

# Development of an Integrated Framework Based on the CE-QUAL-W2 Model, XGBoost Machine Learning, and the EVPS Algorithm for Reservoir Water Quality Simulation and Optimization

Seyedeh Zahra Hassani<sup>1</sup>, Parisa-Sadat Ashofteh<sup>2,\*</sup>

1- Ph.D. Student, Department of Civil Engineering, University of Qom, Qom, Iran. 0009-0001-8670-0248

2- Associate Professor, Department of Civil Engineering, University of Qom, Qom, Iran. 0000-0003-2561-0510

\*Corresponding Author: PS.Ashofteh@qom.ac.ir.

## Extended abstract:

### Introduction

Reservoir water quality management is increasingly challenged by climate change, anthropogenic activities, and growing water demands, necessitating efficient approaches for monitoring, prediction, and optimization. This study develops an integrated framework for optimizing water quality in Ekbatan Reservoir by combining the CE-QUAL-W2 model, an XGBoost-based surrogate model, and the Enhanced Vibrating Particle System (EVPS) algorithm. First, CE-QUAL-W2 simulates reservoir water quality, and its outputs train the XGBoost model for rapid prediction of water quality parameters. Subsequently, EVPS is applied to optimize total dissolved solids (TDS) concentrations and identify suitable reservoir operation policies. The performance of EVPS is compared with Particle Swarm Optimization (PSO) in terms of solution quality, prediction accuracy, and computational efficiency. This integrated framework aims to reduce computational costs while improving the accuracy and efficiency of reservoir water quality management and operational decision-making.

### Materials and Methods

The study developed a three-part framework for simulating and optimizing water quality in Ekbatan Reservoir. First, the CE-QUAL-W2 model was calibrated and validated using observed data to represent reservoir hydrodynamics and water-quality processes. Its performance was evaluated using the Nash–Sutcliffe Efficiency (*NSE*), with reported values for reservoir storage and water-surface elevation. Second, XGBoost was used to construct a machine-learning surrogate based on CE-QUAL-W2 model outputs. The surrogate was intended to provide faster predictions of water-quality indicators than repeated runs of the process-based model. Its predictive performance was assessed using the coefficient of determination ( $R^2$ ), mean absolute error (*MAE*), and root mean square error (*RMSE*). Third, the Enhanced Vibrating Particle System (EVPS) algorithm was applied to identify operating policies for reducing TDS. Its optimization performance was compared with that of Particle Swarm Optimization (PSO). The comparison considered the reported objective-function values and computational runtimes, as well as the resulting TDS concentrations and stability of released-water quality. Detailed information about the observation period, model inputs and outputs, optimization decision variables, and constraints was not available in the retrieved sections of the paper.

### Results and Discussion

The CE-QUAL-W2 model showed strong performance in simulating key reservoir conditions. The reported *NSE* values were 0.97 for reservoir storage and 0.98 for water-surface elevation, indicating close agreement between the model simulations and observations for these variables. The XGBoost surrogate also demonstrated good predictive performance for water-quality indicators, with an  $R^2$  of 0.9176, an *MAE* of 1.7012, and an *RMSE* of 2.5133. These results support the use of XGBoost as a surrogate component in the proposed framework, although the available information does not specify the units of the error metrics or the individual indicators included in the evaluation.

In the optimization comparison, EVPS achieved a reported objective-function value of 0.2340, whereas the corresponding value for PSO was 88.3333. The runtime of EVPS was 332.21 seconds, compared with 238.79 seconds for PSO. Thus, EVPS required more computation time in the reported comparison but achieved the more favorable objective-function result. The operating policies generated by EVPS were also reported to produce lower TDS concentrations and more stable water quality in the released water than the policies generated by PSO. Taken together, these findings suggest that the integrated framework can support the identification of effective reservoir operating policies, while also highlighting a trade-off between optimization performance and runtime.

### Conclusion

This study presents an integrated CE-QUAL-W2–XGBoost–EVPS framework for reservoir water-quality simulation and operational optimization, with an application to TDS management in Ekbatan Reservoir. The results indicate that CE-QUAL-W2 can represent key reservoir conditions with high reported NSE values, while XGBoost provides a surrogate with strong predictive performance for water-quality indicators. Among the two optimization algorithms evaluated, EVPS achieved a substantially lower reported objective-function value than PSO and produced operating policies associated with reduced TDS and more stable released-water quality, although its runtime was longer. The framework offers a potential decision-support approach for evaluating reservoir operating strategies while limiting reliance on repeated, computationally demanding numerical simulations. Its application to other reservoirs would require site-specific calibration and validation and a clear definition of the relevant operating variables and constraints.

**Keywords:** CE-QUAL-W2 Model, XGBoost Model, Reservoir Water Quality Optimization, Surrogate Modeling, Enhanced Vibrating Particle System (EVPS).

# توسعه یک چارچوب یکپارچه مبتنی بر مدل CE-QUAL-W2، یادگیری ماشین XGBoost و الگوریتم EVPS برای شبیه‌سازی و بهینه‌سازی کیفیت آب مخزن

سیده زهرا حسینی<sup>۱</sup>، پریسا سادات آشفته<sup>۲\*</sup>

۱- دانشجوی دکتری، گروه مهندسی عمران، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه قم، قم، ایران.

۲- دانشیار گروه مهندسی عمران، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه قم، قم، ایران.

\*رایانامه نویسنده مسئول: [PS.Ashofteh@qom.ac.ir](mailto:PS.Ashofteh@qom.ac.ir)

## چکیده

در این پژوهش، چارچوبی یکپارچه برای شبیه‌سازی و بهینه‌سازی کیفیت آب مخزن اکباتان با هدف کاهش غلظت جامدات محلول کل (TDS) توسعه داده شد. این چارچوب از تلفیق مدل CE-QUAL-W2، مدل یادگیری ماشین XGBoost به‌عنوان مدل جایگزین و دو الگوریتم فراابتکاری سامانه ذرات ارتعاشی بهبودیافته (EVPS) و بهینه‌سازی ازدحام ذرات (PSO) تشکیل شده است. در گام نخست، CE-QUAL-W2 با استفاده از داده‌های مشاهداتی واسنجی و صحت‌سنجی شد. نتایج نشان داد که این مدل قادر است رفتار هیدرولیکی و کیفی مخزن را با دقت مناسبی بازتولید کند؛ به‌گونه‌ای که مقادیر ضریب کارایی نش - ساتکلیف ( $NSE$ ) برای حجم مخزن و تراز سطح آب به‌ترتیب برابر با  $0.97$  و  $0.98$  به‌دست آمد. سپس خروجی‌های مدل به‌عنوان داده آموزشی برای توسعه مدل جانشین XGBoost استفاده شد. ارزیابی عملکرد این مدل با مقادیر  $R^2=0.9176$ ،  $MAE=1.7012$  و  $RMSE=2.5133$  نشان‌دهنده دقت مناسب آن در پیش‌بینی شاخص‌های کیفیت آب بود. در ادامه، مدل آموزش‌دیده در چارچوب بهینه‌سازی به‌کار گرفته شد و عملکرد دو الگوریتم EVPS و PSO مقایسه شد. نتایج نشان داد که EVPS با دستیابی به تابع هدف  $0.2340$ ، در مقایسه با مقدار  $88/3333$  حاصل از PSO، راهکارهای بهینه‌تری ارائه می‌دهد، هرچند زمان اجرای آن اندکی بیش‌تر بود ( $332/21$  در برابر  $238/79$  ثانیه). همچنین، سیاست‌های بهره‌برداری حاصل از EVPS موجب کاهش بیشتر غلظت TDS و ایجاد نوسانات کم‌تر در کیفیت آب خروجی شدند. نتایج نشان می‌دهند که چارچوب یکپارچه CE-QUAL-W2-XGBoost-EVPS ضمن کاهش قابل توجه هزینه محاسباتی، دقت پیش‌بینی و کیفیت تصمیم‌گیری را در بهینه‌سازی بهره‌برداری کیفی مخازن ارتقا داده و می‌تواند به‌عنوان ابزاری کارآمد برای مدیریت هوشمند منابع آب استفاده شود.

**واژه‌های کلیدی:** مدل CE-QUAL-W2، مدل XGBoost، بهینه‌سازی کیفی آب مخزن، مدل‌سازی جایگزین، سامانه ذرات ارتعاشی بهبودیافته (EVPS)

## مقدمه

مخازن آب از مهم‌ترین اجزای سامانه‌های مدیریت منابع آب محسوب می‌شوند و نقش اساسی در تأمین آب شرب، مصارف کشاورزی، فعالیت‌های صنعتی، تولید انرژی و حفظ تعادل اکولوژیکی ایفا می‌کنند. با این حال، در دهه‌های اخیر عواملی نظیر رشد جمعیت، توسعه فعالیت‌های کشاورزی و صنعتی، تغییرات اقلیمی و افزایش ورود آلاینده‌ها به منابع آب سطحی، چالش‌های مرتبط با کیفیت آب مخازن را به طور قابل توجهی تشدید کرده‌اند. کاهش کیفیت آب علاوه بر افزایش هزینه‌های تصفیه، می‌تواند پیامدهایی همچون تهدید سلامت عمومی، کاهش بهره‌وری بخش کشاورزی و آسیب به زیست‌بوم‌های آبی را در پی داشته باشد. از این رو، توسعه روش‌های کارآمد برای پایش، پیش‌بینی و بهینه‌سازی کیفیت آب مخازن به یکی از محورهای اصلی پژوهش‌های مدیریت منابع آب تبدیل شده است (Palmer et al., 2015; Nikoo et al., 2025).

در میان مدل‌های توسعه‌یافته برای شبیه‌سازی کیفیت آب، مدل CE-QUAL-W2 به‌عنوان یکی از شناخته‌شده‌ترین مدل‌های دوبعدی هیدرودینامیکی - کیفی، کاربرد گسترده‌ای در مطالعات منابع آب یافته است. این مدل قادر است فرایندهای فیزیکی، شیمیایی و زیستی حاکم بر محیط‌های آبی را به‌صورت هم‌زمان شبیه‌سازی کند و برای بررسی پدیده‌هایی نظیر لایه‌بندی حرارتی، انتقال آلاینده‌ها، تغییرات اکسیژن محلول، چرخه مواد مغذی و رشد جلبک‌ها از دقت مناسبی برخوردار است.

کارایی مدل CE-QUAL-W2 در مطالعات مختلف به اثبات رسیده است. شعاعی و همکاران (Shoaei et al., 2022) با استفاده از این مدل، انتقال فلزات سنگین در مخزن سد شهید رجایی را بررسی کردند و نشان دادند که دما مهم‌ترین عامل مؤثر بر انتقال این آلاینده‌ها است، هرچند نقش پارامترهایی نظیر محلول کل<sup>1</sup> (TDS)، اکسیژن محلول<sup>2</sup> (DO) و مواد معلق<sup>3</sup> (SS) نیز قابل توجه است. شی و همکاران (Shi et al., 2024) نیز فرایندهای بیوژئوشیمیایی<sup>4</sup> کربن آلی محلول<sup>5</sup> (DIC) را در مخزن هونگجیادو<sup>6</sup> تحت شرایط مختلف هیدرودینامیکی با استفاده از CE-QUAL-W2 شبیه‌سازی کردند. همچنین، کاظم‌نادی و همکاران (Kazemnadi et al., 2024) با تلفیق مدل CE-QUAL-W2 و یک چارچوب بهره‌برداری تطبیقی، مدیریت مخزن کرخه را با استفاده از پایگاه داده مرکز اروپایی پیش‌بینی هواشناسی متوسط<sup>7</sup> (ECMWF) توسعه دادند. نتایج پژوهش آنان نشان داد که به‌کارگیری الگوریتم بهینه‌سازی اتومات‌های سلولی موازی با جستجوی محلی<sup>8</sup> (PCA-LS) موجب کاهش حدود ۹۵ درصدی زمان محاسباتی نسبت به الگوریتم NSGA-II شده است. علاوه بر این، وانگ و همکاران (Wang et al., 2024) با بهره‌گیری از CE-QUAL-W2 و داده‌های میدانی، راهبرد برداشت انتخابی<sup>9</sup> آب را در یک مخزن تک‌آمیختی گرم<sup>10</sup> ارزیابی کردند و نشان دادند که بهبود دمای آب برداشت شده می‌تواند کیفیت آب و شرایط زیست‌محیطی رودخانه پایین‌دست را بهبود بخشد.

با وجود دقت بالای مدل‌های فیزیکی در بازنمایی فرایندهای کیفی، استفاده از آن‌ها در مسائل بهینه‌سازی با محدودیت‌هایی همراه است. مهم‌ترین چالش این مدل‌ها، هزینه محاسباتی زیاد و زمان اجرای طولانی است؛ موضوعی که در کاربردهای مبتنی بر اجرای مکرر مدل، مانند بهینه‌سازی سیاست‌های بهره‌برداری، اهمیت بیش‌تری پیدا می‌کند. از این رو، استفاده مستقیم از مدل‌های فیزیکی در چارچوب‌های بهینه‌سازی، به‌ویژه برای مسائل پیچیده و بزرگ‌مقیاس، همواره با محدودیت‌هایی مواجه بوده است.

<sup>1</sup> Total Dissolved Solids

<sup>2</sup> Dissolved Oxygen

<sup>3</sup> Suspended Solids

<sup>4</sup> Biogeochemical

<sup>5</sup> Dissolved Inorganic Carbon

<sup>6</sup> Hongjiadu

<sup>7</sup> European Centre for Medium-Range Weather Forecasts

<sup>8</sup> Parallel Cellular Automata with Local Search

<sup>9</sup> Selective Withdrawal

<sup>10</sup> Warm Monomictic Reservoir

در سال‌های اخیر، روش‌های داده‌محور و به‌ویژه الگوریتم‌های یادگیری ماشین<sup>۱</sup> (ML)، به‌عنوان مکمل یا جایگزینی برای مدل‌های فیزیکی مورد توجه قرار گرفته‌اند. این روش‌ها با یادگیری روابط غیرخطی میان متغیرهای سامانه، امکان پیش‌بینی سریع و دقیق رفتار سامانه‌های آبی را فراهم می‌کنند (Nohani et al., 2026). قبادی و کانگ<sup>۲</sup> (Ghobadi and Kang, 2023) در یک مطالعه مروری، نقش روزافزون یادگیری ماشین در مدیریت یکپارچه منابع آب را مورد بررسی قرار داده و بر قابلیت این روش‌ها در تحلیل داده‌های حجیم و پیش‌بینی شرایط آینده تأکید کردند. بولیک و همکاران (Bolick et al., 2023) نیز عملکرد چندین الگوریتم یادگیری ماشین را برای پیش‌بینی اکسیژن محلول در سامانه پایش جریان شهری هانیکات<sup>۳</sup> در کلمسون<sup>۴</sup>، ایالات متحده، مقایسه کردند و نشان دادند که الگوریتم جنگل تصادفی<sup>۵</sup> (RF) نسبت به سایر روش‌ها دقت بیشتری دارد. همچنین، آبا و همکاران (Abba et al., 2025) با ترکیب مدل ماشین یادگیری جدی<sup>۶</sup> (ELM) و الگوریتم‌های فراابتکاری، دقت پیش‌بینی پارامترهای کیفیت آب را نسبت به روش‌های کلاسیک بهبود دادند و مزیت استفاده از مدل‌های هیبریدی را نشان دادند.

در کنار مدل‌های داده‌محور، الگوریتم‌های فراابتکاری نیز به دلیل توانایی مناسب در جستجوی فضای پاسخ‌های پیچیده، جایگاه ویژه‌ای در مسائل بهینه‌سازی منابع آب پیدا کرده‌اند (Magnabosco et al., 2026; Mortezaazadeh et al., 2026). این الگوریتم‌ها با الهام از پدیده‌های طبیعی و رفتارهای جمعی، قابلیت حل مسائل غیرخطی و دارای قیود متعدد را دارند (Pham et al., 2024; Ashofteh and Shakarami, 2026). در این زمینه، المبایدین و همکاران (Almubaidin et al., 2022) کارایی الگوریتم‌های فراابتکاری را در بهینه‌سازی بهره‌برداری از مخازن و افزایش کارایی تخصیص منابع آب گزارش کردند. سیادت‌پور و همکاران (Siadatpour et al., 2025) نیز با مقایسه ده الگوریتم فراابتکاری در نرم‌افزار EPANET 2.2 نشان دادند که الگوریتم‌های RIME<sup>۷</sup> و FATA<sup>۸</sup> عملکرد مطلوب‌تری از نظر سرعت همگرایی و پایداری دارند. همچنین، حسنی و همکاران (Hassani et al., 2025) با ارائه یک چارچوب مبتنی بر مدل جانشین و الگوریتم‌های فراابتکاری، نشان دادند که روش بهینه‌سازی ازدحام ذرات<sup>۹</sup> (PSO) ادغام‌شده با مدل جایگزین یادگیری نظارت‌شده<sup>۱۰</sup> (PSO-SL<sup>۱۱</sup>) تعادل مناسبی میان دقت، پایداری و قابلیت اطمینان برقرار می‌کند، درحالی‌که سامانه ذرات ارتعاشی بهبودیافته<sup>۱۲</sup> (EVPS) ادغام‌شده با SL (EVPS-SL<sup>۱۳</sup>) از سرعت همگرایی بیش‌تری برخوردار است.

اگرچه در سال‌های اخیر پیشرفت‌های قابل توجهی در توسعه مدل‌های فیزیکی، روش‌های یادگیری ماشین و الگوریتم‌های فراابتکاری حاصل شده است، اما اغلب پژوهش‌های موجود این رویکردها را به‌صورت مستقل به‌کار گرفته‌اند. در نتیجه، ظرفیت نهفته تلفیق این ابزارها برای دستیابی هم‌زمان به دقت بالاتر، کاهش هزینه محاسباتی و بهبود فرایند تصمیم‌گیری کم‌تر مورد توجه قرار گرفته است. توسعه چارچوب‌های یک‌پارچه مبتنی بر مدل‌های فیزیکی، مدل‌های جانشین و الگوریتم‌های بهینه‌سازی می‌تواند راه‌کاری مؤثر برای رفع این محدودیت‌ها و افزایش کارایی مدیریت کیفیت آب مخازن فراهم آورد.

بر همین اساس، پژوهش حاضر با هدف توسعه یک چارچوب یک‌پارچه برای مدیریت و بهینه‌سازی کیفیت آب مخزن اکباتان انجام شده است. در این چارچوب، ابتدا رفتار کیفی مخزن با استفاده از مدل CE-QUAL-W2 شبیه‌سازی می‌شود. سپس خروجی‌های مدل به‌عنوان داده آموزشی برای توسعه یک مدل جانشین مبتنی بر XGBoost مورد استفاده قرار می‌گیرند تا امکان پیش‌بینی سریع

<sup>1</sup> Machine Learning

<sup>2</sup> Kang

<sup>3</sup> Hunnicutt Creek

<sup>4</sup> Clemson

<sup>5</sup> Random Forest

<sup>6</sup> Extreme Learning Machine

<sup>7</sup> Rime Optimization Algorithm

<sup>8</sup> Fata Morgana Algorithm

<sup>9</sup> Particle Swarm Optimization

<sup>10</sup> Supervised Learning

<sup>11</sup> Particle Swarm Optimization Integrated with Supervised Learning (SL) Surrogate Model

<sup>12</sup> Enhanced Vibrating Particle System

<sup>13</sup> Enhanced Vibrating Particle System Integrated with Supervised Learning (SL)

پارامترهای کیفی فراهم شود. در ادامه، الگوریتم EVPS به منظور بهینه‌سازی غلظت TDS و تعیین سیاست‌های مناسب بهره‌برداری به کار گرفته می‌شود. در نهایت، عملکرد این الگوریتم از نظر کیفیت پاسخ، دقت پیش‌بینی و کارایی محاسباتی با الگوریتم PSO مقایسه و ارزیابی می‌شود.

## مواد و روش‌ها

در این بخش، ابزارهای مورد استفاده، ویژگی‌های منطقه مطالعاتی و چارچوب به کاررفته برای شبیه‌سازی و تحلیل کیفیت آب مخزن تشریح می‌شوند.

### مدل CE-QUAL-W2

در این پژوهش، به منظور شبیه‌سازی رفتار کیفی مخزن، از نسخه ۷/۳ مدل CE-QUAL-W2 که توسط مرکز مهندسی ارتش ایالات متحده آمریکا توسعه یافته است، استفاده شد. این مدل، یک مدل دوبعدی هیدرودینامیکی - کیفی با میانگین‌گیری در راستای عرض مخزن است که به زبان FORTRAN توسعه یافته و قابلیت شبیه‌سازی هم‌زمان فرایندهای فیزیکی، شیمیایی و زیستی مؤثر بر کیفیت آب را دارد (Cole and Wells, 2015).

به دلیل ساختار عددی و قابلیت‌های گسترده، CE-QUAL-W2 یکی از پرکاربردترین مدل‌های شبیه‌سازی کیفیت آب در مطالعات مربوط به مخازن، دریاچه‌ها، سدها و رودخانه‌ها محسوب می‌شود. این مدل امکان تحلیل فرایندهایی نظیر تغییرات دما، لایه‌بندی حرارتی، چگالی جریان، انتقال و انتشار آلاینده‌ها، جابه‌جایی مواد محلول و همچنین واکنش‌های بیوشیمیایی مرتبط با پارامترهایی مانند اکسیژن محلول، ترکیبات نیتروژن و فسفر را فراهم می‌کند. افزون بر این، اثر متغیرهای محیطی از جمله شرایط اقلیمی، تابش خورشیدی، ورود مواد مغذی و بار آلاینده‌ها نیز در ساختار مدل لحاظ می‌شود.

یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های CE-QUAL-W2، قابلیت تحلیل تغییرات زمانی و مکانی پارامترهای کیفی در طول مخزن و در امتداد عمق آن است. دستیابی به نتایج قابل اعتماد در این مدل مستلزم تهیه مجموعه‌ای از داده‌های ورودی شامل مشخصات هندسی مخزن، اطلاعات هواشناسی، شرایط اولیه شبیه‌سازی، داده‌های هیدرولوژیکی مربوط به جریان‌های ورودی و خروجی، و سایر پارامترهای مؤثر بر فرایندهای هیدرودینامیکی و کیفی است. ترکیب این داده‌ها با روابط حاکم بر انتقال جرم و انرژی، امکان بازسازی رفتار کیفیت آب تحت سناریوهای مختلف بهره‌برداری را فراهم می‌سازد.

در پژوهش حاضر، خروجی‌های مدل CE-QUAL-W2 علاوه بر تحلیل وضعیت کیفی مخزن، به عنوان مبنای تولید داده‌های آموزشی برای توسعه مدل جانشین مبتنی بر یادگیری ماشین نیز مورد استفاده قرار گرفتند. از این رو، این مدل نقش هسته اصلی چارچوب پیشنهادی را ایفا کرده و مبنای ارزیابی سناریوهای مختلف مدیریت کیفیت آب قرار گرفته است.

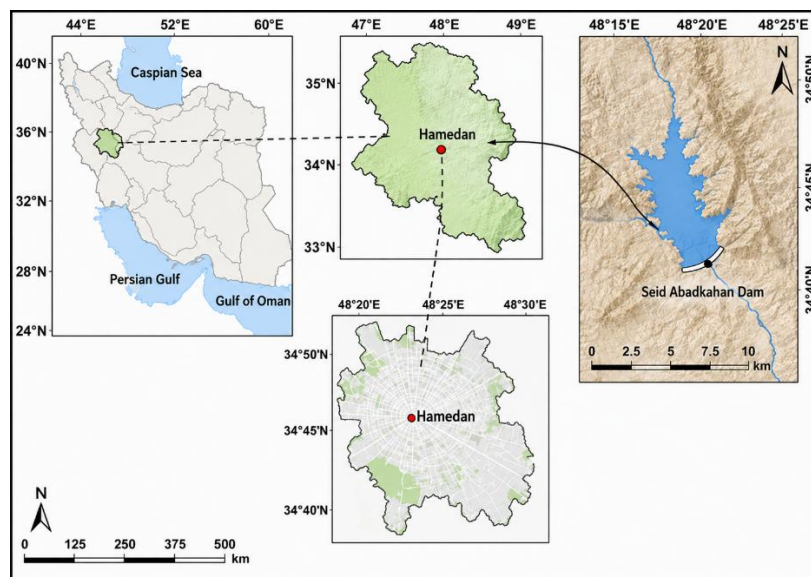
### منطقه مورد مطالعه

مخزن سد اکباتان در استان همدان و بر روی رودخانه آبشینه واقع شده و یکی از مهم‌ترین منابع تأمین آب شرب شهر همدان به‌شمار می‌رود. این سد علاوه بر تأمین آب شرب، در تأمین نیازهای بخش کشاورزی، تنظیم جریان رودخانه و کنترل سیلاب‌های فصلی نیز نقش قابل توجهی ایفا می‌کند؛ از این رو، حفظ و مدیریت کیفیت آب آن از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است.

سد اکباتان در فاصله حدود ۱۳ کیلومتری جنوب شرقی شهر همدان قرار دارد و حوضه آبریز آن مساحتی در حدود ۲۱۳ کیلومتر مربع را در بر می‌گیرد. این سد دارای ارتفاع ۷۹ متر و طول تاج ۶۷۳ متر بوده و ظرفیت ذخیره آن حدود ۳۹ میلیون مترمکعب است. همچنین، تراز نرمال مخزن ۱۹۷۰ متر، تراز آبگیر ۱۹۳۵ متر و تراز بستر رودخانه ۱۸۹۷ متر از سطح متوسط آب‌های آزاد است. این ویژگی‌های هندسی و بهره‌برداری، سد اکباتان را به یکی از مهم‌ترین زیرساخت‌های مدیریت منابع آب در استان همدان تبدیل کرده است.

در این پژوهش، TDS به عنوان شاخص اصلی ارزیابی کیفیت آب انتخاب شد، زیرا این پارامتر ارتباط مستقیمی با میزان شوری آب داشته و تغییرات آن می تواند بر کیفیت آب شرب، بهره‌وری کشاورزی و وضعیت زیست‌محیطی مخزن اثرگذار باشد. از این رو، پایش و پیش‌بینی تغییرات غلظت TDS می‌تواند اطلاعات ارزشمندی برای برنامه‌ریزی و تصمیم‌گیری در زمینه بهره‌برداری بهینه از مخزن فراهم کند.

به منظور شبیه‌سازی رفتار هیدرودینامیکی و کیفی مخزن، از مدل CE-QUAL-W2 استفاده شد. در این مدل، مخزن در امتداد طول به ۵۴ بخش و در راستای عمق به ۲۸ لایه تقسیم‌بندی شد و پس از انجام فرایند واسنجی، برای شبیه‌سازی شرایط مختلف بهره‌برداری مورد استفاده قرار گرفت. موقعیت جغرافیایی حوضه آبریز سد اکباتان در شکل ۱ ارائه شده است.



شکل ۱. موقعیت حوضه آبریز سد اکباتان همدان

Fig 1. Location of the Ekbatan Dam catchment area in Hamadan

### مدل یادگیری ماشین XGBoost

به منظور کاهش هزینه محاسباتی ناشی از اجرای مکرر مدل CE-QUAL-W2 در فرایند بهینه‌سازی، در این پژوهش از یک مدل جانشین مبتنی بر یادگیری ماشین استفاده شد. مدل‌های جانشین با یادگیری رابطه میان متغیرهای ورودی و خروجی، قادرند رفتار مدل‌های فیزیکی را با دقت مناسب و در زمان بسیار کوتاه بازتولید کنند. به همین دلیل، این مدل‌ها در سال‌های اخیر به یکی از ابزارهای مؤثر در مسائل بهینه‌سازی سامانه‌های منابع آب تبدیل شده‌اند.

یادگیری ماشین شاخه‌ای از هوش مصنوعی است که با استفاده از داده‌های آموزشی، روابط میان متغیرها را بدون نیاز به تعریف صریح معادلات فیزیکی استخراج می‌کند. این ویژگی موجب شده است که الگوریتم‌های یادگیری ماشین در مدل‌سازی سامانه‌های پیچیده، غیرخطی و چندمتغیره، از جمله فرایندهای حاکم بر کیفیت آب، عملکرد مطلوبی داشته باشند. در این روش، داده‌های حاصل از اندازه‌گیری‌های میدانی یا خروجی مدل‌های شبیه‌سازی به عنوان مجموعه آموزشی مورد استفاده قرار گرفته و الگوریتم، نگاشت میان متغیرهای ورودی و خروجی را فرامی‌گیرد. در نتیجه، پس از اتمام فرایند آموزش، امکان پیش‌بینی سریع پاسخ سامانه برای شرایط مختلف فراهم می‌شود.

در این مطالعه، الگوریتم تقویت گرادیان شدید<sup>۱</sup> (XGBoost) به عنوان مدل یادگیری ماشین انتخاب شد. این الگوریتم یکی از روش‌های یادگیری گروهی<sup>۲</sup> مبتنی بر درخت تصمیم است که با استفاده از فرایند تقویت گرادیانی، مجموعه‌ای از درخت‌های تصمیم را به صورت ترتیبی ایجاد می‌کند (Chen & Guestrin, 2016). در هر مرحله، درخت جدید با هدف کاهش خطای باقی‌مانده مدل‌های قبلی ساخته می‌شود و در نهایت ترکیب درخت‌ها، مدل نهایی را تشکیل می‌دهد. استفاده هم‌زمان از تابع خطا و جمله منظم‌سازی<sup>۳</sup> در تابع هدف<sup>۴</sup> (OF)، علاوه بر افزایش دقت پیش‌بینی، از پیچیدگی بیش از حد مدل و وقوع بیش‌برازش جلوگیری می‌کند.

یکی از ویژگی‌های مهم XGBoost، بهره‌گیری از مشتقات مرتبه اول و دوم تابع هدف در فرایند بهینه‌سازی است که موجب افزایش سرعت همگرایی و بهبود عملکرد مدل نسبت به بسیاری از روش‌های متداول یادگیری ماشین می‌شود. همچنین این الگوریتم با قابلیت مدیریت داده‌های ناقص، مقاومت مناسب در برابر نویز، امکان اجرای موازی محاسبات و ارزیابی اهمیت متغیرهای ورودی، گزینه‌ای مناسب برای مدل‌سازی سامانه‌های پیچیده مهندسی و زیست‌محیطی به‌شمار می‌رود. مدل XGBoost بر اساس یک تابع هدف بهینه می‌شود که مطابق با رابطه (۱) شامل دو بخش خطای پیش‌بینی و جمله منظم‌سازی است:

$$Obj(\theta) = \sum_{i=1} l(y_i, \hat{y}_i) + \sum_{k=1} \Omega(f_k) \quad (1)$$

که در آن  $l$  = تابع زیان برای اندازه‌گیری تفاوت بین مقدار واقعی  $y_i$  و پیش‌بینی  $\hat{y}_i$  است. همچنین  $\Omega(f_k)$  جمله منظم‌سازی برای جلوگیری از بیش‌برازش است که به صورت رابطه (۲) تعریف می‌شود:

$$\Omega(f) = \gamma T + \frac{1}{2} \lambda \|\omega\|^2 \quad (2)$$

که در آن،  $T$  = تعداد برگ‌های درخت،  $\omega$  = وزن برگ‌ها، و  $\gamma$  و  $\lambda$  = ضرایب کنترل‌کننده پیچیدگی مدل هستند. عملکرد مدل XGBoost به شدت وابسته به تنظیم هایپرپارامترهای آن است. در این پژوهش، پارامترهای کلیدی شامل موارد زیر تنظیم شدند:

- `n_estimators`: تعداد درخت‌های تصمیم‌گیری که برای بهبود دقت مدل تنظیم شد.
- `learning_rate`: نرخ یادگیری برای کنترل گام‌های بهینه‌سازی.
- `max_depth`: بیش‌ترین عمق درخت‌ها برای جلوگیری از بیش‌برازش.
- `subsample`: نسبت نمونه‌های استفاده‌شده برای آموزش هر درخت.

فرایند تنظیم این پارامترها با استفاده از روش Grid Search و ارزیابی مدل در یک فرایند k-fold Cross-Validation (با  $k=5$ ) انجام شد تا بهترین ترکیب هایپرپارامترها با کم‌ترین میزان خطا انتخاب شود.

در چارچوب پیشنهادی این پژوهش، خروجی‌های حاصل از مدل CE-QUAL-W2 به عنوان مجموعه داده آموزشی برای توسعه مدل XGBoost مورد استفاده قرار گرفتند. پس از آموزش، مدل توسعه‌یافته توانست رابطه میان متغیرهای هیدرولیکی و پارامترهای کیفی مخزن را با دقت مناسب بازسازی کند. سپس این مدل جانشین به جای اجرای مکرر مدل CE-QUAL-W2 در فرایند بهینه‌سازی به کار گرفته شد و بدین ترتیب، ضمن حفظ دقت پیش‌بینی، زمان محاسباتی موردنیاز برای اجرای الگوریتم‌های فراابتکاری به طور قابل توجهی کاهش یافت.

## الگوریتم PSO و توسعه چارچوب PSO-XGBoost

<sup>1</sup> Extreme Gradient Boosting

<sup>2</sup> Ensemble Learning

<sup>3</sup> Regularization

<sup>4</sup> Objective Function

الگوریتم PSO که توسط کندی و ابرهارت (Kennedy and Eberhart, 1995) معرفی شد، یکی از پرکاربردترین الگوریتم‌های فراابتکاری مبتنی بر جمعیت برای حل مسائل بهینه‌سازی غیرخطی است. این الگوریتم با الهام از رفتار جمعی پرندگان و ماهیان در جستجوی منابع غذایی توسعه یافته و به دلیل ساختار ساده، همگرایی مناسب و نیاز به تعداد محدودی پارامتر تنظیمی، در مسائل مختلف مهندسی، از جمله مدیریت منابع آب، به طور گسترده مورد استفاده قرار گرفته است.

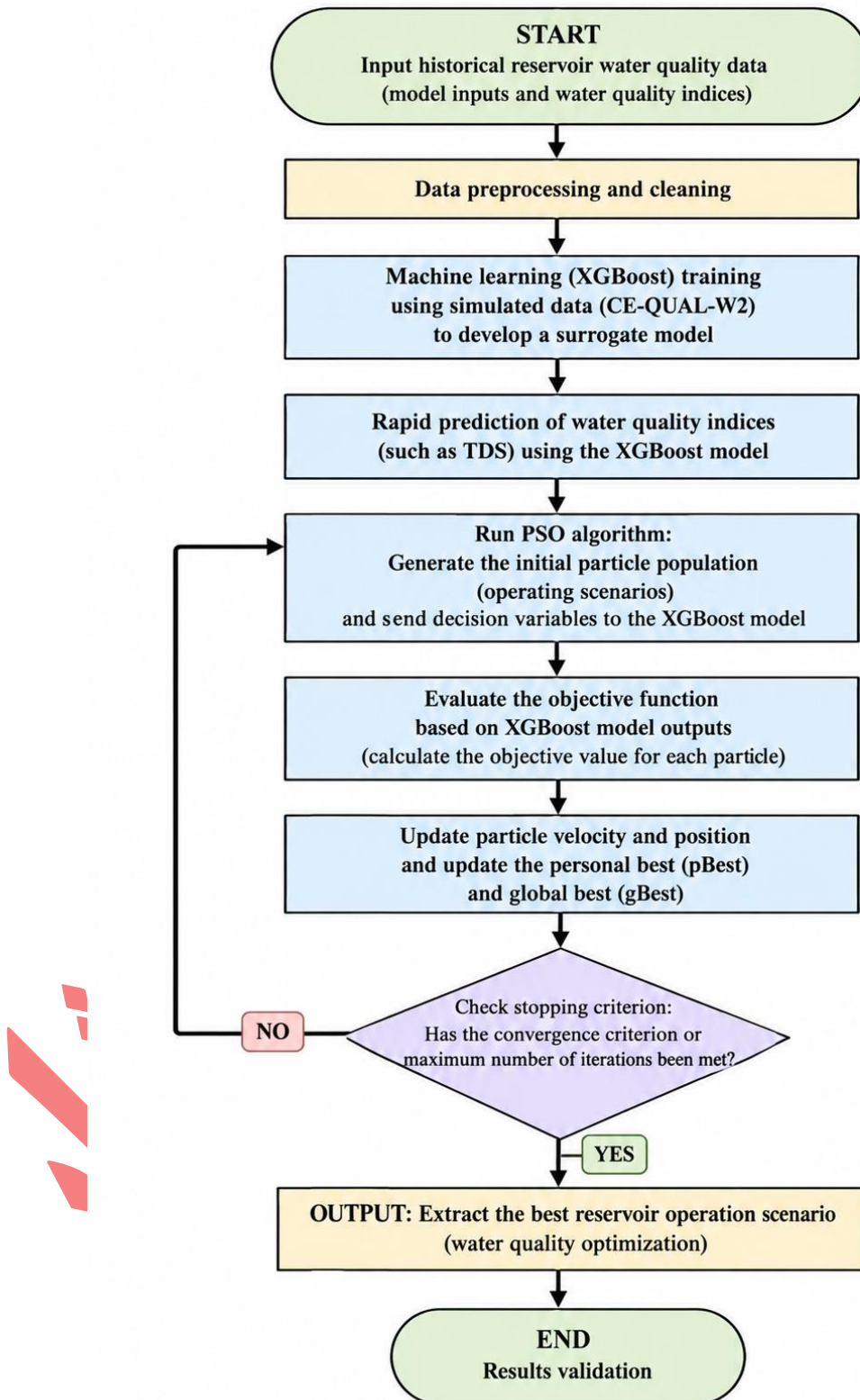
در PSO، هر ذره نمایانگر یک راه‌حل نهفته در فضای جستجو است. موقعیت هر ذره بیانگر مقادیر متغیرهای تصمیم بوده و حرکت آن تحت تأثیر دو مؤلفه اصلی انجام می‌شود: تجربه فردی که با بهترین موقعیت قبلی ذره (pBest) نمایش داده می‌شود و تجربه جمعی که از بهترین جواب به‌دست‌آمده در کل جمعیت (gBest) حاصل می‌شود. در هر تکرار، سرعت و موقعیت ذرات با استفاده از روابط استاندارد الگوریتم به‌روزرسانی شده و فرایند جستجو تا برآورده شدن معیار توقف ادامه می‌یابد. در پایان، بهترین موقعیت یافت‌شده به‌عنوان جواب بهینه مسئله انتخاب می‌شود.

در مسائل مرتبط با کیفیت آب، ارزیابی تابع هدف به طور معمول مستلزم اجرای مکرر مدل‌های عددی نظیر CE-QUAL-W2 است. با توجه به هزینه محاسباتی زیاد این مدل‌ها، استفاده مستقیم از آن‌ها در هر تکرار الگوریتم‌های فراابتکاری موجب افزایش چشمگیر زمان اجرای فرایند بهینه‌سازی می‌شود. به‌منظور رفع این محدودیت، در پژوهش حاضر از یک مدل جانشین مبتنی بر XGBoost در کنار الگوریتم PSO استفاده شد.

بدین منظور، ابتدا مدل CE-QUAL-W2 برای مجموعه‌ای از سناریوهای بهره‌برداری اجرا شد و داده‌های متناظر شامل متغیرهای ورودی و پارامترهای کیفی خروجی استخراج شد. سپس این داده‌ها به‌عنوان مجموعه آموزشی در اختیار الگوریتم XGBoost قرار گرفت تا ارتباط میان متغیرهای تصمیم، شرایط هیدرولوژیکی و شاخص‌های کیفیت آب را فراگیرد. پس از تکمیل فرایند آموزش، مدل توسعه‌یافته قادر بود پاسخ سامانه را با دقت مناسب و در زمان بسیار کوتاه پیش‌بینی کند.

در چارچوب پیشنهادی PSO-XGBoost، هر ذره بیانگر یک سناریوی بهره‌برداری از مخزن است. در هر تکرار، پس از به‌روزرسانی موقعیت ذرات توسط الگوریتم PSO، مقادیر متغیرهای تصمیم به مدل آموزش‌دیده XGBoost ارسال می‌شود و پارامترهای کیفی موردنظر، از جمله غلظت TDS، پیش‌بینی می‌شوند. سپس مقدار تابع هدف بر اساس خروجی مدل جانشین محاسبه شده و برای به‌روزرسانی مقادیر pBest و gBest مورد استفاده قرار می‌گیرد. این فرایند تا دستیابی به معیار توقف ادامه یافته و در نهایت بهترین سناریوی بهره‌برداری استخراج می‌شود. روند کلی اجرای چارچوب پیشنهادی PSO-XGBoost در شکل ۲ ارائه شده است.

در مقایسه با استفاده مستقیم از مدل CE-QUAL-W2، چارچوب پیشنهادی با جایگزین کردن مدل جانشین XGBoost در حلقه بهینه‌سازی، تعداد اجرای مدل عددی را به کم‌ترین حد رسانده و در نتیجه زمان محاسباتی را به طور قابل توجهی کاهش می‌دهد، درحالی‌که دقت پیش‌بینی و کیفیت پاسخ‌های بهینه حفظ می‌شود. از این‌رو، ترکیب قابلیت جستجوی سراسری PSO با توانایی یادگیری غیرخطی XGBoost، چارچوبی کارآمد برای بهینه‌سازی کیفیت آب مخازن فراهم می‌آورد.



شکل ۲. روندنمای چارچوب پیشنهادی PSO-XGBoost برای بهینه‌سازی کیفیت آب مخزن

Fig 2. Flowchart of the proposed PSO-XGBoost framework for optimizing reservoir water quality

## EVPS و توسعه الگوریتم EVPS-XGBoost

الگوریتم EVPS نسخه توسعه یافته الگوریتم سامانه ذرات ارتعاشی<sup>۱</sup> (VPS) است که با هدف افزایش سرعت همگرایی، بهبود توان جستجوی سراسری و کاهش احتمال گرفتار شدن در بهینه های محلی ارائه شده است. الگوریتم VPS نخستین بار توسط کاوه و همکاران (Kaveh et al., 2017; 2019) معرفی شد و سازوکار آن از رفتار ارتعاش آزاد یک سامانه با درجه آزادی واحد الهام گرفته شده است. در این الگوریتم، جمعیتی از پاسخ های اولیه به صورت تصادفی در فضای جستجو تولید شده و موقعیت ذرات در طول فرایند بهینه سازی بر اساس روابط حاکم بر ارتعاش سامانه به روزرسانی می شود.

در نسخه استاندارد VPS، موقعیت هر ذره با استفاده از سه مرجع شامل بهترین موقعیت تاریخی کل جمعیت<sup>۲</sup> (HB)، یک ذره مناسب<sup>۳</sup> (GP) و یک ذره نامناسب<sup>۴</sup> (BP) تعیین می شود. همچنین، یک تابع کاهش به منظور کنترل دامنه جستجو در طول تکرارها تعریف شده و موقعیت ذرات مطابق روابط (۳) تا (۶) به روزرسانی می شود. به منظور رعایت قیود مسئله نیز از سازوکار حافظه هماهنگ شامل پارامترهای HMCR (نرخ در نظر گرفتن حافظه هماهنگ<sup>۵</sup>) و PAR (نرخ تنظیم تمام<sup>۶</sup>) استفاده می شود.

$$x_{ij} = x_{minj} + rand \times (x_{maxj} - x_{minj}) \quad (3)$$

$$D = \left( \frac{iter}{MaxIt} \right)^{-\alpha} \quad (4)$$

$$x_i^j = \omega_1 [D \times A \times rand1 + HB^j] + \omega_2 [D \times A \times rand2 + GP^j] + \omega_3 [D \times A \times rand3 + BP^j] \quad (5)$$

$$A = [\omega_1 \times (HB^j - x_i^j)] + [\omega_2 \times (GP^j - x_i^j)] + [\omega_3 \times (BP^j - x_i^j)]$$

$$\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 = 1$$

$$x_i^j = \begin{cases} [D \times A \times rand1 + OHB^j] & (a) \\ [D \times A \times rand2 + GP^j] & (b) \\ [D \times A \times rand3 + BP^j] & (c) \end{cases} \quad (6)$$

$$A = \begin{cases} (\pm 1)(OHB^j - x_i^j) & (a) \\ (\pm 1)(GP^j - x_i^j) & (b) \\ (\pm 1)(BP^j - x_i^j) & (c) \end{cases}$$

$$\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 = 1$$

که در آن،  $x_{ij}$  = متغیر  $j$ ام ذره  $i$ ام است،  $x_{minj}$  و  $x_{maxj}$  = نقاط شروع و پایانی فضای جستجوی مجاز برای متغیر  $j$ ، و  $rand$  = یک عدد تصادفی در بازه  $[0, 1]$ ،  $iter$  = تعداد تکرار فعلی،  $MaxIt$  = تعداد کل تکرارها،  $\alpha$  = یک مقدار ثابت، هستند. تولید عوامل بعدی در الگوریتم VPS با استفاده از رابطه (۵) به روزرسانی می شود: که در آن،  $\omega_{1,2}$  و  $\omega_3$  = به ترتیب برای HB، GP و BP اهمیت نسبی هستند و  $rand1$ ،  $rand2$  و  $rand3$  = اعداد تصادفی که به طور یکنواخت در محدوده  $[0, 1]$  توزیع شده اند. یک پارامتر

<sup>1</sup> Vibrating Particles System

<sup>2</sup> Historically Best Position of the Entire Population

<sup>3</sup> Good Particle

<sup>4</sup> Bad Particle

<sup>5</sup> Harmony Memory Considering Rate

<sup>6</sup> Pitch Adjusting Rate

مانند  $p$  (در بازه ۰ تا ۱) برای شتاببخشی به همگرایی الگوریتم VPS تعریف می‌شود. این پارامتر با  $rand$  مقایسه می‌شود و اگر  $p < rand$  باشد، آنگاه  $\omega_3 = 0$  و  $\omega_2 = 1 - \omega_1$  برابر با ۰ و ۱ قرار داده می‌شود.

در الگوریتم EVPS، چندین اصلاح نسبت به نسخه پایه VPS اعمال شده است. در این مطالعه از الگوریتم EVPS که پیش‌تر توسط نویسندگان توسعه یافته است (Hassani et al., 2025)، استفاده شده است. مهم‌ترین تغییر، جایگزینی بهترین پاسخ منفرد (HB) با یک حافظه از بهترین پاسخ‌های تاریخی است که مجموعه‌ای از بهترین راه‌حل‌های به‌دست‌آمده را در طول فرایند جستجو ذخیره می‌کند. در هر تکرار، در صورتی که پاسخ جدید از ضعیف‌ترین عضو حافظه بهتر باشد، جایگزینی انجام می‌شود. سپس یکی از اعضای این حافظه به‌صورت تصادفی انتخاب شده و به‌عنوان یکی از بهترین موقعیت‌های تاریخی در کل جمعیت<sup>۱</sup> (OHB) در فرایند به‌روزرسانی موقعیت ذرات مورد استفاده قرار می‌گیرد. این راهبرد موجب افزایش تنوع جمعیت، تقویت قابلیت اکتشاف فضای جستجو و کاهش احتمال همگرایی زودهنگام می‌شود.

علاوه بر این، رابطه به‌روزرسانی موقعیت ذرات در EVPS نسبت به VPS اصلاح شده است؛ به‌گونه‌ای که در هر مرحله یکی از روابط (a-۶)، (b-۶) و (c-۶) با توجه به ضرایب وزنی اعمال می‌شود. این اصلاح، ضمن حفظ تعادل میان اکتشاف و بهره‌برداری، موجب بهبود عملکرد الگوریتم در مسائل بهینه‌سازی پیچیده می‌شود. شبه‌کد الگوریتم EVPS در شکل ۳ ارائه شده است.

---

```

1: Input: maximum number of iterations (MaxIt), population size (Npop),
   collision memory size (MemSize)
2: Parameters:  $\alpha$ , HMCR, PAR
3: Initialization: generate initial population using Eq. (1)
4: iter = 1
5: while iter ≤ MaxIt do
6:   Evaluate objective function and update memory
7:   Compute the damping factor using Eq. (3)
8:   for i = 1 to Npop do
9:     Select OHB, GP, and BP
10:    Generate a random number  $r \sim U(0, 1)$ 
11:    if  $r < p$  then
12:      | Set  $\omega_3 = 0$  and  $\omega_2 = 1 - \omega_1$ 
13:    end if
14:    Update the position of the i-th particle using one of Eqs. (6-a), (6-b), or (6-c)
15:    Update control coefficients  $\omega_1$ ,  $\omega_2$ ,  $\omega_3$ 
16:    Apply the harmony search mechanism to handle boundary constraints
      (use HMCR and PAR)
17:    end for
18:    iter = iter + 1
19: end while
20: Output: the best solution found

```

---

شکل ۳. شبه‌کد الگوریتم EVPS (برگرفته از [Water reservoirs quality management using meta-heuristic Algorithms: Analysis and optimization of water quality considering uncertainties])

**Fig 3. Pseudocode of the EVPS algorithm (adapted from [Water reservoirs quality management using meta-heuristic Algorithms: Analysis and optimization of water quality considering uncertainties])**

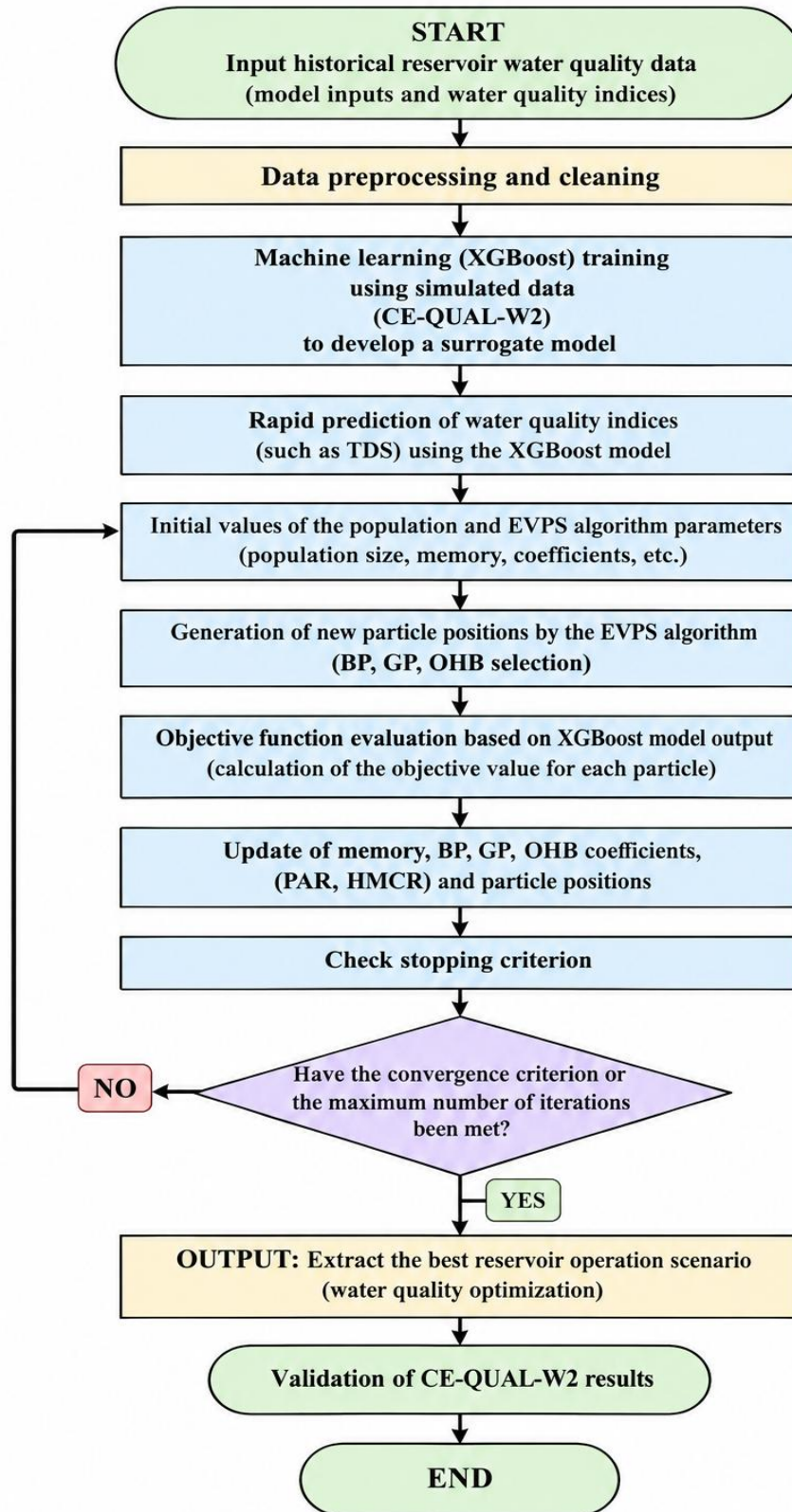
در این پژوهش، به‌منظور کاهش هزینه محاسباتی فرایند بهینه‌سازی، الگوریتم EVPS با مدل جانشین XGBoost تلفیق شد. بدین منظور، ابتدا مدل CE-QUAL-W2 برای مجموعه‌ای از سناریوهای بهره‌برداری اجرا و داده‌های حاصل برای آموزش مدل

<sup>۱</sup> One of the Best Historically Positions in Entire Population

XGBoost استفاده شد. پس از تکمیل فرایند آموزش، مدل توسعه یافته قادر بود پاسخ کیفی مخزن را بدون نیاز به اجرای مجدد مدل هیدرودینامیکی پیش‌بینی کند.

در چارچوب پیشنهادی EVPS-XGBoost، هر ذره بیانگر یک سناریوی بهره‌برداری از مخزن است. در هر تکرار، الگوریتم EVPS موقعیت جدید ذرات را تولید کرده و متغیرهای تصمیم به مدل آموزش دیده XGBoost ارسال می‌شوند. سپس مقادیر پیش‌بینی شده شاخص کیفیت آب، از جمله غلظت TDS، برای محاسبه تابع هدف مورد استفاده قرار می‌گیرد و نتایج حاصل مبنای به‌روزرسانی جمعیت قرار می‌گیرد. این فرایند تا دستیابی به معیار توقف ادامه یافته و در نهایت بهترین سیاست بهره‌برداری تعیین می‌شود. روند اجرای چارچوب پیشنهادی EVPS-XGBoost به صورت شماتیک در شکل ۴ نشان داده شده است.

نسخه پیش از انتشار



شکل ۴. روندنمای چارچوب پیشنهادی EVPS-XGBoost برای بهینه‌سازی کیفیت آب مخزن

Fig 4. Flowchart of the proposed EVPS-XGBoost framework for reservoir water quality optimization

در مقایسه با اجرای مستقیم مدل CE-QUAL-W2 در حلقه بهینه‌سازی، چارچوب EVPS-XGBoost ضمن حفظ دقت پیش‌بینی، زمان محاسباتی را به میزان قابل توجهی کاهش داده و امکان ارزیابی تعداد بیشتری از سناریوهای بهره‌برداری را فراهم می‌کند. از این‌رو، این چارچوب می‌تواند به‌عنوان ابزاری کارآمد برای مدیریت و بهینه‌سازی کیفیت آب مخازن مورد استفاده قرار گیرد.

## مسئله تحقیق

در این پژوهش، مسئله بهینه‌سازی به‌صورت تعیین راهبرد بهره‌برداری بهینه از مخزن سد اکباتان با هدف ارتقای کیفیت آب خروجی تعریف شده است. شاخص کیفیت آب مورد بررسی، غلظت TDS است و هدف، یافتن ترکیبی از متغیرهای تصمیم است که ضمن رعایت تمامی محدودیت‌های بهره‌برداری مخزن، مقدار جرم TDS خروجی را کمینه کند.

برای حل این مسئله، یک چارچوب یکپارچه متشکل از مدل شبیه‌سازی CE-QUAL-W2، مدل جانشین مبتنی بر XGBoost و الگوریتم فراابتکاری EVPS توسعه داده شد. در این چارچوب، مدل CE-QUAL-W2 به‌منظور تولید داده‌های آموزشی در سناریوهای مختلف بهره‌برداری اجرا شد و خروجی‌های آن برای آموزش مدل XGBoost مورد استفاده قرار گرفت. پس از آموزش، مدل XGBoost به‌عنوان یک مدل جانشین، پاسخ سامانه را با سرعت بالا پیش‌بینی کرده و الگوریتم EVPS با استفاده از این مدل، فضای تصمیم را جستجو می‌کند تا بهترین سیاست بهره‌برداری تعیین شود.

تابع هدف مسئله به‌صورت کمینه‌سازی جرم کل جامدات محلول خروجی از مخزن در طول دوره شبیه‌سازی مطابق رابطه (۷) تعریف شده است:

$$\text{Min } f = \sum_{i=1}^T M_i^2 \quad (7)$$

که در آن  $M_i$  جرم TDS خروجی در روز  $i$  است و از حاصل ضرب دبی خروجی و غلظت TDS محاسبه می‌شود. به‌منظور جلوگیری از تولید راه‌حل‌هایی که تقاضای بهره‌برداری را تأمین نمی‌کنند، از تابع جریمه مطابق رابطه (۸) استفاده شده است:

$$\text{Penalty} = u \times \left(1 - \left(\frac{Q}{Q_D}\right)\right)^n \quad (8)$$

که در آن  $u$  ضریب جریمه،  $Q$  مجموع دبی رهاسازی شده،  $Q_D$  میزان تقاضای آب و  $n$  تعداد روزهای دوره شبیه‌سازی است. علاوه بر تابع هدف، فرایند بهینه‌سازی تحت مجموعه‌ای از قیود هیدرولوژیکی و بهره‌برداری انجام شده است. مهم‌ترین قید، معادله پیوستگی مخزن است که تغییرات حجم ذخیره را در طول زمان مطابق رابطه (۹) بیان می‌کند:

$$S(t+1) = S(t) + Q(t) - Re(t) - Loss(t) - Sp(t) \quad \forall t=1, \dots, T \quad (9)$$

که برای تمامی گام‌های زمانی برقرار است. میزان تلفات مخزن از رابطه (۱۰) محاسبه می‌شود:

$$Loss(t) = A(t) E(t) \quad (10)$$

که در آن  $E(t)$  تبخیر از سطح مخزن و  $A(t)$  مساحت سطح آب در ابتدای دوره زمانی است. از آنجا که مساحت سطح مخزن تابعی از حجم ذخیره است، این رابطه به‌صورت رابطه (۱۱) بیان می‌شود:

$$A(t) = g[S(t)] \quad (11)$$

همچنین حجم ذخیره مخزن در هر گام زمانی باید در محدوده مجاز بهره‌برداری مطابق با رابطه (۱۲) قرار گیرد:

$$S_{min}(t) \leq S(t) \leq S_{max}(t) \quad \forall t=1, \dots, T \quad (12)$$

که در آن  $S_{min}$  و  $S_{max}$  به‌ترتیب حجم مرده و ظرفیت مجاز مخزن هستند.

در روابط فوق،  $S(t)$  حجم ذخیره در ابتدای دوره،  $Q(t)$  جریان ورودی،  $Re(t)$  میزان رهاسازی،  $Loss(t)$  تلفات ناشی از تبخیر و نشست،  $Sp(t)$  حجم سرریز و  $S(t+1)$  حجم ذخیره در پایان دوره زمانی را نشان می‌دهند. همچنین تابع  $g(\cdot)$  بیانگر رابطه بین حجم ذخیره و مساحت سطح مخزن است.

به منظور هدایت الگوریتم EVPS به سمت نواحی مجاز فضای جستجو، از روش تابع جریمه استفاده شد. در این روش، هرگاه یکی از قیود بهره‌برداری نقض شود، مقدار جریمه متناسب با میزان تخطی به مقدار تابع هدف افزوده می‌شود؛ در نتیجه، راه‌حل‌های غیرمجاز به تدریج از فرایند جستجو حذف شده و الگوریتم به سمت پاسخ‌های قابل قبول همگرا می‌شود. در نهایت، الگوریتم EVPS با استفاده از مدل جانشین XGBoost، سناریوهای مختلف بهره‌برداری را ارزیابی کرده و ترکیب بهینه متغیرهای تصمیم را به گونه‌ای تعیین می‌کند که جرم خروجی TDS کمینه شود و تمامی محدودیت‌های فیزیکی و بهره‌برداری مخزن به طور هم‌زمان رعایت شوند.

## نتایج و بحث

### واسنجی هندسه و تراز سطح آب مخزن اکباتان در مدل CE-QUAL-W2

به منظور ارزیابی عملکرد مدل CE-QUAL-W2، ابتدا فرایند واسنجی هندسه مخزن و تراز سطح آب انجام شد. در این مرحله، داده‌های هیدرولوژیکی شامل جریان‌های ورودی و خروجی، اطلاعات هواشناسی و مشخصات هندسی مخزن به مدل معرفی شدند و خروجی‌های مدل با داده‌های مشاهده‌ای مربوط به سال آبی ۲۰۲۰-۲۰۱۹ مقایسه شد. انتخاب این دوره به دلیل در دسترس بودن داده‌های اندازه‌گیری شده و کامل بودن اطلاعات مورد نیاز برای واسنجی انجام شد.

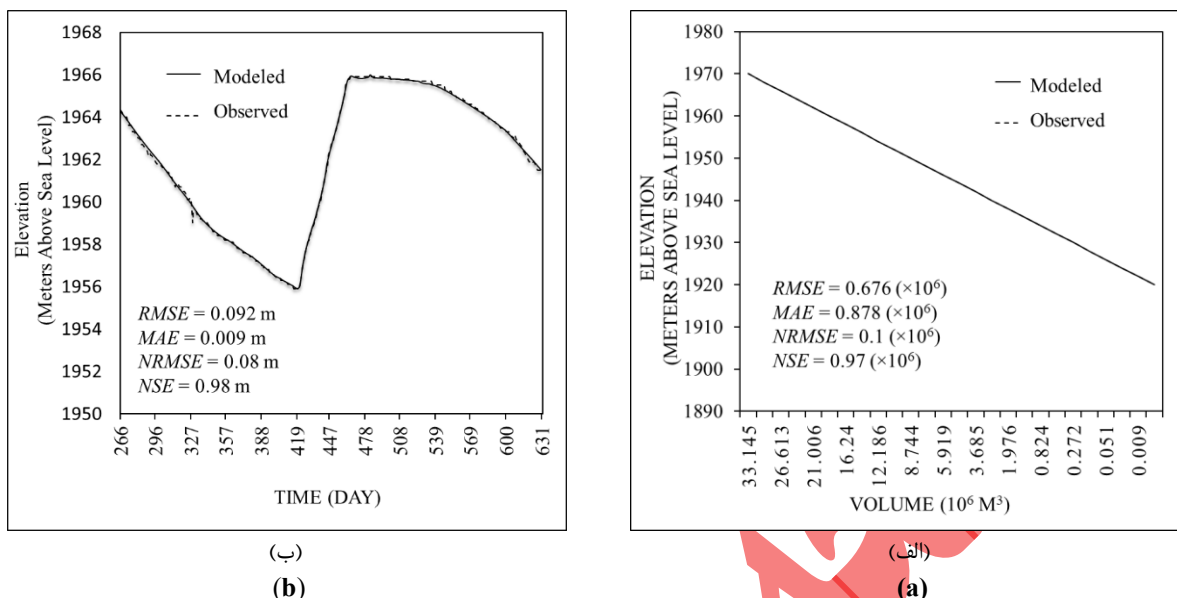
در فرایند واسنجی، منحنی حجم - سطح - ارتفاع مبنای تنظیم پارامترهای هندسی قرار گرفت و تغییرات تراز سطح آب به عنوان مهم‌ترین شاخص هیدرودینامیکی برای اصلاح رفتار مدل مورد استفاده قرار گرفت. عملکرد مدل با استفاده از چهار شاخص آماری شامل ضریب کارایی نش - ساتکلیف<sup>۱</sup> ( $NSE$ )، میانگین خطای مطلق<sup>۲</sup> ( $MAE$ )، ریشه میانگین مربعات خطا<sup>۳</sup> ( $RMSE$ ) و ریشه میانگین مربعات خطای نرمال شده<sup>۴</sup> ( $NRMSE$ ) ارزیابی شد. نتایج این ارزیابی و مقایسه داده‌های مشاهده‌ای و شبیه‌سازی شده نیز در شکل ۵ نمایش داده شده است. بر این اساس، مقدار  $NSE$  برای حجم مخزن برابر ۰/۹۷ و برای تراز سطح آب برابر ۰/۹۸ به دست آمد که بیانگر انطباق بسیار مطلوب بین مقادیر شبیه‌سازی شده و داده‌های اندازه‌گیری شده است. همچنین مقادیر  $NRMSE$  به ترتیب برابر ۰/۱۰ برای حجم مخزن و ۰/۰۸ برای تراز سطح آب نشان می‌دهد که خطای نسبی مدل در هر دو متغیر پایین بوده و دقت شبیه‌سازی در محدوده قابل قبول قرار دارد. علاوه بر این، مقادیر  $RMSE$  و  $MAE$  نیز بیانگر اختلاف اندک بین نتایج مدل و داده‌های مشاهداتی هستند که نشان‌دهنده توانایی مدل در بازتولید تغییرات زمانی حجم ذخیره و نوسانات تراز سطح آب است.

<sup>۱</sup> Nash-Sutcliffe Efficiency

<sup>۲</sup> Mean Absolute Error

<sup>۳</sup> Root Mean Square Error

<sup>۴</sup> Normalized Root Mean Square Error



شکل ۵. ارزیابی عملکرد مدل CE-QUAL-W2 در واسنجی مخزن اکباتان؛ شامل (الف) منحنی حجم - تراز مخزن و (ب) مقایسه تراز سطح آب مشاهده‌ای و شبیه‌سازی شده

Fig 5. Performance evaluation of CE-QUAL-W2 model in Ekbatan reservoir calibration; including (a) reservoir volume-level curve and (b) comparison of observed and simulated water level

همان‌گونه که در شکل ۵ مشاهده می‌شود، روند تغییرات شبیه‌سازی شده در طول دوره مطالعه تطابق مناسبی با داده‌های اندازه‌گیری شده دارد و مدل توانسته است الگوی افزایش و کاهش تراز مخزن را با دقت مطلوب بازسازی کند. این موضوع نشان می‌دهد که پارامترهای هندسی و شرایط مرزی مدل به‌درستی تنظیم شده‌اند و مدل از پایداری مناسبی در شبیه‌سازی رفتار هیدرودینامیکی مخزن برخوردار است.

با توجه به نتایج حاصل، می‌توان نتیجه گرفت که مدل CE-QUAL-W2 قادر است رفتار هیدرولیکی مخزن اکباتان را با دقت قابل قبول شبیه‌سازی کند. دستیابی به مقادیر بالای  $NSE$  و مقادیر پایین شاخص‌های خطا، اعتبار مدل را برای ادامه شبیه‌سازی پارامترهای کیفی آب تأیید می‌کند. از این‌رو، مدل واسنجی شده به‌عنوان پایه توسعه مدل جایگزین مبتنی بر XGBoost و همچنین ارزیابی سناریوهای مختلف بهره‌برداری در مراحل بعدی پژوهش مورد استفاده قرار گرفت.

اعتبار مناسب مدل هیدرودینامیکی، شرط لازم برای توسعه مدل جایگزین مبتنی بر یادگیری ماشین است؛ زیرا کیفیت داده‌های آموزشی تأثیر مستقیمی بر عملکرد مدل XGBoost دارد؛ بنابراین، پس از اطمینان از صحت شبیه‌سازی CE-QUAL-W2، خروجی‌های این مدل برای آموزش مدل جایگزین و اجرای فرایند بهینه‌سازی مورد استفاده قرار گرفتند.

در مجموع، نتایج ارائه شده در شکل ۵ نشان می‌دهد که مدل CE-QUAL-W2 از دقت و پایداری کافی برای شبیه‌سازی شرایط واقعی مخزن اکباتان برخوردار است؛ بنابراین، خروجی‌های این مدل می‌تواند با اطمینان به‌عنوان داده آموزشی مدل XGBoost و همچنین مبنای اجرای الگوریتم‌های بهینه‌سازی در ادامه پژوهش مورد استفاده قرار گیرند.

### صحت‌سنجی پارامترهای دما و DO در مخزن اکباتان

به‌منظور ارزیابی قابلیت مدل CE-QUAL-W2 در شبیه‌سازی پارامترهای کیفی آب، تغییرات دما و DO در قطعه ۵۳ مخزن برای چهار مقطع زمانی شامل اکتبر ۲۰۱۹، فوریه ۲۰۲۰، ژوئن ۲۰۲۰ و سپتامبر ۲۰۲۰ مورد صحت‌سنجی قرار گرفت. این قطعه به

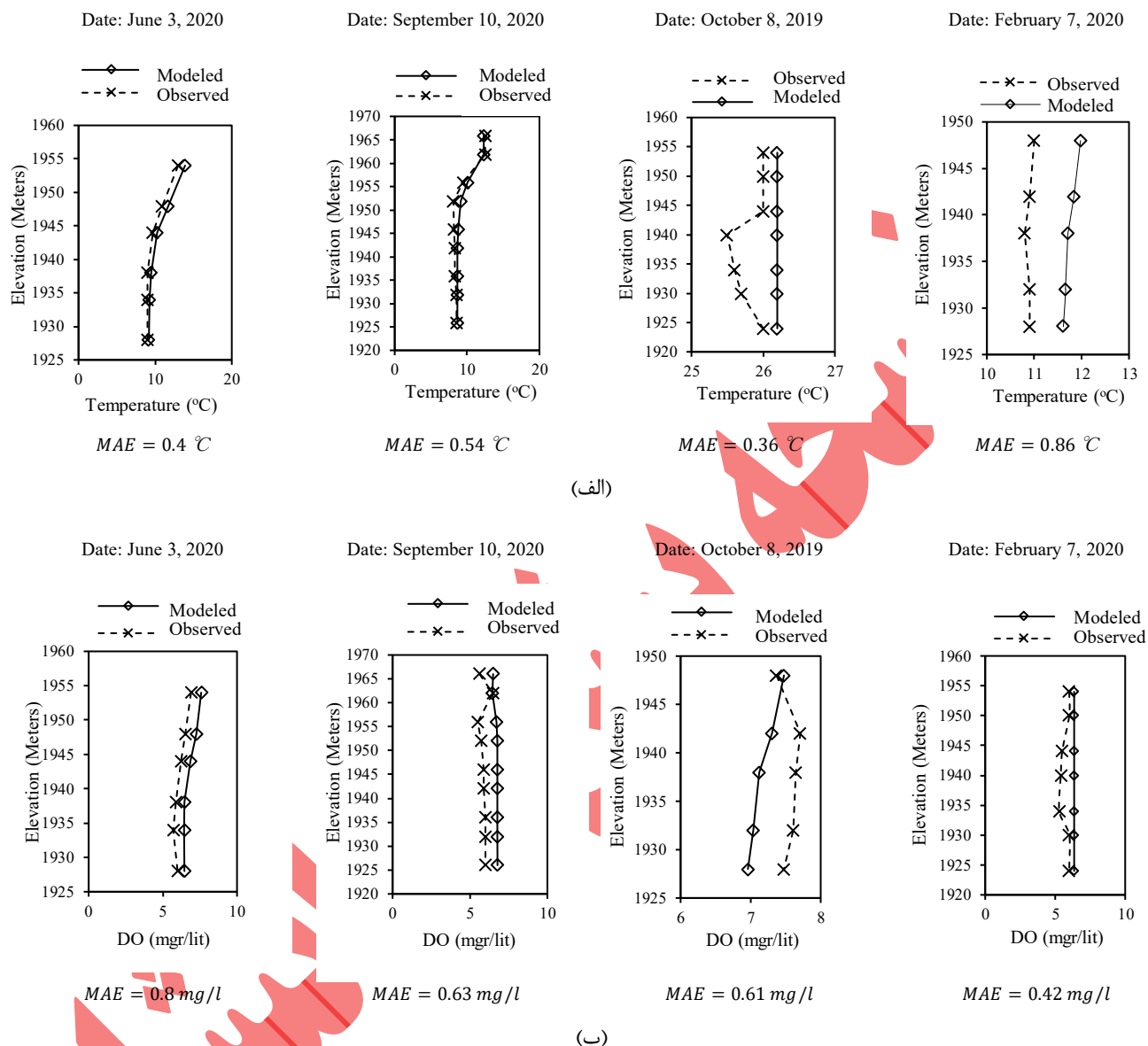
دلیل قرارگیری در مجاورت سازه آبگیر و تأثیر مستقیم بر کیفیت آب خروجی مخزن، به عنوان یکی از مهم ترین بخش های مخزن برای ارزیابی عملکرد مدل انتخاب شد.

در این مرحله، مقادیر شبیه سازی شده با داده های اندازه گیری شده در اعماق مختلف ستون آب مقایسه شدند. نتایج نشان داد که مدل توانسته است الگوی تغییرات عمقی دما و DO را با دقت مطلوب بازتولید کند. همچنین اختلاف میان مقادیر محاسبه شده و داده های مشاهداتی در محدوده قابل قبول ارائه شده در راهنمای مدل CE-QUAL-W2 (Cole and Wells, 2015) قرار دارد که بیانگر عملکرد مناسب مدل در بازنمایی فرایندهای هیدرودینامیکی و کیفی مخزن است.

نتایج ارائه شده در شکل ۶ نشان می دهد که مدل، پدیده لایه بندی حرارتی مخزن و تغییرات عمقی پارامترهای کیفی را به خوبی شبیه سازی کرده است. انطباق مناسب بین داده های مشاهداتی و مقادیر شبیه سازی شده، بیانگر آن است که مدل از دقت کافی برای تحلیل رفتار کیفی مخزن و بررسی سناریوهای مختلف بهره برداری برخوردار است.

همان گونه که در شکل ۶ مشاهده می شود، بیشترین غلظت DO در فصل زمستان (فوریه ۲۰۲۰) ثبت شده است. این رفتار را می توان به افزایش قابلیت انحلال اکسیژن در دماهای پایین تر و اختلاط مناسب تر ستون آب در این فصل نسبت داد. از سوی دیگر، بررسی نیم رخ عمقی DO نشان می دهد که با افزایش عمق، غلظت DO به تدریج کاهش می یابد. این کاهش در لایه های میانی مخزن به دلیل وجود گرادیان دمایی و اختلاط نسبی آب با شیب ملایم تری همراه است، در حالی که در لایه های عمیق تر افت غلظت DO محسوس تر است. این پدیده به طور عمده ناشی از محدود بودن تبادل اکسیژن با اتمسفر، کاهش فرایند اختلاط و مصرف اکسیژن در اثر تجزیه مواد آلی و فعالیت های زیستی در نواحی عمیق مخزن است.

به طور کلی، نتایج صحت سنجی نشان می دهد که مدل CE-QUAL-W2 قادر است تغییرات زمانی و عمقی دما و DO را با دقت قابل قبول شبیه سازی کند؛ بنابراین، می توان از این مدل به عنوان ابزاری قابل اعتماد برای تحلیل کیفیت آب مخزن اکباتان و توسعه مدل های جایگزین مبتنی بر یادگیری ماشین در مراحل بعدی پژوهش استفاده کرد.



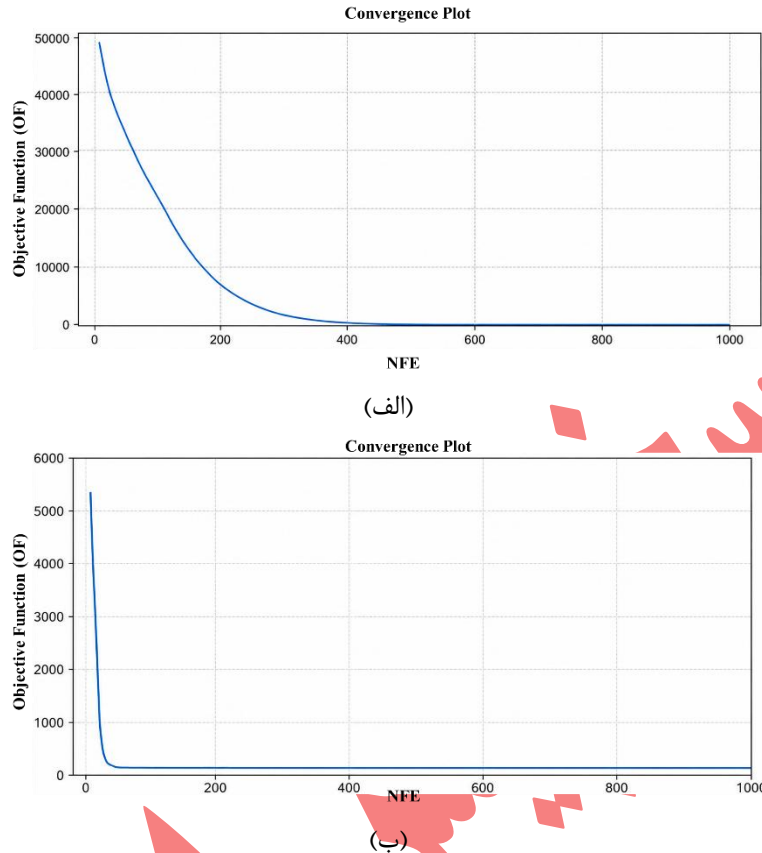
شکل ۶. نتایج حاصل از واسنجی (الف) نیم‌رخ دما و (ب) اکسیژن محلول برای قطعه ۵۳

Fig 6. Calibration results of (a) temperature profile and (b) dissolved oxygen for section 53

### تحلیل همگرایی و عملکرد مدل‌های EVPS-XGBoost و PSO-XGBoost

به منظور ارزیابی کارایی الگوریتم‌های بهینه‌سازی در تنظیم ابرپارامترهای مدل XGBoost، عملکرد دو الگوریتم EVPS و PSO مورد بررسی قرار گرفت. شکل ۷ روند تغییرات OF را برحسب تعداد ارزیابی‌های تابع<sup>۱</sup> (NFE) برای هر دو الگوریتم نشان می‌دهد. در این پژوهش، تابع هدف بر مبنای کمینه‌سازی-سازی خطای مدل جایگزین تعریف شده است؛ از این رو، مقادیر کم‌تر تابع هدف بیانگر دستیابی به ترکیب مناسب‌تری از ابرپارامترهای مدل XGBoost و در نتیجه افزایش کیفیت مدل پیش‌بینی است.

<sup>1</sup> Number of Function Evaluations



شکل ۷. روند همگرایی الگوریتم (الف) EVPS-XGBoost و (ب) PSO-XGBoost برحسب تعداد ارزیابی تابع هدف (NFE)  
**Fig 7. Convergence trend of (a) EVPS-XGBoost and (b) PSO-XGBoost algorithms in terms of number of objective function evaluations (NFE)**

مطابق شکل ۷ (الف)، الگوریتم EVPS-XGBoost در مراحل ابتدایی جستجو کاهش چشمگیری در مقدار تابع هدف ایجاد کرده است. شیب زیاد منحنی در ابتدای فرایند نشان دهنده توانایی بالای الگوریتم در شناسایی سریع نواحی امیدبخش فضای جستجو است. با افزایش تعداد ارزیابی‌ها، نرخ کاهش تابع هدف به تدریج کاهش یافته و منحنی به ناحیه‌ای با تغییرات اندک وارد می‌شود که بیانگر همگرایی پایدار الگوریتم است. این رفتار نشان می‌دهد که EVPS پس از مرحله اکتشاف، جستجوی خود را بر روی نواحی بهینه متمرکز کرده و از گرفتار شدن در جواب‌های محلی تا حد زیادی جلوگیری نموده است.

در مقابل، شکل ۷ (ب) نشان می‌دهد که الگوریتم PSO نیز روند همگرایی مناسبی دارد، اما در مقایسه با EVPS با نوسانات بیشتری همراه بوده و در مقدار بزرگ‌تری از تابع هدف متوقف شده است. این موضوع بیانگر آن است که PSO در فضای پیچیده و غیرخطی ابرپارامترهای XGBoost از توانایی کم‌تری برای یافتن بهترین ناحیه جستجو برخوردار بوده و احتمال همگرایی زود هنگام در آن بیش‌تر است. به منظور مقایسه کمی عملکرد دو الگوریتم، شاخص‌های اصلی فرایند بهینه‌سازی در جدول ۱ ارائه شده‌اند.

جدول ۱. مقایسه عملکرد الگوریتم‌های بهینه‌سازی در تنظیم ابرپارامترهای مدل XGBoost

Table 1. Performance comparison of optimization algorithms in setting hyperparameters of XGBoost model

| شاخص<br>Index                                                                  | EVPS-XGBoost     | PSO-XGBoost                                  |
|--------------------------------------------------------------------------------|------------------|----------------------------------------------|
| بهترین مقدار تابع هدف (OF)<br>Best Objective Function (OF) Value               | 0.2340           | 88.3333                                      |
| زمان اجرا (ثانیه)<br>Run-Time (seconds)                                        | 332.21           | 238.79                                       |
| زمان اجرا (دقیقه)<br>Run-Time (minutes)                                        | 5.54             | 3.98                                         |
| تعداد ارزیابی تابع هدف (NFE)<br>Number of Objective Function Evaluations (NFE) | 1000             | 1000                                         |
| کیفیت همگرایی<br>Convergence Quality                                           | پایدار<br>Stable | به نسبت نوسانی<br>Proportionally fluctuating |
| احتمال همگرایی زودهنگام<br>Probability of Premature Convergence                | کم<br>Little     | بیشتر<br>More                                |

همان‌گونه که در جدول ۱ مشاهده می‌شود، الگوریتم EVPS مقدار نهایی تابع هدف را به ۰/۲۳۴۰ کاهش داده است، درحالی‌که این مقدار برای PSO برابر با ۸۸/۳۳۳۳ به‌دست آمده است. اگرچه زمان اجرای EVPS برابر با ۳۳۲/۲۱ ثانیه بوده و نسبت به PSO (۲۳۸/۷۹ ثانیه) بیشتر است، اما این افزایش زمان محاسباتی منجر به دستیابی به جوابی با کیفیت بسیار بالاتر شده است. همچنین روند همگرایی EVPS پایدارتر بوده و احتمال همگرایی زودهنگام در آن کم‌تر از الگوریتم PSO است. در مجموع، نتایج شکل ۶ و جدول ۱ نشان می‌دهد که الگوریتم EVPS در مقایسه با PSO تعادل مؤثرتری میان اکتشاف و بهره‌برداری برقرار کرده و توانسته است فضای جستجو را با کارایی بیش‌تری پیمایش کند. هرچند این برتری با افزایش محدودی در زمان اجرا همراه بوده است، اما کاهش چشمگیر مقدار تابع هدف، استفاده از EVPS را برای تنظیم ابرپارامترهای مدل XGBoost و مسائل پیچیده بهینه‌سازی کیفیت آب توجیه‌پذیر می‌سازد.

### ارزیابی عملکرد مدل جایگزین XGBoost

پس از تعیین ابرپارامترهای بهینه توسط الگوریتم‌های فراابتکاری، عملکرد مدل جایگزین XGBoost با استفاده از شاخص‌های آماری  $R^2$ ، MAE و RMSE مورد ارزیابی قرار گرفت. بر اساس نتایج، مدل XGBoost توانسته است به مقدار ۰/۹۱۷۶ برای ضریب تعیین دست یابد که نشان می‌دهد حدود ۹۱/۷۶ درصد از تغییرات متغیر هدف توسط مدل تبیین می‌شود. همچنین مقادیر  $RMSE = ۲/۵۱۳۳$  و  $MAE = ۱/۷۰۱۲$  بیانگر آن هستند که مدل از دقت مناسبی در پیش‌بینی غلظت TDS برخوردار بوده و خطاهای پیش‌بینی در محدوده قابل قبولی قرار دارند.

با توجه به این نتایج، می‌توان نتیجه گرفت که مدل XGBoost پس از تنظیم ابرپارامترها، توانایی مناسبی در بازتولید رفتار سامانه داشته و می‌تواند به‌عنوان یک مدل جایگزین سریع و دقیق در فرایند بهینه‌سازی مورد استفاده قرار گیرد؛ بنابراین، تفاوت

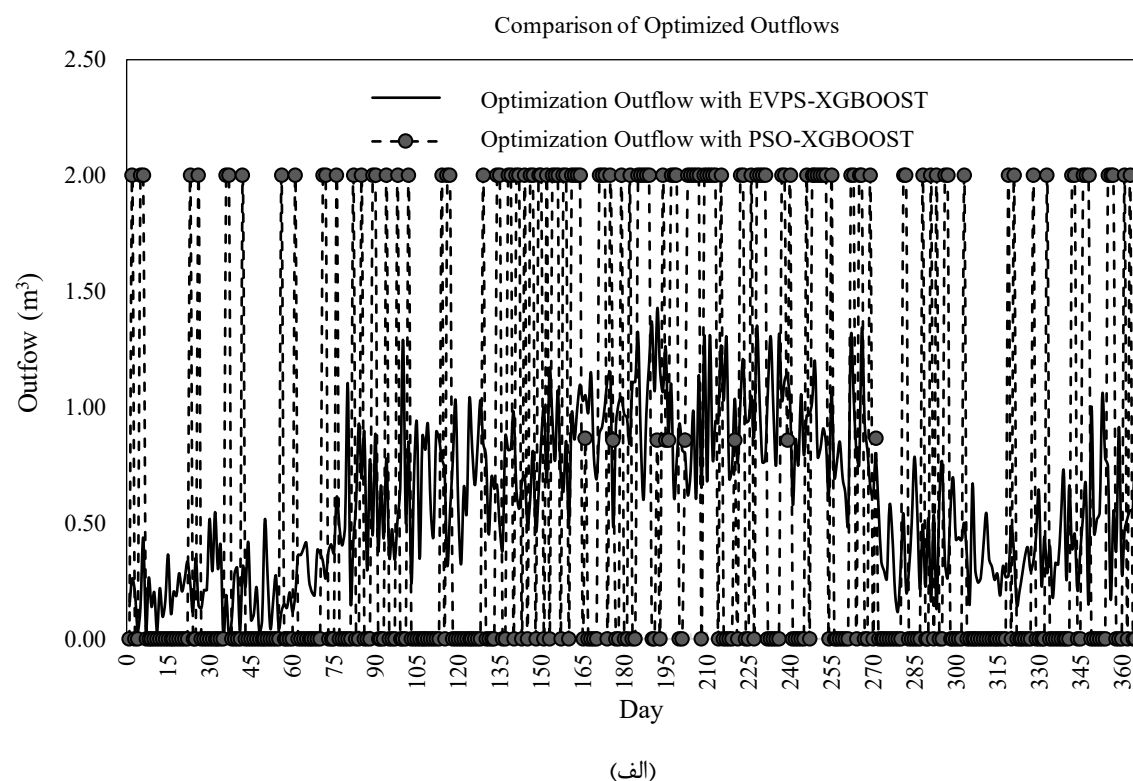
اصلی میان دو چارچوب EVPS-XGBoost و PSO-XGBoost نه در دقت نهایی مدل یادگیری ماشین، بلکه در کارایی الگوریتم بهینه‌سازی برای دستیابی به ابرپارامترهای مناسب و کیفیت راه‌حل نهایی است.

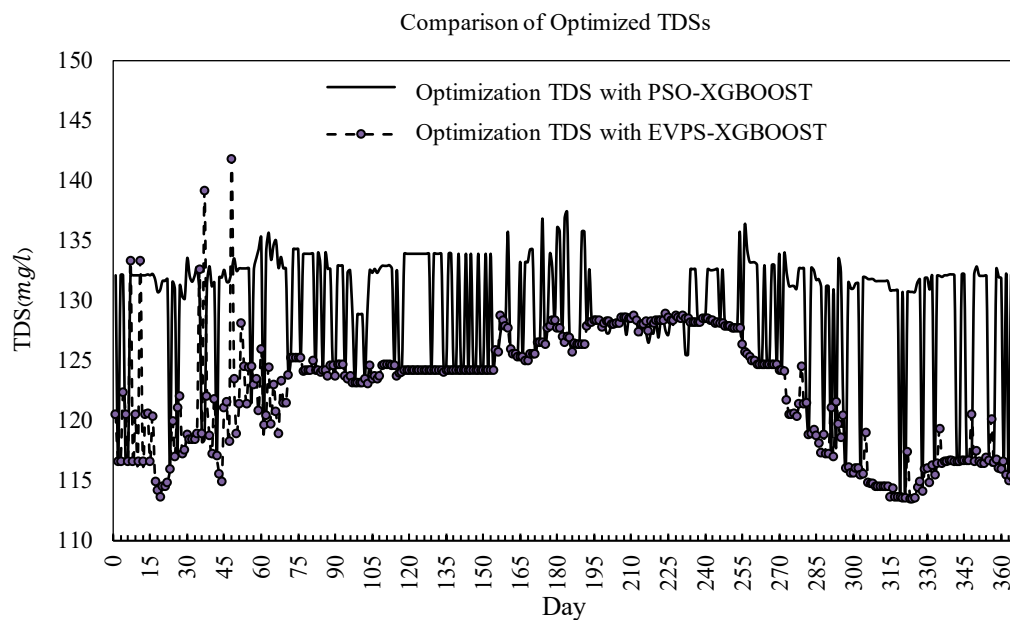
### نتایج بهینه‌سازی بهره‌برداری کیفی از مخزن

به‌منظور ارزیابی عملکرد چارچوب پیشنهادی در بهینه‌سازی کیفیت آب، داده‌های دبی خروجی و پارامترهای کیفی مخزن اکباتان در سال آبی ۲۰۲۰-۲۰۱۹ مورد استفاده قرار گرفت. انتخاب این دوره به دلیل در دسترس بودن هم‌زمان داده‌های هیدرولوژیکی، هواشناسی و کیفی و همچنین مناسب بودن آن برای آموزش و ارزیابی مدل‌های یادگیری ماشین انجام شد. از مجموع ۳۶۵ روز داده موجود، ۷۰ درصد برای آموزش، ۱۵ درصد برای اعتبارسنجی و ۱۵ درصد برای آزمون مدل XGBoost اختصاص یافت.

هدف اصلی بهینه‌سازی، تعیین سیاست بهره‌برداری مناسب از مخزن به‌منظور کمینه‌سازی غلظت TDS در آب خروجی بود. برای دستیابی به این هدف، چارچوب ترکیبی CE-QUAL-W2-XGBoost-EVPS توسعه داده شد. در این چارچوب، مدل CE-QUAL-W2 برای تولید داده‌های آموزشی، مدل XGBoost به‌عنوان مدل جایگزین برای پیش‌بینی سریع شاخص TDS و الگوریتم‌های EVPS و PSO برای جستجوی فضای تصمیم و تعیین سیاست‌های بهره‌برداری بهینه مورد استفاده قرار گرفتند. در هر تکرار فرایند بهینه‌سازی، متغیرهای تصمیم تولیدشده توسط الگوریتم‌های فراابتکاری به مدل آموزش‌دیده XGBoost ارسال شده و مقدار پیش‌بینی‌شده TDS به‌عنوان معیار ارزیابی تابع هدف محاسبه شد.

شکل ۸ تغییرات دبی خروجی بهینه و غلظت TDS متناظر را برای کل دوره شبیه‌سازی نشان می‌دهد. این نتایج امکان مقایسه عملکرد سیاست بهره‌برداری پیشنهادی با شرایط موجود مخزن را فراهم کرده و میزان موفقیت چارچوب پیشنهادی در کاهش غلظت TDS آب خروجی را به‌خوبی نشان می‌دهد.





(ب)

شکل ۸. (الف) مقایسه دبی خروجی‌های بهینه‌شده و (ب) مقایسه غلظت TDS محاسبه‌شده (محور افقی شماره روزهای شبیه‌سازی بر اساس تاریخ ژولین)

**Fig. 8. (a) Comparison of optimized outlet discharge and (b) comparison of calculated TDS concentration (horizontal axis: number of simulation days based on Julian date)**

در شکل ۸ (الف)، الگوی دبی خروجی بهینه حاصل از الگوریتم‌های PSO و EVPS برای دوره شبیه‌سازی ارائه شده است. نتایج نشان می‌دهد که هر دو الگوریتم قادر به تولید سیاست‌های بهره‌برداری سازگار با محدودیت‌های بهره‌برداری مخزن هستند، اما الگوی تغییرات دبی خروجی در دو روش تفاوت محسوسی دارد. در روش EVPS، تغییرات دبی خروجی روندی یکنواخت‌تر و با نوسانات کم‌تر دارد، درحالی‌که الگوریتم PSO در برخی بازه‌های زمانی تغییرات شدیدتری در دبی خروجی ایجاد کرده است. این موضوع بیانگر آن است که EVPS در فرایند جستجوی فضای پاسخ، راهکارهایی با پایداری زمانی بیش‌تر ارائه می‌کند.

شکل ۸ (ب) تغییرات غلظت TDS متناظر با سیاست‌های بهره‌برداری بهینه را نشان می‌دهند. مقایسه نتایج بیانگر آن است که هر دو الگوریتم توانسته‌اند غلظت TDS خروجی را کاهش دهند، اما الگوریتم EVPS در بیش‌تر بازه‌های زمانی مقادیر پایین‌تر و یکنواخت‌تری نسبت به PSO ایجاد کرده است. همچنین دامنه نوسانات TDS در روش EVPS کم‌تر بوده و تغییرات کیفیت آب خروجی با روندی پایدارتر همراه است، درحالی‌که در نتایج حاصل از PSO نوسانات بیش‌تری مشاهده می‌شود.

برای مقایسه کمی عملکرد دو روش، شاخص‌های آماری نتایج بهینه‌سازی نشان داد که میانگین غلظت TDS حاصل از EVPS کم‌تر از PSO بوده و علاوه بر آن، انحراف معیار مقادیر TDS نیز کاهش یافته است که بیانگر پایداری بیش‌تر سیاست بهره‌برداری استخراج‌شده توسط EVPS است. این نتایج نشان می‌دهند که استفاده از الگوریتم EVPS علاوه بر دستیابی به کیفیت بهتر آب خروجی، موجب کاهش نوسانات زمانی در فرایند بهره‌برداری نیز می‌شود.

به‌طور کلی، نتایج نشان می‌دهد که هر دو الگوریتم قادر به حل مسئله بهینه‌سازی بهره‌برداری کیفی مخزن هستند، اما الگوریتم EVPS با ارائه سیاست‌های بهره‌برداری پایدارتر و دستیابی به مقادیر کم‌تر TDS، عملکرد بهتری نسبت به PSO از خود نشان داده است. این برتری نشان می‌دهد که ترکیب EVPS-XGBoost می‌تواند به‌عنوان چارچوبی کارآمد برای بهینه‌سازی کیفیت آب مخازن و استخراج سیاست‌های بهره‌برداری پایدار مورد استفاده قرار گیرد.

## نتیجه‌گیری

در این پژوهش، یک چارچوب یک‌پارچه مبتنی بر مدل هیدرودینامیکی - کیفی CE-QUAL-W2، مدل یادگیری ماشین XGBoost و الگوریتم‌های فراابتکاری EVPS و PSO به منظور شبیه‌سازی، پیش‌بینی و بهینه‌سازی کیفیت آب مخزن اکباتان توسعه و ارزیابی شد. استفاده از مدل CE-QUAL-W2 امکان بازنمایی دقیق فرایندهای هیدرودینامیکی و کیفی مخزن را فراهم کرد و نتایج واسنجی و صحت‌سنجی نشان داد که این مدل قادر است هندسه مخزن، تراز سطح آب، نیم‌رخ دما و اکسیژن محلول را با دقت قابل قبول شبیه‌سازی کند. مقادیر بالای  $NSE$  و مقادیر پایین شاخص‌های خطا، بیانگر قابلیت اعتماد مدل برای تولید داده‌های آموزشی مورد نیاز مدل یادگیری ماشین است.

به منظور کاهش هزینه محاسباتی فرایند بهینه‌سازی، مدل XGBoost به عنوان یک مدل جایگزین توسعه یافت و با استفاده از خروجی‌های مدل CE-QUAL-W2 آموزش داده شد. نتایج ارزیابی عملکرد نشان داد که این مدل با ضریب تعیین  $0.91/0.9176$ ، توانسته است حدود  $91/76$  درصد از تغییرات متغیر هدف را تبیین کند و در عین حال مقادیر پایین  $MAE$  و  $RMSE$  بیانگر دقت مناسب آن در پیش‌بینی غلظت TDS است. این موضوع نشان می‌دهد که مدل XGBoost می‌تواند جایگزین مناسبی برای اجرای مکرر مدل شبیه‌سازی در فرایندهای بهینه‌سازی باشد.

مقایسه عملکرد الگوریتم‌های بهینه‌سازی نشان داد که هر دو روش قادر به استخراج سیاست‌های بهره‌برداری قابل قبول هستند، اما الگوریتم EVPS در مقایسه با PSO عملکرد مطلوب‌تری از خود نشان داد. نتایج تحلیل همگرایی بیانگر آن بود که EVPS با وجود صرف زمان محاسباتی اندکی بیشتر، به مقادیر پایین‌تر تابع هدف دست‌یافته و فرایند جستجوی پایدارتر و مؤثرتری را در فضای پاسخ ارائه کرده است. همچنین، سیاست‌های بهره‌برداری حاصل از EVPS منجر به کاهش بیش‌تر غلظت TDS و کاهش نوسانات زمانی دبی خروجی نسبت به PSO شد که بیانگر توانایی بالاتر این الگوریتم در برقراری تعادل میان اهداف کمی و کیفی بهره‌برداری از مخزن است.

به‌طور کلی، نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که ادغام مدل‌های فیزیکی، یادگیری ماشین و الگوریتم‌های فراابتکاری می‌تواند چارچوبی کارآمد برای مدیریت کیفیت آب مخازن فراهم کند. استفاده از مدل جایگزین مبتنی بر XGBoost ضمن حفظ دقت پیش‌بینی، زمان محاسباتی فرایند بهینه‌سازی را به میزان قابل توجهی کاهش داده و امکان بررسی تعداد بیش‌تری از سناریوهای بهره‌برداری را فراهم می‌سازد. از سوی دیگر، عملکرد برتر الگوریتم EVPS نشان می‌دهد که این روش ظرفیت مناسبی برای حل مسائل پیچیده و غیرخطی مدیریت منابع آب دارد.

## منابع

- Abba, S. I., Pham, Q. B., Malik, A., Costache, R., Gaya, M. S., Abdullahi, J., Mati, S., Usman, A. G., & Saini, G. (2025). Optimization of extreme learning machine with metaheuristic algorithms for modelling water quality parameters of Tamburawa water treatment plant in Nigeria. *Water Resources Management*, 39(3), 1377–1401. <https://doi.org/10.1007/s11269-024-04027-z>
- Almubaidin, M. A. A., Ahmed, A. N., Sidek, L. B. M., & Elshafie, A. (2022). Using metaheuristic algorithms (MHAs) to optimize water supply operation in reservoirs: A review. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 29(6), 3677–3711. <https://doi.org/10.1007/s11831-022-09716-9>
- Ashofteh, P.-S. and Shakarami, L. (2026). Modeling and optimization of water allocation using a hybrid LSTM-HHOA approach under climate change conditions. *Journal of Drought and Climate Change Research (JDCR)*, 4(13), 131-158. [In Persian]. <https://doi.org/10.22077/jdcr.2025.9958.1165>
- Bolick, M. M., Post, C. J., Naser, M.-Z., & Mikhailova, E. A. (2023). Comparison of machine learning algorithms to predict dissolved oxygen in an urban stream. *Environmental Science and Pollution Research*, 1–22. <https://doi.org/10.1007/s11356-023-27481-5>

- Chen, T., & Guestrin, C. (2016). XGBoost: A scalable tree boosting system. *Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, 785–794. <https://doi.org/10.1145/2939672.2939785>
- Cole, T. M., & Wells, S. A. (2015). *CE-QUAL-W2: A two-dimensional, laterally averaged, hydrodynamic and water quality model (Version 3.71)*. Department of Civil and Environmental Engineering, Portland State University.
- Ghobadi, F., & Kang, D. (2023). Application of machine learning in water resources management: A systematic literature review. *Water*, 15(4), 620. <https://doi.org/10.3390/w15040620>
- Hassani, S. Z., Ashofteh, P. S., & Vaez, S. R. H. (2025). Water reservoir quality management using meta-heuristic algorithms: Analysis and optimization of water quality considering uncertainties. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 140, 103987. <https://doi.org/10.1016/j.pce.2025.103987>
- Kaveh, A., & Ghazaan, M. I. (2017). A new meta-heuristic algorithm: Vibrating particles system. *Scientia Iranica. Transactions A, Civil Engineering*, 24(2), 551–566. <https://doi.org/10.24200/SCI.2017.2417>
- Kaveh, A., Hoseini Vaez, S. R., & Hosseini, P. (2019). Enhanced vibrating particles system algorithm for damage identification of truss structures. *Scientia Iranica*, 26(1), 246–256. <https://doi.org/10.24200/SCI.2017.4265>
- Kazemnadi, Y., Nazari, M., & Kerachian, R. (2024). Adaptive reservoir operation considering water quantity and quality objectives: Application of parallel cellular automata and sub-seasonal streamflow forecasts. *Journal of Environmental Management*, 354, 120294. <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2024.120294>
- Kennedy, J., & Eberhart, R. C. (1995). Particle swarm optimization. In *Proceedings of the IEEE International Conference on Neural Networks* (Vol. 4, pp. 1942–1948). IEEE. <https://doi.org/10.1109/ICNN.1995.488968>
- Magnabosco, R., A. Godoy, V., & Gómez-Hernández, J. J. (2026). Review of multi-sectoral water management simulation–optimization approaches. *Sustainable Water Resources Management*, 12, 19. <https://doi.org/10.1007/s40899-026-01334-8>
- Mortezaazadeh, F., Pourmohammadi, M. H., Khoshnavaz, S., Nohani, E., & Eslami, H. (2026). The use of plain Hendijan in water resources: optimal method for model exploitation bargaining objective-multi. *Journal of Drought and Climate Change Research (JDCR)*, 4(13), 19–40. [In Persian]. <https://doi.org/10.22077/jdcr.2025.9141.1131>
- Nikoo, M. R., Al Aamri, A., Etri, T., & Al-Rawas, G. (2025). A review of machine learning, remote sensing, and statistical methods for reservoir water quality assessment. *Journal of Hydrology*, 669, 133323. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2025.133323>
- Nohani, E., Babaali, H., & Dehghani, R. (2026). Estimation of suspended sediments in the coastal areas of the Caspian Sea using machine learning techniques under drought conditions. *Journal of Drought and Climate Change Research (JDCR)*, 4(13), 1–18. <https://doi.org/10.22077/jdcr.2025.8983.1121>
- Palmer, M. A., Reidy Liermann, C. A., Nilsson, C., Flörke, M., Alcamo, J., Lake, P. S., & Bond, N. (2015). Potential impacts of climate change on reservoir services and management approaches. *Lake and Reservoir Management*, 31(4), 321–332. <https://doi.org/10.1080/10402381.2015.1107665>
- Pham, B. T., Thi Bui, K.-T., Prakash, I., & Ly, H.-B. (2024). Hybrid artificial intelligence models based on adaptive neuro-fuzzy inference system and metaheuristic optimization algorithms for prediction of daily rainfall. *Physics and Chemistry of the Earth, Parts A/B/C*, 134, 103563. <https://doi.org/10.1016/j.pce.2024.103563>
- Shi, W., Wang, W., Yu, S., Liang, L., Zhong, J., Yi, Y., & Li, S.-L. (2024). Influences of hydrodynamics on dissolved inorganic carbon in deep subtropical reservoir: Insights from hydrodynamic model and carbon isotope analysis. *Water Research*, 250, 121058. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2023.121058>
- Shoaei, S. M., Arjmandi, S. A., & Mirbagheri, S. A. (2022). Enhancing the CE-QUAL-W2 to model dissolved lead transport and transformation in dam reservoirs: A case study of Shahid Rajaei Dam reservoir, northern part of Iran. *Environmental Science and Pollution Research*, 29(38), 57860–57872. <https://doi.org/10.1007/s11356-022-19889-2>
- Siadatpour, S. A. S., Aghamolaei, Z., Jafari-Asl, J., & Baniasadi Moghadam, A. (2025). A single-objective optimization of water quality sensors in water distribution networks using advanced metaheuristic techniques. *Water*, 17(8), 1221. <https://doi.org/10.3390/w17081221>
- Wang, H., Deng, Y., Yang, Y., Lu, J., Tuo, Y., Yan, Z., & Chen, M. (2024). Optimization of selective withdrawal strategy in a warm monomictic reservoir based on thermal stratification. *Ecological Indicators*, 158, 111294. <https://doi.org/10.1016/j.ecolind.2023.111294>