



Intelligent Calibration of the Transient Storage Model by Integrating Genetic Algorithm and Finite Difference Method for Solute Transport Simulation

Mohammad Mirnaseri^{1✉} | Laleh Divband Hafshejani² | Mojtaba Khoshravesh³

1. Corresponding Author, Department of Water Engineering, Faculty of Agricultural Engineering, Sari Agricultural Sciences and Natural Resources University, Sari, Iran. E-mail: m.mirnaseri@sanru.ac.ir

2. Department of Environmental Engineering, Faculty of Water and Environmental Engineering, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran. E-mail: l.divband@scu.ac.ir

3. Department of Water Engineering, Faculty of Agricultural Engineering, Sari Agricultural Sciences and Natural Resources University, Sari, Iran. E-mail: khoshravesh_m24@yahoo.com

Article Info

Article type: Research Article

Article history:

Received: Aug. 30, 2025

Revised: Oct. 10, 2025

Accepted: Nov. 10, 2025

Published online: Jan. 2026

Keywords:

Automated Optimization, Finite Difference Method (FDM), Genetic Algorithm (GA), Numerical Modeling, Parameter Calibration, Solute Transport, Transient Storage Model (TSM).

ABSTRACT

Simulating solute transport in rivers is significantly challenged by the complex phenomenon of transient storage. This study develops an integrated numerical model that couples an explicit Finite Difference Method (FDM) with a Genetic Algorithm (GA) to automate the calibration of key parameters in the one-dimensional Transient Storage Model (TSM). The governing advection-dispersion equations for the main channel and storage zones were discretized using an Upwind-Central scheme. A GA-based optimization framework was implemented to estimate four critical parameters—longitudinal dispersion coefficient (D), storage exchange coefficient (α), main channel cross-sectional area (A), and storage zone area (A_s)—by minimizing the Root Mean Square Error (RMSE) between simulated and experimental concentration data. The model incorporates flexible boundary conditions, including constant concentration, time-varying input, and mass flux at the upstream end, and zero-gradient or advective flux at the downstream end. Advanced numerical stability mechanisms (CFL, diffusion, and exchange criteria) ensure robust performance. Validation against experimental data from a simulated flume demonstrated the model's superior performance ($R^2 > 0.90$, NSE > 0.90) over the standard OTIS-P software. Beyond high accuracy, the model offers novel capabilities: 3D concentration output visualization, systematic parameter sensitivity analysis via the Morris method, and uncertainty assessment based on the Damköhler number (Da). This approach provides a powerful, automated tool for realistically simulating solute transport in river systems, effectively incorporating transient storage dynamics.

Cite this article: Mirnaseri, M., Divband Hafshejani, L., Khoshravesh, M. (2026) Intelligent Calibration of the Transient Storage Model by Integrating Genetic Algorithm and Finite Difference Method for Solute Transport Simulation, *Iranian Journal of Soil and Water Research*, 56 (11), 3157-3179. <https://doi.org/10.22059/ijswr.2025.401515.670002>

© The Author(s).

Publisher: University of Tehran Press.

DOI: <https://doi.org/10.22059/ijswr.2025.401515.670002>



EXTENDED ABSTRACT

Introduction

The simulation of solute transport in rivers is fundamentally challenged by transient storage, whereby solutes are temporarily retained within hyporheic zones and other low-velocity recirculation areas before re-entering the main channel. This process materially influences contaminant dispersion, nutrient cycling, and ecosystem dynamics. While the One-Dimensional Transport with Inflow and Storage (OTIS) model and its software implementation (OTIS-P) provide a standard theoretical framework, their practical use often hinges on manual parameter calibration. Such calibration is labor-intensive, subjective, and liable to converge to suboptimal local minima, thereby introducing avoidable uncertainty into predictions. There is thus a clear need for an automated, robust calibration framework to enhance the accuracy and reliability of the Transient Storage Model (TSM).

Materials and Methods

This study developed an integrated numerical framework that couples an explicit finite-difference solver with a genetic algorithm (GA) to automate calibration of the one-dimensional TSM. The governing advection–dispersion equations for the main channel and the storage zone were discretized using an upwind scheme for advection to promote stability and a central-difference scheme for dispersion to preserve accuracy, with time integration via the forward Euler method. The GA-based optimizer minimizes the root mean square error (RMSE) between simulated and observed breakthrough curves (BTCs) by evolving populations of candidate parameter sets for four key coefficients: longitudinal dispersion (D), storage exchange (α), main-channel cross-sectional area (A), and storage-zone area (A_s).

To accommodate diverse field and laboratory settings, the model supports flexible boundary conditions: at the upstream boundary, constant concentration (Dirichlet), time-varying input, or inflow mass-flux; at the downstream boundary, zero-gradient (Neumann) or advective outflow. A central feature of the framework is a triple stability check embedded in the GA fitness evaluation that enforces numerical stability and physical plausibility: the Courant–Friedrichs–Lewy (CFL) condition for advection, a diffusion stability criterion for dispersion, and an exchange stability criterion for inter-zone mass transfer. Candidate solutions that fail any criterion are penalized, guiding the search toward stable, admissible parameterizations.

For validation, high-resolution experimental data were collected in a controlled laboratory flume (12 m length, 0.5 m width) with a natural gravel bed. Instantaneous NaCl tracer injections were performed under three discharges (10, 12.5, and 15 L/s), and concentration BTCs were recorded at two downstream stations. Model performance was evaluated against OTIS-P using the coefficient of determination (R^2), Nash–Sutcliffe efficiency (NSE), and RMSE.

Results and Discussion

The integrated GA–FDM model delivered consistently superior performance relative to OTIS-P across all experimental scenarios, achieving close agreement with observations, with ($R^2 > 0.9$) and ($NSE > 0.9$). The automated calibration efficiently identified physically meaningful parameter sets, removing the need for subjective, iterative manual tuning.

Parameter trends were robust and physically coherent. The exchange coefficient (α) exhibited a strong inverse relationship with discharge, decreasing by approximately 97% as flow increased, indicating reduced hydrological connectivity with storage zones at higher velocities. In contrast, the storage-zone area (A_s) showed a non-monotonic response, initially decreasing from 0.030 m² to 0.018 m² and then increasing to 0.037 m², consistent with a dynamic activation–deactivation of sub-zones within the sediment bed. The Damköhler number (Da) served as an informative diagnostic: ($0.1 < Da < 10$) corresponded to reliable parameterizations, whereas ($Da > 100$) or ($Da < 0.01$) flagged regimes more susceptible to uncertainty. A Morris elementary-effects sensitivity analysis further indicated that (α) and (A_s) dominate solute retention and the characteristic tailing of the BTCs.

Conclusions

This work presents an automated, robust computational framework for simulating solute transport with transient storage in riverine environments. By fully automating calibration, the GA–FDM approach improves objectivity, efficiency, and numerical robustness over conventional workflows such as OTIS-P. Its diagnostic capabilities (via the Damköhler number) and its global sensitivity analysis provide insight beyond standard outputs, making the framework a practical tool for contaminant fate assessment, tracer-test design and interpretation, and restoration planning where transient storage is consequential. The framework is extensible and provides a solid foundation for future incorporation of reactive transport processes.

Author Contributions

All authors contributed equally to the conceptualization of the article and writing of the original and subsequent drafts. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Data Availability Statement

Data is available on reasonable 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.

واسنجی هوشمند مدل ذخیره موقت با ادغام الگوریتم ژنتیک و روش تفاضل محدود در شبیه سازی انتقال املاح

محمد میرناصری^۱ | لاله دیوبند هفشجانی^۲ | مجتبی خوشروش^۳

۱. نویسنده مسئول، گروه مهندسی آب، دانشکده مهندسی زارعی، دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری، ساری، ایران. رایانامه:

m.mirnaseri@sanru.ac.ir

۲. گروه مهندسی محیط زیست، دانشکده مهندسی آب و محیط زیست، دانشگاه شهیدچمران اهواز، اهواز، اهواز، ایران.

رایانامه: l.divband@scu.ac.ir

۳. گروه مهندسی آب، دانشکده مهندسی زارعی، دانشگاه علوم کشاورزی و منابع طبیعی ساری، ساری، ایران. رایانامه:

khoshravesh_m24@yahoo.com

اطلاعات مقاله	چکیده
نوع مقاله: مقاله پژوهشی	
تاریخ دریافت: ۱۴۰۴/۶/۸	مدل سازی انتقال املاح در رودخانه ها به دلیل پدیده پیچیده ذخیره موقت با چالش های عمده ای مواجه است. این پژوهش به توسعه یک مدل عددی یکپارچه می پردازد که با ادغام هوشمندانه روش تفاضلات محدود صریح (FDM) و الگوریتم بهینه سازی ژنتیک (GA)، فرآیند واسنجی خودکار پارامترهای کلیدی مدل نگهداشت موقت یک بعدی (TSM) را ممکن می سازد. معادلات حاکم پراکندگی-انتقال برای کانال اصلی و نواحی ذخیره با روش Upwind-Central گسسته سازی شده و یک چارچوب بهینه سازی مبتنی بر GA برای تخمین چهار پارامتر مؤثر (ضریب پراکندگی طولی D، ضریب تبادل ناحیه نگهداشت α ، مساحت ناحیه کانال اصلی A و مساحت ناحیه ذخیره A_s) با کمینه سازی خطای میانگین مربعات (RMSE) بین داده های شبیه سازی و آزمایشگاهی پیاده سازی شده است. مدل FDM-GA از انواع شرایط مرزی بالادست: (غلظت ثابت، داده زمانی، شار جرمی) و پایین دست: (گرادیان صفر، جابجایی) و مکانیزم های پایداری عددی پیشرفته (معیارهای CFL، پخش و تبادل) بهره می برد. اعتبارسنجی این مدل عددی با داده های آزمایشگاهی در یک کانال شبیه سازی شده نشان دهنده عملکرد برتر آن (با شاخص های R^2 > 0.90 و $NSE > 0.90$) در مقایسه با نرم افزار استاندارد OTIS-P است. این مدل علاوه بر دقت بالا، قابلیت های نوینی از جمله تولید خروجی های سه بعدی، تحلیل حساسیت سیستماتیک پارامترها با روش موریس و ارزیابی عدم قطعیت بر مبنای عدد دام-کولر (Dal) نیز در مقایسه با نرم افزار OTIS-P ارائه می دهد. این رویکرد، ابزاری قدرتمند و خودکار برای شبیه سازی واقع گرایانه انتقال املاح در سیستم های رودخانه ای با در نظر گیری اثرات ذخیره موقت را می تواند فراهم نماید.
واژه های کلیدی: بهینه سازی خودکار، روش تفاضل محدود (FDM)، الگوریتم ژنتیک (GA)، مدل سازی عددی، واسنجی پارامترها، انتقال املاح، مدل ذخیره موقت (TSM).	

استناد: میرناصری؛ محمد، دیوبند هفشجانی؛ لاله، خوشروش؛ مجتبی، (۱۴۰۴) واسنجی هوشمند مدل ذخیره موقت با ادغام الگوریتم ژنتیک و روش تفاضل محدود در

شبیه سازی انتقال املاح، مجله تحقیقات آب و خاک ایران، ۵۶ (۱۱)، ۳۱۷۹-۳۱۵۷. <https://doi.org/10.22059/ijswr.2025.401515.670002>



© نویسندگان.

ناشر: مؤسسه انتشارات دانشگاه تهران.

DOI: <https://doi.org/10.22059/ijswr.2025.401515.670002>

مقدمه

مدل سازی انتقال املاح و آلاینده ها در سیستم های رودخانه ای همواره به عنوان یکی از بحث برانگیزترین مباحث در حوزه هیدرولوژی و مهندسی محیط زیست مطرح بوده است (Bencala and Walters, 1983; Runkel, 1998). این پیچیدگی ناشی از ماهیت پویا و غیرخطی فرآیندهای انتقال است که تحت تأثیر عوامل متعددی از جمله ناهمگنی رسوبات بستر، تغییرات مکانی-زمانی سرعت جریان و برهمکنش های پیچیده بین آب سطحی و زیرسطحی قرار دارد (Harvey et al., 1996; Boano et al., 2014). در این میان، مدل ذخیره موقت (TSM) به عنوان یکی از ابزارهای تحلیلی در این حوزه، توجه بسیاری از پژوهشگران را به خود جلب کرده است. این مدل با در نظر گرفتن اثرات پویای مناطق ذخیره ای حاشیه ای مانند حفره های زیرسطحی، مناطق مرده هیدرولیکی^۲ و پوشش های گیاهی کنار رودخانه ای^۳ تحولی اساسی در درک مکانیسم های انتقال مواد در آبراهه ها ایجاد کرده است (Gooseff et al., 2005; Ward et al., 2018). تخمین هر چهار پارامتر (α ، A_s ، D و A) مدل ذخیره موقت (TSM) سبب خواهد شد تا این مدل با دقت بالاتری شبیه سازی انتقال املاح در محاری باز را انجام نماید. روش های میدانی برای تخمین پارامترهای مدل نگهداشت موقت (TSM) با استفاده از تزریق لحظه ای یا ثابت ماده ردیاب معمولاً فقط برای اندازه گیری منحنی های غلظت-زمان برای تعریف شرایط مرزی بالادست، شرایط اولیه و شرایط پایین دست در نظر گرفته می شود (نیکبخت و همکاران، ۱۴۰۱). مناطق ذخیره موقت به عنوان باتری اکولوژیکی عمل می کنند که با افزایش زمان ماند هیدرولیکی، فرصت لازم برای فرآیندهای زیست شیمیایی مانند حذف طبیعی نیترات از آب های زیرزمینی (دنیتریفیکاسیون)^۴، جذب فلزات سنگین و تجزیه مواد آلی فراهم می کنند (Zarnetske et al., 2011; Briggs et al., 2013). با این حال، مدل سازی این پدیده نیازمند ادغام معادلات حاکم بر انتقال جرم^۵ (ADE) با معادلات تبادل دینامیک بین جریان اصلی و مناطق ذخیره است (Choi et al., 2000; Wörman et al., 2002).

پیشینه پژوهش

توسعه تاریخی TSM به کارهای اولیه Bencala and Walters (1983) بازمی گردد که با معرفی مفهوم حافظه هیدرولوژیکی رودخانه ها، پایه های نظری این مدل را بنا نهادند. در ادامه، Runkel (1998) با ارائه نرم افزار OTIS^۶ چارچوبی عددی برای شبیه سازی انتقال مواد همراه با ذخیره موقت ایجاد نمود. این مدل امروزه به عنوان استاندارد در مطالعات میدانی و آزمایش های ردیابی^۷ مورد استفاده قرار می گیرد (Haggerty et al., 2000; Knapp & Kelleher, 2020). مطالعات اولیه مانند Bencala and Walters, 1983 بر حل های تحلیلی ساده شده متمرکز بودند که تنها برای شرایط ایده آل کاربرد داشتند اما این روش ها قادر به شبیه سازی ناهمگنی های محیطی نبودند (Harvey et al., 2021). معرفی نرم افزار OTIS توسط Runkel, 1998 با استفاده از روش تفاضل محدود^۸ (FDM) نقطه عطفی در این زمینه بود. میرناصری (۱۴۰۴) استفاده از نرم افزار OTIS را در شبیه سازی انتقال املاح در آبراهه ها دارای شرایط خاص هیدرولیکی با وجود سازه های پره متقاطع I و U شکل را دارای دقت بالایی ارزیابی کرد. روش المان محدود^۹ که توسط Boano et al., (2023) مورد بررسی قرار گرفته است، به دلیل انعطاف پذیری بالا در هندسه های پیچیده، جایگاه ویژه ای در مدل سازی سیستم های طبیعی دارد. نتایج پژوهش Tang et al., 2024 به هزینه محاسباتی بالا به عنوان یکی از مهم ترین محدودیت های روش المان محدود اشاره دارد. از دیگر مشکلات این روش می توان به: پیچیدگی در پیاده سازی، نیاز به حافظه محاسباتی زیاد، مشکلات در مدل سازی ناپیوستگی ها و حساسیت به کیفیت شبکه بندی اشاره کرد. مهم ترین مزیت روش حجم محدود^{۱۰} که توسط Wu (2022) به تفصیل بررسی شده است، خاصیت ذاتی حفظ پایستگی جرم در شبکه های محاسباتی، حتی در حالت

1 Transient Storage Model

2 Hydraulic Dead Zones

3 Riparian Vegetation

4 Denitrification

5 Advection-Dispersion Equation

6 One-Dimensional Transport with Inflow and Storage

7 Tracer Tests

8 Finite Difference Method

9 Finite Element Method

10 Finite Volume Method

غیرساختاریافته می‌باشد. این ویژگی منحصر به فرد، FVM را به گزینه‌ای ایده‌آل برای شبیه‌سازی جریان‌های با مرزهای پیچیده تبدیل کرده است. با وجود مزایای متعدد، روش حجم محدود با چالش‌های مهمی نیز مواجه است. همان‌طور که Zhang et al., 2023 اشاره کرده‌اند، محاسبه دقیق شار در مرزهای سلول‌های محاسباتی نیازمند الگوریتم‌های پیچیده و زمان‌بر است. از دیگر معایب این روش می‌توان به: (الف) در رسیدن به دقت مرتبه بالا، (ب) حساسیت به کیفیت شبکه‌بندی و (ج) مشکلات در پیاده‌سازی برای معادلات غیرخطی، دانست. پیشرفت‌های اخیر در این حوزه شامل ادغام TSM با مدل‌های واکنش-انتقال^۱ برای شبیه‌سازی فرآیندهای میکروبی (Battin et al., 2016)، استفاده از تکنیک‌های یادگیری ماشین برای واسنجی پارامترها (Zaramella et al., 2020) و توسعه مدل‌های سه‌بعدی مبتنی بر دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) برای تحلیل جریان‌های ثانویه است (Marion et al., 2008; Stonedahl et al., 2010). با وجود پیشرفت‌های قابل توجه در روش‌های عددی، پتانسیل ترکیب نظام‌مند آن‌ها با الگوریتم‌های بهینه‌سازی پیشرفته در حوزه مدل‌سازی هیدرولوژیکی هنوز به طور گسترده مورد کاوش قرار نگرفته است. این پژوهش با هدف رفع این چالش‌ها، چارچوبی محاسباتی ارائه می‌دهد که در آن روش تفاضل محدود (FDM) با الگوریتم ژنتیک (GA) در مدل نگهداشت موقت (TSM) تلفیق شده است. در این رویکرد، واسنجی خودکار پارامترهای کلیدی با اعمال هم‌زمان معیارهای پایداری CFL و پخش برای تضمین پایداری عددی همراه گردیده است. انتظار می‌رود این مدل FDM-GA، بر چالش‌های عمده در کالیبراسیون مدل‌های هیدرولوژیکی غلبه کرده و دقت برآورد پارامترها را بهبود بخشد.

روش‌شناسی پژوهش

معادلات حاکم و گسسته‌سازی

مدل عددی کدنویسی شده در این پژوهش بر پایه حل سیستم معادلات دیفرانسیل جزئی حاکم بر انتقال مواد محلول و آلاینده‌ها در جریان اصلی رودخانه و تبادل آن با نواحی ذخیره موقت توسعه یافته است. معادلات اصلی حاکم بر اساس مدل مفهومی انتقال یک بعدی با جریان ورودی و ذخیره تحت عنوان مدل نگهداشت موقت^۲ (TSM) بوده که به صورت زیر بیان می‌گردند:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{Q}{A} \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{1}{A} \frac{\partial}{\partial x} \left(AD \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{q_{LIN}}{A} (C_L - C) + \alpha (C_S - C) \quad (\text{رابطه ۱})$$

$$\frac{dC_S}{dt} = \alpha \frac{A}{A_S} (C - C_S) \quad (\text{رابطه ۲})$$

که در آن^۳ A: مساحت مقطع عرضی ناحیه اصلی جریان [L²]; A_S: مساحت مقطع عرضی ناحیه نگهداشت [L²]; C: غلظت املاح ناحیه اصلی جریان [M/L³]; C_L: غلظت املاح جریان جانبی ورودی [M/L³]; C_S: غلظت املاح ناحیه نگهداشت [M/L³]; D: ضریب پراکندگی [L²/T]; Q: دبی جریان حجمی [L³/T]; q_{LIN}: دبی جریان جانبی ورودی در واحد طول [L³/T-L]; t: زمان [T]; x: فاصله مکانی [L] و α: ضریب تبادل ناحیه نگهداشت [1/T];

برای گسسته‌سازی معادلات فوق از روش اختلاف محدود صریح^۴ با استفاده از روش Upwind برای جزء انتقال^۵ و روش تفاضل مرکزی^۶ برای جزء پخش^۷ استفاده شد. گسسته‌سازی زمانی نیز با استفاده از روش اویلر پیشرو^۸ انجام گرفت. فرم گسسته‌شده معادلات به صورت زیر می‌باشد:

$$C_i^{n+1} = C_i^n + \Delta t \left[-U \frac{C_i^n - C_{i-1}^n}{\Delta x} + D \frac{C_{i+1}^n - 2C_i^n + C_{i-1}^n}{\Delta x^2} + \alpha (C_{S,i}^n - C_i^n) + \frac{q_{LIN}}{A} (C_L - C_i^n) \right] \quad (\text{رابطه ۳})$$

$$C_{S,i}^{n+1} = C_{S,i}^n + \Delta t \left[\alpha \frac{A}{A_S} (C_i^n - C_{S,i}^n) \right] \quad (\text{رابطه ۴})$$

که در این روابط، C_iⁿ غلظت املاح در ناحیه اصلی جریان در مکان i و زمان n، C_{S,i}ⁿ غلظت املاح در ناحیه ذخیره موقت در مکان i

1 Reactive Transport Models

2 Transient Storage Model (TSM)

۳ واحدهای اساسی جرم [M]، طول [L] و زمان [T]

4 Explicit Finite Difference Method

5 Advective

6 Central Difference

7 Dispersive

8 Forward Euler

و زمان Δx ، Δt گام مکانی و Δt گام زمانی در مراحل گسسته‌سازی می‌باشد.

در تمامی مراحل گسسته‌سازی و شبیه‌سازی، سرعت جریان (U) به عنوان متغیر اصلی در نظر گرفته شد که از داده‌های ورودی اخذ گردید. سطح مقطع (A) برای هر بازه به صورت مشتقی و از رابطه $A = Q/U$ محاسبه شد، که در آن Q دبی اندازه‌گیری شده برای همان بازه است. این رویکرد تضمین می‌کند که رابطه بنیادی $U = Q/A$ که پایستگی جرم بر آن استوار است، در تمام محاسبات به طور دقیق رعایت گردد.

شرایط مرزی

شرایط مرزی بالادست

شرایط مرزی و اولیه در مدل حاضر با دقت و انعطاف پذیری بالا طراحی شده‌اند تا طیف وسیعی از سناریوهای واقعی در رودخانه‌ها را پوشش دهند. در مرز بالادست، سه گزینه اصلی پیش‌بینی شده که کاربر قابلیت انتخاب بین این سه گزینه را خواهد داشت: الف) شرایط غلظت ثابت؛ در حالت غلظت ثابت (شرط دیریکله)، مقدار غلظت در نقطه شروع به صورت یک مقدار ثابت مطابق رابطه (۵) در تمام زمان‌ها تعیین می‌شود:

$$C(0, t) = C_0, \quad t > 0 \quad \text{رابطه (۵)}$$

که در این رابطه: C_0 غلظت ثابت در مرز بالادست، $x=0$ موقعیت مرز بالادست و t نیز زمان می‌باشد. این نوع شرایط مرزی، برای شبیه‌سازی منابع آلاینده پایدار مانند تخلیه پساب تصفیه‌خانه‌ها با غلظت کنترل شده یا تزریق مواد شیمیایی در آزمایشگاه با غلظت مشخص، مناسب است. این شرایط مرزی برای رودخانه‌های پیوسته و بدون نوسانات زمانی نیز توصیه می‌شود. همچنین این نوع شرایط می‌تواند در مطالعات ردیابی آلاینده با تزریق ناگهانی (مثل تزریق نمک) نیز کاربرد داشته باشد (Runkel, 1998).

ب) شرایط غلظت متغیر زمانی^۳ مبتنی بر داده‌های تجربی: در سناریوهای پیچیده‌تر که غلظت ورودی طی زمان تغییر می‌کند (مانند نوسانات جزرومدی یا تخلیه دوره‌ای)، مدل امکان وارد کردن داده‌های زمانی از فایل‌های Excel تحت عنوان `upstream_input.xlsx` را فراهم می‌کند. این داده‌ها مطابق رابطه (۶) با استفاده از درون‌یابی خطی به نقاط زمانی بین داده‌های گسسته تبدیل می‌شوند تا پیوستگی زمانی غلظت ورودی حفظ شود.

$$C(t) = C_i + \frac{(t-t_i)(C_{i+1}-C_i)}{t_{i+1}-t_i} \quad \text{رابطه (۶)}$$

که در این رابطه، t بازه زمانی و اندس i نیز مشخص‌کننده تغییرات گام‌های زمانی می‌باشد. این نوع شرایط مرزی برای سناریوهای واقع‌گرایانه با داده‌های واقعی مناسب است. همچنین در مدل‌های هیدرودینامیک پیچیده، این تابع نیز می‌تواند به دبی جریان وابسته باشد. خطای درون‌یابی با کاهش فاصله زمانی کم‌تر خواهد شد (Fletcher, 1991; Chapra, 1997). در این مدل عددی مقادیر Δt به‌منظور افزایش دقت درون‌یابی توسط الگوریتم ژنتیک بهینه‌سازی شده و در محاسبات استفاده می‌شوند.

ج) شرایط شار جرمی^۴ برای شرایطی که منبع آلاینده به صورت شار جرمی مشخص می‌شود (مانند نشت آلودگی یا پساب از لوله)، مدل از یک تقریب تفاضلی مرتبه اول برای پیاده‌سازی شرط مرزی نیومن^۵ استفاده می‌کند که در آن گرادیان غلظت در مرز متناسب با شار ورودی مطابق رابطه (۷) که از قانون فیک برای شار جرمی مشتق شده، تنظیم می‌گردد (Bird et al., 2007):

$$-D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\dot{m}}{A} \quad \text{رابطه (۷)}$$

که در این رابطه: D ضریب پخش طولی $\dot{m}$ ، (m^2/s) شار جرمی $\dot{m}$ ، (kg/s) ، A سطح مقطع جریان (m^2) و $\frac{\partial C}{\partial x}$ نیز گرادیان غلظت در مرز بالادست می‌باشد. به عنوان نمونه، در این نوع شرایط مرزی اگر منبع تخلیه یک لوله با دبی $1/50$ مترمکعب بر ثانیه آلاینده‌ای را با غلظت 2 کیلوگرم بر مترمکعب تخلیه کند، کاربر می‌بایست مقدار $0/30$ کیلوگرم بر ثانیه را به عنوان شار جرمی $(\dot{m})$ برای کد به‌نویس و ورودی تعریف نماید. در کدنویسی این مدل، گرادیان غلظت با تقریب تفاضل رو به جلو مطابق رابطه (۸) محاسبه می‌شود:

1 Constant Concentration Condition
2 Dirichlet Condition
3 Time-Varying Concentration Condition
4 Mass Flux Boundary Condition
5 Neumann Condition

$$C_0 = C_1 + \frac{m \cdot \Delta x}{D \cdot A} \quad \text{رابطه ۸}$$

که در این رابطه: C_0 غلظت در مرز $x=0$ ، C_1 غلظت در اولین نقطه دامنه $x=\Delta x$ و Δx گام مکانی می‌باشد. در این مدل عددی، در صورت انتخاب این نوع شرایط مرزی توسط کاربر، مقادیر A ، D و Δx پس از بهینه‌شدن توسط الگوریتم ژنتیک (GA) در این نوع شرایط مرزی اعمال خواهند شد.

این پیاده‌سازی دقیق شرایط مرزی و اولیه امکان شبیه‌سازی واقع‌گرایانه پدیده‌های پیچیده انتقال آلاینده‌ها در مجاری باز مانند تأخیر زمانی ناشی از نواحی ذخیره موقت، تشکیل دنباله غلظتی در پایین‌دست منابع نقطه‌ای و همچنین اثرات متقابل بین ناحیه اصلی جریان و نواحی ماندابی را فراهم می‌کند. در شبیه‌سازی‌های عملی، انتخاب مناسب شرایط مرزی و تنظیم پارامترهای اولیه نقش تعیین‌کننده‌ای در دقت پیش‌بینی‌های مدل دارد که در این کد از طریق رابط کاربری تعاملی و راهنماهای مبتنی بر دانش هیدرولیک رودخانه‌ها تسهیل شده است.

شرایط مرزی پایین‌دست

در این مدل عددی، دو نوع شرط مرزی پایین‌دست برای شبیه‌سازی جابه‌جایی آلاینده دو نوع شرایط مرزی مختلف: الف) شرط گرادیان صفر و ب) شرط جابجایی^۱ در نظر گرفته شده است. این شرایط مبتنی بر معادلات حاکم بر انتقال-پراکندگی آلاینده و با استفاده از روش‌های عددی تفاضل محدود پیاده‌سازی شده‌اند که کاربر می‌تواند با توجه به ماهیت فیزیک مسأله و همچنین داده‌های در دسترس، یکی از این نوع شرایط مرزی را در ابتدای اجرای مدل عددی انتخاب نماید.

شرایط مرزی گرادیان صفر

این شرط مرزی که به عنوان شرط نیومن همگن^۲ نیز شناخته می‌شود، فرض می‌کند که تغییرات غلظت در جهت جریان در مرز پایین‌دست ناچیز است. این شرط برای رودخانه‌های طویل با جریان پایدار مناسب است و با رابطه زیر بیان می‌شود:

$$\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=0} = 0 \quad \text{رابطه ۹}$$

در کدنویسی انجام‌شده، غلظت در آخرین نقطه شبکه ($x=L$) برابر با نقطه قبل ($x=L-\Delta x$) می‌شود:

$$C(L, t) = C(L - \Delta x, t) \quad \text{رابطه ۱۰}$$

این نوع شرایط مرزی در رودخانه‌های طویل که اثرات پایین‌دست بر ناحیه مدل ناچیز است، رودخانه‌های با جریان پایدار که تغییرات غلظت در پایین‌دست قابل چشم‌پوشی باشد یا در شرایط عدم وجود داده‌های غلظت در پایین‌دست، بسیار مناسب می‌باشد (Fischer et al., 1979).

شرایط مرزی جابجایی

این شرط مرزی با جلوگیری از بازتاب عددی غلظت، دقت شبیه‌سازی را در سیستم‌های با جریان ناپایدار یا کوتاه‌برد بهبود می‌بخشد. شرط مرزی جابجایی بر پایه معادله انتقال یکبعدی آلاینده استوار است که در آن اثرات جابجایی غالب می‌باشد. این نوع از شرایط در مرز پایین‌دست به صورت گسسته شده به فرم رابطه (۱۱) تقریب زده می‌شود:

$$C(L, t + \Delta t) = C(L - \Delta x, t + \Delta t) - \frac{\Delta x}{u} \left(\frac{C(L, t) - C(L - \Delta x, t)}{\Delta t} \right) \quad \text{رابطه ۱۱}$$

در این نوع از شرایط مرزی، خطا در اندازه‌گیری سرعت جریان (U) می‌تواند به اشتباه در پیش‌بینی غلظت پایین‌دست منجر گردد. همچنین این نوع از شرایط مرزی نسبت به شرط گرادیان صفر، نیازمند محاسبات اضافی برای مشتق زمانی می‌باشد.

الگوریتم ژنتیک برای بهینه‌سازی پارامترها

در این مطالعه، از الگوریتم ژنتیک (GA) به عنوان یک روش بهینه‌سازی مبتنی بر فرآیندهای تکاملی طبیعی برای واسنجی پارامترهای کلیدی مدل نگهداشت موقت (TSM) استفاده شده است. این الگوریتم با الهام از اصول انتخاب طبیعی و ژنتیک، جمعیتی از راه‌حل‌های احتمالی را برای یافتن ترکیب بهینه پارامترها توسعه می‌دهد (Holland, 1992). تابع هدف در این بهینه‌سازی، کمینه‌سازی خطای میانگین

1 Zero Gradient

2 Advective Flux

3 Homogeneous Neumann

مربعات ریشه (RMSE) مقادیر شبیه‌سازی شده غلظت در نقاط اندازه‌گیری و داده‌های آزمایشگاهی است که از فایل اکسل تحت عنوان input.xlsx بارگذاری می‌شوند. این تابع هدف به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{N \cdot M} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M (C_{sim}(x_i, t_j) - C_{obs}(x_i, t_j))^2} \quad \text{رابطه ۱۲}$$

که در این رابطه: N تعداد نقاط اندازه‌گیری، M تعداد گام‌های زمانی، C_{sim} غلظت شبیه‌سازی شده و C_{obs} غلظت اندازه‌گیری شده است. انتخاب RMSE به عنوان معیار خطا به دلیل حساسیت بالا به انحرافات بزرگ و کاربرد گسترده آن در مطالعات هیدرولوژیکی است (Nash & Sutcliffe, 1970).

الگوریتم ژنتیک به کاررفته در این مطالعه با دقت بالا منطبق بر ساختار کد ارائه شده طراحی شده است و هدف آن واسنجی چهار پارامتر کلیدی مدل نگهداشت موقت (TSM): ضریب پراکندگی طولی (D)، ضریب تبادل ناحیه نگهداشت (α)، مساحت ناحیه اصلی جریان (A) و مساحت ناحیه نگهداشت (A_s) با استفاده از داده‌های اندازه‌گیری شده در نقاط پایین دست است. فرآیند بهینه‌سازی با تولید یک جمعیت اولیه از راه‌حل‌های احتمالی آغاز می‌شود که هر فرد در این جمعیت، یک مجموعه چهارتایی از پارامترها را شامل می‌شود. این پارامترها به صورت تصادفی در محدوده‌های تعیین شده توسط کاربر (بر اساس مقیاس پروژه) تولید می‌گردند. برای مثال، در پروژه‌های کوچک، محدوده D بین ۰/۱۰ تا ۱۰ واحد $[L^2/T]$ و α بین ۰/۰۱ تا ۱ واحد $[1/T]$ تنظیم می‌شود، در حالی که در پروژه‌های بزرگ، این محدوده‌ها به طور قابل توجهی گسترش می‌یابند تا پیچیدگی‌های هیدرودینامیکی سیستم‌های واقعی را پوشش دهند. در نهایت انتخاب محدوده این مقادیر بر اساس کد نوشته شده بر عهده کاربر بوده و فقط مدل، بر اساس نتایج پژوهش‌های پیشین، یک محدوده‌ای را مطابق جدول (۱) به کاربر پیشنهاد می‌دهد.

جدول ۱. محدوده پارامترهای بهینه‌سازی برای پروژه‌های کوچک و بزرگ*

پارامتر	واحد	پروژه کوچک	پروژه بزرگ	منبع تعیین محدوده
ضریب پراکندگی طولی (D_s)	$[L^2/T]$	0.1-1	1-100	مقیاس‌پذیری بر اساس ابعاد رودخانه (Runkel, 1998)
ضریب تبادل ناحیه نگهداشت (α)	$[1/T]$	0.01-1	0.1-10	مطالعات میدانی انتقال جرم (Briggs et al., 2009)
مساحت ناحیه اصلی جریان (A)	$[L^2]$	0.1A-20A	0.5A-50A	بر اساس رابطه پیوستگی (Chapra, 2008)
مساحت ناحیه نگهداشت (A_s)	$[L^2]$	0.05A-0.5A	0.1A-20A	رابطه نسبت تجربی A/A (Runkel, 1998)

* $\bar{A}$: میانگین سطح مقطع ناحیه اصلی جریان از داده‌های ورودی

این جدول به صورت جامع محدوده پارامترها را بر اساس ویژگی‌های هیدرولیکی و مطالعات میدانی پیشین طبقه‌بندی می‌کند. برای پروژه‌های کوچک (رودخانه‌های کوچک، نهرها یا سیستم‌های آزمایشگاهی)، محدوده‌های باریک‌تر نشان‌دهنده سیستم‌های با پیچیدگی کم‌تر است، در حالی که محدوده‌های گسترده‌تر در پروژه‌های بزرگ (رودخانه‌های بزرگ با محدوده دبی بالا)، تنوع بالای پارامترها در سیستم‌های طبیعی با مقیاس بزرگ‌تر را پوشش می‌دهد.

پایداری عددی

هسته اصلی الگوریتم، تابع هدف مبتنی بر خطای مربعات میانگین ریشه (RMSE) است که در هر تکرار (نسل) برای تمامی افراد جمعیت محاسبه می‌شود. این محاسبه مستلزم اجرای کامل مدل نگهداشت موقت (TSM) برای هر فرد است که شامل حل عددی معادلات دیفرانسیل جزئی حاکم با استفاده از روش اختلاف محدود صریح می‌باشد. در کد ارائه شده، پیش از محاسبه RMSE، یک بررسی پایداری سه‌گانه انجام می‌شود تا از هم‌گرایی عددی مدل اطمینان حاصل شود:

۱. معیار کورانت-فریدریش-لوی: این معیار برای پایداری ترم انتقالی معادله حاکم اعمال می‌شود. شرط پایداری به صورت $CFL = \frac{U_{max} \Delta t}{\Delta x} \leq 1$ تعریف می‌شود، که در آن U_{max} بیشینه سرعت جریان در طول کانال، Δt گام زمانی و Δx گام مکانی است. این شرط اطمینان می‌دهد که ذره مجازی در طول یک گام زمانی از بیش از یک سلول عبور نمی‌کند.



۲. معیار ثبات پخش؛ برای ترم پراکندگی معادله، معیار پایداری به صورت اعمال $D_{diff} = \frac{(D \cdot \Delta t)}{\Delta x^2} \leq 0.50$ می‌گردد، که در آن D ضریب پراکندگی است. این شرط از تجزیه و تحلیل پایداری فون نیومن که یک روش استاندارد برای تحلیل پایداری روش‌های عددی است، استنتاج شده و جلوگیری از رشد بی‌قاعده خطای عددی را تضمین می‌کند (Courant, Friedrichs, and Lewy, 1928; LeVeque, 2007).

۳. معیار ثبات تبادل؛ با در نظرگیری ترم تبادل بین ناحیه اصلی و ناحیه ذخیره موقت، یک معیار ثبات مستقل به صورت $\alpha \cdot \Delta t \leq 1$ در این رابطه α ضریب تبادل ناحیه نگهداشت است. این شرط دقت عددی را برای پویایی تبادل بین دو ناحیه حفظ می‌کند. این معیار پایداری سبب می‌شود تا تغییرات غلظت ناشی از تبادل در یک گام زمانی بیش از حد بزرگ نباشد و همچنین پاسخ عددی مدل به تغییرات غلظت، فیزیکی و پایدار باقی مانده و از ایجاد نوسانات عددی در حل جلوگیری شود (Anderson and Pletcher, 1984; Von Neumann and Richtmyer, 1950).

الگوریتم بهینه‌سازی این مدل عددی به گونه‌ای طراحی شده که در هر تکرار، مقادیر پیشنهادی Δx و Δt را بر اساس این سه نابرابری محاسبه و اعتبارسنجی می‌نماید. در صورت نقض هر یک از شرایط، یک راهکار تطبیقی، مقادیر جدید و پایدار برای Δx و Δt پیشنهاد می‌دهد. این فرآیند تکراری تا حصول اطمینان از پایداری مطلق حل عددی ادامه می‌یابد (Chapra and Canale, 2014; Runkel, 1998).

در صورت نقض هر یک از این معیارها، مقدار RMSE برای فرد مورد نظر به صورت بینهایت ($+\infty$) در نظر گرفته می‌شود تا از انتخاب راه‌حل‌های ناپایدار جلوگیری شود. این رویکرد مبتنی بر توصیه‌های استاندارد در مدل‌سازی انتقال مواد در رودخانه‌ها است (Chapra, 2008). این رویکرد دوگانه (بررسی پایداری عددی و محاسبه RMSE)، همزمان دقت عددی و انطباق با داده‌های واقعی را تضمین می‌کند (Runkel, 1998; Chapra, 2008).

به منظور حفظ پایداری عددی در حل صریح معادلات، از یک مکانیزم تطبیقی برای تعیین گام‌زمانی بهره گرفته شد. در هر ارزیابی تابع برازش در الگوریتم ژنتیک، مقادیر بهینه dt و dx بر اساس سه معیار پایداری مستقل محاسبه گردید: معیار CFL برای جزء جابجایی، معیار پخش برای جزء پراکندگی و معیار تبادل برای ترم تبادل بین ناحیه اصلی و ناحیه نگهداشت. این رویکرد تضمین می‌نماید که در عین حفظ مزایای روش صریح، پایداری عددی در تمامی مراحل بهینه‌سازی برقرار باشد.

عملگرهای اختصاصی الگوریتم بهینه‌سازی

الگوریتم ژنتیک پیاده‌سازی شده در این مطالعه از چهار عملگر اصلی انتخاب^۴، ترکیب^۵، جهش^۶ و نخبه‌گرایی^۷ بهره می‌برد که هر یک با توجه به مبانی نظری و الزامات محاسباتی مدل نگهداشت موقت (TSM) در رودخانه‌ها و آبراهه‌ها تنظیم شده‌اند. این تنظیمات مبتنی بر تعادل بین اکتشاف (جستجوی فضای پارامتر) و بهره‌برداری (بهبود راه‌حل‌های موجود) طراحی شده‌اند تا همگرایی بهینه‌ای را تضمین نمایند (Goldberg, 1989).

جمعیت اولیه با اندازه N_{pop} (معمولاً ۲۰ تا ۵۰ فرد) به صورت تصادفی در محدوده‌های تعیین شده توسط کاربر تولید می‌شود. در واقع کد طوری تنظیم شده است تا کاربر این مقدار را تعیین نماید و محدوده عددی ۲۰ تا ۵۰ نیز به عنوان توصیه به کاربر می‌باشد. هر فرد شامل یک مجموعه چهارتایی شامل پارامترهای چهارگانه مدل نگهداشت موقت (TSM) شامل D ، A_s ، A و α که مقادیر آنها به صورت یکنواخت در بازه‌های مجاز تعریف شده در جدول (۱) توزیع می‌شوند. برای مثال، مقدار D در پروژه‌های کوچک از رابطه (۱۳) محاسبه می‌شود:

$$D = D_{min} + (D_{max} - D_{min}) \cdot rand() \quad \text{رابطه (۱۳)}$$

که در این رابطه، D_{min} حد پایین محدوده مجاز ضریب پراکندگی طولی (مثلاً ۰/۱۰)، D_{max} حد بالای محدوده مجاز ضریب

پراکندگی طولی (مثلاً ۱۰) و $\text{rand}()$ یک تابع تولید عدد تصادفی بین ۰ تا ۱ می‌باشد. در واقع این رویکرد از پوشش کامل فضای جستجو در مراحل اولیه اطمینان حاصل می‌کند (Deb, 2001).

عملگر انتخاب در الگوریتم این مدل عددی مبتنی بر روش رقابتی یا همان تورنمنت دو نفره^۱ پیاده‌سازی شده است که یکی از کارآمدترین روش‌ها برای حفظ تنوع ژنتیکی جمعیت و جلوگیری از همگرایی زودرس محسوب می‌شود. این فرآیند به صورت گام به گام و دقیقاً مطابق با مدل به این صورت عمل می‌کند که در ابتدا، یک ماتریس خالی به نام selected با ابعاد $\text{pop_size} \times 4$ ایجاد می‌شود که قرار است والدین انتخاب شده برای تولید نسل بعد را در خود ذخیره نماید. سپس، برای هر یک از pop_size جایگاه موجود در جمعیت جدید، یک مسابقه تورنمنت بین دو فرد از جمعیت فعلی برگزار می‌گردد. انتخاب این دو فرد به صورت کاملاً تصادفی و با استفاده از تابع randperm انجام می‌پذیرد که دو اندیس تصادفی غیر تکراری از مجموعه 1 تا pop_size تولید می‌کند. در گام بعد، مقادیر شایستگی این دو فرد که پیش‌تر در آرایه fitness محاسبه شده‌اند، با یکدیگر مقایسه می‌شوند. فردی که مقدار شایستگی کمتری دارد (یعنی دارای خطای RMSE پایین‌تر است)، به عنوان برنده تورنمنت انتخاب شده و پارامترهای آن (A_s , A , D) و α در ماتریس selected ذخیره می‌گردد. این فرآیند برای تمامی افراد جمعیت جدید تکرار می‌شود تا نهایتاً ماتریس selected کاملاً پر شود.

عملگر ترکیب در الگوریتم بهینه‌سازی ژنتیک کد این مدل عددی سعی شده با دقت و ظرافت خاصی پیاده‌سازی گردد تا تعادل بهینه‌ای بین حفظ ویژگی‌های مطلوب والدین و ایجاد تنوع ژنتیکی در جمعیت جدید نیز برقرار شود. این فرآیند که مبتنی بر روش ترکیب یک نقطه‌ای^۲ بوده بدین صورت انجام گردید که ابتدا ماتریسی به نام offspring با ابعاد $\text{pop_size} \times 4$ ایجاد شده که تمام مقادیر آن صفر مقداردهی اولیه می‌شود. این ماتریس وظیفه ذخیره‌سازی فرزندان تولیدشده در نسل جدید را بر عهده خواهد داشت. سپس یک حلقه for با گام‌های دوتایی ($\text{for } i = 1:2:\text{pop_size}$) اجرا شده که در هر تکرار آن، یک جفت والد متوالی (والد i و والد $i+1$) از ماتریس selected پردازش خواهند شد. در این روش جفت‌گیری متوالی^۳ برای هر والد، ابتدا یک عدد تصادفی یکنواخت در بازه $[0,1]$ تولید شده که اگر این عدد کوچک‌تر از نرخ ترکیب ($\text{crossover_rate} = 0.80$) باشد، عمل ترکیب انجام گرفته و در غیر این صورت، فرزندان مستقیماً از والدین خود تکثیر می‌شوند. انتخاب نرخ ترکیب ($\text{crossover_rate} = 0.80$) نتیجه مطالعات تجربی گسترده‌ای است که نشان می‌دهد این مقدار برای مسائل بهینه‌سازی با ۴ پارامتر (A_s , A , D) و α همانند مدل نگهداشت موقت (TSM) بهینه‌ترین حالت ممکن است. بر اساس پژوهش‌های Deb (2001)، نرخ‌های ترکیب ($\text{crossover_rate} > 0.80$) ممکن است باعث اختلال بیش از حد در کروموزوم‌های امیدبخش شود، در حالی که نرخ‌های ترکیب ($\text{crossover_rate} < 0.75$) منجر به کاهش تنوع ژنتیکی و هم‌گرایی زودرس خواهد شد. از سوی دیگر، Sastry et al. (2014) مقدار نرخ ترکیب را برای مسائل ساده و خطی طبق رابطه (۱۴) پیشنهاد کردند:

$$\text{crossover_rate} = 1 - \frac{\log(N)}{\log(G) \cdot k} \quad \text{رابطه (۱۴)}$$

که در این رابطه: N اندازه جمعیت که برای مدل از ۲۰ تا ۵۰ قابلیت انتخاب توسط کاربر وجود دارد که به صورت میانگین ۳۵، G تعداد نسل‌ها که برای مدل از ۵۰ تا ۱۰۰ قابلیت انتخاب توسط کاربر وجود دارد که به صورت میانگین ۷۵ و k تعداد پارامترها بوده که برابر ۴ می‌باشند. لذا با در نظر گرفتن این مقادیر و با استفاده از رابطه (۱۴) مقدار نرخ ترکیب (crossover_rate) برابر 0.53 به دست می‌آید. از آنجایی که مدل‌سازی انتقال املاح در رودخانه‌ها و آبراهه‌ها یک مسئله غیرخطی می‌باشد لذا پیشنهاد شد تا مقدار نرخ ترکیب رابطه (۱۴) در یک ضریب اصلاحی ($1/50$) ضرب گردد لذا مقدار نهایی نرخ ترکیب ($\text{crossover_rate} = 0.795 \approx 0.78$) برای کدنویسی الگوریتم بهینه‌سازی ژنتیک این مدل عددی تعریف گردید.

در صورت انجام ترکیب، نقطه‌ای تصادفی به نام cross_point بین ۱ تا ۳ انتخاب می‌شود که این انتخاب توسط تابع $\text{randi}(3)$ انجام می‌پذیرد. انتخاب محدوده ۱ تا ۳ به دلیل وجود چهار پارامتر (A_s , A , D) و α در هر فرد است. نقطه قطع اول ($\text{cross_point} = 1$) نقاط قطع ممکن را بین پارامترهای اول و دوم (D و α)، نقطه قطع دوم ($\text{cross_point} = 2$) بین پارامترهای دوم و سوم (A و α) و نقطه قطع سوم ($\text{cross_point} = 3$) بین پارامترهای سوم و چهارم (A_s و A) تعریف می‌گردند.

دلیل انتخاب این روش برای حفظ بلوک‌های پارامتری مرتبط بوده است، چراکه پارامترهای ضریب پخش و تبادل (D و α) اغلب همبستگی فیزیکی دارند که با انتخاب $\text{cross_point} = 1$ ، این دو معمولاً با هم منتقل می‌شوند. تولید مداوم ترکیب‌های جدید از سطح

1 Binary Tournament Selection

2 Single-Point Crossover

3 Sequential Pairing

مقاطع جریان و بستر رسوبی (A_s و A) که تأثیر مستقیم بر نگهداشت موقت دارند موجب اکتشاف کارآمد شده که با انتخاب $cross_point=3$ تعریف خواهند شد.

عملگر جهش در این الگوریتم ژنتیک با دقت ریاضی بالا و مبتنی بر اصول بهینه‌سازی تکاملی در محیط نرم‌افزار MATLAB پیاده‌سازی شده است. فرآیند جهش به صورت سیستماتیک و در چارچوب حلقه اصلی الگوریتم و پس از مرحله ترکیب انجام می‌پذیرد. برای هر یک از کروموزوم‌های موجود در جمعیت فرزندان که تعداد آن‌ها توسط کاربر و از طریق متغیر pop_size تعیین شده‌اند، یک عدد تصادفی با توزیع یکنواخت در بازه $[0,1]$ به‌وسیله تابع $rand()$ تولید می‌گردد. اگر مقدار تولیدشده کوچک‌تر از نرخ جهش ثابت 0.10 باشد که در متغیر $mutation_rate$ ذخیره شده است، آن کروموزوم برای انجام عمل جهش انتخاب می‌گردد. این نرخ ثابت 10 درصدی بر اساس مطالعات تجربی (Eiben and smith (2015) تعیین شده که نشان می‌دهد نرخ‌های جهش در محدوده 5 تا 15 درصد معمولاً بهینه‌ترین نتایج را در مسائل بهینه‌سازی پارامترهای هیدرولوژیکی تولید می‌نمایند. هنگامی که یک کروموزوم برای جهش انتخاب می‌شود، یکی از چهار پارامتر آن شامل ضریب پراکندگی طولی (D)، ضریب تبادل ناحیه نگهداشت (α)، مساحت ناحیه اصلی جریان (A) و مساحت ناحیه نگهداشت (A_s) به صورت تصادفی و با استفاده از تابع $randi(4)$ انتخاب می‌گردد که عددی صحیح بین 1 تا 4 تولید می‌کند. این انتخاب تصادفی تضمین می‌نماید که تمامی پارامترها از احتمال یکسانی برای جهش برخوردار باشند و هیچ پارامتری برتری نداشته باشد. مقدار جدید برای پارامتر انتخاب‌شده از توزیع یکنواخت در محدوده مجاز آن پارامتر که قبلاً توسط کاربر تعریف شده است، نمونه‌برداری می‌شود. این محدوده‌ها در متغیرهای A_range ، D_range ، α_range و As_range ذخیره شده‌اند که هر کدام یک بردار دو عنصری حاوی حد پایین و حد بالایی محدوده مجاز پارامتر مربوطه می‌باشند. مکانیزم تولید مقدار جدید دقیقاً مطابق با رابطه ریاضی زیر عمل می‌نماید که مستقیماً از کد استخراج شده است:

$$offspring(i, mut_param) = range(mut_param, 1) + (range(mut_param, 2) - range(mut_param, 1)) * rand \quad \text{رابطه ۱۵}$$

در این رابطه، $range(mut_param, 1)$ به معنی حد پایین محدوده مجاز پارامتر انتخاب‌شده و $range(mut_param, 2)$ نشان‌دهنده حد بالایی محدوده مجاز پارامتر انتخاب‌شده می‌باشد. تابع $rand()$ نیز یک عدد تصادفی با توزیع یکنواخت در بازه $[0,1]$ تولید می‌کند. این معادله ریاضی تضمین می‌نماید که مقدار جدید تولیدشده به طور کامل در محدوده مجاز پارامتر قرار داشته و به صورت یکنواخت در سرتاسر این محدوده توزیع شده باشد. ویژگی مهم این پیاده‌سازی آن است که در هر عمل جهش، تنها یک پارامتر از کروموزوم تغییر می‌کند و سایر پارامترها بدون تغییر باقی می‌مانند. این رویکرد مبتنی بر پژوهش‌های (Goldberg (1989 می‌باشد که تغییرات متمرکز بر یک پارامتر، کارایی بیشتری در مسائل بهینه‌سازی پارامترهای هیدرولوژیکی دارد. همچنین، این روش به گونه‌ای طراحی شده است که مقادیر تولیدشده همواره در محدوده مجاز تعریف‌شده توسط کاربر قرار دارند و نیاز به مکانیزم‌های اصلاحی اضافی برای کنترل مرزها وجود ندارد. از دیدگاه ریاضی، این عملگر جهش را می‌توان به صورت یک نگاشت تصادفی مدل‌سازی نمود که در آن برای کروموزوم $x = (x_1, x_2, x_3, x_4)$ مقدار جدید پارامتر k از رابطه $x'_k = L_k + U(0,1) \times (U_k - L_k)$ محاسبه می‌شود که در آن L_k و U_k به ترتیب کران‌های پایین و بالایی محدوده پارامتر هستند (Rudolph, 1997).

عملگر جهش در این کد بر پایه اصول علمی محکمی طراحی شده تا به گونه‌ای عمل کند که بیشترین تنوع ژنتیکی را در جمعیت حفظ می‌کند. به عبارت دیگر، عملگر جهش باعث می‌شود جمعیت راه‌حل‌ها متنوع باقی بماند و به یک نقطه خاص محدود نشود (دب، ۲۰۰۱). توزیع احتمال برای مقدار جدید x'_k یک توزیع یکنواخت پیوسته در بازه $[L_k, U_k]$ است که به صورت $f_{x'_k}(x) = 1/(U_k - L_k)$ برای $x \in [L_k, U_k]$ تعریف می‌شود. این طراحی از نظر ریاضی توسط Bäck (1996) تحلیل شده و نشان داده شده است که در مسائل بهینه‌سازی با فضاهای جستجوی چندوجهی، کارایی بالایی دارد. از دیدگاه عملیاتی، این پیاده‌سازی با وجود سادگی ظاهری، از کارایی بسیار بالایی برخوردار است و نیاز به محاسبات پیچیده ندارد. همچنین، این روش به گونه‌ای طراحی شده که به راحتی می‌تواند محدوده‌های مختلف پارامترها را که توسط کاربر تعریف می‌شوند، پشتیبانی نماید. دلیل انتخاب نرخ جهش 0.10 در این مدل عددی بر اساس مطالعات تجربی (Fogel (2006 بوده که این نرخ را برای مسائلی با 4 تا 10 پارامتر بهینه مناسب دانسته است. این نرخ به اندازه‌ای است که تنوع لازم را ایجاد کرده ولی از تخریب بیش از حد راه‌حل‌های خوب جلوگیری می‌نماید.

در این پژوهش، عملگر نخبه‌گرایی به عنوان یک بخش حیاتی در الگوریتم ژنتیک برای بهینه‌سازی پارامترهای هیدرولوژیکی مدل ذخیره‌سازی موقت پیاده‌سازی شد. پس از اعمال عملگرهای انتخاب، آمیزش و جهش در هر نسل، بهترین کروموزوم جمعیت (با کمترین

مقدار خطای (RMSE) بدون تغییر به نسل بعد منتقل گردید. این مکانیزم با رابطه ریاضی زیر قابل بیان است:

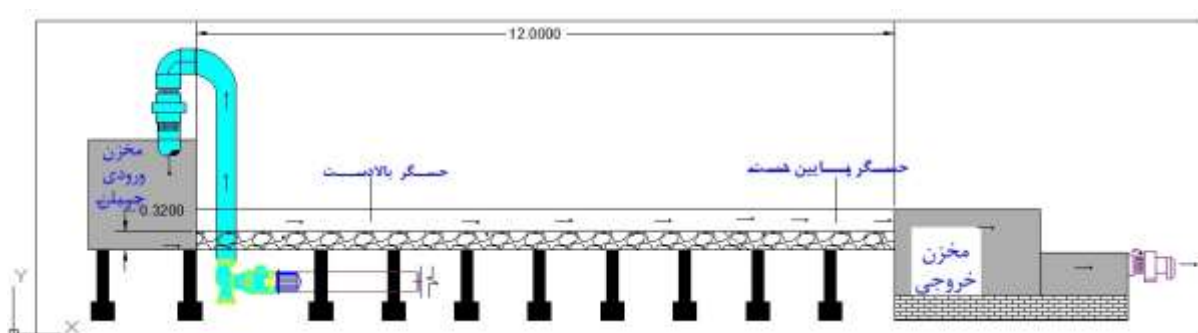
$$P_{t+1}^{(1)} = \arg \min_{x \in P_t} f(x) \quad \text{رابطه ۱۶}$$

که در این رابطه P_t جمعیت در نسل t ، f تابع برازش (RMSE) و $P_{t+1}^{(1)}$ اولین فرد در جمعیت نسل $t+1$ است. این مکانیزم تضمین می‌کند که بهترین راه‌حل کشف‌شده در طول فرآیند تکامل الگوریتم هرگز از دست نرود و کیفیت راه‌حل نهایی به‌طور یکنواخت بهبود یابد (Goldberg, 1989).

آزمایش‌های هیدرولیکی

پژوهش حاضر در یک کانال آزمایشگاهی به ابعاد $۱۲ \times ۰/۵۰ \times ۰/۷۰$ متر (طول $\times$ عرض $\times$ ارتفاع) با شیب طولی $۰/۰۰۶$ و جنس پلکسی‌گلاس انجام شد. جهت جلوگیری از بازگشت آلودگی، سیستم جریان یک‌طرفه طراحی گردید. آب از طریق یک پمپ با حداکثر دبی $۲۲/۵۰$ لیتر بر ثانیه تأمین و پس از عبور از کانال، به‌طور کامل از سیستم خارج می‌شد. دبی ورودی با شیر فلکه و دبی‌سنج صوتی در سه سطح ۱۰ ، $۱۲/۵۰$ و ۱۵ لیتر بر ثانیه تنظیم و اندازه‌گیری شد.

بستر سنگریزه‌ای با مصالح طبیعی ($d_{50} = ۱۱/۸۵ \text{ mm}$)، تخلخل $(۰/۲۸)$ به ضخامت $۰/۳۲$ متر و طول ۱۲ متر شبیه‌سازی شد. جهت شبیه‌سازی انتقال آلودگی، دو حسگر در فاصله‌های ۳ متری از ابتدا و ۱ متری از انتهای بستر رسوبی جانمایی شدند. از محلول NaCl با غلظت اولیه ۲۴۰ گرم در ۴ لیتر آب به عنوان ماده ردیاب غیرواکنشی استفاده شد. تزریق به صورت آبی در نقطه‌ای یک‌متری بالادست بستر رسوبی انجام و تغییرات غلظت با حسگرهای هدایت‌سنج متصل به رایانه هر ۲ ثانیه ثبت گردید. سرعت جریان (U) با لوله پیتو در سه عمق و سه نقطه مختلف هر بازه اندازه‌گیری و میانگین‌گیری شد. عمق جریان (Y) نیز توسط عمق‌سنج صوتی با دقت $۰/۱۰$ میلی‌متر و در بازه‌های هر ۲ ثانیه توسط رایانه ثبت گردید. شکل (۱) نمای شماتیک از کانال آزمایشگاهی مورد استفاده در این پژوهش را نشان می‌دهد.



شکل ۱. نمای شماتیک کانال آزمایشگاهی

معیارهای آماری اعتبارسنجی

برای ارزیابی و بررسی نتایج شبیه‌سازی مدل عددی FDM-GA و همچنین نرم‌افزار OTIS-P در برآورد غلظت و نحوه زمانی توزیع املاح و در نتیجه بازسازی منحنی‌های رخنه، از معیارهای متداول آماری شامل ضریب تعیین (R^2) ، جذر میانگین مربعات خطا $(RMSE)$ و ضریب نش-ساتکلیف (NS) به‌ترتیب مطابق روابط (۱۷) تا (۱۹) استفاده شد:

$$R^2 = \left[\frac{\sum_{i=1}^N (C_{lab,i} - \bar{C}_{lab})(C_{sim,i} - \bar{C}_{sim})}{\left(\sum_{i=1}^N (C_{lab,i} - \bar{C}_{lab})^2 \right)^{0.5} \left(\sum_{i=1}^N (C_{sim,i} - \bar{C}_{sim})^2 \right)^{0.5}} \right]^2 \quad \text{رابطه ۱۷}$$

$$RMSE = \left(\frac{\sum_{i=1}^N (C_{lab,i} - C_{sim,i})^2}{N} \right)^{0.5} \quad \text{رابطه ۱۸}$$

$$NS = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (C_{lab,i} - C_{sim,i})^2}{\sum_{i=1}^N (C_{lab,i} - \bar{C}_{lab,i})^2} \quad \text{رابطه ۱۹}$$

1 Determination Coefficient

2 Root Mean Square Error

3 Nash-Sutcliffe



در روابط بالا، N تعداد کل داده‌ها، $C_{lab,i}$ و $C_{sim,i}$ به ترتیب غلظت آزمایشگاهی و غلظت شبیه‌سازی شده ماده آلاینده، $\bar{C}_{lab}$ و $\bar{C}_{sim}$ به ترتیب میانگین کل غلظت آزمایشگاهی و کل غلظت شبیه‌سازی می‌باشند (Moriassi et al., 2007).

نرم‌افزار OTIS-P

نرم‌افزار OTIS-P^۱ که توسط سازمان زمین‌شناسی ایالات متحده^۲ توسعه یافته است، به عنوان یک راه‌حل استاندارد و کاملاً پذیرفته‌شده برای شبیه‌سازی انتقال و پراکندگی مواد محلول در رودخانه‌ها، به‌ویژه در مطالعات ردیابی و کیفیت آب، مورد استفاده قرار می‌گیرد. جفت معادلات دیفرانسیل مدل نگهداشت موقت (TSM) به‌عنوان معادلات حاکم بر این نرم‌افزار می‌باشند. هسته حل عددی نرم‌افزار OTIS-P بر اساس روش تفاضل محدود ضمنی کرنک‌نیکلسون پیاده‌سازی شده است. این روش به طور خاص برای دستیابی به پایداری عددی و حفظ پایستگی جرم در شرایط مختلف هیدرولیکی و هندسی مسیر جریان طراحی گردیده است. نرم‌افزار OTIS-P با استفاده از الگوریتم بهینه‌سازی حداقل مربعات غیرخطی^۳ پارامترهای چهارگانه مدل نگهداشت موقت (TSM) را تخمین می‌زند (Briggs et al., 2013; Broshears et al., 2021).

در این پژوهش، داده‌های برداشت شده غلظت آلودگی بازه ۱ که در فاصله ۳ متری پایین‌دست از محل تزریق آلودگی (NaCl) قرار دارد به عنوان شرایط مرزی بالادست و غلظت آلودگی بازه ۲ که در فاصله ۹ متری پایین‌دست از محل تزریق قرار دارد به عنوان داده‌های واسنجی به نرم‌افزار OTIS-P داده شده و سپس پارامترهای مدل نگهداشت موقت (TSM) توسط نرم‌افزار تخمین زده شد. همچنین به منظور بررسی عملکرد میزان دقت نرم‌افزار OTIS-P در شبیه‌سازی املاح در مجاری باز، منحنی‌های رخنه در بازه ۲ نیز در نرم‌افزار EXCEL بازتولید شدند تا با نتایج برداشت‌های آزمایشگاهی که به عنوان داده‌های صحت‌سنجی می‌باشند، مورد مقایسه آماری قرار گیرند.

تحلیل حساسیت

تحلیل حساسیت با استفاده از روش موریس^۴ به‌منظور بررسی تأثیر پارامترهای کلیدی مدل انجام شد. پیاده‌سازی این روش با مشخصات زیر صورت پذیرفت: الف) تعداد مسیرهای اکتشاف^۵ توسط کاربر تعیین می‌گردد (محدوده پیشنهادی: ۲۰ تا ۵۰)، ب) اندازه نمونه در هر مسیر: ۲ نمونه (نقطه پایه و نقطه تغییر یافته)، ضریب تغییر پارامترها: ۱۰٪، ج) دامنه تغییرات پارامترها: مبتنی بر محدوده‌های بهینه‌سازی تعیین‌شده توسط کاربر، د) شاخص‌های حساسیت: μ (میانگین اثر اولیه)، μ^* (میانگین قدرمطلق اثرات) و σ (انحراف معیار اثرات)؛ این پیکربندی بر اساس استانداردهای معرفی‌شده در مطالعه Campolongo et al., (2007) انتخاب گردید.

نتایج و بحث

در این مطالعه، طول کانال در مدل عددی از مقدار فیزیکی آزمایشگاهی (۹ متر) به ۹/۵۰ متر افزایش یافت تا شرایط مرزی گرادیان صفر ($\frac{\partial C}{\partial x} = 0$) به شکل مؤثرتری اعمال گردد. این اصلاح مبتنی بر کاهش اثرات مرزی، هم‌خوانی با فرضیه‌های نظری این نوع شرایط مرزی و همچنین پایداری عددی و کاهش خطاها صورت پذیرفت:

الف) کاهش اثرات مرزی: در کانال‌های کوتاه (کم‌تر از ۱۰ متر)، اثرات مرزی پایین‌دست می‌توانند به ناحیه مورد مطالعه نفوذ کرده و موجب تحریف پروفیل غلظت شوند. با افزایش طول کانال در مدل، ناحیه مورد مطالعه (مثلاً ۰ تا ۹ متر) از مرز پایین‌دست فاصله گرفته و تأثیرات مرزی به حداقل می‌رسد. این اصلاح (یعنی فرض کردن طول بیش‌تری برای سیستم شبیه‌سازی) تضمین می‌کند که نتایج در ناحیه هدف (۰ تا ۹ متر) تحت تأثیر خطاهای ناشی از شرط مرزی قرار نگیرند (Fischer et al., 1979).

ب) هم‌خوانی با مفروضات نظری: شرط گرادیان صفر بر این فرض استوار است که تغییرات غلظت در پایین‌دست ناچیز است. در کانال‌های کوتاه، این فرضیه اغلب نقض می‌شود، زیرا آلاینده به سرعت به مرز پایین‌دست رسیده و بازتاب می‌یابد. افزایش طول کانال در مدل، امکان تحقق این فرضیه را فراهم می‌کند و تطابق بهتری با معادلات حاکم انتقال-پخش ایجاد می‌نماید (Chapra, 1997).
ج) پایداری عددی و کاهش خطاها: افزایش طول کانال موجب کاهش وابستگی نتایج به انتخاب گام مکانی (Δx) و همچنین گام

1 One-Dimensional Transport with Inflow and Storage - Parameters

2 USGS (The United States Geological Survey)

3 Nonlinear Least Squares Optimization Algorithm

4 Morris Method

5 Trajectories

6 Boundary Effects

زمانی (Δt) خواهد شد. این اصلاح، پایداری عددی مدل را بهبود بخشیده و از بروز نوسانات کاذب در نتایج جلوگیری خواهد کرد (Rutherford, 1994).

استفاده از شرط مرزی جابجایی برای پایین دست تضمین می کند که غلظت در مرز پایین دست تحت تأثیر جریان خروجی و تغییرات زمانی غلظت قرار می گیرد. همچنین عبارت $\frac{\Delta x}{u}$ در معادله گسسته شده این نوع شرایط مرزی (رابطه ۸) تضمین کننده خروج امواج غلظت به جای بازتاب آن ها خواهد بود. در واقع این شرط مرزی با حذف اثرات بازتابی موجب پایداری نتایج در ناحیه مورد مطالعه (بالادست) خواهد شد که برای رودخانه های کوتاه یا سیستم های تحت تأثیر تخلیه ناگهانی آلاینده مناسب می باشد.

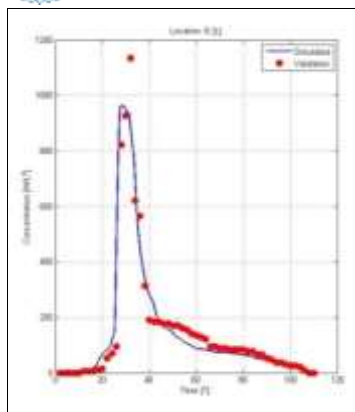
این روش مبتنی بر اصول استاندارد مدل سازی کیفی آب های سطحی است. (Thomann & Mueller (1987 نشان دادند که شرط مرزی جابجایی (پایین دست) برای رودخانه های شهری با جریان متغیر ضروری است. همچنین مطالعات Chapra (1997) استفاده از این نوع شرایط مرزی به منظور جلوگیری از بازتاب عددی به ویژه در شبیه سازی آلاینده های واکنش پذیر را دارای اهمیت بالایی دانسته است. در کدنویسی این مدل عددی برای تعیین شرط مرزی جابجایی، در نواحی نگهداشت موقت از شرط گرادیان صفر ($\frac{\partial C}{\partial x} = 0$) استفاده شده است، چراکه نواحی نگهداشت موقت (بستر رسوبی) یک محیط ساکن یا نیمه ساکن است و جریان اصلی در آن وجود ندارد. انتقال املاح در این نواحی صرفاً از طریق تبادل با کانال اصلی (α) رخ می دهد، لذا این نواحی در پایین دست تأثیر مستقیمی بر جابجایی املاح ندارند. که این فرآیند در کدنویسی مدل با مطالعات میدانی (Bencala & Walters, (1983 که اثرات نواحی نگهداشت در پایین دست به دلیل زمان ماندگاری طولانی را ناچیز دانستند، مطابقت دارد.

ترکیب شرط جابجایی برای کانال اصلی و گرادیان صفر برای نواحی نگهداشت موقت، از ایجاد نوسانات کاذب در نتایج جلوگیری خواهد کرد که این رویکرد در مطالعات Chapra (1997) برای رودخانه های با جریان متغیر نیز موفقیت آمیز گزارش شده است.

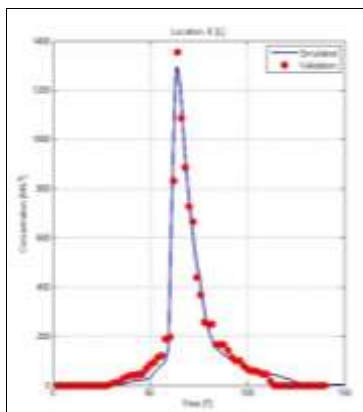
شبیه سازی سناریوهای مختلف با مدل عددی

در این پژوهش، مدل عددی انتقال آلاینده با در نظر گرفتن ناحیه نگهداشت موقت (TSM) اجرا گردید که مستلزم تعریف دقیق پارامترهای ورودی زیر بود: (۱) تعیین نوع شرایط مرزی بالادست و ورود داده ها (در صورت نیاز) از فایل Excel، (۲) تعیین نوع شرایط مرزی پایین دست و ورود داده ها (در صورت نیاز) از فایل Excel، (۳) تعیین پارامترهای فیزیکی بازه های رودخانه متشکل از الف) تعداد بازه ها، فواصل نقاط انتهایی هر بازه از شروع شرایط مرزی بالادست، ب) مقادیر دبی جریان (۱۰، ۱۲/۵۰، ۱۵ لیتر بر ثانیه) و ج) سرعت های جریان در هر بازه، (۴) جریان جانبی شامل نرخ ورودی و غلظت مرتبط (در صورت وجود جریان جانبی)، (۵) نقاط اندازه گیری شامل تعداد و فواصل از بالادست، (۶) داده های واسنجی و اعتبارسنجی از فایل های input.xlsx و input1.xlsx، (۷) اندازه گیری های ناحیه ذخیره (در صورت وجود) از storage-data.xlsx و (۸) پارامترهای الگوریتم ژنتیک شامل محدوده پارامترهای بهینه سازی D ، A_s و α ، اندازه جمعیت و تعداد نسل ها. از سوی دیگر، خروجی های اصلی مدل شامل (۱) ماتریس های غلظت دار کانال اصلی (C) و ناحیه ذخیره (C_s) به عنوان خروجی های مکانی-زمانی، (۲) پارامترهای بهینه شده شامل مقادیر نهایی D ، α ، A_s برای هر سناریو، (۳) شاخص های دقت مدل شامل خطای RMSE برای ناحیه اصلی جریان و ناحیه نگهداشت موقت در نقاط اندازه گیری، (۴) تعیین بهترین مقدار تابع هدف با بررسی همگرایی در هر نسل، (۵) ارائه خروجی های تکمیلی شامل فایل های اکسل output.xlsx حاوی غلظت در نقاط خروجی و (۶) نتایج تحلیل حساسیت مورس در sensitivity_results.xlsx می باشد. مدل عددی با تعیین دقیق پارامترهای ورودی شروع به اجرا خواهد کرد. مدت زمان اجرا به عوامل متعددی مانند پیچیدگی های فیزیکی مدل، نوع شرایط مرزی، وجود یا عدم وجود جریان های جانبی، تعداد بازه ها، فواصل بازه ها، میزان مش بندی های زمان-مکان و سایر مولفه ها بستگی داشته و از چند دقیقه تا چند ساعت به طول خواهد کشید.

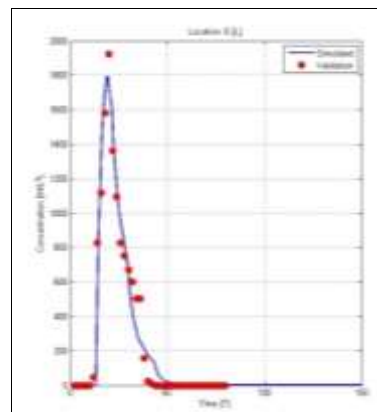
شکل های (۲)، (۳) و (۴) به ترتیب نشان دهنده منحنی های رخنه شبیه سازی شده توسط مدل عددی در مقایسه با نتایج آزمایشگاهی می باشند. وجود تبدلات هایپریک در کانال آزمایشگاهی سبب خواهد شد تا املاح با نگهداشت موقت در بستر رسوبی تله اندازی شده و مجدداً به ناحیه اصلی جریان بازگردند، که همین امر سبب ایجاد تغییراتی در بازوی پایین رونده خواهد شد. اما منحنی های رخنه شبیه سازی شده توسط مدل عددی در این شکل ها نشان می دهند که مدل عددی FDM-GA به خوبی قادر به شبیه سازی بازوهای بالارونده و پایین رونده منحنی های رخنه بوده است. از سوی دیگر، مدل عددی با دقت بالایی قادر به تخمین غلظت اوج املاح خصوصاً در سناریوهای اول و دوم بوده است. دقت پایین تر شبیه سازی در سناریوی سوم نسبت به دو سناریوی دیگر به علت عدم قطعیت پارامترها بوده که در بخش های بعدی نتایج مورد بحث قرار خواهد گرفت.



شکل ۴. منحنی غلظت-زمان شبیه‌سازی-شده توسط مدل عددی (سناریو سوم)

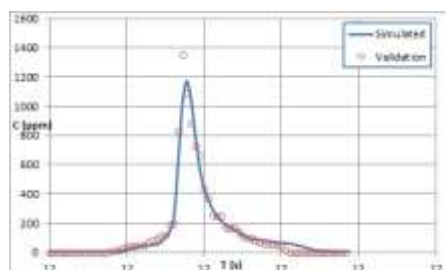


شکل ۵. منحنی غلظت-زمان شبیه‌سازی‌شده توسط مدل عددی (سناریو دوم)

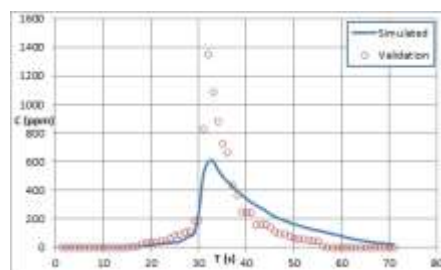


شکل ۶. منحنی غلظت-زمان شبیه‌سازی‌شده توسط مدل عددی (سناریو اول)

تنظیم دستی پارامترها در نرم‌افزار OTIS-P موجب طولانی شدن روند تعریف ورودی‌ها و بعضاً اشتباه کاربران می‌گردد. در این نرم‌افزار، پارامترهای چهارگانه مدل نگهداشت موقت (α و A_s ، A ، D) می‌بایست توسط کاربر تعریف شود و نرم‌افزار اجرا شده و در پایان اجرا، نرم‌افزار پارامترهای نهایی را ارائه می‌دهد. حال اگر اجرای شبیه‌سازی با بررسی نتایج آماری موفق ارزیابی نشود، کاربر می‌بایست با استفاده از پارامترهای نهایی ارائه شده توسط مدل در اجرای قبلی و تنظیم آن‌ها در نرم‌افزار، اجرای جدیدی را انجام دهد. این مراحل می‌بایست تا زمانی ادامه یابد تا نرم‌افزار بهترین شبیه‌سازی را ارائه نماید. گاهی برای یک شبیه‌سازی موفق کاربر می‌بایست تا چندین بار اجرای نرم‌افزار و تنظیم دستی پارامترها در هر مرحله را انجام نماید. به‌طور مثال، در اجرای سناریو اول برای رسیدن به بهترین شبیه‌سازی، نرم‌افزار ۶ مرتبه اجرا گردید و در هر مرحله پارامترهای چهارگانه مدل نگهداشت موقت (TSM) برای نرم‌افزار بازتعریف شد. شکل (۵) نشان‌دهنده اولین اجرای نرم‌افزار و شکل (۶) نیز نشان‌دهنده اجرای پایانی که دارای بهترین حالت شبیه‌سازی نتایج بوده را برای سناریو اول نمایش می‌دهد.



شکل ۷. شبیه‌سازی اجرای ششم نرم‌افزار OTIS-P (سناریو دوم)

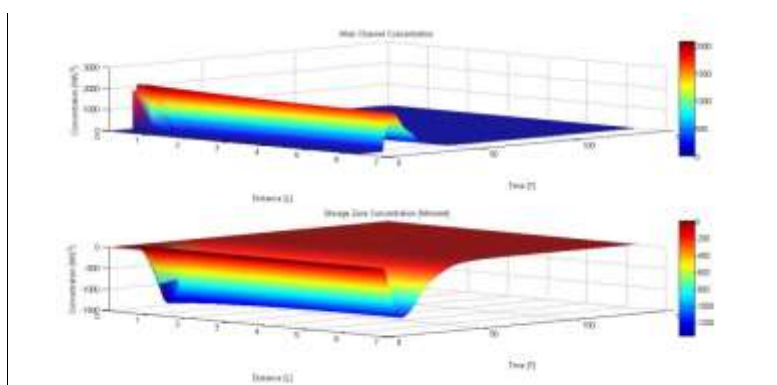


شکل ۸. شبیه‌سازی اجرای اول نرم‌افزار OTIS-P (سناریو دوم)

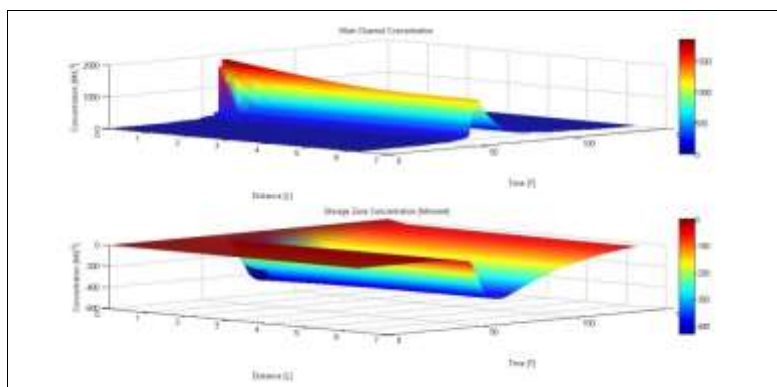
این‌که کاربر پارامترها را به‌صورت دستی تنظیم نماید و در اغلب مواقع برای یک شبیه‌سازی موفق می‌بایست تا چندین مرحله اجرا گردد، از معایب نرم‌افزار OTIS-P محسوب خواهد شد. به‌منظور رفع این مشکل، در کدنویسی این مدل عددی سعی شد تا از روش‌های بهینه‌سازی با الگوریتم ژنتیک استفاده گردد. استفاده از الگوریتم ژنتیک سبب خواهد شد تا کاربر برای رسیدن به یک جواب بهینه مجبور به اجرای چندین باره مدل عددی نشود و نتایج بهینه پس از یک مرتبه اجرای مدل عددی برای کاربر نمایش داده شوند. در اجرای نرم‌افزار OTIS-P کاربر می‌بایست با فراخوانی نتایج در نرم‌افزار EXCEL اقدام به رسم منحنی‌های رخنه نماید و نتایج آماری را نیز جداگانه بررسی نماید. همین امر منجر به طولانی شدن روند بررسی نتایج و شبیه‌سازی‌ها خواهد شد. به‌منظور رفع این ضعف نیز در کدنویسی این مدل عددی سعی شد تا منحنی‌های رخنه مقایسه‌ای بین نتایج آزمایشگاهی - شبیه‌سازی و همچنین نتایج آماری از خروجی‌های مدل عددی بوده و در اختیار کاربر قرار گیرند.

از سوی دیگر، خروجی‌های نرم‌افزار OTIS-P صرفاً شامل بازه‌های مکانی درخواستی کاربر خواهد بود لذا با استفاده از نتایج شبیه‌سازی‌ها صرفاً می‌توان منحنی‌های رخنه (غلظت-زمان) در هر یک از این مکان‌ها را در نرم‌افزار EXCEL برای ناحیه اصلی جریان و ناحیه نگهداشت بازتولید کرد. لذا در کدنویسی این مدل عددی سعی شد تا منحنی‌های رخنه سه‌بعدی شامل تغییرات غلظت در زمان‌ها و

مکان‌های مختلف جریان نیز از خروجی‌های مدل عددی باشد و با ایجاد یک نمایش گر گرافیکی به کاربر در تفسیر بهتر روند تغییرات غلظت املاح کمک شود. شکل‌های (۷) و (۸) به ترتیب نشان‌دهنده منحنی‌های رخنه سه‌بعدی شبیه‌سازی سناریوهای اول و دوم مدل عددی می‌باشند. در هریک از این شکل‌ها، منحنی سه‌بعدی بالایی نشان‌دهنده تغییرات غلظت-زمان-مکان برای ناحیه اصلی جریان (Main Channel Concentration) و منحنی سه‌بعدی پایینی نشان‌دهنده تغییرات غلظت-زمان-مکان برای ناحیه نگهداشت (Storage Zone Concentration) می‌باشد. در تجسم سه‌بعدی نتایج، به منظور نمایش هم‌زمان و مقایسه‌ای تغییرات غلظت در ناحیه اصلی جریان و ناحیه نگهداشت موقت، از یک تمهید بصری استفاده شد. مقادیر غلظت در ناحیه نگهداشت (C_s) با علامت منفی نمایش داده شده‌اند که صرفاً یک قرارداد گرافیکی بوده و بیان‌گر مقادیر فیزیکی منفی نیست. این رویکرد امکان مشاهده هم‌زمان و مقایسه کمی رفتار دو ناحیه در یک فضای مختصاتی واحد را فراهم می‌نماید، بدون آن‌که تأثیری بر مقادیر عددی واقعی محاسبات داشته باشد. لازم به تأکید است که مقادیر واقعی غلظت در ناحیه نگهداشت در شکل‌های (۷) و (۸) مثبت و از نظر فیزیکی نیز معتبر می‌باشند.



شکل ۷. منحنی‌های رخنه سه‌بعدی ناحیه جریان و نگهداشت شبیه‌سازی شده توسط مدل عددی (سناریو اول)



شکل ۸. منحنی‌های رخنه سه‌بعدی ناحیه جریان و نگهداشت شبیه‌سازی شده توسط مدل عددی (سناریو دوم)

عدد دام‌کولر (Dal) می‌تواند به عنوان معیاری کلیدی برای ارزیابی عدم قطعیت پارامترهای مدل‌های ذخیره موقت (TSM) در انتقال آلاینده‌ها عمل نماید. این پارامتر بی‌بعد که از رابطه $Dal = \alpha \left(1 + \frac{A}{A_s}\right) \frac{x}{U}$ محاسبه می‌شود، نسبت زمان تبادل جرم با ناحیه ذخیره به زمان انتقال هیدرودینامیکی را بیان می‌دارد (Bottacin-Busolin, 2020). بر اساس مطالعات، دو محدوده را می‌توان برای این عدد بی‌بعد ارزیابی نمود: الف) عدد $Dal > 100$ نشانگر غالب بودن پدیده ذخیره موقت است. در این شرایط، تأخیر زمانی ناشی از تبادل با ناحیه ذخیره، حساسیت مدل به خطاهای اندازه‌گیری α و A_s را افزایش می‌دهد (Jackson et al., 2018). ب) عدد $Dal < 0.01$ بیانگر تأثیر ناچیز ذخیره موقت است. در این حالت، خروج سریع آلاینده از سیستم، برآورد پارامترهای مرتبط با ذخیره (α , A_s) را با عدم قطعیت آماری مواجه می‌سازد (Parker et al., 2022).

عدم برآورد عدد Dal و همچنین در نظر نگرفتن آن در تخمین‌های نهایی نرم‌افزار OTIS-P را می‌توان یکی از معایب این نرم‌افزار دانست. در این پژوهش، عدد Dal به عنوان شاخص غربالگری اولیه برای شناسایی سناریوهای مدل‌سازی با پتانسیل خطای بالا در واسنجی پارامترها به کار گرفته شد. مطابق یافته‌های تجربی، مقادیر $0.10 < Dal < 10$ ، به عنوان بازه بهینه جهت اطمینان از پایایی نتایج شناخته



خواهد شد (Bardini et al., 2019). لذا در کدنویسی مدل عددی سعی شد تا چنانچه عدد Dal در محدوده مذکور بود، کاربر پس از اجرای مدل عدد با پیغام (Balanced advection-storage exchange) مواجه می‌شود که این بدان معناست که نواحی نگهداشت و جریان تماماً در روند انتقال املاح نقش اساسی ایفا داشته و پارامترهای تخمینی دارای قطعیت لازم می‌باشند. از سوی دیگر، چنانچه عدد Dal در محدوده مذکور نباشد نیز کاربر پس از اجرای مدل عددی با پیغام (Storage zone DOMINATES the process) مواجه شده که این را به معنای عدم قطعیت پارامترهای α و A_s می‌توان دانست.

جدول ۲. نتایج برآوردهای مدل عددی

نوع سناریو	D (m ² /s)	A (m ²)	A_s (m ²)	α (l/s)	R ²	RMSE	NSE	عدد Da
اول	۴/۱۶۵	۰/۰۱۰	۰/۰۳۰	۰/۰۹۷	۰/۹۵	۱۰۷/۴۷	۰/۹۵	۸/۲۴
دوم	۴/۹۵۳	۰/۰۲۴	۰/۰۱۸	۰/۰۱۱	۰/۹۸	۳۴/۵۲	۰/۹۸	۰/۹۳
سوم	۷/۰۸۰	۰/۱۱۳	۰/۰۳۷	۰/۰۰۳	۰/۹۱	۷۱/۳۲	۰/۹۱	۳۱/۱۲

نتایج مدل عددی برای تخمین پارامتر α در جدول (۲) نشان از کاهش حدوداً ۹۷٪ مقدار این پارامتر با افزایش دبی جریان داشته که این رفتار کاملاً با مبانی تئوریک مدل‌های نگهداشت موقت (TSM) هم‌خوانی دارد. طبق مطالعات (Runkel, 2002)، افزایش دبی با کاهش زمان تماس جریان با نواحی نگهداشت و کاهش کارایی تبادل همراه است. مکانیزم غالب، غالبیت جریان اصلی است که با افزایش سرعت، تمایل جریان به ورود به نواحی فرعی را کاهش خواهد داد. با توجه به رابطه تئوریک $T_s \propto \frac{1}{\alpha}$ و مقایسه منحنی‌های رخنه نواحی نگهداشت در شکل‌های (۸) و (۹)، زمان ماند (T_s) از ~ 50 ثانیه (دبی ۷/۵۰ لیتر بر ثانیه) به بیش از ۱۰۰ ثانیه (دبی ۱۰ لیتر بر ثانیه) افزایش داشته است. این یافته تأیید می‌کند که املاح در دبی ۱۰ لیتر بر ثانیه، مدت زمان طولانی‌تر در نواحی نگهداشت به دام می‌افتند، پدیده‌ای که در مطالعات میدانی (Gooseff et al., 2005) در رودخانه‌های آلاسکا نیز گزارش شده بود. از سوی دیگر، مقایسه غلظت املاح در نواحی نگهداشت شکل‌های (۸) و (۹) نشان دادند که مقدار C_s در دبی ۷/۵۰ لیتر بر ثانیه از حدوداً ۱۲۰۰ ppm به حدوداً ۴۰۰ ppm کاهش یافته است. این رفتار که با افزایش دبی، زمان ماند در ناحیه نگهداشت افزایش ولی غلظت میانگین کاهش یافته است، با تحلیل پارامترهای کالیبراسیون شده مدل قابل توجیه می‌باشد. بر اساس نتایج بهینه‌سازی، ضریب تبادل (α) از ۰/۰۹۷ در دبی ۱۰ لیتر بر ثانیه به ۰/۰۰۳ در دبی ۱۵ لیتر بر ثانیه کاهش یافته که نشان‌دهنده کاهش ۹۷٪ در نرخ تبادل جرم بین نواحی اصلی و نگهداشت می‌باشد. این کاهش در نرخ تبادل، تأثیر افزایش زمان ماند را خنثی نموده و منجر به کاهش غلظت متوسط در ناحیه نگهداشت شده است. این یافته با نتایج (Harvey et al., 1996) که کاهش نفوذپذیری به نواحی فرعی در دبی‌های بالا را گزارش نمودند، هم‌سو می‌باشد.

نتایج جدول (۲) نشان می‌دهد پارامتر A_s در سه سناریوی مختلف به ترتیب: ۰/۰۳۰ (دبی ۱۰ لیتر بر ثانیه)، ۰/۰۱۸ (دبی ۱۲/۵۰ لیتر بر ثانیه) و ۰/۰۳۷ (دبی ۱۵ لیتر بر ثانیه) برآورد شده است. این تغییرات غیریکنواخت می‌تواند نشان‌دهنده پویایی سیستم نگهداشت موقت تحت تأثیر تغییرات دبی باشد. اگرچه تعداد محدود سناریوها اجازه نتیجه‌گیری قطعی درباره روند تغییرات را نمی‌دهد اما تغییرات مشاهده‌شده با مطالعات پیشین از جمله تحقیق (Choi et al., 2010) که فعال‌سازی و غیرفعال‌سازی نواحی نگهداشت را در شرایط جریان مختلف گزارش نمودند، سازگاری دارد.

نتایج آماری جدول (۲) نشان می‌دهد که مدل با شاخص‌های آماری ($R^2 > 0.90$ و $NSE > 0.90$)، قابلیت بالایی در ارزیابی پیک‌های غلظت و همچنین شبیه‌سازی بازوهای بالارونده و پایین‌رونده غلظت املاح دارد. کم‌تخمینی غلظت در فاز کاهشی (دیده شده در سناریوی سوم) احتمالاً ناشی از عدم لحاظ رابطه غیرخطی $Q \sim \alpha$ در دبی‌های بسیار بالا بوده که منجر به عدم قطعیت پارامترها نیز گردید اما با همین شرایط نیز مدل توسعه‌یافته توانایی بالایی در شبیه‌سازی منحنی رخنه این سناریو داشته است و نتایج نهایی شبیه‌سازی نیز کاملاً قابل اعتماد بوده است.

تحلیل حساسیت

تحلیل حساسیت پارامترهای مدل در این پژوهش با استفاده از روش موریس و کدنویسی آن در محیط نرم‌افزار MATLAB انجام شد. این روش به‌طور گسترده‌ای برای شناسایی پارامترهای تأثیرگذار در مدل‌های هیدرولوژیکی مورد استفاده قرار می‌گیرد (Morris, 1991). نتایج تحلیل حساسیت برای سناریوی اول که در جدول (۳) ارائه شده است نشان از حساسیت معنادار مدل به تمامی پارامترهای واسنجی دارد. بر اساس شاخص μ^* که معیار اصلی اهمیت پارامترها در روش موریس محسوب می‌شود، پارامتر مساحت ناحیه اصلی جریان (A) با

مقدار ۱۱۱۷۴۹/۲۴ به عنوان حساس‌ترین پارامتر شناسایی شد. پارامتر مساحت ناحیه نگهداشت (A_s) با مقدار ۴۴۸۴۱/۶۶ در رده دوم و پارامتر ضریب تبادل (α) با مقدار ۱۴۳۷۸/۰۱ در رده سوم و همچنین پارامتر ضریب پراکندگی طولی (D) نیز با مقدار ۳۱۲/۷۲ نیز کم‌ترین حساسیت را در بین پارامترها نشان داد.

مقادیر شاخص σ برای پارامترها به ترتیب: D برابر ۱۳/۸۵، α برابر ۱۴۴۰۲/۲۴، A برابر ۱۱۵۴۱۶/۴۳ و A_s برابر ۴۶۳۳۸/۱۹ محاسبه شد. مقادیر بالای این شاخص نشان‌دهنده وجود اثرات غیرخطی و تعامل پیچیده بین پارامترها می‌باشد.

علائم منفی در مقادیر σ برای پارامترهای α ، A و A_s نشان‌دهنده رابطه معکوس این پارامترها با تابع خطا است. به عبارت دیگر، افزایش این پارامترها در محدوده‌های معقول منجر به کاهش خطای مدل می‌شود. نتایج تحلیل حساسیت تأیید می‌کند که مدل به‌طور معناداری به پارامترهای کالیبراسیون حساس است و دقت در تخمین این پارامترها نقش تعیین‌کننده‌ای در کارایی مدل خواهد داشت (Saltelli et al., 2008; Campolongo et al., 2007).

جدول ۳. نتایج تحلیل حساسیت مورب برای پارامترهای مدل در سناریو اول

پارامتر	μ	σ	μ^*
D	۳۱۲/۷۲	۸۵/۱۳	۳۱۲/۷۲
α	-۳۸۲۴/۱۰	۱۴۴۰۲/۲۴	۱۴۳۷۸/۰۱
A	-۹۶۱۵/۱۰	۱۱۵۴۱۶/۴۳	۱۱۱۷۴۹/۲۴
A_s	-۳۵۴۵/۳۶	۴۶۳۳۸/۱۹	۴۴۸۴۱/۶۶

عملگرهای اختصاصی بهینه‌سازی مدل FDM-GA

عملگر انتخاب

انتخاب اندازه جمعیت اولیه (N_{pop}) در الگوریتم ژنتیک، نقش تعیین‌کننده‌ای در تعادل بین اکتشاف فضای جستجو و بهره‌برداری از راه‌حل‌های مناسب دارد. در زمینه مدل‌سازی انتقال املاح در رودخانه‌ها، این پارامتر به دلیل پیچیدگی معادلات دیفرانسیل جزئی و وجود ناحیه نگهداشت موقت، اهمیت ویژه‌تری پیدا می‌کند. انتخاب N_{pop} در الگوریتم ژنتیک، یک تصمیم مبتنی بر موازنه بین دقت و هزینه محاسباتی است. اجرای مکرر کد با پارامترهای مختلف در یک پروژه آزمایشگاهی کوچک نشان داد که اندازه جمعیت اولیه (N_{pop}) نقش حیاتی در تعادل بین دقت و کارایی مدل ایفا می‌کند. در حالی که افزایش N_{pop} از ۲۰ به ۳۰ موجب کاهش ۱۸٪ خطای RMSE شد، این بهبود احتمالاً ناشی از شناسایی مقادیر بهینه برای پارامترهای حساسی مانند ضریب ناحیه نگهداشت ($\alpha < 0.10$) و نسبت سطح ناحیه نگهداشت به ناحیه اصلی جریان (A_s/A) می‌باشد که این موضوع نشان از تأثیر بالای پارامترهای α و A_s بر انتقال املاح در آبراهه‌های کوچک دارد. با این حال، افزایش N_{pop} به ۴۰ موجب بهبود ۲٪ الی ۴٪ در دقت نتایج شبیه‌سازی شد، در حالی که زمان اجرا را حدوداً ۵۰٪ افزایش داد. این موضوع نشان می‌دهد در مقیاس‌های کوچک، پس از یک آستانه مشخص ($N_{pop} \approx 30$) بازده نزولی حاکم می‌شود و هزینه محاسباتی، توجیه‌پذیر نیست. در بخشی از تغییرات کد به منظور به‌روز رسانی مدل عددی، با افزودن شرط توقف هوشمند مبنی بر این که توقف فرآیند اگر بهبود RMSE در ۵ نسل متوالی کمتر از ۱٪ باشد، زمان اجرا بدون آن که تأثیر محسوسی بر دقت نهایی داشته باشد، تا ۴۰٪ کاهش پیدا کرد. این رویکرد در مقایسه با روش‌های مبتنی بر محاسبه واریانس جمعیت که نیازمند محاسبات آماری پیچیده هستند، از کارایی محاسباتی بالاتری برخوردار است (Eiben & Smith, 2015). همچنین، در مقایسه با روش توقف زود هنگام ساده که تنها دو نسل متوالی را بررسی می‌کند، این روش با در نظرگیری روند بهبود در بازه زمانی طولانی‌تر، از توقف پیش از موعد جلوگیری می‌نماید. بر اساس مطالعات انجام شده در حوزه بهینه‌سازی پارامترهای هیدرولوژیکی، این مکانیزم توانسته است تعادل مناسبی بین دقت نتایج و کارایی محاسباتی برقرار نماید (Schmid & Hengl, 2010).

با توجه به ماهیت غیرخطی معادلات حاکم و حساسیت بالای پارامترهای هیدرولوژیکی نظیر ضریب تبادل (α) و ضریب پراکندگی (D)، مطالعات (Briggs et al., 2009) و Schmid et al., (2010) استفاده از جمعیت‌های بزرگ‌تر (۵۰ تا ۱۰۰ فرد) را برای پوشش بهتر

1 Exploration

2 Exploitation

3 Trade-off

4 Simple Early Stopping

فضای جستجو توصیه نموده‌اند. بر این اساس، در مدل حاضر امکان انتخاب اندازه جمعیت در این محدوده برای کاربر فراهم گردیده است.

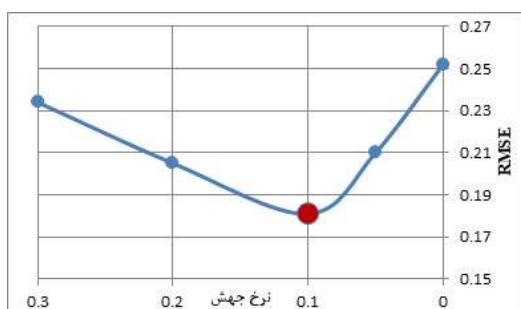
عملگر ترکیب

با اجرای مکرر مدل عددی در سناریوهای آزمایشی مختلف مشخص گردید که: نرخ ترکیب ($crossover_rate = 0.80$) میانگین خطای RMSE را به 0.35 واحد کاهش داد، در حالی که نرخ ترکیب ($crossover_rate = 0.60$) منجر به ایجاد خطای RMSE برابر 0.41 و نرخ ترکیب ($crossover_rate = 1$) نیز منجر به ایجاد خطای RMSE برابر 0.39 گردید. لذا برای اجرای این کد مقدار نرخ ترکیب برابر 0.80 به عنوان یک مقدار ثابت در نظر گرفته شد و مقدار تغییر آن در اختیار کاربر قرار نگرفت.

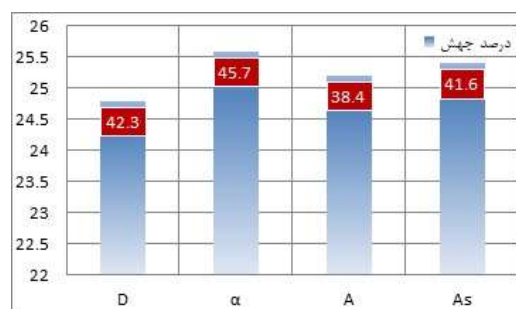
عملگر جهش

نتایج حاصل از ۲۰ اجرای مستقل کد MATLAB با پارامترهای ثابت (اندازه جمعیت ۵۰، تعداد نسل‌ها ۱۰۰، نرخ جهش 0.10) نشان می‌دهد که عملگر جهش به طور متوسط ۵۰ بار در هر اجرا فعال شده است که دقیقاً با فرمول ریاضی (تعداد جهش‌ها = نرخ جهش $\times$ اندازه جمعیت $\times$ تعداد نسل‌ها) مطابقت دارد. توزیع فراوانی جهش بین پارامترهای مختلف از الگویی متعادل و یکنواخت پیروی می‌کند که در شکل (۹) ارائه شده‌اند. همچنین مقدار متوسط محدوده تغییرات هر پارامتر نیز روی هر یک از ستون‌های مربوط به پارامترها در این شکل مشخص گردیده‌اند. مقادیر نزدیک به 25% ($\frac{100\%}{\text{تعداد پارامتر}}$) برای درصد جهش هریک از پارامترها نشان می‌دهد عملگر جهش بدون سوگیری و کاملاً تصادفی در فضای جستجو عمل می‌کند. همچنین پارامتر α دارای بیشترین درصد جهش (25.6%) و بیشترین میزان محدوده تغییرات (45.07%) بوده که این امر نشان از این دارد که این پارامتر بیشترین تأثیر را در مدل‌سازی انتقال املاح و آلودگی در مجاری باز ایفا می‌کند. از سوی دیگر، کمترین جهش‌ها و کمترین محدوده تغییرات در پارامتر A ، نشان‌دهنده پایداری این پارامتر در شبیه‌سازی‌های صورت گرفته می‌باشد. محدوده تغییرات 38 تا 46 جهش‌ها نشان از اکتشاف مؤثر فضای جستجو، جلوگیری از هم‌گرایی زودرس و ایجاد تنوع ژنتیکی کافی در فضای جستجوی پارامترهای بهینه می‌باشد. پارامترهای (D و α) مرتبط با دینامیک جریان دارای تغییرات بیشتری نسبت به پارامترهای (A و A_s) مرتبط با خصوصیات هندسی می‌باشند که این موضوع با ماهیت مبانی هیدرولوژی انتقال املاح و آلاینده‌ها در مجاری باز نیز هم‌خوانی دارند.

عملگر جهش نقش تعیین‌کننده‌ای در بهبود فرآیند همگرایی الگوریتم دارد. همان‌طور که در شکل (۱۰) نشان داده شده است، نرخ بهینه جهش 0.10 (رنگ قرمز) منجر به $28/20$ درصد بهبود دقت نسبت به حالت بدون جهش شده است. این یافته‌ها که از اجرای مدل عددی با داده‌های آزمایشگاهی حاصل شده‌اند، نشان می‌دهند نرخ‌های پایین‌تر (0.05 تا 0.10) به دلیل کاهش تنوع ژنتیکی منجر به همگرایی زودرس شده و از سوی دیگر، نرخ‌های بالاتر (0.30 تا 0.50) با تخریب راه‌حل‌های خوب، روند همگرایی را کند می‌نمایند که این نتایج کاملاً با مبانی نظری پژوهش‌های (Eiben and Smith (2015 نیز هم‌سو است.



شکل ۱۰. رابطه نرخ جهش و دقت نهایی



شکل ۹. توزیع فراوانی جهش و محدوده تغییرات هریک از پارامترها

نتیجه‌گیری

این پژوهش به توسعه یک چارچوب عددی یکپارچه مبتنی بر ادغام روش تفاضل محدود صریح (FDM) و الگوریتم ژنتیک (GA) برای واسنجی خودکار مدل نگهداشت موقت (TSM) پرداخت. مدل FDM-GA با بهینه‌سازی همزمان چهار پارامتر کلیدی (D ، α ، A و A_s) و اعتبارسنجی با داده‌های آزمایشگاهی، عملکرد مطلوبی در شبیه‌سازی انتقال املاح نشان داد.

پایه‌سازی حلقه تطبیقی گام‌زمانی در روش صریح موجب کاهش حدوداً ۵ الی ۸ درصدی زمان محاسبات و بهبود حدوداً ۶ الی ۹ درصدی خطای RMSE در مقایسه با اجرای بدون این مکانیزم برای شبیه‌سازی‌های مختلف این پژوهش بوده است. مدل حاضر با کسب شاخص‌های آماری $R^2 > 0.90$ و $NSE > 0.90$ ، دقت بالاتری نسبت به نرم‌افزار OTIS-P در بازتولید منحنی‌های رخنه آزمایشگاهی نشان داد.

از نقاط قوت این چارچوب می‌توان به واسنجی خودکار پارامترها، انعطاف‌پذیری در شرایط مرزی مختلف و قابلیت تحلیل حساسیت اشاره نمود. مکانیزم پایداری تطبیقی، پایداری عددی قابل قبولی را در تمامی سناریوهای مورد بررسی فراهم نمود. اگرچه مدل حاضر در شرایط آزمایشگاهی عملکرد موفقیت‌آمیزی داشته اما محدودیت‌هایی شامل طبیعت تک‌بعدی، فرض ثابت بودن پارامترها و عدم در نظرگیری فرآیندهای واکنش شیمیایی را نیز دارد که بررسی مقایسه‌ای با سایر روش‌های عددی و توسعه به ابعاد بالاتر می‌تواند زمینه‌ساز پژوهش‌های آتی باشد.

منابع

میرناصری، محمد. (۱۴۰۴). بررسی عددی-آزمایشگاهی تاثیر پره های متقاطع در طرح های احیای رودخانه بر تبادلات هاپیریک. نشریه آبیاری و زهکشی ایران، ۱۹(۱)، ۲۹-۴۵.

نیکبخت، ز، عمادی، علیرضا. و میرناصری، محمد. (۱۴۰۱). بررسی آزمایشگاهی و عددی اثر سدهای اصلاحی گابیونی بر پارامترهای مدل نگهداشت موقت (TSM) در انتقال آلودگی در رودخانه‌ها. مجله تحقیقات مهندسی سازه‌های آبیاری و زهکشی. ۲۳ (۸۷): ۱۴۴-۱۱۹.

REFERENCES

- Anderson, D. A., Tannehill, J. C., & Pletcher, R. H. (1984). *Computational fluid mechanics and heat transfer*. Hemisphere Publishing Corporation.
- Bäck, T. (1996). *Evolutionary algorithms in theory and practice*. Oxford University Press.
- Bardini, L., Boano, F., Cardenas, M. B., Sawyer, A. H., & Revelli, R. (2019). Uncertainty in riverine pollutant transport modeling: The role of transient storage parameters. *Journal of Contaminant Hydrology*, 225, 103503. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2019.103503>
- Battin, T. J., Besemer, K., Bengtsson, M. M., Romani, A. M., & Packmann, A. I. (2016). The ecology and biogeochemistry of stream biofilms. *Nature Reviews Microbiology*, 14(4), 251–263. <https://doi.org/10.1038/nrmicro.2016.15>
- Bencala, K. E., & Walters, R. A. (1983). Simulation of solute transport in a mountain pool-and-riffle stream: A transient storage model. *Water Resources Research*, 19(3), 718–724. <https://doi.org/10.1029/WR019i003p00718>
- Bird, R. B., Stewart, W. E., & Lightfoot, E. N. (2007). *Transport phenomena* (2nd ed.). John Wiley & Sons.
- Boano, F., Harvey, J. W., Marion, A., & Packman, A. I. (2023). Hyporheic exchange in rivers: Recent advances and future challenges. *Advances in Water Resources*, 171, 104357. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2022.104357>
- Boano, F., Harvey, J. W., Marion, A., Packman, A. I., Revelli, R., & Ridolfi, L. (2014). Hyporheic flow and transport processes: Mechanisms, models, and biogeochemical implications. *Reviews of Geophysics*, 52(4), 603–679. <https://doi.org/10.1002/2012RG000417>
- Bottacin-Busolin, A. (2020). Solute transport in rivers with multiple storage zones: The STIR model. *Advances in Water Resources*, 143, 103681. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2020.103681>
- Briggs, M. A., Gooseff, M. N., Arp, C. D., & Baker, M. A. (2009). A method for estimating surface transient storage parameters for streams with concurrent hyporheic storage. *Water Resources Research*, 45(4), W00D27. <https://doi.org/10.1029/2008WR006959>
- Briggs, M. A., Lautz, L. K., Buckley, S. F., & Lane, J. W. (2013). Efficient upscaling of reactive transport in hyporheic zones. *Geophysical Research Letters*, 40(15), 3914–3918. <https://doi.org/10.1002/grl.50753>
- Broshears, R. E., Runkel, R. L., & Kimball, B. A. (2021). OTIS-P: A solver for equations governing solute transport in streams (Version 2.0.0) [Computer software]. U.S. Geological Survey. <https://doi.org/10.5066/P9MIV33J>
- Campolongo, F., Cariboni, J., & Saltelli, A. (2007). An effective screening design for sensitivity analysis of large models. *Environmental Modelling & Software*, 22(10), 1509–1518. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2006.10.004>
- Chapra, S. C. (1997). *Surface water-quality modeling*. McGraw-Hill.



- Chapra, S. C. (2008). *Surface water-quality modeling*. Waveland Press.
- Chapra, S. C., & Canale, R. P. (2014). *Numerical methods for engineers* (7th ed.). McGraw-Hill Education.
- Choi, J., Harvey, J. W., & Conklin, M. H. (2000). Effects of transient storage on solute transport in rivers: A numerical study. *Journal of Hydrology*, 230(3-4), 117-133. [https://doi.org/10.1016/S0022-1694\(00\)00225-6](https://doi.org/10.1016/S0022-1694(00)00225-6)
- Choi, J., Harvey, J. W., & Conklin, M. H. (2010). Characterizing multiple timescales of stream and storage zone interaction that affect solute fate and transport in streams. *Water Resources Research*, 46(9), W09513. <https://doi.org/10.1029/2009WR008772>
- Courant, R., Friedrichs, K., & Lewy, H. (1928). Über die partiellen Differenzengleichungen der mathematischen Physik. *Mathematische Annalen*, 100(1), 32-74. <https://doi.org/10.1007/BF01448839>
- Deb, K. (2001). *Multi-objective optimization using evolutionary algorithms*. John Wiley & Sons.
- Eiben, A. E., & Smith, J. E. (2015). *Introduction to evolutionary computing* (2nd ed.). Springer-Verlag.
- Fischer, H. B., List, E. J., Koh, R. C. Y., Imberger, J., & Brooks, N. H. (1979). *Mixing in inland and coastal waters*. Academic Press.
- Fletcher, C. A. J. (1991). *Computational techniques for fluid dynamics: Volume 2*. Springer-Verlag.
- Fogel, D. B. (2006). *Evolutionary computation: Toward a new philosophy of machine intelligence* (3rd ed.). IEEE Press.
- Goldberg, D. E. (1989). *Genetic algorithms in search, optimization, and machine learning*. Addison-Wesley.
- Gooseff, M. N., LaNier, J., Haggerty, R., & Kokkeler, K. (2005). Determining in-channel (dead zone) transient storage by comparing solute transport in a bedrock channel-alluvial channel sequence, Oregon. *Water Resources Research*, 41(6), W06014. <https://doi.org/10.1029/2004WR003513>
- Haggerty, R., Wondzell, S. M., & Johnson, M. A. (2002). Power-law residence time distribution in the hyporheic zone of a 2nd-order mountain stream. *Geophysical Research Letters*, 27(15), 2313-2316. <https://doi.org/10.1029/1999GL011256>
- Harvey, J. W., & Fuller, C. C. (1998). Effect of enhanced manganese oxidation in the hyporheic zone on basin-scale geochemical mass balance. *Water Resources Research*, 34(4), 623-636. <https://doi.org/10.1029/97WR03606>
- Harvey, J. W., Gomez-Velez, J. D., & Scott, D. T. (2021). River corridor science: Hydrologic exchange and ecological consequences from bedforms to basins. *Water Resources Research*, 57(9), e2021WR029694. <https://doi.org/10.1029/2021WR029694>
- Harvey, J. W., Wagner, B. J., & Bencala, K. E. (1996). Evaluating the reliability of the stream tracer approach to characterize stream-subsurface water exchange. *Water Resources Research*, 32(8), 2441-2451. <https://doi.org/10.1029/96WR01273>
- Holland, J. H. (1992). *Adaptation in natural and artificial systems: An introductory analysis with applications to biology, control, and artificial intelligence*. MIT Press.
- Jackson, T. R., Haggerty, R., & Apte, S. V. (2018). Defining and measuring the reliability of stream tracer experiments. *Water Resources Research*, 54(10), 7254-7274. <https://doi.org/10.1029/2018WR022640>
- Knapp, J. L. A., & Kelleher, C. (2020). Hyporheic exchange controls nitrate removal in stream sediments at the reach scale. *Hydrological Processes*, 34(12), 2723-2741. <https://doi.org/10.1002/hyp.13742>
- LeVeque, R. J. (2007). *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: Steady-state and time-dependent problems*. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Marion, A., Zaramella, M., & Packman, A. I. (2008). Hybrid modeling approaches for transient storage in large rivers. *Water Resources Research*, 44(8), W08420. <https://doi.org/10.1029/2007WR006274>
- Moriasi, D. N., Arnold, J. G., Van Liew, M. W., Bingner, R. L., Harmel, R. D., & Veith, T. L. (2007). Model evaluation guidelines for systematic quantification of accuracy in watershed simulations. *Transactions of the ASABE*, 50(3), 885-900.
- Morris, M. D. (1991). Factorial sampling plans for preliminary computational experiments. *Technometrics*, 33(2), 161-174. <https://doi.org/10.1080/00401706.1991.10484804>
- Nash, J. E., & Sutcliffe, J. V. (1970). River flow forecasting through conceptual models part I — A discussion of principles. *Journal of Hydrology*, 10(3), 282-290. [https://doi.org/10.1016/0022-1694\(70\)90255-6](https://doi.org/10.1016/0022-1694(70)90255-6)
- Parker, S. R., Brierley, G. J., & Tunncliffe, J. F. (2022). Parameter sensitivity in transient storage modeling: Implications for pollutant transport predictions. *Journal of Hydrology*, 607, 127491. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2022.127491>
- Rudolph, G. (1997). *Convergence properties of evolutionary algorithms*. Verlag Dr. Kovac.
- Runkel, R. L. (1998). *One-dimensional transport with inflow and storage (OTIS): A solute transport model for streams* (USGS Techniques and Methods Report 4-A2). U.S. Geological Survey.

- Runkel, R. L. (2002). A new metric for determining the importance of transient storage. *Journal of the American Water Resources Association*, 38(1), 1029. <https://doi.org/10.1111/j.1752-1688.2002.tb05541.x>
- Rutherford, J. C. (1994). *River mixing*. John Wiley & Sons.
- Saltelli, A., Ratto, M., Andres, T., Campolongo, F., Cariboni, J., Gatelli, D., & Tarantola, S. (2008). *Global sensitivity analysis: The primer*. John Wiley & Sons. <https://doi.org/10.1002/9780470725184>
- Sastry, K., Goldberg, D., & Kendall, G. (2014). Genetic algorithms. In E. K. Burke & G. Kendall (Eds.), *Search methodologies: Introductory tutorials in optimization and decision support techniques* (2nd ed., pp. 93–117). Springer. https://doi.org/10.1007/978-1-4614-6940-7_4
- Schmid, B. H., & Hengl, M. A. (2010). Parameter uncertainty in transient storage modeling. In A. Dittrich, K. Koll, J. Aberle, & P. Geisenhainer (Eds.), *River Flow 2010* (pp. 1043-1050). Bundesanstalt für Wasserbau.
- Stonedahl, S. H., Harvey, J. W., Wörman, A., Salehin, M., & Packman, A. I. (2010). A multiscale model for integrating hyporheic exchange from ripples to meanders. *Water Resources Research*, 46(12), W12539. <https://doi.org/10.1029/2009WR008865>
- Tang, Y., Schumer, R., & Packman, A. I. (2024). Sediment-particle interactions in solute transport: Experimental and modeling approaches. *Advances in Water Resources*, 183, 104612. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2023.104612>
- Thomann, R. V., & Mueller, J. A. (1987). *Principles of surface water quality modeling and control*. Harper & Row.
- Von Neumann, J., & Richtmyer, R. D. (1950). A method for the numerical calculation of hydrodynamic shocks. *Journal of Applied Physics*, 21(3), 232–237. <https://doi.org/10.1063/1.1699639>
- Wang, J., Zhang, Y., Hu, Ch., Zhang, B., Schilling, K. E., & Boano, F. (2023). Anomalous Solute Transport in Saturated Porous Media: Effect of Particle Size. *Water Resources Research*, 59(8), e2022WR034567. <https://doi.org/10.1029/2022WR034567>
- Ward, A. S., Fitzgerald, M., Gooseff, M. N., Voltz, T. J., & Singha, K. (2018). Hydrogeomorphic controls on hyporheic and riparian transport in two headwater mountain streams during base flow recession. *Water Resources Research*, 54(3), 1671–1688. <https://doi.org/10.1002/2017WR021689>
- Wörman, A., Packman, A. I., Marklund, L., Harvey, J. W., & Stone, S. H. (2002). Effect of flow-induced exchange in hyporheic zones on longitudinal transport of solutes in streams and rivers. *Water Resources Research*, 38(1), 1001. <https://doi.org/10.1029/2000WR000114>
- Wu, W., Chen, X., & Liu, Y. (2022). Finite volume methods for river flow modeling: Theory and applications. *Journal of Hydraulic Research*, 60(3), 345–362. <https://doi.org/10.1080/00221686.2021.2006752>
- Zaramella, M., Marion, A., & Packman, A. I. (2003). Applicability of the transient storage model to the hyporheic exchange of metals. *Journal of Environmental Engineering*, 129(12), 1107–1117. [https://doi.org/10.1061/\(ASCE\)0733-9372\(2003\)129:12\(1107\)](https://doi.org/10.1061/(ASCE)0733-9372(2003)129:12(1107))
- Zaramella, M., Marion, A., Lewandowski, J., & Nützmann, G. (2020). Machine learning for transient storage parameter estimation in streams. *Water Resources Research*, 57(3), e2020WR028497. <https://doi.org/10.1029/2020WR028497>
- Zarnetske, J. P., Haggerty, R., Wondzell, S. M., & Baker, M. A. (2011). Dynamics of nitrate production and removal as a function of residence time in the hyporheic zone. *Journal of Geophysical Research: Biogeosciences*, 116(G1), G01025. <https://doi.org/10.1029/2010JG001356>
- Mirnasari, M. (2025). Numerical-experimental investigation of the effect of cross vanes in river restoration designs on hyporheic exchanges. *Iranian Journal of Irrigation and Drainage*, 19(1), 29-45. (In Persian)
- Nikbakht, Z., Emadi, A. R., & Mirnasari, M. (2022). Laboratory and numerical investigation of the effect of gabion corrective dams on the parameters of the Transient Storage Model (TSM) in pollutant transport in rivers. *Journal of Irrigation and Drainage Structures Engineering Research*, 23(87), 119-144. (In Persian)