

شناسایی گستره شوری در سفره آب زیرزمینی با استفاده از روش متمرکز بر پیش‌بینی (PFA) و پی‌جویی ژئوالکتریکی

ابوالفضل رضائی^{۱*} و فرشته سلیمانی^۲

^۱ استادیار، دانشکده علوم زمین، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان، ایران
^۲ دانشجوی کارشناسی ارشد ژئوفیزیک، دانشکده علوم زمین، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان، ایران

(دریافت: ۱۴۰۰/۰۱/۱۴، پذیرش: ۱۴۰۰/۰۵/۰۱)

چکیده

در دهه‌های اخیر کاربرد هیدروژئوفیزیک در مطالعه آبخوان‌ها افزایش چشمگیری یافته است، اما هنوز مقادیر کم آلودگی (نظیر شوری) حاصل از تبدیل مدل‌های ژئوفیزیکی به مدل‌های هیدروژئولوژیک، که با روابط پتروفیزیکی انجام می‌شود، دقت کافی را ندارد. یکی از دلایل اصلی این موضوع، نقاط ضعف مرتبط با منظم‌سازی موجود در مدل‌سازی وارون ژئوالکتریک است. این تبدیل‌ها در شرایط پیچیده مانند محیط‌های ناهمگن عدم قطعیت زیادی دارند. در این مطالعه سعی شده است با روش متمرکز بر پیش‌بینی PFA و بدون نیاز به مدل‌سازی وارون کلاسیک ژئوالکتریک، تکامل زمانی و گستره مکانی ابر آلودگی حاصل از تزریق شوری در یک آبخوان ناهمگن مصنوعی با استفاده از مقادیر مقاومت الکتریکی ظاهری شناسایی و مدل شود. ابتدا ۵۰۰ سری هدایت هیدرولیکی ناهمگن مختلف برای یک آبخوان مصنوعی متناسب با خاک ماسه لومی با روش شبیه‌سازی گاوسی متوالی مدل شد. در مرحله بعد، با استفاده از مدل‌سازی جریان و انتقال آلودگی و سپس مدل‌سازی پیشرو ژئوالکتریکی، ۵۰۰ سری مقادیر مقاومت ویژه ظاهری به‌طور جداگانه متناسب با ۵۰۰ سری هدایت هیدرولیکی محاسبه شد. در ادامه، با تحلیل همبستگی کانونی بین داده‌های مقاومت ویژه ظاهری و داده‌های غلظت آلودگی (داده آموزش) یک رابطه خطی در فضای ابعاد یافته برقرار شد. به دلیل دقت زیاد رابطه خطی به‌دست‌آمده، توزیع پسین داده‌های ابر آلودگی (داده پیش‌بینی) با استفاده از رگرسیون روند گاوسی به‌طور مستقیم نمونه‌گیری شد. نتایج از همخوانی خوبی با داده‌های غلظت آلودگی اولیه برخوردار هستند. این مطالعه نشان داد روش PFA علاوه بر گستره مکانی و تکامل زمانی ابر آلودگی، توانسته است حتی مقادیر بیشینه غلظت آلودگی را نیز با دقت خوبی مدل‌سازی کند.

واژه‌های کلیدی: مدل‌سازی ژئوالکتریک، روش PFA، آبخوان ناهمگن، ابر آلودگی، شوری

۱ مقدمه

در طول چند دهه گذشته، هیدروژئوفیزیک که تخصصی بین رشته‌ای است، با استفاده از پی‌جویی‌های ژئوفیزیکی کمک فراوانی به درک و شناسایی بهتر فرایندهای هیدروژئولوژیکی کرده است (هرمانز و همکاران، ۲۰۱۶). یکی از کاربردهای تازه و مهم روش‌های ژئوفیزیکی در مطالعات هیدروژئوفیزیکی، شناسایی ابر آلودگی در آبخوان و مشخصات هیدرولیکی زیرسطحی است (بینلی و همکاران، ۲۰۱۵ و لیند و دوچ، ۲۰۱۶). روش‌های ژئوفیزیکی در مقایسه با برداشت مستقیم و صحرایی داده‌های هیدروژئولوژیکی همانند حفر چاه‌های عمیق مشاهده‌ای و برداشت منظم و تحلیل نمونه‌های آب به هزینه کمتری نیاز دارند (هرمانز و همکاران، ۲۰۱۸). به علاوه، داده‌های هیدروژئولوژیکی بیشتر نماینده یک نقطه یا منطقه با شعاع کم در اطراف چاه مشاهده‌ای هستند (رضایی و همکاران، ۲۰۲۰)، در حالی که تصاویر توموگرافی حاصل از روش‌های ژئوالکتریکی می‌توانند یک نقشه دو یا سه بعدی (برحسب نوع داده‌برداری و مدل‌سازی) در مقیاس کل محدوده آبخوان را در اختیار پژوهشگران و کاربران قرار دهند.

در میان روش‌های هیدروژئوفیزیکی، استفاده از روش‌های الکتریکی مبتنی بر زمان-گذر (time-lapse) بسیار بیشتر گسترش یافته است (سینگا و همکاران، ۲۰۱۵). مقاومت ویژه الکتریکی بسیاری از سیالات منفذی در محیط‌های زمین‌شناسی به حجم سیال موجود و میزان هدایت الکتریکی ویژه آن سیال بستگی دارد؛ بنابراین روش‌های الکتریکی گذر زمان در عمل برای بررسی فرایندهای دینامیکی نظیر تغییرات میزان اشباع‌شدگی در منطقه تهویه (کواستل و همکاران، ۲۰۰۸)، انتقال آلودگی (آراتو و همکاران، ۲۰۱۵)، انتقال گرما (هرمانز، ۲۰۱۴) و چگونگی پاک‌سازی آبخوان‌ها از آلودگی (مسی و همکاران، ۲۰۱۶) بسیار مناسب هستند. هدف از مطالعات

هیدروژئوفیزیک تنها تخمین تغییر در مقاومت ویژه ناشی از این فرایندهای فیزیکی نیست، بلکه بررسی تغییر در میزان غلظت این فرایندها نیز هست. شناسایی چگونگی توزیع زمانی-مکانی این فرایندهای فیزیکی برای اهداف مدیریتی و پیش‌بینی منابع آب، کشاورزی یا زمین‌گرایی بسیار مفید است.

مرسوم‌ترین راهبرد برای تبدیل پارامترهای ژئوفیزیکی به خصوصیات فیزیکی یا هیدروژئولوژیک استفاده از روابط پتروفیزیکی تجربی، آزمایشگاهی و صحرایی است (سینگا و همکاران، ۲۰۱۵). پارامترهای ژئوفیزیکی اغلب با مدل‌سازی وارون منظم‌شده تعینی (deterministic regularized) به دست می‌آیند (هرمانز و همکاران، ۲۰۱۶). به هر حال روش منظم‌شده تعینی معمولاً به توزیع‌های آغشته به خطا برای پارامترهای فیزیکی و هیدروژئولوژیکی منجر می‌شود (سینگا و همکاران، ۲۰۱۵). مدل‌سازی وارون ژئوفیزیکی یکتا نیست و وارون‌سازی تعینی به دلیل فراهم‌آوری (over-smoothing) تصاویر ژئوفیزیکی، گاهی مقادیر پارامترهای هیدروژئولوژیکی را کمتر یا بیشتر از مقادیر واقعی برآورد می‌کند (مولر و همکاران، ۲۰۱۰). مسئله مهمی که هنگام استفاده از وارون‌سازی تعینی کلاسیک پیش می‌آید، تغییر در تباین فضایی روش وارون‌سازی است که مانع از استفاده مستقیم روابط پتروفیزیکی در کارهای صحرایی می‌شود (دی-لویس و همکاران، ۲۰۰۵). برای غلبه بر این نقص، مویسی و همکاران (۲۰۰۵) و سینگا و مویسی (۲۰۰۶) استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو را برای به دست آوردن روابط پتروفیزیکی سلول-به-سلول پیشنهاد کردند. همچنین اور و همکاران (۲۰۱۳) روش POD را معرفی کردند. هنوز محدودیت‌های مربوط به منظم‌سازی در همه این روش‌ها وجود دارد (هرمانز و همکاران، ۲۰۱۶).

روش دیگر برای غلبه بر نقص تغییر در تفکیک فضایی هنگام وارون‌سازی، استفاده از خصوصیات آماری مربوط

در PFA، از یک چارچوب کاهش ابعاد برای محاسبه درست‌نمایی (likelihood) استفاده می‌شود. درست‌نمایی به جای پارامترهای مدل، بر اساس متغیرهای فیزیکی فرمول‌بندی می‌شود. پیش از این، روش PFA را ساتیجا و کارس (۲۰۱۵) برای پیش‌بینی آلودگی در یک چاه پمپاژ به کاربرند. همچنین هرمانز و همکاران (۲۰۱۶ و ۲۰۱۸) از آن روش با تلفیق داده‌های ژئوفیزیکی برای تخمین تغییرات گرمایی یک آبخوان در بلژیک استفاده کردند. در این مطالعه از PFA در تلفیق با داده‌های ژئوالکتریکی برای مدل‌سازی تکامل زمانی و گسترش مکانی ابر آلودگی حاصل از تزریق نمک در یک سامانه آب زیرزمینی ناهمگن استفاده خواهد شد.

۲ روش تحقیق

در این تحقیق برای به‌دست آوردن داده‌های ورودی قبل از اجرای مدل PFA ابتدا مراحل زیر انجام شد:

الف) مدل‌سازی و تولید ۵۰۰ سری میدان هدایت هیدرولیکی ناهمگن برای یک آبخوان به ابعاد ۳۰ در ۳۰ متر با سلول‌های ۱ در ۱ متر با استفاده از روش شبیه‌سازی گاوسی متوالی (sequential Gaussian simulation)؛

ب) مدل‌سازی هم‌زمان جریان و ابر آلودگی (در اینجا شوری) در محدوده آبخوان به تعداد ۵۰۰ سری برای هر کدام از شش مرحله زمانی (۰/۰۵، ۰/۱۰، ۰/۲۰، ۰/۵، ۱ و ۵ سال) در محیط متلب با تولید ۳۰۰۰ ابر آلودگی؛

ج) تبدیل داده‌های غلظت آلودگی به‌دست‌آمده به داده‌های مقاومت ویژه با استفاده از فرمول آرچی (آرچی، ۱۹۴۴)؛

د) مدل‌سازی پیشرو ژئوالکتریکی با استفاده از آرایه دوقطبی-دوقطبی و یافتن مقاومت ویژه ظاهری در محدوده آبخوان (اجرای یک مدل پیشرو به ازای ۳۰۰۰ ابر آلودگی).

پس از فراهم شدن مقادیر ورودی که شامل ۵۰۰ سری

به پارامترهای فیزیکی است که ممکن است برای شناسایی تأثیر همرفت و پراکنش کافی باشد (کواستل و همکاران، ۲۰۰۸). مسئله وارون می‌تواند برحسب هندسه ابر آلودگی فرمول‌بندی شود (لالوی و همکاران، ۲۰۱۲). در این حالت، تعداد پارامترهای مدل با استفاده از اولین ممان‌های فضایی توزیع پارامتر ژئوفیزیکی کاهش می‌یابد که این موضوع با فراتخمین کردن مسئله وارون، استفاده مؤثر از روش مونت کارلوی زنجیره مارکوف را فراهم می‌کند (لالوی و همکاران، ۲۰۱۲). به‌هرحال به‌کارگیری تعداد محدودی از ممان‌های فضایی برای وارون‌سازی سبب می‌شود دقت مدل‌سازی در شرایط زمین‌شناسی پیچیده کاهش یابد (هرمانز و همکاران، ۲۰۱۶). در چنین وضعیتی، یک راه، استفاده از همبستگی در زمان، بین داده‌های ژئوفیزیکی و هیدروژئولوژیکی است. سری زمانی و تحلیل طیفی (spectral analysis) می‌تواند اطلاعات کمی از فرایندهای دینامیکی رخ داده در آبخوان‌ها را فراهم سازد (والین و همکاران، ۲۰۱۳). البته این روش نیز هنوز برخی از محدودیت‌های مربوط به خود وارون‌سازی نظیر تفکیک متغیر در بخش‌های مختلف محیط و نبود داده کافی از وضعیت واقعی هیدروژئولوژیکی را دربردارد (هرمانز و همکاران، ۲۰۱۶).

در این پژوهش سعی بر این است با بهره‌گیری از روش PFA (Prediction-Focused Approach) و بدون نیاز به مدل‌سازی وارون کلاسیک، گسترش فضایی و زمانی ابر آلودگی شوری در یک آبخوان مصنوعی با استفاده از داده‌های ژئوالکتریکی تعیین شود. به جای استفاده از روش‌های مبتنی بر منظم‌سازی، سعی می‌شود گسترش مکانی و تکامل زمانی ابر آلودگی به‌طور مستقیم از توپوگرافی مقاومت ویژه الکتریکی گذر زمان و بدون هیچ تکراری (iteration) به‌دست‌آید. برای این کار یک مدل آماری چندمتغیره مستقیم بین مقادیر مقاومت ظاهری (متغیر اولیه) و پارامتر فیزیکی مورد نظر (داده پیش‌بینی) تولید شد.

۶- برگرداندن توزیع‌های ابر آلودگی به دست آمده در فضای کاهش ابعاد یافته به فضای اولیه با ابعاد بزرگ. مراحل ۱ تا ۳ مرحله آموزش هستند و رابطه بین متغیرهای داده اولیه و پیش‌بینی یاد گرفته می‌شود. مراحل ۴ تا ۶ مرحله پیش‌بینی هستند و توزیع پسین کامل مقادیر آلودگی بر اساس داده‌های اولیه (مقادیر مقاومت ویژه) تعیین می‌شود. در ابتدا ۵۰۰ سری میدان هدایت هیدرولیکی ناهمگن با میانگین $\text{Log}K = -4/6$ (متناسب با خاک ماسه لومی) برای محدوده آبخوان با استفاده از شبیه‌سازی گاوسی تصادفی دو بعدی دوچ و جورنل (۱۹۹۲) تولید شد. تغییرات فضایی میدان هدایت هیدرولیکی با استفاده از یک مدل واریوگرام نمایی همسانگرد توصیف می‌شود. یکی از نمونه‌های هدایت هیدرولیکی در شکل ۱ ارائه شده است.

به منظور مدل‌سازی جریان آب زیرزمینی از قانون داری برای شرایط جریان هیدرولیکی غیرچسبنده و بی‌اصطکاک (non-frictional) استفاده شده است (ویتاگر، ۱۹۸۶):

(۱)

$$K^{-1}\nu + \nabla p = 0; \quad \nabla \cdot \nu = 0; \quad \nabla \cdot (K\nabla p) = 0 \text{ on } \Omega$$

که ν سرعت حرکت آب، K تانسور هدایت هیدرولیکی و

داده آلودگی و ۵۰۰ سری داده مقاومت ویژه است، مدل PFA اجرا شد. هدف اصلی از PFA، تخمین توزیع پسین (posterior) آلودگی (h) بدون تبدیل صریح داده‌های ژئوفیزیکی مشاهده‌ای (d_{obs}) به داده غلظت آلودگی است. مراحل زیر بر اساس روش کار هرمانز و همکاران (۲۰۱۳) برای مدل PFA انجام شد:

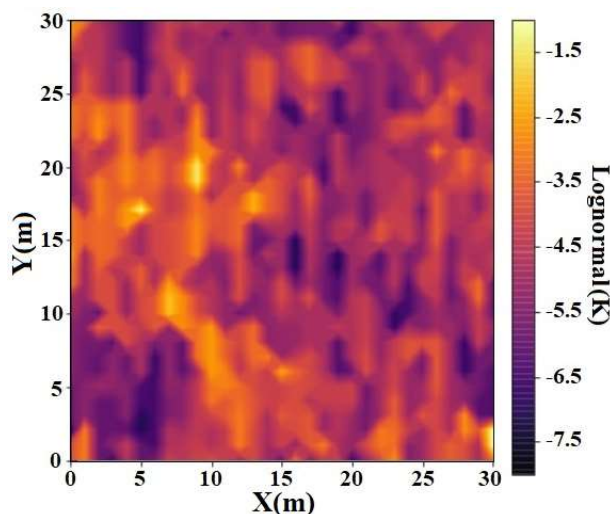
۱- استفاده از داده‌های مقاومت ویژه (داده اولیه) و ابر آلودگی (متغیر پیش‌بینی) به عنوان داده‌های مورد نیاز اولیه (آغازین)؛

۲- کاهش ابعاد داده‌های مقاومت ویژه و آلودگی با استفاده از تحلیل مؤلفه‌های اصلی؛

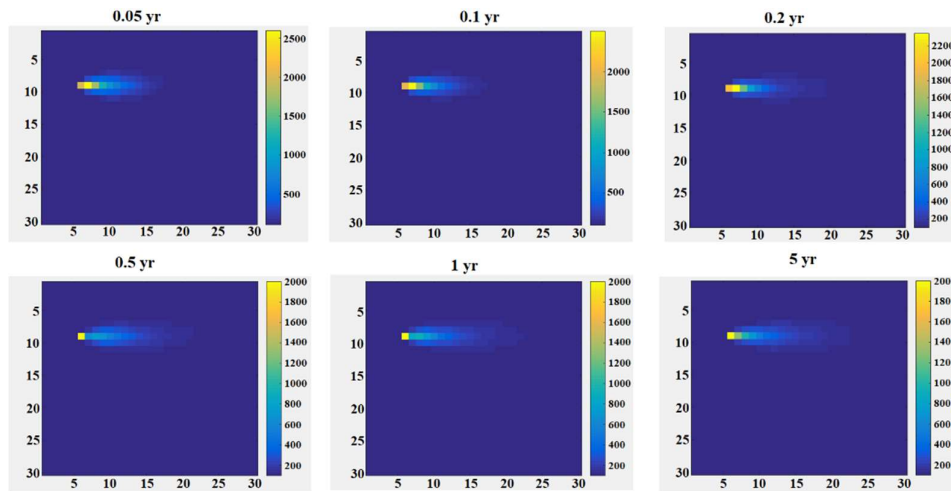
۳- تحلیل همبستگی کانونی برای برقرار کردن همبستگی چندمتغیره بین داده اولیه و متغیر پیش‌بینی؛

۴- اجرای رگرسیون روند گاوسی (Kriging) برای داده‌های اولیه جهت به دست آوردن ماتریس‌های میانگین شرایطی و کوواریانس متغیر پیش‌بینی (در فضای مؤلفه کانونی)؛

۵- نمونه‌گیری با مدل رگرسیون گاوسی؛



شکل ۱. لگاریتم میدان هدایت هیدرولیکی ناهمگن با میانگین $-4/6$ حاصل از شبیه‌سازی گاوسی متوالی.



شکل ۲. نمونه‌ای از مدل‌های آلودگی شوری درون آبخوان مصنوعی برای هرکدام از شش مرحله زمانی از ۰/۰۵ تا ۵ سال. راهنمای رنگی بیانگر مقدار غلظت آلودگی برحسب میلی‌گرم بر لیتر است.

برای هرکدام از شش مرحله زمانی را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشخص است، با افزایش زمان تزریق، ابر آلودگی به تدریج در حال گسترش است.

مدل ابر شوری با استفاده از رابطه آرچی به هدایت الکتریکی ویژه تبدیل شد (آرچی، ۱۹۴۴):

$$\sigma_s = \sigma_f \phi^m \quad (3)$$

که m و ϕ به ترتیب عامل سیمان‌شدگی و تخلخل محیط آبخوان هستند. رابطه زیر برای شوری برقرار است (سولزباچر و همکاران، ۲۰۱۲):

$$\sigma_f = 1 / (\text{Conc} \times 0.1 + 0.01)$$

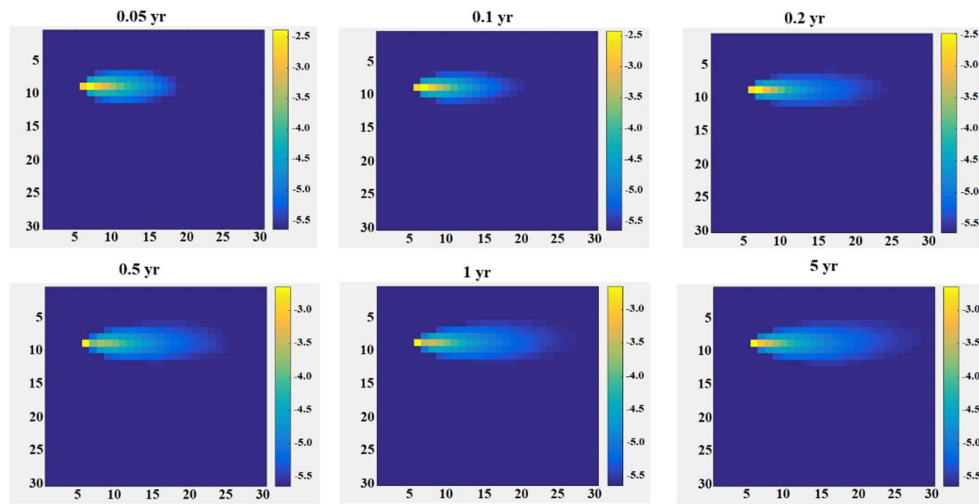
از آنجا که جنس محیط ماسه لومی است، در این مطالعه $1/3$ از آنجا که $m = 0.33$ انتخاب شده است (آور و همکاران، ۲۰۱۳). در شکل ۳ نمونه‌ای از تصاویر هدایت الکتریکی ویژه برای هرکدام از شش مرحله زمانی ارائه شده است. مقادیر هدایت الکتریکی در مقیاس لگاریتمی نشان داده شده است.

در مرحله بعد برای به دست آوردن مقادیر مقاومت ویژه ظاهری، از مدل پیشرو ژئوالکتریکی استفاده شد. میدان پتانسیل الکتریکی سه‌بعدی حاصل از یک جریان الکتریکی

p پتانسیل هدایت هیدرولیکی است. در اینجا از شرایط مرزی دیرینله و شیب هیدرولیکی متناسب با شرایط واقعی (۰/۰۱) استفاده شده است. حرکت دینامیک ذرات آلودگی (اینجا شوری) $c(p,t)$ در آبخوان با معادله همرفت-انتشار زیر باروش تفاضل محدود مدل شد تا ابر آلودگی در محدوده آبخوان به دست آید (بجتولد و همکاران، ۲۰۱۲):

$$\partial c / \partial t = \nabla \cdot (D \nabla c) - v \cdot \nabla c + Sr \quad (2)$$

Sr بیانگر چشمه آلودگی، D ضریب پراکنش مولکولی $D = \alpha |v|$ و α پراکنش است. ضریب پراکنش در جهت x و y به ترتیب ۳ و ۰/۳۳ متر مربع بر روز انتخاب شد. در حقیقت برای هرکدام از ۳۰۰۰ مدل جریان، یک مدل آلودگی اجرا شد. برای بررسی تکامل زمانی آلودگی، مدل ابر آلودگی در شش مرحله زمانی مختلف (۰/۱۰، ۰/۰۵، ۰/۲۰، ۰/۵، ۱ و ۵ سال) بررسی شد. برای هر مرحله زمانی، ۵۰۰ مدل جریان آب زیرزمینی و انتقال آلودگی متناسب با ۵۰۰ سری هدایت هیدرولیکی ناهمگن تهیه شد. نقطه تزریق در $x = 5$ و عمق ۸ متری با میزان تزریق ثابت ۲۰۰۰ میلی‌گرم بر لیتر قرار دارد. شکل ۲ یک نمونه از ابر آلودگی



شکل ۳. نقشه‌های هدایت ویژه به‌دست‌آمده برای هر کدام از ابرهای آلودگی ارائه‌شده در شکل ۲. مقادیر هدایت ویژه در راهنمای رنگی در مقیاس لگاریتم است.

به رابطه زیر تبدیل می‌شود (پیدلیسکی و نایت، ۲۰۰۸):

$$\vec{u} = A(\sigma, k_y^2)^{-1} q \quad (۶)$$

از آنجاکه به خود پتانسیل‌ها نیاز است نه پتانسیل‌های تبدیل‌شده، در نهایت، وارون تبدیل کسینوسی فوریه اعمال می‌شود تا خود مقادیر پتانسیل (u) به‌دست‌آید (پیدلیسکی و نایت، ۲۰۰۸). در این مطالعه از کد متلب پیدلیسکی و نایت (۲۰۰۸) و آرایه دوقطبی - دوقطبی با فاصله الکتروودی ۱ متر برای الکترودهای پتانسیل استفاده شده است. در کل، از سه جفت الکتروود جریان برای تزریق الکتروسیسته به درون زمین استفاده شده است. همه الکتروودها در عمق ۱۲ سانتی‌متری قرار داده شدند. جفت الکترودهای جریان روی محور x به‌ترتیب در نقاط ۰/۵، ۱۵، ۱۵ و ۲۹/۵، ۰/۵ و ۲۹/۵ متر قرار داده شدند.

در روش PFA برای برقرار کردن یک مدل آماری بین داده‌های اولیه (اینجا مقاومت ویژه ظاهری) و پیش‌بینی (اینجا ابر آلودگی) ابتدا باید یک مجموعه واقعی از هر دو داده برای آموزش مدل در دسترس باشد. تا اینجا کار ۵۰۰ سری از داده‌های مقاومت ویژه ظاهری و داده‌های آلودگی لازم برای هر مرحله زمانی از انتقال آلودگی فراهم

تزریقی، به ساختار هدایت ویژه الکتریکی محیط بستگی دارد که برای شرایط مرزی مناسب می‌توان آن را به صورت زیر تعریف کرد (پیدلیسکی و نایت، ۲۰۰۸):

(۴)

$$-\nabla \cdot \sigma(x, y, z) \nabla \phi(x, y, z) = I(\delta(r - r_+) - \delta(r - r_-))$$

که ϕ میدان پتانسیل الکتریکی، I جریان تزریقی و σ ساختار هدایت الکتریکی ویژه محیط است. r_+ و r_- به‌ترتیب محل الکترودهای جریان مثبت و منفی و $\delta(r - r_+)$ تابع دلتای دیراک است. پس از تبدیل کسینوسی فوریه برای حالت پیشرو، معادله (۴) را می‌توان به شکل ماتریسی نوشت:

$$(D \cdot S(\sigma)G + k_y^2 \cdot S(\sigma)) \vec{u} = A(\sigma, k_y^2) \vec{u} = q \quad (۵)$$

در این مقاله، D و G ماتریس‌های دو بعدی هستند که به‌ترتیب عملگرهای واگرایی و گرادینان را دربردارند. $S(\sigma)$ ماتریس هدایت ویژه الکتریکی، \vec{u} بردار حاوی پتانسیل‌های تبدیل‌شده، $A(\sigma, k_y^2)$ ماتریس عملگر پیشرو و q یک بردار حاوی موقعیت مکانی الکترودهای جریان مثبت و منفی است. برای یافتن پتانسیل‌های تبدیل‌شده جهت مدل هدایت الکتریکی ویژه و عدد موج، معادله (۵)

خطی $a_i^T d^f$ و $b_i^T h^f$ را به حداکثر برساند. ترکیب‌های خطی به‌دست‌آمده را می‌توان به‌صورت d_i^c و h_i^c بیان کرد که همان متغیرهای کانونی d^f و h^f نامیده می‌شوند. ضریب همبستگی بین مقادیر اسکالر n را همبستگی کانونی می‌نامند. بردارهای $a_i(p \times 1)$ و $b_i(q \times 1)$ متعامد هستند. تبدیل کانونی سبب تشکیل دو متغیر کاهش ابعاد یافته d^c و h^c می‌شود هرمانز و همکاران (۲۰۱۶):

$$D^c = d^f A^T; h^c = h^f B^T \quad (9)$$

With $A = [a_1 \dots a_m]$ and $B = [b_1 \dots b_m]$

تبدیل کانونی را می‌توان با تجزیه بردارهای ویژه ماتریس کوواریانس نمونه به‌دست آورد. اگر $p > q$ باشد، این تبدیل وارون‌پذیر است:

$$h^f = B^{-1} h^{cT} \quad (10)$$

در مرحله آخر PFA که ماتریس‌های کاهش ابعاد یافته دوباره به ماتریس‌هایی با ابعاد بزرگ تبدیل می‌شوند، این وارون‌سازی تبدیل ضروری است. اگر روابط خطی با دقت پذیرفتنی بین داده‌های اولیه و متغیر پیش‌بینی برقرار شود، در مرحله بعد رگرسیون روند گاوسی اعمال می‌شود. در اینجا از قانون بیز (Bayes) برای فرمول‌بندی و تخمین توزیع پسین داده‌های h برای برخی از داده‌های مشاهده‌ای d_{obs} استفاده شده است:

$$f_H(h | d_{obs}) = k f_H(h) L(h | d_{obs}) \quad (11)$$

که $f_H(h)$ توزیع آغازین، $L(h | d_{obs})$ تابع درست‌نمایی و k ثابت نسبت است. تحلیل مؤلفه اصلی و تحلیل همبستگی کانونی سبب کاهش ابعاد ماتریس‌های متغیرها (d و h) و ایجاد ماتریس‌های جدید (d^c و h^c) می‌شود. هدف از PFA به‌دست آوردن توزیع پسین است:

$$f_H(h^c | d_{obs}^c) = k f_H(h^c) L(h^c | d_{obs}^c) \quad (12)$$

اگر همبستگی کانونی برای مؤلفه‌های اول متغیرهای کاهش ابعاد یافته به اندازه کافی بزرگ باشد؛ یعنی مؤلفه‌های همبسته d^c و h^c با هم رابطه خطی داشته باشند، رگرسیون

شده است. در عمل، n سری آغازین (اینجا ۵۰۰) از فرایند زیرسطحی m (برای مثال پارامترهای هیدرولیکی آبخوان، تخلخل و گرادیان هیدرولیکی) تولید شد و پاسخ مدل h به فرایند بررسی شده (در اینجا جریان و انتقال آلودگی) شبیه‌سازی شد که به‌طور خلاصه می‌توان نوشت:

$$h = g_H(m) \quad (7)$$

که g_H عملگر مدل پیشرو بر پایه فیزیک مسئله است. پاسخ مدل (h) همان تکامل ابر آلودگی در موقعیت‌های مختلف مکانی I در مراحل مختلف زمانی t درون آبخوان است. در سری‌های آغازین، h یک ماتریس سه بعدی با ابعاد بزرگ $I \times t \times n$ است که همان توزیع آغازین برای متغیر پیش‌بینی است. همان‌طور که تشریح شد، برای هر کدام از ۵۰۰ سری ابر آلودگی در هر یک از شش مرحله زمانی، داده ژئوفیزیکی متناظر (d) با استفاده از معادلات (۴) تا (۶) با کد متلب پیدلیسکی و نایت (۲۰۰۸) محاسبه شد:

$$d = g_D(h, m) \quad (8)$$

مدل پیشرو ژئوالکتریکی است. خروجی این مرحله نیز یک ماتریس سه بعدی $u \times t \times n$ با ابعاد بزرگ است که u ماتریس حاوی مقادیر مقاومت ویژه ظاهری است.

در مرحله بعد، هر دو ماتریس ابعاد بزرگ با استفاده از تحلیل مؤلفه اصلی و در نظر گرفتن مؤلفه‌های اول، به دو ماتریس کوچک‌تر تبدیل شدند. ماتریس‌های حاوی متغیرهای اولیه و پیش‌بینی بعد از کوچک شدن به ترتیب $d^f(p \times 1)$ و $h^f(q \times 1)$ نامیده شدند. به دلیل غیرخطی بودن رابطه بین $d^f(p \times 1)$ و $h^f(q \times 1)$ که ناشی از روابط پتروفیزیکی و وجود معادلات دیفرانسیل جزئی است، در ادامه سعی شد با تحلیل همبستگی کانونی، یک همبستگی چندمتغیره بین متغیرهای داده اولیه و پیش‌بینی برقرار شود. از نظر ریاضی، تحلیل همبستگی کانونی، ضرایب $a_i(p \times 1)$ و $b_i(q \times 1)$ ($i=1, \dots, m$) را به گونه‌ای محاسبه می‌کند که همبستگی بین ترکیب‌های

کانونی، مقدار p بزرگ‌تر از q انتخاب شده است.

داده‌های اولیه شامل یک ماتریس $6 \times 81 \times 500$ است حاصل ۵۰۰ سری مدل پیشرو ژئوالکتریک شامل ۸۱ داده مقاومت ویژه برای شش مرحله زمانی است. جالب توجه این است که ۱۲ بعد اول، بیش از ۹۹/۹۵ درصد از واریانس کل داده‌ها را دربردارد. داده‌های پیش‌بینی در یک ماتریس $6 \times 900 \times 500$ ذخیره شده‌اند که حاصل ۵۰۰ سری مدل آلودگی شامل 30×30 گره مکانی برای هر کدام از شش مرحله زمانی است. ۸ بعد اول بیش از ۹۹/۹۵ درصد از واریانس کل داده‌های آلودگی را دربردارد.

تحلیل همبستگی کانونی بر ماتریس‌های کاهش ابعاد یافته اعمال شد تا همبستگی بین مؤلفه‌های داده‌های اولیه و متغیرهای پیش‌بینی به حداکثر برسد (شکل ۴). همان‌طور که در شکل ۴ مشخص است، ابعاد کاهش یافته در اینجا مناسب و کافی است؛ زیرا میزان ضریب همبستگی برای ۴ بعد اول که حداکثر میزان واریانس را در بر دارند، بیش از ۹۹/۵ درصد است. برای بدهای بعدی یعنی ۵ تا ۷ نیز همبستگی به‌صورت چشمی شکل خطی دارد. این مشاهدات نشان می‌دهد به‌درستی می‌توان از رگرسیون روند گاوسی برای ادامه کار استفاده کرد.

مشابه کار هرمانز و همکاران (۲۰۱۶)، در این مطالعه ۳۰۰ نمونه از توزیع پسین تولید شد و این نمونه‌ها بعداً همگی به فضای فیزیکی اولیه برگردانده شدند. در این فضا ماتریس‌ها ابعاد بزرگی دارند. در شکل ۵ برای هر کدام از شش مرحله زمانی، سه نمونه نشان داده شده است. در مقایسه با میانگین ۵۰۰ سری هر مرحله زمانی (ردیف بالا در شکل ۶) کاملاً مشخص است که علاوه بر گسترش مکانی، حداکثر غلظت آلودگی نیز به‌خوبی مدل شده است. برای مثال مقایسه ابر تکامل زمانی آلودگی نیز با کیفیت مناسب مدل شده است.

روند گاوسی می‌تواند برای حل مسئله و محاسبه h^c از داده‌های مشاهده‌ای d_{obs}^c به‌کار رود. برای مدل کردن رابطه بین d^c و h^c با عملگر مدل پیشرو از رابطه زیر استفاده می‌شود:

$$d^c = Gh^c \quad (13)$$

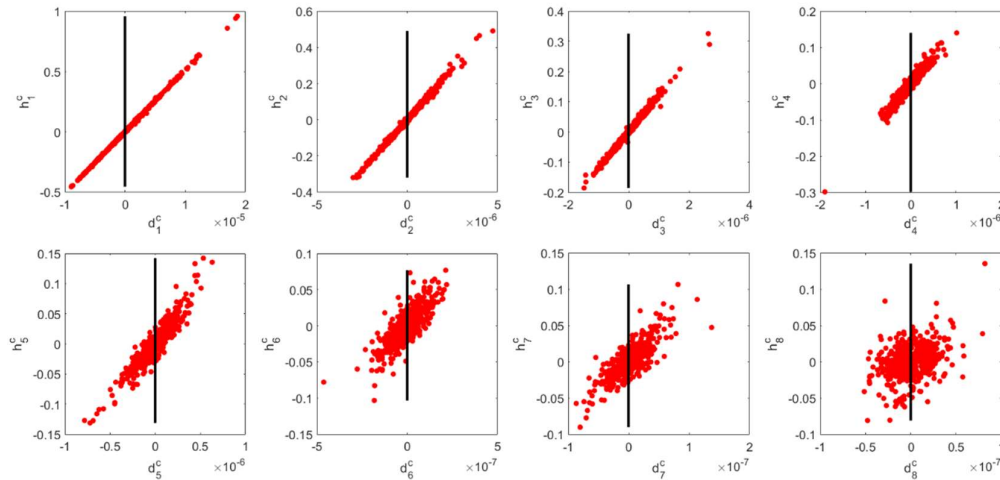
توجه شود که در معادله (۱۳)، فرض بر این است که درست‌نمایی به‌صورت گاوسی چندمتغیره زیر است هرمانز و همکاران (۲۰۱۶):

$$L(h^c | d_{obs}^c) = \exp(-0.5(Gh^c - d_{obs}^c)^T C_c^{-1} (Gh^c - d_{obs}^c))$$

$$\tilde{C}_H^c = G^T C_c^{-1} A + C_{Hc}^{-1} \quad (15)$$

۳ نتایج و بحث

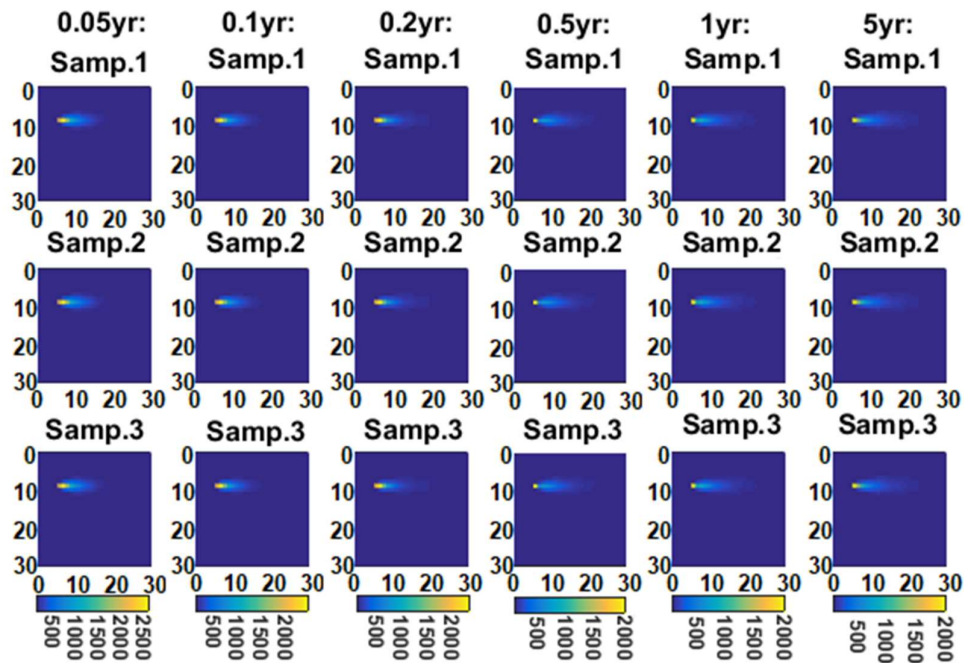
در این مقاله سعی بر این است که بدون اجرای مدل‌سازی ژئوالکتریک و ارون کلاسیک، گسترش مکانی ابر آلودگی در مراحل مختلف زمانی با روش PFA مدل‌سازی شود. در این کار ماتریس سه بعدی حاوی داده‌های آلودگی شوری (نمک) برای شش مرحله زمانی (۰/۰۵، ۰/۱، ۰/۲، ۰/۵، ۱ و ۵ سال) به‌عنوان داده پیش‌بینی و ماتریس سه بعدی حاوی داده‌های مقاومت ویژه ظاهری حاصل از مدل پیشرو ژئوالکتریک بر داده‌های شوری به‌عنوان داده اولیه وارد مدل PFA شد. تعداد ابعاد داده‌های اولیه (مقاومت ویژه) و داده‌های پیش‌بینی (آلودگی) از ۵۰۰ به ترتیب به ۱۲ (p) و ۸ (q) کاهش یافته است. انتخاب این ابعاد بر اساس میزان واریانسی است که این ابعاد پوشش می‌دهد (آور و همکاران، ۲۰۱۳). برای داده‌های پیش‌بینی، ماتریس کاهش ابعاد یافته نظیر سری زمانی در یک نقطه خاص باید بیش از ۹۹ درصد از کل واریانس ماتریس اولیه را تشکیل دهد (ساتیجا و کارس، ۲۰۱۵). در این مطالعه ابعاد انتخاب‌شده ۱۲ و ۸ بیش از ۹۹ درصد از کل واریانس را تشکیل می‌دهند. برای اطمینان از وارون‌پذیری تحلیل همبستگی



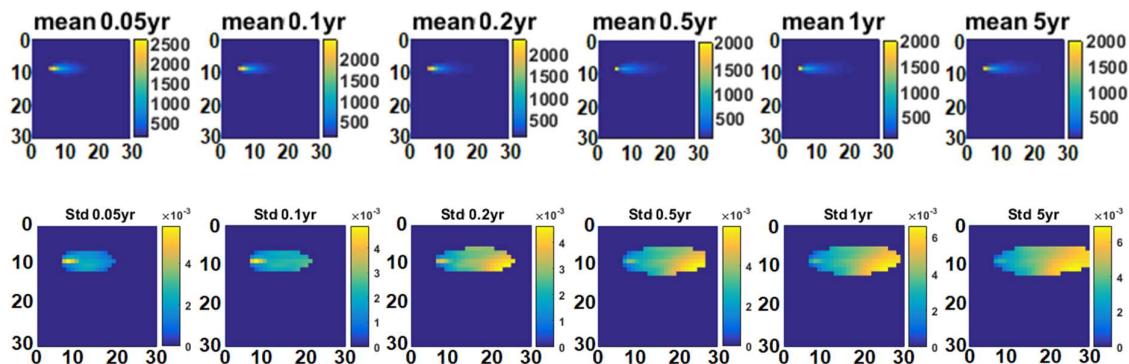
شکل ۴. تحلیل همبستگی کانونی مؤلفه‌های اصلی تغییر در داده‌های مقاومت ویژه ظاهری (۱۲ بُعد) و تغییر در غلظت آلودگی (۸ بُعد). به‌وضوح مشخص است بین مؤلفه‌های اول، رابطه خطی وجود دارد. خط مشکی موقعیت متوسط داده‌های مشاهده‌ای است.

مقایسه با خود مقادیر غلظت آلودگی، انحراف معیارها (راهنمای رنگی) بسیار کوچک هستند که این نشان از درست بودن مدل و کارایی زیاد توموگرافی مقاومت ویژه با روش PFA در مدل‌سازی ابر آلودگی در آبخوان‌ها دارد.

شکل ۶ میانگین و انحراف معیار توزیع پسین در مراحل زمانی مختلف را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشخص است، در هر مرحله زمانی، محدوده‌ای که تحت تأثیر شوری قرار گرفته است، کاملاً در مدل به‌درستی شناسایی شده است.



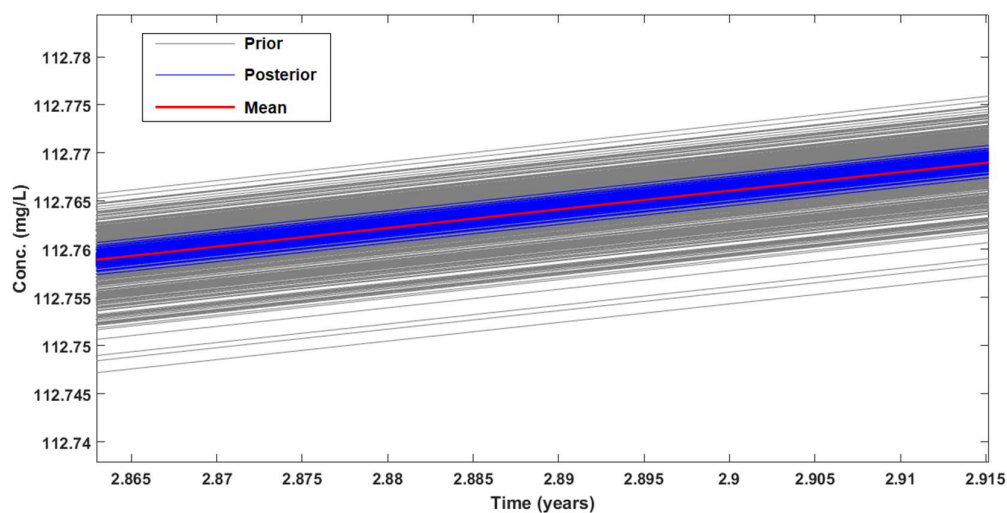
شکل ۵. سه نمونه از ابر آلودگی پسین برای هر مرحله زمانی. هر ستون برای یک مرحله زمانی است. هر مرحله زمانی راهنمای رنگی ویژه خود را دارد.



شکل ۶. میانگین و انحراف معیار توزیع پسین در مراحل زمانی مختلف

نتایج مدل نشان می‌دهد روش PFA به خوبی در کاهش عدم قطعیت توموگرافی مقاومت ویژه مؤثر است. با توجه به تمامی نتایج، روش PFA قادر است به درستی علاوه بر گسترش مکانی-زمانی میزان شوری، بزرگی غلظت شوری بیشینه را نیز به تصویر بکشد. در مقایسه با مدل‌های هیدروژئوفیزیکی کلاسیک که از روش منظم‌سازی استاندارد برای وارون‌سازی داده‌های ژئوفیزیک استفاده می‌کنند، این روش از ویژگی‌های زیر برخوردار است:

جالب توجه اینکه در مراحل زمانی اولیه (۰/۰۵ و ۰/۱ سال) بیشترین میزان انحراف معیار در محل‌هایی است که غلظت آلودگی بیشینه است، اما در مراحل زمانی طولانی‌تر، بیشینه انحراف معیار مربوط به منطقه انتهایی ابر آلودگی است. مقایسه مقادیر آغازین و پسین در مقطعی از زمان در شکل ۷ نشان داده شده است. مقادیر آغازین به صورت یک منطقه باریک، کاملاً در بازه تغییرات مقادیر پسین و در اطراف منحنی میانگین آلودگی قرار دارند که نشان‌دهنده کارایی زیاد روش PFA در مدل‌سازی ابر آلودگی است. در کل،



شکل ۷. مقایسه مقادیر آغازین و پسین در مقطعی از زمان. مقادیر آغازین درون دامنه تغییرات مقادیر پسین قرار دارد که نشان از کارایی زیاد روش PFA در مدل‌سازی ابر آلودگی دارد.

۴ نتیجه‌گیری

در این مطالعه با استفاده از داده‌های هیدروژئولوژیکی و ژئوالکتریکی و به‌کارگیری روش PFA، گستره مکانی و تکامل زمانی ابر آلودگی در آبخوان‌های ناهمگن دو بعدی با استفاده از پی‌جویی‌های مقاومت ویژه زمین شناسایی شده است. نتایج نشان می‌دهد تحلیل‌های مؤلفه اصلی و همبستگی کانونی به‌خوبی توانسته‌اند تنها با ۱۲ و ۸ بُعد از داده‌های مقاومت ویژه و ابر آلودگی به‌جای همه ماتریس داده‌ها و بدون نیاز به مدل‌سازی ژئوالکتریکی و ارون کلاسیک، ابر آلودگی را به‌خوبی و با دقت زیاد مدل کنند. انحراف معیار توزیع‌های پسین به‌دست آمده، بسیار کم و در حدود ۰/۰۰۱ تا ۰/۰۰۶ است. در نهایت، این کار نشان می‌دهد روش PFA در تلفیق با مدل پیشرو ژئوالکتریکی می‌تواند گزینه‌ای مناسب باشد و بدون نیاز به مدل‌سازی و ارون، به‌خوبی برای شناسایی ابر آلودگی در آبخوان‌ها به‌کاربرد تا بتواند با صرف وقت و هزینه کمتر، تصویر مناسبی را از ابر آلودگی درون سامانه ارائه دهد.

منابع

- Arato, A., Boaga, J., Comina, C., De Seta, M., Di Sipio, E., Galgaro, A., Giordano, N., and Mandrone, G., 2015, Geophysical monitoring for shallow geothermal applications—Two Italian case histories: First Break, **33**(8), 75–79.
- Archi, G. E., 1942. The electrical resistivity log as an aid in determining some reservoir characteristics. *Trans. A.I.M.E.*, 146, 54–62.
- Bechtold, M., Vanderborght, J., Weihermüller, L., Herbst, M., Günther, T., Ippisch, O., Kasteel, R., and Vereecken, H., 2012, Upward transport in a three-dimensional heterogeneous laboratory soil under evaporation conditions: *Vadose Zone Journal*, **11**.
- Binley, A., Hubbard, S. S., Huisman, J. A., Revil, A., Robinson, D. A., Singha, K., and Slater, L. D., 2015, The emergence of hydrogeophysics for improved understanding of subsurface processes over multiple scales: *Water Resources Research*, **51**, 3837–3866.
- Day-Lewis, F. D., Singha, K., and Binley, A., 2005, Applying petrophysical models to radar travel time and electrical resistivity

(الف) تصادفی است؛ یعنی حلی که ارائه می‌شود تنها یک حل تعینی نیست بلکه حاصل مجموعه‌ای از توزیع‌های پسین کامل است؛

(ب) PFA پارامترهای ژئوفیزیکی محیط را حل نمی‌کند بلکه توزیع مکانی و زمانی ویژگی‌های فیزیکی پدیده مورد نظر را مدل می‌کند؛

(ج) در این روش نیازی نیست که عبارت منظم‌سازی، اصلی‌ترین مانع کمی‌سازی داده‌های ژئوفیزیکی در مدل‌های هیدروژئولوژیک تعریف شود (هرمانز و همکاران، ۲۰۱۶)؛ بنابراین مهم‌ترین مزیت روش PFA نیاز نداشتن به منظم‌سازی مرسوم در مدل‌های و ارون کلاسیک است. این موضوع سبب می‌شود حل حاصل از PFA دچار هیچ‌گونه اربیی فضایی (spatial bias) نشود. به‌خاطر داشته باشید اربیی فضایی سبب تغییر در تفکیک فضایی و زمانی عدم قطعیت در تبدیل پتروفیزیکی بعد از و ارون‌سازی می‌شود (ساتیجا و کارس، ۲۰۱۵). در اینجا تبدیل پتروفیزیکی بین داده‌های غلظت شوری و مقاومت ویژه الکتریکی (یا برعکس) تنها برای ساختن داده‌های اولیه لازم است. بعد از این مرحله دیگر نیازی به اجرا کردن مدل‌سازی پیشرو هیدروژئولوژیک یا ژئوفیزیکی نیست؛ بنابراین روش PFA سریع است (هرمانز و همکاران، ۲۰۱۸).

این روش ممکن است محدودیت‌هایی نیز داشته باشد که یکی از آنها انتخاب تعداد پارامترها برای ساختن توزیع‌های آغازین در مدل‌های هیدروژئولوژیک جهت شبیه‌سازی جریان و انتقال آلودگی درون آبخوان است. حل درست وقتی به‌دست می‌آید که داده‌های مدل یا مشاهده‌ای در دامنه توزیع‌های آغازین بیفتند؛ پس این روش برای برون‌یابی مناسب نیست. به‌هرحال این نقطه ضعف تنها مختص روش PFA نیست بلکه در همه روش‌های بیزی وجود دارد (ساتیجا و کارس، ۲۰۱۵).

- B08206.
- Deutsch, C. V., and Journal, A. G., 1992, *GSLIB: Geostatistical Software Library and User's Guide*: Oxford University Press, New York.
- Hermans, T., Nguyen, F., Klepikova, M., Dassargues, A., and Caers, J., 2018, Uncertainty quantification of medium-term heat storage from short-term geophysical experiments using Bayesian evidential learning: *Water Resources Research*, **54**(4), 2931-2948.
- Hermans, T., Nguyen, F., Robert, T., and Revil, A., 2014, Geophysical methods for monitoring temperature changes in shallow low enthalpy geothermal systems: *Energies*, **7**(8), 5083–5118.
- Hermans, T., Oware, E., and Caers, J., 2016, Direct prediction of spatially and temporally varying physical properties from time-lapse electrical resistance data: *Water Resources Research*, **52**(9), 7262-7283.
- Koestel, J., Kemna, A., Javaux, M., Binley, A., and Vereecken, H., 2008, Quantitative imaging of solute transport in an unsaturated and undisturbed soil monolith with 3-D ERT and TDR: *Water Resources Research*, **44**, W12411.
- Laloy, E., Linde, N., and Vrugt, J. A., 2012, Mass conservative three-dimensional water tracer distribution from Markov chain Monte Carlo inversion of time-lapse ground-penetrating radar data: *Water Resources Research*, **48**, W07510.
- Linde, N., and Doetsch, J., 2016, Joint inversion in hydrogeophysics and near-surface geophysics, in Moorkamp, M., Lelièvre, P. G., Linde, N., and Khan, A., eds., *Integrated Imaging of the Earth: Theory and Applications*: John Wiley & Sons, Inc., 117–135.
- Masy, T., Caterina, D., Tromme, O., Lavigne, B., Thonart, P., Hiligsmann, S., and Nguyen, F., 2016, Electrical resistivity tomography to monitor enhanced biodegradation of hydrocarbons with *Rhodococcus erythropolis* T902.1 at a pilot scale: *Journal of Contaminant Hydrology*, **184**, 1–13.
- Moysey, S., Singha, K., and Knight, R., 2005, A framework for inferring field-scale rock physics relationships through numerical simulation: *Geophysical Research Letters*, **32**, L08304.
- Muller, K., Vanderborght, J., Englert, A., Kemna, A., Huisman, J. A., Rings, J., and Vereecken, H., 2010, Imaging and characterization of solute transport during two tracer tests in a tomograms: Resolution-dependent limitations: *Journal of Geophysical Research*, **110**, shallow aquifer using electrical resistivity tomography and multilevel groundwater samplers: *Water Resources Research*, **46**, W03502.
- Oware, E. K., Moysey, S. M. J., and Khan, T., 2013, Physically based regularization of hydrogeophysical inverse problems for improved imaging of process-driven systems: *Water Resources Research*, **49**(10), 6238-6247.
- Pidlisecky, A., and Knight, R., 2008, FW2_5D: A MATLAB 2.5-D electrical resistivity modeling code: *Computers & Geosciences*, **34**(12), 1645-1654.
- Rezaei, A., Mousavi, Z., Khorrani, F., and Nankali, H., 2020, Inelastic and elastic storage properties and daily hydraulic head estimates from continuous global positioning system (GPS) measurements in northern Iran: *Hydrogeology Journal*, **28**(2), 657-672.
- Satija, A., and Caers, J., 2015, Direct forecasting of subsurface flow response from non-linear dynamic data by linear least-squares in canonical functional principal component space: *Advances in Water Resources*, **77**, 69–81.
- Singha, K., Day-Lewis, F. D., Johnson, T., and Slater, L., 2015, Advances in interpretation of subsurface processes with time-lapse electrical imaging: *Hydrological Processes*, **29**(6), 1549–1576.
- Singha, K., and Moysey, S., 2006, Accounting for spatially variable resolution in electrical resistivity tomography through field-scale rock physics relations: *Geophysics*, **71**(4), A25–A28.
- Sulzbacher, H., Wiederhold, H., Siemon, B., Grinat, M., Igel, J., Burschil, T., Günther, T., and Hinsby, K., 2012, Numerical modelling of climate change impacts on freshwater lenses on the North Sea Island of Borkum using hydrological and geophysical methods: *Hydrology and Earth System Sciences*, **16**, 3621–3643.
- Wallin, E. L., Johnson, T. C., Greenwood, W. J., and Zachara, J. M., 2013, Imaging high stage river-water intrusion into a contaminated aquifer along a major river corridor using 2-D time-lapse surface electrical resistivity tomography: *Water Resources Research*, **49**, 1693–1708.
- Whitaker, S., 1986, Flow in porous media I: a theoretical derivation of Darcy's law: *Transport in Porous Media*, **1**, 3–25.

Contaminant plume modeling in aquifers through prediction-focused approach and geoelectrical data

Abolfazl Rezaei^{1*} and Freshteh Soleimani²

¹ Assistant professor, Department of Earth Sciences, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan, Iran

² MS student, Department of Earth Sciences, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences (IASBS), Zanjan, Iran

(Received: 04 May 2021, Accepted: 25 July 2021)

Summary

Although hydrogeophysics application in studying the groundwater systems has been significantly increased over the two recent decades, the solute concentration quantities obtained from geophysical modeling are of high uncertainty. This is mostly attributed to (1) the regularization procedure in geoelectrical inverse models, particularly in complex geological settings such as heterogeneous aquifers, and (2) the use of petrophysical relationships.

The primary goal of this study is to model the spatio-temporal evolution of the injected salt contaminant in a heterogeneous loamy sand aquifer through the prediction-focused approach (PFA) and resistivity data, circumventing the need for classical geoelectric inversion. The primary advantage of the PFA method is that it does not need any regularization step used in the deterministic geoelectric inversion. This methodology only needs to generate the prior dataset without suffering from any spatial bias, spatially and temporally varying resolution or uncertainty in the post inversion petrophysical transformation.

In this research, a synthetic heterogeneous two-dimensional aquifer with 30m×30m is generated through a sequential Gaussian simulation. Then, 500 heterogeneous hydraulic conductivity (K) fields with mean of $\log K = -4.6$ are generated. Accordingly, 500 models of flow and solute transport are carried out for each of six time steps of 0.05, 0.1, 0.2, 0.5, 1, and 5 years. Subsequently, 500 corresponding apparent resistivity datasets are generated through forward geoelectrical modeling (dipole-dipole array) for each of six steps using a MATLAB code. After preparing the large 3D matrices of resistivity and concentration variables as inputs for the PFA, canonical correlation analysis is used to explore the relationship between the apparent resistivity (data) and the solute concentrations (forecast variables) in their reduced dimension space. We selected only 12 and 8 first components for the resistivity and saline concentration variables which they both explain more than 99.5 percent of the variance. The principal component analysis and canonical correlation analysis are used on the reduced datasets to maximize the correlation between the components of the resistivity and solute concentration data. Since a linear relationship is established between the data and forecast, the posterior distribution of the solute concentration is directly sampled using a Gaussian process regression. Finally, the reduced dimension space is back-transformed to the original space. Results demonstrate that the modeled contaminant plumes, in addition to their spatio-temporal distributions, are highly consistent with the maximum and minimum concentration values of the reference images. This signifies the robustness of the PFA for hydrogeophysical investigation.

Keywords: Geoelectrical surveys, prediction-focused approach, heterogeneous aquifer, contaminant plume, salinity

*Corresponding author:

arezaei@iasbs.ac.ir