نشان‌دهنده عملکرد بهتر مدل است.

جذر میانگین مربعات خطای نرمال شده (NRMSE)

این معیار، حاصل تقسیم جذر میانگین مربعات خطا بر میانگین مقادیر اندازه‌گیری شده، به همین دلیل عددی بدون بُعد بوده و برای گزارش بسیار مناسب است.

$$NRMSE = \frac{\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (TP_{actual,i} - TP_{pred,i})^2}{n}}}{\text{mean}(TP_{actual})} \quad (\text{رابطه ۸})$$

در تمامی روابط بالا TP_{actual} مقادیر مشاهده شده، و TP_{pred} مقادیر پیش‌بینی شده را نشان می‌دهد. n تعداد کل داده‌هاست.

یافته‌های پژوهشی و بحث

در جدول ۴ مشخصات آماری ویژگی‌های استفاده شده در این تحقیق ارائه شده است.

در این جدول یک نمای کلی از میانگین، حداقل، حداکثر، انحراف معیار، چولگی و کشیدگی ارائه شده است. میانگین pH استانداردهای کیفیت آب سطحی را برآورده کرده و انحراف معیار در بازه ۰/۳۲۴-۰/۳۸۱ نشان‌دهنده خواص فیزیکی نسبتاً پایدار است. میانگین هدایت الکتریکی در تمام ایستگاه‌ها در محدوده استاندارد WHO قرار گرفت، اگر چه حداکثر آن در ایستگاه‌های دیزیچه، لنج و موسیان از مقدار مجاز بالاتر بود. در ایستگاه‌های نامبرده انحراف معیار نیز مقادیر بالایی نشان داد. لازم به ذکر است که EC شاخص کیفیت فیزیکی آب است که عمدتاً تحت تأثیر شرایط هواشناسی و املاح آب قرار می‌گیرد (Li et al. 2014, Cheng et al. 2020). از سوی دیگر میانگین ویژگی TDS در ایستگاه‌های دیزیچه و لنج، و میانگین سولفات در ایستگاه دیزیچه بالاتر از حد استاندارد WHO قرار گرفت که نشان از بالابودن میزان بار رسوب معلق در این ایستگاه‌ها داشته و جهت تأمین آب شرب در آنها نیاز به تمهیدات جدی است. دو آنیون بیکربنات و کلر، و همچنین سه کاتیون کلسیم، منیزیم و سدیم مقادیر میانگین بسیار کمتر از حد استاندارد نشان دادند. ویژگی TH هم اگر چه از حد استاندارد کیفیت آب‌های سطحی گذر نکرده، اما مقادیر بالای ۱۰۰mg/lit نشان داد.

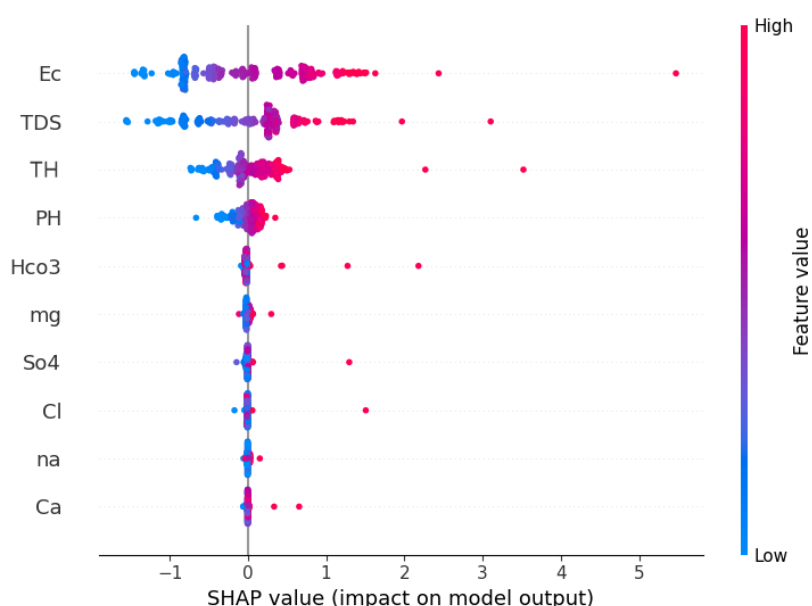
از آنجایی که متغیرهای مختلف کیفیت آب به طور یکسان در پدیدآمدن مقادیر WQI مشارکت نمی‌کنند، می‌توان چندین متغیر تعیین‌کننده را که وضعیت کیفیت آب را به طور معقول و بدون ازدست‌دادن اطلاعات کلیدی منعکس کنند شناسایی کرد. در این تحقیق تلاش شد تا با استفاده از شاخص‌های کیفی کمتری که کیفیت آب را به طور مناسب منعکس می‌کند، یک ارزیابی جامع پیش‌بینی‌کننده کیفیت آب انجام شود. این آنالیز با استفاده از روش SHAP انجام شد و نتیجه آن در شکل ۳ ارائه شده است.

جدول ۴- مشخصات آماری متغیرهای کیفیت آب مورد مطالعه در رودخانه زاینده‌رود

متغیر کیفیت آب	آماره	قلعه شاهرخ	سد تنظیمی	پل زمانخان	سد چم اسمان	پل کله	دیزچه	لنج	موسیان
pH	میانگین	۷/۷۶۶	۷/۷۷۹	۷/۸۱۳	۷/۸۷۵	۷/۸۰۷	۷/۸۹۹	۷/۷۸۹	۷/۸۲۵
	حداکثر	۸/۸۰۰	۸/۵۰۰	۸/۷۰۰	۸/۶۰۰	۸/۶۰۰	۸/۸۰۰	۸/۹۰۰	۹/۱۰۰
	حداقل	۶/۰۰۰	۶/۹۰۰	۵/۵۰۰	۷/۲۰۰	۶/۸۰۰	۷/۰۰۰	۶/۸۰۰	۶/۹۰۰
	انحراف معیار	۰/۳۴۳	۰/۳۳۱	۰/۳۸۱	۰/۳۳۳	۰/۳۲۴	۰/۳۴۱	۰/۳۶۸	۰/۳۶۷
	چولگی	-۰/۶۹۲	-۰/۱۶۵	-۰/۹۰۷	۰/۲۲۸	-۰/۰۹۳	-۰/۰۷۰	۰/۲۲۵	۰/۲۳۴
هدایت الکتریکی $\mu\text{s}/\text{cm}$	کشییدگی	۲/۰۸۰	-۰/۳۵۱	۳/۹۲۸	-۰/۵۷۱	-۰/۱۴۶	-۰/۱۲۱	-۰/۳۴۹	۰/۵۵۰
	میانگین	۳۴۸/۵۵۷	۳۲۰/۳۷۳	۳۳۸/۶۵۵	۳۸۸/۴۵۴	۴۲۵/۸۸۳	۹۰۰/۶۶۲	۷۷۷/۹۳۷	۶۸۰/۲۳۳
	حداکثر	۱۰۴۵/۰۰	۱۲۲۹/۰۰	۱۲۲۱/۰۰	۶۲۳/۰۰۰	۱۲۱۹/۰۰۰	۲۳۰۰/۰۰۰	۲۰۱۰/۰۰۰	۱۵۴۷/۰۰۰
	حداقل	۱۸۴/۰۰۰	۲۱۳/۰۰۰	۲۱۸/۰۰۰	۲۲۸/۰۰۰	۲۴۲/۰۰۰	۳۲۹/۰۰۰	۳۵۳/۰۰۰	۳۶۳/۰۰۰
	انحراف معیار	۷۶/۳۴۹	۶۴/۴۵۷	۷۷/۱۲۴	۶۰/۴۲۰	۱۴۶/۰۵۰	۵۰۰/۹۴۲	۳۸۳/۷۵۶	۲۵۹/۹۶۸
کل جامدات محلول mg/lit	چولگی	۲/۶۹۰	۹/۹۷۶	۶/۸۷۴	۰/۴۳۶	۲/۶۱۰	۰/۹۷۷	۱/۳۷۱	۱/۱۱۷
	کشییدگی	۲۳/۱۷۹	۱۳۹/۷۸۲	۷۰/۶۹۲	۲/۱۱۴	۹/۳۴۲	-۰/۰۷۰	-۰/۸۲۵	۰/۵۱۱
	میانگین	۲۲۶/۶۴۹	۲۰۸/۰۷۲	۲۲۰/۲۴۰	۲۵۲/۵۱۸	۲۷۶/۹۶۶	۵۷۸/۳۹۲	۵۱۰/۲۴۵	۴۴۸/۱۱۸
	حداکثر	۷۳۲/۰۰۰	۷۹۸/۹۰۰	۸۵۵/۰۰۰	۴۰۴/۹۵۰	۷۹۲/۰۰۰	۱۴۹۵/۰۰۰	۱۴۰۷/۰۰۰	۱۰۸۳/۰۰۰
	حداقل	۱۱۹/۶۰۰	۱۳۸/۰۰۰	۱۴۱/۷۰۰	۱۴۸/۰۰۰	۱۵۷/۰۰۰	۲۱۴/۰۰۰	۲۲۹/۵۰۰	۲۳۶/۰۰۰
سولفات meq/lit	انحراف معیار	۵۱/۳۳۱	۴۱/۹۶۱	۵۲/۶۹۵	۳۹/۲۸۰	۹۶/۰۷۹	۳۲۸/۲۰۸	۲۵۷/۲۱۸	۱۸۱/۶۱۰
	چولگی	۳/۳۶۵	۹/۹۴۵	۷/۵۴۹	۰/۴۳۷	۲/۶۸۸	۰/۹۸۳	۱/۲۸۸	۱/۲۶۳
	کشییدگی	۳۱/۷۲۰	۱۳۹/۱۳۵	۸۲/۷۱۸	۲/۱۱۴	۹/۹۲۸	-۰/۰۴۱	-۰/۸۷۶	۱/۰۱۵
	میانگین	۰/۴۲۷	۰/۴۷۰	۰/۵۸۸	۰/۶۸۳	۱/۰۳۹	۵۸۷/۳۹۲	۲/۶۳۴	۲/۲۲۵
	حداکثر	۳/۲۰۰	۳/۲۰۰	۱۰/۱۸۰	۱/۳۹۰	۷/۱۰۰	۱۴۹۵/۰۰۰	۸/۷۴۰	۷/۷۰۰
بیکربنات meq/lit	حداقل	۰/۰۱۰	۰/۰۱۰	۰/۰۱۰	۰/۲۷۰	۰/۰۱۰	۲۱۴/۰۰۰	۰/۱۱۰	۰/۱۱۰
	انحراف معیار	۰/۳۷۷	۰/۳۹۲	۰/۷۶۳	۰/۲۴۸	۰/۸۸۶	۳۲۸/۲۰۸	۱/۹۲۵	۱/۳۸۲
	چولگی	۲/۶۶۸	۲/۶۱۶	۸/۴۰۴	۰/۶۹۰	۲/۵۳۱	۰/۹۸۳	۱/۱۶۰	۱/۳۳۵
	کشییدگی	۱۱/۹۵۳	۱۰/۹۴۵	۹۴/۶۷۱	-۰/۲۵۳	۱۰/۶۹۵	-۰/۰۴۱	-۰/۵۹۲	۱/۹۰۲
	میانگین	۲/۷۱۷	۲/۵۱۹	۲/۵۷۱	۲/۷۸۸	۲/۸۱۹	۳/۳۴۵	۳/۱۴۲	۲/۹۹۰
کلر meq/lit	حداکثر	۶/۴۰۰	۳/۷۰۰	۴/۶۰۰	۳/۵۰۰	۵/۸۰۰	۵/۲۰۰	۵/۲۰۰	۵/۳۰۰
	حداقل	۱/۱۰۰	۰/۲۷۰	۱/۰۰۰	۱/۰۰۰	۱/۵۰۰	۱/۱۰۰	۱/۲۰۰	۰/۷۰۰
	انحراف معیار	۰/۵۴۷	۰/۳۸۴	۰/۴۰۶	۰/۵۱۰	۰/۴۷۶	۰/۷۳۴	۰/۶۱۶	۰/۵۴۸
	چولگی	۰/۹۳۹	-۱/۰۰۷	-۰/۳۷۱	-۱/۴۱۵	۰/۹۸۱	-۰/۱۴۸	۰/۳۴۷	-۰/۱۱۶
	کشییدگی	۶/۹۲۶	۴/۸۳۵	۳/۱۸۶	۱/۸۵۶	۵/۹۹۱	۰/۴۷۸	۰/۹۹۴	۴/۰۱۲
کلسیم meq/lit	میانگین	۰/۵۴۳	۰/۴۵۴	۰/۴۷۴	۰/۶۶۸	۰/۶۶۳	۳/۰۲۰	۲/۳۷۴	۱/۸۷۹
	حداکثر	۳/۵۰۰	۷/۶۰۰	۲/۲۰۰	۲/۷۰۰	۴/۶۰۰	۱۰/۸۰۰	۸/۹۰۰	۵/۹۰۰
	حداقل	۰/۱۰۰	۰/۲۰۰	۰/۲۰۰	۰/۱۰۰	۰/۲۰۰	۰/۲۰۰	۰/۴۰۰	۰/۵۰۰
	انحراف معیار	۰/۳۵۷	۰/۴۶۵	۰/۲۳۲	۰/۳۰۸	۰/۵۶۷	۲/۵۴۴	۱/۹۸۷	۱/۱۹۳
	چولگی	۳/۰۳۰	۱۲/۹۸۳	۲/۷۵۱	۳/۱۴۹	۴/۱۷۸	۱/۱۹۴	۱/۴۱۶	۱/۱۷۱
منیزیم meq/lit	کشییدگی	۱۷/۱۰۰	۱۹۷/۹۵۹	۱۳/۳۱۷	۱۹/۰۷۷	۲۱/۵۱۳	۰/۵۰۶	۱/۲۳۵	۰/۶۰۷
	میانگین	۲/۴۲۲	۲/۲۷۹	۲/۳۵۸	۲/۴۹۷	۲/۶۶۱	۴/۲۸۲	۳/۶۹۴	۳/۳۳۹
	حداکثر	۵/۲۰۰	۳/۰۰۰	۵/۰۰۰	۳/۵۰۰	۴/۶۰۰	۹/۰۰۰	۸/۶۰۰	۸/۶۰۰
	حداقل	۱/۰۰۰	۰/۹۰۰	۰/۹۰۰	۱/۱۰	۱/۲۰۰	۲/۰۰۰	۱/۳۰۰	۱/۳۰۰
	انحراف معیار	۰/۴۹۷	۰/۳۲۲	۰/۴۰۷	۰/۴۹۵	۰/۵۱۰	۱/۸۴۰	۱/۴۲۶	۰/۸۶۳
	چولگی	۰/۶۱۲	-۰/۸۶۳	۰/۷۹۳	-۰/۸۸۸	۰/۵۲۳	۱/۰۶۵	۱/۳۷۲	۱/۰۵۷
	کشییدگی	۴/۳۱۸	۲/۱۴۰	۷/۳۷۹	۱/۰۵۱	۱/۵۴۸	۰/۲۰۰	۱/۵۸۲	۲/۰۴۵
	میانگین	۰/۷۵۹	۰/۷۱۹	۰/۷۶۱	۰/۸۵۹	۰/۸۹۳	۱/۵۷۵	۱/۴۷۰	۱/۳۵۱
	حداکثر	۲/۵۰۰	۲/۱۰۰	۲/۶۰۰	۲/۲۰۰	۲/۳۰۰	۵/۱۰۰	۵/۸۰۰	۵/۵۰۰
	حداقل	۰/۲۰۰	۰/۱۰۰	۰/۲۰۰	۰/۳۰۰	۰/۲۰۰	۰/۳۰۰	۰/۳۰۰	۰/۱۰۰
	انحراف معیار	۰/۳۳۳	۰/۳۰۲	۰/۳۲۰	۰/۳۲۰	۰/۴۰۱	۰/۸۳۱	۰/۷۸۲	۰/۶۷۲
	چولگی	۱/۲۱۴	۱/۲۵۹	۱/۵۷۹	۱/۵۵۷	۱/۰۱۰	۱/۱۵۷	۲/۰۵۷	۱/۷۲۹



۷/۴۰۶	۶/۹۰۹	۱/۹۰۱	۱/۰۳۴	۳/۸۳۹	۵/۱۲۳	۲/۹۶۰	۲/۷۵۲	کشیدگی
۲/۲۹۳	۲/۸۹۵	۳/۴۸۸	۰/۸۹۷	۰/۶۲۶	۰/۴۴۱	۰/۳۷۷	۰/۴۳۰	میانگین
۸/۱۰۰	۱۱/۰۰۰	۱۱/۹۰۰	۶/۹۰۰	۲/۱۰۰	۶/۶۰۰	۷/۱۰۰	۳/۸۰۰	حداکثر
۰/۱۰۰	۰/۱۰۰	۰/۱۰۰	۰/۱۰۰	۰/۱۰۰	۰/۱۰۰	۰/۱۰۰	۰/۱۰۰	حداقل
۱/۵۴۲	۲/۲۳۴	۲/۹۳۵	۰/۸۷۱	۰/۳۷۷	۰/۵۰۴	۰/۴۸۴	۰/۳۷۷	انحراف معیار
۱/۰۵۶	۱/۲۲۶	۱/۰۱۹	۳/۱۵۱	۰/۷۲۱	۷/۵۲۲	۹/۸۹۸	۳/۲۰۶	چولگی
۰/۵۷۴	۰/۷۹۶	۰/۰۷۳	۱۴/۳۵۶	۱/۲۳۱	۸۲/۷۳۰	۱۳۲/۵۸۱	۲۲/۰۳۳	کشیدگی
۲۳۴/۴۸۹	۲۵۸/۱۸۸	۲۹۲/۸۴۶	۱۷۷/۷۲۶	۱۶۷/۷۸۴	۱۵۵/۹۵۲	۱۴۹/۸۵۹	۱۵۹/۰۱۶	میانگین
۴۱۰/۰۰۰	۵۵۰/۰۰۰	۶۶۰/۰۰۰	۳۰۵/۰۰۰	۲۲۰/۰۰۰	۳۵۵/۰۰۰	۲۴۰/۰۰۰	۳۶۵/۰۰۰	حداکثر
۱۲۵/۰۰۰	۱۴۵/۰۰۰	۱۴۵/۰۰۰	۱۰۰/۰۰۰	۸۵/۰۰۰	۹۰/۰۰۰	۹۰/۰۰۰	۸۰/۰۰۰	حداقل
۵۷/۵۱۵	۹۱/۲۳۲	۱۲۳/۹۰۸	۳۲/۶۹۱	۲۴/۰۵۵	۲۳/۹۸۲	۱۸/۱۶۱	۲۹/۷۲۲	انحراف معیار
۰/۹۷۳	۱/۳۸۹	۱/۰۶۹	۱/۲۲۱	-۱/۱۴۷	۲/۴۹۹	۰/۳۵۳	۱/۳۸۰	چولگی
۰/۳۴۶	۱/۲۰۶	۰/۲۲۵	۲/۱۹۰	۲/۴۱۳	۱۹/۵۹۵	۲/۹۴۰	۹/۸۱۹	کشیدگی
۲۲/۲۶۴	۲۴/۵۷۴	۲۷/۶۱۵	۱۶/۰۸۵	۱۵/۲۰۷	۱۳/۹۷۱	۱۳/۴۷۸	۱۴/۱۹۱	میانگین
۴۳/۶۵۳	۵۵/۶۱۲	۶۱/۷۶۳	۳۳/۰۳۱	۲۰/۵۲۶	۳۶/۳۵۰	۳۳/۶۱۸	۳۲/۴۵۷	حداکثر
۱۴/۴۴۲	۱۴/۳۳۳	۱۳/۹۷۱	۱۱/۴۸۳	۱۱/۰۸۲	۱۰/۹۲۰	۱۰/۷۳۶	۱۰/۳۷۱	حداقل
۶/۳۴۲	۹/۳۱۷	۱۲/۱۰۹	۳/۳۹۴	۱/۵۲۰	۱/۹۳۷	۱/۵۰۷	۱/۹۹۸	انحراف معیار
۱/۱۹۰	۱/۲۹۷	۰/۹۹۸	۲/۳۲۴	۰/۰۶۹	۶/۸۱۸	۸/۴۸۹	۲/۷۰۱	چولگی
۰/۷۴۱	۰/۸۶۷	-۰/۰۲۰	۷/۴۱۵	۱/۵۶۹	۷۱/۲۲۶	۱۱۲/۴۹۷	۲۳/۵۱۸	کشیدگی



شکل ۳- رتبه‌بندی اهمیت ۱۰ ویژگی استفاده‌شده در این تحقیق

همان‌طور که در شکل ۳ نشان داده شده، بر اساس رتبه‌بندی اهمیت مدل GB، EC تأثیرگذارترین عامل در پیش‌بینی WQI بود، و پس از آن TDS، TH، pH، HCO_3^- ، Mg^{2+} ، SO_4^{2-} ، Cl^- ، Na^+ و Ca^{2+} قرار گرفتند. شاخص‌های رتبه برتر آنهایی بودند که از حد مطلوب و یا استاندارد فراتر رفتند. بدین صورت که میانگین مقدار EC اگر چه از حد استاندارد فراتر نبوده؛ اما در حد مطلوب آب شرب ($300-1000 \mu\text{S}/\text{cm}$) نیز قرار نداشته است. همچنین میانگین مقدار TDS در دو ایستگاه از حد استاندارد فراتر بوده و در بقیه ایستگاه‌ها مقادیر میانگین به حداکثر استاندارد نزدیک‌تر بوده است. از سوی دیگر اگرچه میانگین TH از حد استاندارد $500 \text{ mg}/\text{lit}$ که توسط WHO ارائه شده فراتر نرفته است، اما از حد مطلوب و متعادل $100 \text{ mg}/\text{lit}$ بیشتر بوده است. پایین‌ترین اهمیت به Ca^{2+} اختصاص داشته که احتمالاً به دلیل مقادیر نسبتاً پایین آنها در کل سری زمانی، با بازه میانگین غلظت‌های $2/3-279/694 \text{ mg}/\text{lit}$ برای کلسیم و $0/2-377/293 \text{ mg}/\text{lit}$ برای سدیم، بود که تأثیر کمی بر کیفیت آب داشت. بر اساس درجات اهمیت به‌دست آمده از شکل ۳، تعداد ۶ سری تعریف شد که در جدول ۵ ارائه شده است. در هر سری بسته به درجه اهمیت به‌دست آمده ترکیب‌های مختلفی از ویژگی‌های ورودی به

مدل در نظر گرفته شد.

جدول ۵: نتایج انتخاب ویژگی‌ها برای پیش‌بینی شاخص کیفیت آب (WQI)

شماره سری	ویژگی	درجه اهمیت ویژگی	شماره سری	ویژگی	درجه اهمیت ویژگی
۱	EC, TDS, TH, pH, HCO ₃ ⁻	۱/۵۸۰	۴	EC, TDS	۱/۱۹۷
۲	EC, TDS, TH, pH	۱/۵۵۷	۵	TDS	۰/۵۲۴
۳	EC, TDS, TH	۱/۴۴۷	۶	EC	۰/۶۷۳

هر یک از ترکیب‌های تعریف شده برای تمام ۸ ایستگاه اجرا و نتایج پیش‌بینی WQI در ادامه به تفکیک ایستگاه‌ها ارائه شده است.

ایستگاه قلعه شاهرخ

در ایستگاه قلعه شاهرخ مقایسه ۶ معیار ارزیابی نشان داد که روش GB نسبت به روش XGB نتایج بهتری ارائه کرده است (جدول ۶). اگرچه تفاوت بین مقادیر ویژگی‌های ارزیابی زیاد نبود، به‌گونه‌ای که مقدار ضریب تعیین در بازه ۰/۹۵۰-۰/۹۹۱ و مقدار RMSE در بازه ۰/۰-۱۵۴/۳۶۴ قرار گرفت؛ بنابراین در این ایستگاه می‌توان روش GB را به‌عنوان روش مؤثر جهت برآورد ویژگی کیفیت آب معرفی کرد. همچنین نتایج مقایسه معیارهای ارزیابی نشان داد سری ۳ که شامل ویژگی‌های EC، TDS، و TH است بهترین سری در برآورد مقدار ویژگی کیفیت آب (WQI) بوده است. چنانچه در برآورد شاخص کیفیت آب (WQI) دقت کمتری مدنظر باشد می‌توان سری ۲ را نیز پیشنهاد داد. اما باتوجه‌به اینکه در سری ۳ تعداد ویژگی کمتری مورد نیاز است انتخاب این سری به هدف استفاده از روش‌های هوش مصنوعی و یادگیری ماشین نزدیک‌تر خواهد بود.

جدول ۶- معیارهای ارزیابی برای مدل‌ها و سری‌های مختلف در ایستگاه قلعه شاهرخ

شماره سری	مدل یادگیری ماشین	R ²	MAE	ME	MSE	RMSE	NRMSE
۱	GB	۰/۹۸۷	۰/۱۱۳	۰/۹۹۷	۰/۰۳۳	۰/۱۸۴	۱/۲۸۱
	XGB	۰/۹۸۵	۰/۱۲۹	۰/۹۵۰	۰/۰۳۹	۰/۱۹۹	۱/۳۸۵
۲	GB	۰/۹۹۱	۰/۱۰۸	۰/۶۷۶	۰/۰۲۴	۰/۱۵۴	۱/۰۷۴
	XGB	۰/۹۸۸	۰/۱۱۸	۰/۸۷۶	۰/۰۳۱	۰/۱۷۷	۱/۲۳۸
۳	GB	۰/۹۷۲	۰/۲۱۶	۰/۷۴۷	۰/۰۷۶	۰/۲۷۶	۱/۹۲۸
	XGB	۰/۹۶۶	۰/۲۴۱	۰/۸۶۳	۰/۰۹۱	۰/۳۰۱	۱/۵۱۶
۴	GB	۰/۹۶۲	۰/۲۶۰	۰/۸۱۱	۰/۱۰۲	۰/۳۱۹	۲/۲۲۶
	XGB	۰/۹۵۱	۰/۳۰۴	۰/۸۸۷	۰/۱۳۲	۰/۳۶۳	۲/۵۳۳
۵	GB	۰/۹۶۲	۰/۲۵۹	۰/۸۱۹	۰/۱۰۲	۰/۳۱۹	۲/۲۲۶
	XGB	۰/۹۵۰	۰/۲۹۵	۰/۸۴۰	۰/۱۳۳	۰/۳۶۴	۲/۵۴۴
۶	GB	۰/۹۶۵	۰/۲۵۳	۰/۷۵۶	۰/۰۹۴	۰/۳۰۷	۲/۱۴۲
	XGB	۰/۹۶۱	۰/۲۷۸	۰/۶۸۶	۰/۱۰۶	۰/۳۲۵	۲/۲۶۹

ایستگاه سد تنظیمی زاینده‌رود

در ایستگاه سد تنظیمی زاینده‌رود مقایسه ۶ معیار ارزیابی نشان داد که الگوریتم GB نسبت به الگوریتم XGB نتایج بهتری ارائه کرده است (جدول ۷). مقایسه مقادیر نشان داد که مقادیر ویژگی‌های ارزیابی اعدادی نزدیک به هم بودند، به‌گونه‌ای که مقدار ضریب R² در بازه ۰/۰-۸۰۲/۹۸۷ و مقدار RMSE در بازه ۰/۱۱۲-۰/۴۷۲ قرار گرفت؛ بنابراین در این ایستگاه می‌توان روش GB را به‌عنوان روش مؤثر معرفی کرد. همچنین نتایج مقایسه معیارهای ارزیابی نشان داد که سری ۲ بهترین سری در برآورد مقدار ویژگی کیفیت آب (WQI) بوده است.



جدول ۷- معیارهای ارزیابی برای مدل‌ها و سری‌های مختلف در ایستگاه سد تنظیمی زاینده‌رود

شماره سری	مدل یادگیری ماشین	R ²	MAE	ME	MSE	RMSE	NRMSE
۱	GB	۰/۹۸۷	۰/۰۷۹	۰/۴۸۴	۰/۰۱۳	۰/۱۱۴	۰/۸۵۶
	XGB	۰/۹۷۰	۰/۱۱۴	۰/۷۰۷	۰/۰۲۹	۰/۱۷۲	۱/۲۹۳
۲	GB	۰/۹۸۷	۰/۰۷۹	۰/۴۵۵	۰/۰۱۳	۰/۱۱۲	۰/۸۴۷
	XGB	۰/۹۷۲	۰/۱۱۱	۰/۷۱۴	۰/۰۲۷	۰/۱۶۵	۱/۲۴۱
۳	GB	۰/۹۵۶	۰/۱۵۷	۰/۵۹۱	۰/۰۴۴	۰/۲۱۰	۱/۵۷۹
	XGB	۰/۹۲۰	۰/۲۰۴	۰/۹۹۹	۰/۰۸۰	۰/۲۸۲	۲/۲۱۳
۴	GB	۰/۸۵۳	۰/۲۷۲	۱/۴۳۰	۰/۱۴۷	۰/۳۸۳	۲/۸۸۵
	XGB	۰/۷۷۶	۰/۳۴۳	۱/۵۲۱	۰/۲۲۳	۰/۴۷۲	۳/۵۵۴
۵	GB	۰/۸۵۷	۰/۲۶۷	۱/۳۹۲	۰/۱۴۳	۰/۳۷۸	۲/۸۴۴
	XGB	۰/۸۳۱	۰/۲۸۴	۱/۵۳۵	۰/۱۶۸	۰/۴۱۰	۳/۰۸۸
۶	GB	۰/۸۳۳	۰/۲۹۷	۱/۳۹۵	۰/۱۶۶	۰/۴۰۷	۳/۰۷۰
	XGB	۰/۸۰۲	۰/۳۲۴	۱/۴۱۸	۰/۱۹۷	۰/۴۴۴	۳/۳۴۱

ایستگاه پل زمان‌خان

در ایستگاه پل زمان‌خان مقایسه معیارهای ارزیابی نشان داد که الگوریتم GB نسبت به الگوریتم XGB نتایج بهتری ارائه کرده است (جدول ۸). علی‌رغم نزدیکی مقادیر عددی ویژگی‌های ارزیابی، به‌گونه‌ای که مقدار ضریب R² در بازه ۰/۹۷۸-۰/۸۲۳ و مقدار MAE در بازه ۰/۳۲۶-۰/۰۸۸ قرار گرفت، اما می‌توان روش GB را در این ایستگاه به‌منظور پیش‌بینی ویژگی کیفیت آب (WQI) پیشنهاد داد. همچنین نتایج مقایسه معیارهای ارزیابی نشان داد که سری ۲ بهترین سری در برآورد مقدار ویژگی کیفیت آب (WQI) بوده است.

جدول ۸- معیارهای ارزیابی برای مدل‌ها و سری‌های مختلف در ایستگاه پل زمان‌خان

شماره سری	مدل یادگیری ماشین	R ²	MAE	ME	MSE	RMSE	NRMSE
۱	GB	۰/۹۷۸	۰/۰۸۹	۱/۰۲۰	۰/۰۲۶۹	۰/۱۶۴	۱/۱۸۲
	XGB	۰/۹۷۱	۰/۱۱۵	۰/۹۶۰	۰/۰۳۵	۰/۱۸۷	۱/۳۴۹
۲	GB	۰/۹۷۸	۰/۰۸۸	۱/۰۴۲	۰/۰۲۷	۰/۱۶۵	۱/۱۸۸
	XGB	۰/۹۶۹	۰/۱۱۱	۱/۰۶۴	۰/۰۳۸	۰/۱۹۴	۱/۳۹۸
۳	GB	۰/۹۲۷	۰/۲۰۳	۱/۶۰۸	۰/۰۸۹	۰/۲۹۹	۲/۱۴۹
	XGB	۰/۸۹۹	۰/۲۳۷	۱/۷۳۸	۰/۱۲۴	۰/۳۵۲	۲/۵۳۵
۴	GB	۰/۸۶۹	۰/۲۷۵	۱/۶۶۴	۰/۱۶۰	۰/۴۰۰	۲/۸۸۲
	XGB	۰/۸۲۷	۰/۳۱۹	۱/۶۸۱	۰/۲۱۱	۰/۴۵۹۸	۳/۳۱۰
۵	GB	۰/۸۵۷	۰/۲۸۶	۱/۶۵۸	۰/۱۷۵	۰/۴۱۹	۳/۰۱۶
	XGB	۰/۸۲۳	۰/۳۲۶	۱/۵۸۶	۰/۲۱۶	۰/۴۶۵	۳/۳۴۶
۶	GB	۰/۸۸۸	۰/۲۵۴	۱/۶۶۹	۰/۱۳۷	۰/۳۷۰	۲/۶۶۴
	XGB	۰/۸۶۶	۰/۲۹۹	۱/۶۶۹	۰/۱۶۴	۰/۴۰۵	۲/۹۱۶

ایستگاه سد چم آسمان

در ایستگاه سد چم آسمان مقایسه ویژگی‌های شش‌گانه ارزیابی نشان داد که الگوریتم XGB نسبت به الگوریتم GB نتایج بهتری ارائه کرده است (جدول ۹). نتایج نشان داد که مقدار ضریب R² در بازه ۰/۹۸۶-۰/۹۱۴ و مقدار RMSE در بازه ۰/۳۴۳-۰/۱۳۷ قرار گرفت، اما با مقایسه تمامی ویژگی‌های ارزیابی می‌توان روش XGB را در این ایستگاه به‌منظور پیش‌بینی ویژگی کیفیت آب (WQI) پیشنهاد داد. همچنین نتایج مقایسه معیارهای ارزیابی نشان داد که سری ۳ بهترین سری در برآورد مقدار ویژگی کیفیت آب (WQI) بوده است. همان‌گونه که مشخص است، باتوجه‌به نزدیک بودن مقادیر ویژگی‌های ارزیابی می‌توان سری‌های بهتری معرفی کرد، اما چون هدف برداشت کمترین ویژگی‌های صحرایی است، لذا سری ۳ به‌عنوان سری بهینه پیشنهاد می‌شود.

جدول ۹- معیارهای ارزیابی برای مدل‌ها و سری‌های مختلف در ایستگاه سد چم آسمان

شماره سری	مدل یادگیری ماشین	R ²	MAE	ME	MSE	RMSE	NRMSE
۱	GB	۰/۹۸۴	۰/۱۱۳	۰/۳۶۱	۰/۰۲۲	۰/۱۴۷	۰/۹۷۷
	XGB	۰/۹۷۹	۰/۱۳۹	۰/۳۹۱	۰/۰۲۹	۰/۱۷۱	۱/۱۳۹
۲	GB	۰/۹۸۶	۰/۱۱۰	۰/۳۹۳	۰/۰۱۸۷	۰/۱۳۷	۰/۹۱۰
	XGB	۰/۹۸۲	۰/۱۱۹	۰/۳۶۰	۰/۰۲۵۰	۰/۱۵۸	۱/۰۵۲
۳	GB	۰/۹۴۶	۰/۲۲۳	۰/۵۴۲	۰/۰۷۳	۰/۲۷۱	۱/۸۰۳
	XGB	۰/۹۴۹	۰/۲۲۰	۰/۵۷۴	۰/۰۷۰	۰/۲۶۴	۱/۷۵۳
۴	GB	۰/۹۱۶	۰/۲۶۹	۰/۷۹۹	۰/۱۱۵	۰/۳۳۴	۲/۲۵۱
	XGB	۰/۹۲۲	۰/۲۴۴	۰/۷۸۱	۰/۱۰۶	۰/۳۲۶	۲/۱۶۸
۵	GB	۰/۹۲۱	۰/۲۶۳	۰/۷۷۹	۰/۱۰۸	۰/۳۲۹	۲/۱۸۵
	XGB	۰/۹۲۸	۰/۲۳۹	۰/۷۷۵	۰/۰۹۹	۰/۳۱۵	۲/۰۹۱
۶	GB	۰/۹۱۴	۰/۲۷۲	۰/۸۰۱	۰/۱۱۸	۰/۳۴۳	۲/۲۸۱
	XGB	۰/۹۲۲	۰/۲۴۵	۰/۷۸۲	۰/۱۰۷	۰/۳۲۶	۲/۱۶۹

ایستگاه پل کله

در ایستگاه پل کله مقایسه شش ویژگی ارزیابی نشان داد که الگوریتم GB نسبت به الگوریتم XGB بهتر عمل کرده، هرچند مقادیر بسیار نزدیک به هم برای ضریب R² در بازه ۰/۹۹۸-۰/۹۸۷ و مقدار MSE در بازه ۰/۱۵۸-۰/۰۲۱ قرار گرفت، اما با مقایسه تمامی ویژگی‌های ارزیابی می‌توان الگوریتم GB را در این ایستگاه به‌منظور پیش‌بینی ویژگی کیفیت آب (WQI) پیشنهاد داد (جدول ۱۰). همچنین نتیجه مقایسه معیارهای ارزیابی نشان داد که سری ۳ بهترین سری در برآورد مقدار ویژگی کیفیت آب (WQI) بوده است.

جدول ۱۰- معیارهای ارزیابی برای مدل‌ها و سری‌های مختلف در ایستگاه پل کله

شماره سری	مدل یادگیری ماشین	R ²	MAE	ME	MSE	RMSE	NRMSE
۱	GB	۰/۹۹۸	۰/۱۱۴	۰/۴۷۳	۰/۰۲۴	۰/۱۵۳	۰/۹۶۵
	XGB	۰/۹۹۶	۰/۱۵۹	۱/۰۸۳	۰/۰۵۷	۰/۲۳۹	۱/۴۹۹
۲	GB	۰/۹۹۸	۰/۱۱۰	۰/۴۵۳	۰/۰۲۱	۰/۱۴۵	۰/۹۰۷
	XGB	۰/۹۹۶	۰/۱۳۳	۱/۰۰۹	۰/۰۴۵	۰/۲۱۲	۱/۳۲۷
۳	GB	۰/۹۹۶	۰/۱۷۳	۰/۵۸۳	۰/۰۵۲	۰/۲۲۸	۱/۴۳۲
	XGB	۰/۹۹۲	۰/۲۳۹	۰/۹۹۸	۰/۰۹۹	۰/۳۱۵	۱/۹۷۵
۴	GB	۰/۹۹۳	۰/۲۲۸	۰/۷۶۶	۰/۰۸۴	۰/۲۹۰	۱/۸۱۹
	XGB	۰/۹۸۷	۰/۲۹۹	۱/۰۰۸	۰/۱۵۸	۰/۳۹۸	۲/۴۹۶
۵	GB	۰/۹۹۳	۰/۲۳۴	۰/۷۶۳	۰/۰۸۸	۰/۲۹۷	۱/۸۶۶
	XGB	۰/۹۸۸	۰/۲۹۱	۱/۰۰۹	۰/۱۵۰	۰/۳۸۷	۲/۴۲۸
۶	GB	۰/۹۹۳	۰/۲۲۷	۰/۷۷۸	۰/۰۸۴	۰/۲۸۹	۱/۸۱۲
	XGB	۰/۹۸۸	۰/۲۹۴	۱/۰۱۰	۰/۱۵۴	۰/۳۹۱	۲/۴۵۷

ایستگاه دیزیچه

در ایستگاه دیزیچه مقایسه ویژگی‌های ارزیابی که در بخش مواد و روش‌ها ارائه گردید، نشان داد که الگوریتم GB نسبت به الگوریتم XGB بهتر بوده است (جدول ۱۱). نتایج نشان داد مقادیر ضریب R² بسیار به یکدیگر نزدیک بوده و در بازه ۰/۹۹۹-۰/۹۹۶ قرار گرفته است، همچنین مقدار MAE در بازه ۰/۵۶۶-۰/۲۹۲ قرار گرفت؛ اما با مقایسه تمامی ویژگی‌های ارزیابی می‌توان الگوریتم GB را در این ایستگاه به‌منظور پیش‌بینی ویژگی کیفیت آب (WQI) پیشنهاد داد. همچنین به‌منظور انتخاب ترکیب بهینه برای برآورد ویژگی کیفیت آب، نتیجه مقایسه معیارهای ارزیابی نشان داد که سری ۳ بهترین سری در برآورد مقدار ویژگی کیفیت آب (WQI) بوده است.

جدول ۱۱- معیارهای ارزیابی برای مدل‌ها و سری‌های مختلف در ایستگاه دیزچه

شماره سری	مدل یادگیری ماشین	R ²	MAE	ME	MSE	RMSE	NRMSE
۱	GB	۰/۹۹۸	۰/۲۹۲	۱/۱۸۲	۰/۱۵۹۶	۰/۳۹۹۵	۱/۵۱۶
	XGB	۰/۹۹۷	۰/۴۹۶	۱/۹۳۰	۰/۴۳۹۷	۰/۶۶۳	۲/۵۱۶
۲	GB	۰/۹۹۹	۰/۲۹۲	۱/۱۸۲	۰/۱۵۸	۰/۳۹۸	۱/۵۰۹
	XGB	۰/۹۹۷	۰/۴۹۴	۱/۸۴۳	۰/۴۲۳	۰/۶۵۰	۲/۴۶۸
۳	GB	۰/۹۹۹	۰/۳۰۵	۱/۱۸۱	۰/۱۶۸	۰/۴۱۰	۱/۵۵۷
	XGB	۰/۹۹۷	۰/۵۳۱	۱/۹۸۹	۰/۴۷۴	۰/۶۸۸	۲/۶۱۲
۴	GB	۰/۹۹۸	۰/۳۹۱	۱/۵۸۵	۰/۲۸۱	۰/۵۲۹۷	۲/۰۱۰
	XGB	۰/۹۹۶	۰/۵۶۶	۱/۹۹۵	۰/۵۱۱	۰/۷۱۴	۲/۷۱۲
۵	GB	۰/۹۹۷	۰/۴۰۸	۱/۵۸۹۸	۰/۳۰۲	۰/۵۴۹	۲/۰۸۳
	XGB	۰/۹۹۶	۰/۶۲۱	۱/۹۸۹	۰/۶۱۷	۰/۷۸۵	۲/۹۸۰
۶	GB	۰/۹۹۸	۰/۳۹۰	۱/۵۸۵	۰/۲۷۹۶	۰/۵۲۹	۲/۰۰۷
	XGB	۰/۹۹۶	۰/۵۶۶	۱/۹۹۵	۰/۵۰۹	۰/۷۱۳	۲/۷۰۸

ایستگاه لنج

در ایستگاه لنج مقایسه ۶ معیار ارزیابی نشان داد که الگوریتم GB نسبت به الگوریتم XGB نتایج بهتری ارائه کرده است (جدول ۱۲). مقادیر به‌دست‌آمده حاکی از آن بود که ضریب R^2 با تغییرات بسیار اندک در بازه ۰/۹۹۷-۰/۹۸۷ قرار گرفته است؛ همچنین مقدار RMSE در بازه ۱/۲۰۱-۰/۵۳۷ قرار گرفت؛ اما با مقایسه تمامی ویژگی‌های ارزیابی می‌توان الگوریتم GB را در این ایستگاه به‌منظور پیش‌بینی ویژگی کیفیت آب (WQI) پیشنهاد داد. همچنین به‌منظور انتخاب ترکیب بهینه برای برآورد ویژگی کیفیت آب، و تلاش در انتخاب روشی که با حداقل ویژگی‌های کیفیت آب نتیجه بهتری را به دست دهد؛ نتیجه مقایسه معیارهای ارزیابی نشان داد سری ۵ بهترین سری در برآورد مقدار ویژگی کیفیت آب (WQI) بوده است.

جدول ۱۲- معیارهای ارزیابی برای مدل‌ها و سری‌های مختلف در ایستگاه لنج

شماره سری	مدل یادگیری ماشین	R ²	MAE	ME	MSE	RMSE	NRMSE
۱	GB	۰/۹۹۷	۰/۳۶۱	۱/۹۳۷	۰/۲۸۹	۰/۵۳۷	۲/۱۱۴
	XGB	۰/۹۹۱	۰/۶۱۷	۳/۸۷۷	۱/۰۳۴	۱/۰۱۷	۴/۰۰
۲	GB	۰/۹۹۷	۰/۳۶۱	۲/۴۸۱	۰/۳۵۲	۰/۵۹۴	۲/۳۳۶
	XGB	۰/۹۹۰	۰/۶۱۲	۴/۰۶۰	۱/۰۸۵	۱/۰۴۲	۴/۰۹۸
۳	GB	۰/۹۹۷	۰/۴۰۹	۲/۱۰۲	۰/۳۵۱	۰/۵۹۲	۲/۳۳۰
	XGB	۰/۹۹۲	۰/۶۲۷	۳/۵۴۷	۰/۹۰۱	۰/۹۴۹	۳/۷۳۶
۴	GB	۰/۹۹۶	۰/۵۱۷	۱/۹۳۶	۰/۴۲۵	۰/۶۵۲	۲/۶۵۶
	XGB	۰/۹۸۹۸	۰/۷۲۸	۳/۹۳۳	۱/۱۲۳	۱/۰۵۹۸	۴/۱۷۰
۵	GB	۰/۹۹۷	۰/۴۴۶	۱/۹۳۵	۰/۳۳۷	۰/۵۷۲	۲/۲۴۹۷
	XGB	۰/۹۹۷	۰/۴۹۲	۱/۹۳۸	۰/۳۸۲	۰/۶۱۸	۲/۴۳۳
۶	GB	۰/۹۹۱	۰/۶۷۷	۳/۲۷۳	۰/۹۸۵	۰/۹۹۳	۳/۹۰۶
	XGB	۰/۹۸۷	۰/۸۴۰	۳/۷۹۹	۱/۴۴۴	۱/۲۰۱	۴/۷۲۸

ایستگاه موسیان

در ایستگاه موسیان مقایسه پارامترهای شش‌گانه ارزیابی نشان داد که الگوریتم GB نسبت به الگوریتم XGB نتایج بهتری به دست داده است (جدول ۱۳). نتایج مقادیر نزدیک به هم را برای ضریب R^2 نشان داد که در بازه ۰/۹۹۷-۰/۹۸۹ قرار گرفت. همچنین مقدار MAE در بازه ۰/۵۸۲-۰/۲۹۶ قرار گرفت؛ اما با مقایسه تمامی پارامترهای ارزیابی می‌توان الگوریتم GB را در این ایستگاه به‌منظور پیش‌بینی ویژگی کیفیت آب (WQI) پیشنهاد داد. همچنین به‌منظور انتخاب ترکیب بهینه برای برآورد WQI، مقایسه معیارهای ارزیابی نشان داد که سری ۳ بهترین سری در برآورد مقدار ویژگی کیفیت آب (WQI) بوده است. اگر چه مقادیر معیارهای ارزیابی به هم نزدیک بوده، اما باتوجه به اینکه هدف کاربرد مدل‌های هوش مصنوعی و یادگیری ماشین صرفه‌جویی در زمان و هزینه است؛ لذا سری ۳ که نیاز به

اندازه‌گیری تنها ۳ ویژگی جهت برآورد شاخص کیفیت آب دارد پیشنهاد گردید

جدول ۱۳- معیارهای ارزیابی برای مدل‌ها و سری‌های مختلف در ایستگاه موسیان

شماره سری	مدل یادگیری ماشین	R ²	MAE	ME	MSE	RMSE	NRMSE
۱	GB	۰/۹۹۷	۰/۳۰۵	۰/۹۹۰	۰/۱۴۲	۰/۳۷۸	۱/۶۸۵
	XGB	۰/۹۹۵	۰/۳۴۸	۱/۰۴۶	۰/۲۲۸	۰/۴۷۸	۲/۱۳۱
۲	GB	۰/۹۹۷	۰/۲۹۶	۰/۹۲۸	۰/۱۳۶	۰/۳۶۹	۱/۶۴۸
	XGB	۰/۹۹۴	۰/۳۵۳	۱/۱۱۱	۰/۲۳۹	۰/۴۸۹	۲/۱۸۲
۳	GB	۰/۹۹۵	۰/۳۵۸	۰/۹۳۹	۰/۱۹۳	۰/۴۳۹	۱/۹۶۰
	XGB	۰/۹۹۳	۰/۴۳۷	۱/۰۶۶	۰/۲۸۸	۰/۵۳۶	۲/۳۹۶
۴	GB	۰/۹۹۰	۰/۵۱۲	۱/۶۲۲	۰/۴۰۵	۰/۶۳۶	۲/۸۴۱
	XGB	۰/۹۹۰	۰/۵۴۴	۱/۵۳۰	۰/۴۲۱	۰/۶۴۹	۲/۸۹۹
۵	GB	۰/۹۹۱	۰/۴۹۸	۱/۳۱۸	۰/۲۵۸	۰/۵۹۹	۲/۶۷۴
	XGB	۰/۹۸۹	۰/۵۸۲	۱/۵۲۹	۰/۴۶۹	۰/۶۸۵	۳/۰۵۹
۶	GB	۰/۹۸۹	۰/۵۴۳	۱/۸۶۹	۰/۴۸۱	۰/۹۶۳	۳/۰۹۶
	XGB	۰/۹۸۹۶	۰/۵۵۲	۱/۵۵۱	۰/۴۳۶	۰/۶۶۰	۲/۹۴۸

مقایسه با تحقیقات پیشین انجام شده نشان داد که Ejaz et al. (2024) و Sidek et al. (2024) نیز در تحقیق خود مدل GB را جهت برآورد شاخص کیفی آب به‌عنوان بهترین مدل معرفی کردند. وجه اشتراک تحقیقات ذکر شده با تحقیق حاضر استفاده از آنیون‌ها همچون Cl^- ، کاتیون‌ها همچون K^+ و ویژگی‌هایی همچون TDS و pH بوده است. اگر چه در تحقیقات ذکر شده ویژگی‌هایی همچون DO، و BOD نیز استفاده شده، اما مدل پیشنهادی مشابه با تحقیق حاضر بوده است. همچنین Farzana et al. (2024) با کاربرد مدل بهینه شده XGBoost-BO اظهار داشتند که پیش‌بینی شاخص کیفیت آب با استفاده از پارامترهای ورودی PO_4^{3-} ، N-NH_3 ، pH و کدورت به مقیاس زمانی وابسته بوده و برای داده‌های ماهانه نتایج دقت بالاتری نشان داده است. با توجه به تفاوت داده‌های ورودی مدل‌ها در این تحقیق با مطالعه حاضر و یکسان بودن شرایط آب‌وهوایی کوهستانی برای هر دو مطالعه، می‌توان اظهار داشت که با تغییر پارامترهای ورودی و اضافه کردن پارامترهای شیمیایی مدل XGBoost نیز می‌تواند به‌عنوان یک مدل پیشنهادی برای ایستگاه‌های استفاده شده در این تحقیق ارائه گردد.

اعتبارسنجی متقابل (cross validation)

به‌منظور جلوگیری از برآزش‌های کم یا زیاد، از اعتبارسنجی متقابل استفاده شد. در این روش داده‌ها به ۵ بخش مساوی تقسیم شده و مدل ۵ بار اجرا گردید. در هر بار، یک بخش به‌عنوان داده‌های آزمون و ۴ بخش دیگر به‌عنوان داده‌های آموزش در نظر گرفته شد. برای هر بار یکی از شاخص‌های خطا و نهایتاً میانگین آنها محاسبه گردید.

نتایج در ایستگاه قلعه شاهرخ برای همه داده‌ها بر مبنای NRMSE در جدول ۱۴ ارائه گردیده است.

جدول ۱۴- نتایج اعتبارسنجی متقابل برای ایستگاه قلعه شاهرخ

روش	۱	۲	۳	۴	۵	میانگین
GB	۰/۹۳	۱/۱۵	۱۳/۸	۱/۰۷	۱/۲۶	۳/۶۴
XGB	۱/۲	۱/۴۷	۱۴/۱	۱/۱۷	۱/۴۵	۳/۸۸

بر اساس اعتبارسنجی متقابل انجام‌شده میانگین خطای NRMSE برای روش‌های GB و XGB به ترتیب ۳/۶۴ و ۳/۸۸ محاسبه شد، این در حالی است که قبلاً میزان این شاخص به ترتیب ۱/۹۲۸ و ۱/۵۱۶ به‌دست‌آمده بود؛ لذا این نتیجه نشان می‌دهد که با تغییر نمونه‌برداری خطا به میزان اندکی افزایش می‌یابد.

تحلیل عدم قطعیت (uncertainty)

برای تحلیل عدم قطعیت از روش نمونه‌گیری مجدد (bootstrapy) استفاده شد. در این روش یک نمونه به طور تصادفی انتخاب و سپس

با برگرداندن نمونه انتخاب شده به نمونه‌های اصلی مجدداً نمونه‌گیری انجام گردید. این عمل به تعداد کل نمونه‌ها تکرار شده، سپس روش یادگیری ماشین اجرا و مقدار خطا محاسبه شد. این عمل چندین بار تکرار شده و نهایتاً مقدار فاصله اطمینان خطا با احتمال ۹۵ درصد تعیین گردید. برای ایستگاه قلعه شاهرخ، در روش GB مقادیر NRMSE با احتمال ۹۵ درصد بین ۰/۶ تا ۶ درصد و در روش XGB مقادیر NRMSE با احتمال ۹۵ درصد بین ۰/۸ تا ۶/۲ درصد قرار گرفت. باتوجه به اینکه مقادیر NRMSE در اجرای مدل‌ها برای GB و XGB به ترتیب ۱/۹۲۸ و ۱/۵۱۶ به دست آمده بود و این مقادیر در فواصل اطمینان خطا قرار گرفته است می‌توان اظهار داشت که مدل‌ها با اطمینان مناسبی استفاده و پیشنهاد شده است.

نتیجه‌گیری

یافته‌های این پژوهش نشان داد که در هفت ایستگاه الگوریتم GB و در ایستگاه سد چم آسمان الگوریتم XGB برای پیش‌بینی شاخص کیفیت آب رودخانه زاینده‌رود بهترین عملکرد را نشان داد. در این تحقیق ضریب تعیین در برآوردها در بازه ۰/۸۰۲-۰/۹۹۹، و شاخص RMSE در محدوده ۰/۱۱۲-۱/۲۰۱ قرار گرفت. همان‌گونه که مشاهده می‌شود تفاوت مقادیر R^2 بسیار کم بوده، با این وجود در بین ۸ ایستگاه موجود بالاترین مقدار R^2 مربوط به ایستگاه دیزچه، و کمترین R^2 را ایستگاه سد تنظیمی زاینده‌رود به خود اختصاص داد. نتایج حاصل از تحلیل اهمیت ویژگی‌ها نشان داد که ویژگی‌های EC، TDS، TH و HCO_3^- به ترتیب بیشترین اهمیت را در برآورد شاخص کیفیت آب (WQI) داشته است. از طرفی Ca^{2+} کمترین اهمیت را در بین ویژگی‌ها نشان داد. نتایج تحلیل عاملی نشان داد که سه ویژگی EC، TDS و TH نقش کلیدی در پیش‌بینی شاخص کیفیت آب داشته و بنابراین اندازه‌گیری پیوسته و دقیق آن باید در برنامه‌ریزی منابع آب مورد توجه قرار گیرد؛ بنابراین از آنجاکه هدف هوش مصنوعی و به عبارت دیگر یادگیری ماشین کاهش زمان و هزینه در مطالعات است، با جایگزینی ۳ ویژگی به جای ۱۰ ویژگی می‌توان به پیش‌بینی مناسبی از شاخص کیفیت آب (WQI) رسید. نتایج آنالیز اعتبارسنجی متقابل نشان داد که با تغییر نمونه‌برداری خطا به میزان اندکی افزایش می‌یابد. نتایج آنالیز عدم قطعیت نیز نشان داد که مقادیر NRMSE برای هر دو مدل در فواصل اطمینان خطا قرار گرفته و می‌توان ادعا کرد که مدل‌ها با اطمینان مناسبی پیشنهاد شده‌اند. یافته‌های این مطالعه به مدیران و سیاست‌گذاران آب در محاسبه کارآمد شاخص کیفیت آب برای رودخانه‌ها و نهرها کمک می‌کند. این مهم با کاهش زمان محاسباتی، هزینه‌های کمتر، و نظارت بر ایستگاه‌های آلوده به دست می‌آید. چنین رویکردی می‌تواند استراتژی‌های مدیریت منابع آب را افزایش داده، منجر به ارزیابی‌های مؤثرتر از کیفیت آب شده، و در نهایت به مدیریت پایدار آب رودخانه کمک کند. با این حال، اذعان به چندین محدودیت در این مطالعه مهم است که در درجه اول مربوط به انتخاب متغیرهای فیزیکوشیمیایی و مکان‌های نمونه‌برداری محدود است. تحقیقات می‌تواند با تعداد بیشتری از محل‌های نمونه‌برداری و طیف وسیع‌تری از متغیرهای فیزیکوشیمیایی برای پیش‌بینی شاخص کیفیت آب رودخانه زاینده‌رود با استفاده از رویکرد شاخص وزنی آنتروپی توسعه یابد. توصیه می‌شود مدل پیشنهادی در رودخانه‌های مختلف با شرایط آبی - اقلیمی متفاوت اعتبارسنجی شود.

"هیچ‌گونه تعارض منافع بین نویسندگان وجود ندارد"

منابع

دزفولی، دنیا، حسینی موغاری، سیدمحمد، ابراهیمی، کیومرث، و عراقی نژاد، شهاب. (۱۳۹۶). تعیین طبقه بندی کیفی آب بر اساس حداقل پارامترهای کیفی (مطالعه ی موردی: رودخانه ی کارون). محیط زیست طبیعی (منابع طبیعی ایران)، ۷۰(۳)، ۵۸۳-۵۹۵.

سازمان حفاظت محیط زیست (وزارت محیط زیست، جمهوری اسلامی ایران). (۱۳۹۰). راهنمای محاسبه شاخص کیفیت آب در ایران.

REFERENCES

- Aghaee, M., Heshmatpoor, A., & Seyedian, S. M. (2020). Investigation of water quality of Chehelchay River using IRWQIsc index.
- Akbari Osmavandani, S., Sharafati, A., & Moghaddam, H. K. (2024). Assessing the effectiveness of artificial intelligence models in predicting Zayanderud dam inflow at different time scales. *Acta Geophysica*, 72(5), 3511-3527.
- Alexakis, D. E. (2022). Applying factor analysis and the CCME water quality index for assessing groundwater quality of an Aegean Island (Rhodes, Greece). *Geosciences*, 12(10), 384.

- Alexakis, D., Tsihrintzis, V. A., Tsakiris, G., & Gikas, G. D. (2016). Suitability of water quality indices for application in lakes in the Mediterranean. *Water resources management*, 30, 1621-1633.
- Alizadeh, M., Mirzaei, R., & Kia, S. H. (2017). Determining the spatial trend of water quality indices across Kan and Karaj river basins. *Journal of Environmental Health Engineering*, 4(3), 256-243.
- Al-Mukhtar, M., & Al-Yaseen, F. (2019). Modeling water quality parameters using data-driven models, a case study Abu-Ziriq marsh in south of Iraq. *Hydrology*, 6(1), 24.
- Basha, L., Shyti, B., & Bektashi, L. (2024). Evaluating the performance of machine learning approaches in predicting Albanian Shkumbini River's waters using water quality index model. *Journal of Environmental Engineering and Landscape Management*, 32(2), 117-127.
- Bentéjac, C., Csörgő, A., & Martínez-Muñoz, G. (2021). A comparative analysis of gradient boosting algorithms. *Artificial Intelligence Review*, 54, 1937-1967.
- Box, G. E., Jenkins, G. M., Reinsel, G. C., & Ljung, G. M. (2015). *Time series analysis: forecasting and control*. John Wiley & Sons.
- Breiman, L. (2001). Random forests. *Machine learning*, 45, 5-32.
- Bui, D. T., Khosravi, K., Tiefenbacher, J., Nguyen, H., & Kazakis, N. (2020). Improving prediction of water quality indices using novel hybrid machine-learning algorithms. *Science of the Total Environment*, 721, 137612.
- Chen, K., Chen, H., Zhou, C., Huang, Y., Qi, X., Shen, R., Liu, F., Zuo, M., Zou, X., Wang, J. and Zhang, Y., (2020). Comparative analysis of surface water quality prediction performance and identification of key water parameters using different machine learning models based on big data. *Water research*, 171, 115454.
- Chen, T., & Guestrin, C. (2016, August). Xgboost: A scalable tree boosting system. In *Proceedings of the 22nd acm sigkdd international conference on knowledge discovery and data mining* (pp. 785-794).
- Cheng, G., Wang, M., Chen, Y., & Gao, W. (2020). Source apportionment of water pollutants in the upstream of Yangtze River using APCS-MLR. *Environmental Geochemistry and Health*, 42, 3795-3810.
- de Almeida, G. S., & de Oliveira, I. B. (2018). Application of the index WQI-CCME with data aggregation per monitoring campaign and per section of the river: case study—Joanes River, Brazil. *Environmental monitoring and assessment*, 190(4), 195.
- Dezfooli, D., Mooghari, S.M.H., Ebrahimi, K., & Araghinejad, S. (2017). Water quality classification based on minimum qualitative parameter (Case Study: Karun River). *Journal of Natural Environment*, 70(3), 583-595. <https://sid.ir/paper/195087/en>. [In Persian]
- DOE (Department of Environment, Islamic Republic of Iran). (2012) Guideline for calculating water quality index in Iran. In Persian, <https://www.doe.ir/portal/file/?958505/5->.
- Effendi, H., & Wardiatno, Y. (2015). Water quality status of Ciambulawung River, Banten Province, based on pollution index and NSF-WQI. *Procedia Environmental Sciences*, 24, 228-237.
- Ejaz, U., Khan, S. M., Jehangir, S., Ahmad, Z., Abdullah, A., Iqbal, M., Khalid, N., Nazir, A. & Svenning, J. C. (2024). Monitoring the Industrial waste polluted stream-Integrated analytics and machine learning for water quality index assessment. *Journal of Cleaner Production*, 450, 141877.
- Farzana, S. Z., Paudyal, D. R., Chadalavada, S., & Alam, M. J. (2024). Temporal Dynamics and Predictive Modelling of Streamflow and Water Quality Using Advanced Statistical and Ensemble Machine Learning Techniques. *Water*, 16(15), 2107.
- Fonseca, A., Botelho, C., Boaventura, R. A., & Vilar, V. J. (2024). Evaluating the Effects of Parameter Uncertainty on River Water Quality Predictions. *Resources*, 13(8), 106.
- Gao, Y., Wang, S., Zhang, C., Xing, C., Tan, W., Wu, H., Niu, X. and Liu, C. (2023). Assessing the impact of urban form and urbanization process on tropospheric nitrogen dioxide pollution in the Yangtze River Delta, China. *Environmental Pollution*, 336, 122436.
- Gholizadeh, M. H., Melesse, A. M., & Reddi, L. (2016). Water quality assessment and apportionment of pollution sources using APCS-MLR and PMF receptor modeling techniques in three major rivers of South Florida. *Science of the Total Environment*, 566, 1552-1567.
- Goodarzi, M. R., Abedi, M. J., Niknam, A. R. R., & Heydaripour, M. (2022). Groundwater quality status based on a modification of water quality index in an arid area, Iran. *Water Supply*, 22(7), 6245-6261.
- Goodarzi, M. R., Niknam, A. R. R., Rahmati, S. H., & Attar, N. F. (2023a). Assessing land use changes' effect on river water quality in the Dez Basin using land change modeler. *Environmental Monitoring and Assessment*, 195(6), 774.
- Goodarzi, M. R., Niknam, A. R. R., Rahmati, S. H., & Fatehifar, A. (2023b). Evaluation of the effects of climate change and pollution discharge scenario on the quality of Dez River using the QUAL2Kw model.



Environmental Earth Sciences, 82(20), 479.

- Gültekin, B., & Sakar, B.E. (2018). Variable importance analysis in default prediction using machine learning techniques. In: Paper Presented at the 7th International Conference on Data Science, Technology and Applications, DATA 2018.
- Hamadan, I. R. A. N. (2016). Water quality of Aghlaghan River based on NSFQI index and zoning it by Geographic Information System (GIS). *Journal of Occupational and Environmental Health*, 1(1), 68-78.
- Hameed, M., Sharqi, S.S., Yaseen, Z.M., Afan, H.A., Hussain, A., & Elshafie, A. (2017). Application of artificial intelligence (AI) techniques in water quality index prediction: a case study in tropical region, Malaysia. *Neural Computing and Applications*, 28, 893-905.
- Horton, R. K. (1965). An index number system for rating water quality. *J Water Pollut Control Fed*, 37(3), 300-306.
- Huang, F., Wang, X., Lou, L., Zhou, Z., & Wu, J. (2010). Spatial variation and source apportionment of water pollution in Qiantang River (China) using statistical techniques. *Water research*, 44(5), 1562-1572.
- Icaga, Y. (2007). Fuzzy evaluation of water quality classification. *Ecological Indicators*, 7(3), 710-718.
- Javid, A., Yaghmaeian, K., Abbasi, E., & Roudbari, A. (2014). An evaluation of water quality from Mojen River, by NSFQI index. *Journal of ecological engineering*, 15(4), 1-6.
- Kalin, L., & Isik, S. (2010). Prediction of water quality parameters using an artificial neural networks model. In *World Environmental and Water Resources Congress 2010: Challenges of Change* (pp. 3145-3153).
- Kamyab-Talesh, F., Mousavi, S. F., Khaledian, M., Yousefi-Falakdehi, O., & Norouzi-Masir, M. (2019). Prediction of water quality index by support vector machine: a case study in the Sefidrud Basin, Northern Iran. *Water Resources*, 46, 112-116.
- Khalife, S., & Khoshnazar, A. (2018). Evaluation of water quality in Zarrineh-rood River using the standard quality index of Iran's surface water resources. *Journal of Water and Wastewater Science and Engineering*, 3(1), 22-34.
- Khalili, R., Montaseri, H., Motaghi, H., & Jalili, M. B. (2021). Water quality assessment of the Talar River in Mazandaran Province based on a combination of water quality indicators and multivariate modeling. *Water and Soil Management and Modelling*, 1(4), 30-47.
- Khan, M. S. I., Islam, N., Uddin, J., Islam, S., & Nasir, M. K. (2022). Water quality prediction and classification based on principal component regression and gradient boosting classifier approach. *Journal of King Saud University-Computer and Information Sciences*, 34(8), 4773-4781.
- Khoi, D. N., Quan, N. T., Linh, D. Q., Nhi, P. T. T., & Thuy, N. T. D. (2022). Using machine learning models for predicting the water quality index in the La Buong River, Vietnam. *Water*, 14(10), 1552.
- Li, X., Li, P., Wang, D., & Wang, Y. (2014). Assessment of temporal and spatial variations in water quality using multivariate statistical methods: A case study of the Xin'anjiang River, China. *Frontiers of environmental science & engineering*, 8, 895-904.
- Lin, Z., Lim, J. Y., & Oh, J. M. (2024). Innovative interpretable AI-guided water quality evaluation with risk adversarial analysis in river streams considering spatial-temporal effects. *Environmental Pollution*, 350, 124015.
- Luo, H., Nong, X., Xia, H., Liu, H., Zhong, L., Feng, Y., Zhou, W. & Lu, Y. (2024). Integrating Water Quality Index (WQI) and Multivariate Statistics for Regional Surface Water Quality Evaluation: Key Parameter Identification and Human Health Risk Assessment. *Water*, 16(23), 3412.
- Mahrooyan, F., Taghavi, L., Sarai Tabrizi, M., & Babazadeh, H. (2021). Water quality assessment of Qazvin River using NSFQI Index for water quality classification. *Journal of Wetland Ecobiology*, 12(1), 99-112.
- Malone, B.P., Minasny, B., McBratney, A.B. (2017). *Using R for Digital Soil Mapping*, vol. 35. Springer.
- Matta, G., Nayak, A., Kumar, A., & Kumar, P. (2020). Water quality assessment using NSFQI, OIP and multivariate techniques of Ganga River system, Uttarakhand, India. *Applied Water Science*, 10(9), 206.
- Niknam, A. R. R., Sabaghzadeh, M., Barzkar, A., & Shishebori, D. (2024). Comparing ARIMA and various deep learning models for long-term water quality index forecasting in Dez River, Iran. *Environmental Science and Pollution Research*, 1-17.
- Ocampo-Duque, W., Ferre-Huguet, N., Domingo, J. L., & Schuhmacher, M. (2006). Assessing water quality in rivers with fuzzy inference systems: A case study. *Environment international*, 32(6), 733-742.
- Oladipo, J. O., Akinwumiju, A. S., Aboyeji, O. S., & Adelodun, A. A. (2021). Comparison between fuzzy logic and water quality index methods: A case of water quality assessment in Ikare community, Southwestern Nigeria. *Environmental Challenges*, 3, 100038.
- Omidi, A., & Shariati, F. (2021). Evaluation of Pasikhan River, north of Iran using water quality index

- (NSFWQI). *Caspian Journal of Environmental Sciences*, 19(2), 219-230.
- Palabıyık, S., & Akkan, T. (2024). Evaluation of water quality based on artificial intelligence: performance of multilayer perceptron neural networks and multiple linear regression versus water quality indexes. *Environment, Development and Sustainability*, 1-24.
- Panagopoulos, A. (2022). Brine management (saline water & wastewater effluents): Sustainable utilization and resource recovery strategy through Minimal and Zero Liquid Discharge (MLD & ZLD) desalination systems. *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, 176, 108944.
- Panagopoulos, A., & Giannika, V. (2022). Decarbonized and circular brine management/valorization for water & valuable resource recovery via minimal/zero liquid discharge (MLD/ZLD) strategies. *Journal of Environmental Management*, 324, 116239.
- Panagopoulos, Y., Alexakis, D. E., Skoulidakis, N. T., Laschou, S., Papadopoulos, A., & Dimitriou, E. (2022). Implementing the CCME water quality index for the evaluation of the physicochemical quality of Greek Rivers. *Water*, 14(17), 2738.
- Polikar, R. (2012). Ensemble learning. *Ensemble machine learning: Methods and applications*, 1-34.
- Rahaman, M. H., Sajjad, H., Hussain, S., Masroor, M., & Sharma, A. (2024). Surface water quality prediction in the lower Thoubal river watershed, India: A hyper-tuned machine learning approach and DNN-based sensitivity analysis. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 12(3), 112915.
- Rahman, S., Khan, A. A., Brake, K., & Tobin, A. (2024). Deriving water quality index using site-specific water quality parameter guidelines for real-time water quality stations. *Water Quality Research Journal*, 59(4), 347-367.
- Ramya, S., Srinath, S., & Tuppad, P. (2024). Comprehensive analysis of multiple classifiers for enhanced river water quality monitoring with explainable AI. *Case Studies in Chemical and Environmental Engineering*, 10, 100822.
- Sadeghi, M., Bay, A., Bay, N., Soflaie, N., Mehdinejad, M. H., & Mallah, M. (2015). The survey of Zarin-Gol River water quality in Golestan Province using NSF-WQI and IRWQISC.
- Salami, E. S., & Ehteshami, M. (2015). Simulation, evaluation and prediction modeling of river water quality properties (case study: Ireland Rivers). *International journal of environmental science and technology*, 12, 3235-3242.
- Sattari, M. T., Feizi, H., Colak, M. S., Ozturk, A., Ozturk, F., & Apaydin, H. (2021). Surface water quality classification using data mining approaches: Irrigation along the Aladag River. *Irrigation and Drainage*, 70(5), 1227-1246.
- Sidek, L.M., Mohiyaden, H.A., Marufuzzaman, M., Noh, N.S.M., Heddham, S., Ehteram, M., Kisi, O. and Sammen, S.S., (2024). Developing an ensembled machine learning model for predicting water quality index in Johor River Basin. *Environmental Sciences Europe*, 36(1), 67.
- Siham, A., Sara, S., & Abdellah, A. (2021). Feature selection based on machine learning for credit scoring: an evaluation of filter and embedded methods. In: Paper Presented at the 2021 International Conference on Innovations in Intelligent Systems and Applications (INISTA).
- Silvert, W. (2000). Fuzzy indices of environmental conditions. *Ecological modelling*, 130(1-3), 111-119.
- Singh, S., Das, A., & Sharma, P. (2024). Predictive modeling of water quality index (WQI) classes in Indian rivers: Insights from the application of multiple Machine Learning (ML) models on a decennial dataset. *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*, 38(8), 3221-3238.
- Singha, S., Pasupuleti, S., Singha, S.S., Singh, R., & Kumar, S. (2021). Prediction of groundwater quality using efficient machine learning technique. *Chemosphere*, 276, 130265. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2021.130265>.
- Soleimanpour, S. M., Mesbah, S. H., & Hedayati, B. (2018). Application of CART decision tree data mining to determine the most effective drinking water quality factors (case study: Kazeroon plain, Fars province).
- Sutadian, A. D., Muttill, N., Yilmaz, A. G., & Perera, B. J. C. (2016). Development of river water quality indices—a review. *Environmental monitoring and assessment*, 188, 1-29.
- Tiwari, N.K., Das Gupta, S., Swain, H.S., Jha, D.N., Samanta, S., Manna, R.K., Das, A.K. and Das, B.K. (2022). Water quality assessment in the ecologically stressed lower and estuarine stretches of river Ganga using multivariate statistical tool. *Environmental Monitoring and Assessment*, 194(7), 469.
- Tiwari, D., Kumar, R., Yadav, M., Gupta, G. K., kumar Singh, S., Dhapekar, N. K., ... & Sharma, R. (2025). Holistic analysis of Ganga basin water quality: a statistical approach with WQI, HMCI, HMQI and HRI indices. *RSC advances*, 15(5), 3290-3316.
- Tizro, A. T., Fryar, A. E., Vanaei, A., Kazakis, N., Voudouris, K., & Mohammadi, P. (2021). Estimation of total dissolved solids in Zayandehrood River using intelligent models and PCA. *Sustainable Water*



Resources Management, 7, 1-13.

- Tripathi, M., & Singal, S. K. (2019). Use of principal component analysis for parameter selection for development of a novel water quality index: a case study of river Ganga India. *Ecological indicators*, 96, 430-436.
- Uddin, M. G., Nash, S., Rahman, A., & Olbert, A. I. (2022). A comprehensive method for improvement of water quality index (WQI) models for coastal water quality assessment. *Water Research*, 219, 118532.
- Wu, T., Zhang, W., Jiao, X., Guo, W., & Hamoud, Y. A. (2020). Comparison of five Boosting-based models for estimating daily reference evapotranspiration with limited meteorological variables. *PLoS One*, 15(6), e0235324.
- Yadav, A. K., Khan, P., & Sharma, S. K. (2010). Water Quality Index Assessment of Groundwater in Todaraisingh Tehsil of Rajasthan State, India-A Greener Approach. *Journal of Chemistry*, 7, S428-S432.
- Yusri, H. I. H., Hassan, S. L. M., Halim, I. S. A., & Abdullah, N. E. (2022, July). Water quality classification using SVM and XGBoost method. In *2022 IEEE 13th Control and System Graduate Research Colloquium (ICSGRC)* (pp. 231-236). IEEE.
- Zamani-Ahmadm Mahmoodi, R., Ghaedamini, F., & Najafi, M. (2021). Spatial distribution pattern of water quality of Pireghar river with using water quality index (WQI) and geographic information system (GIS). *Journal of Environmental Science and Technology*, 23(2), 73-86.
- Xu, Y., Li, P., Zhang, M., Xiao, L., Wang, B., Zhang, X., Wang, Y. & Shi, P. (2024). Quantifying seasonal variations in pollution sources with machine learning-enhanced positive matrix factorization. *Ecological Indicators*, 166, 112543.
- Zhao, X., Liu, X., Xing, Y., Wang, L., & Wang, Y. (2022). Evaluation of water quality using a Takagi-Sugeno fuzzy neural network and determination of heavy metal pollution index in a typical site upstream of the Yellow River. *Environmental Research*, 211, 113058.