

Exploring Uncertainty Caused by Model Complexity in Column Experiments from Local and Global Perspectives

S. Samani^{1*} and A. Asghari Moghadam²

Abstract

Considering the complexity of contaminant transport models in column experiments, can aid selection of an optimal model and best estimation of model parameters, avoid over parameterization, model uncertainty and incorrect conclusions. We consider two experiments with high flow velocity (q36.7) and low flow velocity (q2.71) with four models of different levels of complexity, including the equilibrium and non-equilibrium convection dispersion models. Consists of the convection-dispersion models CDE1 (The simplest model with one parameter) and CDE2, and mobile-immobile models MIM1 and MIM2 (the most complex model with four parameters). Through analysis of column experiments, we can view the four approaches: 1- ranking the models based on the RMSE, 2- Evaluate model probability through model selection criteria (AIC, AICc, BIC, and KIC statistics). 3- Evaluate model probability using the arithmetic mean estimated using the Monte Carlo method, and 4- Evaluate model probability using the harmonic mean estimated using the Markov chain Monte Carlo method as a gradual expansion from the local to the global scale of model parameters. The final result is showing that, evaluation of model probability change from local to global scale of model parameters. In a general conclusion, degree of complexity for high flow case to the extent MIM1 and for low flow case to the CDE2 model is enough to avoid uncertainty from over parameterization.

Keywords: Model complexity, Model uncertainty, Column experiment, Contaminant transport model, Local and global perspectives.

Received: August 28, 2016

Accepted: November 18, 2016

بررسی عدم قطعیت ناشی از پیچیدگی مدل‌های ستون تجربی انتقال آلاینده از دیدگاه محلی و منطقه‌ای

سعیده سامانی^{۱*} و اصغر اصغری مقدم^۲

چکیده

شناسایی پیچیدگی در مدل‌های جایگزین ستون تجربی انتقال آلاینده منجر به انتخاب مدل بهینه و بهترین برآورد از پارامتر می‌گردد و از عدم قطعیت ناشی از پیچیدگی و نتایج غیر صحیح جلوگیری می‌نماید. در این مطالعه جهت مدل‌سازی عدم قطعیت ناشی از پیچیدگی در مدل‌های ستون تجربی چهار مدل مفهومی مختلف با درجه‌های پیچیدگی متفاوت شامل: مدل‌های تعادلی کانوکشن - دیسپژن، CDE1 (ساده‌ترین مدل با یک پارامتر) و CDE2، مدل‌های غیر تعادلی متحرک- غیر متحرک، MIM1 و MIM2 (پیچیده‌ترین مدل با چهار پارامتر)، با دو وضعیت سرعت جریان بالا (q36.7) و سرعت جریان پایین (q2.71) از منابع استفاده گردیده است. آنالیز مدل‌های جایگزین ستون تجربی از طریق چهار روش: ۱- امتیازدهی به مدل‌ها بر اساس RMSE، ۲- ارزیابی احتمال مدل‌های جایگزین از طریق روش معیارهای انتخاب مدل (AIC, AICc, BIC, KIC)، ۳- ارزیابی احتمالات مدل از طریق میانگین حسابی یا AME با روش مونت کارلو و ۴- روش برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین هارمونیک یا HME از طریق زنجیره مارکوف مونت کارلو (MCMC)، دارای یک توسعه تدریجی از دیدگاه محلی به سمت دیدگاه منطقه‌ای می‌باشد. نتایج نهایی در ارزیابی مدل‌ها نشان می‌دهد که امتیازبندی مدل‌ها در روش‌های محلی با روش‌های منطقه‌ای متفاوت هستند. در یک نتیجه‌گیری کلی پیچیدگی در وضعیت سرعت جریان بالا تا حد مدل MIM1 و در وضعیت سرعت جریان پایین تا حد مدل CDE2 کافی می‌باشد و پیچیده کردن مدل‌های انتقال بیشتر از این حد منجر به افزایش عدم قطعیت مدل می‌گردد.

کلمات کلیدی: پیچیدگی مدل، عدم قطعیت مدل، ستون تجربی، مدل انتقال آلاینده، دیدگاه محلی و منطقه‌ای.

تاریخ دریافت مقاله: ۷ شهریور ۱۳۹۵

تاریخ پذیرش مقاله: ۲۸ آبان ۱۳۹۵

1- Ph.D Student of Hydrogeology, Geology Department, University of Tabriz, Tabriz, Iran. Email: samani@tabrizu.ac.ir

2- Ph.D in Hydrogeology, Professor, Geology Department, University of Tabriz, Tabriz, Iran

*- Corresponding Author

۱- دانشجوی دکتری هیدروژئولوژی، گروه علوم زمین دانشگاه تبریز، تبریز، ایران

۲- دکتری هیدروژئولوژی، استاد گروه علوم زمین دانشگاه تبریز، تبریز، ایران

*- نویسنده مسئول

بحث و مناظره (Discussion) در مورد این مقاله تا پایان پاییز ۱۳۹۶ امکانپذیر است.

نخواهد داد و منجر به ارائه نتایج گمراه کننده می‌گردد (Oreskes, 2000; Simmons, 2012; Hunt et al., 2007). Hill (2006) اعلام نمودند که مدل پیچیده برازش بهتری بین داده‌های مشاهداتی و محاسباتی نسبت به مدل ساده ارائه خواهد داد ولی نسبت به مدل ساده خطای پیش‌بینی بالاتری خواهد داشت. Maslia et al. (2012) مخالفت خود را با مبحث مدل صرفه جو اعلام نمودند. ایشان بیان نمودند که انتخاب مدل ساده یا پیچیده در یک منطقه باید بر اساس اهداف مطالعه نه بر اساس میزان داده‌های موجود صورت گیرد. Gomez-Hernandez (2006) نیز با مدل ساده مخالف می‌باشد به طوری که ایشان بیان نمودند که مدل پیچیده برای انتقال پیچیدگی سیستم واقعی مورد نیاز می‌باشد. Vand der Engelhardt et al. (2014) هفت مدل مفهومی با تعداد پارامتر بین صفر تا چهل را کالبره نمودند. از روش‌های انتخاب معیار برای وزن‌دهی به مدل‌ها استفاده گردید. همه معیارها مدل یک به عنوان ساده‌ترین مدل و مدل ۷ را به عنوان پیچیده‌ترین مدل رد کردند. AIC و AICC مدل ۴ با پانزده پارامتر را انتخاب نمودند. BIC مدل ۲ را با پنج پارامتر انتخاب نمود و KIC مدل ۳ را با ده پارامتر انتخاب نمود. Orth et al. (2015) سه مدل هیدرولوژی با درجه‌های مختلف پیچیدگی را مقایسه نمودند. در این مقایسه ایشان متوجه شدند که افزایش پیچیدگی منجر به بهبود عملکرد مدل نمی‌گردد. در ضمن ساده‌ترین مدل نیز در این مطالعه برآورد خوبی از پارامتر ارائه نداده است. Tsai et al. (2003) از دو روش محلی (بررسی چگونگی برازش) و روش منطقه‌ای (ژنتیک الگوریتم و شبه نیوتن) برای شناسایی پارامتر در مدل‌سازی آب زیرزمینی استفاده نمودند. ایشان به این نتیجه رسیدند که استفاده از این دو روش احتمال رسیدن به بهترین پارامتر را افزایش داد.

در این تحقیق برای بررسی پیچیدگی مدل از داده‌های ستون تجربی (Anamosa et al., 1990) و Tang et al. (2009) استفاده گردیده است. خاک تهیه شده در ستون دارای یک اسکلت رسی، oxidic isohyperthermic و Typic Gibbssiorthox می‌باشد. این خاک از منطقه‌ای در ۸ کیلومتری دانشگاه Dschang در استان غربی Cameroon تهیه گردیده است. در این مطالعه دو ستون خاک با فاصله دو متر در صحرا تهیه شد. ستون‌ها دارای شرایط غلظتی برابر از آب، گراول و مواد دانه ریز بودند. برای اندازه‌گیری منحنی پیشرفت (BTC) ستون‌های تهیه شده در ابتدا از محلول فاقد گاز ۰/۰۱ مول کلرید کلسیم اشباع گردید و سپس از طریق یک سری لوله‌هایی در تماس با آب تریتیوم‌دار قرار گرفتند تا جایگزین محلول

منابع متفاوتی برای عدم قطعیت در مدل‌های هیدرولوژی و آب زیرزمینی به وسیله مؤلفان مختلف ارائه شده است. Yen et al. (1986) عدم قطعیت مدل را به پنج قسمت تقسیم کرده‌اند: ۱- عدم قطعیت طبیعی که از بی‌نظمی ذاتی فرایندهای طبیعی حاصل می‌شود. ۲- عدم قطعیت مدل ناشی از مدل ناقص که قادر به ارائه فرایندهای فیزیکی واقعی نیست. ۳- عدم قطعیت پارامتر مدل. ۴- عدم قطعیت ناشی از خطاهای مشاهداتی. ۵- عدم قطعیت اجرایی ناشی از فاکتورهای بشری. در کل مطابق با فرایند منطقی مدل‌سازی منشأ عدم قطعیت از سه منبع می‌باشد که شامل: ۱- عدم قطعیت پارامتر. ۲- عدم قطعیت چهارچوب مدل مفهومی. ۳- عدم قطعیت ناشی از داده‌های مشاهداتی. به علاوه برخی از مؤلفان عدم قطعیت سناریو و عدم قطعیت ناشی از پیچیدگی مدل^۱ را نیز به عنوان چهارمین و پنجمین منبع عدم قطعیت در نظر گرفتند (Rojas et al., 2010a,b; Ye et al., 2010; Hill and Tiedman, 2007).

افزایش پارامترهای مدل^۲ عاملی است که منجر به پیچیدگی مدل و در نهایت عدم قطعیت در مدل می‌شود (Hill and Tiedman, 2007). دلیل این امر این است که داده‌های مشاهداتی در حالتی که پارامترهای بیشتری برای مدل تعریف می‌گردد باید بین تعداد بیشتری پارامتر توزیع گردد. یک راه کاهش این عدم قطعیت انتخاب مدلی با تعداد پارامترهای بهینه و با عملکرد مناسب می‌باشد که اصطلاحاً به این مدل، صرفه‌جو^۳ گفته می‌شود. در کل یک مدل را باید تا جایی که امکان دارد ساده تهیه کرد ولی باید به این نکته نیز توجه نمود که ساده‌سازی و صرفه‌جویی بیش از حد در مدل‌سازی از کارایی مدل خواهد کاست (Hunt et al., 2007). یکی از مهمترین مسائل در فرایند مدل‌سازی و کالبراسیون مدل پیدا کردن تعادل بین عملکرد مدل و بهترین درجه پیچیدگی می‌باشد (Schöniger et al., 2013; Elsheikh et al., 2013). مبحث پیچیدگی مدل در همه علوم قابل بحث می‌باشد. در علوم زمین مباحث زیادی در رابطه با مزایا و معایب استفاده از مدل‌های مفهومی با درجه پیچیدگی مختلف مطرح شده است. در این مباحث همه محققان با این نظر که یک مدل پیچیده درصد احتمال خطای بالایی خواهد داشت و در نهایت منجر به نتیجه‌گیری غیرصحیح خواهد شد، موافقتند. همچنین فهم کامل یک مدل پیچیده نسبت به مدل ساده و تفسیر نتایج این مدل سخت‌تر خواهد بود. در ضمن اینکه یک مدل بسیار ساده نیز توصیف جامعی از سیستم ارائه

کلرید کلسیم فاقد تریتیوم گردد. سرعت ورود محلول به ستون از کم به زیاد تا حدود ۴۰ برابر افزایش داده شد. از ستون اول جریان‌هایی با سرعت ۱۱۱ (سرعت بالا) و ۲/۷۱ (سرعت پایین) سانتی‌متر در روز و از ستون دوم جریان‌هایی معادل ۳۶/۷ (سرعت بالا) و ۲/۶۹ (سرعت پایین) عبور داده شد. در هر وضعیت سرعت جریان بالا و پایین در ۳۰ دوره زمانی غلظت آب تریتیوم‌دار در قسمت خروجی ستون اندازه‌گیری شده است. در وضعیت سرعت جریان بالا ۱۱۱ این زمان بین ۰/۱ تا ۴/۶ روز، وضعیت ۳۶/۷ بین ۰/۱ تا ۵/۲ و در دو وضعیت سرعت جریان پایین بین ۰/۱ تا ۶/۵ روز طول کشیده است (Anamosa et al., 1990).

در این مطالعه جهت بررسی عدم قطعیت ناشی از پیچیدگی مدل از دو دیدگاه محلی و منطقه‌ای از چهار مدل با درجه‌های مختلف پیچیدگی در وضعیت سرعت جریان بالا ۳۶.۷ و سرعت جریان پایین ۲.۷۱ شامل مدل‌های تعادلی و غیر تعادلی انتقال استفاده گردیده است. ۱- ساده‌ترین آن‌ها مدل تعادلی کانوکشن - دیسپرزین شماره یک (مدل CDE1) می‌باشد که در این مدل فقط یک پارامتر محاسبه می‌گردد. ۲- مدل تعادلی کانوکشن-دیسپرزین شماره دو (CDE2) که در آن دو پارامتر محاسبه می‌شود. ۳- مدل غیر تعادلی متحرک - غیر متحرک شماره یک (MIM1) که در آن سه پارامتر محاسبه می‌شود. ۴- پیچیده‌ترین مدل، مدل غیر تعادلی متحرک - غیر متحرک شماره دو (MIM2): که در آن چهار پارامتر کالیبره می‌گردد. از کد CXTFIT تهیه شده توسط Tang و همکاران برای کالیبره کردن مدل‌ها در مقابل منحنی پیشرفت اندازه‌گیری شده (BTC) در هر دو ستون وضعیت سرعت جریان بالا و پایین استفاده گردید.

در بررسی پیچیدگی مدل بعد از تعیین مدل‌هایی جایگزین با درجه پیچیدگی متفاوت، نیاز به استفاده از یک سری روش‌هایی جهت تعیین قطعیت مدل‌ها می‌باشد. برخی از این روش‌ها در بررسی قطعیت مدل فقط به بررسی چگونگی برازش سطح آب مشاهداتی و محاسباتی می‌پردازند. ساختار درونی و قطعیت داده‌های مدل در این روش‌ها فقط در صورتی که روی چگونگی برازش موثر باشد در نظر گرفته می‌شود به همین دلیل در این مطالعه این روش‌ها را در دسته محلی طبقه‌بندی نموده‌ایم. در واقع این روش‌ها با یک دیدگاه سطحی و محلی به بررسی قطعیت مدل می‌پردازند. یک سری روش‌ها در تعیین قطعیت مدل‌های جایگزین نه تنها به چگونگی برازش سطح آب مشاهداتی و محاسباتی می‌پردازند، بلکه قطعیت داده و ساختار مدل نیز در این‌ها جهت انتخاب مدل در نظر گرفته

می‌شود. در این مطالعه این روش‌ها را در دسته منطقه‌ای طبقه‌بندی نموده‌ایم. در واقع این روش‌ها با یک دیدگاه کامل و منطقه‌ای به بررسی قطعیت مدل می‌پردازند. در مطالعه آنالیز مدل‌های جایگزین ستون تجربی ارزیابی عدم قطعیت ناشی از پیچیدگی مدل برای اولین بار با دو طبقه‌بندی دیدگاه محلی و منطقه‌ای از طریق روش‌های زیر مورد بررسی قرار گرفته است و قابلیت این روش‌ها در تعیین پیچیدگی مدل مورد بحث قرار گرفته است:

روش‌های محلی: بررسی محلی پیچیدگی مدل‌های جایگزین با دو معیار RMSE و SSR

روش‌های منطقه‌ای: ۱- ارزیابی احتمال مدل‌های جایگزین از طریق روش معیارهای انتخاب مدل (AIC، AICC، BIC و KIC). ۲- ارزیابی احتمالات مدل از طریق میانگین حسابی یا AME. که این روش خود شامل دو زیر مجموعه بررسی پیچیدگی مدل می‌باشد: الف: تعیین پیچیدگی مدل از طریق اندازه‌گیری فضای خروجی مدل در روش (AME). ب: تعیین پیچیدگی مدل از طریق اندازه‌گیری رابطه بین خروجی مدل و پارامتر. ۳- روش برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین هارمونیک یا HME. این روش‌ها از دیدگاه محلی به سمت دیدگاه منطقه‌ای یک تکامل تدریجی را نشان می‌دهند. در این بررسی بر خلاف مطالعات قبلی، فقط به نتایج تقریبی احتمالات با روش‌های معیارهای انتخاب مدل تکیه نشده است و بررسی پیچیدگی مدل با هدف مدل‌سازی عدم قطعیت با روش‌های دقیق برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین حسابی و هارمونیک نیز صورت گرفته است.

۲- مواد و روش‌ها

۲-۱- بررسی معادلات کانوکشن دیسپرزین (CDE)

معادله انتقال کانوکشن-دیسپرزین به صورت زیر می‌باشد (Parker and van Genuchten, 1984; Toride et al., 1995):

$$R \left(\frac{\partial C}{\partial T} \right) = \left(\frac{1}{P} \right) \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) - \left(\frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (1)$$

$$T = \frac{v}{L} = qt/\theta L \quad (2)$$

R: فاکتور تأخیر، C: غلظت نسبی محلول، T: دوره تزریق، P: عدد پکلت، x: فاصله نسبی، p: چگالی بخش جامد بر حسب گرم بر سانتی‌متر مکعب، v: سرعت متوسط آب در منافذ بر حسب سانتی‌متر بر روز، q: سرعت دارسی بر حسب سانتی‌متر بر روز، t: زمان بر حسب روز، L: طول ستون بر حسب سانتی‌متر، C_e: غلظت خروجی و C₀: غلظت ورودی.

۳-۲- روش‌های استفاده شده جهت محاسبه احتمالات مدل‌های جایگزین

۳-۲-۱- روش میانگین‌گیری بیزین^۴

تکنیک بیزین به وسیله Kass and Raftery (1995) ارائه شده است. این روش بر اساس فرمول بیزین برای به دست آوردن احتمال پسین مدل‌های مفهومی مختلف می‌باشد. روش میانگین‌گیری بیزین برای برآورد توزیع احتمال پسین مدل‌های مفهومی مختلف می‌باشد. احتمالات پسین مدل، مقادیر عددی غیر منفی هستند که مجموع آنها برابر با یک می‌باشد و برآورد آن نیاز به احتمال پیشین مدل دارد. احتمال پیشین مدل با استفاده از دانش متخصص تعیین می‌شود (Ye et al., 2008a,b) و یا اینکه می‌تواند برای همه مدل‌ها برابر در نظر گرفته شود. در این مطالعه احتمال پیشین مدل‌های مفهومی برابر در نظر گرفته شده است. در این روش مدل‌هایی با عملکرد پیش‌بینی بهتر، وزن‌های بالاتری را دریافت می‌کنند. در چهارچوب روش بیزین اگر یک مجموعه مدل جایگزین K وجود داشته باشد، احتمال پسین مدل M_k از طریق فرمول زیر محاسبه می‌شود:

$$p(M_k|D) = \frac{p(D|M_k) p(M_k)}{\sum_{i=1}^K p(D|M_i) p(M_i)} \quad (5)$$

احتمال پیشین مدل M_k : $p(M_k)$; تشابه حاشیه‌ای یا ادغام شده مدل M_k : θ_k ; مجموعه پارامتر همراه با مدل K .

برای محاسبه مقدار تشابه ادغام شده مدل مفهومی، روش BMA می‌تواند به دو طبقه بندی وسیع تقسیم شود. ۱- روش میانگین‌گیری حداکثر تشابهات بیزین^۵ از طریق روش‌های انتخاب معیار. ۲- روش مونت کارلو بر اساس روش میانگین‌گیری بیزین (Kass and Raftery, 1995); از جمله روش‌هایی موجود در برآورد مونت کارلو می‌توان به روش برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین حسابی^۶ و برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین هارمونیک^۷ نام برد (Liu et al., 2016).

۳-۲-۲- روش میانگین‌گیری حداکثر تشابهات بیزین از طریق روش‌های انتخاب معیار

این روش توسط Neuman (2003) پیشنهاد شده است. این شیوه برآورد لاپلاس بر اساس تقریب گوسین در حدود بهترین برآورد پارامتر می‌باشد. احتمال پسین مدل $p(M_k|D)$ در این روش از طریق زیر محاسبه می‌گردد (Ye et al., 2004):

در این تحقیق دو مدل تعادلی کانوکشن - دیسپرژن با مشخصات زیر تهیه گردیده است. ۱- مدل تعادلی کانوکشن-دیسپرژن شماره یک (مدل CDE1) که در این مدل فقط پارامتر پراکندگی محاسبه می‌شود. ۲- مدل تعادلی کانوکشن - دیسپرژن شماره دو (CDE2) و در آن دو پارامتر پراکندگی و تخلخل محاسبه می‌شود.

۲-۲- بررسی معادلات مدل غیر تعادلی متحرک- غیر متحرک (MIM)

مدل غیر تعادلی متحرک- غیر متحرک توسط Van Genuchten and Wierenga (1976) توسعه یافت. این مدل در خاک دو ناحیه را فرض می‌کند به طوری که فرایند کانوکشن در بخش متحرک و فرایند دیفیوژن در ناحیه غیر متحرک صورت می‌گیرد. این مدل برای توصیف خاک‌های دارای ساختار درز و شکاف مؤثر می‌باشد. معادلات این مدل در زیر آمده است (Toride et al., 1995).

$$\beta R \left(\frac{\delta C_m}{\delta T} \right) + \frac{(1-\beta)R\delta C_{im}}{\delta T} = \left(\frac{1}{P} \right) \left(\frac{\delta C_m}{\delta x^2} \right) - \delta C_m / \delta x \quad (3)$$

$$\beta = \frac{\theta_m + pfK_d}{\theta + pK_d} \quad (4)$$

C_m : غلظت نسبی در بخش متحرک، C_{im} : غلظت نسبی در بخش غیر متحرک، θ_m : تخلخل بخش متحرک، f : جذب در ناحیه متحرک، V_m : سرعت آب در ناحیه متحرک، β : کسری از بخش متحرک آب، P_m : عدد پکلت در بخش متحرک.

در این تحقیق دو مدل غیرتعادلی متحرک- غیر متحرک برای هر دو وضعیت سرعت جریان بالا و پایین با مشخصات زیر تهیه گردیده است. ۱- مدل غیرتعادلی متحرک - غیرمتحرک شماره یک (MIM1) که در آن سه پارامتر پراکندگی، بخش متحرک آب و ضریب انتقال جرم محاسبه می‌شود. ۲- مدل غیرتعادلی متحرک- غیر متحرک شماره دو (MIM2) که در آن چهار پارامتر پراکندگی، کسری از بخش متحرک آب، ضریب انتقال جرم و زمان تزریق محاسبه می‌شود.

حل تحلیلی برای هر دو معادله CDE و MIM توسط Toride et al. (1995) ارائه گردیده است و در VBA به صورت کد در آمده است و در نهایت این کد برای نرم‌افزار اکسل توسط کد CXTFIT نیز تهیه گردیده است (Tang et al., 2009 and 2010). این کد در اکسل قابلیت انجام کالیبراسیون همزمان پارامتر، برآورد آنالیزهای حساسیت و عدم قطعیت را دارد.

اندازه تعداد نمونه تعریف شده برای مدل تکرار می‌گردد و در نهایت از همه این احتمالات میانگین حسابی گرفته می‌شود. احتمالات مدل در این روش طبق فرمول‌های زیر محاسبه می‌گردد (Kass and Raftery, 1995):

$$p_{AME}(D|M_k) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m p(D|\theta_{prior}^{(i)}, M_k) \quad (13)$$

$$p(M_k|D) = \frac{p_{AME}(D|M_k)p(M_k)}{\sum_{l=1}^k p_{AME}(D|M_l)p(M_l)} \quad (14)$$

m : تعداد نمونه پارامتر؛ $\theta_{prior}^{(i)}$ پارامتر در توزیع پیشین $p(\theta|M)$

۲-۳-۴- روش برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین هارمونیک یا HME

روش HME از طریق زنجیره مارکوف مونت کارلو قابل اجرا می‌باشد. در این روش از توزیع پیشین تعریف شده برای پارامتر توزیع پسین محاسبه می‌گردد. نمونه برداری توزیع پسین از طریق روش مربع لاتین^۸ صورت می‌گیرد و با توجه به این مقدار پارامتر، مدل احتمال مشترک پارامتر و مدل k را محاسبه می‌نماید و این محاسبات به اندازه تعداد نمونه تعریف شده برای مدل تکرار می‌گردد و در نهایت از همه این احتمالات میانگین هارمونیک گرفته می‌شود. احتمالات مدل در این روش طبق فرمول‌های زیر محاسبه می‌گردد (Kass and Raftery, 1995):

$$p_{HME}(D|M_k) = \left[\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m p(D|\theta_{postrior}^{(i)}, M_k) \right]^{-1} \quad (15)$$

$$p(M_k|D) = \frac{p_{HME}(D|M_k)p(M_k)}{\sum_{l=1}^k p_{HME}(D|M_l)p(M_l)} \quad (16)$$

m : تعداد نمونه پارامتر؛ $\theta_{postrior}^{(i)}$ پارامتر در توزیع پسین $p(\theta|M)$

۲-۳-۴- صحت سنجی

صحت سنجی مدل، بررسی ارزیابی مدل در پیش‌بینی با سری جدید داده می‌باشد. در اعتبار سنجی مدل معمولاً بخشی از داده‌ها برای کالیبراسیون و بخشی برای صحت سنجی به کار می‌رود. بعد از اعتبارسنجی مدل نیاز به روشی جهت امتیازبندی مدل‌های مختلف با توجه به قابلیت مدل‌ها در پیش‌بینی می‌باشد (Good, 2013; Zhang and Yang, 2015). در این بررسی برای صحت سنجی چهار مدل در وضعیت سرعت جریان بالا $q=36.7$ از

$$P(D|M_k) \approx \exp(-\frac{1}{2}IC_k) \quad (6)$$

$$p(M_k|D) = \frac{\exp(-\frac{1}{2}\Delta IC_k)p(M_k)}{\sum_{l=1}^k \exp(-\frac{1}{2}\Delta IC_l)p(M_l)} \quad (7)$$

IC : می‌تواند روش‌های انتخاب معیار AIC، AICC، BIC و KIC باشد. در این روش‌ها در ابتدا مدل‌های جایگزین کالیبره می‌شوند و سپس معیار انتخاب مدل بر اساس نتایج کالیبراسیون، محاسبه می‌شود (Ye et al. 2008a, 2008b, 2010). امتیاز دهی مدل‌های مفهومی مختلف و انتخاب بین این مدل‌ها از طریق روش‌های زیر صورت می‌گیرد: ۱- روش AIC (Akaike, 1974). ۲- روش تصحیح شده AIC (AICc, Hurvich and Tsai, 1989). ۳- روش بیزین (BIC, Schwarz, 1978). ۴- روش KIC (Kashyap, 1982). این روش‌ها بر اساس تئوری آماری می‌باشند و دارای فاکتورهای در حذف مدل‌های پیچیده می‌باشند. این روش‌ها به خصوص روش KIC قابلیت اجرای توازن بین قابلیت برازش و تعداد پارامتر در مدل را دارند (Giacopetti et al., 2016). اگر مجموعه مدل جایگزین M_k در نظر گرفته شود، معیارهای انتخاب مدل به صورت زیر تعریف می‌گردند (Ye et al., 2008a):

$$AIC_k = -2\ln[L(\hat{\theta}_k|D)] + 2N_k \quad (8)$$

$$AICc_k = -2\ln[L(\hat{\theta}_k|D)] + 2N_k + \frac{2N_k(N_k+1)}{N-N_k-1} \quad (9)$$

$$BIC_k = -2\ln[L(\hat{\theta}_k|D)] + N_k \ln(N) \quad (10)$$

$$KIC = -2\ln[L(\hat{\theta}_k|D)] - 2\ln p(\hat{\theta}_k) + N_k \ln(N/2\pi) + \ln|\bar{F}_k| \quad (11)$$

$\hat{\theta}_k$: حداکثر تشابهات از برآورد θ_k می‌باشد؛ $-2\ln[L(\hat{\theta}_k|D)]$: لگاریتم منفی تشابهات نامیده می‌شود؛ N_k : تعداد پارامترها می‌باشد؛ $p(\hat{\theta}_k)$: احتمال پیشین پارامتر θ_k ؛ F_k : ماتریس اطلاعات فشر می‌باشد.

$$\bar{F}_{k,ij} = \frac{1}{N} F_{k,ij} = -\frac{1}{N} \frac{\delta^2 \ln[L(\hat{\theta}_k|D)]}{\delta \theta_{ki} \delta \theta_{kj}} \Big|_{\theta_k = \hat{\theta}_k} \quad (12)$$

۲-۳-۳- روش برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین حسابی یا AME

در این روش تشابهات ادغام شده از طریق روش مونت کارلو محاسبه می‌گردد. در روش مونت کارلو اندازه‌گیری‌های احتمالات مدل بر اساس بهترین برآورد نمی‌باشد بلکه از طریق میانگین‌گیری در تمام فضای پارامتر صورت می‌گیرد. در این روش در ابتدا برای هر مدل توزیع پیشین پارامتر تعریف می‌گردد. به طوری که روش مونت کارلو بین توزیع پیشین پارامتر به صورت تصادفی نمونه انتخاب کرده و با توجه به این مقدار پارامتر، مدل احتمال مشترک پارامتر و مدل

جذر میانگین مربعات پیچیده‌ترین مدل یعنی MIM2 بین مدل‌هایی با ساختار یکسان و متفاوت به عنوان بهترین مدل انتخاب می‌گردد.

۳-۲- بررسی پیچیدگی مدل‌های ستون تجربی از دیدگاه منطقه‌ای

برای انتخاب مدل مناسب در شبیه‌سازی مدل‌های ستون تجربی نیاز به دست‌یابی به یک مدل با تعداد پارامتر بهینه می‌باشد تا از عدم قطعیت ناشی از پیچیدگی مدل اجتناب گردد. برای رسیدن به این هدف اعتماد به داده‌های برازش منحنی پیشروی و و خطای جذر میانگین مربعات کافی نمی‌باشد. بنابراین به روش‌های قطعی‌تر برای شناسایی بهترین مدل در توصیف منحنی پیشروی نیاز می‌باشد. در این بخش از متدهای معیار انتخاب مدل، روش برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین حسابی (AME) و میانگین هارمونیک (HME) استفاده گردیده است.

۳-۲-۱- روش میانگین‌گیری حداکثر تشابهات بیزین از طریق روش‌های انتخاب معیار

در این مرحله بعد از کالیبراسیون ۸ مدل و محاسبه پارامترهای آن‌ها، بر اساس مجموع مربعات باقی‌مانده در در تابع تشابهات گوسین معیارهای انتخاب مدل محاسبه گردیدند. در نهایت احتمال پسین مدل‌ها با استفاده از معیارهای انتخاب مدل محاسبه گردید و نتایج آن در جدول ۲ و ۳ برای هر دو وضعیت سرعت جریان بالا و پایین آمده است. در این روش‌ها مدلی که IC کمتری دارد احتمال بیشتری را به خود اختصاص می‌دهد و دارای عدم قطعیت کمتری می‌باشد.

داده‌ها و نتایج کالیبراسیون چهار مدل مشابه در وضعیت سرعت بالا $q=111$ در ستون دیگر استفاده گردید. برای صحت سنجی چهار مدل در وضعیت سرعت جریان پایین $q=2.71$ از داده‌ها و نتایج کالیبراسیون چهار مدل مشابه در وضعیت سرعت پایین $q=2.69$ در ستون دیگر استفاده گردید. جهت امتیازدهی به مدل‌ها در قابلیت پیش‌بینی، مجدداً احتمالات مدل از روش‌های معیار انتخاب مدل در هر ۸ مدل محاسبه گردید.

۳- نتایج و تحلیل نتایج

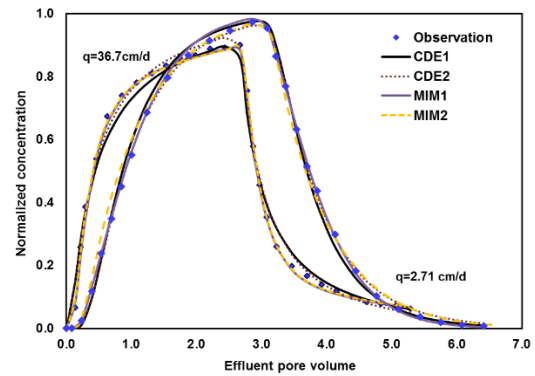
۳-۱- بررسی پیچیدگی مدل‌های ستون تجربی از دیدگاه محلی

هشت مدل انتقال با ۳۰ داده مشاهداتی غلظت اندازه‌گیری شده ردیاب در انتهای ستون در نرم‌افزار اکسل و تحت کد CXTFIT کالیبره گردیدند. این نرم‌افزار در فرایند کالیبراسیون برای مدل‌هایی با تعداد پارامتر بالاتر از ۱، قابلیت برآورد پارامتر به صورت همزمان را دارد. منحنی‌های پیشرفت (BTC) برای دو وضعیت سرعت بالا $q=36.7$ و سرعت پایین $q=2.71$ با چهار مدل CDE1، CDE2، MIM1 و MIM2 در شکل ۱ ارائه شده است و پارامترهای محاسبه شده توسط این مدل‌ها در جدول ۱ آمده است. با توجه به نمودار پیشروی، همه مدل‌ها به جز CDE1 در وضعیت سرعت جریان بالا برازش خوبی را بین داده‌های مشاهداتی و محاسباتی نشان می‌دهند. بهترین برازش منحنی پیشروی در وضعیت سرعت جریان بالا و پایین با توجه به خطای جذر میانگین مربعات در مدل MIM2 مشاهده می‌شود. در هر دو وضعیت سرعت جریان بالا و پایین کالیبره کردن تعداد بیشتری پارامتر منجر به بهبود کیفیت مدل می‌شود. بنابراین از دیدگاه محلی و با توجه به در نظر گرفتن خطای

جدول ۱- مقادیر پارامترهای محاسباتی و خطای جذر میانگین مربعات چهار مدل در دو وضعیت سرعت جریان بالا و پایین

امتیاز	RMSE	T	ω	β	θ	λ (cm)	مدل‌ها	
۴	۰/۰۳۳۷					$100/0.3 \pm 5/21$	CDE1	$q=36.7$
۳	۰/۰۲۸۴				$0/438 \pm 0/02$	$92/74 \pm 4/67$	CDE2	
۲	۰/۰۱۲۷		$0/280 \pm 0/02$	$0/467 \pm 0/02$		$27/45 \pm 2/74$	MIM1	
۱	۰/۰۱۰۵	$2/609 \pm 0/01$	$0/288 \pm 0/02$	$0/454 \pm 0/02$		$28/22 \pm 2/42$	MIM2	
۴	۰/۰۲۲۷					$15/63 \pm 0/71$	CDE1	$q=2.71$
۳	۰/۰۱۲۰				$0/560 \pm 0/01$	$16/74 \pm 0/41$	CDE2	
۲	۰/۰۱۱۶		$2/988 \pm 0/34$	$0/373 \pm 0/09$		$4/58 \pm 3/26$	MIM1	
۱	۰/۰۱۱۵	$2.841 \pm 0/01$	$2/983 \pm 0/34$	$0/373 \pm 0/09$		$4/57 \pm 2/55$	MIM2	

CDE با فرض اینکه کل آب موجود در محیط متخلخل در تعادل فیزیکی می‌باشد توصیف مناسبی برای بررسی جریان آب در این خاک می‌باشد. در همه روش‌ها مدل CDE1 به عنوان ساده‌ترین و مدل MIM2 به عنوان پیچیده‌ترین مدل، کمترین احتمال را به خود اختصاص داده‌اند.



شکل ۱- منحنی پیشرفت (BTC) برای چهار مدل در دو وضعیت سرعت جریان بالا و پایین

۳-۲-۲- صحت سنجی مدل‌های جایگزین انتقال آلاینده

بعد از صحت‌سنجی مدل‌ها، نتایج روش‌های انتخاب مدل و احتمالات مدل در جدول‌های ۴ و ۵ آمده است و احتمالات این بخش نتایج کالیبراسیون را تأیید می‌نماید. در وضعیت سرعت جریان بالا، بالاترین احتمال مدل در MIM1 و در وضعیت سرعت جریان پایین، در CDE2 مشاهده می‌گردد. در واقع بهترین عملکرد مدل در صحت سنجی با توجه به نتایج احتمالات مدل، در وضعیت سرعت جریان بالا در MIM1 و در وضعیت جریان پایین در CDE2 مشاهده می‌شود.

۳-۲-۳- روش برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین حسابی (AME)

در روش‌های معیار انتخاب مدل، احتمالات مدل بر اساس تقریب گوسین در حدود بهترین برآورد پارامتر صورت می‌گیرد و این نتایج مخصوصاً در مدل‌های غیر خطی اعتبار بالایی ندارند

با توجه به جدول ۲ در همه متدها بالاترین احتمال مدل در وضعیت سرعت بالا در مدل MIM1 می‌باشد و با توجه به جدول ۳ بالاترین احتمال مدل در وضعیت سرعت جریان پایین در همه متدها در مدل CDE2 مشاهده می‌گردد. این مدل با نتیجه نهایی تحقیق Anamosa et al. (1990) هم‌خوانی دارد. ایشان به این نتیجه رسیدند که در وضعیت سرعت جریان بالا به دلیل اینکه زمان برای رسیدن به حالت تعادل بین ناحیه غیر متحرک آب با بخش متحرک پایین است، مدل CDE برای شرح جریان آب در این خاک نامناسب می‌باشد در حالی که در سرعت جریان پایین زمان ماندگاری آب در خاک بالاتر می‌باشد بنابراین طی فرایند دیفیوژن تعادل فیزیکی بین بخش متحرک و غیر متحرک برقرار می‌گردد. در این وضعیت مدل

جدول ۲ - نتایج معیار انتخاب مدل و احتمالات پسین مدل در وضعیت سرعت بالا $q=36.7$

q=36.7								روش‌ها
احتمال مدل‌های جایگزین				مدل‌ها				
P- MIM2	P- MIM1	P- CDE2	P- CDE1	MIM2	MIM1	CDE2	CDE1	
۰/۶	۹۹/۴	۰/۰	۰/۰	-۱۶۱/۷	-۱۷۰/۵	-۱۲۷/۷	-۱۲۳/۷	AIC
۰/۸	۹۹/۲	۰/۰	۰/۰	-۱۶۰/۸	-۱۶۶/۷	-۱۲۷/۲	-۱۲۳/۵	AICc
۱/۱	۹۸/۹	۰/۰	۰/۰	-۱۵۷/۷	-۱۶۰/۵	-۱۲۵/۰	-۱۲۲/۳	BIC
۱۵/۷	۸۴/۳	۰/۰	۰/۰	-۱۵۳/۱۷	-۱۷۰/۵	-۱۳۰/۲	-۱۲۹/۹	KIC

جدول ۳- نتایج معیار انتخاب مدل و احتمالات پسین مدل در وضعیت سرعت پایین $q=2.71$

q=2.71								روش‌ها
احتمال مدل‌های جایگزین				مدل‌ها				
P- MIM2	P- MIM1	P- CDE2	P- CDE1	MIM2	MIM1	CDE2	CDE1	
۰/۰	۰/۹	۷۲/۲	۲۶/۸	-۱۶۶/۱	-۱۷۵	-۱۸۳/۷	-۱۸۱/۷	AIC
۰/۰	۱/۳	۷۸/۵	۲۰/۱	-۱۶۵/۹	-۱۷۴/۶	-۱۸۲/۷	-۱۸۰/۰	AICc
۰/۰	۲/۱	۸۲/۲	۱۵/۷	-۱۶۴/۷	-۱۷۲/۴	-۱۷۹/۷	-۱۷۶/۴	BIC
۰/۱	۰/۱	۹۶/۷	۳/۱	-۱۶۸/۲	-۱۷۰/۱	-۱۸۳/۴	-۱۷۶/۵	KIC

جدول ۴- نتایج معیار انتخاب مدل و احتمالات پسین مدل در وضعیت صحت سنجی مدل‌های سرعت بالا $q=36.7$ با وضعیت $q=111$

احتمال مدل‌های جایگزین				مدل‌ها				روش‌ها
P- MIM2	P- MIM1	P- CDE2	P- CDE1	MIM2	MIM1	CDE2	CDE1	
۱۱/۲	۸۸/۷	۰/۰	۰/۱	-۱۸۳/۱	-۱۸۷/۲	-۱۲۸/۴	-۱۷۳/۰	AIC
۷/۸	۹۲/۲	۰/۰	۰/۰	-۱۸۲/۱	-۱۸۷/۱	-۱۲۸/۰	-۱۷۱/۳	AICc
۳/۱	۹۶/۹	۰/۰	۰/۰	-۱۷۹/۰	-۱۸۵/۸	-۱۲۵/۷	-۱۶۷/۵	BIC
۰/۳	۹۹/۷	۰/۰	۰/۰	-۱۸۷/۴	-۱۹۹/۰	-۱۳۵/۸	-۱۷۴/۳	KIC

جدول ۵- نتایج معیار انتخاب مدل و احتمالات پسین مدل در وضعیت صحت سنجی مدل‌های سرعت پایین $q=2.71$ با وضعیت $q=2.69$

احتمال مدل‌های جایگزین				مدل‌ها				روش‌ها
P- MIM2	P- MIM1	P- CDE2	P- CDE1	MIM2	MIM1	CDE2	CDE1	
۰/۰	۰/۰	۵۰/۵	۴۹/۵	-۱۵۰/۵	-۱۵۲/۵	-۱۶۱/۲	-۱۶۱/۰	AIC
۰/۰	۰/۰	۵۵/۳	۴۴/۷	-۱۴۸/۷	-۱۵۱/۵	-۱۶۰/۹	-۱۶۰/۵	AICc
۰/۰	۰/۰	۶۷/۰	۳۳/۰	-۱۴۵/۱	-۱۴۸/۵	-۱۵۸/۴	-۱۵۸/۴	BIC
۰/۰	۰/۰	۸۳/۷	۱۶/۳	-۱۵۰/۱	-۱۵۵/۶	-۱۷۰/۰	-۱۶۰/۹	KIC

حداکثر تشابهات صورت می‌گیرد. مدل‌هایی با تشابهات بیشتر احتمال بالاتری خواهند داشت (Kass and Raftery, 1995). با توجه به حداکثر تشابهات بیشترین مقدار در وضعیت سرعت بالا در مدل MIM1 و در وضعیت سرعت پایین در مدل CDE2 مشاهده می‌شود.

۳-۲-۴- تعیین پیچیدگی مدل از طریق اندازه‌گیری فضای خروجی مدل در روش (AME)

در نمودار پیشروی (BTC) برای هر هشت مدل، غظت اندازه‌گیری شده در یک نقطه انتخاب گردید و سپس تعداد ۳ میلیون داده شبیه‌سازی شده برای این نقطه در روش AME مجزا گردید و بر اساس این داده‌ها نمودارهای تابع چگالی احتمال رسم گردید.

(Shi et al. 2014)، بنابراین در بررسی منطقه‌ای پیچیدگی مدل، روش قطعی‌تر برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین حسابی نیز در این مطالعه استفاده گردیده است. این روش بر اساس روش ساده مونت کارلو می‌باشد. چون این روش با فرض گوسین تعریف نمی‌گردد، بنابراین نتایج قطعی‌تری نسبت به روش معیار انتخاب مدل ارائه می‌دهد. برای اجرای این روش از سه میلیون تعداد نمونه در هشت مدل استفاده گردید. نتایج احتمالات مدل از طریق میانگین حسابی در جدول ۶ و جدول ۷ ارائه گردیده است. در این روش در هر دو وضعیت سرعت کم و بالا، احتمالات به صورت توزیع شده بین مدل‌های مختلف می‌باشند و بیشترین احتمال مدل در مدل CDE1 در هر دو وضعیت مشاهده می‌گردد. دلیل این امر را می‌توان به کوچک بودن ابعاد مدل در محاسبات حاشیه تشابهات نسبت داد. به دلیل برابر نبودن ابعاد مدل مقایسه مدل‌ها در این بخش از طریق

جدول ۶- برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین حسابی در وضعیت $q=36.7$

$q=36.7$					مدل‌ها
P-Model	AME	ML	SSR	RMSE	
۲۶	۹/۲۴۶E-۱۳	۱/۰۳۵E-۱۲	۰/۰۳۳	۰/۰۳۴	CDE1
۲۱	۷/۴۸۴E-۱۳	۱/۰۵۵E-۱۲	۰/۰۲۳	۰/۰۲۸	CDE2
۲۵	۸/۹۹۲E-۱۳	۱/۰۶۳E-۱۲	۰/۰۰۵	۰/۰۱۳	MIM1
۲۴	۸/۸۷۷E-۱۳	۱/۰۶۲E-۱۲	۰/۰۰۴	۰/۰۱۲	MIM2

جدول ۷- برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین حسابی در وضعیت $q=2.71$

q=2.71					
P-Model	AME	ML	SSR	RMSE	
۲۶	۴/۵۹۰E-۱۲	۶/۶۶۷E-۱۲	۰/۰۱۴۴	۰/۰۲۲۷	CDE1
۲۲	۳/۸۶۵E-۱۲	۶/۶۷۸E-۱۲	۰/۰۰۴۱	۰/۰۱۲۱	CDE2
۲۵	۴/۳۲۵E-۱۲	۶/۶۷۶E-۱۲	۰/۰۰۳۷	۰/۰۱۱۵	MIM1
۲۴	۴/۲۷۳E-۱۲	۶/۶۷۶E-۱۲	۰/۰۰۳۸	۰/۰۱۱۷	MIM2

در همه نمودارها دیده می‌شود که رابطه بین پارامتر و خروجی مدل در مدل‌های پیچیده‌تر MIM نسبت به مدل‌های ساده CDE پیچیده می‌باشد. در نمودارهای وضعیت سرعت جریان بالا دیده می‌شود که (شکل ۳)

۱- مدل CDE1 با تغییرات زیادی در رنج پارامتر پراکندگی (λ)، فقط قادر به شبیه‌سازی مقدار واقعی این پارامتر در یک نقطه می‌باشد که در اینجا مقدار این پارامتر ۱۰ سانتی‌متر می‌باشد. بنابراین در این مدل اگر برای مدل AME رنج متفاوتی برای پارامتر پراکندگی (λ) به عنوان مثال بین ۲۰ تا ۲۰۰ سانتی‌متر انتخاب کرده بودیم آنگاه این مدل قابلیت برآورد این پارامتر را نداشت.

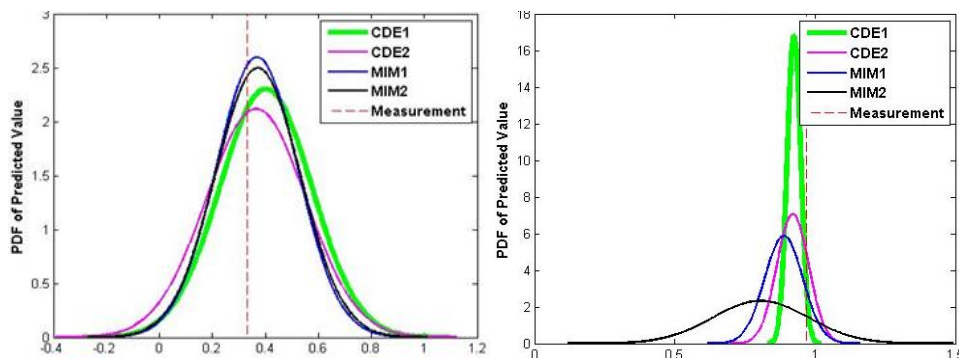
بنابراین این شکل نشان می‌دهد که مدل CDE1 به عنوان ساده‌ترین مدل، کارایی بالایی در شبیه‌سازی مدل انتقال در وضعیت سرعت بالا را ندارد.

۲- مدل CDE2 برازش بهتری را نسبت به CDE1 نشان می‌دهد و دلیل این امر برآورد یک پارامتر بیشتر در این مدل نسبت به مدل CDE1 می‌باشد و برازش ضعیف‌تری را نسبت به مدل‌های MIM نشان می‌دهد.

میزان اندازه‌گیری شده غلظت در این زمان به صورت خطچین نمایش داده شده است. این نمودارها در شکل ۲ ارائه گردیده است. در مورد وضعیت سرعت جریان بالا مدل‌های MIM و در وضعیت سرعت جریان پایین مدل‌های CDE احتمال بیشتر را نشان می‌دهند. در وضعیت سرعت جریان پایین مدل MIM2 به عنوان پیچیده‌ترین مدل وسیع‌ترین رنج خروجی را ارائه می‌دهد. در وضعیت سرعت جریان بالا احتمال مدل پیچیده MIM2 به دلیل عدم برقراری شرط تعادل فیزیکی در محیط خاک، بیشتر می‌باشد ولی احتمال این مدل کمتر از مدل MIM1 می‌باشد. بنابراین در هر وضعیت بیانگر این مطلب می‌باشد که پیچیدگی مدل انتقال در این مطالعه مجاز نمی‌باشد.

۳-۲-۵- تعیین پیچیدگی مدل از طریق اندازه‌گیری رابطه بین خروجی مدل و پارامتر

در نمودار پیشروی (BTC) برای هر هشت مدل، غلظت اندازه‌گیری شده در یک نقطه انتخاب گردید و سپس تعداد ۳ میلیون داده شبیه‌سازی شده برای این نقطه مجزا گردید و رابطه بین این خروجی‌ها و پارامترهای شبیه‌سازی شده در در روش AME در نمودارهای شکل ۳ و شکل ۴ رسم گردید.



شکل ۲- نمودارهای تابع چگالی احتمال بر اساس مقدار پیش‌بینی شده غلظت در مدل (AME)

نیازی به افزایش پیچیدگی از مدل CDE2 به مدل‌های MIM نمی‌باشد.

۳-۲-۶- روش برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین هارمونیک (HME)

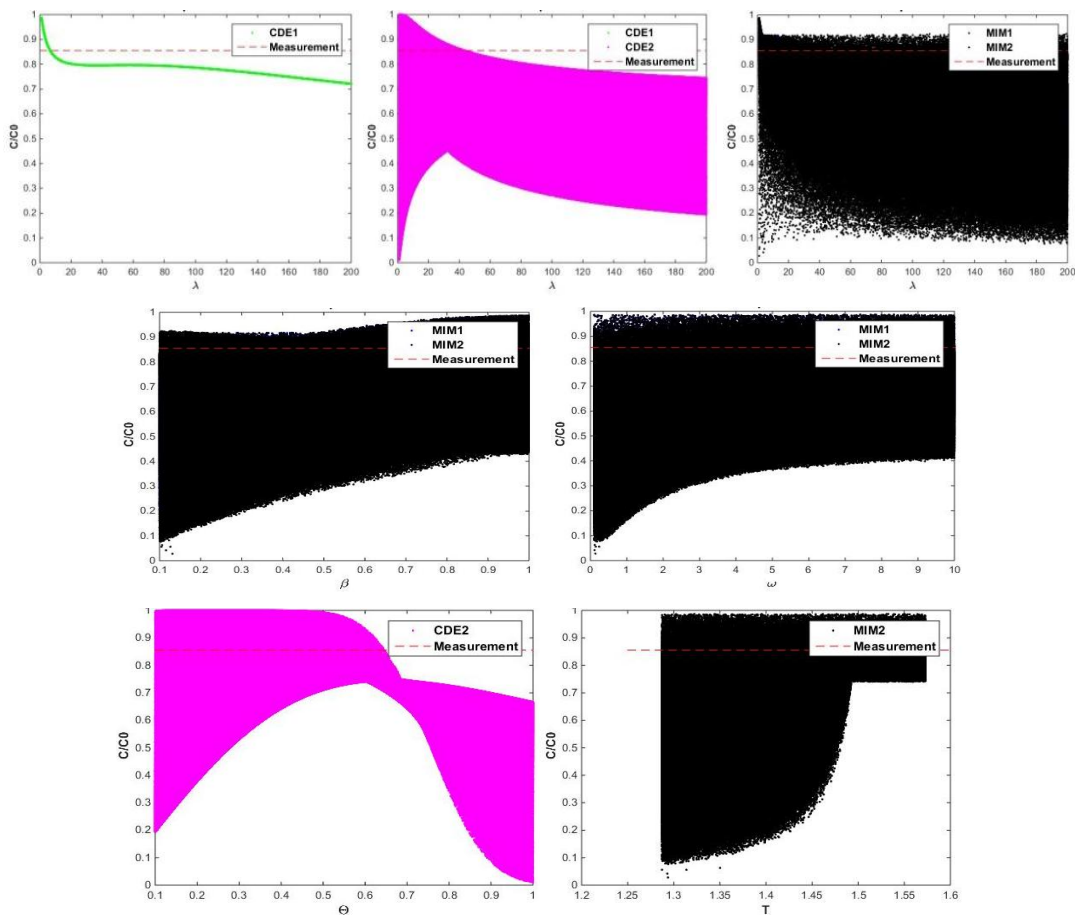
روش HME از طریق زنجیره مارکوف مونت کارلو اجرا می‌گردد. برای اجرای این روش از سه میلیون تعداد نمونه استفاده گردید. محدوده حداقل و حداکثر برای پارامتر در این مدل مشابه مدل AME در نظر گرفته شد. نتایج احتمالات مدل از طریق میانگین هارمونیک در جدول ۸ و جدول ۹ ارائه گردیده است. در این روش هر دو وضعیت سرعت کم و بالا، احتمالات به صورت توزیع شده بین مدل‌های مختلف می‌باشند و بیشترین احتمال مدل در مدل CDE1 در هر دو وضعیت مشاهده می‌گردد. دلیل این امر را می‌توان به کوچک بودن ابعاد مدل در محاسبات حاشیه تشابهات نسبت داد.

مدل‌های MIM قابلیت برازش داده در یک رنج وسیعی از پارامتر را دارند و می‌توان بیان کرد که در عملکرد مدل MIM2 نسبت به مدل MIM1 تفاوت قابل ملاحظه‌ای دیده نمی‌شود.

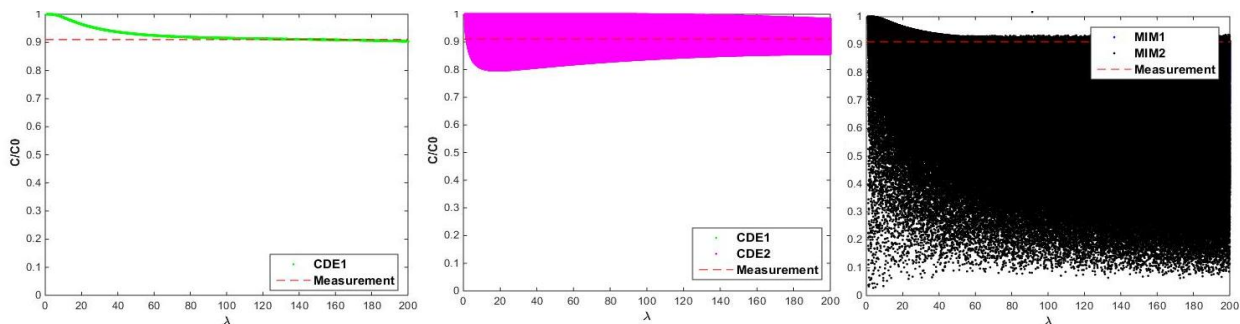
۳- این نمودارها عملکرد بهتر مدل‌های پیچیده نسبت به مدل‌های ساده در برازش داده نشان می‌دهند.

۴- در کل وضعیت سرعت جریان بالا و با توجه به شکل ۳ می‌توان نتیجه گرفت که مدل MIM1 با درجه پیچیدگی متوسط برای توضیح مدل انتقال در این بررسی کافی می‌باشد.

در سرعت جریان پایین فقط نمودارهای بین پارامتر پراکندگی (λ) و خروجی مدل ارائه گردیده است. در مورد بقیه پارامترها شرایط نمودارها شبیه به وضعیت سرعت جریان بالا می‌باشد. در شکل ۴ در وضعیت سرعت جریان پایین دیده می‌شود که مدل‌های CDE1 و CDE2 قابلیت برازش بالایی در حد مدل‌های MIM دارند و قابلیت برازش در CDE2 بالاتر از CDE1 می‌باشد. بنابراین در این وضعیت



شکل ۳- رابطه بین این خروجی مدل و پارامترهای شبیه‌سازی شده در روش AME در وضعیت $q=36.7$



شکل ۴- رابطه بین این خروجی مدل و پارامترهای شبیه‌سازی شده در در روش AME در وضعیت $q=2.71$

مدل‌های تعادلی و غیر تعادلی انتقال استفاده گردیده است. ۱- ساده‌ترین مدل CDE1 یا معادله تعادلی کانوکشن-دیسپرژن می‌باشد. در این مدل فقط پارامتر پراکندگی محاسبه گردید. مدل CDE2: مدل تعادلی کانوکشن-دیسپرژن می‌باشد و در آن دو پارامتر پراکندگی و تخلخل محاسبه گردید. مدل MIM1 مدل غیر تعادلی متحرک- غیر متحرک که در آن سه پارامتر پراکندگی، کسری از بخش متحرک آب و ضریب انتقال جرم محاسبه شد و پیچیده‌ترین مدل MIM2: مدل غیر تعادلی متحرک- غیر متحرک که در آن چهار پارامتر پراکندگی، کسری از بخش متحرک آب، ضریب انتقال جرم و زمان تزریق محاسبه گردید.

۲- از دیدگاه محلی بررسی پیچیدگی مدل، و با توجه به در نظر گرفتن خطای جذر میانگین مربعات پیچیده‌ترین مدل یعنی MIM2 بین مدل‌هایی با ساختار یکسان و متفاوت به عنوان بهترین مدل انتخاب می‌گردد.

به دلیل برابر نبودن ابعاد مدل مقایسه مدل‌ها در این بخش از طریق حداکثر تشابهات صورت می‌گیرد. با توجه به حداکثر تشابهات بیشترین مقدار در وضعیت سرعت بالا در مدل MIM1 و در وضعیت سرعت پایین در مدل CDE2 مشاهده می‌شود. نتایج احتمالات مدل به این شیوه نتایج قبلی احتمالات مدل از طریق میانگین حسابی را تأیید می‌نماید. در یک نتیجه‌گیری کلی پیچیدگی در وضعیت سرعت جریان بالا تا حد مدل MIM1 و در وضعیت سرعت جریان پایین تا حد مدل CDE2 کافی می‌باشد و پیچیده کردن مدل‌های انتقال بیشتر از این حد منجر به افزایش عدم قطعیت مدل می‌گردد.

۴- خلاصه و جمع بندی

۱- در بررسی عدم قطعیت ناشی از پیچیدگی مدل انتقال آلاینده در ستون تجربی، چهار مدل در دو ستون با وضعیت سرعت جریان بالا ($q=36.7$) و پایین ($q=2.71$) با درجه‌های مختلف پیچیدگی شامل

جدول ۸- برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین هارمونیک در وضعیت $q=36.7$

q=36.7					
P-Model	HME	ML	SSR	RMSE	
۲۷	۹/۲۶۵E-۱۳	۱/۰۳۵E-۱۲	۰/۰۳۲۹	۰/۰۳۳۷	CDE1
۲۱	۷/۴۵۶E-۱۳	۱/۰۵۵E-۱۲	۰/۰۲۳۴	۰/۰۲۸۴	CDE2
۲۶	۹/۱۵۹E-۱۳	۱/۰۶۲E-۱۲	۰/۰۰۵۲	۰/۰۱۳۴	MIM1
۲۵	۹/۰۰E-۱۳	۱/۰۶۱E-۱۲	۰/۰۰۴۸	۰/۰۱۲۸	MIM2

جدول ۹- برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین هارمونیک در وضعیت $q=2.71$

q=2.71					
P-Model	HME	ML	SSR	RMSE	
۲۷	۴/۵۸۹E-۱۲	۶/۶۶۷E-۱۲	۰/۰۱۴۴	۰/۰۲۲۷	CDE1
۲۱	۳/۷۹۲E-۱۲	۶/۶۷۸E-۱۲	۰/۰۰۴۱	۰/۰۱۲۱	CDE2
۲۶	۴/۵۱۹E-۱۲	۶/۶۷۶E-۱۲	۰/۰۰۳۸	۰/۰۱۱۶	MIM1
۲۵	۴/۴۴۹E-۱۲	۶/۶۷۵E-۱۲	۰/۰۰۳۹	۰/۰۱۱۸	MIM2

۵- سپاسگزاری

از پروفسور Ming Ye در دانشگاه ایالتی فلوریدا و از آقای دکتر Guoping Tang در آزمایشگاه ملی اوک ریج^۱ جهت راهنمایی‌های ارزنده ایشان در پیشبرد اهداف تحقیق قدردانی و تشکر می‌نماییم.

پی‌نوشت‌ها

- 1- Model complexity
- 2- Overparameterized
- 3- Parsimonious model
- 4- Bayesian Model-averaging (BMA)
- 5- Maximum Likelihood Bayesian Model-averaging (MLBMA)
- 6- Arithmetic Mean Estimators (AME)
- 7- Harmonic Mean Estimators (AME)
- 8- Latin Hypercube sampling
- 9- Oak Ridge National Laboratory

۶- مراجع

- Attinger S, Herold C, Kumar R, Mai J, Ross K, Samaniego L, Zink M (2015) Complexity of groundwater models in catchment hydrological models. In EGU General Assembly Conference Abstracts 17: 6155
- Akaike H (1974) A new look at the statistical model identification. IEEE transactions on automatic control 19(6):716-723
- Anamosa PR, Nkedi-Kizza P, Blue WG, Sartain JB (1990) Water movement through an aggregated, gravelly oxisol from Cameroon. Geoderma 46(1):263-281
- Elsheikh AH, Wheeler MF, Hoteit I (2013) Nested sampling algorithm for subsurface flow model selection, uncertainty quantification, and nonlinear calibration. Water Resource Research 49(12): 8383-8399
- Engelhardt I, DeAguinaga JG, Mikat H, Schüth C, Liedl R (2014) Complexity vs. simplicity: groundwater model ranking using information criteria. Groundwater 52(4): 573-583
- Giacopetti M, Crestaz E, Materazzi M, Pambianchi G, Posavec K (2016) A multi-model approach using statistical index and information criteria to evaluate the adequacy of the model geometry in a fissured carbonate aquifer (Italy). Water 8(7):271
- Gómez-Hernández J (2006) Complexity. Groundwater 44(6): 782-785

۳- از دیدگاه منطقه‌ای بررسی پیچیدگی مدل از طریق روش‌های معیار انتخاب مدل (AIC، AICC، BIC و KIC) بالاترین احتمال مدل در همه متدها در وضعیت سرعت بالا در مدل MIM1 می‌باشد و بالاترین احتمال مدل در وضعیت سرعت جریان پایین در همه متدها در مدل CDE2 مشاهده می‌گردد. در همه روش‌ها مدل CDE1 به عنوان ساده‌ترین مدل و مدل MIM2 به عنوان پیچیده‌ترین مدل کمترین احتمال را به خود اختصاص داده‌اند. نتایج صحت سنجی مدل نیز این احتمالات مدل را تأیید نمود.

۴- در روش‌های AME و HME بررسی پیچیدگی مدل از دیدگاه منطقه‌ای در هر دو وضعیت سرعت کم و بالا، احتمالات به صورت توزیع شده بین مدل‌های مختلف می‌باشند و بیشترین احتمال مدل در مدل CDE1 مشاهده می‌گردد. دلیل این امر را می‌توان به کوچک بودن ابعاد مدل در محاسبات حاشیه تشابهات نسبت داد. به دلیل برابر نبودن ابعاد مدل مقایسه مدل‌ها از طریق حداکثر تشابهات صورت گرفت. با توجه به حداکثر تشابهات بیشترین مقدار در وضعیت سرعت بالا در مدل MIM1 و در وضعیت سرعت پایین در مدل CDE2 مشاهده می‌شود.

۵- در بررسی پیچیدگی مدل از دیدگاه منطقه‌ای احتمالات محاسبه شده مدل‌های جایگزین با روش‌های محلی کاملاً متفاوت هستند. با توجه به اینکه در روش‌های محلی فقط چگونگی برازش سطح آب مشاهداتی و محاسباتی در نظر گرفته می‌شود و در واقع با یک دیدگاه سطحی و محلی به بررسی قطعیت مدل می‌پردازند، برای تعیین یک مدل قطعی نمی‌توان به نتایج این روش تکیه نمود. در حالی که روش‌های منطقه‌ای در تعیین قطعیت مدل‌های جایگزین نه تنها به چگونگی برازش سطح آب مشاهداتی و محاسباتی می‌پردازند، بلکه قطعیت داده و ساختار مدل نیز در این‌ها جهت انتخاب مدل در نظر گرفته می‌شود. بنابراین در نتیجه گیری نهایی از روش‌های منطقه‌ای می‌توان بیان نمود که پیچیدگی در وضعیت سرعت جریان بالا تا حد مدل MIM1 و در وضعیت سرعت جریان پایین تا حد مدل CDE2 کافی می‌باشد و پیچیده کردن مدل‌های انتقال بیشتر از این حد منجر به افزایش عدم قطعیت مدل می‌گردد.

۶- در این مطالعه با بررسی ستون‌های تجربی، نتایج نشان می‌دهد که با توجه به احتمالات مختلف محاسبه شده بین مدل‌های مفهومی جایگزین، در فرایند مدل‌سازی آب زیرزمینی در صورت عدم توجه به فرایند پیچیدگی مدل و افزایش تعداد پارامتر، عدم قطعیت ناشی از پیچیدگی حاصل و منجر به پیش‌بینی‌های غیر صحیح شده و در نهایت تصمیمات مدیریتی در رابطه با آن مدل با خطر شکست مواجه خواهد شد.

- Rojas R, Kahunde S, Peeters L, Batelaan O, Feyen L, Dassargues A (2010a) Application of a multimodel approach to account for conceptual model and scenario uncertainties in groundwater modelling. *Journal of Hydrology* 394(3):416-435
- Rojas R, Feyen L, Batelaan O, Dassargues A (2010b) On the value of conditioning data to reduce conceptual model uncertainty in groundwater modeling. *Water Resources Research* 46(8)
- Schöniger A, Illman WA, Wöhling T, Nowak W (2015) Finding the right balance between groundwater model complexity and experimental effort via Bayesian model selection. *Journal of Hydrology* 531: 96-110
- Schwarz G (1978) Estimating the dimension of a model. *The annals of statistics* 6(2):461-464
- Shi X, Ye M, Curtis GP, Miller GL, Meyer PD, Kohler M, Yabusaki S, Wu J (2014) Assessment of parametric uncertainty for groundwater reactive transport modeling. *Water Resources Research* 50(5): 4416-4439
- Simmons CT, Hunt RJ (2012) Updating the debate on model complexity. *GSA Today* 22(8):28-29
- Tang G, Mayes MA, Parker JC, Yin XL, Watson DB, Jardine PM (2009) Improving parameter estimation for column experiments by multi-model evaluation and comparison. *Journal of hydrology* 376(3): 567-578
- Tang G, Mayes MA, Parker JC, Jardine PM (2010) CXTFIT/Excel—a modular adaptable code for parameter estimation, sensitivity analysis and uncertainty analysis for laboratory or field tracer experiments. *Computers & Geosciences* 36(9):1200-1209
- Toride N, Leij FJ, Van Genuchten MT (1995) The CXTFIT code for estimating transport parameters from laboratory or field tracer experiments. *US Salinity Laboratory*, 132p
- Tsai F, Sun NZ, Yeh W (2003) Global-local optimization for parameter structure identification in three-dimensional groundwater modeling. *Water Resources Research* 39(2)
- Van Genuchten MT, Wierenga PJ (1977) Mass transfer studies in sorbing porous media: II. Experimental evaluation with tritium (3H2O). *Soil Science Society of America Journal* 41(2):272-280
- Ye M, Neuman SP, Meyer PD (2004) Maximum likelihood Bayesian averaging of spatial variability models in unsaturated fractured tuff. *Water Resources Research* 40(5)
- Good PI, Good P (2013) *Resampling methods: A practical guide to data analysis*. Springer Science & Business Media. Berlin, 265p
- Haitjema H (2011) Model complexity: A cost-benefit issue. *Geological Society of America* 43(5): 354
- Hill MC (2006) The practical use of simplicity in developing ground water models. *Groundwater* 44(6):775-781
- Hill CM, Tiedeman CR (2007) *Effective groundwater model calibration: With analysis of data, sensitivities, predictions, and uncertainty*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey. 455 p
- Hunt RJ, Doherty J, Tonkin MJ (2007) Are models too simple? Arguments for increased parameterization. *Ground Water* 45(3): 254-262
- Hurvich CM, Tsai CL (1989) Regression and time series model selection in small samples. *Biometrika* 76(2):297-307
- Kashyap RL (1982) Optimal choice of AR and MA parts in autoregressive moving average models. *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence* (2):99-104
- Kass RE, Raftery AE (1995) Bayes factors. *Journal of the American statistical association* 90 (430):773-795
- Liu P, Elshall AS, Ye M, Beerli P, Zeng X, Lu D, Tao Y (2016) Evaluating marginal likelihood with thermodynamic integration method and comparison with several other numerical methods. *Water Resources Research* 52(2):734-758
- Masliá ML, Aral MM, Faye RE, Grayman WM, Suárez-Soto RJ, Sautner JB, Anderson BA, Bove FJ, Ruckart PZ, Moore SM (2012) Complexities in hindcasting models—When should we say enough is enough. *Ground water* 50(1):10-16
- Neuman SP (2003) Maximum likelihood Bayesian averaging of uncertain model predictions: *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment* 17(5): 291-305
- Oreskes N (2000) Why believe a computer? Models, measures, and meaning in the natural world. *The earth around us: Maintaining a livable planet* 70-82
- Orth R, Staudinger M, Seneviratne S I, Seibert J, Zappa M (2015) Does model performance improve with complexity? A case study with three hydrological models. *Journal of Hydrology* 523: 147-159
- Parker JC, Van Genuchten MT (1984) Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments. *Bulletin/Virginia Agricultural Experiment Station* 84(3)

- assessing groundwater conceptual model uncertainty. *Ground Water* 48(5):716-728
- Yen BC, Cheng ST, Melching CS (1986) Stochastic and risk analysis in hydraulic engineering. Water Resources Publications. Littleton 36p
- Zhang Y, Yang Y (2015) Cross-validation for selecting a model selection procedure. *Journal of Econometrics* 187(1):95-112
- Ye M, Meyer PD, Neuman SP (2008a) On model selection criteria in multimodel analysis. *Water Resources Research* 44(3)
- Ye M, Pohlmann KF, Chapman JB (2008b) Expert elicitation of recharge model probabilities for the Death Valley regional flow system. *Journal of Hydrology* 354(1):102-115
- Ye M, Pohlmann KF, Chapman JB, Pohl GM, Reeves DM (2010) A model-averaging method for