

**T.C.  
PAMUKKALE ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
İNŞAAT MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI**

**YERALTISUYU AKIM VE KİRLETİCİ TAŞINIM  
PROBLEMLERİ İÇİN ÇİZGİLER METODUNA DAYALI BİR  
MODEL**

**DOKTORA TEZİ**

**ERSİN BAHAR**

**DENİZLİ, OCAK - 2022**

**T.C.  
PAMUKKALE ÜNİVERSİTESİ  
FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ  
İNŞAAT MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI**



**YERALTISUYU AKIM VE KİRLİTİCİ TAŞINIM  
PROBLEMLERİ İÇİN ÇİZGİLER METODUNA DAYALI BİR  
MODEL**

**DOKTORA TEZİ**

**ERSİN BAHAR**

**DENİZLİ, OCAK - 2022**

**Bu tezin tasarımı, hazırlanması, yürütülmesi, arařtırmalarının yapılması ve bulgularının analizlerinde bilimsel etięe ve akademik kurallara özenle riayet edildiđini; bu çalışmanın doğrudan birincil ürünü olmayan bulguların, verilerin ve materyallerin bilimsel etięe uygun olarak kaynak gösterildiđini ve alıntı yapılan çalışmalara atfedildiđine beyan ederim.**

**ERSİN BAHAR**

## ÖZET

### YERALTISUYU AKIM VE KİRLETİCİ TAŞINIM PROBLEMLERİ İÇİN ÇİZGİLER METODUNA DAYALI BİR MODEL

DOKTORA TEZİ

ERSİN BAHAR

PAMUKKALE ÜNİVERSİTESİ FEN BİLİMLERİ ENSTİTÜSÜ

İNŞAAT MÜHENDİSLİĞİ ANABİLİM DALI

(TEZ DANIŞMANI: PROF. DR. GÜRHAN GÜRARSLAN)

**DENİZLİ, OCAK - 2022**

Bu çalışmada, iki boyutlu yeraltısuyu akım ve kirletici taşınım simülasyon modellerinin oluşturulması için yeni bir sayısal şema geliştirilmiştir. Ayrıca bu şema, sezgisel bir optimizasyon algoritması ile birleştirilerek, yeraltısuyu kirletici kaynak karakteristiklerinin belirlenmesi problemi için simülasyon-optimizasyon modeli oluşturulmuştur. Geliştirilen simülasyon-optimizasyon modelinde, simülasyon kısmının görevini gören iki farklı vekil model kullanılmış ve bilgi işlem süresi önemli miktarda azaltılmıştır.

Önerilen sayısal şema, çizgiler metodu yaklaşımına dayanmakta olup konumda B-spline fonksiyonlarını zamanda ise adaptif bir Runge-Kutta algoritmasını kullanmaktadır. Bu şema, ilk olarak düzenli geometriye sahip kirletici taşınım problemlerinde test edilmektedir. Daha sonra, geliştirilen sayısal şema, düzenli ve düzensiz geometriye sahip birleşik akım ve kirletici taşınım problemlerine uygulanabilir hale getirilmektedir. Metodun kesinliği elde edilen sonuçların, problemlerin mevcut analitik çözümleri, literatürdeki sonuçlar veya COMSOL Multiphysics, MODFLOW ve MT3DMS gibi paket program çıktılarıyla karşılaştırılarak test edilmektedir. Elde edilen sonuçların analitik çözümlere ve paket program çıktılarına oldukça yakın olduğu, ve literatürdeki sonuçlardan daha düşük hatalara sahip olduğu tespit edilmiştir. Yapılan analizler sonucunda, önerilen sayısal şemanın farklı geometri ve parametre yapılarına sahip akım ve kirletici taşınım problemlerinin simülasyonlarını başarılı bir şekilde gerçekleştirebildiği görülmektedir.

Önerilen simülasyon-optimizasyon modeli, kirletici kaynaklarının konumları, sayıları, salınım geçmişleri ve aktif stres periyot sayıları gibi kaynak karakteristiklerinin tamamını başarılı bir şekilde bulmaktadır. Ayrıca ölçüm verilerine bir miktar hata terimleri eklenerek modelin performansı test edilmektedir. Hata içeren durumlarda da model başarılı bir şekilde kirletici kaynak karakteristiklerini belirlemektedir. Optimizasyon sürecinin her adımında simülasyon modelinin oluşturulmasından dolayı çözüm süreci oldukça uzamaktadır. Bu süreyi kısaltmak amacıyla simülasyon modelinin görevini gerçekleştiren vekil modeller (tepki matrisi yaklaşımı ve destek vektör makinesi) kullanılmaktadır. Çalışmada kullanılan vekil modeller başarılı bir şekilde simülasyon-optimizasyon modeline entegre edilmiştir. Yapılan analizler sonucunda, vekil model yaklaşımının simülasyon-optimizasyon modelinin bilgi işlem süresini oldukça kısalttığı görülmektedir.

**ANAHTAR KELİMELELER:** B-spline fonksiyonları; akım ve kirletici taşınımı; adaptif Runge-Kutta şeması; yeraltısuyu kirletici kaynak karakteristikleri belirleme; simülasyon-optimizasyon

## **ABSTRACT**

### **A MODEL BASED ON METHOD OF LINES FOR GROUNDWATER FLOW AND CONTAMINANT TRANSPORT PROBLEMS**

**PH.D THESIS**

**ERSIN BAHAR**

**PAMUKKALE UNIVERSITY INSTITUTE OF SCIENCE**

**CIVIL ENGINEERING**

**(SUPERVISOR:PROF. DR. GURHAN GURARSLAN)**

**DENİZLİ, JANUARY 2022**

In this study, a new numerical scheme is developed to generate two-dimensional groundwater flow and contaminant transport simulation models. In addition, this scheme is combined with a heuristic optimization algorithm to create a simulation-optimization model for the identification of groundwater contaminant source characteristics. In the developed simulation-optimization model, two different surrogate models that serve as the simulation part are used and the computing time is significantly reduced.

The proposed numerical scheme is based on the method of lines approach. It uses B-spline functions to approximate space derivatives and an adaptive Runge-Kutta algorithm in time integration. At first, the scheme is tested on contaminant transport problems with regular geometry. It is then adjusted to solve combined flow and contaminant transport problems which have regular and irregular geometry. The accuracy of the method is tested by comparing the obtained results with the existing analytical solutions of the problems, the results in the literature or the outputs of softwares such as COMSOL Multiphysics, MODFLOW and MT3DMS. It is seen that the obtained results are very close to the analytical solutions and software outputs, and have lower error values than the results in the literature. As a result of the analysis, it is concluded that the proposed numerical scheme can successfully simulate combined flow and contaminant transport problems with different geometry and parameter structures.

The proposed simulation-optimization model successfully finds all of the contaminant source characteristics such as the locations, number, release history, and the number of active stress periods. In addition, the performance of the model is tested by adding some error terms to the measurement data. In the erroneous case, contaminant source characteristics are successfully determined by the model. Due to the creation of the simulation model at each step of the optimization process, the solution process takes a long time. In order to shorten this, surrogate models that perform the task of the simulation model are used. In the study, two different surrogate models (response matrix approach and support vector machine) were created and successfully integrated into the simulation-optimization model. As a result of the analysis, it is seen that the surrogate model approach shortens the computing time of the simulation-optimization model considerably while maintaining high computation accuracy.

**KEYWORDS:** B-spline functions; flow and contaminant transport; adaptive Runge-Kutta scheme; identification of groundwater contaminant source characteristics; simulation-optimization

# İÇİNDEKİLER

Sayfa

ÖZET.....	1
ABSTRACT .....	2
İÇİNDEKİLER .....	3
ŞEKİL LİSTESİ .....	4
TABLO LİSTESİ .....	5
SEMBOL LİSTESİ .....	6
KISALTMA LİSTESİ .....	9
ÖNSÖZ.....	10
<b>1. GİRİŞ.....</b>	<b>11</b>
1.1 Tezin Amacı .....	12
1.2 Literatür Özeti .....	13
<b>2. MATEMATİKSEL MODELLER .....</b>	<b>26</b>
2.1 Simülasyon Modeli.....	27
2.1.1 B-spline ÇM.....	28
2.1.1.1 Konum Türevlerinin KBS Fonksiyonları ile Hesaplanması ...	28
2.1.1.2 Zaman İntegrasyonu .....	30
2.2 S-O Modeli .....	32
2.2.1 Optimizasyon Modeli .....	33
2.2.1.1 Diferansiyel Evrim Algoritması.....	34
2.2.1.2 Optimum kaynak sayısı ve aktif stres periyotlarının belirlenmesi .....	36
2.2.1.3 Ölçüm hatalarının dahil edilmesi .....	36
2.2.1.4 Performans değerlendirme kriterleri .....	37
2.3 Vekil Model.....	38
2.3.1 Konsantrasyon TM yaklaşımı.....	39
2.3.2 Destek Vektör Makinesi .....	39
<b>3. SAYISAL UYGULAMALAR .....</b>	<b>43</b>
3.1 Yeraltısuyu kirletici taşınımının simülasyonu.....	43
3.1.1 Örnek 1 .....	43
3.1.2 Örnek 2 .....	47
3.1.3 Örnek 3 .....	50
3.1.4 Örnek 4 .....	55
3.2 Birleşik akım ve kirletici taşınımının simülasyonu .....	59
3.2.1 Örnek 5 .....	59
3.2.2 Örnek 6 .....	65
3.3 Kirletici kaynak karakteristiklerinin belirlenmesi .....	70
3.3.1 Örnek 7 .....	71
3.3.2 Örnek 8 .....	74
<b>4. SONUÇ VE ÖNERİLER .....</b>	<b>82</b>
<b>5. KAYNAKLAR.....</b>	<b>85</b>
<b>6. EKLER.....</b>	<b>92</b>
<b>7. ÖZGEÇMİŞ .....</b>	<b>95</b>

## ŞEKİL LİSTESİ

### Sayfa

<b>Şekil 3.1:</b> $\Delta x = \Delta y = 0.025$ m, $V_x = V_y = 0.8$ m/s, $D_{xx} = D_{yy} = 0.01$ m <sup>2</sup> /s alınarak $t = 1.25$ s simülasyon zamanı için KBS-DOPRI5 ile elde edilen yaklaşık çözüm .....	47
<b>Şekil 3.2:</b> Şekil 3.1’de verilen yaklaşık çözümün ve analitik çözümün kontur grafiği .....	47
<b>Şekil 3.3:</b> $t = 1500$ gün için KBS-DOPRI5 ile elde edilen sonuçlarla analitik çözümün karşılaştırılması ( $\Delta x = 20$ m, $\Delta y = 16$ m).....	49
<b>Şekil 3.4:</b> $t = 3000$ gün için KBS-DOPRI5 ile elde edilen sonuçlarla analitik çözümün karşılaştırılması ( $\Delta x = 20$ m, $\Delta y = 16$ m).....	49
<b>Şekil 3.5:</b> Merkezdeki yaklaşık ve analitik konsantrasyon değerlerinin farklı simülasyon süreleri için karşılaştırılması .....	50
<b>Şekil 3.6:</b> KBS-DOPRI5 ( $\Delta x = \Delta y = 5$ m) ile referans çözümün ( $\Delta x = \Delta y = 0.5$ m) sonuçlarının karşılaştırılması .....	52
<b>Şekil 3.7:</b> KBS-DOPRI5 ( $\Delta x = \Delta y = 5$ m) ile COMSOL sonuçlarının karşılaştırılması .....	54
<b>Şekil 3.8:</b> 1.7 günde KBS-DOPRI5 ( $\Delta x = \Delta y = 0.01$ m) ve COMSOL Multiphysics ile elde edilen konsantrasyon alanı (Senaryo A).....	56
<b>Şekil 3.9:</b> 1.7 günde KBS-DOPRI5 ( $\Delta x = \Delta y = 0.01$ m) ve COMSOL Multiphysics ile elde edilen konsantrasyon alanı (Senaryo B).....	56
<b>Şekil 3.10:</b> 1.7 günde giriş ve çıkış sınırındaki konsantrasyon profilleri (Senaryo A).....	58
<b>Şekil 3.11:</b> 1.7 günde giriş ve çıkış sınırındaki konsantrasyon profilleri (Senaryo B).....	58
<b>Şekil 3.12:</b> Örnek 5’te kullanılan varsayımsal akifer modeli .....	60
<b>Şekil 3.13:</b> Akım modeli sonuçlarının karşılaştırılması .....	62
<b>Şekil 3.14:</b> Kirletici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (2 yıl) .....	63
<b>Şekil 3.15:</b> Kirletici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (3 yıl) .....	63
<b>Şekil 3.16:</b> Kirletici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (4 yıl) .....	64
<b>Şekil 3.17:</b> Kirletici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (5 yıl) .....	64
<b>Şekil 3.18:</b> Örnek 6’da kullanılan varsayımsal akifer modeli .....	66
<b>Şekil 3.19:</b> Akım modeli sonuçlarının karşılaştırılması .....	67
<b>Şekil 3.20:</b> Kirletici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (2 yıl) .....	68
<b>Şekil 3.21:</b> Kirletici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (4 yıl) .....	68
<b>Şekil 3.22:</b> Kirletici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (6 yıl) .....	69
<b>Şekil 3.23:</b> Kirletici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (8 yıl) .....	69
<b>Şekil 3.24:</b> Vekil modellerin sonuçları ile gözlenen değerlerin uyumluluğu: (a)-(f) sırasıyla birinciden altıncıya kadar gözlem kuyularını temsil etmektedir.....	72
<b>Şekil 3.25:</b> Vekil modellerin sonuçları ile gözlenen değerlerin uyumluluğu: (a)-(j) sırasıyla birinciden onuncuya kadar gözlem kuyularını temsil etmektedir.....	75
<b>Şekil 3.25 (devam):</b> Vekil modellerin sonuçları ile gözlenen değerlerin uyumluluğu: (a)-(j) sırasıyla birinciden onuncuya kadar gözlem kuyularını temsil etmektedir.....	76

## TABLO LİSTESİ

### Sayfa

<b>Tablo 2.1:</b> Dügüm noktalarındaki $B_i(x)$ ve türevlerinin aldığı değerler .....	29
<b>Tablo 2.2:</b> Dügüm noktalarındaki $Q_j(y)$ ve türevlerinin aldığı değerler.....	30
<b>Tablo 2.3:</b> DOPRI5 için Butcher dizisi (Dormand ve Prince 1980). .....	32
<b>Tablo 3.1:</b> Örnek 1 için $t = 1$ s ve $V_x = V_y = 0.8$ m/s alınarak $[1,2] \times [1,2]$ çözüm alanında elde edilmiş ortalama mutlak hata değerleri .....	44
<b>Tablo 3.2:</b> Örnek 1 için $t = 1$ s ve $V_x = V_y = 0.8$ m/s alınarak $[1,2] \times [1,2]$ çözüm alanında elde edilmiş ortalama mutlak hata değerleri .....	44
<b>Tablo 3.3:</b> $t = 1.25$ s için $[0,2] \times [0,2]$ çözüm alanında $V_x = V_y = 0.8$ m/s alınarak elde edilen ortalama mutlak hata ve maksimum hata değerlerinin karşılaştırılması .....	45
<b>Tablo 3.4:</b> Farklı simülasyon zamanları için $\Delta x = \Delta y = 0.025$ m alınarak elde edilen ortalama ve maksimum hata değerlerinin karşılaştırılması .	46
<b>Tablo 3.5:</b> Farklı simülasyon zamanları için $\Delta x = \Delta y = 0.025$ m alınarak elde edilen ortalama ve maksimum hata değerlerinin karşılaştırılması .	46
<b>Tablo 3.6:</b> 200 gün sonra KBS-DOPRI5 ve diğer nümerik metotlar ile elde edilen konsantrasyon değerlerinin karşılaştırılması (Senaryo A) ..	52
<b>Tablo 3.7:</b> 200 gün sonra KBS-DOPRI5 ve diğer nümerik metotlar ile elde edilen CPU sürelerinin karşılaştırılması (Senaryo A).....	53
<b>Tablo 3.8:</b> 200 gün sonra KBS-DOPRI5 ve diğer nümerik metotlar ile elde edilen CPU sürelerinin karşılaştırılması (Senaryo B) .....	54
<b>Tablo 3.9:</b> Farklı $x$ koordinatları için çıkış sınırındaki KBS-DOPRI5 ve COMSOL Multiphysics konsantrasyon değerleri .....	57
<b>Tablo 3.10:</b> Örnek 5'te kullanılan çözüm parametreleri .....	60
<b>Tablo 3.11:</b> Kaynak Akılarının değerleri .....	61
<b>Tablo 3.12:</b> Örnek 6'da kullanılan çözüm parametreleri .....	66
<b>Tablo 3.13:</b> Kaynak Akılarının değerleri .....	67
<b>Tablo 3.14:</b> Farklı gürültü seviyeleri için elde edilen NH değerlerinin literatürdeki sonuçlarla karşılaştırılması .....	73
<b>Tablo 3.15:</b> Orta gürültü seviyesi için gerçek kaynak akıları ile hesaplanan kaynak akılarının karşılaştırılması ( $\alpha = 0.10$ ).....	74
<b>Tablo 3.16:</b> Farklı gürültü seviyeleri için elde edilen NH değerleri .....	76
<b>Tablo 3.17:</b> Farklı sayıdaki kirleticili kaynağı ve aktif stres periyodu için belirlenen kaynak karakteristikleri .....	79
<b>Tablo 3.18:</b> Farklı gürültü seviyelerinde hesaplanan kaynak karakteristikleri	80
<b>Tablo 3.19:</b> Vekil modeller ile simülasyon modelinin işlem süresinin karşılaştırılması .....	81



## SEMBOL LİSTESİ

$S$	: Depolama katsayısını
$h$	: Hidrolik yükü
$t$	: Zaman boyutunu
$x_i$	: Kartezyan koordinatları
$W$	: Birim alandaki hacimsel akı
$T_{ij}$	: Akifer iletim kapasitesi tensörünün bileşenlerini
$K_{ij}$	: Hidrolik iletkenlik tensörünün bileşenlerini
$b$	: Akiferin doymun kalınlığını
$C$	: Kirletici madde konsantrasyonunu
$V_i$	: Akış hızını
$\theta$	: Akiferin efektif porozite değerini
$C_s$	: Kaynak/yitik akımındaki kirletici madde konsantrasyonunu
$D_{ij}$	: Hidrodinamik dispersiyon tensörünün bileşenlerini
$\alpha_L$	: Boyuna dispersivite katsayısı
$\alpha_T$	: Enine dispersivite katsayısı
$D^*$	: Etkili moleküler difüzyon katsayısı
$\Delta x$	: $x$ koordinatındaki düğüm noktaları arasındaki mesafe
$\Delta y$	: $y$ koordinatındaki düğüm noktaları arasındaki mesafe
$N$	: $x$ koordinatındaki toplam düğüm noktası sayısının bir eksiği
$M$	: $y$ koordinatındaki toplam düğüm noktası sayısının bir eksiği
$\tilde{C}$	: Kuintik B-spline fonksiyonları ile yaklaşık olarak temsil edilen konsantrasyon değerleri
$\delta_{j,i}$	: $x$ koordinatındaki zamana bağlı parametre matrisi
$\gamma_{j,i}$	: $y$ koordinatındaki zamana bağlı parametre matrisi
$B_i$	: $x$ koordinatındaki kuintik B-spline temel fonksiyonları
$B'_i$	: $x$ koordinatındaki kuintik B-spline temel fonksiyonlarının birinci türevi
$B''_i$	: $x$ koordinatındaki kuintik B-spline temel fonksiyonlarının ikinci türevi
$Q_j$	: $y$ koordinatındaki kuintik B-spline temel fonksiyonları
$Q'_j$	: $y$ koordinatındaki kuintik B-spline temel fonksiyonlarının birinci türevi
$Q''_j$	: $y$ koordinatındaki kuintik B-spline temel fonksiyonları ikinci türevi
$\mathcal{L}$	: Konumsal diferansiyel operatör
$\mathbf{k}_v$	: Yaklaşık eğim matrisi
$\Delta t$	: Zaman adımı
$\omega_v$	: DOPRI5 için Butcher dizisi elemanı
$\phi_{v,\zeta}$	: DOPRI5 için Butcher dizisi elemanı
$\psi_v$	: DOPRI5 için Butcher dizisi elemanı
$\mathbf{e}$	: Yerel kesme hatası matrisi
$e_{tol}$	: Maksimum hata toleransı
$F_{n_k, n_{asp}}$	: Optimizasyon modelinin amaç fonksiyonu
$n_k$	: Kaynak sayısı
$n_{asp}$	: Kirletici kaynaklarının aktif stres periyodunu
$n_{tsp}$	: Toplam stres periyodu sayısını

$n_{göz}$	: Gözlem kuyularının sayısını
$C_{m,t}$	: $m$ numaralı gözlem kuyusu ve $t$ numaralı stres periyodundaki simülasyon modeli ile hesaplanan konsantrasyon değerini
$\hat{C}_{m,t}$	: $m$ numaralı gözlem kuyusu ve $t$ numaralı stres periyodundaki gözlenen konsantrasyon değerini
$\mathbf{x}$	: Kirletici kaynaklarının $x$ eksenindeki koordinatlarını içeren vektörü
$\mathbf{y}$	: Kirletici kaynaklarının $y$ eksenindeki koordinatlarını içeren vektörü
$\mathbf{q}$	: Kirletici kaynaklarının her aktif stres periyodundaki akılarını içeren vektörü
$f(*)$	: Simülasyon modeli ile kirletici kaynak konumları ve akılarını bütün stres periyotları ve gözlem kuyularındaki konsantrasyonları içeren vektöre dönüştüren fonksiyon
$\mathbf{C}$	: Gözlem kuyularındaki gözlenen konsantrasyon değerleri
$\Phi_{m,t}$	: Ağırlık katsayısı
$\eta$	: Kullanıcı tarafından belirtilen yeterince büyük sabit bir sayı
$\mathbf{V}_{i,G+1}$	: Yeni oluşturulan mutant vektörü
$G$	: Jenerasyon
$r1, r2, r3$	: birbirinden farklı olan ve rastgele seçilen popülasyon indeksleri
$\mathbf{P}_{r1,G}$	: Mutasyon işlemine kullanılacak ebeveyn vektörü
$\mathbf{P}_{r2,G}$	: Mutasyon işlemine kullanılacak ebeveyn vektörü
$\mathbf{P}_{r3,G}$	: Mutasyon işlemine kullanılacak ebeveyn vektörü
MF	: Mutasyon faktörü katsayısı
ND	: Karar değişkeni sayısı
CR	: Çaprazlama oranı katsayısı
$\mathbf{U}_{i,G+1}$	: Çocuk vektörü
NP	: Popülasyondaki potansiyel vektör sayısı
$m_k$	: Maksimum kaynak sayısı
$m_{asp}$	: Maksimum aktif stres periyotları
$\mathbf{C}^*$	: Hata terimleri eklenerek pertürbe edilmiş gözlem kuyularındaki konsantrasyon değerlerini
$\delta$	: Ortalaması 0 ve standart sapması 1 alınarak normal dağılıma göre üretilmiş hata terimleri
$\alpha$	: $0 \leq \alpha \leq 1$ aralığında bir sayı
$q_{i,t}$	: $i$ numaralı kirletici kaynağında $t$ stres periyodunda gözlenen kaynak akısını
$\bar{q}_{i,t}$	: $i$ numaralı kirletici kaynağında $t$ stres periyodunda önerilen metodoloji ile belirlenen kaynak akılarının ortalaması
$q_{i,t,r}$	: $r$ numaralı analizin $i$ numaralı kaynağının $t$ aktif stres periyodundaki kaynak akısı
$n_t$	: Toplam analiz sayısı
$n_{pk}$	: Potansiyel kirletici kaynak konumlarının sayısını
$q_0^k$	: Kirletici kaynaklarının aktif stres periyotlarındaki akıları
$\mathbf{R}$	: Konsantrasyon tepki matrisi
$F_{n_k, n_{asp}}^*$	: $n_k$ kaynak sayısına ve $n_{asp}$ aktif stres periyoduna sahip cezalandırılmış amaç fonksiyonunu
$Pe(\mathbf{x}, \mathbf{y})$	: Penaltı fonksiyonu
$\lambda$	: Penaltı fonksiyonunun değeri
$\hat{Y}$	: Destek vektör makinesi regresyon model çıktısı

$\mathbf{w}$	: Destek vektör makinesi regresyon modeli uyum katsayıları
$\Phi(\cdot)$	: Giriş verilerini yüksek boyutlu özellik uzayına taşıyan fonksiyonu
$E$	: Destek vektör makinesi regresyon modeli hata terimi
$\mathbf{X}$	: Destek vektör makinesi regresyon modeli eğitim girdilerini
$Y$	: Destek vektör makinesi regresyon modeli eğitim çıktılarını
$\alpha_i$	: Her bir eğitim veri noktasındaki katsayıları
$K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j)$	: Kernel fonksiyonu
$\sigma$	: Genişlik parametresi
$L(\varepsilon, y, \hat{y})$	: $\varepsilon$ -duyarsız kayıp fonksiyonu
$\varepsilon$	: Çıktı için kabul edilebilir hatanın üst değeri
$N_e$	: Eğitim veri sayısı
$D_p$	: Düzenleme parametresi
$\xi_i$	: Serbestlik değişkeni
$\xi_i^*$	: Serbestlik değişkeni
$\beta_i$	: Lagrange çarpanı
$\beta_i^*$	: Lagrange çarpanı

## KISALTMA LİSTESİ

S-O	: Simülasyon-optimizasyon
ÇM	: Çizgiler metodu
TM	: Tepki matrisi
İGA	: İlerlemeli genetik algoritma
YSA	: Yapay sinir ağı
GA	: Genetik algoritma
YA	: Yerel arama
KSEKK	: Kısıtlı sağlam en küçük kareler
AA	: Armoni araştırma
AEM	: Analitik eleman metodu
GKZ-ÇK	: Global konum-zaman çoklu-karesel
RBKM	: Radyal bazlı kollokasyon metodu
EEK- RBKM	: En küçük karelere dayanan radyal bazlı kollokasyon metodunu
RBF	: Radyal bazlı fonksiyonlar
KSO	: Kedi sürüsü optimizasyonu
RNKM	: Radyal nokta kollokasyon ağırsız metodu
SMP SO	: Seçkin-mutasyona uğramış PSO
KBS	: Kuintik B-spline fonksiyonları
ADD	: Adi diferansiyel denklem
KDD	: Kısmi diferansiyel denklem
NH	: Normalize hata
OBHY	: Ortalama belirleme hatasının yüzdesi
SS	: Standart sapma
DVM	: Destek vektör makinesi
LHÖ	: Latin hiperküp örnekleme
SFM	: Sonlu fark metodu

## ÖNSÖZ

Bu çalışmanın gerçekleşmesini sağlayan, destek ve katkılarını esirgemeyen, bilgi ve tecrübelerini sürekli olarak benimle paylaşan değerli hocam Prof. Dr. Gürhan GÜRARSLAN'a teşekkürlerimi sunarım.

Çalışma süresince değerli görüş ve önerilerini eksik etmeyerek katkı sağlayan Tez İzleme Komitesi üyeleri Prof. Dr. Serdar İPLİKÇİ'ye ve Prof. Dr. Mustafa Tamer AYVAZ'a, tez jüri üyeleri Prof. Dr. Gamze TANOĞLU'na ve Prof. Dr. Gökmen TAYFUR'a teşekkür ederim.

Bu zorlu süreç boyunca beni destekleyen, moral, motivasyon ve özgüvenimi yüksek tutmamı sağlayan değerli dostlarım ve çalışma arkadaşlarım, Dr. Öğr. Üyesi Ziya ÇAKICI'ya, Arş. Gör. Dr. Muhammet KAMAL'a, Arş. Gör. Kadir MERCAN'a, Arş. Gör. Özge ERSU ÇAKIR'a, Öğr. Gör. Volkan HELVA'ya ve İnş. Yük. Müh. Ahmet TANRIKULU'na teşekkür ederim.

Ayrıca, hayatımın her alanında bana yol gösteren, maddi ve manevi desteklerini hiçbir zaman esirgemeyen, beni yetiştirip bugünlere gelmemde en büyük paya sahip olan, karşılıksız sevgilerini her zaman hissettiğim sevgili annem Semahat BAHAR'a, babam Tuncay BAHAR'a ve abim Emin BAHAR'a ne kadar teşekkür etsem azdır. İyi ki varsınız.

## 1. GİRİŞ

Dünya nüfusu artmaya devam ettikçe temiz suya olan talepte orantılı olarak artmaktadır. Dünya yüzeyinin %75'i sularla kaplıdır. Bu %75 suyun hemen hemen %97'si tuzlu sudur ve hazır olarak içilebilir değildir. Diğer %2 buzullarda kullanılamaz durumda olduğuna göre bütün insanlığın temiz su ihtiyacını karşılayacak ulaşılabilir su %1'dir. Bu küçük miktardaki temiz su yüzeysel ve yeraltı suyu şeklindedir. Bu %1'lik temiz suyun %96'sı yeraltı suyudur. 1940'tan 1990'a kadar nehirlerden, göllerden ve diğer kaynaklardan çekilen temiz suyun miktarı 4 kat artmıştır. Ancak tek sorun miktar değildir. Ayrıca kirlenmeye açık olan bu hayati kaynağın kalitesi de önemlidir. Teknolojinin gelişmesiyle her geçen gün insan aktiviteleri su kaynaklarını kirletmektedir (Bagtzoglou ve Atmadja 2005).

Sudaki kirletici maddeler noktasal veya noktasal olmayan kaynaklardan meydana gelebilmektedir. Noktasal kaynaklar tanımlanabilir, küçük ölçekli kirletici kaynağıyla karakterize edilebilmektedir. Noktasal olmayan kaynaklar ise bir sürü küçük kaynaktan beslenen büyük bir alana yayılmış kirlilik olarak tanımlanabilmektedir. Sızdıran yeraltı depolama tankları, arazi dolguları, septik sistemler ve tehlikeli atık madde sahaları başlıca noktasal kirletici kaynakları olarak bilinmektedir. Tarım ilaçları, üretim tesislerinden endüstriyel kimyasalların sızması, yollardan ve otoyollardan kimyasalların akması noktasal olmayan kirletici kaynaklarına örnek verilebilmektedir.

Kirlilik tespit edildiği zaman yeraltı suyu sisteminin temizlenebilmesi için büyük bir çaba sarf edilmelidir. Yeraltı su kaynaklarında oluşan kirliliği önlemek veya ortadan kaldırmanın ilk aşaması, kirletici kaynaklarının konumlarının, sayılarının ve salınım geçmişlerinin belirlenmesidir. Ancak kirletici kaynağının tespitini sağlayacak araçların eksikliğinden dolayı birçok durumda kirlilikten kimin sorumlu olduğunu bulmak oldukça zordur. Kirleticilerin konumlarının ve stres periyotlarının bulunması için kimyasal parmak izi, şirketlerin atık madde salınım kayıtları gibi bilgiler çoğunlukla yeterli değildir. Bu sebeple kirleticinin konumsal ve

zamansal hareketinin simülasyonunu oluşturabilecek araçlara ihtiyaç vardır (Atmadja ve Bagtzoglou 2001).

## 1.1 Tezin Amacı

Bu tez çalışması kapsamında, literatürdeki sayısal şemalara alternatif olarak yeraltısuyu akım ve kirlenici taşınımının simülasyonunu gerçekleştiren yeni bir sayısal şema geliştirilmesi amaçlanmaktadır. Ayrıca yeraltısuyu kirlenici kaynak karakteristiklerinin belirlenmesi ters probleminin çözümü için önerilen sayısal şema, sezgisel bir optimizasyon algoritması ile birleştirilerek bir simülasyon-optimizasyon (S-O) modeli oluşturulmaktadır. S-O modelinin bilgi işlem süresini kısaltmak amacıyla simülasyon kısmının görevini gören vekil modeller kullanılarak araştırmalar yapılmaktadır.

Bu amaçlar doğrultusunda, geliştirilmesi hedeflenen sayısal şema çizgiler metodu (ÇM) yaklaşımına dayanmakta olup konum türevlerinin hesaplanmasında B-spline fonksiyonları, zaman integrasyonunda ise adaptif bir Runge-Kutta şeması olan DOPRI5 algoritması kullanılmaktadır. Bu sayede hem konum hem de zaman türevleri yüksek mertebeden hesaplanarak düşük hataya sahip çözümler üreten alternatif bir sayısal şema geliştirilmesi amaçlanmaktadır. Bu sayısal şema, sezgisel optimizasyon algoritmalarından diferansiyel evrim algoritması ile birleştirilerek S-O modeli elde edilmektedir. Bu model, kaynakların sayısı, kaynakların konumları, aktif stres periyot sayısı, salınım geçmişi gibi kirlenici kaynak karakteristiklerinin belirlenmesi ters problemde kullanılmaktadır. Bilinmeyen karakteristiklerin sayısı arttıkça problemin çözümü zorlaşmakta olup bilgi işlem süresi oldukça artmaktadır. Bilgi işlem süresini kısaltmak amacıyla S-O modelinin simülasyon kısmının görevini çok daha kısa sürede gerçekleştirecek vekil modeller olarak farklı algoritmalar kullanılmaktadır. Çalışma kapsamında vekil model olarak tepki matrisi (TM) yaklaşımı ve destek vektör makinesi tercih edilmiştir. Geliştirilen modeller farklı parametre ve geometrik yapılara sahip varsayımsal problemler üzerinde test edilmiştir. Bu problemlerde elde edilen sonuçların doğrulukları ve modellerin performansları literatürden alınan sonuçlarla, varsa analitik çözümlerle veya kabul görmüş paket programların çıktılarıyla karşılaştırılarak incelenmiştir.

## 1.2 Literatür Özeti

Gorelick (1983) çalışmasında akifer kirlenici kaynaklarını ve büyüklüklerini belirlemek için en küçük kareler regresyonu ve doğrusal programlamayı yeraltı suyu kirlenici taşınım simülasyonu ile birleştirmiştir. Kirlenici kaynakları ölçülmüş konsantrasyon verileri ile simüle edilen verilerin benzeştirilmesiyle belirlenmektedir. Hidrolik parametrelerin bilindiği fakat konsantrasyon verilerinin hatalı olduğu kabul edilmektedir. Belirleme modelleri, kararlı ve kararsız durumlar olmak üzere iki varsayımsal akifer sisteminde karşılaştırılmaktadır. Kararlı durum modelleri bilinmeyen boru sızıntı konumlarını ve sızıntı miktarlarını, konumda dağılmış seyrek klorür ve trityum verilerine dayanarak belirlemektedir. Modellerde, sızıntı konumları karışık tamsayı programlama ve çoklu regresyon kullanılarak kısıtlanmaktadır. Kararsız durum modelleri, gözlem kuyularındaki konsantrasyon verilerine dayanarak akiferdeki birkaç yıllık boşaltım akılarını belirlemektedir. Bu durumda korumalı kirlenici konsantrasyonu verisi boldur ve önemli hatalar içermektedir. Kirlenici kaynaklarını belirlemede en küçük mutlak hatanın veya en küçük hataların karesinin minimizasyonu başarılıdır. Her metodun ürettiği sonuçlar için hata analizi yapılmaktadır (Gorelick 1983).

Wagner (1992) eş zamanlı kirlenici kaynak karakterizasyonu ve parametre belirlenmesi için bir metodoloji sunmaktadır. Bu metodoloji, hidrolik yük ve kirlenici konsantrasyon ölçümlerine dayanarak bilinmeyen model parametrelerini ve kaynak karakteristiklerini optimum şekilde belirlemek için yeraltı suyu akım ve kirlenici taşınım simülasyonunu doğrusal olmayan maksimum benzerlik belirleme ile birleştirmektedir. Birinci mertebe belirsizlik analizi maksimum benzerlik belirlemelerin güvenilirliğini ve akım ve taşınım modellerinin tahminlerinin doğruluğunu ve güvenilirliğini sağlamaktadır. Geliştirilen ters modelin birleşik parametre belirleme/kaynak karakterizasyonu ters problemdeki performansı birkaç varsayımsal örnek üzerinde test edilmektedir. İki boyutlu akifer sistemi için hidrolik iletkenlikler, efektif porozite, boyuna ve enine dispersivite, sınır akıları ve kaynaktaki kirlenici akıları belirlenmektedir. Dahası kirlenici salınım geçmişi veya kirlenici kaynak karakterizasyonu yapılmaktadır. Son olarak hidrolik yükler ve konsantrasyon verileri ile ilgili hataları tanımlayan istatistiksel parametreler belirlenmektedir (Wagner 1992).



McKinney ve Lin (1994) yaptıkları çalışmada üç yeraltısuyu yönetim probleminin çözümü için yeraltısuyu simülasyon modelleri genetik algoritma (GA) ile birleştirilmektedir. Bu üç problem sırasıyla bir akiferden maksimum pompaj, su temini için minimum maliyet ve akifer iyileştirmesi için minimum maliyettir. Bu yeraltısuyu yönetim problemlerine, GA optimum sonuçlar ürettiğini görülmektedir. Metot, doğrusal ve doğrusal olmayan olmayan programlama ile aynı veya daha iyi sonuçlar üretmektedir. Kısıtlar doğrudan formülasyona dahil edilebilmekte ve doğrusal olmayan programlamadaki gibi türevlere ihtiyaç duyulmamaktadır. Bu metotla, zamana bağlı pompaj ve çok aşamalı iyileştirme gibi daha karmaşık problemlerin çözülebileceği belirtilmektedir. Problemin karmaşıklığı arttıkça çözüm için gereken hesaplama süresi de artmaktadır. Her nesildeki simülasyon süresini fazla olduğu karmaşık problemlerde çözümün elde edilmesini hızlandırmak için paralel bilgisayarlar önemlidir (McKinney ve Lin 1994).

Skaggs ve Kabala (1994) yaptıkları çalışmada bilinen bir sahadan kaynaklanan kirliliğin salınım geçmişini bulmak için yaptıkları sayısal deneylerde Tikhonov düzenlemesini kullanmaktadır. Daha sonra bu salınım geçmişi kirliliğin ilerleyişi oluşturulurken kullanılmaktadır. Metot yuvarlama hatalarına duyarlıdır fakat kirlilik ölçüm hatalarından etkilenmektedir (Skaggs ve Kabala 1994).

Guan ve Aral (1999) yeraltısuyu sistemi iyileştirme tasarımı problemi için ilerlemeli genetik algoritma (İGA) olarak tanımlanmış yeni bir hesaplama prosedürü önermektedir. İGA, yeraltısuyu simülasyon modellerini iteratif bir çözüm sürecinde standart GA ile birleştiren bir alt bölge metodudur. Sayısal örnekler üzerinde önerilen metodun uygulanabilirliğini ve etkinliğini gösterilmektedir. Sonuçlar önerilen yaklaşımın, yeraltısuyu yönetimindeki doğrusal olmayan optimizasyon problemlerinin çözümü için uygun bir alternatif olduğunu belirtmektedir (Guan ve Aral 1999).

Mahar ve Datta (2001) bilinmeyen yeraltısuyu kirletici kaynaklarını belirleyen bir optimizasyon tabanlı metodoloji önermektedir. Önerilen metodolojide akım ve taşınım denklemleri optimizasyon modeline kısıtlar olarak gömülmektedir. Bilinmeyen kirletici kaynaklarının optimum çözümlerini elde etmek için doğrusal olmayan bir programlama algoritması kullanılmaktadır. Bu modelin girdisi gözlem saharındaki ölçülmüş kirletici konsantrasyonunu içermektedir. Kaynak belirleme

metodolojisi, bilinmeyen kirletici kaynaklarının belirlenmesiyle aynı anda akifer parametrelerini de belirleyecek şekilde genişletilmektedir. Geliştirilen metodolojinin performansı iki boyutlu akım ve advectif-dispersif kirletici taşınımı örnek problemleri üzerinde test edilmektedir. Mevcut verilerin değişkenliği, tek ve çoklu kirletici kaynak konumları ve ölçüm hata durumları gibi farklı senaryolar değerlendirilmektedir. Performans testleri, önerilen metodolojinin akifer parametreleri bilinmediğinde dahi örnek problemler için yeraltısuyu kirletici kaynaklarının konumlarını, büyüklüklerini ve sürelerini belirlemede tatmin edici olduğunu göstermektedir (Mahar ve Datta 2001).

Das ve Datta (2001) yeraltısuyu kalitesi ve miktarının yönetiminde kullanılmış optimizasyon tekniklerini anlatmaktadır. Araştırmacılar optimizasyona dayanan yeraltısuyu yönetim modellerinde doğrusal programlama, doğrusal olmayan programlama, karışık-tam sayı programlama, optimum kontrol teori-tabanlı matematiksel programlama, diferansiyel dinamik programlama, stokastik programlama, birleşimsel optimizasyon ve çok amaçlı yönetim için çok amaçlı optimizasyon gibi modeller kullanılmaktadır. Bu çalışmada bu modellerin literatürdeki uygulamaları incelenmektedir (Das ve Datta 2001).

Atmadja ve Bagtzoglou (2001) yaptıkları çalışmada kirletici kaynak belirleme ve salınım geçmişi oluşturma probleminin çözümü için geliştirilmiş matematiksel modelleri derlemiştir (Atmadja ve Bagtzoglou 2001).

Aral ve diğ. (2001) yaptıkları çalışmada kirletici kaynak karakterizasyon problemi, kirletici kaynak konumları ve salınım geçmişleri açık bilinmeyen değişkenler olarak tanımlanarak bir doğrusal olmayan optimizasyon modeli ile formülize edilmektedir. Optimizasyon modeli, gözlem sahasında simüle edilen konsantrasyonlar ile ölçülmüş konsantrasyonlar arasındaki farkı minimize etmektedir. Önerilen formülizasyonda, yeraltısuyu akım ve taşınım simülasyon modelleriyle gözlem noktalarındaki simüle edilen konsantrasyon değerleri kapalı olarak optimizasyon modelinin içine gömülmektedir. Optimizasyon sürecinin önemli bir parçası olan simülasyon modellerinin tekrar tekrar çözülmesinin hesaplama yükünü arttırdığı ve çözüm sürecinin olumsuz etkilediği bilinmektedir. Bu hesaplama yükünü basitleştirerek doğrusal olmayan optimizasyon modelinin çözümü için İGA isminde yeni bir yaklaşım önerilmektedir. Yapılan analizler önerilen yaklaşımın

yeraltısuyu kirletici kaynak belirleme problemleri için sağlam bir araç olduğunu göstermektedir (Aral ve diğ. 2001).

Singh ve diğ. (2004) bilinmeyen kirletici kaynaklarının belirlenmesi için ileri beslemeli çok katmanlı bir yapay sinir ağı (YSA) önermektedir. Akiferdeki belirli noktadaki simüle edilmiş konsantrasyon ölçüm verileri kullanılarak YSA eğitilmektedir. Bu konsantrasyon verileri rastgele oluşturulmuş kirletici kaynak akıları için simüle edilmektedir. YSA'nın eğitiminde geri yayılım algoritması kullanılmaktadır. Önerilen metodolojinin performansı çeşitli mevcut veriler, ölçüm hataları ve kaynak konum senaryoları için test edilmektedir. Geliştirilen YSA, hatalı ölçüm verileri kullanıldığında bile bilinmeyen yeraltısuyu kirletici kaynaklarını belirleyebilmektedir (Singh ve diğ. 2004).

Mahinthakumar ve Sayeed (2005) yaptıkları çalışmada basit bir yeraltısuyu kaynak belirleme problemi kullanarak birkaç popüler optimizasyon metodunu karşılaştırmaktadır. Bu yolla geliştirdikleri GA ve yerel arama (GA-YA) yaklaşımını birleştiren hibrit algoritmanın diğer metodların tek başlarına kullanılmasına göre daha etkili olduğunu göstermektedirler. Daha sonra GA-YA yaklaşımının bazı versiyonlarını paralel bir süper bilgisayara yerleştirerek daha karmaşık bir üç boyutlu problemi çözmektedir (Mahinthakumar ve Sayeed 2005).

Rao (2006) ayrık ve sürekli karar değişkenleri içeren kirletici kaynak belirleme problemleri için türeve dayalı olmayan bir S-O tekniği sunmaktadır. Bu yaklaşımda mevcut yoğunluğa bağlı akım ve taşınım modellerin vekil simülatörü olarak bir YSA modeli ve optimizasyon algoritması olarak benzetilmiş tavlama algoritması kullanılmaktadır. Kaynak konumu ve salınım geçmişi üç boyutlu bir akifer probleminde belirlenmektedir. Metodoloji, etkili, sağlam ve hesaplama süresi sıkıntısını azaltmaktadır. Metodolojinin tek bir kaynak içeren probleme uygulanmasına rağmen çoklu kaynak ve bilinmeyen akifer parametreleri içeren problemlere genişletilebileceği belirtilmektedir (Rao 2006).

Sun ve diğ. (2006) kirletici kaynak konumların ve salınım geçmişlerinin belirlenmesi problemi için kısıtlı sağlam en küçük kareler (KSEKK) tahmin ediciyi global optimizasyon çözücüsüyle birleştirmektedir. Kirletici salınım geçmişi için KSEKK, konum araması içinse global optimizasyon çözücüsü kullanılmaktadır.

KSEKK, modelleyicinin ölçüm hatası ve model belirsizliği ile ilgili ön bilgisini doğrudan işleme dahil etmek üzere geliştirilmiş sağlam bir tahmin edicidir. Yapılan sayısal testler göstermiştir ki KSEKK ile global optimizasyon çözücüsünün birleşmesi, sağlam olmayan (non-robust) bir tahmin edici ile birleşmesinden daha iyidir (Sun ve diğ. 2006).

Singh ve Datta (2006) bilinmeyen yeraltısuyu kirletici kaynaklarının optimum olarak belirlenmesi için GA tabanlı S-O yaklaşımı kullanmışlardır. Çoklu bilinmeyen yeraltısuyu kirletici kaynaklarının basit ve karmaşık senaryoları değerlendirilmiştir. Yeraltısuyundaki fiziksel süreçler olan akım ve taşınımı çözen simülasyon modeli GA tabanlı optimizasyon modeline bağlanmıştır. Simülasyon modeli, GA tarafından geliştirilen potansiyel kirlilik kaynağı özelliklerini kullanarak simülasyon yapar ve gözlem noktalarındaki konsantrasyon ölçüm değerlerini hesaplar. Bu simüle edilen kirletici konsantrasyon ölçüm değerleri GA'nın amaç fonksiyonu değerinin hesaplanmasında kullanılır. Önerilen metodolojini en önemli avantajı sayısal simülasyon modeli ile optimizasyon modelinin harici olarak bağlanmasıdır. Bu yaklaşım çoklu bilinmeyen kirletici kaynaklarının olduğu karmaşık akifer yapısına sahip alanlardaki kaynak belirleme problemlerinin çözülmesini mümkün hale getirir. Geliştirdikleri metodolojiyi farklı kaynak karakteristikleri, veri bulunması ve konsantrasyon ölçüm hataları gibi durumlar için test etmişlerdir (Singh ve Datta 2006).

Ayvaz ve Karahan (2008) iki boyutlu akifer sistemi için bilinmeyen kuyu konumlarını ve debilerini belirleyen bir S-O modeli önermişlerdir. Önerilen S-O modelinde simülasyon modeli olarak yeraltısuyu akım denklemi bir sonlu fark açılımı ile çözülmektedir. Daha sonra bu model her kuyu için debilerini belirleyen bir GA tabanlı optimizasyon modeliyle birleştirilmektedir. Kuyu konumlarını belirlemek için iteratif hareketli bir alt bölge yaklaşımı önermektedirler. Bu yaklaşımın ana avantajı optimizasyon modelinin sadece debileri belirlemesi ve kuyu konumlarının karar değişkeni olarak seçilmesine gerek duymamasıdır. Kuyu konumları, alt bölgelerde önceden belirlenmiş kuyu konumlarındaki optimize edilmiş debi sonuçlarına bakılarak kapalı olarak belirlenmektedir. Önerdikleri S-O modelinin performansını iki varsayımsal akifer modelinde kararlı ve kararsız akım koşulları altında test edilmektedir. İki durumda da belirleme prosedürü bir pompaj kuyusu ile

başlamakta ve sistematik olarak pompaj kuyularının sayısı arttırılarak en iyi kuyu düzeni belirlenmektedir. En iyi pompaj kuyularının sayısı, simüle edilen ve gözlenmiş hidrolik yükler arasındaki farka bakılarak karar verilmektedir. Sonuçlar, belirlenen pompaj kuyu sayılarının gerçekten büyük olması durumunda belirlenen kuyu düzenlemesinin gerçek kuyu düzenlemesine yaklaştığını göstermektedir. Dahası kararlı akım koşullarında önerilen hareketli alt bölge yaklaşımının performansı farklı alt bölge başlangıç konumlarında test edilmektedir. Sonuçlar, aramanın nereden başlatılırsa başlatılsın gerçek kuyu konumlarının belirlendiğini göstermektedir. Sonuçlar, önerilen S-O modelinin %14 daha az simülasyon sayısına ve daha düşük hataya sahip olduğunu göstermektedir (Ayvaz ve Karahan 2008).

Mirghani ve diğ. (2009) yeraltısuyu kirletici kaynağı belirleme ters probleminin çözümü için sayısal bir kirletici taşınım simülasyon modeli ile evrimsel arama algoritmalarını birleştiren bir S-O yaklaşımı önermişlerdir. Bu yaklaşımda, evrimsel arama sırasında sayısal taşınım modeli iteratif olarak çözülmektedir. Sayısal modelin çözüm sırasında binlerce defa oluşturulması gerekmektedir. Bu durum hesaplama süresini arttırmaktadır. S-O yaklaşımının hesaplama süresini azaltmak için paralel hesaplama kullanmışlardır. Bir yeraltısuyu kaynağı tanımlama problemini çeşitli varyasyonlarıyla çözümlenmiş kalitesi ve hesaplama performansı açısından incelemişlerdir. Sayısal analizleri, ABD’de bulunan TeraGrid süper hesaplama merkezinde yapmışlardır. Sonuçlar, çözüm kalitesi ve hesaplama performansı açısından paralel S-O yaklaşımının performansını göstermektedir (Mirghani ve diğ. 2009).

Ayvaz (2009) yaptığı çalışmada birleşik bir S-O modeli kullanarak yeraltısuyu kaynakları için bir yönetim modeli önermiştir. Simülasyon modeli olarak MODFLOW paket programını kullanmıştır. Daha sonra bu modeli armoni araştırma (AA) optimizasyon algoritması ile birleştirmiştir. Önerdiği AA tabanlı yönetim modelinin performansını üç farklı yeraltısuyu yönetim probleminde test etmiştir. Bu problemler sırasıyla bir akiferden çekilebilecek toplam suyun maksimizasyonu, talebin karşılanarak toplam çekilebilecek suyun maliyetinin minimizasyonu ve farklı yönetim zamanları için talebin karşılanarak toplam çekilebilecek suyun maliyetinin minimizasyonudur. AA parametrelerinin çözüm üzerindeki etkisini görmek için duyarlılık analizi yapmıştır. Sonuçlar, AA'nın önceki çözüm yöntemlerinden daha iyi

veya onlardan daha iyi çözümler ürettiğini ve yeraltısuyu modellemesindeki yönetim problemlerini çözmek için kullanılabileceğini göstermektedir (Ayvaz 2009).

Ayvaz (2010) bilinmeyen yeraltısuyu kirletici kaynak belirleme problemleri için bir S-O modeli önermiştir. Önerdiği modelde, yeraltısuyu sistemindeki akım ve taşınım süreçlerinin çözümü için MODFLOW ve MT3DMS paket programları kullanılmaktadır. Daha sonra bu modeller AA sezgisel optimizasyon algoritmasıyla birleştirilmiştir. Önerdiği S-O modelinde kirletici kaynaklarının konumları ve salınım geçmişleri açık karar değişkenleri olarak kabul edilmiş ve optimizasyon modeli aracılığıyla belirlenmiştir. Ayrıca kirletici kaynaklarının optimum sayısını belirlemek için kapalı bir çözüm prosedürü önermiştir. Önerilen modelin performansı, basit ve karmaşık akifer geometrileri, ölçüm hata durumları ve farklı AA çözüm parametre setleri gibi farklı durumlar için iki varsayımsal örnek üzerinde test edilmiştir. Elde ettiği sonuçlarla önerdiği modelin kirletici kaynağı belirleme ters problemlerini çözmek için etkili bir yol olduğunu göstermiştir (Ayvaz 2010).

Datta ve diğ. (2011) kirletici kaynaklarının belirlenmesi probleminin çözümü için alternatif bir model önermişlerdir. Önerdikleri model, bir akım ve taşınım simülasyon modeline bağlı klasik bir doğrusal olmayan optimizasyon modelidir. Yeraltısuyu akım ve taşınım modeli, doğrusal olmayan optimizasyon modeline dış bir birim olarak bağlanmıştır. Simülasyon ve optimizasyon metodu arasındaki temel bağ türevler veya optimizasyon algoritması için gerekli olan gradyan bilgileridir. Doğrusal olmayan programlamayı kullanarak akım ve taşınım süreçlerinin yönetici denklemlerini, optimizasyon modeline eşitlik kısıtı olarak yerleştirmişlerdir. Önerdikleri kirletici kaynağı belirleme metodolojisini örnek problemler üzerinde test etmişlerdir. Bu metodolojinin, çok sayıda bilinmeyen kirletici kaynağı içeren görece geniş çaplı çalışma sahalarına uygulanabilir potansiyelde olduğunu belirtmişlerdir (Datta ve diğ. 2011).

Meenal ve Eldho (2011) iki boyutlu yeraltısuyu akım simülasyonu için çoklu-karesel radyal baz fonksiyonlu ağsız nokta kollokasyon metodunu önermişlerdir. Modelin doğruluğunu literatürdeki analitik çözümlerle karşılaştırarak göstermişlerdir. Geliştirilen yöntem hidrolik yük dağılımlarını hesaplamak için öncelikle varsayımsal bir probleme daha sonra bir saha problemine uygulanmıştır. Varsayımsal problemde elde edilen sonuçlar sonlu eleman simülasyon sonuçlarıyla,

saha probleminde elde edilen sonuçlar ise sınır eleman tabanlı model sonuçlarıyla karşılaştırılmıştır. Bu sonuçlara bakarak geliştirdikleri metodun tatmin edici sonuçlar ürettiğini göstermişlerdir (Meenal ve Eldho 2011).

Gaur ve diğ. (2011) yaptıkları çalışmada yeraltısuyu yönetim problemlerinin çözümü için analitik eleman metodunun (AEM) ve parçacık sürü optimizasyonuna (PSO) dayanan bir S-O modeli sunmuşlardır. Geliştirdikleri AEM-PSO modelini Fransa'daki Dore nehri havzasına uygulayarak buradaki iki çeşit yeraltısuyu hidrolik yönetim problemini çözmüşlerdir. Bu problemlerden ilki bir akiferden maksimum pompalama, ikincisi ise yeni pompaj kuyu sistemi geliştirme maliyetinin minimizasyonudur. Debi ile birlikte pompaj kuyularının konumlarını da karar değişkeni olarak almışlardır. Yeni pompaj kuyularının toplam geliştirme maliyeti hesaplanırken boru uzunlukları da dikkate alınmıştır. Farklı kuyu gruplarını dikkate alarak optimum sayıdaki kuyu sayısını da hesaplamışlardır. Problemin kısıtlarını su otoritelerinin ve yetkililerin yardımıyla belirlemişlerdir. AEM-PSO modelinin pompaj kuyularının optimum konumlarının ve debilerinin belirlenmesinde etkili olduğunu bulmuşlardır (Gaur ve diğ. 2011).

Li ve Mao (2011) yeraltısuyu kirletici kaynak belirleme ters probleminin çözümü için global konum-zaman çoklu-karesele (GKZ-ÇK) dayanan radyal bazlı kollokasyon metodu (RBKM) geliştirmişlerdir. Bu deterministik yöntem, problemi doğrudan tüm uzay-zaman alanındaki bir lineer cebirsel denklem sisteminin tek adımlı bir çözümüne yönlendirmektedir. Lineer sistemin kötü-koşullanmışlığının üstesinden gelmek için en küçük karelere dayanan radyal bazlı kollokasyon metodunu (EKK-RBKM) tanıtmışlardır. GKZ-ÇK çözümlerine olan güveni arttırmak için hesaplama parametrelerini, gözlem verilerini ve model belirsizliğini dikkate alarak duyarlılık analizi yapmışlardır. Önerilen metodu bir ve iki boyutlu ortamdaki kirletici kaynağı belirleme örneklerine uygulayarak ağsız yapının avantajını ve metodun etkinliğini göstermişlerdir (Li ve Mao 2011).

Meenal ve Eldho (2012) serbest yüzeyli akiferler için iki boyutlu, birleştirilmiş yeraltısuyu akım ve taşınım taşınımı için çoklu-karesel radyal baz fonksiyonu ile ağsız bir nokta kollokasyon metodu önermişlerdir. Geliştirdikleri metodun doğruluğunu literatürdeki mevcut analitik çözümü bilinen problemlerle test etmişlerdir. Dahası geliştirdikleri modeli hidrolik yük ve konsantrasyon dağılımını

hesaplamak için bir saha problemine uygulamışlardır. Elde ettikleri sonuçları aynı problemin sonlu eleman metodu ile çözümüyle karşılaştırmışlardır. Sonuç olarak modelin bu tarz problemlerde uygulanabilir bir yaklaşım olduğunu göstermişlerdir (Meenal ve Eldho 2012).

Mategaonkar ve Eldho (2012) çalışmalarında kirlenmiş yeraltısuyunun iyileştirilmesinde kullanılmak üzere bir S-O modeli önermişlerdir. Bu modelin simülasyon kısmındaki serbest yüzeyli yeraltısuyu akım ve kirlenici taşınım kısmi diferansiyel denklemlerini (KDD) ağırsız nokta kollokasyon metodu ile çözmüşlerdir. Optimizasyon kısmında ise parçacık sürü optimizasyon algoritmasını kullanmışlardır. Bu modelleri birleştirerek pompala ve iyileştir (pump and treat) tekniğini kullanarak yeraltısuyu iyileştirme tasarımı yapabilmek için etkili bir S-O modeli elde etmişlerdir. Bu S-O modeli toplam çözümlü katılarla kirlenmiş bir serbest yüzeyli akiferin iyileştirme tasarımında kullanılmıştır. Model, seçili kuyulardaki debiler ve iyileştirme maliyetleri için etkili bir iyileştirme tasarımı sağlamaktadır (Mategaonkar ve Eldho 2012).

Mirghani ve diğ. (2012) yaptıkları çalışmada vekil model kullanılarak yeraltısuyu sistem karakteristiklerinin bulunması problemini araştırmışlardır. Bu ters problemde, kirlilik profillerinin oluşturulması için gözlem kuyularındaki kirlenici sinyalleri kaydedilmektedir. Bu ters problemlerin çözümünde S-O yaklaşımını kullanan bir teknik kullanılmıştır. Bu yaklaşımda, optimizasyon kısmında yeraltısuyu taşınımını temsil eden KDD iteratif olarak çözümlenmektedir. Ancak bu durum hesaplama açısından oldukça pahalıdır. Çünkü binlerce defa simülasyon modeli çalıştırılmaktadır. Bu kısıtlamanın üstesinden gelmek için simülasyon modeli daha hızlı ve göreceli olarak hassas olan bir vekil model değiştirilmektedir. Kabul edilebilir hassaslık performansı sağlayan vekil modeller oluşturmak için YSA kullanılmıştır. Kaynak belirleme probleminin çözümü için simülasyon modelinin yerine geçen YSA dayalı bir vekil model, daha sonra GA ile birleştirilmiştir. Sonuçlar, YSA vekil modelinin yeraltısuyu simülasyonuna göre daha kaliteli çözümler ürettiğini göstermektedir. Son olarak vekil modelin performansını ölçmek için bir zaman araştırması yapmışlardır (Mirghani ve diğ. 2012).

Ayvaz ve Elçi (2013) mevcut ve yeni kuyularla birlikte herhangi bir su talebini karşılayan yeraltısuyu pompalama maliyeti minimizasyonu probleminin



çözümü için bir S-O modeli önermişlerdir. Önerdikleri şema MODFLOW-2000 ile HS-Solver' ı birleştirmektedir. HS-Solver ise AA algoritması ve Excel çözücü eklentisini birleştiren hibrit bir optimizasyon algoritmasıdır. Önerdikleri modeli kullanarak pompalama debileri ve yeni açılacak kuyuların konumlarını karar değişkeni olarak belirleyerek pompalama maliyeti minimizasyonu problemini çözmüşlerdir. Bazı fiziksel ve yönetsel kısıtlar tanımlamışlardır. Bu kısıtları optimizasyon sürecinde ceza fonksiyonu yaklaşımını kullanarak sağlatmışlardır. Önerdikleri modelin performansını Tahtalı havzasında test etmişlerdir. Ayrıca farklı AA algoritmasının parametreleri için duyarlılık analizi gerçekleştirmişlerdir. Önerdikleri S-O modelinin sonuçlarının verilen kısıtları sağlayarak optimum sayıda, konumda ve pompalama debilerini belirlemede etkili olduğunu bulmuşlardır (Ayvaz ve Elçi 2013).

Gurarslan ve Karahan (2015) yaptıkları çalışmada, yeraltısuyu kirletici kaynak belirleme problemlerinin çözümü için geliştirilen doğruluğu yüksek bir model sunulmaktadır. Geliştirilen modelde yeraltısuyu akım ve kirletici taşınım simülasyonları MODFLOW ve MT3DMS paket programları kullanılarak yapılmaktadır. Optimizasyon sürecinde diferansiyel evrim algoritması kullanılmaktadır. Geliştirilen model, gerçek ve hata içeren gözlem verileri için ayrı ayrı iki varsayımsal akifer modelinde test edilmektedir. İlk modelde, kirletici kaynaklarının sayıları, konumları ve aktif stres periyotları bilindiği kabul edilerek sadece salınım geçmişleri belirlenmektedir. İkinci modelde, kirletici ile ilgili herhangi bir bilgi bilinmediği kabul edilerek salınım geçmişleri belirlenmektedir. Elde edilen sonuçların literatürdeki sonuçlardan daha iyi olduğu gösterilmektedir (Gurarslan ve Karahan 2015).

Zhao ve diğ. (2015) yeraltısuyu kirletici kaynaklarının karakteristiklerinin belirlenmesinde kullanılacak vekil bir model içeren zamanda verimli bir S-O modeli araştırmışlardır. Önerdikleri vekil modelde hesaplama süresi ve iş yükünü azaltmak için Latin hiperküp örnekleme ve YSA kullanmışlardır. Önerdikleri vekil model, çoğunlukla kullanılan YSA modeli ve vekil içermeyen modelin sonuçlarını karşılaştırmışlardır. Bu sayede önerdikleri modelin yeraltısuyu kaynak belirleme problemlerinde kullanılacak zamanda verimli bir teknoloji olduğunu göstermişlerdir (Zhao ve diğ. 2015).

Singh ve diğ. (2016) basınçlı akiferde gerçekleşen kirletici taşınımını modellemek için ağırsız bir radyal nokta kollokasyon metodu kullanmışlardır. Yönetici denklemlerin ayrıştırmasını nokta kollokasyon metodu ile yapmışlardır. Radyal bazlı fonksiyonları (RBF) ise interpolasyon fonksiyonu olarak kullanmışlardır. Karşılaştırmayı sıklıkla kullanılan çoklu-karesel denklemler ve üssel RBF aracılığıyla yapmışlardır. Şekil fonksiyonları oluşturmak için yerel bir dairesel destek alanı kullanmışlardır. Modelde, sonlu fark ve sonlu eleman tabanlı metotlardan farklı olarak şekil fonksiyonu oluşturulurken düğüm koordinatları dışında bir bilgiye ihtiyaç duyulmamaktadır. Geliştirilen model bir ve iki boyutlu benchmark problemler üzerinde test edilmiştir. Dahası modeli, büyük Peclet sayılarındaki advectif taşınımında test etmişler ve büyük Peclet problemlerinde görülen instabilite ile baş etmede etkili olduğunu göstermişlerdir. Modeli saha problemine uyguladıklarında ise elde ettikleri sonuçları sonlu eleman metodunun sonuçları ile karşılaştırmış ve tatmin edici sonuçlar bulmuşlardır. Geliştirilen metodun geleneksel metotlara bir alternatif olabileceğini ve kabul edilebilir işlem süresinde iyi sonuçlar ürettiğini belirtmişlerdir (Guneshwor Singh ve diğ. 2016).

Ayvaz (2016) yaptığı çalışmada kötü konumlanmış bir ters problem olan bölgesel yeraltısuyu kirletici kaynağı tanımlanması için yeni bir S-O yaklaşımı önermiştir. Önerilen yaklaşımın simülasyon kısmındaki yeraltısuyu akım ve kirletici taşınım süreçlerinin çözümleri ilgili akifer sisteminin MODFLOW ve MT3DMS paket programlarında modellenerek sağlanmaktadır. Daha sonra geliştirilen bu simülasyon model, yeni önerilen GA ve geliştirilmiş azaltılmış gradyan metodunu birleştiren bir hibrit optimizasyon modeli ile birleştirilmiştir. Önerilen hibrit optimizasyon yaklaşımının amacı, sınırlı sayıda olan gözlem kuyularındaki kirletici konsantrasyonu zaman serilerini kullanarak eş zamanlı olarak bilinmeyen bölgesel yeraltısuyu kirletici kaynaklarının konumsal dağılımlarını ve konsantrasyon girdilerini belirlemektir. Önerilen S-O yaklaşımının uygulanabilirliği farklı kirletici kaynak dağılımları için varsayımsal bir akifer modelinde gösterilmiştir. Dahası modelin performansı ölçüm hata durumları, farklı GA parametre kombinasyonları, farklı sayıdaki ve konumdaki gözlem kuyuları ve farklı heterojen hidrolik iletkenlik sahaları için test edilmiştir. Elde edilen sonuçlarla önerilen S-O yaklaşımının bölgesel yeraltısuyu kirletici kaynak belirleme problemlerinin çözümü için etkili bir yol olduğu gösterilmiştir (Ayvaz 2016).

Thomas ve diğ. (2018) akifer parametre tahmini için kedi sürüsü optimizasyonu (KSO) ve radyal nokta kollokasyon ağırsız metodun (RNKM) birleştirilmesinden oluşan yeni bir S-O modeli önermişlerdir. Karar ve durum deęişkenleri sırasıyla bölge bazlı geçirirnilik deęerleri ve önceden tanımlanmış noktadaki hidrolik yüklerdir. RNKM kullanılarak elde edilen hidrolik yükler KSO modelinin girdileri olmaktadır. RNKM-KSO modeli farklı geçirgenlik deęerleri için gözlenmiş ve simüle edilmiş hidrolik yüklerin farklarının karelerinin ağırlıklı toplamını minimize etmektedir. Dahası karşılaştırma için RNKM PSO ve seçkinmutasyona uğramış PSO (SMPSO) ile birleştirmişlerdir. Bölgesel geçirgenlik deęerlerinin tahmini için RNKM-KSO modelini sentetik bir akifere ve bir saha problemine uygulamışlardır. Sentetik problem de geçirgenlik deęerlerini mevcut sonuçlarla karşılaştırmışlardır. RNKM-KSO modelinin GA ve PSO' ya dayalı modellerin sonuçlarına göre daha doğru olduğunu göstermişlerdir. Saha probleminde parametre tahminindeki ortalama yüzdesel hataları RNKM-KSO modeli için %1.555, RNKM-PSO için %3.145 ve RNKM-SMPSO için %2.270 olarak hesaplamışlardır. Dahası güvenilirlik analizi yaparak RNKM-KSO modelinin geçirgenlik deęerlerinin tahmininde daha etkili olduğunu göstermişlerdir (Thomas ve diğ. 2018).

Vesselinov ve diğ. (2018) özel bir yarı-denetimli kümeleme algoritmasıyla birleştirilmiş, kör kaynak ayrımı (Blind Source Separation) için negatif olmayan matris faktörizasyonuna (Non-Negative Matrix Factorization) dayalı gözlem karışımlarının ayrıştırmasını gerçekleştiren yeni bir kirletici kaynağı belirleme yaklaşımı önermişlerdir. Bu yeni yaklaşım bilinmeyen sayıdaki yeraltısuyu tiplerini ve fazladan saha verisine ihtiyaç duymadan karışım oranları bilinmeyen, ölçülmüş jeokimyasal karışımlardan kirletici kaynaklarının orijinal jeokimyasal konsantrasyonunu belirleyebilmektedir. Önerdikleri yeni yaklaşımı sentetik ve gerçek saha verileri üzerinde test etmişlerdir (Vesselinov ve diğ. 2018).

Xing ve diğ. (2019) yeraltısuyundaki kirlilik kaynaklarının tanımlaması probleminin çözüm sürecinde kullanılan simülasyon modelinin hesaplama açısından verimsiz olması durumunda sonuçları iyileştirmek amacıyla grup bir vekil model önermişlerdir. Önerilen grup vekil model Kriging, RBF ve en küçük kareler destek vektör makinaları gibi üç ayrı vekil modeli içermektedir. Bu üç modelin ağırlık katsayılarını uyarlamalı Metropolis-Markov zincir Monte Carlo metodu ile

hesaplamışlardır. Grup vekil modelin performansını hem kimyasal reaksiyon içeren hem de içermeyen kirleticilerde test etmişlerdir. Elde edilen sonuçlar aracılığıyla önerilen grup vekil modelin, kirletici kaynak tanımlanması ters probleminin çözümünde, yüksek doğruluklu ve kısa hesaplama süresine sahip etkili bir metot olduğunu göstermişlerdir (Xing ve diğ. 2019).

Guo ve diğ. (2019) kirletici kaynaklarını bulmada doğrusal olmayan programlamaya dayanan bir optimizasyon modeli kullanmışlardır. Modeldeki karar değişkenleri süreklidir. Bu durum kirletici kaynak konumlarında içeren tam sayı değişkenlerinin zayıf bir şekilde tanımlanmasına yol açmıştır. Dahası kirletici kaynak sayısı arttıkça hesap yükü üssel olarak artmakta ve hassaslık azalmaktadır. Önceki çalışmalarla kıyaslandığında yaptıkları bu çalışma birkaç geliştirme içermektedir. Geliştirdikleri 0-1 karışık tam sayı doğrusal olmayan programlamaya dayanan optimizasyon modeli eş zamanlı olarak kaynak konumlarını (tam sayı değişken) ve kirletici salınımını (sürekli değişken) bulmaktadır. Optimizasyon modelindeki kısıtlardan biriside simülasyon kısmıdır. Bu kısım hesaplama sürecinde binlerce defa kullanıldığı için çok fazla hesaplama yüküne sebep olmaktadır. Araştırmacılar bu soruna çözüm olarak Kriging vekil modelini geliştirmişlerdir. Ayrıca GA ile kirletici kaynak konumlarını ve salınımlarını hesaplayarak karşılaştırmışlardır. Kriging vekil modelin kirletici kaynak konumlarını ve salınımlarını yüksek doğruluk ve kısa hesaplama süresinde simüle edebildiğini göstermişlerdir (Guo ve diğ. 2019).

## 2. MATEMATİKSEL MODELLER

Bu bölümde, öncelikle yeraltısu akımının ve kirletici taşınımının simülasyonunun gerçekleştirilmesini sağlayan KDD tanıtılacaktır. Bundan sonra tez çalışması kapsamında geliştirilen sayısal şema, kirletici kaynak karakteristiklerinin belirlenmesi ters probleminde kullanılan S-O modeli, bu metodolojinin performansını anlayabilmek amacıyla kullanılan değerlendirme kriterleri ve bu modelin içine gömülen vekil modeller anlatılacaktır.

İki boyutlu doygun bölgedeki basınçlı bir akifer sistemi için yeraltısu akımını temsil eden KDD aşağıdaki gibidir (Bear ve Cheng 2010).

$$S \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( T_{ij} \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) + W \quad (2.1)$$

Denklem (2.1)'de  $S$  depolama katsayısını [-],  $h$  hidrolik yükü [L],  $t$  zaman boyutunu [T],  $x_i$  kartezyan koordinatları [L],  $W$  akifere su girişini (artı işaret) veya su çıkışını (eksi işaret) temsil eden birim alandaki hacimsel akı [ $LT^{-1}$ ],  $T_{ij}$  akifer iletim kapasitesi tensörünün bileşenlerini [ $L^2T^{-1}$ ] temsil etmekte olup  $K_{ij}b$ 'ye eşittir.  $K_{ij}$  hidrolik iletkenlik tensörünün bileşenlerini [ $LT^{-1}$ ],  $b$  akiferin doygun kalınlığını [L] temsil etmektedir.

Yeraltısu ortamında reaktif olmayan kirletici madde taşınımını temsil eden adveksiyon-difüzyon KDD aşağıdaki gibidir (Bear ve Cheng 2010).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (V_i C) + \frac{C_s W}{b\theta} \quad (2.2)$$

Denklem (2.2)'de  $C$  kirletici madde konsantrasyonunu [ $ML^{-3}$ ],  $V_i$  akış hızını [ $LT^{-1}$ ],  $\theta$  akiferin efektif porozite değerini [-],  $C_s$  kaynak/yitik akımındaki kirletici madde konsantrasyonunu [ $ML^{-3}$ ] ve  $D_{ij}$  hidrodinamik dispersiyon tensörünün bileşenlerini [ $L^2T^{-1}$ ] göstermektedir.

Denklem (2.1) ve Denklem (2.2) aşağıda verilen Darcy yasası aracılığıyla birleştirilmektedir.

$$V_i = -\frac{K_{ii}}{\theta} \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (2.3)$$

Denklem (2.3) kullanılarak elde edilen hız değerleri yardımıyla  $D_{ij}$  hidrodinamik dispersiyon tensörünün bileşenleri boyuna ( $\alpha_L$ ) ve enine ( $\alpha_T$ ) dispersivite katsayıları [L] aracılığıyla aşağıdaki şekilde hesaplanmaktadır (Bear ve Cheng 2010).

$$D_{xx} = \frac{\alpha_L V_x^2 + \alpha_T V_y^2}{\sqrt{V_x^2 + V_y^2}} + D^*; \quad D_{xy} = D_{yx} = \frac{V_x V_y (\alpha_L - \alpha_T)}{\sqrt{V_x^2 + V_y^2}}; \quad (2.4)$$

$$D_{yy} = \frac{\alpha_L V_y^2 + \alpha_T V_x^2}{\sqrt{V_x^2 + V_y^2}} + D^*$$

Burada  $D^*$  etkili moleküler difüzyon katsayısıdır [ $L^2T^{-1}$ ]. Moleküler difüzyon katsayısı, mekanik dispersiyon katsayısına kıyasla son derece küçüktür. Bu nedenle hesaplamalarda ihmal edilebilir.

## 2.1 Simülasyon Modeli

Bir simülasyon modeli, ilgili sistemi temsil eden matematiksel denklemlerin çözülmesiyle elde edilebilmektedir. Örneğin kirletici taşınımının simülasyon modelini oluşturmak için Denklem (2.2)'de verilen kirletici taşınımını temsil eden adveksiyon-difüzyon denkleminin birtakım başlangıç ve sınır koşullarına bağlı olarak çözülmesi gerekmektedir. Ancak bu denklemin çözülebilmesi için hız değerlerinin bilinmesi gerekmektedir. Bu sebeple öncelikle ilgili bölgenin belirli başlangıç ve sınır koşulları altında yeraltısuyu akım KDD çözülmelidir. Buradan elde edilen hidrolik yükler yardımıyla hız değerleri hesaplanır. Bu hız değerleri yardımıyla adveksiyon-difüzyon denklemi çözülerek kirletici taşınım simülasyon modeli oluşturulmaktadır.

Çalışma kapsamında simülasyon modelleri oluşturulmasında yeni geliştirilen B-spline ÇM kullanılmaktadır. Bu şemada konum türevlerinin hesaplanmasında kuintik B-spline fonksiyonları (KBS), zaman integrasyonunda ise adaptif Runge-Kutta şeması kullanılmaktadır. B-spline ÇM detayları aşağıda anlatılmaktadır.

### 2.1.1 B-spline ÇM

B-spline ÇM yaklaşımında ilk olarak konum türevleri KBS fonksiyonları yardımıyla hesaplanmaktadır. Daha sonra hesaplanan bu değerler ilgili denklemde yerine yazılmaktadır. Böylece problem zamana bağlı adi diferansiyel denklem (ADD) sistemine dönüştürülmektedir. Bu sistemin integrasyonu DOPRI5 olarak bilinen beşinci mertebeden adaptif Runge-Kutta şeması yardımıyla gerçekleştirilmektedir. Geliştirilen metodoloji hem Denklem (2.1)'in hem de Denklem (2.2)'nin sayısal çözümünde kullanılmaktadır. B-spline ÇM'nun formülasyonu Denklem (2.2) üzerinden anlatılmakta olup detayları aşağıdaki bölümlerde sunulmaktadır. Bu çözüm yaklaşımı Denklem (2.1)'de verilen akım denkleminde de benzer şekilde uygulanmaktadır.

#### 2.1.1.1 Konum Türevlerinin KBS Fonksiyonları ile Hesaplanması

İki boyutlu çözüm alanı  $x$  ve  $y$  yönlerinde sırasıyla  $\Delta x = x_{i+1} - x_i$  ve  $\Delta y = y_{j+1} - y_j$  eşit aralıkları kullanılarak  $(x_i, y_j)$  düğüm noktalarına ayrılmaktadır. Burada  $i = 0, 1, \dots, N$  ve  $j = 0, 1, \dots, M$ 'dir. Amacımız iki yöndeki her vektör için KBS fonksiyonlarını oluşturmaktır. Daha sonra konum türevleri, bu fonksiyonların türevleri alınarak hesaplanabilecektir. Çözüm alanı  $M + 1$  satır vektörü ve  $N + 1$  sütun vektörü içermektedir. Bu sebeple kirlenici konsantrasyonları için  $(M + 1) + (N + 1)$  defa KBS fonksiyonları oluşturulmalıdır.

$C(x, y, t)$  konsantrasyon değerleri, KBS fonksiyonlarıyla yaklaşık olarak  $\tilde{C}(x, y, t)$  ile temsil edilebilmektedir. KBS fonksiyonlarının matematiksel formülasyonu satır ve sütun vektörlerini dikkate alarak sırasıyla  $x$  ve  $y$  yönleri için aşağıdaki gibidir.

$$C(x, y_j, t) \approx \tilde{C}(x, y_j, t) = \sum_{i=-2}^{N+2} \delta_{j,i}(t) B_i(x), \quad j = 0, 1, \dots, M \quad (2.5)$$

$$C(x_i, y, t) \approx \tilde{C}(x_i, y, t) = \sum_{j=-2}^{M+2} \gamma_{j,i}(t) Q_j(y), \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (2.6)$$

Burada  $\delta_{j,i}(t)$  ve  $\gamma_{j,i}(t)$  başlangıç ve sınır koşulları kullanılarak hesaplanması gereken zamana bağlı parametre matrisleridir.  $B_i(x)$  ve  $Q_j(y)$  ise sırasıyla Denklem (2.7) ve Denklem (2.8)'de verilen  $x$  ve  $y$  yönleri için KBS temel fonksiyonlarıdır (Mittal ve Arora 2010).

$$B_i(x) = \frac{1}{\Delta x^5} \begin{cases} (x - x_{i-3})^5 & x \in [x_{i-3}, x_{i-2}) \\ (x - x_{i-3})^5 - 6(x - x_{i-2})^5 & x \in [x_{i-2}, x_{i-1}) \\ (x - x_{i-3})^5 - 6(x - x_{i-2})^5 + 15(x - x_{i-1})^5 & x \in [x_{i-1}, x_i) \\ (x_{i+3} - x)^5 - 6(x_{i+2} - x)^5 + 15(x_{i+1} - x)^5 & x \in [x_i, x_{i+1}) \\ (x_{i+3} - x)^5 - 6(x_{i+2} - x)^5 & x \in [x_{i+1}, x_{i+2}) \\ (x_{i+3} - x)^5 & x \in [x_{i+2}, x_{i+3}) \\ 0 & \text{diğer} \end{cases} \quad (2.7)$$

$$Q_j(y) = \frac{1}{\Delta y^5} \begin{cases} (y - y_{j-3})^5 & y \in [y_{j-3}, y_{j-2}) \\ (y - y_{j-3})^5 - 6(y - y_{j-2})^5 & y \in [y_{j-2}, y_{j-1}) \\ (y - y_{j-3})^5 - 6(y - y_{j-2})^5 + 15(y - y_{j-1})^5 & y \in [y_{j-1}, y_j) \\ (y_{j+3} - y)^5 - 6(y_{j+2} - y)^5 + 15(y_{j+1} - y)^5 & y \in [y_j, y_{j+1}) \\ (y_{j+3} - y)^5 - 6(y_{j+2} - y)^5 & y \in [y_{j+1}, y_{j+2}) \\ (y_{j+3} - y)^5 & y \in [y_{j+2}, y_{j+3}) \\ 0 & \text{diğer} \end{cases} \quad (2.8)$$

KBS temel fonksiyonlarının, birinci ve ikinci türevlerinin düğüm noktalarındaki değerleri Tablo 2.1 ve 2.2'de verilmektedir.

**Tablo 2.1:** Düğüm noktalarındaki  $B_i(x)$  ve türevlerinin aldığı değerler

$x$	$x_{i-3}$	$x_{i-2}$	$x_{i-1}$	$x_i$	$x_{i+1}$	$x_{i+2}$	$x_{i+3}$
$B_i(x)$	0	1	26	66	26	1	0
$B'_i(x)$	0	$-5/\Delta x$	$-50/\Delta x$	0	$50/\Delta x$	$5/\Delta x$	0
$B''_i(x)$	0	$20/\Delta x^2$	$40/\Delta x^2$	$-120/\Delta x^2$	$40/\Delta x^2$	$20/\Delta x^2$	0



**Tablo 2.2:** Dügüm noktalarındaki  $Q_j(y)$  ve türevlerinin aldığı değerler

$y$	$y_{j-3}$	$y_{j-2}$	$y_{j-1}$	$y_j$	$y_{j+1}$	$y_{j+2}$	$y_{j+3}$
$Q_j(y)$	0	1	26	66	26	1	0
$Q'_j(y)$	0	$-5/\Delta y$	$-50/\Delta y$	0	$50/\Delta y$	$5/\Delta y$	0
$Q''_j(y)$	0	$20/\Delta y^2$	$40/\Delta y^2$	$-120/\Delta y^2$	$40/\Delta y^2$	$20/\Delta y^2$	0

Dügüm noktalarındaki yaklaşık konsantrasyon değerleri ve birinci ve ikinci mertebeden türevleri, Tablo 2.1 ve 2.2’de verilen KBS fonksiyonlarının değerleri ve Denklem (2.5) ve Denklem (2.6)’daki yaklaşık fonksiyonlar kullanılarak  $\delta_{j,i}(t)$  ve  $\gamma_{j,i}(t)$  terimleri cinsinden hesaplanabilir.  $\delta_{j,i}(t)$  ve  $\gamma_{j,i}(t)$  değerlerinin bulunması için gerekli adımlar Ek A’ da detaylı bir şekilde sunulmaktadır.

### 2.1.1.2 Zaman İntegrasyonu

ÇM, KDD’in ADD sistemine dönüştüğü güçlü bir yaklaşımdır. Bu yaklaşımın temel avantajı, ADD sisteminin integrasyonunda iyi kurulmuş, sağlam, iyice test edilmiş integratörlerin kullanılabilmesidir (Hamdi ve diğ. 2007). Denklem (2.2)'de verilen kirletici taşınım denkleminin konumsal türevleri KBS fonksiyonları tarafından hesaplandığında, aşağıda verilen zamana bağlı ADD sistemi elde edilir.

$$\frac{dC}{dt} = \mathcal{L}(t, C) \quad (2.9)$$

Burada  $\mathcal{L}$ , konumsal diferansiyel operatörü belirtir. DOPRI5 (Dormand ve Prince 1980) olarak bilinen beşinci mertebeden adaptif Runge-Kutta formülü,  $(M + 1) \times (N + 1)$  adet ADD’den oluşan Denklem (2.9)’un zaman integrasyonu için kullanılmaktadır.

DOPRI5, ADD çözümünde kullanılan adaptif bir integrasyon yöntemidir ve Runge-Kutta ailesinin bir üyesidir (Dormand ve Prince 1980). Yedi aşaması vardır, ancak FSAL (First Same As Last) özelliğine sahip olduğu için adım başına yalnızca altı işlem gerçekleştirilmektedir. Son aşama, bir sonraki adımın ilk aşaması ile aynı olarak değerlendirilmektedir. DOPRI5'teki katsayılar beşinci dereceden çözümün hatasını en aza indirecek şekilde seçilmektedir. Bu, dördüncü dereceden çözümün

küçük bir hataya sahip olması için geliştirilen Fehlberg yöntemi (Fehlberg 1969) ile temel farktır. Bu nedenle, daha üst düzey çözüm gerektiğinde DOPRI5 yönteminin kullanılması daha uygundur (Shampine 1986). Bu tür adaptif zaman integrasyonu yöntemleri, kesme hatalarını her adım için her zaman belirli bir değerin altında tutmakta ve hataların kontrolsüz bir şekilde büyümesini önlemektedir. Başka bir deyişle, sayısal hataların aşırı büyümesi önlenmekte ve sayısal yöntemin kararlılığı korunmaktadır. Ardışık zaman adımları için sayısal konsantrasyon değerleri, DOPRI5 şeması ile aşağıdaki gibi hesaplanmaktadır:

$$\mathbf{k}_1 = \mathcal{L}(t_p, \mathbf{C}_p) \quad (2.10)$$

$$\mathbf{k}_v = \mathcal{L}\left(t_p + \omega_v \Delta t_p, \mathbf{C}_p + \Delta t_p \sum_{\zeta=1}^{v-1} \phi_{v,\zeta} \mathbf{k}_\zeta\right), \quad v = 2, 3, \dots, 7 \quad (2.11)$$

$$\mathbf{C}_{p+1} = \mathbf{C}_p + \Delta t_p \sum_{v=1}^7 \psi_v \mathbf{k}_v \quad (2.12)$$

Burada,  $p$  ve  $v$  zaman ve aşama indekslerini temsil eder,  $\mathbf{k}_v$  her aşamada hesaplanan yaklaşık eğim matrisidir,  $\Delta t_p$  ise  $t_p$  zamanında dinamik olarak belirlenmiş zaman adımıdır,  $\omega_v$ ,  $\phi_{v,\zeta}$ ,  $\psi_v$  katsayıları Tablo 2.3'te verilen Butcher dizisinin elemanlarıdır (Butcher 1964).

DOPRI5 şeması için yerel kesme hatası yaklaşık olarak Denklem (2.13)'de verilen formülle elde edilir. Bu hata matrisinin sonsuz normu, kullanıcı tanımlı izin verilen maksimum hata toleransı ile karşılaştırılır. Eğer  $\|\mathbf{e}_{p+1}\|_\infty \leq e_{tol}$  koşulu sağlanmışsa, zaman adımı Denklem (2.14)'de verilen formülasyona göre hesaplanır. Aksi takdirde,  $\Delta t_{p+1}$  zaman adımı iteratif olarak  $\|\mathbf{e}_{p+1}\|_\infty \leq e_{tol}$  koşulu sağlanana kadar Denklem (2.14) kullanılarak güncellenir. Bu çalışmada,  $e_{tol} = 1 \times 10^{-6}$  olarak seçilmekte ve  $\Delta t_{p+1}/\Delta t_p$  oranı  $[0.1, 10]$  ile sınırlandırılmaktadır.

$$\mathbf{e}_{p+1} = \Delta t_p \sum_{v=1}^7 (\psi_v - \hat{\psi}_v) \mathbf{k}_v \quad (2.13)$$

$$\Delta t_{p+1} = 0.9 \Delta t_p \left( \frac{e_{tol}}{\|\mathbf{e}_{p+1}\|_\infty} \right)^{1/5}, \quad \|\mathbf{e}_{p+1}\|_\infty \leq e_{tol} \quad (2.14)$$

**Tablo 2.3:** DOPRI5 için Butcher dizisi (Dormand ve Prince 1980).

$\omega$	$\phi$						
0	0						
$\frac{1}{5}$	$\frac{1}{5}$	0					
$\frac{3}{10}$	$\frac{3}{40}$	$\frac{9}{40}$	0				
$\frac{4}{5}$	$\frac{44}{45}$	$-\frac{56}{15}$	$\frac{32}{9}$	0			
$\frac{8}{9}$	$\frac{19372}{6561}$	$-\frac{25360}{2187}$	$\frac{64448}{6561}$	$-\frac{212}{729}$	0		
1	$\frac{9017}{3168}$	$-\frac{355}{33}$	$\frac{46732}{5247}$	$\frac{49}{176}$	$-\frac{5103}{18656}$	0	
1	$\frac{35}{384}$	0	$\frac{500}{1113}$	$\frac{125}{192}$	$-\frac{2187}{6784}$	$\frac{11}{84}$	0
$\psi^T$	$\frac{35}{384}$	0	$\frac{500}{1113}$	$\frac{125}{192}$	$-\frac{2187}{6784}$	$\frac{11}{84}$	0
$\hat{\psi}^T$	$\frac{5179}{57600}$	0	$\frac{7571}{16695}$	$\frac{393}{640}$	$-\frac{92097}{339200}$	$\frac{187}{2100}$	$\frac{1}{40}$

## 2.2 S-O Modeli

S-O modelleri kirletici kaynak karakteristiklerinin belirlenmesi gibi ters problemlerin çözülmesinde kullanılmaktadır. S-O modeli, simülasyon ve optimizasyon süreçleri olmak üzere iki kısımdan oluşmaktadır. Simülasyon kısmında akım ve kirletici taşınım modelleri zamanda ileriye doğru çözülmektedir. Bu kısımda kullanılan simülasyon modelinin detayları yukarıda verilmektedir. Optimizasyon kısmında ise kirletici kaynaklarının konumları, sayıları, salınım geçmişleri ve aktif stres periyotları simülasyon modeli defalarca çalıştırılarak belirlenmektedir.

### 2.2.1 Optimizasyon Modeli

Daha önce bahsedildiği gibi optimizasyon modelinin amacı akiferdeki kirletici kaynak karakteristiklerinin belirlenmesi ters problemine çözüm üretmektir. Bu amaç, gözlem kuyularında belirli zamanlarda gözlenen konsantrasyonlar ve simülasyon modeli ile hesaplanan konsantrasyonlar arasındaki farkların minimize edilmesiyle gerçekleştirilmektedir. Optimizasyon modelinin amaç fonksiyonu ve karar değişkenlerinin sınırları aşağıdaki gibidir.

$$F_{n_k, n_{asp}} = \min \left( \sum_{t=1}^{n_{tsp}} \sum_{m=1}^{n_{göz}} (C_{m,t} - \hat{C}_{m,t})^2 \Phi_{m,t} \right) \quad (2.15)$$

$$\mathbf{C} = f(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{q}) \quad (2.16)$$

$$\mathbf{x}_{min} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}_{maks} \quad (2.17)$$

$$\mathbf{y}_{min} \leq \mathbf{y} \leq \mathbf{y}_{maks} \quad (2.18)$$

$$\mathbf{q}_{min} \leq \mathbf{q} \leq \mathbf{q}_{maks} \quad (2.19)$$

Burada  $n_k$  belirlenmesi gereken kaynak sayısını,  $n_{asp}$  belirlenmesi gereken kirletici kaynaklarının aktif stres periyodunu,  $n_{tsp}$  toplam stres periyodu sayısını,  $n_{göz}$  gözlem kuyularının sayısını,  $C_{m,t}$   $m$  numaralı gözlem kuyusu ve  $t$  numaralı stres periyodundaki simülasyon modeli ile hesaplanan konsantrasyon değerini,  $\hat{C}_{m,t}$  ise  $m$  numaralı gözlem kuyusu ve  $t$  numaralı stres periyodundaki gözlenen konsantrasyon değerini,  $\mathbf{x} = [x_1, x_2, \dots, x_{n_k}]$  kirletici kaynaklarının  $x$  eksenindeki koordinatlarını içeren vektörü,  $\mathbf{y} = [y_1, y_2, \dots, y_{n_k}]$  kirletici kaynaklarının  $y$  eksenindeki koordinatlarını içeren vektörü,  $\mathbf{q} = [q_1^1, q_2^1, \dots, q_{n_k}^1, q_1^2, q_2^2, \dots, q_{n_k}^2, \dots, q_1^{n_{asp}}, q_2^{n_{asp}}, \dots, q_{n_k}^{n_{asp}}]$  kirletici kaynaklarının her aktif stres periyodundaki akılarını içeren vektörü,  $f(*)$  ise kirletici kaynak konumları ve akılarını kullanarak simülasyon modeli ile  $\mathbf{C} = [C_{1,1}, C_{2,1}, \dots, C_{n_{göz},1}, C_{1,1}, C_{2,1}, \dots, C_{n_{göz},2}, \dots, C_{1,1}, C_{2,1}, \dots, C_{n_{göz},n_{tsp}}]$  dönüştüren fonksiyonu belirtmektedir. Karar değişkenlerinin minimum ve maksimum sınırları Denklem (2.17)-(2.19) belirtildiği biçimde tanımlanmaktadır.

$\Phi_{m,t}$  ağırlık katsayısı aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$\Phi_{m,t} = \frac{1}{(\hat{C}_{m,t} + \eta)^2} \quad (2.20)$$

Burada  $\eta$  kullanıcı tarafından belirtilen yeterince büyük sabit bir sayı olmakla birlikte gözlem kuyularındaki düşük konsantrasyon değerlerinin çözümde baskın hale gelmemesi için kullanılmaktadır. Bu çalışmada bu değer 100 ppm olarak seçilmiştir (Singh ve Datta 2006).

### 2.2.1.1 Diferansiyel Evrim Algoritması

Diferansiyel evrim algoritması global optimizasyon problemlerine çözüm üreten evrimsel algoritmalarından birisidir. Kusursuz olmamakla birlikte benzerlerine göre daha hızlı ve etkili bir şekilde global optimuma ulaştığı gösterilmiştir (Storn ve Price 1997). Evrimsel algoritmalara benzer olarak mutasyon, çaprazlama ve seçim operatörlerini içermektedir. Bu operatörler sayesinde çözüm uzayında global optimumu aramaktadır. Bu arama süreci ilk olarak belirli popülasyon sayısında potansiyel çözüm vektörlerinin oluşturulmasıyla başlar. Daha sonra bu popülasyon içerisinde rastgele ebeveyn vektörler seçilmekte ve bunlar kullanılarak mutant vektör oluşturulmaktadır. Çaprazlama işlemiyle ebeveyn ve mutant vektörler kullanılarak deneme vektörü oluşturulmaktadır. Son olarak popülasyon vektörü ve deneme vektöründen daha iyi olan sonuç bir sonraki jenerasyona aktarılmaktadır. Maksimum jenerasyon sayısına ya da durdurma kriterine ulaşıncaya kadar bu işlemler tekrarlanmaktadır. Diferansiyel evrim algoritmasındaki işlemler matematiksel olarak aşağıda gösterilmektedir.

$$\mathbf{V}_{i,G+1} = \mathbf{P}_{r1,G} + MF(\mathbf{P}_{r2,G} - \mathbf{P}_{r3,G}) \quad (2.21)$$

Burada  $\mathbf{V}_{i,G+1}$  yeni oluşturulan mutant vektörü,  $G$  jenerasyonu,  $i, r1, r2, r3 \in [1, \dots, NP]$  birbirinden farklı olan ve rastgele seçilen popülasyon indekslerini belirtmektedir.  $\mathbf{P}_{r1,G}$ ,  $\mathbf{P}_{r2,G}$ , ve  $\mathbf{P}_{r3,G}$  mutasyon işleminde kullanılacak ebeveyn vektörlerini temsil etmektedir. MF fark vektörüne etki eden mutasyon faktörü katsayısını temsil etmektedir.

Ebeveyn vektör ve oluşturulan mutant vektör çaprazlama işlemine maruz bırakılarak deneme yani çocuk vektörü oluşturulmaktadır. Çaprazlama işlemi aşağıdaki gibi yapılmaktadır.

$$U_{ij,G+1} = \begin{cases} V_{ij,G+1} & \text{eğer randb} \leq \text{CR veya } j \leq \text{jrand} \\ P_{ij,G} & \text{eğer randb} > \text{CR veya } j > \text{jrand} \end{cases} \quad (2.22)$$

Burada  $j \in [1, 2, \dots, \text{ND}]$  olmakla birlikte karar değişkeni indeksini,  $\text{randb} \in [0, 1]$  düzgün dağılıma uygun belirlenen rastgele bir sayıyı,  $\text{CR} \in [0, 1]$  çaprazlama oranı katsayısını,  $\text{jrand} \in [1, 2, \dots, \text{ND}]$  ise rastgele belirlenen bir tamsayıyı belirtmektedir. Bu sayede  $\mathbf{U}_{i,G+1}$  çocuk vektörüne  $\mathbf{V}_{i,G+1}$  mutant vektöründen en az bir eleman seçilmesi garanti edilmektedir.

Seçim aşamasında ebeveyn ve çocuk vektörün amaç fonksiyonu değerleri karşılaştırılmaktadır. Çalışma kapsamında oluşturulan optimizasyon probleminin amaç fonksiyonu Denklem (2.15)'te verilmekte olup gözlem kuyularında gözlenen konsantrasyon ile simülasyon modeli aracılığıyla hesaplanan konsantrasyonların farklarının karelerinin toplamı minimize edilmeye çalışılmaktadır. Bu sebeple ebeveyn ve çocuk vektörlerden hangisi daha küçük hata değeri üretiyorsa bu vektör bir sonraki jenerasyona aktarılmaktadır. Bu seçim işleminin matematiksel gösterimi aşağıdaki gibidir.

$$\mathbf{P}_{i,G+1} = \begin{cases} \mathbf{U}_{i,G+1} & F(\mathbf{U}_{i,G+1}) < F(\mathbf{P}_{i,G}) \\ \mathbf{P}_{i,G} & \text{diğer} \end{cases} \quad (2.23)$$

Yukarıda bahsedildiği şekilde diferansiyel evrim algoritmasında arama süreci öncesinde belirlenmesi gereken üç parametre vardır. Bunlar popülasyondaki potansiyel vektör sayısı NP, mutasyon faktörü katsayısı MF ve çaprazlama oranı katsayısı CR'dir. Çalışma kapsamında MF ve CR katsayıları her jenerasyonda dinamik olarak değiştirilerek  $[0.5, 1]$  aralığında rastgele olarak belirlenmektedir. NP ise 20 olarak alınmıştır (Gurarslan ve Karahan 2015). Optimizasyon süreci popülasyondaki en iyi ve en kötü amaç fonksiyonu değerleri arasındaki farkın önceden belirlenmiş bir hata toleransı değerinin altına ininceye kadar veya maksimum jenerasyona ulaşıncaya kadar devam ettirilmektedir. Çalışma kapsamında

bu hata toleransı  $1 \times 10^{-10}$  olarak maksimum jenerasyon sayısı ise 10000 olarak seçilmiştir.

### 2.2.1.2 Optimum kaynak sayısı ve aktif stres periyotlarının belirlenmesi

Kirletici kaynak konumları ve akıları Denklem (2.15)-(2.19) verilen matematiksel formülasyon aracılığı ile hesaplanabilir. Ancak bu işlemin yapılabilmesi için optimizasyon sürecine başlamadan önce kirletici kaynak sayılarının ve aktif stres periyotlarının bilinmesi gerekmektedir. Bu amaçla kaynak sayısı ve aktif stres periyotlarının belirlenebilmesi için kapalı bir arama süreci kullanılmıştır.

$$F_{1,1} \rightarrow F_{1,2} \rightarrow F_{1,m_{asp}} \rightarrow F_{2,1} \rightarrow F_{2,2} \rightarrow F_{m_k,m_{asp}} \quad (2.24)$$

Burada  $m_k$  ve  $m_{asp}$  sırasıyla arama sürecinden önce belirlenen aramanın yapılacağı maksimum kaynak sayısı ve aktif stres periyotlarını belirtmektedir. Arama süreci kirletici kaynak sayısı ve aktif periyodu 1 alınarak başlamakta ve sistematik olarak Denklem (2.24)'te belirtildiği şekilde maksimum değerlere ulaşıncaya kadar devam etmektedir. Bu arama sürecinin sonucunda en düşük amaç fonksiyonu değerini veren kaynak sayısı ve aktif stres periyodunun optimum değerler olduğu kabul edilmektedir.

### 2.2.1.3 Ölçüm hatalarının dahil edilmesi

Kirletici kaynak karakteristiklerinin belirlenmesi probleminin çözümü için önerilen metodolojinin temel amacı gözlem kuyularındaki simüle edilen konsantrasyonlar ile gözlenen konsantrasyonların benzeştirilmesine dayanmaktadır. Ancak gözlem kuyularındaki konsantrasyon değerleri elde edilirken yapılan ölçümler veya laboratuvar testleri belli oranlarda hatalar içermektedir. Bu hataların çözüm metodolojisine olan etkisi incelemek amacıyla gözlem kuyularındaki konsantrasyon değerleri aşağıda belirtildiği şekilde belli oranlarda pertürbe edilecektir.

$$C^* = C + \delta\alpha C \quad (2.25)$$

Burada  $\mathbf{C}$  gözlem kuyularındaki gözlenen konsantrasyon değerlerini,  $\mathbf{C}^*$  hata terimleri eklenerek pertürbe edilmiş gözlem kuyularındaki konsantrasyon değerlerini,  $\delta$  ortalaması 0 ve standart sapması 1 alınarak normal dağılıma göre üretilmiş hata terimlerini temsil etmektedir.  $\alpha$  ise  $0 \leq \alpha \leq 1$  aralığında bir sayı olmakla birlikte yapılan hatanın büyüklüğünü göstermektedir. Örneğin  $\alpha < 0.10$  düşük gürültü seviyesini,  $0.10 \leq \alpha \leq 0.15$  orta gürültü seviyesini,  $\alpha > 0.15$  ise yüksek gürültü seviyesini belirtmektedir (Singh ve Datta 2006). 10 farklı  $\delta$  hata terimleri üretilerek Denklem (2.25) kullanılarak gözlem kuyularındaki değerler pertürbe edilmiştir. Analiz sonuçlarının değerlendirilmesinde bu değerlerin ortalamaları alınmıştır.

#### 2.2.1.4 Performans değerlendirme kriterleri

Kirletici kaynak karakteristiklerinin belirlenmesi için önerilen metodolojinin performansını görebilmek için çeşitli performans değerlendirme kriterleri kullanılmıştır. Farklı performans değerlendirme kriterleri kullanılabilir. Çalışma kapsamında literatürden alınan normalize hata (NH), ortalama belirleme hatasının yüzdesi (OBHY) ve standart sapma (SS) gibi üç farklı performans kriteri dikkate alınmıştır. Bu kriterler sırasıyla tanıtılacaktır. NH değerinin hesaplanması aşağıdaki gibidir (Singh ve Datta 2006).

$$NH = \frac{\sum_{t=1}^{n_{tsp}} \sum_{i=1}^{n_k} |\bar{q}_{i,t} - q_{i,t}|}{\sum_{t=1}^{n_{tsp}} \sum_{i=1}^{n_k} q_{i,t}} \times 100 \quad (2.26)$$

Burada  $q_{i,t}$   $i$  numaralı kirletici kaynağında  $t$  stres periyodunda gözlenen kaynak akısını,  $\bar{q}_{i,t}$  ise  $i$  numaralı kirletici kaynağında  $t$  stres periyodunda önerilen metodoloji ile belirlenen kaynak akılarının ortalamasını belirtmektedir.  $n_k$  kirletici kaynak sayısını,  $n_{tsp}$  toplam stres periyodu sayısını temsil etmektedir. Belirlenen konsantrasyon değerlerinin gözlenen değerlere yaklaşmasıyla Denklem (2.26)'da görüldüğü üzere NH değeri sıfıra yaklaşmaktadır. 10 farklı çözüm için elde edilen OBHY hesaplanması aşağıdaki gibidir (Singh ve Datta 2006).

$$OBHY = \frac{|\bar{q}_{i,t} - q_{i,t}|}{q_{i,t}} \times 100 \quad (2.27)$$



Denklem (2.27)'den görüldüğü gibi OBHY değeri her kirletici kaynağı ve aktif stres periyodu için ayrı ayrı hesaplanmaktadır. 10 farklı çözümden elde edilen değerler kullanılarak her kaynak ve stres periyodu için SS aşağıdaki gibi hesaplanmaktadır.

$$SS = \sqrt{\frac{\sum_{r=1}^{n_t} (\bar{q}_{i,t} - q_{i,t,r})^2}{n_t - 1}} \quad (2.28)$$

Burada  $n_t$  yapılan toplam analiz sayısını belirtmektedir. Bu çalışma da 10 farklı çözüm üretilerek incelemeler yapılmıştır.  $q_{i,t,r}$   $r$  numaralı analizin  $i$  numaralı kaynağının  $t$  aktif stres periyodundaki kaynak akısını temsil etmektedir.

### 2.3 Vekil Model

Belirtildiği gibi akım ve kirletici taşınım süreçlerinin simülasyonu KBS-DOPRI5 sayısal şeması ile yapılacaktır. Yeraltısuyu kirletici kaynak karakteristikleri belirleme ters probleminin çözümünde bu simülasyon süreçleri optimizasyon algoritmasının içine entegre edilecek olup her iterasyonda sayısal şema ile sayısal model oluşturulacaktır. KBS-DOPRI5 sayısal şemasının standart şemalara göre daha kısa sürede doğruluğu yüksek sonuçlar ürettiği bilinmektedir (Bahar ve Gurarşlan 2020). Buna rağmen bu işlemin defalarca yapılması ters problemin çözüm süresini oldukça arttırmaktadır. Özellikle sayısal şemadan oluşacak sayısal yaklaşım hatalarını azaltmak amacıyla ilgili probleme bağlı olarak konumdaki aralıkların küçültülmesi gerekmektedir. Bu küçültmeden dolayı akiferi temsil eden nokta sayısı artmakta ve buna bağlı olarak sayısal modelin oluşturulması için gereken işlem süresi de artmaktadır. Bu sebeple sayısal şemanın görevini çok daha hızlı bir şekilde gerçekleştirecek vekil bir model kullanılması işlem süresini oldukça kısaltacaktır. Bu amaçla çalışma kapsamında konsantrasyon TM yaklaşımı ve destek vektör makinesi vekil modeller olarak kullanılmaktadır. Aşağıda bu modellerin detayları anlatılmaktadır.

### 2.3.1 Konsantrasyon TM yaklaşımı

Konsantrasyon TM sayesinde sayısal şema girdileri (kirletici kaynak konumları ve akıları) kullanılarak gözlem kuyularındaki konsantrasyon değerleri hesaplanabilmektedir. Konsantrasyon TM doğrusal süperpozisyon ilkesine dayandığı için Denklem (2.2)'deki kaynak akı girdisinin doğrusal olması gerekmektedir. Bu tanıma bağlı olarak konsantrasyon TM aşağıdaki gibi tanımlanmaktadır.

$$C_{m,t} = \sum_{k=1}^{n_{pk} \times n_{asp}} R_{m,t}^k \cdot q_0^k; \quad R_{m,t}^k \in \mathbf{R} \quad (2.29)$$

Burada  $n_{pk}$  potansiyel kirletici kaynak konumlarının sayısını,  $q_0^k$  kirletici kaynaklarının aktif stres periyotlarındaki akıları,  $\mathbf{R}$  ise konsantrasyon TM temsil etmektedir. Bu matris  $n_{pk} \times n_{asp}$  adet sütun,  $n_{göz} \times n_{tsp}$  adet satırdan oluşmaktadır.  $R_{m,t}^k$  konsantrasyon TM elemanlarını temsil etmektedir. Bu elemanların her biri için ayrı ayrı simülasyon modeli çalıştırılması gerekmektedir. Bu işlemlerden sonra  $R_{m,t}^k = \partial C_{m,t} / \partial q_0^k$  eşitliği kullanılarak hesaplanmaktadır (Ayvaz 2016).

### 2.3.2 Destek Vektör Makinesi

Oluşturulacak vekil modelin giriş ve çıkış verileri arasındaki ilişkiyi doğru bir şekilde temsil ediyor olması gerekmektedir. Burada giriş verileri kirletici kaynaklarındaki konsantrasyon akılarını çıkış verileri ise gözlem kuyularındaki konsantrasyon değerlerini belirtmektedir. Eğitim veri seti kullanılarak destek vektör makinesi (DVM) modeli elde edildikten sonra giriş verileri modele girilerek gözlem kuyularındaki çıkış verileri KBS-DOPRI5 sayısal şeması çalıştırılmadan hızlıca elde edilecektir.

Bu bölümde, DVM regresyon algoritması olan  $\varepsilon$ -DVM algoritması kısaca anlatılacaktır. Yüksek boyutlu öznitelik uzayı  $\mathbf{F}$ 'de doğrusal olan DVM regresyon modelinin ilkel formu aşağıdaki gibidir.

$$\hat{Y}(\mathbf{X}_i) = \langle \mathbf{w}, \Phi(\mathbf{X}_i) \rangle + E \quad (2.30)$$

Burada,  $\mathbf{w}$  öznitelik uzayı  $\mathbf{F}$ 'de bir vektörü,  $\Phi(\cdot)$  giriş verilerini yüksek boyutlu özellik uzayına taşıyan fonksiyonu,  $E$  hata terimini,  $\langle \cdot \rangle$  ise özellik uzayındaki skaler çarpım işlemini temsil etmektedir. DVM regresyon algoritması, regresyon problemine dual uzayda bir optimizasyon problemi olarak ele almaktadır. Bunun model denklemi aşağıda verilmektedir.

$$\hat{Y}(\mathbf{x}_i) = \sum_{j=1}^{N_e} \alpha_j K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) + E \quad (2.31)$$

Burada,  $\alpha_j$  her bir eğitim veri noktasındaki katsayıları,  $K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j)$  ise Kernel fonksiyonu temsil etmektedir. Kernel fonksiyonu öznitelik uzayındaki,  $\langle \Phi(\mathbf{X}_i), \Phi(\mathbf{X}_j) \rangle$  skaler çarpım işlemini gerçekleştirmektedir. Bu sayede  $\Phi(\mathbf{X})$  fonksiyonunun açık formunun bilinmesi gerek yoktur. Tez çalışmasında, Kernel fonksiyonu olarak aşağıda verilen Gauss Kernel fonksiyonu kullanılmaktadır.

$$K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) = \exp\left(-\frac{\|\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j\|^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2.32)$$

Burada,  $\|\cdot\|$  öklid uzaklığını,  $\sigma$  genişlik parametresi olarak bilinmektedir. Denklem (21)' de verilen modelde sıfırdan farklı  $\alpha_j$  değerlerine karşılık gelen  $\mathbf{X}_j$  eğitim verileri destek vektör olarak bilinmektedir.  $\varepsilon$ -DVM algoritması, aşağıda verilen Vapnik' in  $\varepsilon$ -duyarsız kayıp fonksiyonu  $L(\varepsilon, Y, \hat{Y})$  kullanılmaktadır.

$$L(\varepsilon, Y, \hat{Y}) = \begin{cases} 0 & Y - \hat{Y} \leq \varepsilon \\ Y - \hat{Y} & Y - \hat{Y} > \varepsilon \end{cases} \quad (2.33)$$

Böylece regresyon probleminin ilkel formu aşağıdaki şekilde formüle edilmiş olur.

$$\min_{\mathbf{w}, b, \xi, \xi^*} P_\varepsilon = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + D_p \sum_{i=1}^{N_e} (\xi_i + \xi_i^*) \quad (2.34)$$

Kısıtlar

$$\begin{aligned}
Y(\mathbf{X}_i) - \langle \mathbf{w}, \Phi(\mathbf{X}_i) \rangle - E &\leq \varepsilon + \xi_i, & i = 1, \dots, N_e \\
\langle \mathbf{w}, \Phi(\mathbf{X}_i) \rangle + E - Y(\mathbf{X}_i) &\leq \varepsilon + \xi_i^*, & i = 1, \dots, N_e \\
\xi_i, \xi_i^* &\geq 0, & i = 1, \dots, N_e
\end{aligned} \tag{2.35}$$

Burada,  $\xi_i$  ve  $\xi_i^*$  serbestlik deęişkenlerini,  $\varepsilon$  çıktı için kabul edilebilir hatanın üst deęerini ve  $D_p$  model karmaşıklığı ile  $\varepsilon$ 'dan büyük hataların kabul edilebilmesini düzenleyen bir parametreyi temsil etmektedir. Optimizasyon probleminin dual formu aşığıdaki gibi karesel programlama problemine dönüşmektedir.

$$\begin{aligned}
\min_{\beta, \beta^*} D_\varepsilon = & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N_e} \sum_{j=1}^{N_e} K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) (\beta_i - \beta_i^*) (\beta_j - \beta_j^*) + \varepsilon \sum_{i=1}^{N_e} (\beta_i + \beta_i^*) \\
& - \sum_{i=1}^{N_e} Y(\mathbf{X}_i) (\beta_i - \beta_i^*)
\end{aligned} \tag{2.36}$$

Kısıtlar

$$0 \leq \beta_i, \beta_i^* \leq D_p, \quad \sum_{i=1}^{N_e} (\beta_i - \beta_i^*) = 0, \quad i = 1, \dots, N \tag{2.37}$$

Karesel programlama probleminin çözümü optimum  $\beta_i$  ve  $\beta_i^*$  deęerlerini vermektedir.  $E$  teriminin hesabı şu şekildedir:  $0 \leq \beta_i, \beta_i^* \leq D_p$  şartını sağlayan her bir  $\mathbf{X}_i$  destek vektörü için  $|Y(\mathbf{X}_i) - \hat{Y}(\mathbf{X}_i)| = \varepsilon$  şartı sağlanmalıdır. Eđer  $\alpha_j, j = 1, \dots, N_e$  ve  $\alpha_j = \beta_j - \beta_j^*$  olmak üzere  $\mathbf{X}_j$ 'nin yeni bir katsayısı olarak tanımlanırsa DVM modeli Denklem (2.31)'de verildięi şekilde elde edilmektedir. Ayrıca sadece destek vektörleri dikkate alındığında model aşığıdaki hale dönüşmektedir (Karahan ve dię. 2014).

$$\hat{Y}(\mathbf{X}_i) = \sum_{\substack{j=1 \\ j \in DV}}^{\#DV} \alpha_j K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) + E \tag{2.38}$$

Burada #DV modeldeki destek vektörleri sayısına karşılık gelmektedir. Bütün eğitim verileri sadece destek vektörleri ile temsil edilebildięi için DVM modeli seyrek olarak düşünülebilir.  $\varepsilon$ -DVM parametreleri, çıktıdaki kabul edilebilir

maksimum hata  $\varepsilon$ , düzenleme parametresi  $D_p$ , eğitim veri sayısı  $N_e$  ve genişlik parametresi  $\sigma$ 'dır.

DVM regresyon modelinin oluşturulabilmesi için örnek girdi ve çıktı verilerine ihtiyaç vardır. Bu veriler her probleme özel olarak simülasyon modelinin çalıştırılmasıyla elde edilmektedir. Burada kirletici kaynaklarındaki konsantrasyon salınımları girdileri, simülasyon modelinin oluşturulmasıyla elde edilen gözlem kuyularındaki gözlenen konsantrasyonlar ise çıktıları temsil etmektedir. Çalışma kapsamında latin hiperküp örnekleme (LHÖ) yaklaşımı kullanılarak 400 adet kirletici kaynaklarındaki konsantrasyon salınım verisi yani girdiler üretilmiştir. Bu verilerle simülasyon modeli oluşturularak gözlem kuyularındaki konsantrasyon verileri yani çıktılar elde edilmiştir. Daha sonra verilerin %75'i eğitim, %25'i ise test verisi olarak rastgele ayrılmıştır. Eğitim verileri kullanılarak DVM modeli oluşturulmuş ve bu modelin performansı test verileri üzerinde test edilmiştir. Buradaki amaç DVM modelinin girdiler ve çıktılar arasındaki ilişkiyi öğrenip öğrenemeyeceğini görmek ve hangi DVM parametrelerinde daha iyi sonuç vereceğini belirlemektir. DVM parametreleri, diferansiyel evrim algoritması kullanılarak oluşturulan parametre optimizasyon modelinin çözümüyle elde edilmektedir.

### 3. SAYISAL UYGULAMALAR

Bu bölümde, tez çalışması kapsamında geliştirilen KBS-DOPRI5 sayısal şemasının, S-O modelinin ve vekil modellerin entegre edilmiş hallerinin literatürden alınan veya hipotetik olarak incelenen örnekler üzerinde uygulamaları gerçekleştirilmektedir. Öncelikle KBS-DOPRI5 sayısal şeması yeraltısuyu kirletici taşınımının simülasyonu örneklerinde test edilmektedir. Bu aşamadan sonra akım ve kirletici taşınım modelleri birleşik olarak oluşturulmaktadır. Bir sonraki aşama olarak ise yeraltısuyu kirletici kaynak karakteristikleri belirlenmesi ters problemleri ele alınmaktadır.

#### 3.1 Yeraltısuyu kirletici taşınımının simülasyonu

Bu bölümde, KBS-DOPRI5 sayısal şeması dört farklı iki boyutlu yeraltısuyu kirletici taşınım modelinin oluşturulmasında kullanılmaktadır. İncelenen örneklerden birincisi homojen ve izotropik yapıda olup analitik çözümü bulunmaktadır. Elde edilen çözümler analitik çözüm sonucu ve literatürdeki sonuçlarla karşılaştırılmaktadır. İkinci örnek, homojen ve anizotropik yapıda olup yine analitik çözümü bulunmaktadır. Sonuçlar analitik çözümle karşılaştırılmaktadır. Üçüncü örnek, homojen ve anizotropik yapıda olup analitik çözümü bilinmemektedir. Elde edilen sonuçlar COMSOL Multiphysics paket program sonuçları ve literatürdeki mevcut sonuçlarla karşılaştırılmaktadır. Dördüncü örnek, homojen olmayan ve anizotropik yapıda olup incelenen en zorlu örnektir. Bu örneğin analitik çözümü olmayıp elde edilen sonuçlar COMSOL Multiphysics paket program sonuçları ile karşılaştırılmaktadır.

##### 3.1.1 Örnek 1

Denklem (2.2)'i  $V_x = V_y = 0.8 \text{ m/s}$  ve  $D_{xx} = D_{yy} = 0.01 \text{ m}^2/\text{s}$  sabit parametreleri ve  $0 < x, y < 2$  çözüm alanı için ele alalım. Bu problemin analitik çözümü aşağıda verilmektedir (Gurarslan 2014).

$$C(x, y, t) = \frac{1}{1 + 4t} \exp\left(-\frac{(x - \hat{x} - V_x t)^2}{D_{xx}(1 + 4t)} - \frac{(y - \hat{y} - V_y t)^2}{D_{yy}(1 + 4t)}\right) \quad (3.1)$$

Bu problem de başlangıç koşulu olarak pik değeri 1' e eşit olan bir normal dağılımı alınmıştır. Pik değerin konumu  $(\hat{x}, \hat{y})$  ile belirtilmekte olup yapılan testlerde değerleri (0.5,0.5) olarak seçilmiştir. Sınır koşulları analitik çözümden hesaplanmaktadır. Başlangıç koşulu Denklem (3.1)' de verilen analitik çözümde  $t = 0$  alınarak aşağıdaki gibi hesaplanmaktadır.

$$C(x, y, 0) = C_0 = \exp\left(-\frac{(x - \hat{x})^2}{D_{xx}} - \frac{(y - \hat{y})^2}{D_{yy}}\right) \quad (3.2)$$

**Tablo 3.1:** Örnek 1 için  $t = 1$  s ve  $V_x = V_y = 0.8$  m/s alınarak  $[1,2] \times [1,2]$  çözüm alanında elde edilmiş ortalama mutlak hata değerleri

$D_{xx} = D_{yy} = 0.05 \text{ m}^2/\text{s}$			
	Dehghan ve Mohebbi (2008)	Mittal ve Tripathi (2017)	KBS-DOPRI5
$\Delta x = \Delta y$	Hata	Hata	Hata
0.04	$1.7995 \times 10^{-6}$	$8.4590 \times 10^{-6}$	$4.0931 \times 10^{-5}$
0.02	$1.1660 \times 10^{-7}$	$5.5883 \times 10^{-7}$	$8.5280 \times 10^{-6}$
0.01	$7.4296 \times 10^{-9}$	$3.5909 \times 10^{-8}$	$1.9433 \times 10^{-6}$

**Tablo 3.2:** Örnek 1 için  $t = 1$  s ve  $V_x = V_y = 0.8$  m/s alınarak  $[1,2] \times [1,2]$  çözüm alanında elde edilmiş ortalama mutlak hata değerleri

$D_{xx} = D_{yy} = 0.005 \text{ m}^2/\text{s}$			
	Dehghan ve Mohebbi (2008)	Mittal ve Tripathi (2017)	KBS-DOPRI5
$\Delta x = \Delta y$	Hata	Hata	Hata
0.04	$2.7414 \times 10^{-4}$	$1.0378 \times 10^{-6}$	$1.0218 \times 10^{-6}$
0.02	$2.0043 \times 10^{-5}$	$6.5768 \times 10^{-8}$	$5.0215 \times 10^{-8}$
0.01	$1.3043 \times 10^{-6}$	$3.8352 \times 10^{-9}$	$2.9706 \times 10^{-9}$

Elde edilen sonuçları literatürde önerilen sayısal metotlarla karşılaştırmak için akış hızları, dispersiyon katsayıları, grid boyutları gibi simülasyon parametrelerinin değerleri aynı alınmaktadır. Örnek 1, geliştirilen sayısal metotların test edilmesinde birçok araştırmacı tarafından kullanılmıştır. Bu sebeple, mümkün olduğu kadar çok karşılaştırma yapılmaya çalışılmıştır. Ortalama mutlak hata değerleri Tablo 3.1 ve Tablo 3.2’de verilmektedir. Tablo 3.1 ve Tablo 3.2’de verilen sonuçlar akış hızları  $V_x = V_y = 0.8$  m/s alınarak ve grid boyutları  $\Delta x = \Delta y = 0.04$  m ,  $\Delta x = \Delta y = 0.02$  m ,  $\Delta x = \Delta y = 0.01$  m alınarak elde edilmektedir. Tablo 3.1 ve Tablo 3.2 arasındaki fark sırasıyla  $D_{xx} = D_{yy} = 0.05$  m<sup>2</sup>/s ve  $D_{xx} = D_{yy} = 0.005$  m<sup>2</sup>/s olarak alınan dispersiyon katsayılarıdır. Sonuçlar maksimum simülasyon süresi  $t = 1$  s için üretilmektedir. Tablo 3.1’de KBS-DOPRI5, literatürde verilen diğer metotlarla benzer ortalama mutlak hata değerleri vermektedir. Tablo 3.2’de KBS-DOPRI5 metodunun ortalama mutlak hata değerleri diğer metotlara benzer veya onlardan daha iyidir.

**Tablo 3.3:**  $t = 1.25$  s için  $[0,2] \times [0,2]$  çözüm alanında  $V_x = V_y = 0.8$  m/s alınarak elde edilen ortalama mutlak hata ve maksimum hata değerlerinin karşılaştırılması

	$D_{xx} = D_{yy} = 0.01$ m <sup>2</sup> /s		$D_{xx} = D_{yy} = 0.001$ m <sup>2</sup> /s	
	Ortalama Hata	Maksimum Hata	Ortalama Hata	Maksimum Hata
Noye ve Tan (1989)	$1.430 \times 10^{-5}$	$4.840 \times 10^{-4}$	-	-
Kalita ve diğ. (2002)	$1.590 \times 10^{-5}$	$4.447 \times 10^{-4}$	-	-
Karaa ve Zhang (2004)	$9.218 \times 10^{-6}$	$2.500 \times 10^{-4}$	-	-
Tian ve Ge (2007)	$9.663 \times 10^{-6}$	$2.664 \times 10^{-4}$	-	-
Dehghan ve Mohebbi (2008)	$9.483 \times 10^{-6}$	$2.469 \times 10^{-4}$	-	-
Shukla ve Tamsir (2018)	$6.482 \times 10^{-7}$	$1.609 \times 10^{-6}$	-	-
Gurarslan MC-CD6 (2014)	$2.600 \times 10^{-5}$	$7.920 \times 10^{-3}$	-	-
Gurarslan RK4-CD6 (2014)	$2.240 \times 10^{-8}$	$1.650 \times 10^{-5}$	-	-
Mittal ve Tripathi (2017)	$1.021 \times 10^{-7}$	$9.110 \times 10^{-4}$	$2.120 \times 10^{-8}$	$1.417 \times 10^{-4}$
KBS-DOPRI5	$1.224 \times 10^{-7}$	$1.301 \times 10^{-5}$	$2.842 \times 10^{-6}$	$5.141 \times 10^{-4}$

Tablo 3.3’te verilen sonuçların üretilmesinde kullanılan parametreler  $V_x = V_y = 0.8$  m/s ,  $D_{xx} = D_{yy} = 0.01$  m<sup>2</sup>/s ,  $D_{xx} = D_{yy} = 0.001$  m<sup>2</sup>/s ve  $\Delta x = \Delta y = 0.025$  m’ dir. Tablo 3.3’te hem ortalama mutlak hata hem de maksimum hata değerleri verilerek literatürde mevcut sayısal metotların sonuçlarıyla



karşılaştırılmaktadır. Açıkça görülmektedir ki KBS-DOPRI5 metodu çok küçük hata değerleri üretmektedir. Bu değerler literatürdeki diğer metotlarla benzer veya daha iyidir. Ayrıca Tablo 3.3'te verilen sonuçların grafiksel gösterimi Şekil 3.1'de verilmektedir. Aynı sonuçların kontur grafiği Şekil 3.2'de gösterilmektedir.

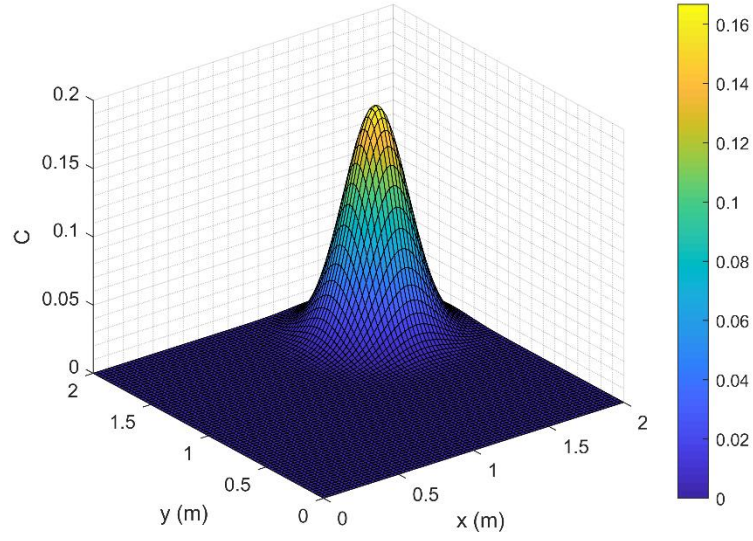
**Tablo 3.4:** Farklı simülasyon zamanları için  $\Delta x = \Delta y = 0.025$  m alınarak elde edilen ortalama ve maksimum hata değerlerinin karşılaştırılması

$V_x = V_y = 0.8$ m/s ve $D_{xx} = D_{yy} = 0.05$ m <sup>2</sup> /s				
	Rohila ve Mittal (2018)	KBS-DOPRI5	Rohila ve Mittal (2018)	KBS-DOPRI5
$t$	Maksimum Hata		Ortalama Hata	
1	$2.81 \times 10^{-4}$	$4.88 \times 10^{-5}$	$5.04 \times 10^{-5}$	$1.40 \times 10^{-5}$
2	$2.60 \times 10^{-4}$	$4.31 \times 10^{-5}$	$1.27 \times 10^{-5}$	$3.83 \times 10^{-6}$
3	$3.62 \times 10^{-5}$	$3.06 \times 10^{-6}$	$4.18 \times 10^{-7}$	$1.46 \times 10^{-7}$

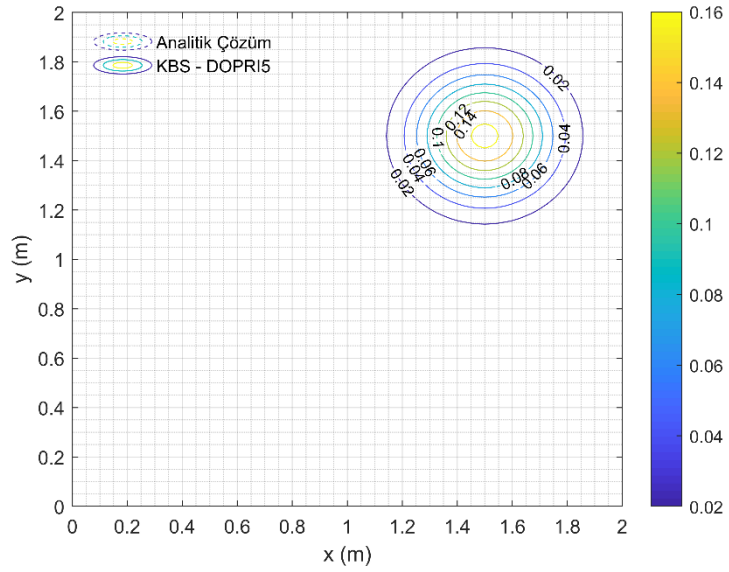
**Tablo 3.5:** Farklı simülasyon zamanları için  $\Delta x = \Delta y = 0.025$  m alınarak elde edilen ortalama ve maksimum hata değerlerinin karşılaştırılması

$V_x = V_y = 0.8$ m/s ve $D_{xx} = D_{yy} = 0.005$ m <sup>2</sup> /s				
	Rohila ve Mittal (2018)	KBS-DOPRI5	Rohila ve Mittal (2018)	KBS-DOPRI5
$t$	Maksimum Hata		Ortalama Hata	
1	$1.99 \times 10^{-3}$	$9.79 \times 10^{-6}$	$2.62 \times 10^{-5}$	$1.20 \times 10^{-7}$
2	$4.10 \times 10^{-3}$	$2.25 \times 10^{-4}$	$5.37 \times 10^{-6}$	$2.65 \times 10^{-7}$
3	$1.56 \times 10^{-11}$	$1.32 \times 10^{-7}$	$1.33 \times 10^{-13}$	$5.91 \times 10^{-10}$

Son olarak,  $V_x = V_y = 0.8$  m/s,  $D_{xx} = D_{yy} = 0.05$  m<sup>2</sup>/s,  $D_{xx} = D_{yy} = 0.005$  m<sup>2</sup>/s ve  $\Delta x = \Delta y = 0.025$  m parametreleri kullanılarak  $t = 1, 2, 3$  s simülasyon süreleri için karşılaştırma yapılmaktadır. Elde edilen ortalama ve maksimum hata değerleri Tablo 3.4 ve Tablo 3.5'de verilmektedir. KBS-DOPRI5 metodunun benzer veya daha iyi hata değerlerine sahip olduğu görülmektedir.



**Şekil 3.1:**  $\Delta x = \Delta y = 0.025$  m,  $V_x = V_y = 0.8$  m/s,  $D_{xx} = D_{yy} = 0.01$  m<sup>2</sup>/s alınarak  $t = 1.25$  s simülasyon zamanı için KBS-DOPRI5 ile elde edilen yaklaşık çözüm



**Şekil 3.2:** Şekil 3.1’de verilen yaklaşık çözümün ve analitik çözümün kontur grafiği

### 3.1.2 Örnek 2

Bu örnekte dar nispeten ince bir dolgulu akiferdeki klorür iyonunun taşınımı dikkate alınmıştır. Bu taşınımın simülasyonu Denklem (2.2) ile temsil edilmektedir.

Bu örnek Wexler' in çalışmasındaki (Wexler 1992) örnek problem 6 ile aynıdır. Problemin sınır koşulları aşağıdaki gibidir.

$$C(x, y, t) = \begin{cases} \hat{C}, & x = x_0 \text{ ve } \hat{y}_1 \leq y \leq \hat{y}_2 \\ 0, & x = x_0 \text{ ve } y < \hat{y}_1 \text{ veya } y > \hat{y}_2 \end{cases} \quad (3.3)$$

ve

$$\begin{aligned} \partial C / \partial x &= 0, & x &= x_N \\ \partial C / \partial y &= 0, & y &= y_0 \text{ veya } y = y_M \end{aligned} \quad (3.4)$$

Burada  $\hat{y}_1 = 300$  m ve  $\hat{y}_2 = 800$  m kirletici kaynak konum aralığını,  $y_M = 1200$  m akifer genişliğini,  $x_N = 1500$  m akifer uzunluğunu,  $\hat{C} = 1$  kg/m<sup>2</sup> kaynaktaki kirletici konsantrasyonunu temsil etmektedir. Akım hızları  $V_x = 3 \times 10^{-6}$  m/s,  $V_y = 0$  ve dispersiyon katsayıları  $D_{xx} = 2 \times 10^{-4}$  m<sup>2</sup>/s,  $D_{yy} = 6 \times 10^{-5}$  m<sup>2</sup>/s olarak alınmaktadır. Problemin analitik çözümü Wexler tarafından aşağıdaki gibi verilmiştir.

$$\begin{aligned} C(x, y, t) = \hat{C} \sum_{n=0}^{\infty} L_n P_n \cos(\eta y) \left\{ \exp \left[ \frac{x(V_x - \beta)}{2D_{xx}} \right] \operatorname{erfc} \left[ \frac{x - \beta t}{2\sqrt{D_{xx}t}} \right] \right. \\ \left. + \exp \left[ \frac{x(V_x + \beta)}{2D_{xx}} \right] \operatorname{erfc} \left[ \frac{x + \beta t}{2\sqrt{D_{xx}t}} \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.5)$$

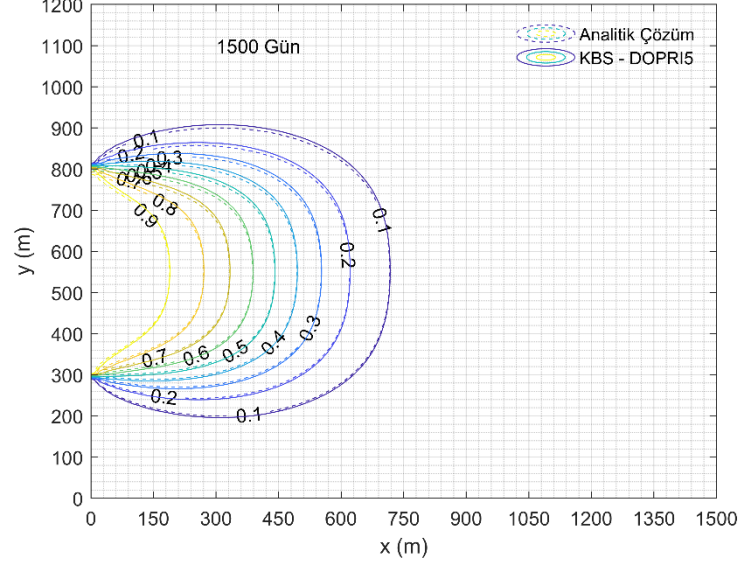
Burada

$$L_n = \begin{cases} 0.5, & n = 0 \\ 1, & n > 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

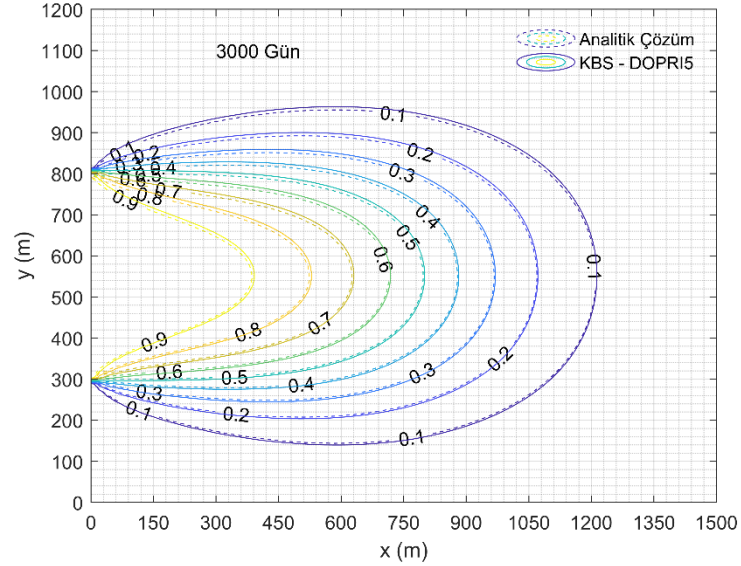
$$P_n = \begin{cases} (\hat{y}_2 - \hat{y}_1)/y_M, & n = 0 \\ [\sin(\eta \hat{y}_2) - \sin(\eta \hat{y}_1)] / (n\pi), & n > 0 \end{cases} \quad (3.7)$$

$$\eta = n\pi/y_M, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (3.8)$$

$$\beta = \sqrt{V_x^2 + 4\eta^2 D_{xx} D_{yy}} \quad (3.9)$$

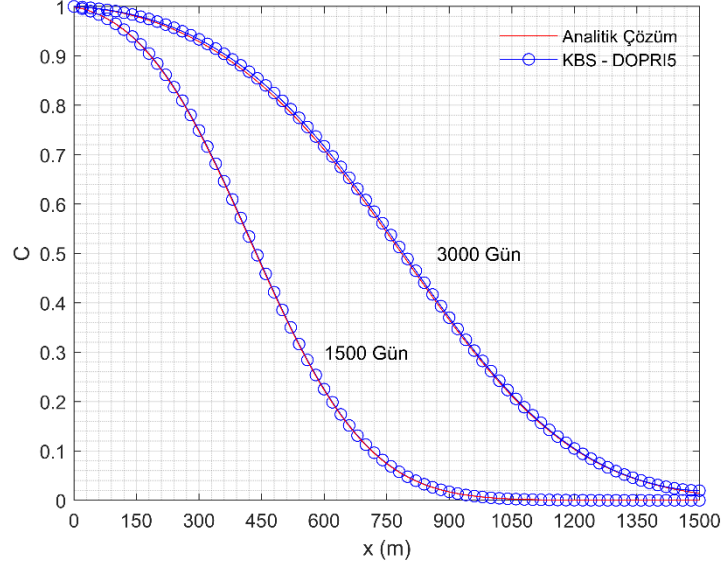


Şekil 3.3:  $t = 1500$  gün için KBS-DOPRI5 ile elde edilen sonuçlarla analitik çözümün karşılaştırılması ( $\Delta x = 20$  m,  $\Delta y = 16$  m)



Şekil 3.4:  $t = 3000$  gün için KBS-DOPRI5 ile elde edilen sonuçlarla analitik çözümün karşılaştırılması ( $\Delta x = 20$  m,  $\Delta y = 16$  m)

Simülasyonlar  $t = 1500$  gün ve  $t = 3000$  gün gibi iki farklı süre için yapılmıştır. Bu süreler için elde edilen sayısal çözümler ile analitik çözümlerin karşılaştırıldığı kontur grafikleri Şekil 3.3 ve Şekil 3.4'te verilmektedir. Sonuçların birbiriyle oldukça uyumlu oldukları görülmektedir. Ayrıca merkezdeki konsantrasyon profillerinin grafiksel karşılaştırılması Şekil 3.5'te verilmektedir. Bu karşılaştırmada da sayısal çözümle analitik çözüm arasında çok iyi bir uyum olduğu açıktır.



Şekil 3.5: Merkezdeki yaklaşık ve analitik konsantrasyon değerlerinin farklı simülasyon süreleri için karşılaştırılması

### 3.1.3 Örnek 3

Bu örnekte, sol sınırda ( $x = x_0$ ) çizgi halinde simetrik olmayan sürekli bir kirletici kaynağı olduğu dikkate alınmıştır. Sınırdaki kirletici kaynağının konsantrasyon değerleri aşağıdaki formülasyonla hesaplanmaktadır (Boddula ve Eldho 2017, Eldho ve Vasudeva Rao 1997).

$$C(x_0, y, t) = \hat{C} \left( -\frac{(y - \hat{y})^2}{3140} \right) \quad (3.10)$$

Burada  $\hat{C}$  kaynaktaki pik konsantrasyon değerini belirtmekte ve çalışma da birim büyüklükte olduğu varsayılmıştır. Bu durumda elde edilen konsantrasyonlar görelî değerler olacaktır.  $\hat{y} = 125 \text{ m}$  kaynaktaki pik konsantrasyon değerinin

konumunu belirtmektedir. Diğer sınırlarda akış olmadığı varsayılmaktadır ve bu sınır koşullarının matematiksel gösterimi aşağıdaki gibidir.

$$\begin{aligned}\frac{\partial C}{\partial x} &= 0, & x &= x_N \\ \frac{\partial C}{\partial y} &= 0, & y &= y_0 \text{ or } y = y_M\end{aligned}\quad (3.11)$$

Burada,  $y_M = 300 \text{ m}$  ve  $x_N = 600 \text{ m}$  sırasıyla akiferin genişliği ve uzunluğudur. İki boyutlu hız alanı dikkate alınmıştır. Simülasyonlarda akım hızları  $V_x = 1.1784 \text{ m/gün}$  ve  $V_y = 0.3157 \text{ m/gün}$  olarak seçilmiştir. Dispersiyon katsayıları Denklem (2.4) aracılığıyla boyuna dispersivite  $\alpha_L = 6.248 \text{ m}$  ve enine dispersivite  $\alpha_T = 0.393 \text{ m}$  alınarak hesaplanmaktadır. Parametrelerden görülebileceği gibi, akifer homojen ve anizotropiktir. Bu nedenle, Denklem (2.2)'deki  $\frac{\partial}{\partial x} \left( D_{xy} \frac{\partial C}{\partial y} \right)$  ve  $\frac{\partial}{\partial y} \left( D_{yx} \frac{\partial C}{\partial x} \right)$  gibi çapraz türev terimleri de çözüme dahil edilmelidir. Ancak Eldho ve Rao (1997) ve Boddula ve Eldho (2017) tarafından yapılan çalışmalarda bu terimlerin çözüme dahil edilmediği görülmektedir. Bu örnek iki farklı senaryo durumu için incelenmektedir. İlk senaryoda (Senaryo A), aynı koşullar altındaki çözümleri karşılaştırmak için bu terimler ihmal edilir. İkinci senaryoda (Senaryo B), sorunun gerçek davranışını görmek için bu terimler dikkate alınır.

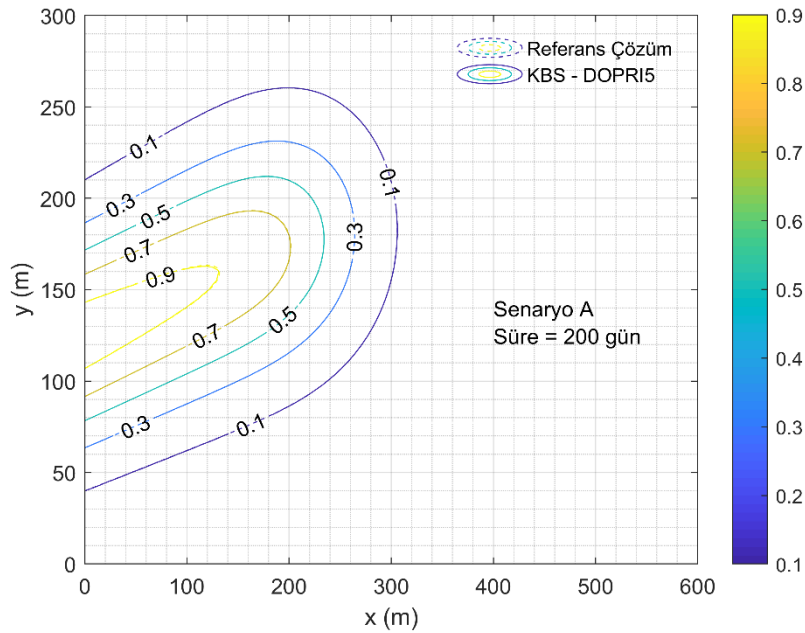
Bu tip problemler için analitik çözüm bulunmadığından zamanda DOPRI5 konumunda ise klasik sonlu fark metodu (SFM) kullanan bir metot geliştirilmiştir. Geliştirilen bu SFM-DOPRI5 metodu, senaryo A için  $h = \Delta x = \Delta y = 0.5 \text{ m}$  ve senaryo B için  $h = \Delta x = \Delta y = 0.25 \text{ m}$  gibi grid boyutlarını oldukça küçük alarak referans bir çözüm elde etmede kullanılmaktadır. Bu grid boyutlarına göre çözüm alanında senaryo A için  $1201 \times 601$  ve senaryo B için  $2401 \times 1201$  düğüm noktası bulunmaktadır. Bu kadar fazla düğüm noktası ile elde edilen çözüm yaklaşık analitik çözüm olarak kabul edilebilmektedir.

Senaryo A dikkate alınarak KBS-DOPRI5 ile elde edilen sonuçlar, farklı grid boyutları için Tablo 3.6'da literatürden alınan diğer çözümlerle karşılaştırılmaktadır. KBS-DOPRI5, çözüm alanında  $25 \times 13$  düğüm noktası bulunduğu yani grid boyutu  $h = 25 \text{ m}$  olarak alındığında bile çok iyi sonuçlar üretmektedir. Grid boyutu  $h = 5$  seçildiğinde yani  $121 \times 61$  düğüm noktası için, KBS-DOPRI5 ile elde edilen konsantrasyon değerleri referans çözüm ile aynıdır. KBS-DOPRI5 ve referans

çözümün konsantrasyon değerlerinin kontur çizgileri, Şekil 3.6'da çizilmektedir. Şekil 3.6'dan açıkça görüldüğü gibi, çözümlerin kontur çizgileri aynıdır.

**Tablo 3.6:** 200 gün sonra KBS-DOPRI5 ve diğer nümerik metotlar ile elde edilen konsantrasyon değerlerinin karşılaştırılması (Senaryo A)

Koordinat (x,y)	BEM (Eldho ve Vasudeva Rao 1997)	MLPG- MLS (Boddul a ve Eldho 2017) h=25 m	MLPG- MLS (Boddul a ve Eldho 2017) h=5 m	KBS- DOPRI5 h=25 m	KBS- DOPRI5 h=5 m	Referans Çözüm h=0.5 m
(100,125)	0.774	0.771	0.771	0.767	0.768	0.768
(150,150)	0.797	0.794	0.795	0.824	0.833	0.833
(200,125)	0.362	0.361	0.361	0.391	0.389	0.389
(300,125)	0.057	0.056	0.056	0.058	0.052	0.052



Şekil 3.6: KBS-DOPRI5 ( $\Delta x = \Delta y = 5$  m) ile referans çözümün ( $\Delta x = \Delta y = 0.5$  m) sonuçlarının karşılaştırılması

Tablo 3.7, önerilen yöntemin standart sayısal yöntemlerden daha kısa sürede aynı doğruluğa ulaştığını göstermek için oluşturulmuştur. Farklı  $h$  değerleri için KBS-DOPRI5 ve SFM-DOPRI5 ile elde edilen çözümlerin çeşitli konumlardaki konsantrasyon değerleri Tablo 3.7'de verilmektedir. Bu çözümler için harcanan CPU süreleri de aynı tabloda sunulmaktadır. Tablo 3.7 dikkatle incelendiğinde,  $h = 25/4$

m ile KBS-DOPRI5 ve  $h = 25/32$  m ile SFM-DOPRI5 için elde edilen çözümlerin referans çözümle aynı olduğu görülmektedir. Bu durum için elde edilen CPU süreleri (19.57 s ve 1302.46 s) karşılaştırıldığında, KBS-DOPRI5 yönteminin SFM-DOPRI5 yönteminden 66.55 kat daha hızlı olmaktadır.

**Tablo 3.7:** 200 gün sonra KBS-DOPRI5 ve diğer nümerik metotlar ile elde edilen CPU sürelerinin karşılaştırılması (Senaryo A)

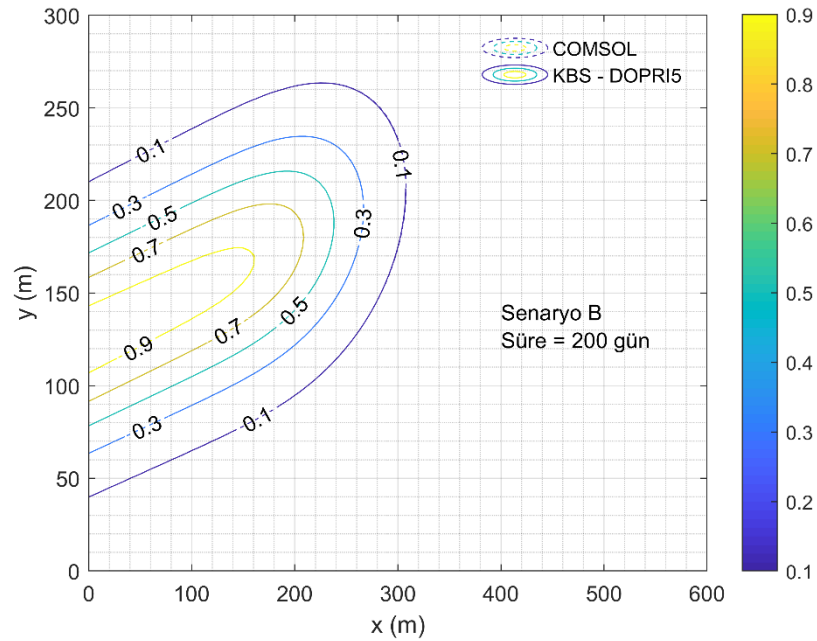
Metot	$h$ (m)	Koordinat (x,y)				CPU (s)
		(100,125)	(150,150)	(200,125)	(300,125)	
KBS - DOPRI5	25	0.767	0.824	0.391	0.058	0.57
	25/2	0.768	0.831	0.389	0.053	1.40
	<b>25/4</b>	<b>0.768</b>	<b>0.833</b>	<b>0.389</b>	<b>0.052</b>	<b>19.57</b>
	25/8	0.768	0.833	0.389	0.052	278.17
	25/16	0.768	0.833	0.389	0.052	9041.92
SFM - DOPRI5	25	0.815	0.867	0.421	0.074	0.31
	25/2	0.779	0.845	0.397	0.057	0.38
	25/4	0.771	0.836	0.391	0.053	1.05
	25/8	0.769	0.834	0.390	0.052	8.38
	25/16	0.769	0.833	0.389	0.052	84.04
	<b>25/32</b>	<b>0.768</b>	<b>0.833</b>	<b>0.389</b>	<b>0.052</b>	<b>1302.46</b>
Referans Çözüm	0.50	0.768	0.833	0.389	0.052	8399.55

Aynı problem senaryo B dikkate alınarak çözüldüğünde, sonuçlar Tablo 3.8'de sunulmaktadır. Tablo 3.8'den görülebileceği gibi, grid aralığı KBS-DOPRI5 için  $h = 25/4$  m ve SFM-DOPRI5 için  $h = 25/64$  m alındığında elde edilen sonuçlar referans çözümle aynı olmaktadır. Bu koşullar altında harcanan CPU süreleri karşılaştırıldığında, KBS-DOPRI5'in SFM-DOPRI5'ten 1061.82 kat daha hızlı olduğu görülmektedir. Ayrıca, bu örnek senaryo B dikkate alınarak sonlu elemanlar metodunu kullanan COMSOL Multiphysics ile çözülmüştür. Bu çözüm, COMSOL Multiphysics programında adaptif ağ iyileştirme özelliği etkinleştirilerek ve 30763 üçgen eleman kullanılarak elde edilmiştir. KBS-DOPRI5 ve COMSOL Multiphysics sonuçlarının çok iyi bir uyum içinde olduğu görülmektedir. Bu sonuçlar Şekil 3.7'de gösterilmektedir.



**Tablo 3.8:** 200 gün sonra KBS-DOPRI5 ve diğer nümerik metotlar ile elde edilen CPU sürelerinin karşılaştırılması (Senaryo B)

Metot	$h$ (m)	Koordinat (x,y)				CPU (s)
		(100,125)	(150,150)	(200,125)	(300,125)	
KBS - DOPRI5	25	0.779	0.852	0.336	0.026	0.76
	25/2	0.781	0.861	0.331	0.023	1.97
	<b>25/4</b>	<b>0.782</b>	<b>0.864</b>	<b>0.330</b>	<b>0.022</b>	<b>26.08</b>
	25/8	0.782	0.864	0.330	0.022	479.95
SFM - DOPRI5	25	0.844	0.895	0.378	0.045	0.37
	25/2	0.804	0.880	0.345	0.027	0.47
	25/4	0.791	0.871	0.337	0.023	1.25
	25/8	0.786	0.867	0.334	0.022	10.08
	25/16	0.784	0.866	0.332	0.022	97.03
	25/32	0.783	0.865	0.331	0.022	1532.50
	<b>25/64</b>	<b>0.782</b>	<b>0.864</b>	<b>0.330</b>	<b>0.022</b>	<b>27691.71</b>
Referans Çözüm	0.25	0.782	0.864	0.330	0.022	174576.14



**Şekil 3.7:** KBS-DOPRI5 ( $\Delta x = \Delta y = 5$  m) ile COMSOL sonuçlarının karşılaştırılması

### 3.1.4 Örnek 4

Gerçekte akiferler karmaşıktır ve geçirgenlik ve yayılabilirlik gibi fiziksel parametreler açısından önemli ölçüde değişkenlik göstermektedir. Bu nedenle Perko (2018)'nin çalışmasında verilen bir örnek incelenmektedir. Bu örnekte, önerilen yöntemin sağlamlığını test etmek için konumsal olarak değişen anizotropik hız alanı dikkate alınmaktadır. Problem z-yönünde değişmemektedir. Bu nedenle iki boyutlu bir problem olarak düşünülebilir.  $x$  ve  $y$  yönlerindeki hız bileşenleri aşağıdaki gibidir:

$$V_x = 2y(1 - x^2) \quad (3.12)$$

$$V_y = -2x(1 - y^2) \quad (3.13)$$

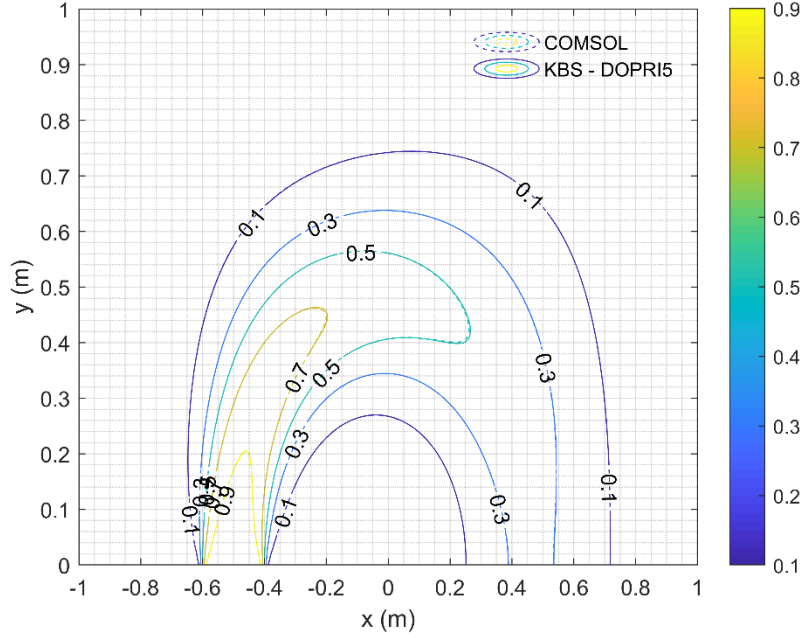
$-1 \leq x \leq 1$  ve  $0 \leq y \leq 1$  boyutlarında bir akış alanı dikkate alınmaktadır. Sol alt sınır boyunca Dirichlet sınır koşulu bulunmaktadır ( $-1 \leq x \leq 0$ ,  $y = 0$ ). Dirichlet sınırındaki konsantrasyon profili keskin bir şekilde sahiptir ve 0 ile 1 arasında değişmektedir. Sağ alt sınır boyunca açık sınır koşulu tanımlanmaktadır ( $0 \leq x \leq 1$ ,  $y = 0$ ). Dirichlet sınır konsantrasyonu profili aşağıdaki şekilde tanımlanmaktadır.

$$C(x, t) = \frac{\tanh(\Upsilon(0.6 + x)) - \tanh(\Upsilon(0.4 + x))}{2} \quad (3.14)$$

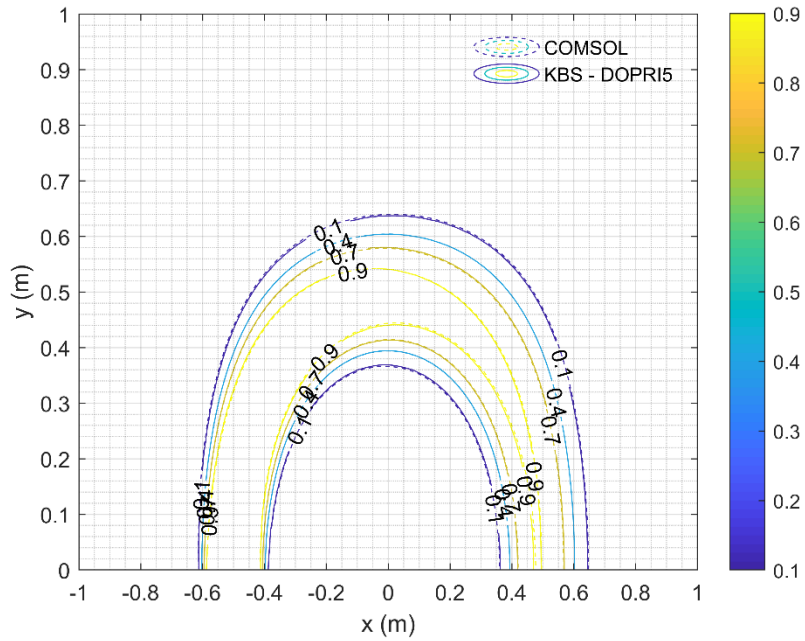
Burada  $\Upsilon$  parametresi konsantrasyon profilinin keskinliğini belirlemektedir.  $\Upsilon$  parametresinin değeri 100 olarak alınmakta olup, bu değer sınırda keskin bir konsantrasyon profili olduğu anlamına gelmektedir. Sol, sağ ve üst sınırlarda sıfır akılı Neumann sınır koşulu tanımlanmaktadır.

Bu örneğin analitik bir çözümü bulunmadığından, KBS-DOPRI5 sonuçlarını karşılaştırmak için bir referans çözüm gerekmektedir. Bu amaçla, COMSOL Multiphysics yazılımı içindeki adaptif ağ iyileştirme özelliği etkinleştirilerek bir referans çözüm elde edilmektedir. Bu örnekte, boyuna dispersivite ile enine dispersivite katsayılarının oranı değiştirilerek iki farklı senaryo oluşturulmaktadır. İlk senaryoda (senaryo A),  $\alpha_L = 0.1$  m ve  $\alpha_T = 0.01$  m alınarak 10' luk tipik bir oran dikkate alınmaktadır. İkinci senaryoda (senaryo B), önerilen yöntemin gerçek potansiyelini test etmek için bu oran 1000 olarak büyütülmektedir. Bu senaryoda,

boyuna ve enine dispersivite sırasıyla  $\alpha_L = 1$  m ve  $\alpha_T = 0.001$  m olarak seçilmektedir. COMSOL Multiphysics modelleri, Senaryo A ve B için çözüm alanında sırasıyla 25806 ve 106268 üçgen eleman içermektedir.



Şekil 3.8: 1.7 günde KBS-DOPRI5 ( $\Delta x = \Delta y = 0.01$  m) ve COMSOL Multiphysics ile elde edilen konsantrasyon alanı (Senaryo A).



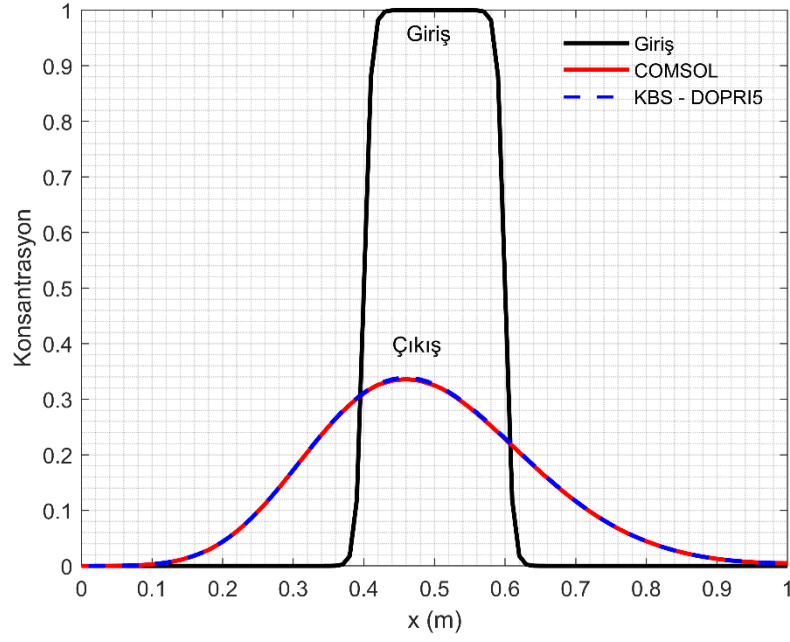
Şekil 3.9: 1.7 günde KBS-DOPRI5 ( $\Delta x = \Delta y = 0.01$  m) ve COMSOL Multiphysics ile elde edilen konsantrasyon alanı (Senaryo B).

Senaryo A ve B koşullarında KBS-DOPRI5 ve COMSOL Multiphysics ile elde edilen çözümlerin kontur grafikleri sırasıyla Şekil 3.8 ve 3.9'da sunulmaktadır. Şekil 3.8 ve 3.9 birlikte incelendiğinde, konsantrasyon profilinin dağılımının A senaryosunda daha fazla olduğu açıktır. B senaryosunda, girişteki keskin konsantrasyon profili korunma eğilimindedir.

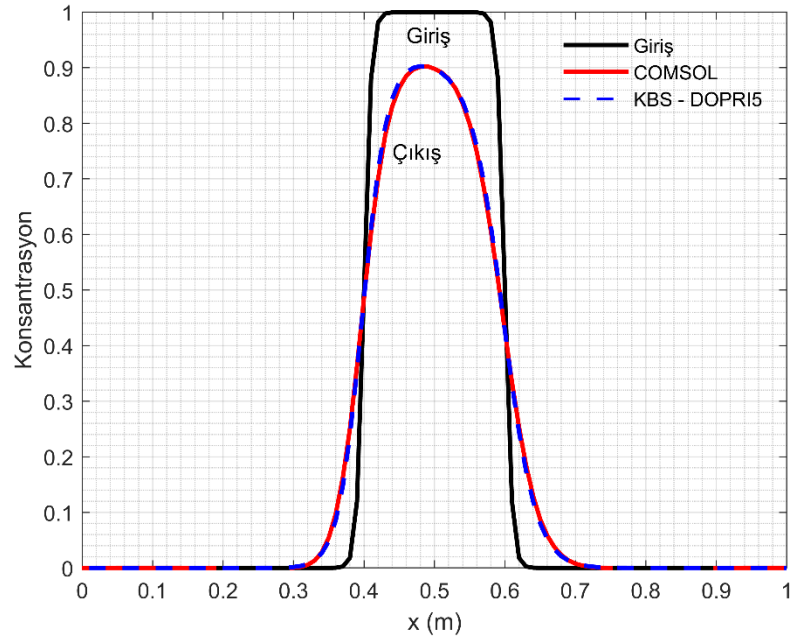
Ayrıca, A ve B senaryoları için elde edilen çözümlerden alınan giriş ve çıkış sınırlarındaki konsantrasyon profilleri sırasıyla Şekil 3.10 ve 3.11'de sunulmaktadır. Senaryo A ve B koşullarının kirletici taşınımı üzerindeki etkileri Şekil 3.10 ve 3.11'de açıkça görülmektedir. Ayrıca, açık sınırdaki konsantrasyon profillerinin sayısal değerleri her iki senaryo için Tablo 3.9'da ayrı olarak verilmektedir.

**Tablo 3.9:** Farklı  $x$  koordinatları için çıkış sınırındaki KBS-DOPRI5 ve COMSOL Multiphysics konsantrasyon değerleri

$x$ (m)	Senaryo A		Senaryo B	
	KBS - DOPRI5	COMSOL	KBS - DOPRI5	COMSOL
0.10	0.003	0.003	0.000	0.000
0.20	0.044	0.043	0.000	0.000
0.30	0.173	0.172	0.002	0.000
0.35	0.251	0.251	0.048	0.055
0.40	0.312	0.311	0.485	0.486
0.45	0.338	0.335	0.875	0.864
0.50	0.327	0.325	0.898	0.898
0.55	0.286	0.285	0.806	0.799
0.60	0.229	0.228	0.426	0.426
0.65	0.170	0.169	0.080	0.088
0.70	0.117	0.116	0.008	0.008
0.80	0.044	0.044	0.000	-0.001
0.90	0.013	0.013	0.000	0.000



Şekil 3.10: 1.7 günde giriş ve çıkış sınırındaki konsantrasyon profilleri (Senaryo A).



Şekil 3.11: 1.7 günde giriş ve çıkış sınırındaki konsantrasyon profilleri (Senaryo B).

### 3.2 Birleşik akım ve kirletici taşınımının simülasyonu

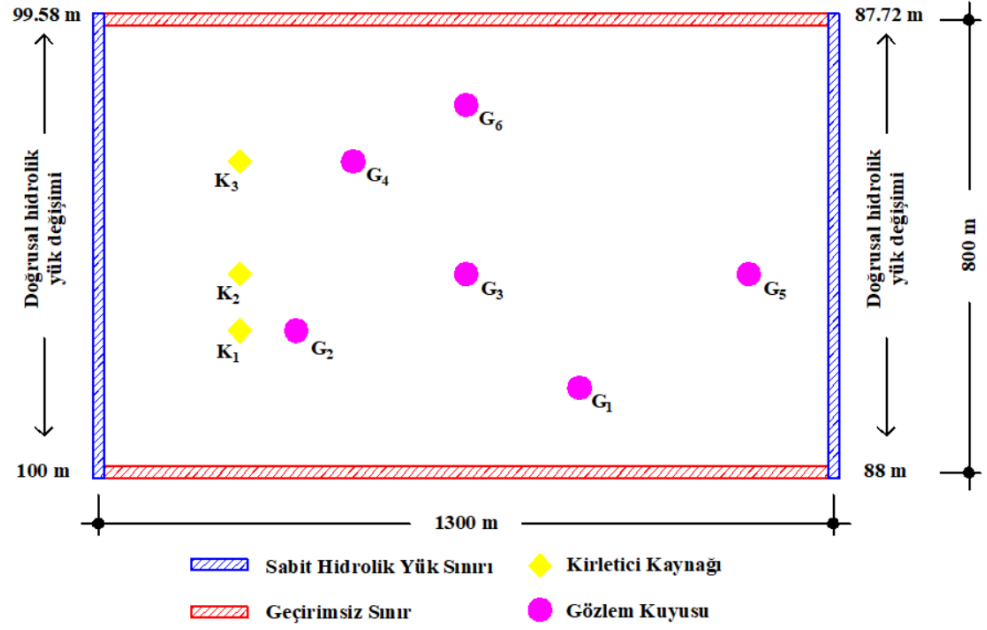
Bu bölümde, KBS-DOPRI5 sayısal şemasının akım ve kirletici taşınım modellerinin birleşik olarak oluşturulması incelenmektedir. Geliştirilen sayısal şema varsayımsal iki farklı örnek dikkate alınarak test edilmektedir.

Birinci örnek, literatürden alınmış olup düzgün geometriye sahiptir. Akım modeli homojen ve izotropik yapıdadır. Kirletici taşınım modeli ise heterojen ve anizotropik yapıdadır. Elde edilen çözümler MODFLOW ve MT3DMS paket programları ile elde edilen sonuçlarla karşılaştırılmaktadır.

İkinci örnek, literatürdeki farklı örnekler dikkate alınarak oluşturulmaktadır. Bu örnek düzensiz geometriye sahip olup model oluşturulması birinci örneğe göre daha karmaşıktır. Birinci örneğe benzer şekilde akım modeli homojen izotropik yapıda olup kirletici taşınım modeli heterojen ve anizotropiktir. Karşılaştırma amacıyla aynı örnek MODFLOW ve MT3DMS paket programları ile çözümlenerek sayısal şemanın doğruluğu gösterilmektedir.

#### 3.2.1 Örnek 5

Singh ve Datta (2006)'nın çalışmasından alınan bu örnekte daha gerçekçi bir durumu temsil eden akifer koşulları dikkate alınmaktadır. Akiferin batı ve doğu taraflarında doğrusal olarak değişen sabit hidrolik yükler mevcuttur. Bu kısımlar Dirichlet sınır koşulu olarak tanımlanmaktadır. Diğer sınırların geçirimsiz olduğu kabul edilmektedir. Akifer parametreleri ile ilgili bilgiler Tablo 3.10'da verilmektedir. Ayrıca akiferde üç adet kirletici kaynağı ve kirletici konsantrasyonlarının izlendiği dokuz adet gözlem kuyusu bulunmaktadır. Akifer geometrisi, kirletici kaynakları ve gözlem kuyuları Şekil 3.12'de gösterilmektedir.



Şekil 3.12: Örnek 5'te kullanılan varsayımsal akifer modeli

Tablo 3.10: Örnek 5'te kullanılan çözüm parametreleri

Parametre	Değer
$x$ yönündeki hidrolik iletkenlik, $K_{xx}$ (m/s)	0.0002
$y$ yönündeki hidrolik iletkenlik, $K_{yy}$ (m/s)	0.0002
Etkili porozite, $\theta$	0.25
Boyuna dispersivite, $\alpha_L$ (m)	40
Enine dispersivite, $\alpha_T$ (m)	9.6
Doygun kalınlık, $b$ (m)	30.5
Birim alandaki hacimsel akı, $W$ (m/s)	$1 \times 10^{-9}$
Başlangıç konsantrasyonu (ppm)	100

Bu örnek için toplam simülasyon süresi 5 yıldır. Bu süre 3'er aylık stres periyotlarından oluşmak üzere toplam 20 stres periyoduna karşılık gelmektedir. Önerilen metodolojide stres periyodu gibi bir kavrama ihtiyaç duyulmamaktadır. Ancak analiz sonuçlarının karşılaştırılması için referans bir çözüm gerekmektedir. Bu amaçla aynı örnek MODFLOW (akım modeli) ve MT3DMS (kirletici taşınım modeli) programlarıyla çözülerek referans çözüm elde edilmektedir. Stres periyotları MT3DMS programında kullanılmaktadır. Kirletici kaynaklarının ilk 4 stres periyodunda yani ilk 1 yıl süresince aktif olduğu varsayılmaktadır. Kirletici

kaynaklarının koordinatları ve aktif olduğu stres periyotlarındaki konsantrasyon akıları Tablo 3.11’de sunulmaktadır.

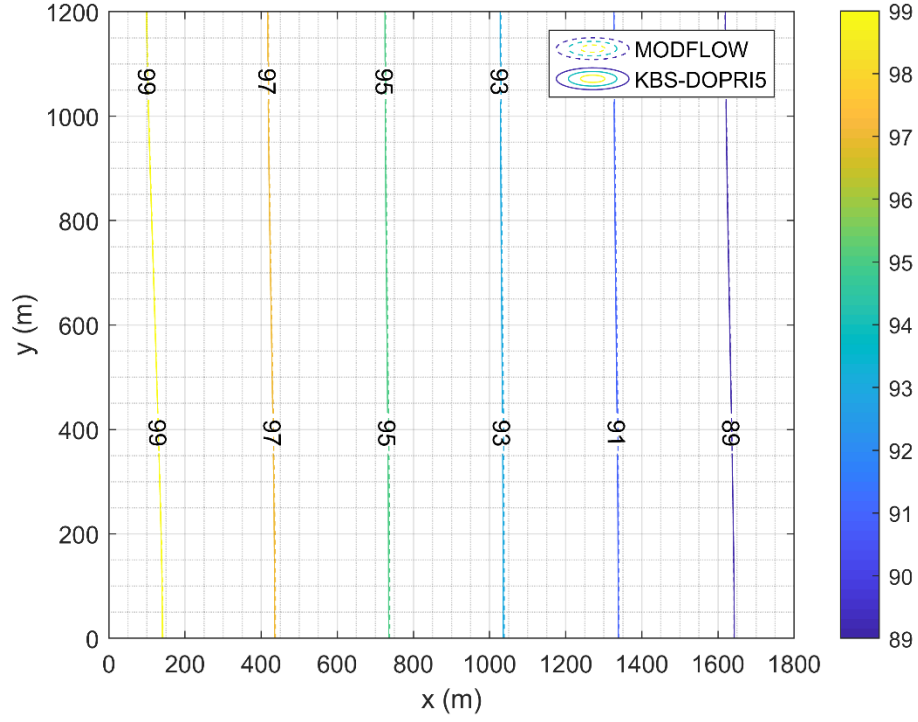
**Tablo 3.11:** Kaynak Akılarının değerleri  
(SP: stres periyodu)

Kirlenici Kaynağı	Koordinatlar		Kaynak Akıları (g/s)			
	x (m)	y (m)	SP1	SP2	SP3	SP4
K <sub>1</sub>	200	200	47	15	37	0
K <sub>2</sub>	200	300	0	0	0	0
K <sub>3</sub>	200	500	30	58.8	0	35

Öncelikle Şekil 3.12’de gösterilen akiferin akım modeli elde edilmelidir. Bu amaçla ilgili sınır şartları dikkate alınarak, geliştirilen KBS-DOPRI5 şeması ile Denklem (2.1) kararlı durum için çözülmektedir. KBS-DOPRI5 şeması ile Denklem (2.1)’in kararlı durumda çözülebilmesi için yalancı bir zaman verilerek problem zamana bağlı gibi ele alınmaktadır. Belli bir süre sonra akiferdeki hidrolik yükler sabitlenerek akifer kararlı duruma gelmektedir. Bu şekilde elde edilen sonuçlar Denklem (2.1)’in kararlı durum için çözümü olmaktadır.

Şekil 3.13’te Denklem (2.1)’in kararlı durum için KBS-DOPRI5 ile çözülmesiyle elde edilen hidrolik yüklerle, MODFLOW programından elde edilen hidrolik yükler karşılaştırılmaktadır. Bu karşılaştırma incelendiğinde kontur çizgilerinin birbiriyle oldukça uyumlu olduğu görülmektedir. Böylece KBS-DOPRI5 programının basınçlı akiferdeki akım modelinin oluşturulmasında kullanılabilecek iyi bir araç olduğu anlaşılmaktadır. Bir sonraki aşama akiferin kirlenici taşınım modelinin oluşturulmasıdır.

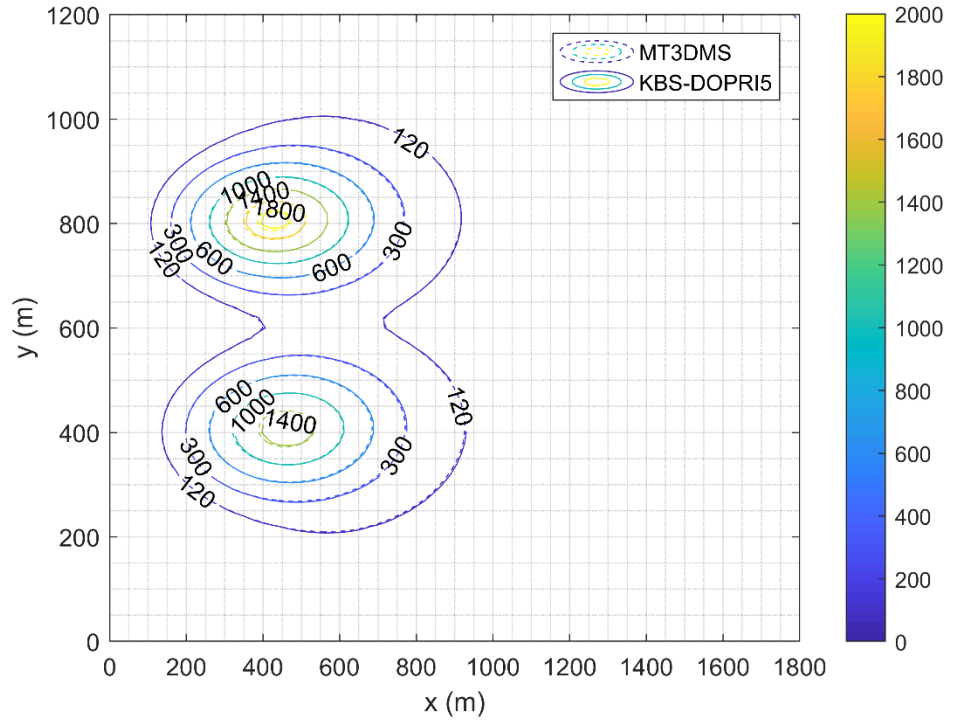




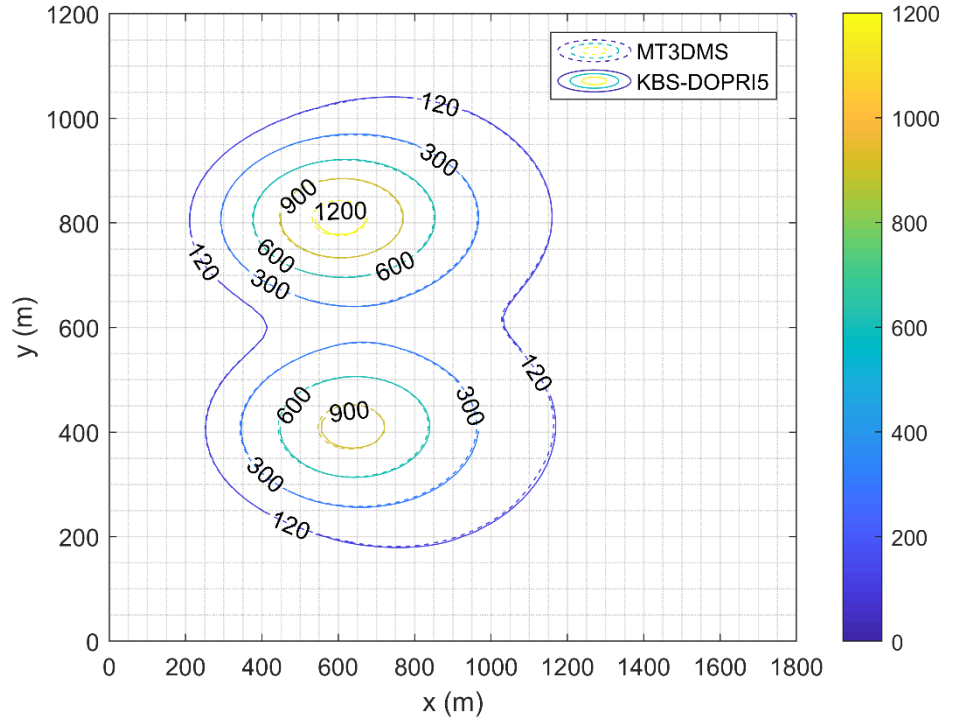
**Şekil 3.13:** Akım modeli sonuçlarının karşılaştırılması

Akiferin kirletici taşınım modelinin Denklem (2.2) aracılığıyla oluşturulabilmesi için öncelikle akış hızları ve dispersiyon tensörünün elemanlarının hesaplanması gerekmektedir. Bu amaçla akım modelinden elde edilen hidrolik yükler Denklem (2.3)'te kullanılarak akış hızları hesaplanmaktadır. Daha sonra bu hız değerleri Denklem (2.4)'te yerine yazılarak dispersiyon tensörünün elemanları elde edilmektedir. Böylece kirletici taşınım modelinin oluşturulması için gerekli olan bütün parametreler bilinmiş olur.

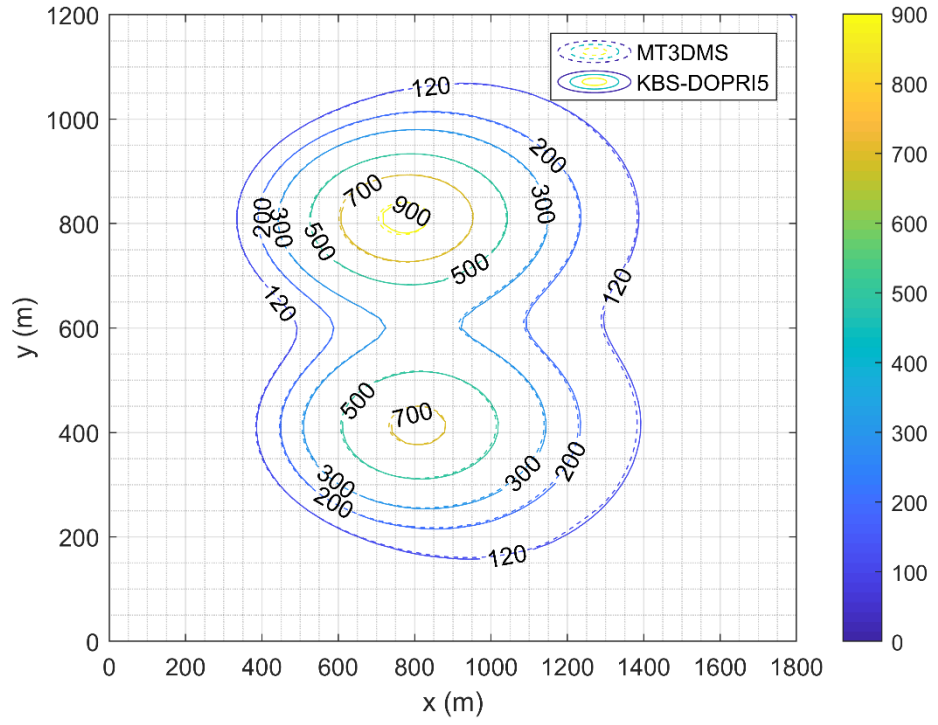
Yapılan analizlerde grid aralıkları MT3DMS programında  $\Delta x = \Delta y = 10$  m olarak, KBS-DOPRI5 şemasında ise  $\Delta x = \Delta y = 20$  m olarak alınmaktadır. Referans çözümün doğruluğunu arttırmak amacıyla grid aralığı daha küçük seçilmektedir. Şekil 3.14, 3.15, 3.16 ve 3.17'de sırasıyla 2, 3, 4 ve 5 yıl sonundaki KBS-DOPRI5 şeması ile elde edilen kirletici taşınım model sonuçlarının MT3DMS ile karşılaştırılması yapılmaktadır. Sonuçların birbirleriyle oldukça uyumlu oldukları açıkça görülmektedir. MT3DMS programıyla üretilen sonuçlarda üçüncü mertebe TVD şeması kullanılmaktadır.



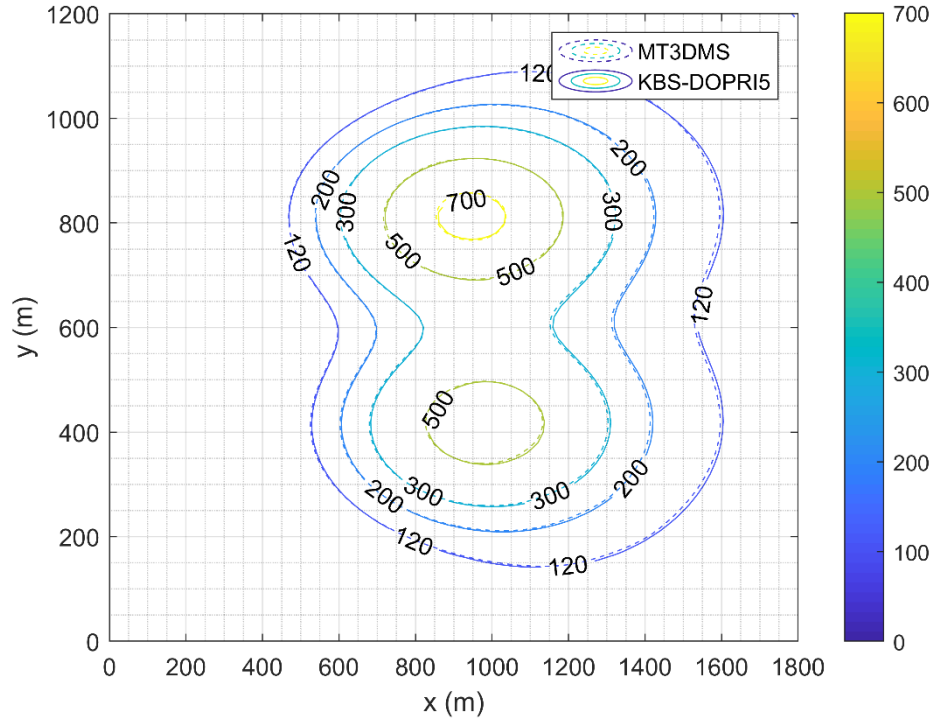
Şekil 3.14: Kirlenici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (2 yıl)



Şekil 3.15: Kirlenici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (3 yıl)



Şekil 3.16: Kirlenici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (4 yıl)

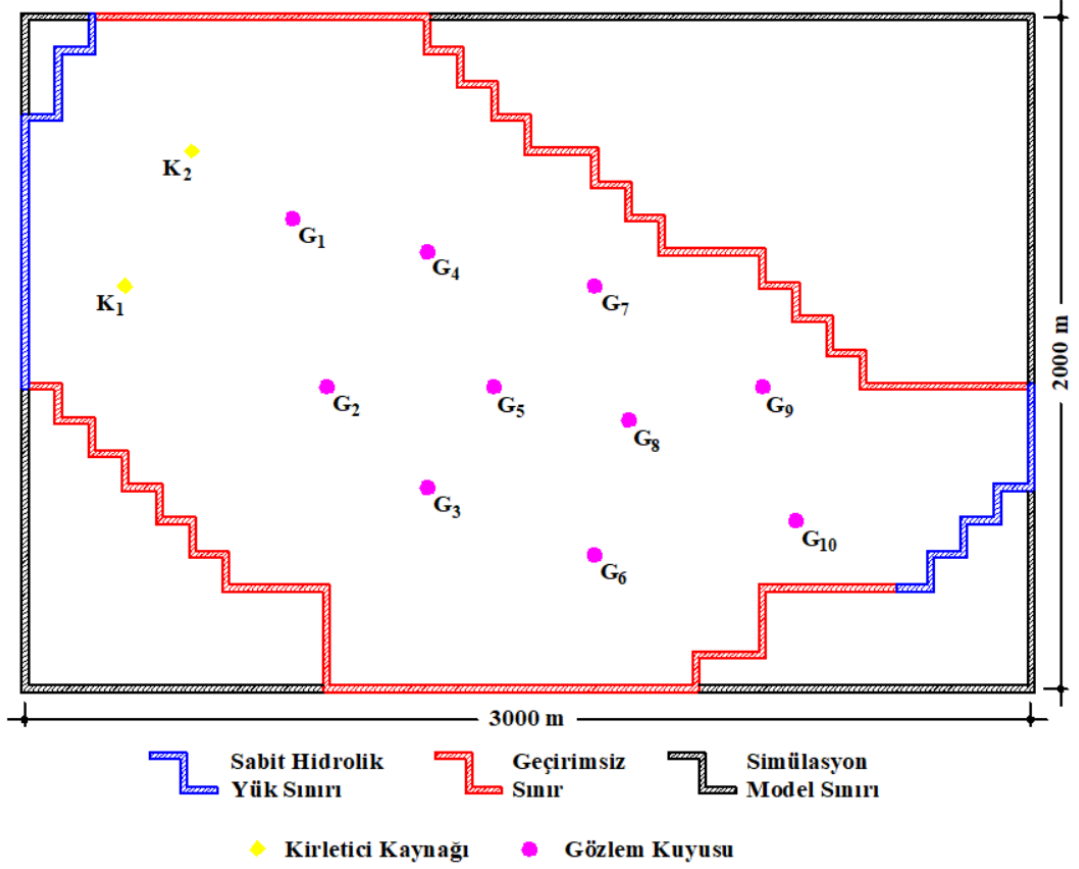


Şekil 3.17: Kirlenici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (5 yıl)

### 3.2.2 Örnek 6

Bir önceki örnekten görüldüğü üzere geliştirilen simülasyon modeli başarılı bir şekilde düzgün geometriye sahip problemlere uygulanabilmektedir. Ayrıca S-O modeli ile aynı problemin kirletici kaynak akılarının başarılı bir şekilde hesaplanabildiği gösterilmektedir. Böylece bir sonraki aşama olarak geliştirilen model daha gerçekçi durumu yansıtan düzensiz geometriye sahip bir akifer problemine uygulanacaktır. Bir önceki örnekte olduğu gibi öncelikle problemin simülasyon modelinin doğrulanması yapılacaktır. Bu doğrulama işlemi başarılı olduktan sonra aynı problem ters problem olarak incelenecek ve S-O modelinin uygulanabilirliği araştırılacaktır. S-O modelinin kullanılacağı ters problemde ise kirletici kaynak karakteristiklerinin tamamının bilinmediği kabul edilerek hesaplamalar yapılacaktır. Gerçek uygulamalarda da genellikle kirletici kaynak özellikleri ile ilgili bilgiler bilinmemektedir.

Düzensiz geometriye sahip bu örnek, mevcut çalışmalarda incelenen örnekler dikkate alınarak uyarlanmıştır (Ayvaz 2010, Gurarlan ve Karahan 2015). Akifer geometrisi, sınır şartları, kirletici kaynaklarının ve gözlem kuyularının konumları Şekil 3.18’de görülmektedir. Akiferin geometrisi düzensiz olduğu için verilerin saklandığı matrisin boyutları simülasyon modelinin sınırları olarak Şekil 3.18’de belirtildiği şekilde alınmıştır. Simülasyon model sınırı ile Dirichlet ve Neumann sınırları arasında kalan kısımlar pasif noktalardır ve çözüm sırasında işlemlere dahil edilmemektedir. MATLAB’ta bu noktaların değerleri NaN (not a number) olarak alınmaktadır. Akiferin batı ve doğu taraflarında yer alan ve mavi renk ile gösterilmiş Dirichlet sınır şartlarındaki sabit hidrolik yük değerleri sırasıyla 100 m ve 70 m’dir. Kırmızı renk ile gösterilen sınırlar geçirimsiz olup o yönde akışın olmadığını belirtmektedir. Şekil 3.18’den açıkça görüldüğü üzere akiferde iki adet kirletici kaynağı ve 10 adet gözlem kuyusu bulunmaktadır. Akiferin özellikleri ile ilgili parametrelerin bilgileri Tablo 3.12’de verilmektedir.



Şekil 3.18: Örnek 6’da kullanılan varsayımsal akifer modeli

Tablo 3.12: Örnek 6’da kullanılan çözüm parametreleri

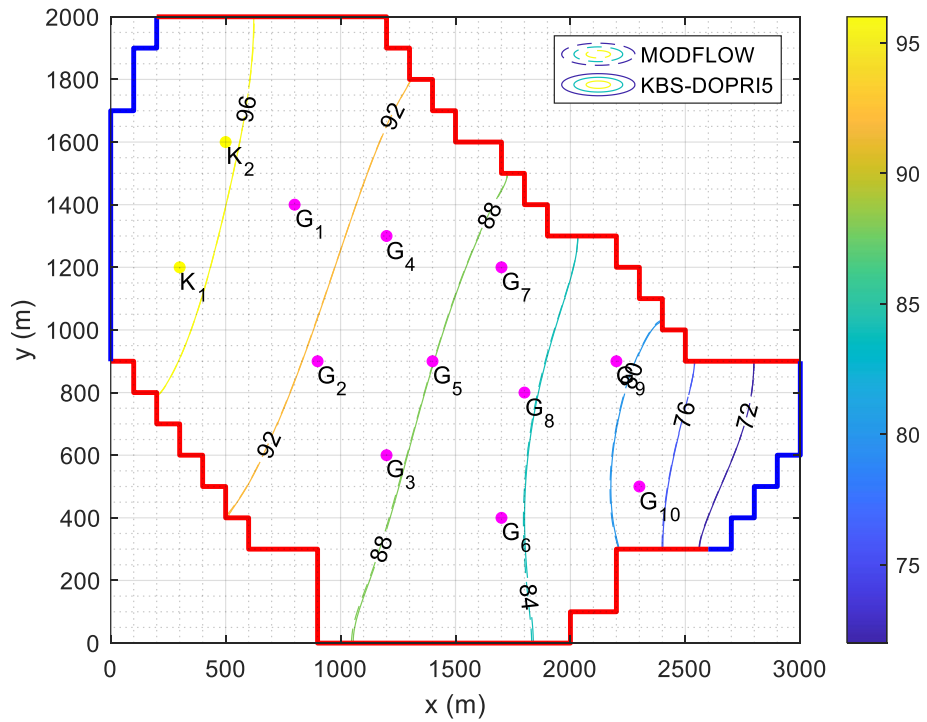
Parametre	Değer
$x$ yönündeki hidrolik iletkenlik, $K_{xx}$ (m/s)	0.0005
$y$ yönündeki hidrolik iletkenlik, $K_{yy}$ (m/s)	0.0005
Etkili porozite, $\theta$	0.3
Boyuna dispersivite, $\alpha_L$ (m)	50
Enine dispersivite, $\alpha_T$ (m)	5
Doygun kalınlık, $b$ (m)	40
Birim alandaki hacimsel akı, $W$ (m/s)	$1 \times 10^{-9}$
Başlangıç konsantrasyonu (ppm)	0

Bu örnek için toplam simülasyon süresi 10 yıl olarak alınmıştır. Bu süre her biri 6 ay olan 20 eş stres periyoduna ayrılmıştır. Kirletici kaynaklarının ilk 2.5 yıllık süreyi kapsayan 5 stres periyodu boyunca aktif olduğu kabul edilmiştir. Bu aktif stres periyotlarındaki kirletici kaynak akılarının değerleri Tablo 3.13’te sunulmaktadır.

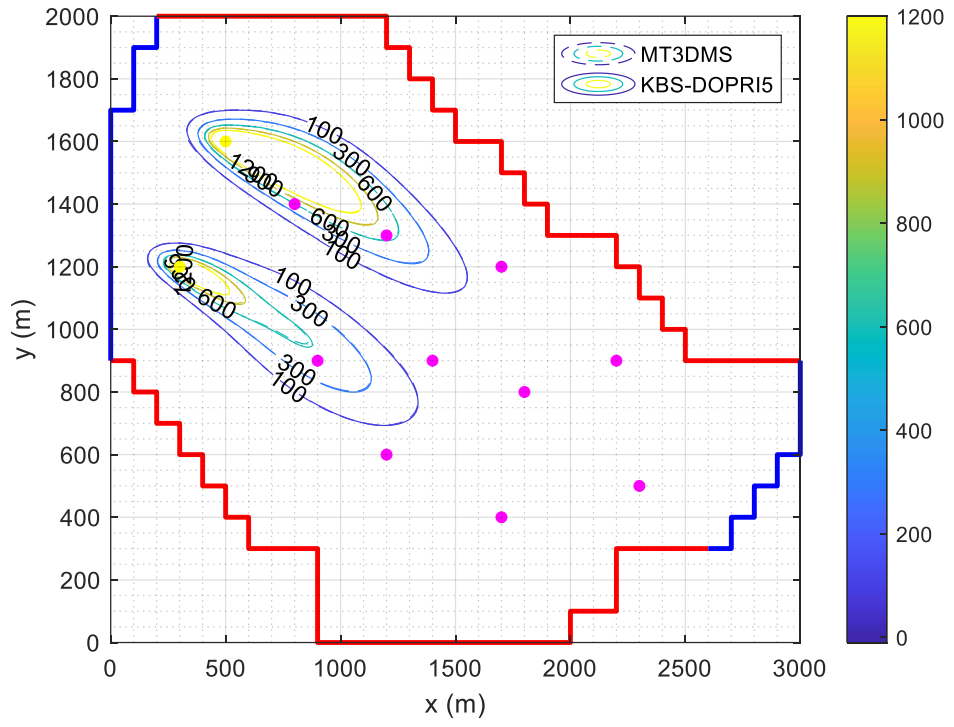
**Tablo 3.13:** Kaynak Akılarının değerleri  
(SP: stres periyodu)

Kirlenici Kaynağı	Koordinatlar		Kaynak Akıları (g/s)				
	x (m)	y (m)	SP1	SP2	SP3	SP4	SP5
K <sub>1</sub>	300	1200	30	40	30	55	10
K <sub>2</sub>	500	1600	75	40	50	70	30

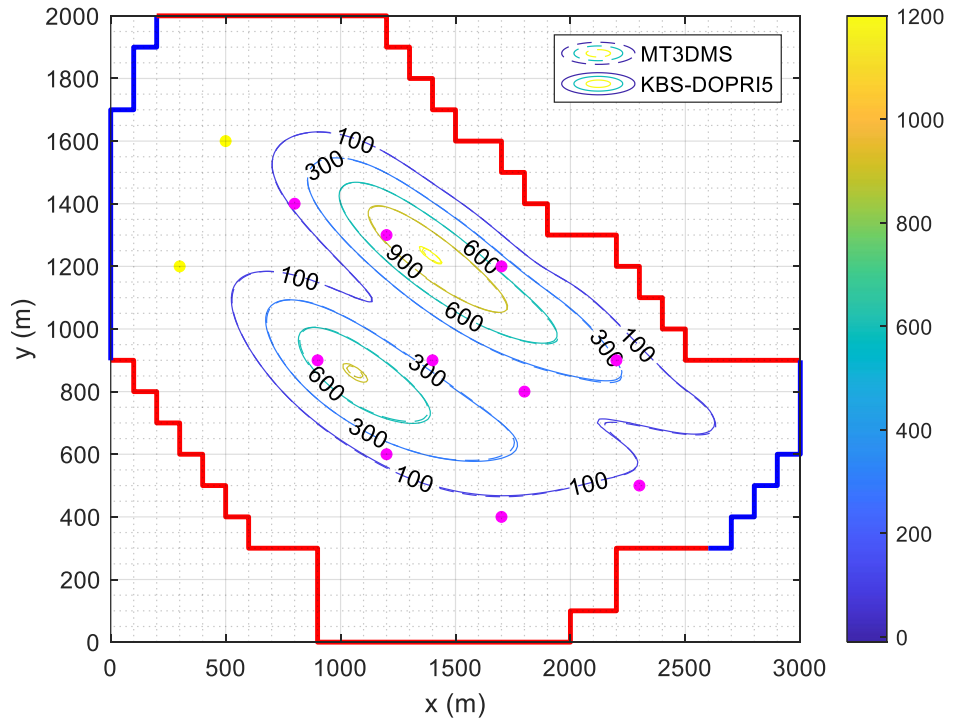
Problemin öncelikle akım modeli oluşturulmuştur. Bu amaçla Denklem (2.1)'de verilen akım denklemi kararlı durum için çözülmüştür. Ayrıca aynı problem MODFLOW ile çözümlenerek elde edilen sonuçlar Şekil 3.19'da karşılaştırılmaktadır. Sonuçların birbiriyle uyumlu oldukları açık bir şekilde görülmektedir. Böylece KBS-DOPRI5 sayısal şemasının düzensiz geometriye sahip akım problemlerine uygulanabilir olduğu gösterilmiştir.



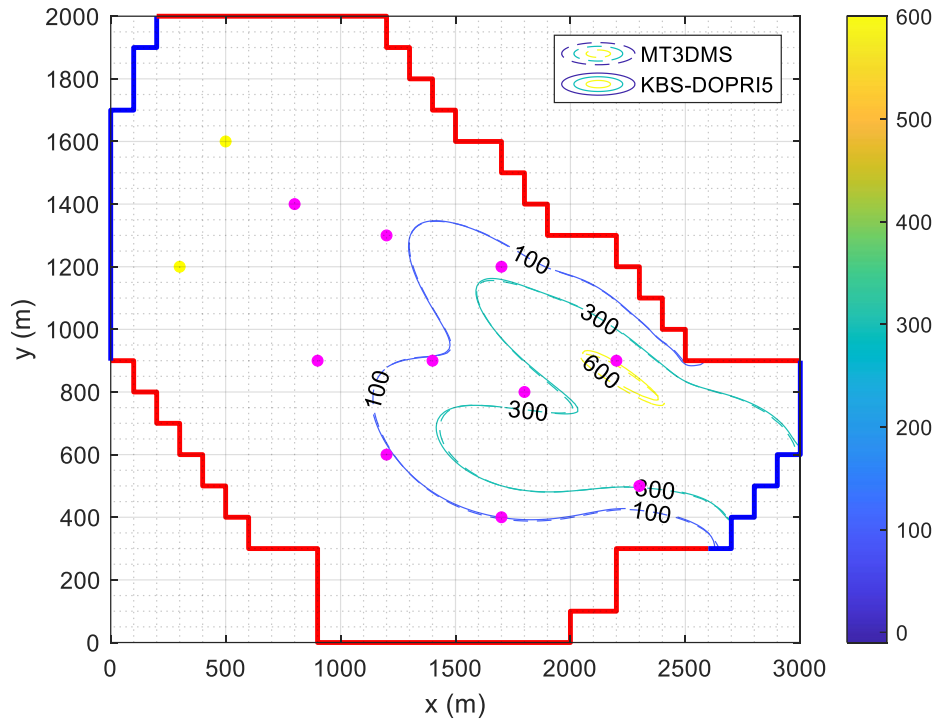
**Şekil 3.19:** Akım modeli sonuçlarının karşılaştırılması



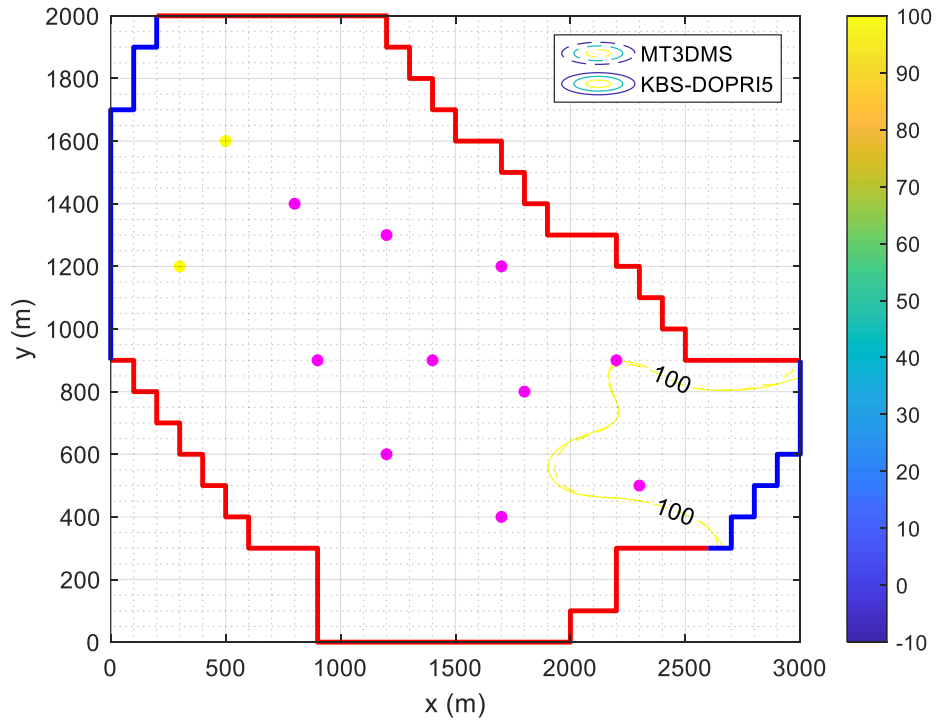
Şekil 3.20: Kirlenici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (2 yıl)



Şekil 3.21: Kirlenici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (4 yıl)



Şekil 3.22: Kirlenici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (6 yıl)



Şekil 3.23: Kirlenici taşınım modeli sonuçlarının karşılaştırılması (8 yıl)



Bir sonraki aşama olarak kirletici taşınım modeli oluşturulacaktır. Bunun için akım modelinden elde edilen sonuçlar kullanılarak hız ve dispersiyon tensörünün bileşenleri hesaplanmıştır. Daha sonra KBS-DOPRI5 sayısal şeması ile Denklem (2.2) çözülerek kirletici taşınım modeli elde edilmiştir. Aynı problemin modeli MT3DMS programı ile de oluşturularak farklı simülasyon süreleri için karşılaştırmalar yapılmıştır. Yapılan analizlerde konum grid aralıkları  $\Delta x = \Delta y = 12.5$  m olarak alınmıştır. Elde edilen analiz sonuçlarının karşılaştırmaları Şekil 3.20, 3.21, 3.22 ve 3.23'te sırasıyla 2, 4, 6, 8 yıl simülasyon süreleri için verilmektedir. Bu karşılaştırmalara göre KBS-DOPRI5 sayısal şemasının oldukça doğru sonuçlar ürettiği açıkça görülmektedir.

### 3.3 Kirletici kaynak karakteristiklerinin belirlenmesi

Bu bölümde, geliştirilen S-O modelinin düzgün ve düzensiz geometriye sahip iki adet varsayımsal akifer problemine uygulanması yapılacaktır. Önceki bölümde geliştirilen simülasyon modelinin doğrulanması gerçekleştirilmiştir. Bu sebeple ilgili problemler doğrudan ters problemler olarak ele alınacak olup S-O modeli ile kirletici kaynak karakteristiklerinin belirlenmesi araştırılacaktır. Ters problem çözümünde optimizasyon sürecinin her iterasyonunda simülasyon modeli defalarca kullanılacağı için işlem süresi oldukça uzun olmaktadır. Bu amaçla tez çalışmasında simülasyon modelinin işini çok kısa sürede gerçekleştirecek vekil model yaklaşımı kullanılmaktadır. Vekil model olarak detayları verilen tepki matrisi yaklaşımı ve DVM regresyon modeli kullanılmaktadır.

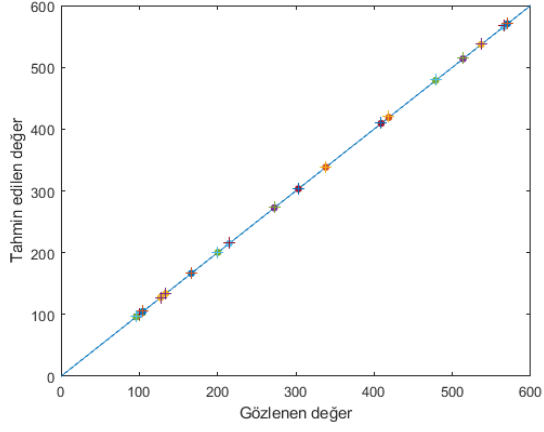
Birinci problem de sadece kirletici kaynaklarındaki konsantrasyon salınımlarının belirlenmesi için analizler yapılacak olup kaynak sayıları, konumları ve aktif stres periyotları gibi diğer kaynak karakteristiklerinin bilindiği varsayılmaktadır. İkinci problem de ise düzensiz geometriye sahip daha gerçekçi bir akifer modeli ele alınacaktır. Bu problem için iki farklı senaryo durumu için incelemeler yapılmaktadır. İlk senaryoda birinci probleme benzer şekilde kirletici kaynak konumlarının aktif stres periyotlarının bilindiği kabul edilerek sadece kaynaklardaki salınım geçmişlerinin bulunması araştırılacaktır. İkinci senaryoda kirletici kaynak karakteristiklerinin (kaynak sayısı, konumları, salınım geçmişleri ve

aktif stres periyotları) tamamının bilinmediği kabul edilerek analizler yapılacaktır. Bunun dışında kalan akiferin hidrolik iletkenlik, dispersivite katsayıları, sınır koşulları vb. gibi özelliklerinde herhangi bir belirsizlik olmadığı kabul edilmektedir. Analizler hata içeren ve hata içermeyen olmak üzere iki farklı durum için gerçekleştirilecektir. Hata içermesinin amacı sahada yapılan ölçümlerde veya laboratuvardaki testlerde gerçekleşebilecek hataları dikkate almaktır. Bu sebeple normal dağılıma uygun şekilde hata değerleri üretilerek gözlem kuyularındaki konsantrasyon verileri bu oranda pertürbe edilmektedir.

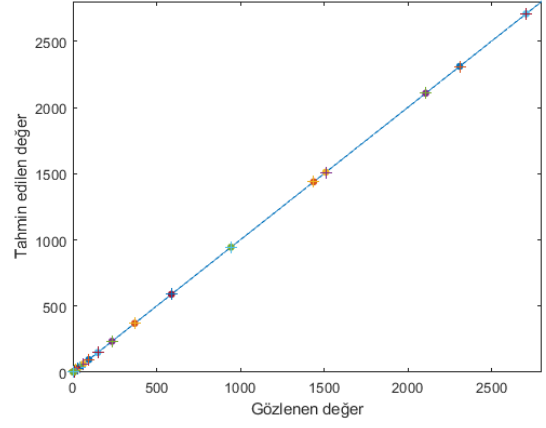
### 3.3.1 Örnek 7

Kirletici kaynaklarının konumları, sayıları ve aktif oldukları stres periyot sayılarının bilindiği varsayılarak sadece kirletici kaynak akılarının belirlenmesi amaçlanmaktadır. Toplamda 3 adet kirletici kaynağı ve 4 aktif stres periyodu bulunduğundan optimizasyon problemindeki karar değişkenlerinin sayısı **ND = 12** 'dir. Optimizasyon problemindeki amaç kirletici kaynaklarındaki akıları ayarlayarak gözlem kuyularında her stres periyodu için hesaplanan ve gözlenen konsantrasyon değerlerinin farklarının karesinin toplamını minimize etmektir. 6 gözlem kuyusu ve 20 stres periyodu olduğundan toplam 120 adet gözlenmiş konsantrasyon değeri bulunmaktadır. Karar değişkenleri olan kirletici kaynak akılarının alt ve üst sınırları sırasıyla 0 g/s ( $C_{s,min}$ ) ve 100 g/s ( $C_{s,max}$ ) olarak alınmıştır.

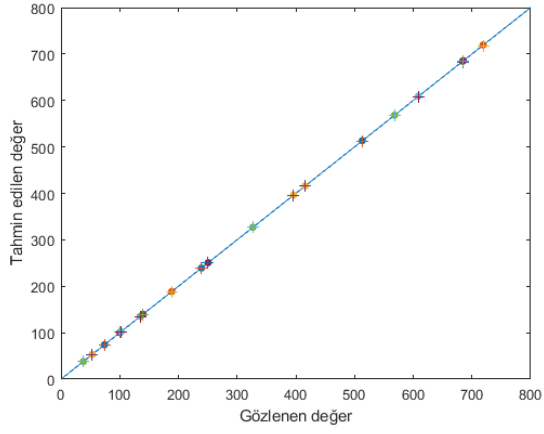
Problemin çözümüne geçebilmek için kullanılacak vekil modellerin doğrulanması gerekmektedir. Bu amaçla, aynı girdiler kullanılarak vekil modellerin ürettiği tahmini değerler ile gözlem kuyularındaki gözlenen değerler aynı grafik üzerine işlenerek Şekil 3.24'te sunulmaktadır. Burada artılar konsantrasyon TM sonuçlarını, noktalar ise DVM regresyon modelinin sonuçlarını temsil etmektedir. Şekil 3.24'ten görüldüğü üzere her iki vekil modelin sonuçları simülasyon model sonucundan alınan gözlenen değerlerle hemen hemen aynıdır. Her iki vekil model içinde hesaplanan  $R^2$  değerleri 0.99'dan büyüktür. Bu sonuçta anlaşılacağı üzere vekil modeller başarılı bir şekilde simülasyon modelinin yerine kullanılabilir.



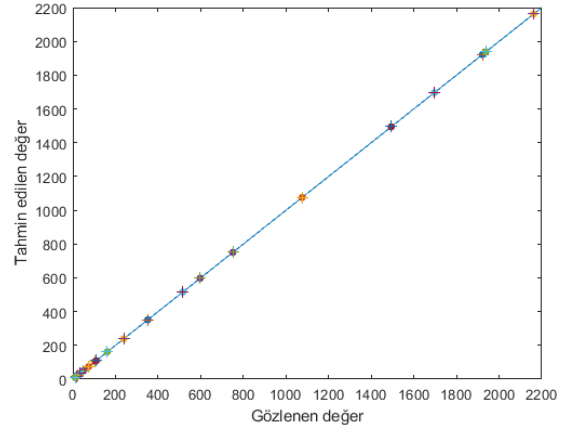
(a)



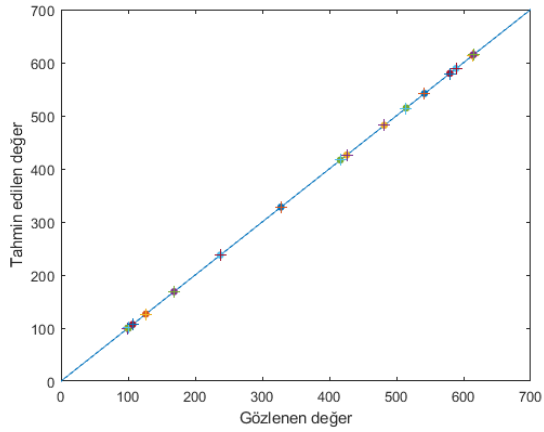
(b)



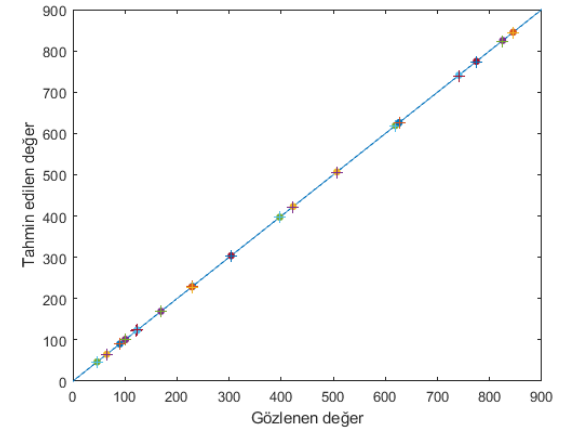
(c)



(d)



(e)



(f)

**Şekil 3.24:** Vekil modellerin sonuçları ile gözlenen değerlerin uyumluluğu: (a)-(f) sırasıyla birinciden altıncıya kadar gözlem kuyularını temsil etmektedir.

Önerilen metodolojinin performansı hatalı ölçümlerin olduğu durumlar içinde test edilecektir. Sahada veya laboratuvarında yapılan testlerin hata içerme olasılıkları bulunduğu için ölçüm verilerine belli oranlarda hata terimleri eklemek gerçek durumu yansıtmaktadır. Bu amaçla farklı gürültü seviyelerinde Denklem (2.25)'te gösterildiği şekilde standart normal dağılıma uygun olarak üretilmiş ölçüm hataları eklenmiştir. Bu durumlar için yapılan hesaplamaların sonuçlarının literatürde verilen sonuçlarla karşılaştırılması Tablo 3.14'te sunulmaktadır. NH değerleri elde edilirken 10 farklı analizin sonuçlarının ortalaması alınmıştır. Tahmin edildiği gibi gürültü seviyesi arttıkça NH değerleri de büyümektedir. Tablo 3.14'ten bu çalışma da bulunan NH değerlerinin literatürdeki diğer sonuçlara göre daha küçük olduğu görülmektedir. Burada DVM ve TM vekil modellerinin ürettiği sonuçların birbirine oldukça yakın olduğu görülmektedir. Bunun sebebi vekil modellerin simülasyon modelinin sonuçlarını çok küçük bir hata payı ile üretmeleridir.

**Tablo 3.14:** Farklı gürültü seviyeleri için elde edilen NH değerlerinin literatürdeki sonuçlarla karşılaştırılması

Gürültü Seviyesi ( $\alpha$ )	NH (%)						
	ANN (Singh ve diğ. 2004)	GA (Singh ve Datta 2006)	HS (Ayvaz 2010)	DE (Gurarslan ve Karahan 2015)	GA-Kriging (Zhao ve diğ. 2016)	DE-TM	DE-DVM
0.00	8.77	5.92	0.09	0.01	6.13	0.01	0.02
0.05	14.18	14.36	3.71	2.31	7.82	2.14	2.21
0.10	22.88	17.41	8.93	5.67	9.05	4.29	4.35
0.15	31.78	19.03	11.23	8.32	10.22	6.43	6.51
0.20	40.05	23.51	16.60	14.38	12.80	8.58	8.72

Orta gürültü seviyesi için elde edilen kirletici kaynak akıları ile gerçek akıların karşılaştırmaları Tablo 3.15'te verilmektedir. Ayrıca bu sonuçlar için OBHY ve SS performans değerlendirme kriterleri hesaplanmaktadır. Sunulan sonuçlar incelendiğinde orta gürültü seviyesi için yapılan analizlerde kaynak akılarının gerçek akılara oldukça yakın olarak bulunduğu görülmektedir. OBHY değerlerinin ise en yükseği 3.22 olarak hesaplanmış olup oldukça küçük bir hata olduğunu ifade etmektedir.

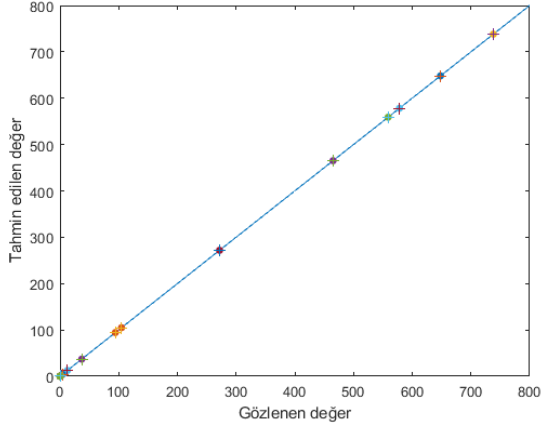
**Tablo 3.15:** Orta gürültü seviyesi için gerçek kaynak akıları ile hesaplanan kaynak akılarının karşılaştırılması ( $\alpha = 0.10$ ).

UD: Uygulanabilir değil

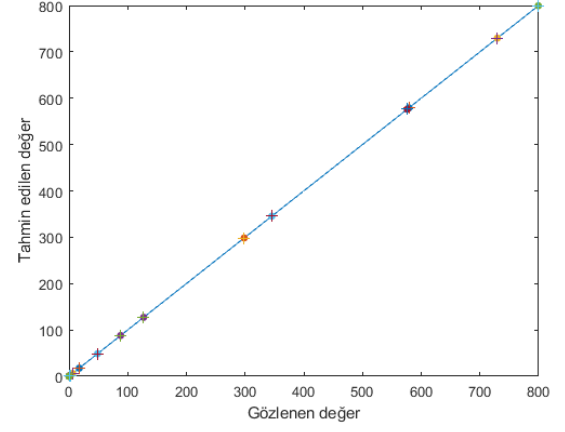
Kaynak	Aktif Stres Periyodu	Gerçek Kaynak Akısı (g/s)	Hesaplanan Kaynak Akısı (g/s)		
			Ortalama Akı	OBHY	SS
K <sub>1</sub>	SP1	47	46.35	1.38	3.75
	SP2	15	14.56	2.95	8.36
	SP3	37	36.02	2.65	5.78
	SP4	0	0.87	UD	1.78
K <sub>2</sub>	SP1	0	0.03	UD	0.08
	SP2	0	0.08	UD	0.21
	SP3	0	0.08	UD	0.24
	SP4	0	0.39	UD	0.73
K <sub>3</sub>	SP1	30	29.65	1.17	0.89
	SP2	58.8	56.90	3.22	3.94
	SP3	0	1.53	UD	3.81
	SP4	35	34.25	2.15	3.80

### 3.3.2 Örnek 8

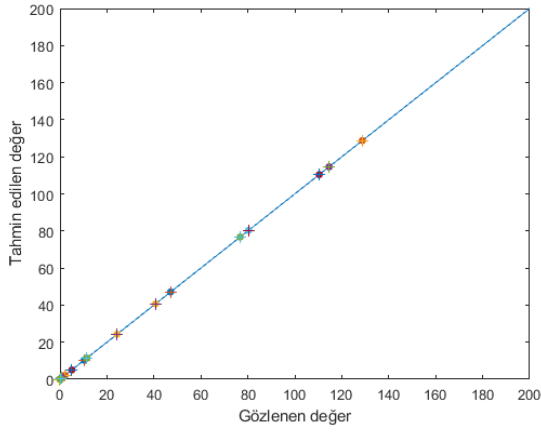
Birinci senaryo için yine LHÖ yaklaşımı ile 400 adet veri üretilerek DVM regresyon modelinin oluşturulması gerçekleştirilmektedir. DVM regresyon modeli ve TM vekil modellerinin sonuçları ile gözlenen değerlerin uyumluluğu birinciden onuncuya kadar her bir gözlem kuyusu için Şekil 3.25'te sunulmaktadır. Açıkça görüldüğü üzere her iki vekil modelde başarılı bir şekilde simülasyon modelinin ürettiği sonuçlara yakın sonuçlar üretmektedir.  $R^2$  değerleri 0.99'dan büyük olarak hesaplanmaktadır. Bu değerler uyumluluğun ne kadar yüksek olduğunu belirtmektedir. Tablo 3.16'da ölçüm hatalarının dahil edildiği durumlarda yapılan analizler sonucunda hesaplanan NH değerlerinin oldukça küçük olduğu görülmektedir. Her iki vekil modelde birinci senaryoda başarılı sonuçlar sağlamaktadır.



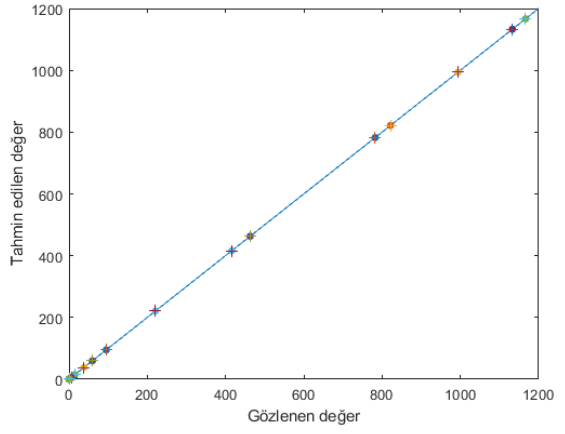
(a)



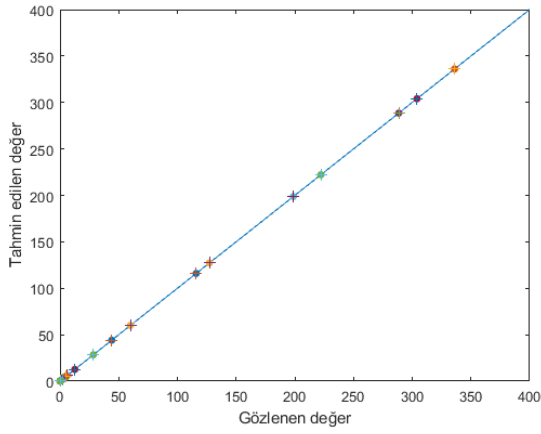
(b)



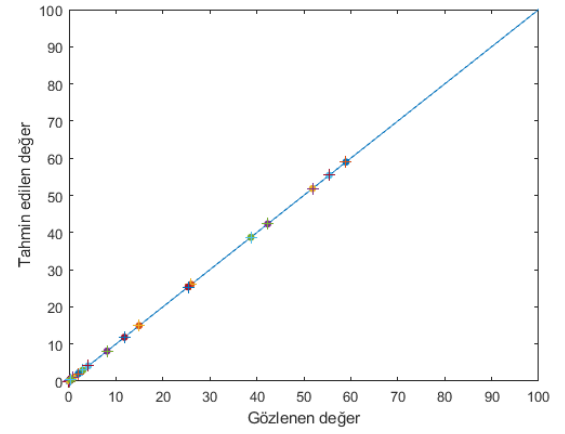
(c)



(d)

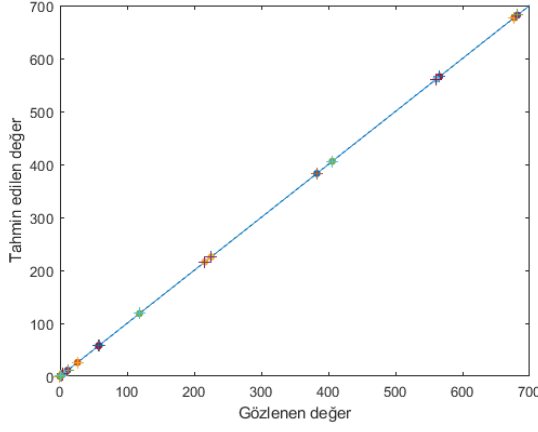


(e)

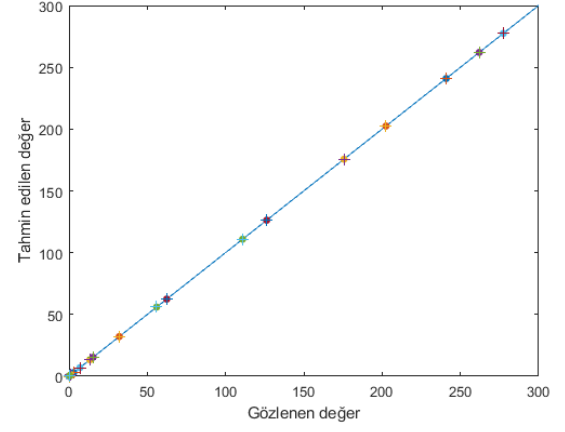


(f)

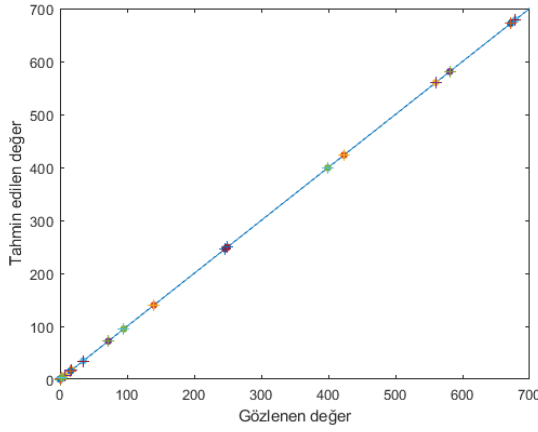
**Şekil 3.25:** Vekil modellerin sonuçları ile gözlenen değerlerin uyumluluğu: (a)-(j) sırasıyla birinciden onuncuya kadar gözlem kuyularını temsil etmektedir.



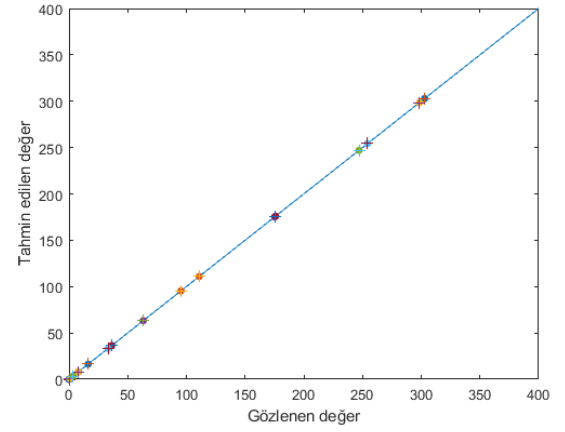
(g)



(h)



(i)



(j)

**Şekil 3.26 (devam):** Vekil modellerin sonuçları ile gözlenen değerlerin uyumluluğu: (a)-(j) sırasıyla birinciden onuncuya kadar gözlem kuyularını temsil etmektedir.

**Tablo 3.16:** Farklı gürültü seviyeleri için elde edilen NH değerleri

Gürültü Seviyesi ( $\alpha$ )	NH (%)	
	DE-TM	DE-DVM
0.00	0.01	0.02
0.05	0.50	0.52
0.10	1.10	1.14
0.15	2.67	2.74
0.20	4.47	4.58

İkinci senaryoda kirletici kaynak karakteristiklerinin tamamı hesaplanmaya çalışılacaktır. Bu amaçla kirletici kaynaklarının konumlarının ve sayılarında vekil modele girdi olarak verilmesi gerekmektedir. Ancak, yapılan çalışmalarda DVM regresyon modelinin bu eğitim verisini öğrenmede başarılı olamadığı tespit edilmiştir. Bu sebeple, bu tarz problemlerde TM yaklaşımının kullanılması daha uygun bir seçim olarak değerlendirilmektedir. TM, her bir potansiyel kaynak konumu için simülasyon modeli çalıştırılarak oluşturulmaktadır. Bu sebeple kaynak konumlarının değişmesinden etkilenmeyerek simülasyon modelini görevini yapabilmektedir.

Bu problem düzensiz geometriye sahip olduğu için akım alanı dışında, aktif olmayan düğüm noktaları içermektedir. S-O modelinin çalışabilmesi için bu noktaların arama sürecine dahil edilmemesi gerekmektedir. Bu amaçla, bu tarz kısıtları dikkate almaya yarayan penaltı yaklaşımı kullanılmaktadır (Ayvaz 2010).

$$F_{n_k, n_{asp}}^* = F_{n_k, n_{asp}} + Pe(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \quad (3.15)$$

$$Pe(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \begin{cases} 0 & \text{eğer } (x_i, y_i) \text{ aktif ise} \\ \lambda & \text{eğer } (x_i, y_i) \text{ aktif değilse} \end{cases} \quad (3.16)$$

Burada  $F_{n_k, n_{asp}}^*$   $n_k$  kaynak sayısına ve  $n_{asp}$  aktif stres periyoduna sahip cezalandırılmış amaç fonksiyonunu,  $Pe(\mathbf{x}, \mathbf{y})$  Denklem (3.16)'ya göre belirlenen penaltı fonksiyonunu,  $\lambda$  ise uygulanacak cezanın yani penaltı fonksiyonunun değerini temsil etmektedir. Denklem (3.15) ve (3.16),  $(x_i, y_i)$  olarak belirlenen bir kaynağın akım alanı içinde ise herhangi bir cezaya maruz bırakılmadan çözümün ilerlediğini, akım alanı dışında kalıyor ise  $\lambda$  değerinde bir ceza ile cezalandırılacağını göstermektedir.  $\lambda$  probleme göre değişmekle birlikte genellikle büyük bir değer seçilmesi uygundur. Yapılan analizlerde bu değer 10000 olarak alınmıştır.

Örnek 7'den farklı olarak bu problemde kirletici kaynak sayısı, konumları, aktif stres periyotları ve salınım geçmişleri gibi bütün karakteristiklerin bilinmediği varsayılarak arama işlemi yapılmaktadır. Salınım geçmişleri ve kirletici konumlarının belirlenebilmesi için kirletici kaynak sayısı ve aktif stres periyotlarının sayısının bilinmesi gerekmektedir. Bu amaçla Denklem (2.24)'te belirtildiği şekilde kaynak sayısının 1 ve aktif stres periyodunun 1 olduğu kabul edilerek arama işlemi



başlatılıp sistematik olarak bu değerler önceden belirlenen  $m_k = 3$  ve  $m_{asp} = 7$  maksimum arama rakamlarına ulaşıncaya kadar arttırılmaktadır.

Kaynak sayısının ve aktif stres periyotlarının belirlenmesi için yapılan analizler Tablo 3.17’de sunulmaktadır. Görüldüğü gibi, kaynak sayısı ve aktif stres periyotlarının kesin değerlerden küçük olduğu analizlerde hesaplanan amaç fonksiyonu değerleri büyüktür. Bu da dikkate alınan kaynak karakteristiklerinin doğru olmadığını göstermektedir. Tablo 3.17 incelendiğinde, kaynak sayısının ve aktif stres periyotlarının doğru değerlere eşit veya büyük olduğu durumlarda amaç fonksiyonu değerlerinin oldukça küçük olarak hesaplandığı görülmektedir. Bu arama süreçlerinden hangisinin doğru olduğuna karar verebilmek için kaynakların konumlarına ve hesaplanan salınım geçmişlerinin incelenmesi gerekmektedir. Bu değerler incelendiğinde 5’in üzerindeki stres periyotlarındaki kaynak salınım geçmişlerinin 0 olarak bulunduğu açıkça görülmektedir. Ayrıca 2’den daha fazla kaynak bulunduğu durum için yapılan analizlerde 3. kaynağın hesaplanan konumunun bir önemi bulunmamaktadır. Çünkü bu kaynağın bütün stres periyotları için salınım geçmişleri sıfırdır. Diğer iki kirletici kaynağının konumları doğru bir şekilde bulunmuştur. Böylece Tablo 3.17’den kirletici kaynak sayısının 2, aktif stres periyotlarının da 5 olduğu görülmektedir.

Optimum kirletici kaynak sayısı ve aktif stres periyodu belirlendiğine göre bir sonraki aşama olarak geliştirilen modelin, hatalı koşullar altında nasıl performans göstereceği incelenecektir. Bu amaçla Denklem (2.25)’te belirtildiği şekilde standart normal dağılıma uygun üretilmiş hata terimleri gözlenen konsantrasyon değerlerine eklenecektir. Örnek 7’de yapıldığı üzere hatalı durumlar için 10 farklı analiz yapılacak olup bunların ortalamaları dikkate alınacaktır. Tablo 3.18’de bu durumlar dikkate alınarak yapılan analiz sonuçları sunulmaktadır. Ayrıca Tablo 3.18’de modelin etkinliğini ölçmek için performans değerlendirme kriterleri de verilmektedir.

**Tablo 3.17:** Farklı sayıdaki kirletici kaynağı ve aktif stres periyodu için belirlenen kaynak karakteristikleri

	K <sub>1</sub>							K <sub>2</sub>							K <sub>3</sub>							F				
	(x, y)	SP1	SP2	SP3	SP4	SP5	SP6	SP7	(x, y)	SP1	SP2	SP3	SP4	SP5	SP6	SP7	(x, y)	SP1	SP2	SP3	SP4		SP5	SP6	SP7	
F <sub>1,1</sub>	(300, 1700)	150.0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	23.98	
F <sub>1,2</sub>	(200, 1700)	150.0	150.0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	19.25	
F <sub>1,3</sub>	(400, 1600)	96.6	0.0	148.1	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	17.36	
F <sub>1,4</sub>	(400, 1600)	104.9	9.4	62.0	71.7	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	16.22	
F <sub>1,5</sub>	(500, 1600)	76.4	44.2	50.7	76.7	28.6	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	16.12	
F <sub>1,6</sub>	(500, 1600)	76.4	44.2	50.7	76.7	28.6	0.0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	16.12	
F <sub>1,7</sub>	(500, 1600)	76.4	44.2	50.7	76.7	28.6	0.0	0.0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	16.12	
F <sub>2,1</sub>	(100, 1300)	117.2	-	-	-	-	-	-	(300, 1700)	150.0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	13.71	
F <sub>2,2</sub>	(200, 1200)	9.8	101.3	-	-	-	-	-	(200, 1700)	150.0	150.0	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	6.82	
F <sub>2,3</sub>	(300, 1200)	35.9	0.0	121.7	-	-	-	-	(200, 1700)	150.0	88.6	102.2	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	2.87	
F <sub>2,4</sub>	(300, 1200)	28.7	46.8	12.9	76.6	-	-	-	(500, 1600)	73.1	51.8	12.0	129.7	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.14	
F <sub>2,5</sub>	<b>(300, 1200)</b>	<b>30.0</b>	<b>40.0</b>	<b>30.0</b>	<b>55.0</b>	<b>10.0</b>	-	-	<b>(500, 1600)</b>	<b>75.0</b>	<b>40.0</b>	<b>50.0</b>	<b>70.0</b>	<b>30.0</b>	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	<b>2.08 × 10<sup>-11</sup></b>	
F <sub>2,6</sub>	<b>(300, 1200)</b>	<b>30.0</b>	<b>40.0</b>	<b>30.0</b>	<b>55.0</b>	<b>10.0</b>	<b>0.0</b>	-	<b>(500, 1600)</b>	<b>75.0</b>	<b>40.0</b>	<b>50.0</b>	<b>70.0</b>	<b>30.0</b>	<b>0.0</b>	-	-	-	-	-	-	-	-	-	<b>2.86 × 10<sup>-11</sup></b>	
F <sub>2,7</sub>	<b>(300, 1200)</b>	<b>30.0</b>	<b>40.0</b>	<b>30.0</b>	<b>55.0</b>	<b>10.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>(500, 1600)</b>	<b>75.0</b>	<b>40.0</b>	<b>50.0</b>	<b>70.0</b>	<b>30.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	-	-	-	-	-	-	-	-	<b>3.59 × 10<sup>-11</sup></b>	
F <sub>3,1</sub>	(200, 1200)	68.2	-	-	-	-	-	-	(100, 1600)	126.4	-	-	-	-	-	-	(300, 1700)	150.0	-	-	-	-	-	-	10.14	
F <sub>3,2</sub>	(200, 1200)	15.4	78.9	-	-	-	-	-	(300, 1700)	112.8	100.2	-	-	-	-	-	(100, 1500)	0.0	64.5	-	-	-	-	-	5.02	
F <sub>3,3</sub>	(300, 1200)	35.0	0.0	123.2	-	-	-	-	(500, 1600)	74.9	39.7	43.4	-	-	-	-	(200, 1700)	0.0	0.0	150.0	-	-	-	-	0.86	
F <sub>3,4</sub>	(300, 1200)	28.7	46.9	12.7	76.8	-	-	-	(500, 1600)	0.0	0.0	0.0	91.5	-	-	-	(300, 2000)	73.4	50.3	16.7	123.9	-	-	-	0.12	
F <sub>3,5</sub>	<b>(300, 1200)</b>	<b>30.0</b>	<b>40.0</b>	<b>30.0</b>	<b>55.0</b>	<b>10.0</b>	-	-	<b>(500, 1600)</b>	<b>75.0</b>	<b>40.0</b>	<b>50.0</b>	<b>70.0</b>	<b>30.0</b>	-	-	<b>(1000, 2000)</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	-	<b>2.94 × 10<sup>-11</sup></b>	
F <sub>3,6</sub>	<b>(300, 1200)</b>	<b>30.0</b>	<b>40.0</b>	<b>30.0</b>	<b>55.0</b>	<b>10.0</b>	<b>0.0</b>	-	<b>(500, 1600)</b>	<b>75.0</b>	<b>40.0</b>	<b>50.0</b>	<b>70.0</b>	<b>30.0</b>	<b>0.0</b>	-	<b>(1000, 2000)</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	-	<b>5.08 × 10<sup>-11</sup></b>
F <sub>3,7</sub>	<b>(300, 1200)</b>	<b>30.0</b>	<b>40.0</b>	<b>30.0</b>	<b>55.0</b>	<b>10.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>(500, 1600)</b>	<b>75.0</b>	<b>40.0</b>	<b>50.0</b>	<b>70.0</b>	<b>30.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>(1000, 2000)</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>0.0</b>	<b>5.19 × 10<sup>-11</sup></b>

**Tablo 3.18:** Farklı gürültü seviyelerinde hesaplanan kaynak karakteristikleri

Kaynak	Aktif Stres Periyodu	$\alpha = 0.05, NH = 0.80$				$\alpha = 0.10, NH = 2.73$				$\alpha = 0.15, NH = 4.54$				$\alpha = 0.20, NH = 7.09$			
		Kaynak Konumu	Ortalama Akı	OBHY	SS	Kaynak Konumu	Ortalama Akı	OBHY	SS	Kaynak Konumu	Ortalama Akı	PAEE	SS	Kaynak Konumu	Ortalama Akı	OBHY	SS
$K_1$	SP1	(300, 1200)	30.07	0.23	1.21	(300, 1200)	31.13	3.76	2.82	(300, 1200)	29.82	0.60	5.14	(300, 1200)	28.94	3.53	3.97
	SP2		30.21	0.69	6.34		30.38	1.28	15.83		29.90	0.33	28.33		32.20	7.32	23.11
	SP3		10.60	6.05	4.27		9.76	2.37	6.15		9.74	2.57	6.52		13.17	31.73	10.24
	SP4		40.70	1.75	6.89		38.80	3.00	10.89		43.41	8.52	18.07		38.07	4.83	28.22
	SP5		70.51	0.73	6.01		73.49	4.98	20.41		72.86	4.08	25.88		64.05	8.51	28.80
$K_2$	SP1	(500, 1600)	39.94	0.15	5.12	(500, 1600)	38.52	3.71	8.06	(500, 1600)	39.63	0.92	16.84	(500, 1600)	39.98	0.04	11.68
	SP2		54.75	0.45	8.73		55.45	0.82	15.41		57.90	5.27	23.02		49.30	10.36	25.21
	SP3		74.36	0.86	2.67		75.11	0.14	3.78		76.78	2.37	6.20		72.77	2.98	6.72
	SP4		50.12	0.23	7.71		48.56	2.88	18.47		43.53	12.94	24.77		57.72	15.44	48.32
	SP5		29.73	0.91	2.27		28.17	6.11	8.14		28.79	4.03	9.70		30.53	1.76	7.85

Tablo 3.18 incelendiğinde gürültü seviyesi arttıkça beklenildiği şekilde NH değerlerinin arttığı görülmektedir. Yine de önerilen modelin gerçek kaynak salınım geçmişlerine oldukça yakın değerler bulduğu açıktır. En büyük NH değeri 7.09 olarak gürültü seviyesi  $\alpha = 0.20$  alındığı durumda hesaplanmıştır. Ancak bu değer bile oldukça küçük bir hata olduğu anlamına gelmektedir. Ayrıca eklenen hata değerlerine rağmen bütün gürültü seviyelerinde önerilen modelin kirlетici kaynak konumlarını doğru bir şekilde bulması dikkat çekicidir.

Vekil model kullanılmasının ana amacı S-O metodolojisinin işlem süresini kısaltmaktır. Son olarak vekil modellerin işlem sürelerinin karşılaştırmaları simülasyon modeli referans alınarak Tablo 3.19’da sunulmaktadır. Örnek 7’de DVM regresyon modeli simülasyon modelinin işlemini 11 kat daha hızlı gerçekleştirirken TM yaklaşımı aynı görevi 6154 kat daha hızlı yapmaktadır. Açıkça görüldüğü üzere vekil modeller simülasyon modeline göre çok kısa sürede aynı görevi yerine getirmektedir. Özellikle Örnek 8’de olduğu gibi akifer boyutlarının büyüdüğü durumlarda simülasyon modelinin işlem süresi artmaktadır. Bu durumda vekil model kullanımı daha da önemli olmaktadır. Ayrıca TM yaklaşımının işlem süresinin bu kadar hızlı olmasının sebebi tek bir matris operasyonu ile simülasyon modelinin görevini görmesinden kaynaklanmaktadır. Bu özelliği sayesinde TM oldukça cazip bir vekil modeldir. Yapılan işlem süresi karşılaştırmalarında vekil modellerin eğitimleri aşamasında harcanan süreler dikkate alınmamaktadır. S-O sürecinde binlerce işlem yapılacağı için eğitim aşamasında harcanan süreler dikkate alınsa bile vekil model kullanımı daha avantajlı olacaktır.

**Tablo 3.19:** Vekil modeller ile simülasyon modelinin işlem süresinin karşılaştırılması

	KBS-DOPRI5	DVM	TM
Örnek 7	1	11	6154
Örnek 8 (Birinci Senaryo)	1	80	75909
Örnek 8 (İkinci Senaryo)	1	-	41750

## 4. SONUÇ VE ÖNERİLER

Bu çalışmada, doymuş bölgede iki boyutlu yeraltısuyu akım ve reaktif olmayan kirletici taşınım problemlerinin simülasyonu için yüksek mertebeden yeni bir sayısal şema, kirletici kaynak karakteristiklerinin (konumlarının, sayılarının, aktif stres periyot sayılarının ve salınım geçmişlerinin) belirlenmesi için bir S-O metodolojisi ve bu S-O metodolojisinin işlem süresini kısaltmak amacıyla simülasyon modelinin görevini gören vekil modeller geliştirilmiştir.

Sayısal şemada, konum türevleri KBS fonksiyonları ile hesaplanmakta olup zaman integrasyonu ise adaptif bir Runge-Kutta şeması olan DOPRI5 ile gerçekleştirilmektedir. B-spline fonksiyonları global yapıya sahip olup türevler yerel olarak hesaplanmaktadır. Bu sayede, türev hesaplamaları yüksek doğrulukta olup global metotlarda görülen kötü koşullanmış matrisler oluşmamaktadır. Zamanda ise DOPRI5 şeması kullanılarak hem yüksek doğruluklu çözümler elde edilmekte hem de bu şema adaptif yapıya sahip olduğu için stabilite problemi ile karşılaşmamaktadır. Geliştirilen sayısal şema homojen izotropik, homojen anizotropik, heterojen anizotropik gibi farklı parametre özelliklerine ve düzenli ve düzensiz geometriye sahip farklı akım ve kirletici taşınım problemlerine başarılı bir şekilde uygulanmıştır. Kirletici taşınım problemlerinde KBS-DOPRI5 şemasının referans çözümlere oldukça yakın, düşük hata oranına ve literatürdeki sonuçlardan daha iyi çözümler ürettiği belirlenmiştir. Ayrıca yapılan incelemelerde KBS-DOPRI5 sayısal şemasının, aynı kesinlikte çözüm elde edilmesi şartıyla, SFM-DOPRI5 yönteminden yaklaşık 1000 kat daha hızlı olduğu tespit edilmiştir. Birleşik akım ve kirletici taşınım problemlerinde ise KBS-DOPRI5 sonuçları referans çözüm olarak alınan MODFLOW ve MT3DMS paket programlarının sonuçlarıyla karşılaştırılmaktadır. Yapılan karşılaştırmalarda sonuçların birbiriyle oldukça uyumlu olduğu görülmektedir. Yapılan uygulamalar sonucunda geliştirilen KBS-DOPRI5 sayısal şemasının, daha gerçekçi bir durumun temsil edildiği akım ve kirletici taşınımının birlikte incelendiği karmaşık parametre yapısı ve düzensiz geometriye sahip problemlerde başarılı bir biçimde kullanılabilceği görülmektedir.

Yeraltısuyu kirlетici kaynak karakteristiklerinin belirlenmesi ters problemi için geliştirilen S-O modelinin performansı iki farklı hipotetik akifer modeline uygulanarak test edilmektedir. Literatürden alınan ilk örnekte kaynak konumlarının ve aktif stres periyotlarının bilindiđi kabul edilerek sadece salınım geçmişlerinin bulunması amaçlanmaktadır. Bu örnek için elde edilen sonuçlar NH, OBHY ve SS gibi performans değerlendirme kriterleri aracılığıyla literatürdeki sonuçlarla karşılaştırılmaktadır. Yapılan karşılaştırmada geliştirilen modelin daha doğru sonuçlar ürettiđi gösterilmektedir. Ayrıca vekil modeller de başarılı bir şekilde bu probleme uygulanarak işlem süresi ciddi bir şekilde kısaltılmaktadır. İkinci örnekte ise düzensiz geometriye sahip farklı bir akifer modeli dikkate alınmıştır. Bu örnek iki farklı senaryo koşulunda incelenmektedir. Birinci senaryoda birinci örneđe benzer şekilde sadece kirlетici kaynak salınım geçmişleri bulunmaya çalışılmaktadır. İkinci senaryoda ise kaynak sayısı, aktif stres periyodu, kaynak konumları ve salınım geçmişleri gibi kaynak karakteristiklerine ait herhangi bir bilgi bulunmadığı kabul edilerek bu bilgilerin bulunması araştırılmaktadır. Birinci senaryo durumu için TM yaklaşımı ve DVM regresyon modelleri başarılı bir şekilde oluşturularak problemin çözümü elde edilmektedir. İkinci problemin akifer boyutları birinciye göre daha büyük olduđu için burada vekil modellerin işlem süresi açısından etkisinin çok daha fazla olduđu görülmektedir. İkinci senaryoda, kirlетici kaynak konumlarının bilinmediđi koşullarda oluşturulan verileri DVM regresyon modeli öğrenmede başarılı olamamıştır. Bu durumun DVM algoritmasından mı yoksa kaynak konumlarının süreksiz tamsayılardan oluşmasından mı meydana geldiđi bilinmemektedir. İleri ki çalışmalarda bunun sebepleri araştırılacaktır. Ancak TM yaklaşımı başarılı bir şekilde probleme uygulanarak kirlетici kaynak karakteristiklerinin tamamı hem hata içermeyen hem de hata içeren durumlar için elde edilmektedir. Hata içeren durumların kaynak konumlarının belirlenmesini etkilemediđi ancak salınım geçmişlerinin bulunmasını zorlaştırdığı görülmektedir. Elde edilen sonuçlar incelendiđinde gerçek koşullarda arama yapılacak kaynak sayısı ve aktif stres periyodu sayılarının büyük seçilmesi gerekmekte olup bu durumda bilgi işlem süresini oldukça arttırmaktadır. Bu amaçla vekil model kullanması zorunluluđu daha belirgin olmaktadır.

Önerilen ÇM, konumda uniform ađ ve zamanda ise adaptif ađ kullanılmaktadır. Özellikle keskin yapıya sahip kirlетici taşınım problemleri söz

konusu olduğunda, konumda non-uniform ağ veya adaptif ağ tercih edilmelidir. Kodda küçük bir değişiklik yapılarak, bu ağ yapıları kolayca oluşturulabilir. Önerilen yöntem ayrıca üç boyutlu kirletici taşınımı problemlerinin çözümünde de kullanılabilir ve çözüm algoritmasında herhangi bir değişikliğe neden olmaz. Ayrıca, çözüm algoritmasının basitliğinden dolayı birçok KDD içeren mühendislik problemlerinin çözümü için güvenle tercih edilebilir.

Yapılan bütün analizlerde hidrojeolojik verilerde, sınır şartlarında, hidrolik iletkenlik ve dispersivite parametrelerinde belirsizlik olmadığı kabul edilmektedir. Ancak gerçek koşullarda bu özelliklerin çoğunluğu kesin olarak bilinmemektedir. Bu sebeple önerilen modelin ileride belirsizlik koşullarını dikkate alacak şekilde geliştirilmesi amaçlanmaktadır. Ayrıca kirleticinin taşınım sürecinde reaksiyona maruz kalmadığı kabul edilmektedir. Bu sayede doğrusal süperpozisyon ilkesine dayanan konsantrasyon tepkisi matrisi yaklaşımı kullanılabilir. Eğer doğrusal olmayan bir reaksiyon gerçekleşiyorsa konsantrasyon tepkisi matrisi yaklaşımı kullanılamamaktadır. İleriki çalışmalarda önerilen modelin doğrusal olmayan reaksiyona maruz kalan kirleticilerin belirlenmesi problemine uygulanabilir hale getirilmesi için çalışılacaktır.

## 5. KAYNAKLAR

- Aral, B. M. M., Guan, J. and Maslia, M. L., "Identification of contaminant source location and release history in aquifers", *J. Hydrol. Eng.*, 6, 225–234, (2001).
- Atmadja, J. and Bagtzoglou, A. C., "State of the art report on mathematical methods for groundwater pollution source identification", *Environ. Forensics*, 2, 205–214, (2001).
- Ayvaz, M. T., "Application of Harmony Search algorithm to the solution of groundwater management models", *Adv. Water Resour.*, 32, 916–924, (2009).
- Ayvaz, M. T., "A linked simulation-optimization model for solving the unknown groundwater pollution source identification problems", *J. Contam. Hydrol.*, 117, 46–59, (2010).
- Ayvaz, M. T., "A hybrid simulation-optimization approach for solving the areal groundwater pollution source identification problems", *J. Hydrol.*, 538, 161–176, (2016).
- Ayvaz, M. T. and Elçi, A., "A groundwater management tool for solving the pumping cost minimization problem for the Tahtali watershed (Izmir-Turkey) using hybrid HS-Solver optimization algorithm", *J. Hydrol.*, 478, 63–76, (2013).
- Ayvaz, M. T. and Karahan, H., "A simulation/optimization model for the identification of unknown groundwater well locations and pumping rates", *J. Hydrol.*, 357, 76–92, (2008).
- Bagtzoglou, A. C. and Atmadja, J., "Mathematical Methods for Hydrologic Inversion: The Case of Pollution Source Identification", *Water Pollut.*, 5, 65–96, (2005).
- Bahar, E. and Gurarslan, G., "B-Spline Method of Lines for Simulation of Contaminant Transport in Groundwater", *Water*, 12, 1607, (2020).
- Bear, J. and Cheng, A. H.-D., "Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport", Heidelberg, London, New York: Springer Dordrecht, (2010).  
doi:10.1007/978-1-4020-6682-5



- Boddula, S. and Eldho, T. I., "A moving least squares based meshless local petrov-galerkin method for the simulation of contaminant transport in porous media", *Eng. Anal. Bound. Elem.*, 78, 8–19, (2017).
- Butcher, J. C., "Implicit Runge-Kutta Processes", *Math. Comput.*, 18, 50–64, (1964).
- Das, A. and Datta, B., "Application of optimisation techniques in groundwater quantity and quality management", *Sadhana - Acad. Proc. Eng. Sci.*, 26, 293–316, (2001).
- Datta, B., Chakrabarty, D. and Dhar, A., "Identification of unknown groundwater pollution sources using classical optimization with linked simulation", *J. Hydro-Environment Res.*, 5, 25–36, (2011).
- Dehghan, M. and Mohebbi, A., "High-order compact boundary value method for the solution of unsteady convection-diffusion problems", *Math. Comput. Simul.*, 79, 683–699, (2008).
- Dormand, J. R. and Prince, P. J., "A family of embedded Runge-Kutta formulae", *J. Comput. Appl. Math.*, 6, 19–26, (1980).
- Eldho, T. I. and Vasudeva Rao, B., "Simulation of two-dimensional contaminant transport with dual reciprocity boundary elements", *Eng. Anal. Bound. Elem.*, 20, 213–228, (1997).
- Fehlberg, E., "Low order classical Runge Kutta formulas with stepwise control and their application to some heat transfer problems [online]", <https://ntrs.nasa.gov/search.jsp?R=19690021375>, (1969).
- Gaur, S., Chahar, B. R. and Graillot, D., "Analytic elements method and particle swarm optimization based simulation-optimization model for groundwater management", *J. Hydrol.*, 402, 217–227, (2011).
- Gorelick, S. M., "Identifying sources of groundwater pollution: An optimization approach", *Water Resour. Res.*, 19, 779–790, (1983).
- Guan, J. and Aral, M. M., "Optimal remediation with well locations and pumping rates selected as continuous decision variables", *J. Hydrol.*, 221, 20–42, (1999).
- Guneshwor Singh, L., Eldho, T. I. and Vinod Kumar, A., "Coupled groundwater flow and contaminant transport simulation in a confined aquifer using

- meshfree radial point collocation method (RPCM)", *Eng. Anal. Bound. Elem.*, 66, 20–33, (2016).
- Guo, J. yuan, Lu, W. xi, Yang, Q. chun and Miao, T. sheng, "The application of 0–1 mixed integer nonlinear programming optimization model based on a surrogate model to identify the groundwater pollution source", *J. Contam. Hydrol.*, 220, 18–25, (2019).
- Gurarslan, G., "Accurate Simulation of Contaminant Transport Using High-Order Compact Finite Difference Schemes", *J. Appl. Math.*, 2014, 1–8, (2014).
- Gurarslan, G. and Karahan, H., "Solving inverse problems of groundwater-pollution-source identification using a differential evolution algorithm", *Hydrogeol. J.*, 23, 1109–1119, (2015).
- Hamdi, S., Schiesser, W. and Griffiths, G., "Method of lines", *Scholarpedia*, 2, 2859, (2007).
- Kalita, J. C., Dalal, D. C. and Dass, A. K., "A class of higher order compact schemes for the unsteady two-dimensional convection-diffusion equation with variable convection coefficients", *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 38, 1111–1131, (2002).
- Karaa, S. and Zhang, J., "High order ADI method for solving unsteady convection-diffusion problems", *J. Comput. Phys.*, 198, 1–9, (2004).
- Karahan, H., Iplikci, S., Yasar, M. and Gurarslan, G., "River flow estimation from upstream flow records using support vector machines", *J. Appl. Math.*, 2014, (2014).
- Li, Z. and Mao, X. zhong, "Global multiquadric collocation method for groundwater contaminant source identification", *Environ. Model. Softw.*, 26, 1611–1621, (2011).
- Mahar, P. S. and Datta, B., "Optimal identification of ground-water pollution sources and parameter estimation", *J. Water Resour. Plan. Manag.*, 127, 20–29, (2001).
- Mahinthakumar, G. and Sayeed, M., "Hybrid genetic algorithm - Local search methods for solving groundwater source identification inverse problems", *J. Water Resour. Plan. Manag.*, 131, 45–57, (2005).

- Mategaonkar, M. and Eldho, T. I., "Groundwater remediation optimization using a point collocation method and particle swarm optimization", *Environ. Model. Softw.*, 32, 37–48, (2012).
- McKinney, D. C. and Lin, M. -D, "Genetic algorithm solution of groundwater management models", *Water Resour. Res.*, 30, 1897–1906, (1994).
- Meenal, M. and Eldho, T. I., "Simulation of groundwater flow in unconfined aquifer using meshfree point collocation method", *Eng. Anal. Bound. Elem.*, 35, 700–707, (2011).
- Meenal, M. and Eldho, T. I., "Two-dimensional contaminant transport modeling using meshfree point collocation method (PCM)", *Eng. Anal. Bound. Elem.*, 36, 551–561, (2012).
- Mirghani, B. Y., Mahinthakumar, K. G., Tryby, M. E., Ranjithan, R. S. and Zechman, E. M., "A parallel evolutionary strategy based simulation-optimization approach for solving groundwater source identification problems", *Adv. Water Resour.*, 32, 1373–1385, (2009).
- Mirghani, B. Y., Zechman, E. M., Ranjithan, R. S. and Mahinthakumar, G., "Enhanced Simulation-Optimization Approach Using Surrogate Modeling for Solving Inverse Problems", *Environ. Forensics*, 13, 348–363, (2012).
- Mittal, R. C. and Arora, G., "Quintic B-spline collocation method for numerical solution of the Kuramoto-Sivashinsky equation", *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.*, 15, 2798–2808, (2010).
- Mittal, R. C. and Tripathi, A., "Numerical solutions of two-dimensional unsteady convection–diffusion problems using modified bi-cubic B-spline finite elements", *Int. J. Comput. Math.*, 94, 1–21, (2017).
- Noye, B. and Tan, H., "Finite difference methods for solving the two-dimensional advection–diffusion equation", *Int. J. Numer. Methods Fluids*, 9, 75–98, (1989).
- Perko, J., "A single-relaxation-time lattice Boltzmann model for anisotropic advection-diffusion equation based on the diffusion velocity flux formulation", *Comput. Geosci.*, 22, 1423–1432, (2018).
- Rao, S. V. N., "A computationally efficient technique for source identification

- problems in three-dimensional aquifer systems using neural networks and simulated annealing", *Environ. Forensics*, 7, 233–240, (2006).
- Rohila, R. and Mittal, R. C., "An efficient Bi-cubic B-spline ADI method for numerical solutions of two-dimensional unsteady advection diffusion equations", *Int. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow*, 28, 2620–2649, (2018).
- Shampine, L. F., "Some practical Runge-Kutta formulas", *Math. Comput.*, (1986). doi:10.1090/s0025-5718-1986-0815836-3
- Shukla, H. S. and Tamsir, M., "An exponential cubic B-spline algorithm for multi-dimensional convection-diffusion equations", *Alexandria Eng. J.*, 57, 1999–2006, (2018).
- Singh, R. M. and Datta, B., "Identification of groundwater pollution sources Using GA-based linked simulation optimization model", *J. Hydrol. Eng.*, 11, 101–109, (2006).
- Singh, R. M., Datta, B. and Jain, A., "Identification of unknown groundwater pollution sources using artificial neural networks", *J. Water Resour. Plan. Manag.*, 130, 506–514, (2004).
- Skaggs, T. H. and Kabala, Z. J., "Recovering the release history of a groundwater contaminant", *Water Resour. Res.*, 30, 71–79, (1994).
- Storn, R. and Price, K., "Differential Evolution – A Simple and Efficient Heuristic for Global Optimization over Continuous Spaces", *J. Glob. Optim.*, 11, 341–359, (1997).
- Sun, A. Y., Painter, S. L. and Wittmeyer, G. W., "A robust approach for iterative contaminant source location and release history recovery", *J. Contam. Hydrol.*, 88, 181–196, (2006).
- Thomas, A., Majumdar, P., Eldho, T. I. and Rastogi, A. K., "Simulation optimization model for aquifer parameter estimation using coupled meshfree point collocation method and cat swarm optimization", *Eng. Anal. Bound. Elem.*, 91, 60–72, (2018).
- Tian, Z. F. and Ge, Y. B., "A fourth-order compact ADI method for solving two-dimensional unsteady convection-diffusion problems", *J. Comput. Appl. Math.*, 198, 268–286, (2007).

- Vesselinov, V. V., Alexandrov, B. S. and O'Malley, D., "Contaminant source identification using semi-supervised machine learning", *J. Contam. Hydrol.*, 212, 134–142, (2018).
- Wagner, B. J., "Simultaneous parameter estimation and contaminant source characterization for coupled groundwater flow and contaminant transport modelling", *J. Hydrol.*, 135, 275–303, (1992).
- Wexler, E. J., "Analytical solutions for one-, two-, and three-dimensional solute transport in ground-water systems with uniform flow", United State Government Printing Office. U.S.A., (1992).
- Xing, Z. *et al.*, "Identifying the release history of a groundwater contaminant source based on an ensemble surrogate model", *J. Hydrol.*, 572, 501–516, (2019).
- Zhao, Y., Lu, W. and An, Y., "Surrogate Model-Based Simulation-Optimization Approach for Groundwater Source Identification Problems", *Environ. Forensics*, 16, 296–303, (2015).
- Zhao, Y., Lu, W. and Xiao, C., "A Kriging surrogate model coupled in simulation-optimization approach for identifying release history of groundwater sources", *J. Contam. Hydrol.*, 185–186, 51–60, (2016).

# **EKLER**

## 6. EKLER

### EK A

$\delta_{j,i}(t)$  ve  $\gamma_{j,i}(t)$  parametre matrislerinin bilinen konsantrasyon ve KBS fonksiyonları ile hesaplanması aşağıdaki gibidir. Denklem (A1-A3) ve (A4-A6) sırasıyla  $x$  ve  $y$  yönleri için yaklaşık eşitlikleri vermektedir.

$$\begin{aligned}\tilde{C}(x_i, y_j, t) &= \delta_{j,i+2} + 26\delta_{j,i+1} + 66\delta_{j,i} + 26\delta_{j,i-1} + \delta_{j,i-2} \quad j = 0, 1, \dots, M \quad (A1) \\ \Delta x \tilde{C}'(x_i, y_j, t) &= 5(\delta_{j,i+2} + 10\delta_{j,i+1} - 10\delta_{j,i-1} - \delta_{j,i-2}) \quad j = 0, 1, \dots, M \quad (A2) \\ \Delta x^2 \tilde{C}''(x_i, y_j, t) &= 20(\delta_{j,i+2} + 2\delta_{j,i+1} - 6\delta_{j,i} + 2\delta_{j,i-1} + \delta_{j,i-2}) \quad j = 0, 1, \dots, M \quad (A3)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{C}(x_i, y_j, t) &= \gamma_{j+2,i} + 26\gamma_{j+1,i} + 66\gamma_{j,i} + 26\gamma_{j-1,i} + \gamma_{j-2,i} \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (A4) \\ \Delta y \tilde{C}'(x_i, y_j, t) &= 5(\gamma_{j+2,i} + 10\gamma_{j+1,i} - 10\gamma_{j-1,i} - \gamma_{j-2,i}) \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (A5) \\ \Delta y^2 \tilde{C}''(x_i, y_j, t) &= 20(\gamma_{j+2,i} + 2\gamma_{j+1,i} - 6\gamma_{j,i} + 2\gamma_{j-1,i} + \gamma_{j-2,i}) \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (A6)\end{aligned}$$

$\tilde{C}(x_i, y_j, t)$  her zaman adımında başlangıç konsantrasyon değerlerine eşit olmaktadır.  $\delta_{j,i}(t)$  ve  $\gamma_{j,i}(t)$  parametre matrisleri, her satır için  $N + 5$  bilinmeyen içeren  $N + 1$  denklem veren ve her sütun için  $M + 5$  bilinmeyen içeren  $M + 1$  denklem veren Denklem (A1) ve Denklem (A4)'teki ilişkiler aracılığıyla belirlenmektedir. Bilinmeyenler, her satır vektörü için  $\delta_{j,-2}, \delta_{j,-1}, \delta_{j,N+1}, \delta_{j,N+2}$  ve her sütun vektörü için  $\gamma_{-2,i}, \gamma_{-1,i}, \gamma_{M+1,i}, \gamma_{M+2,i}$  'dir. Bu bilinmeyenleri bilinen parametreler cinsinden ifade etmek için sınır düğümlerindeki birinci ve ikinci mertebeden türevler kullanılmaktadır. Bu türevler, çözüm alanındaki sınır şartlarına bağlı olarak ya sınır şartlarından bilinmekte ya da yaklaşık olarak SFM ile hesaplanmaktadır.

$$C'(x_0, y_j, t) = f_{j,1}^v \quad j = 0, 1, \dots, M \quad (A7)$$

$$C''(x_0, y_j, t) = F_{j,1}^v \quad j = 0, 1, \dots, M \quad (A8)$$

$$C'(x_N, y_j, t) = f_{j,2}^v \quad j = 0, 1, \dots, M \quad (A9)$$

$$C''(x_N, y_j, t) = F_{j,2}^v \quad j = 0, 1, \dots, M \quad (A10)$$

$$C'(x_i, y_0, t) = g_{1,i}^h \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (A11)$$

$$C''(x_i, y_0, t) = G_{1,i}^h \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (A12)$$

$$C'(x_i, y_M, t) = g_{2,i}^h \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (A13)$$

$$C''(x_i, y_M, t) = G_{2,i}^h \quad i = 0, 1, \dots, N \quad (A14)$$

Burada  $f^v, F^v, g^h, G^h$  sınır şartlarından bilinen veya sınır noktalarında SFM ile hesaplanmış birinci ve ikinci mertebeden türevlerin sayısal değerlerini içeren sınır matrisleridir. Denklem (A2-A3) ve Denklem (A7-A10) kullanılarak aşağıdaki ilişkiler yazılabilmektedir.

$$f_{j,1}^v = (5/\Delta x)(\delta_{j,2} + 10\delta_{j,1} - 10\delta_{j,-1} - \delta_{j,-2}) \quad (A15)$$

$$f_{j,2}^v = (5/\Delta x)(\delta_{j,N+2} + 10\delta_{j,N+1} - 10\delta_{j,N-1} - \delta_{j,N-2}) \quad (A16)$$

$$F_{j,1}^v = (20/\Delta x^2)(\delta_{j,2} + 2\delta_{j,1} - 6\delta_{j,0} + 2\delta_{j,-1} + \delta_{j,-2}) \quad (A17)$$

$$F_{j,2}^v = (20/\Delta x^2)(\delta_{j,N+2} + 2\delta_{j,N+1} - 6\delta_{j,N} + 2\delta_{j,N-1} + \delta_{j,N-2}) \quad (A18)$$

Denklem (A15-A18) kullanılarak bilinmeyen  $\delta_{j,-2}, \delta_{j,-1}, \delta_{j,N+1}, \delta_{j,N+2}$  parametreleri bilinen parametreler cinsinden hesaplanabilir. Daha sonra  $\delta_{j,i}(t)$  parametre matrisi aşağıdaki sistemin  $j = 0, 1, \dots, M$  için çözülmesiyle elde edilmektedir.

$$\begin{bmatrix} 54 & 60 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 101/4 & 135/2 & 105/4 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 26 & 66 & 26 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 26 & 66 & 26 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 26 & 66 & 26 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 26 & 66 & 26 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 105/4 & 135/2 & 101/4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 60 & 54 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \delta_{j,0}(t) \\ \delta_{j,1}(t) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \delta_{j,N-1}(t) \\ \delta_{j,N}(t) \end{bmatrix} \quad (A19)$$

$$= \begin{bmatrix} C(x_0, y_j, t) \\ C(x_1, y_j, t) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ C(x_{N-1}, y_j, t) \\ C(x_N, y_j, t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (3/5)f_{j,1}^v \Delta x + (1/10)F_{j,1}^v \Delta x^2 \\ (1/40)f_{j,1}^v \Delta x + (1/160)F_{j,1}^v \Delta x^2 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ -(1/40)f_{j,2}^v \Delta x + (1/160)F_{j,2}^v \Delta x^2 \\ -(3/5)f_{j,2}^v \Delta x + (1/10)F_{j,2}^v \Delta x^2 \end{bmatrix}$$

Denklem (A5-A6) ve Denklem (A11-A14) kullanılarak aşağıdaki ilişkiler yazılabilmektedir.

$$g_{1,i}^h = (5/\Delta y)(\gamma_{2,i} + 10\gamma_{1,i} - 10\gamma_{-1,i} - \gamma_{-2,i}) \quad (A20)$$

$$g_{2,i}^h = (5/\Delta y)(\gamma_{M+2,i} + 10\gamma_{M+1,i} - 10\gamma_{M-1,i} - \gamma_{M-2,i}) \quad (A21)$$

$$G_{1,i}^h = (20/\Delta y^2)(\gamma_{2,i} + 2\gamma_{1,i} - 6\gamma_{0,i} + 2\gamma_{-1,i} + \gamma_{-2,i}) \quad (A22)$$

$$G_{2,i}^h = (20/\Delta y^2)(\gamma_{M+2,i} + 2\gamma_{M+1,i} - 6\gamma_{M,i} + 2\gamma_{M-1,i} + \gamma_{M-2,i}) \quad (A23)$$



Denklem (A20-A23)'te verilen eşitlikleri kullanarak bilinmeyen  $\gamma_{-2,i}, \gamma_{-1,i}, \gamma_{M+1,i}, \gamma_{M+2,i}$  parametreleri bilinen parametreler cinsinden belirlenebilmektedir. Bu ilişkileri kullanarak oluşturulan aşağıdaki matris sisteminin  $i = 0, 1, \dots, N$  için çözülmesiyle  $\gamma_{j,i}(t)$  matrisi belirlenmektedir.

$$\begin{bmatrix} 54 & 60 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 101/4 & 135/2 & 105/4 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 26 & 66 & 26 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 26 & 66 & 26 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 26 & 66 & 26 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 26 & 66 & 26 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 105/4 & 135/2 & 101/4 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 60 & 54 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \gamma_{0,i}(t) \\ \gamma_{1,i}(t) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ \gamma_{M-1,i}(t) \\ \gamma_{M,i}(t) \end{bmatrix} \quad (A24)$$

$$= \begin{bmatrix} C(x_i, y_0, t) \\ C(x_i, y_1, t) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ C(x_i, y_{M-1}, t) \\ C(x_i, y_M, t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} (3/5)g_{1,i}^h \Delta y + (1/10)G_{1,i}^h \Delta y^2 \\ (1/40)g_{1,i}^h \Delta y + (1/160)G_{1,i}^h \Delta y^2 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ -(1/40)g_{2,i}^h \Delta y + (1/160)G_{2,i}^h \Delta y^2 \\ -(3/5)g_{2,i}^h \Delta y + (1/10)G_{2,i}^h \Delta y^2 \end{bmatrix}$$

Sonuç olarak, artık parametre matrisleri bilindiğinden her düğüm noktasındaki birinci ve ikinci mertebeden türev değerleri  $x$  ve  $y$  yönleri için Denklem (A2-A3) ve Denklem (A5-A6) kullanılarak hesaplanmaktadır.