

## Integration of physics-based models and machine learning for groundwater quality prediction: MODFLOW and SVM

Mohammad AmelSadeghi<sup>1</sup> 

1. Corresponding Author, Department of Water Engineering, Faculty of Agriculture, Islamic Azad University, Takestan Branch, Takestan, Iran. E-mail: m.amelsadeghi@gmail.com

### Article Info

**Article type:**  
Research Article

**Article history:**  
Received 27 Jan 2026  
Revised 11 Mar 2026  
Accepted 22 Mar 2026  
Published 29 Mar 2026

**Keywords:**  
Groundwater Quality Simulation,  
Support Vector Machine (SVM),  
Groundwater Quality,  
MODFLOW.

### ABSTRACT

**Objective:** Groundwater depletion and salinity increase are among the most critical challenges affecting the Qom aquifer in arid regions of Iran. In this study, a hybrid modeling framework integrating physics-based and data-driven approaches was developed to simulate and predict groundwater quality.

**Method:** The MODFLOW model was employed to simulate groundwater flow, while MT3D was used to model chloride transport as an indicator of salinity. Subsequently, a Support Vector Machine (SVM) model was developed to predict chloride concentration. The MODFLOW model was calibrated using data from 16 piezometers.

**Results:** The results demonstrated satisfactory performance in reproducing groundwater levels, with *RMSE* values ranging from 0.10 to 0.18 m and a correlation coefficient of up to 0.96. MT3D simulations revealed significant spatial variability in chloride dispersion, highlighting the influence of hydrogeological heterogeneity on salinity distribution. The SVM model was trained using spatial coordinates, groundwater levels, previous-month chloride concentration, and surface recharge as input variables. The model showed strong predictive capability, achieving a correlation coefficient of 0.91 during the testing phase. Comparison between SVM predictions and numerical model outputs yielded an *MSE* of approximately 0.03 kg/m<sup>3</sup> and a correlation coefficient of about 0.65, indicating acceptable agreement. The results demonstrate that the SVM model can effectively reproduce the behavior of the numerical model while requiring lower computational cost.

**Conclusion:** Overall, the integration of physics-based and machine learning models provides an efficient and reliable framework for groundwater quality prediction and management under data-limited conditions.

**Cite this article:** AmelSadeghi M. Integration of physics-based models and machine learning for groundwater quality prediction: MODFLOW and SVM. *Water Resources and Climate Change*. (2026); 2(1): 37-44. <https://doi.org/10.22091/wrcc.2026.15670.1033>.



## Introduction

Groundwater resources in arid and semi-arid regions are increasingly threatened by overexploitation and salinity intrusion. The Qom aquifer in central Iran is a representative case, where declining groundwater levels and increasing salinity—primarily due to geological formations and saline water intrusion—have raised serious concerns for sustainable water management.

Traditional numerical models such as MODFLOW are widely used for simulating groundwater flow; however, their application in water quality modeling is often limited by the availability of comprehensive spatial and temporal datasets.

To address this limitation, this study aims to develop a hybrid modeling framework by integrating a physically-based model (MODFLOW coupled with MT3D) and a data-driven approach (Support Vector Machine, SVM) to simulate and predict groundwater quality, with a particular focus on chloride concentration as a salinity indicator.

## Method

The study area is located in the Qom plain, characterized by an arid climate and significant groundwater salinity issues. The MODFLOW model was developed to simulate groundwater flow and calibrated using observed data from 16 piezometers. The MT3D model was then applied to simulate chloride transport based on the advection–dispersion equation under transient conditions.

Due to limited water quality data, spatial interpolation techniques (kriging and polynomial approximation) were employed to generate continuous chloride concentration maps. The simulation period covered six months, with two months for calibration and four months for validation.

For predictive modeling, an SVM model with a radial basis function (RBF) kernel was developed. Input variables included piezometer coordinates, groundwater levels (from MODFLOW), previous-month chloride concentration, and surface recharge.

The dataset was divided into training (70%) and testing (30%) subsets, and model performance was evaluated using *RMSE*, *MSE*, *NMSE*, and correlation coefficient (*r*). A 10-fold cross-validation approach was used to avoid overfitting and optimize model parameters.

## Results

The MODFLOW model exhibited reliable performance in simulating groundwater levels, with *RMSE* values ranging from 0.10 to 0.18 m and correlation coefficients reaching up to 0.96. The results indicated relatively stable groundwater conditions in the northwestern parts of the aquifer, whereas notable declines were observed in the southern regions.

The MT3D simulations highlighted considerable spatial variability in chloride transport, with horizontal dispersivity values ranging from 10 to 80 m, reflecting the heterogeneity of the hydrogeological system.

The SVM model demonstrated strong predictive performance, achieving a correlation coefficient of 0.91 during the testing phase. A comparison between SVM outputs and numerical model results yielded an *MSE* of approximately 0.03 kg/m<sup>3</sup> and a correlation coefficient of about 0.65, indicating a reasonable level of agreement. Although the SVM model showed some limitations in capturing minor fluctuations, it effectively reproduced the overall spatial and temporal patterns of chloride concentration.

## **Conclusion**

The results demonstrate that the integration of physically-based and data-driven models provides a robust framework for groundwater quality assessment under data-limited conditions.

The SVM model, in particular, offers a computationally efficient alternative to complex numerical simulations while maintaining acceptable accuracy. The proposed hybrid approach enhances predictive performance and can support sustainable groundwater management in arid and semi-arid regions.

This framework is especially valuable for identifying critical regions prone to salinity and can be extended to similar hydrogeological settings facing data scarcity challenges.

## **Declarations**

### **Ethical Approval**

The paper is not currently being considered for publication elsewhere. All authors have been personally and actively involved in substantial work leading to the paper, and will take public responsibility for its content.

### **Competing interests**

Conflict of Interest – None

### **Availability of data and materials**

Data will be made available on the request.

### **Authors Contributions**

Mohammad AmelSadeghi performed the calculations. He approved the analytical methods. He supervised the findings of this work. Mohammad AmelSadeghi discussed the results, and contributed to the final version of the paper.

### **Acknowledgements**

The authors would like to thank all participants in the present study.

### **Funding**

This research did not receive any specific grant from funding agencies in the public, commercial, or not-for-profit sectors.



## ترکیب مدل‌های فیزیکی و یادگیری ماشین برای پیش‌بینی کیفیت آب زیرزمینی: SVM و MODFLOW

محمد عامل صادقی<sup>۱</sup>

۱. نویسنده مسئول، گروه مهندسی آب، دانشکده کشاورزی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد تاکستان، تاکستان، ایران. رایانامه: m.amelsadeghi@gmail.com

اطلاعات مقاله	چکیده
<b>نوع مقاله:</b> مقاله پژوهشی	<b>هدف:</b> افت سطح آب زیرزمینی و افزایش شوری از مهم‌ترین چالش‌های آبخوان دشت قم در مناطق خشک ایران است. در این پژوهش، یک رویکرد ترکیبی مبتنی بر مدل فیزیکی و داده‌محور برای شبیه‌سازی و پیش‌بینی کیفیت آب زیرزمینی ارائه شد.
<b>تاریخ دریافت:</b> ۱۴۰۴/۱۱/۰۷	<b>روش:</b> بدین‌منظور، مدل MODFLOW برای شبیه‌سازی جریان آب زیرزمینی و مدل MT3D برای تحلیل انتقال یون کلر به‌عنوان شاخص شوری به‌کار گرفته شد و سپس مدل ماشین بردار پشتیبان <sup>۲</sup> (SVM) برای پیش‌بینی غلظت کلر توسعه یافت. مدل MODFLOW با استفاده از داده‌های ۱۶ پیرومتر واسنجی شد.
<b>تاریخ بازنگری:</b> ۱۴۰۴/۱۲/۲۰	<b>یافته‌ها:</b> نتایج حاکی از دقت مناسب آن در بازتولید سطح ایستابی بود ( $RMSE$ بین ۰/۱۰ تا ۰/۱۸ متر و ضریب همبستگی ۰/۹۶). شبیه‌سازی انتقال کلر با MT3D نشان‌دهنده تغییرات قابل توجه مکانی در ضرایب پخشیدگی و نقش شرایط هیدروژئولوژیکی در گسترش شوری بود. در ادامه، مدل SVM با ورودی‌هایی شامل مختصات مکانی، سطح ایستابی، غلظت کلر ماه قبل و میزان تغذیه سطحی آموزش داده شد و عملکرد قابل قبولی در پیش‌بینی غلظت کلر نشان داد ( $r=0.91$ در مرحله آزمون). مقایسه نتایج مدل‌ها نشان داد که SVM قادر است رفتار مدل عددی را با دقت مناسب بازتولید کند ( $MSE \approx 0.03 \text{ kg/m}^3$ و $r \approx 0.65$ ) و در عین‌حال هزینه محاسباتی کم‌تری دارد.
<b>تاریخ پذیرش:</b> ۱۴۰۵/۰۱/۰۲	<b>نتیجه‌گیری:</b> نتایج این مطالعه نشان می‌دهند که ترکیب مدل‌های فیزیکی و یادگیری ماشین می‌تواند ابزاری کارآمد برای پیش‌بینی و مدیریت کیفیت آب زیرزمینی در شرایط محدودیت داده فراهم آورد.
<b>تاریخ انتشار:</b> ۱۴۰۵/۰۱/۰۹	
<b>کلیدواژه‌ها:</b> شبیه‌سازی کیفی آبخوان، ماشین بردار پشتیبان (SVM)، کیفیت آب زیرزمینی، MODFLOW	
<b>استناد:</b> عامل صادقی محمد. ترکیب مدل‌های فیزیکی و یادگیری ماشین برای پیش‌بینی کیفیت آب زیرزمینی: SVM و MODFLOW و منابع آب و تغییر اقلیم. ۱۴۰۵؛ (۱)۲: ۳۷-۴۴. <a href="http://doi.org/10.22091/wrcc.2026.15670.1033">http://doi.org/10.22091/wrcc.2026.15670.1033</a>	

<sup>2</sup>- Support Vector Machine



## ۱- مقدمه

ورودی‌ها و خروجی‌ها، می‌تواند کیفیت آب زیرزمینی را با دقت بالا و با حجم داده محدود پیش‌بینی کند [۶ و ۷]. مطالعات متعدد نشان داده‌اند که ترکیب مدل‌های عددی و داده‌محور، مانند MODFLOW برای شبیه‌سازی کمی و SVM برای پیش‌بینی کیفی، می‌تواند کارایی مدل‌سازی آبخوان‌ها را به‌طور چشمگیری افزایش دهد. به عنوان مثال، لی<sup>۲</sup> و همکاران نشان دادند که استفاده هم‌زمان از MODFLOW و SVM برای شبیه‌سازی کیفی و کمی آبخوان‌ها در مناطق خشک چین دقت پیش‌بینی را نسبت به مدل‌های مجزا افزایش داده است [۸].

هم‌چنین، چن<sup>۳</sup> و همکاران دریافتند که مدل‌های داده‌محور در شرایط کمبود داده، توانایی پیش‌بینی تغییرات مکانی و زمانی کیفیت آب را به نحو موثری فراهم می‌کنند [۹].

آتیا<sup>۴</sup> و همکاران با ترکیب MODFLOW و مدل‌های پیشرفته یادگیری عمیق به نتایج بسیار بهتری نسبت به MODFLOW تنها دست یافتند [۱۰]. رودریگو-ایلاری<sup>۵</sup> از رویکرد جفت‌شده MODFLOW-MT3D برای شبیه‌سازی انتقال آلاینده (نیترات) در آبخوان ساحلی استفاده کرد و نتایج قابل قبولی گزارش داد [۱۱].

با توجه به شرایط خاص آبخوان قم و محدودیت داده‌های کیفی و کمی، استفاده از یک رویکرد ترکیبی MODFLOW و SVM می‌تواند امکان پیش‌بینی بهتر رفتار آبخوان در پاسخ به تنش‌های مختلف بهره‌برداری و تغییرات اقلیمی را فراهم کند. پژوهش حاضر با بهره‌گیری از این رویکرد، به ارزیابی عملکرد مدل MODFLOW در شبیه‌سازی کمی و SVM در پیش‌بینی کیفی می‌پردازد و نتایج آن‌ها در بازه زمانی طولانی مقایسه می‌شود. این مطالعه می‌تواند چارچوبی علمی و عملی برای مدیریت پایدار منابع آب زیرزمینی در مناطق خشک و نیمه‌خشک ایران فراهم آورد.

دشت قم به‌عنوان یکی از مناطق خشک و نیمه‌خشک ایران، با محدودیت‌های شدید منابع آب زیرزمینی مواجه است. کاهش سطح ایستابی ناشی از برداشت بی‌رویه و تغییرات اقلیمی، تهدیدی جدی برای امنیت آبی این منطقه ایجاد کرده است، به‌گونه‌ای که پیشرفت فرونشست زمین و ورود آب شور به سفره‌های آب زیرزمینی را تسریع می‌کند [۱]. علاوه بر این، وجود سازندهای نمکی و مارنی و دریاچه نمک، کیفیت منابع آب زیرزمینی را کاهش داده و باعث پیچیدگی مدیریت پایدار این منابع می‌شود [۲].

مدیریت پایدار آبخوان‌ها نیازمند ابزارهایی برای شبیه‌سازی رفتار سامانه آب زیرزمینی در شرایط مختلف بهره‌برداری و تغییرات اقلیمی است. مدل‌های عددی مانند MODFLOW، که به‌طور گسترده به‌عنوان استاندارد جهانی در شبیه‌سازی کمی جریان آب زیرزمینی شناخته شده‌اند، امکان شبیه‌سازی سه‌بعدی جریان‌های زیرسطحی و ارزیابی اثرات سناریوهای بهره‌برداری را فراهم می‌کنند [۳ و ۴].

این مدل‌ها با استفاده از روش تفاضل محدود، معادلات جریان آب زیرزمینی را در گام‌های زمانی مختلف حل می‌کنند و امکان پیش‌بینی تغییرات سطح آب و جریان آبخوان را در بازه‌های زمانی کوتاه و بلندمدت فراهم می‌آورند [۴].

با این حال، شبیه‌سازی کیفی آبخوان‌ها با مدل‌های عددی نیازمند داده‌های مکانی و زمانی دقیق از پارامترهای هیدرولیکی و کیفیت آب است که در بسیاری از مناطق خشک و نیمه‌خشک، به‌طور کامل در دسترس نیستند. در چنین شرایطی، مدل‌های داده‌محور مانند SVM به‌عنوان جایگزین یا مکمل مدل‌های عددی مطرح می‌شوند [۵]. SVM با توانایی مدل‌سازی روابط غیرخطی پیچیده بین

4- Attea

5- Rodrigo-Ilari

2- Li

3- Chen

## ۲- مواد و روش‌ها

## ۲-۱- منطقه مطالعه

منطقه مورد بررسی در دشت قم، واقع در غرب دریاچه نمک و استان قم قرار دارد و محدوده جغرافیایی آن بین  $37^{\circ} 37' 52''$  تا  $50^{\circ} 15' 51''$  طول شرقی و  $34^{\circ} 24' 24''$  تا  $34^{\circ} 34' 7''$  عرض شمالی است (شکل ۱). این منطقه دارای اقلیم خشک و نیمه‌خشک است و تابستان‌های گرم و خشک و زمستان‌های به نسبت سرد دارد. متوسط بارش سالانه در دشت حدود ۱۸۱ میلی‌متر است و در مرکز دشت به ۱۵۳ میلی‌متر کاهش می‌یابد. نرخ تبخیر و تعرق پتانسیل سالانه به‌طور تقریبی ۱۶۸۰ میلی‌متر گزارش شده و دماهای مطلق بیشینه و کمینه به ترتیب ۴۹ و ۱۸- درجه سانتی‌گراد می‌باشند [۱۲].

همبستگی بالاتر با شوری نسبت به سدیم، برای مدل‌سازی کیفیت آب مناسب است.

معادله عمومی انتقال آلاینده‌ها در آبخوان به صورت

رابطه (۱) بیان می‌شود [۱۴]:

$$\frac{\partial(nC)}{\partial t} + \frac{\partial(nCV_i)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) + \dot{W}C - R \quad (1)$$

که در آن،  $C$  = غلظت آلاینده؛  $V_i$  = سرعت جریان آب؛  $D_{ij}$  = ضریب پخشیدگی؛  $\dot{C}$  = غلظت ورودی یا خروجی؛  $\dot{W}$  = جریان ورودی یا خروجی؛  $n$  = تخلخل موثر، و  $R$  = ضریب تاخیر، هستند.

## ۲-۲- شبیه‌سازی کیفیت آب با استفاده از MODFLOW و MT3D

برای مدل‌سازی کیفی آب زیرزمینی، از مدل سه‌بعدی MT3D که با مدل جریان MODFLOW یکپارچه می‌شود، استفاده شد [۱۵]. این مدل معادله همرفت-پخشیدگی را به روش‌های ترکیبی خطوط مشخصه و تفاضل محدود حل می‌کند و امکان شبیه‌سازی سه‌بعدی کیفیت آب را فراهم می‌سازد. ردیابی ذرات با استفاده از الگوریتم‌های Euler درجه اول و Runge-Kutta درجه چهارم انجام شد.

نمونه‌برداری کیفی آبخوان به صورت پراکنده و در بازه‌های زمانی نامنظم انجام شد. برای تهیه داده‌های ورودی مدل، از روش‌های زمین‌آماری مانند کریجینگ و نرم‌افزار GIS استفاده شد تا نقشه‌های پراکنش مکانی شوری برای ماه‌های مهر تا اسفند ایجاد شود. مقادیر غلظت در نقاط بدون داده برای ماه دی با استفاده از تقریب چندجمله‌ای درجه سوم تخمین زده شد و ضریب تعیین برابر ۰/۹۹۵ به دست آمد که دقت بالای پیش‌بینی را نشان می‌دهد.

مدل کیفی برای دوره شش ماه اول سال ۱۳۸۲ اجرا شد، به طوری که دو ماه اول برای واسنجی و چهار ماه بعد برای ارزیابی مدل مورد استفاده قرار گرفت. شرایط مرزی و پارامترهای هیدرولیکی از مدل MODFLOW استخراج و

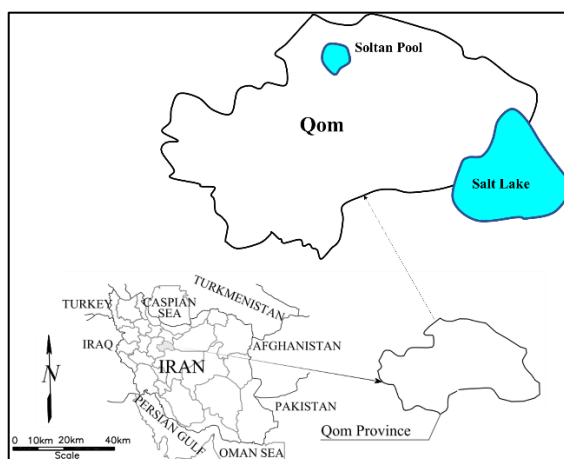


Figure 1. Location of the Qom study area

شکل ۱- موقعیت محدوده مطالعاتی قم

چالش اصلی دشت قم، شوری آب‌های زیرزمینی است که تحت تأثیر سازندهای زمین‌شناسی و هجوم آب شور رخ می‌دهد. کاهش سطح ایستابی موجب تشدید این پدیده شده و تهدیدی برای بهره‌برداری پایدار منابع آب است [۱۳]. حفاظت کیفی آبخوان باید به موازات مدیریت کمی انجام شود، بنابراین مطالعه رفتار آلاینده‌ها مانند یون کلر، به‌عنوان شاخص شوری، ضروری است. کلر با سدیم ترکیب شده و موجب تشکیل نمک می‌شود و به دلیل

که در آن،  $O_i$  و  $P_i$  = به ترتیب مقادیر مشاهده شده و پیش بینی شده و  $\bar{O}$  و  $\bar{P}$  = میانگین آنها، هستند.

$RMSE$ ، میزان خطای پیش بینی مدل را نشان

می دهد و به صورت رابطه (۳) تعریف می شود:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (O_i - P_i)^2}{N}} \quad (3)$$

$MSE$  و  $NMSE$  نیز برای سنجش دقت شبکه SVM

به کار رفتند. این معیارها توانایی مدل در بازتولید داده های مشاهده شده را ارزیابی می کنند و خطاهای بزرگ را به صورت برجسته نشان می دهند [۱۹]. معادلات ریاضی مربوطه به ترتیب در رابطه (۴) و رابطه (۵) ارائه شده است:

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - P_i)^2 \quad (4)$$

$$NMSE = \frac{MSE}{N} \quad (5)$$

برای شبکه SVM، داده ها به دو مجموعه آموزش (۷۰ درصد) و آزمون (۳۰ درصد) تقسیم شدند و به منظور جلوگیری از بیش برآزش<sup>۱۰</sup> از روش اعتبارسنجی متقابل ۱۰-تایی (Fold Cross-Validation) استفاده شد [۲۰]. هم چنین حساسیت مدل به انتخاب پارامترهای هسته ای و ضریب نرم سازی (C) بررسی شد تا بهترین عملکرد پیش بینی حاصل شود.

عملکرد نهایی مدل ها با مقایسه مستقیم نتایج شبیه سازی MODFLOW/MT3D و پیش بینی SVM برای دوره شش ماهه مورد ارزیابی قرار گرفت. معیارهای آماری نشان دادند که مدل SVM توانایی بالایی در بازتولید تغییرات مکانی و زمانی شوری آب زیرزمینی دارد و می تواند جایگزین مناسبی برای مدل های عددی سنتی در شرایط داده محدود باشد.

به مدل MT3D وارد شدند. پارامترهای پخشیدگی افقی و عمودی مطابق توصیه گلهر<sup>۶</sup> و آکسنس<sup>۷</sup> و با مقادیر ۰/۱ و ۰/۱ استفاده شدند [۱۶].

## ۳-۲- پیش بینی کیفیت آب با استفاده از SVM

با توجه به محدودیت داده های میدانی و نیاز به مدل های سریع و دقیق، از الگوریتم SVM برای پیش بینی غلظت کلر استفاده شد. SVM قادر است روابط غیرخطی پیچیده بین ورودی ها و خروجی ها را با دقت بالا تخمین بزند و نسبت به خطا در داده های ورودی حساسیت کمتری دارد [۱۷].

شبکه SVM با ورودی های هیدرولیکی و شوری قبلی و خروجی غلظت کلر ماه بعد آموزش داده شد. داده ها به دو مجموعه آموزش و آزمون تقسیم شدند و ارزیابی عملکرد با معیارهای ریشه میانگین مربعات خطا<sup>۸</sup> ( $RMSE$ )، ضریب همبستگی<sup>۹</sup> ( $r$ )، میانگین مربعات خطا<sup>۱۰</sup> ( $MSE$ ) و میانگین مربعات خطای نرمال شده<sup>۱۱</sup> ( $NMSE$ ) انجام شد. این معیارها توانایی مدل در بازتولید داده های مشاهده شده و دقت پیش بینی را ارزیابی می کنند.

## ۴-۲- ارزیابی مدل و معیارهای عملکرد

برای بررسی دقت و قابلیت اعتماد مدل های شبیه سازی شده، از معیارهای استاندارد آماری استفاده شد. در مدل MODFLOW/MT3D و مدل SVM، عملکرد پیش بینی با توجه به مقایسه داده های شبیه سازی شده با داده های مشاهده ای سنجیده شد. ضریب همبستگی ( $r$ )، معیاری برای سنجش میزان تطابق روند زمانی پیش بینی با مشاهدات است و به صورت رابطه (۲) تعریف می شود [۱۸]:

$$r = \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})(P_i - \bar{P})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2 \sum_{i=1}^N (P_i - \bar{P})^2}} \quad (2)$$

10- Mean Square Error

11- Normalized Mean Square Error

12- Overfitting

6- Gelhar

7- Axness

8- Root Mean Square Error

9- Coefficient of Correlation

## ۳- نتایج و بحث

مشاهده می‌شود که ناشی از برداشت کشاورزی و تبخیر سطحی است.

با استفاده از MT3D، انتقال یون کلر به صورت سه‌بعدی و براساس معادله همرفت-پخشیدگی شبیه‌سازی شد.

ردیابی ذرات آلاینده با الگوریتم ترکیبی Euler و Runge-Kutta انجام شد و امکان تحلیل دقیق مسیرهای انتقال کلر فراهم شد.

ضریب پخشیدگی افقی در شمال غرب دشت حدود ۱۰ متر و در شمال شرق و جنوب شرقی تا ۸۰ متر تغییر داشت، که بیانگر تغییرات مکانیکی و هیدرولیکی آبخوان است.

واکنش‌های جذب سطحی کلر در خاک با استفاده از ایزوترم خطی مدل شد و ضریب توزیع  $0.000065$  مترمکعب بر کیلوگرم تعیین گردید. این مدل نشان داد که بخش‌های با خاک ریزدانه بیشتر، ظرفیت جذب بالاتری دارند و یون کلر با سرعت کم‌تر حرکت می‌کند.

## ۳-۲- پیش‌بینی غلظت کلر با SVM

برای پیش‌بینی کیفیت آب و غلظت کلر، از SVM با هسته RBF استفاده شد. داده‌های آموزشی شامل:

- مختصات جغرافیایی پیژومتر
- سطح ایستابی آب زیرزمینی (خروجی (MODFLOW)

- غلظت کلر در ماه قبل

- میزان تغذیه سطحی یون کلر

خروجی مدل، غلظت کلر پیش‌بینی شده بود. داده‌ها به مجموعه‌های آموزش، اعتبارسنجی و آزمون تقسیم شدند و بهترین پارامترهای مدل با استفاده از جستجوی شبکه‌ای تعیین شد. معیارهای عملکرد SVM در جدول ۲ آورده شده است:

## ۳-۱- شبیه‌سازی جریان آب زیرزمینی و کیفیت آن با MODFLOW

برای تحلیل جریان آب زیرزمینی دشت قم، مدل MODFLOW استفاده شد. معیارهای ارزیابی MODFLOW در جدول ۱ ارائه شده است. مشخصات لایه‌های آبخوان، هدایت هیدرولیکی، نرخ تغذیه و شرایط مرزی جریان در شرق و جنوب شرق به صورت جریان مشخص در نظر گرفته شد. داده‌های سطح ایستابی آب زیرزمینی برای واسنجی مدل در ۱۶ پیژومتر مورد استفاده قرار گرفت.

جدول ۱- معیارهای ارزیابی مدل MODFLOW

Table 1. MODFLOW model evaluation criteria		
Peizometer	RMSE (meter)	r (Dimensionless)
1	0.15	0.94
2	0.12	0.92
3	0.10	0.95
4	0.18	0.91
5	0.14	0.93
6	0.13	0.92
7	0.11	0.94
8	0.12	0.93
9	0.16	0.90
10	0.13	0.91
11	0.12	0.92
12	0.14	0.91
13	0.15	0.90
14	0.11	0.95
15	0.13	0.93
16	0.11	0.96

همان‌طور که در جدول ۱ مشخص است، مدل MODFLOW عملکرد مناسبی در بازتولید سطح ایستابی آب زیرزمینی داشته و حساس‌ترین پارامترها شامل هدایت هیدرولیکی، نرخ تغذیه و شرایط مرزی جریان می‌باشند. نتایج اولیه نشان دادند که سطح ایستابی در بخش‌های شمال غربی دشت به‌طور تقریبی پایدار است، در حالی که در جنوب و جنوب شرقی، کاهش قابل توجهی

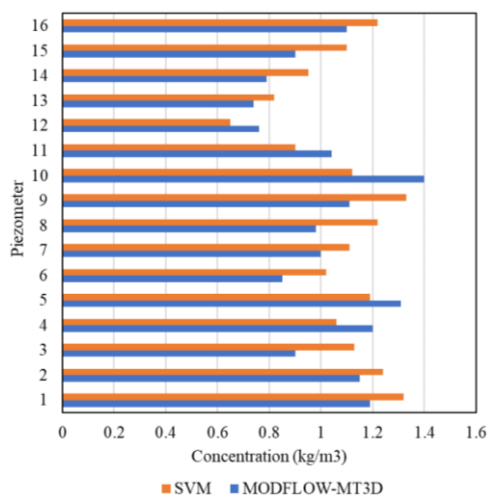


Figure 2. Display of chlorine concentration in a sample piezometer

شکل ۲- نمایش غلظت کلر در یک پیزومتر نمونه

#### ۴- نتیجه گیری

در این مطالعه، برای شبیه سازی انتقال یون کلر در آبخوان دشت قم از مدل هیدرودینامیکی MODFLOW استفاده شد. مدل برای یک دوره شش ماهه واسنجی و ارزیابی شد و عملکرد آن در پیش بینی جریان آب زیرزمینی و شرایط ایستابی، قابل قبول بود. انتخاب یون کلر به عنوان شاخص شوری مناسب بود، زیرا این یون توسط محققان به عنوان ایده آل ترین شاخص برای مدل سازی معادلات انتقال املاح شناخته می شود.

برای پیش بینی غلظت کلر از مدل یادگیری ماشین SVM بهره گرفته شد. پارامترهای ورودی مدل شامل عرض و طول جغرافیایی پیزومتر، سطح ایستابی آب زیرزمینی، غلظت کلر ماه قبل و غلظت تغذیه شده از سطح بود و خروجی مدل، غلظت کلر تعیین شد. مدل SVM منتخب دارای هسته مناسب و پارامترهای بهینه بود که عملکرد آن در مرحله آزمون با ضریب همبستگی ۰/۶۵ و خطای ۰/۱۷ نشان داده شد.

نتایج شبیه سازی MODFLOW و پیش بینی SVM برای یک ماه و تمامی پیزومترها مقایسه شد. مقادیر  $MSE$  و ضریب همبستگی به ترتیب ۰/۰۳ کیلوگرم بر متر مکعب و ۶۵ درصد به دست آمد که نشان دهنده تطابق مناسب و

جدول ۲- معیارهای عملکرد SVM

Table 2. SVM performance metrics

Dataset	$MSE$ (kg/m <sup>3</sup> )	$NMSE$ (Dimensionless)	$r$ (Dimensionless)
Training	0.024	0.70	0.95
Validation	0.026	0.72	0.93
Test	0.028	0.74	0.91

برای کاهش پیچیدگی محاسباتی و پیش بینی سریع تر غلظت کلر، داده های خروجی MT3D به عنوان ورودی به SVM آماده شد. پارامترهای ورودی شامل مختصات پیزومتر، سطح ایستابی، غلظت ماه قبل و میزان تغذیه کلر از سطح بود.

نتایج جدول ۲ نشان می دهند که SVM قادر است روند زمانی و مکانی غلظت کلر را با دقت مناسب پیش بینی کند.

اگرچه شبکه SVM قادر به پیش بینی دقیق نوسانات کوچک نیست، اما برای اهداف مدیریتی و شناسایی مناطق بحرانی مناسب است.

#### ۳-۳- مقایسه MODFLOW و SVM

برای ارزیابی عملکرد ترکیبی، غلظت کلر پیش بینی شده توسط SVM با داده های مدل عددی MODFLOW برای یک ماه، مقایسه شد (شکل ۲). نتایج نشان می دهند که SVM توانسته است تغییرات مکانی و زمانی یون کلر را با دقت بالا بازتولید کند. مقادیر معیارهای مقایسه از قبیل مقدار  $MSE$  و ضریب همبستگی به ترتیب ۰/۰۳ کیلو گرم بر مترمکعب و ۶۵ درصد است.

نتایج نشان می دهند که SVM به عنوان یک ابزار سریع و کم هزینه، جایگزین مناسبی برای مدل عددی کامل MODFLOW در پیش بینی کیفیت آب زیرزمینی است.

## ملاحظات اخلاقی

### پیروی از اصول اخلاق پژوهش

نویسندگان اصول اخلاقی را در انجام و انتشار این پژوهش علمی رعایت نموده و این موضوع مورد تأیید ایشان است.

### مشارکت نویسندگان

محمد عامل‌صادقی محاسبات را انجام داد و روش‌های تحلیلی را تأیید کرد. ایشان بر یافته‌های این پژوهش نظارت داشت و نتایج را بحث نمود و در نسخه نهایی مقاله مشارکت داشت.

### تعارض منافع

بنا بر اظهار نویسندگان این مقاله تعارض منافع ندارد.

### حامی مالی

این پژوهش هیچ‌گونه کمک هزینه خاصی دریافت نکرده است.

### سپاسگزاری

از داوران محترم به‌خاطر ارائه نظرهای ساختاری و علمی سپاسگزاری می‌شود.

اعتبار پیش‌بینی مدل SVM است. این نتیجه بیانگر آن است که ترکیب مدل MODFLOW و SVM می‌تواند ابزاری مؤثر برای مدیریت کیفیت آب زیرزمینی در دشت قم باشد.

نمونه‌برداری کیفی آب زیرزمینی دشت قم به‌صورت پراکنده و نامنظم انجام شده و داده‌های پیوسته و بلندمدت برای دوره طولانی‌تر در دسترس نبوده است.

هدف اصلی در تحقیق حاضر نشان‌دادن قابلیت ترکیب مدل فیزیکی و داده‌محور بود، نه ارائه یک مدل عملیاتی بلندمدت. نتایج (ضریب همبستگی ۰/۹۱) نشان می‌دهد روش در همین بازه کوتاه کارآمد است.

با جمع‌آوری داده‌های کیفی بیش‌تر در ماه‌های آتی، می‌توان مدل را برای بازه‌های زمانی بلندمدت (چندساله) بازآموزی کرد که به‌طور قطع عدم قطعیت پیش‌بینی کاهش خواهد یافت.

## References

- [1] Custodio E. Aquifer overexploitation: What does it mean? *Hydrogeology Journal*. 2002; 10: 254-277. <https://doi.org/10.1007/s10040-002-0180-7>.
- [2] Gleeson T, Wada Y, Bierkens MF, van Beek LPH. Water balance of global aquifers revealed by groundwater footprint. *Nature*. 2012; 488: 197-200. <https://doi.org/10.1038/nature11295>.
- [3] Harbaugh AW. MODFLOW-2005, the US Geological Survey modular ground-water model: the ground-water flow process. *US Geological Survey Techniques and Methods, Book 6, Chapter A16*. 2005.
- [4] Anderson MP, Woessner WW, Hunt RJ. *Applied Groundwater Modeling: Simulation of Flow and Advective Transport*. 2nd edition. Academic Press; 2015. <https://doi.org/10.1016/C2010-0-67111-3>.
- [5] Vapnik VN. *The Nature of Statistical Learning Theory*. 2nd edition. Springer; 1995. <https://doi.org/10.1007/978-1-4757-2440-0>.
- [6] Kavzoglu T, Mather PM. The use of support vector machines in land cover classification. *European Journal of Remote Sensing*. 2003; 37: 173-179. <https://doi.org/10.1080/0143116031000115539>.
- [7] Zhang Y, Zhang L, Zhao P, Sun W. Groundwater quality prediction using support vector machine and MODFLOW: a case study in China. *Hydrogeology Journal*. 2017; 25: 1837-1851. <https://doi.org/10.1007/s10040-017-1605-7>.
- [8] Li X, Zhang H, Zhang L, Liu J. Coupling MODFLOW and SVM for groundwater quality prediction under scarce data conditions. *Journal of Hydrology*. 2018; 561: 1-14. <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2018.03.002>.

- [9] Chen Y, He L, Gao H, Wang Y. Integration of MODFLOW and data-driven models for groundwater quality simulation. *Environmental Modelling & Software*. 2020; 126: 104655. <https://doi.org/10.1016/j.envsoft.2020.104655>.
- [10] Attea ZH, Hassan WH, and Al-Shammari MH. Integration of MODFLOW and deep learning models for groundwater level prediction. *Results in Engineering*. 2025; 27: 106268. <https://doi.org/10.1016/j.rineng.2025.106268>.
- [11] Rodrigo-Illari J, Cassiraga E, Rodrigo-Clavero ME, Escrivá-Benito L. Coupled MODFLOW–MT3DMS simulation of nitrate transport in the Plana de Valencia coastal aquifer (Spain): calibration to monitoring wells and implications for groundwater–wetland interactions. In: EGU General Assembly 2026, Vienna, Austria. 2026. <https://doi.org/10.5194/egusphere-egu26-10368>.
- [12] Sadeghirad MA. Qualitative and contamination studies of groundwater resources in the Qom study area, Volume 3: Hydrogeological studies. Qom: Qom Regional Water Company; 2006.
- [13] Samani JM, Yari R. Spatiotemporal analysis of groundwater salinity using kriging. In: Proceedings of the 7th Hydraulic Conference, Tehran; 2008.
- [14] Siadati Moghadam M. Contaminant transport in aquifers: Theory and applications. Tehran: Water Research Institute; 2004.
- [15] Zheng C, Wang P. MT3D: A modular three-dimensional transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems. *Advances in Water Resources*. 1999; 22(4): 361-382. [https://doi.org/10.1016/S0309-1708\(98\)00055-6](https://doi.org/10.1016/S0309-1708(98)00055-6).
- [16] Gelhar LW, Axness CL. Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers. *Water Resources Research*. 1983; 19(1): 161–180. <https://doi.org/10.1029/WR019i001p00161>.
- [17] Vapnik V. The nature of statistical learning theory. 2nd ed. New York: Springer; 1998.
- [18] Legates DR, McCabe GJ. Evaluating the use of “goodness-of-fit” measures in hydrologic and hydroclimatic model validation. *Water Resources Research*. 1999; 35(1): 233–241. <https://doi.org/10.1029/1998WR900018>.
- [19] Dawson CW, Wilby RL. Hydrological modelling using artificial neural networks. *Progress in Physical Geography*. 2001; 25(1): 80-108. <https://doi.org/10.1177/030913330102500106>.
- [20] Hastie T, Tibshirani R, Friedman J. *The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction*. 2nd edition. Springer; 2009. <https://doi.org/10.1007/978-0-387-84858-7>.