

Evaluation of Uncertainty in Contaminant Transport Model in Column Experiment

S. Samani¹ and A. Asghari Moghadam^{2*}

Abstract

To assess the uncertainty of contaminant transport models in column experiments it is essential to select reliable models for simulating column experiments and estimation of reliable parameters in order to identify the processes governing contaminant transport. So the overall goal of this study is to specify the uncertainty associated with the model development by defining several conceptual models and selecting the most probable model and the best estimate of contaminant transport model parameters and model prediction. For exploring uncertainty in column experiment we considered four models from the literature including the equilibrium and non-equilibrium convection dispersion models i.e. CDE1 and CDE2 convection-dispersion models and MIM1 and MIM2 mobile-immobile models. The model selection criteria were used to evaluate the probabilities of the four models. Using the full covariance matrix that considers residual correlation has caused definitive recommendations on the basis of AIC, AICc, BIC, and KIC statistics and the model probability. The result showed that for the slow flow case due to the satisfaction of the equilibrium assumption the CDE2 and for the high flow case MIM1 were receiving the highest model probability and the least uncertainty. Finally it is concluded that the reliability of the model's data interpretation can be improved by considering alternative transport processes and quantifying uncertainty in the experiment.

Keywords: Uncertainty, Model probability, Column experiment, Contaminant transport model, Cross validation.

Received: July 2, 2016

Accepted: September 20, 2016

بررسی عدم قطعیت مدل‌های ستون تجربی انتقال آلاینده

سعیده سامانی^{۱*} و اصغر اصغری مقدم^۲

چکیده

انتخاب مدل قابل اعتماد برای شبیه سازی ستون تجربی در شناسایی فرایندهای حاکم بر انتقال آلاینده و محاسبه پارامترهای قابل اعتماد ضروری می‌باشد. هدف این تحقیق تعیین عدم قطعیت همراه با توسعه مدل از طریق تعریف چندین مدل انتقال جایگزین، جهت انتخاب محتمل‌ترین مدل و بهترین برآورد از پارامترهای مدل انتقال است. در این مطالعه جهت بررسی عدم قطعیت در مدل‌های ستون تجربی چهار مدل مفهومی مختلف شامل: CDE1 و CDE2 مدل‌های تعادلی کانوکشن-دیسپرز، MIM1 و MIM2 مدل‌های غیر تعادلی متحرک- غیر متحرک از منابع استفاده گردیده است. روش‌های انتخاب معیار مدل (AIC، AICc، BIC و KIC) برای ارزیابی احتمال مدل‌های مفهومی جایگزین مورد استفاده قرار گرفت. برای دستیابی به نتایج قابل اعتماد در روش‌های انتخاب معیار، در محاسبه احتمالات مدل، همبستگی زمانی بین داده‌ها حذف گردید. نتایج نشان می‌دهد که در وضعیت سرعت جریان پایین مدل CDE2 به دلیل برقراری شرط تعادل فیزیکی در محیط خاک و در وضعیت سرعت جریان بالا مدل MIM1 دارای بالاترین احتمال و کمترین عدم قطعیت می‌باشند. محاسبات احتمالات مدل در مرحله صحت سنجی نیز این نتایج را تأیید کرد. در نهایت می‌توان نتیجه گرفت که قابلیت اطمینان از تفسیر داده‌های مدل از طریق در نظر گرفتن عدم قطعیت مدل‌های جایگزین افزایش می‌یابد.

کلمات کلیدی: عدم قطعیت، احتمال مدل، ستون تجربی، مدل انتقال آلاینده، صحت سنجی مدل.

تاریخ دریافت مقاله: ۹۵/۴/۱۲

تاریخ پذیرش مقاله: ۹۵/۶/۳۰

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

2- Professor, Hydrogeology, Geology Department, University of Tabriz, Tabriz, Iran

*- Corresponding Author

۱- 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 تابستان ۱۳۹۶ امکانپذیر است.

ستون‌های تجربی برای بررسی حرکت آلاینده‌های آب زیرزمینی از طریق منحنی‌های پیشروی^۱ کاربرد وسیعی دارند. در ستون تجربی برای شناسایی فرایندهای حاکم در انتقال آلاینده، محاسبه پارامترهای قابل اعتماد انتقال ضروری می‌باشد. محاسبه این پارامترها از طریق تهیه مدل‌های عددی انتقال صورت می‌گیرد.

اولین و مهمترین مرحله در توسعه مدل عددی ساخت یک مدل مفهومی برای سیستم موردنظر می‌باشد. یک مدل مفهومی را می‌توان به صورت‌های مختلفی تعریف نمود، به عنوان مجموعه‌ای از مفروضات که نمایانگر درک ساده ما از سیستم واقعی است که به صورت مدل ریاضی در آمده است (Bear and Verruijt, 1987)؛ یک ارائه تصویری از سیستم که اغلب در قالب یک دیاگرام یا مقطع است که هدف آن ساده کردن وضعیت واقعی و سازمان دهی داده‌های مرتبط، به گونه‌ای که سیستم بتواند به آسانی مورد تجزیه و تحلیل قرار گیرد (Anderson and Woesser, 1992)؛ یا اینکه به عنوان چهارچوبی که مؤلفه‌های کمی و کیفی یک مکان را ارائه می‌دهد و شرایط برای ارزیابی ریاضی رفتار و عملکرد سیستم مورد تجزیه و تحلیل قرار می‌گیرد (Neuman and Wierenga, 2003). بنابراین یک مدل مفهومی یک نماینده‌ای از سیستم واقعی است که بیانگر چگونگی رفتار و عملکرد آن سیستم و در برگیرنده تفسیرهای کیفی و ذهنی است.

توسعه چهارچوب مدل مفهومی شامل چیدمان همه داده‌های موجود از نمونه واقعی و نگاه انتقادی در رفتار سیستم می‌باشد. توسعه یک چهارچوب قوی از مدل مفهومی یک جنبه مهم در کاهش عدم قطعیت در مدل است. توسعه صحیح رفتار سیستم قبل از استفاده از مدل ریاضی، باعث می‌شود تا کاربر مدل از پذیرش خروجی‌های مدل که ارائه دهنده خصوصیات واقعی سیستم نمی‌باشد، اجتناب نماید. فرضیات منطقی و متفاوت می‌توانند به چندین مدل مفهومی قابل قبول منجر شود (Neuman and Wierenga, 2003). در کل زمانی که یک مدل مفهومی منفرد جریان و یا انتقال با موفقیت در مقابل داده‌های مشاهداتی کالیبره می‌شود، عدم قطعیت مدل مفهومی نادیده گرفته می‌شود و تجزیه و تحلیل عدم قطعیت فقط با در نظر گرفتن عدم قطعیت پارامتر انجام می‌گیرد. تجزیه و تحلیل سیستم بر اساس یک مدل مفهومی واحد مستعد خطاهای آماری می‌باشد و این نقص به نوبه خود منجر به اشتباهات در سیاست و طراحی بر اساس این مدل می‌شود.

نتایج کار Rojas et al. (2008) بر اساس یک سیستم مصنوعی مدل آب زیرزمینی نشان می‌دهد که ۵ تا ۳۰ درصد عدم قطعیت پیش‌بینی از ساختار مدل ناشی می‌شود. بنابراین در آنالیز عدم قطعیت مدل باید به عدم قطعیت مدل مفهومی توجه کافی شود. بسیاری از محققان اذعان دارند که عدم قطعیت ناشی از مدل مفهومی بسیار بزرگتر از عدم قطعیتی است که به وسیله مجموعه زیربهمینه از مقادیر پارامتر مدل ایجاد می‌شود و در مطالعات خود به بررسی این عدم قطعیت پرداخته‌اند (Neuman and Wierenga, 2003)؛ (Rojas et al., 2008)؛ (Ye et al., 2010)؛ (Zhang et al., 2014)؛ (Nettasana et al., 2012)؛ (Lukjan et al., 2016).

از جمله مدل‌های مفهومی محتمل در شبیه‌سازی منحنی پیشروی در ستون تجربی مدل‌های تعادلی کانوکشن- دیسپژن می‌باشد، در این مدل‌ها در برخی مواقع برازش ضعیفی بین داده‌های مشاهداتی و محاسباتی در منحنی پیشروی دیده می‌شود (Padilla et al., 2000). این مدل‌ها جهت شبیه‌سازی خصوصیات هیدرودینامیکی خاک مانند پراکندگی، سرعت حرکت آب در منافذ، ضریب تأخیر و تخلخل خاک مورد استفاده قرار می‌گیرند. مدل‌های غیر تعادلی کانوکشن- دیسپژن^۳ از جمله مدل‌های مفهومی جایگزین دیگر برای شرح انتقال آلاینده در محیط‌های درز و شکاف دار می‌باشند. در این مدل‌ها به دلیل برآورد پارامترهای بیشتر، قابلیت برازش داده‌های مشاهداتی و محاسباتی در منحنی پیشروی افزایش یافته است. علاوه بر پارامترهای بیان شده در مدل تعادلی کانوکشن- دیسپژن، این مدل قابلیت برآورد کسری از بخش متحرک آب^۴، ضریب انتقال جرم^۵ و پراکندگی زون متحرک را نیز دارد (Anamosa et al., 1990)؛ (Comegna et al., 2001). البته لازم به ذکر است که برآورد پارامتر بیشتر در این مدل‌ها منجر به افزایش عدم قطعیت ناشی از پیچیدگی مدل و همبستگی بالا در برآورد پارامتر می‌گردد (Engelhardt et al., 2014)؛ (Haitjema, 2011). در واقع در این مدل‌ها ممکن است که برازش خوبی بین داده‌های مشاهداتی و محاسباتی در منحنی پیشروی دیده شود ولی بدان معنا نخواهد بود که خصوصیات خاک از طریق این مدل‌ها به درستی محاسبه گردیده است. این اتفاق زمانی روی خواهد داد که مدل ایجاد کننده توصیف کاملی از واقعیت نباشد (Comegna et al., 2001).

۲- روش تحقیق

۲-۱- بررسی معادلات انتقال کانوکشن-دیسپرژن (CDE)

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

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

$$R = 1 + \rho K_d / \theta \quad (2)$$

$$C = C_e / C_0 \quad (3)$$

$$T = \frac{v}{L} = qt / \theta L \quad (4)$$

$$P = vL / D \quad (5)$$

R : فاکتور تأخیر، C : غلظت نسبی محلول، T : دوره تزریق، P : عدد پکلت، x : فاصله نسبی، چگالی بخش جامد بر حسب گرم بر سانتی-متر مکعب، v : سرعت متوسط آب در منافذ بر حسب سانتی-متر بر روز، q : سرعت داری بر حسب سانتی-متر بر روز، t : زمان بر حسب روز، L : طول ستون بر حسب سانتی-متر، D : ضریب پراکندگی بر حسب سانتی-متر مربع بر روز، C_e : غلظت خروجی و C_0 : غلظت ورودی.

در این تحقیق دو مدل تعادلی کانوکشن-دیسپرژن برای هر دو وضعیت سرعت جریان بالا و پایین با مشخصات زیر تهیه گردیده است:

۱- مدل تعادلی کانوکشن-دیسپرژن شماره ۱، (مدل CDE1) که در این مدل فقط پارامتر پراکندگی^۸ محاسبه می‌شود. ۲- مدل تعادلی کانوکشن-دیسپرژن شماره ۲، (CDE2) و در آن دو پارامتر پراکندگی و تداخل 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 و در واقع در خاک دو ناحیه را فرض می‌کند به طوری که فرایند کانوکشن در بخش متحرک و فرایند دیفیوژن در ناحیه غیرمتحرک صورت می‌گیرد. این مدل برای توصیف خاک‌های دارای ساختار درز و شکاف موثر می‌باشد (Hu and Brusseau, 1995). معادلات این

بعد از تعیین مجموعه مدل‌های جایگزین دو گزینه برای تعیین عدم قطعیت مدل مفهومی وجود دارد: ۱- در صورت بالا بودن احتمال پسین یک مدل نسبت به بقیه مدل‌های جایگزین، ارزیابی هر مدل به طور مجزا و انتخاب بهترین مدل صورت می‌گیرد، این شیوه زمانی که احتمال پسین یک مدل از ۰/۹ بیشتر باشد مؤثر خواهد بود. در این شیوه پیش‌بینی‌ها بر این اساس که بهترین مدل صحیح‌ترین مدل است صورت می‌گیرد (Ye et al., 2004). ۲- در صورتی که احتمال پسین به صورت توزیع شده بین مدل‌های جایگزین باشد، ارزیابی هر مدل به صورت جداگانه و پیش‌بینی نهایی در این حالت با استفاده از روش‌های میانگین‌گیری مدل^۶ یا طرح‌های وزن دهی صورت می‌گیرد (Hoeting, 1999). زمانی که چندین مدل محتمل در پیش‌بینی اعمال می‌شود، پیش‌بینی بهتری نسبت به یک مدل منفرد حاصل خواهد شد (Ye et al., 2010).

در این تحقیق برای بررسی عدم قطعیت مدل مفهومی‌های جایگزین در مدل‌های ستون تجربی انتقال آلاینده، از داده‌های ستون تجربی (Anamosa et al. (1990) و Tang et al. (2009) استفاده گردیده است. 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 اندازه-گیری منحنی پیشروی از آب تریتیوم دار برای عبور از ستون استفاده نمودند. از ستون اول جریان‌هایی با سرعت ۱۱۱ (سرعت بالا) و ۲/۷۱ (سرعت پایین) سانتی-متر در روز و از ستون دوم جریان‌هایی معادل ۳۶/۷ (سرعت بالا) و ۲/۶۹ (سرعت پایین) عبور داده شد.

هدف اصلی این مطالعه تعیین عدم قطعیت مدل‌های جایگزین انتقال آلاینده در ستون تجربی از طریق روش‌های انتخاب معیار جهت رسیدن به مدل قابل اعتماد با بهترین برآورد از پارامترهای ستون خاک می‌باشد. جهت رسیدن به این هدف چهار مدل مفهومی مختلف انتقال در دو ستون تجربی با دو وضعیت سرعت جریان بالا (q111) و پایین (q2.69) شامل مدل‌های تعادلی و غیر تعادلی، از منابع استفاده گردیده است. برای کالیبره کردن مدل‌ها در مقابل منحنی پیشروی اندازه‌گیری شده از کد CXTFIT تهیه شده توسط منحنی (Tang et al. (2009) استفاده گردید. در نهایت روش‌های محاسباتی احتمالات مدل روی مدل‌های مفهومی جایگزین جهت رسیدن به محتمل‌ترین مدل اعمال گردیده است.

مدل در زیر آمده است (Toride et al., 1995):

$$\beta R \left(\frac{\delta C_m}{\delta T} \right) + \frac{(1 - \beta) R \delta C_{im}}{\delta T}$$

$$= \left(\frac{1}{P} \right) \left(\frac{\delta C_m}{\delta x^2} \right) \quad (6)$$

$$- \delta C_m / \delta x$$

$$\frac{(1 - \beta) R \delta C_{im}}{\delta T} = \omega (C_m - C_{im}) \quad (7)$$

$$\beta = \frac{\theta_m + pfK_d}{\theta + pK_d} \quad (8)$$

$$Pm = \frac{v_m L}{D_m} \quad (9)$$

$$\omega = \alpha L / q \quad (10)$$

C_m : غلظت نسبی در بخش متحرک، C_{im} : غلظت نسبی در بخش غیرمتحرک، θ_m : تخلخل بخش متحرک، f : جذب در ناحیه متحرک، v_m : سرعت آب در ناحیه متحرک، D_m : ضریب پراکندگی بخش متحرک، a : ضریب درجه اول انتقال جرم، β : کسری از بخش متحرک آب، Pm : عدد پکلت در بخش متحرک، ω : ضریب انتقال جرم.

در این تحقیق دو مدل غیر تعادلی متحرک- غیر متحرک برای هر دو وضعیت سرعت جریان بالا و پایین با مشخصات زیر تهیه گردیده است.

۱- مدل غیر تعادلی متحرک- غیر متحرک شماره ۱، (MIM1) که در آن سه پارامتر پراکندگی، بخش متحرک آب و ضریب انتقال جرم محاسبه می‌شود. ۲- مدل غیر تعادلی متحرک- غیر متحرک شماره ۲، (MIM2) که در آن چهار پارامتر پراکندگی، کسری از بخش متحرک آب، ضریب انتقال جرم و زمان تزریق^۹ 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., 2010). این کد در اکسل قابلیت برآورد آنالیزهای حساسیت و عدم قطعیت را دارد. در این تحقیق هشت مدل انتقال در نرم‌افزار اکسل و تحت کد CXTFIT کالیبره گردیدند. پارامترهای محاسبه شده و عدم قطعیت در محاسبات پارامتر در این مدل‌ها در جدول ۱ آمده است. منحنی‌های پیشروی برای دو وضعیت سرعت جریان بالا q111 و سرعت جریان پایین q2.69 با چهار مدل CDE1، CDE2، MIM1

و MIM2 در شکل ۱ ارائه شده است.

۳-۲- روش‌های انتخاب معیار

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; Tsai and Li, 2010; Riva et al., 2011). امتیازدهی مدل‌های مفهومی مختلف و انتخاب بین این مدل‌ها از طریق روش‌های زیر صورت می‌گیرد: ۱- روش AIC یا Akaike Information Criterion (Akaike, 1974). ۲- روش تصحیح شده AIC یا Corrected Akaike Information Criterion (AICc, Hurvich and Tsai, 1989). ۳- روش بیزین یا Bayesian Information Criterion (Schwarz, 1978). ۴- روش KIC یا Kashyap Information Criterion (Kashyap, 1982). روش KIC از محبوب‌ترین روش‌ها بین روش‌های انتخاب معیار در حوزه مدل‌سازی آب زیرزمینی می‌باشد و توسط محققان زیادی استفاده گردیده است (Neuman, 2003; Ye et al., 2004, 2005; Neuman and Wierenga, 2003; Foglia et al., 2010; Singh et al., 2010; Singh et al., 2013; Giacopetti et al., 2016).

اگر k مجموعه مدل جایگزین M_k در نظر گرفته شود، معیارهای انتخاب مدل با فرض گوسی بودن تابع تشابهات را می‌توان از طریق فرمول‌های زیر حل کرد (Ye et al., 2008a):

$$AIC_k = n \ln(\sigma^2) + 2 N_k \quad (11)$$

$$AIC_{ck} = n \ln(\sigma^2) + 2N_k + \frac{2N_k(N_k+1)}{N - N_k - 1} \quad (12)$$

$$AIC_{ck} = n \ln(\sigma^2) + 2N_k + \frac{2N_k(N_k+1)}{N - N_k - 1} \quad (13)$$

$$BIC_k = n \ln(\sigma^2) + N_k \ln(N) \quad (14)$$

$$\sigma^2 = SSR / N \quad (15)$$

$$KIC = (N - (N_k - 1)) \ln(\sigma^2) - (N_k - 1) \ln(2\pi) + \ln |X^T \omega X| \quad (16)$$

$$SSR = \sum_{i=1}^n [y_i - \hat{y}_i]^2 \quad (17)$$

n : تعداد مشاهدات؛ N_k : تعداد پارامترهای مدل k : SSR : مجموع مربعات باقیمانده؛ y_i : مقدار داده مشاهداتی؛ \hat{y}_i : مقدار داده محاسباتی؛ ω : وزن خطای مدل؛ X : ماتریکس حساسیت یا ماتریکس جاکوبین.

Table 1. Parameter estimation and RMSE result
 جدول ۱- مقادیر پارامترهای محاسباتی و خطای جذر میانگین مربعات

Models	λ	θ	β	ω	T	RMSE	Grade
q=111	CDE1	86.60 ± 6.62				0.0437	4
	CDE2	36.39 ± 3.47	0.373 ± 0.01			0.0247	3
	MIM1	25.00 ± 2.19		0.536 ± 0.02	0.193 ± 0.02	0.0121	2
	MIM2	25.02 ± 2.25		0.535 ± 0.02	0.194 ± 0.02	1.431 ± 0.01	0.0120
q=2.69	CDE1	21.09 ± 0.64				0.0161	4
	CDE2	22.00 ± 0.05	0.551 ± 0.01			0.0126	3
	MIM1	9.89 ± 3.16		0.600 ± 0.09	1.195 ± 0.21	0.0125	2
	MIM2	9.27 ± 3.59		0.585 ± 0.1	1.233 ± 0.25	2.876 ± 0.01	0.0124

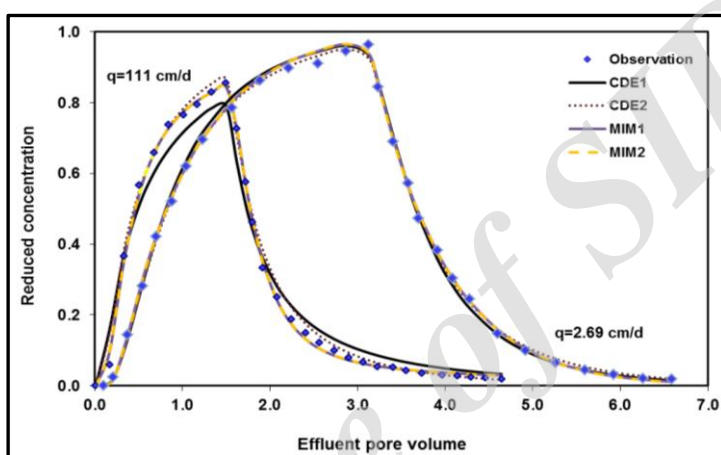


Fig. 1. Measured and Simulated breakthrough curve
 شکل ۱- منحنی پیشروی (BTC) برای داده‌های اندازه‌گیری شده و شبیه‌سازی شده

در چهارچوب روش بیزین اگر یک مجموعه مدل جایگزین K وجود داشته باشد، $p(M_k|D)$: احتمال پسین مدل M_k و از طریق فرمول زیر محاسبه می‌شود:

$$p(M_k|D) = \frac{p(D|M_k) p(M_k)}{\sum_{i=1}^K p(D|M_i) p(M_i)} \quad (18)$$

$$p(D|M_k) \quad (19)$$

$$= \int p(D|\theta_k, M_k) p(\theta_k|M_k) d\theta_k$$

$p(M_k)$: احتمال پیشین مدل M_k ; $p(D|M_k)$: تشابه حاشیه‌ای یا ادغام شده مدل M_k ; θ_k : مجموعه پارامتر همراه با مدل M_k ; $p(\theta|M_k)$: احتمال پیشین پارامتر که یا برابر فرض می‌شود و یا بر اساس دانش متخصص تعیین می‌گردد؛ $p(D|\theta_k, M_k)$: احتمال مشترک مدل k و پارامتر مدل. در این مطالعه احتمال پیشین مدل‌های مفهومی برابر در نظر گرفته شده است.

۲-۴- روش میانگین‌گیری بیزین^{۱۰}

تکنیک بیزین به وسیله Kass and Raftery (1995) و Hoeting et al. (1999) ارائه شده است. این روش بر اساس فرمول بیزین برای به دست آوردن احتمال پسین مدل‌های مفهومی مختلف می‌باشد. روش BMA برای برآورد توزیع احتمال پسین برای هر مدل 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. که احتمال پیشین مدل با استفاده از دانش متخصص تعیین می‌شود (Ye et al., 2005, 2008a,b) و یا اینکه می‌تواند برای همه مدل‌ها برابر در نظر گرفته شود. در این روش مدل‌هایی با عملکرد پیش‌بینی بهتر، وزن‌های بالاتری را دریافت می‌کنند.

$$P(D|M_k) \approx \exp(-\frac{1}{2}IC_k) \quad (20)$$

$$\Delta IC_k = IC_k - IC_{min} \text{ and } IC_{min} = \min_k\{IC_k\} \quad (21)$$

$$p(M_k|D) = \frac{\exp(-\frac{1}{2}\Delta IC_k)p(M_k)}{\sum_{l=1}^k \exp(-\frac{1}{2}\Delta IC_l)p(M_l)} \quad (22)$$

IC: می‌تواند AIC، AICC، BIC و KIC باشد.

در این مرحله بعد از کالیبراسیون ۸ مدل و محاسبه پارامترهای آن‌ها، بر اساس مجموع مربعات باقی‌مانده در تابع تشابهات گوسین معیارهای انتخاب مدل محاسبه گردیدند. در نهایت احتمال پسین مدل‌ها با استفاده از معیارهای انتخاب مدل و بر اساس روش میانگین‌گیری حداکثر تشابهات بیزین با احتمال پیشین برابر محاسبه گردید و نتایج آن در جدول ۲ و ۳ برای هر دو وضعیت سرعت جریان بالا و پایین آمده است. در محاسبات KIC حساسیت مدل تحت کد CXTFIT در نرم‌افزار اکسل محاسبه گردیده است.

۲-۶- روش سری زمانی در حذف همبستگی بین داده‌ها

روش سری زمانی برای بررسی تأثیر کواریانس خطا در برآورد لگاریتم منفی تشابهات (NLL) و احتمالات مدل‌های سری زمانی مورد استفاده قرار می‌گیرد.

برای محاسبه مقدار تشابه ادغام شده مدل مفهومی، روش BMA می‌تواند به دو طبقه بندی وسیع تقسیم شود:

۱- روش معیار انتخاب مدل بر اساس روش میانگین‌گیری بیزین (BMA)IC-BMA یا روش میانگین‌گیری حداکثر تشابهات بیزین (MLBMA)؛ ۲- روش مونت کارلو بر اساس روش BMA (MC_BMA)، (Kass and Raftery, 1995)، از جمله روش‌هایی موجود در برآورد مونت کارلو می‌توان به روش برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین حسابی یا AME و برآورد احتمالات مدل از طریق میانگین هارمونیک یا HME نام برد (Liu et al., 2016).

۲-۵- روش میانگین‌گیری حداکثر تشابهات بیزین

این روش توسط Neuman (2003) پیشنهاد شده است. این شیوه برآورد لاپلاس بر اساس تقریب گوسین در حدود بهترین برآورد پارامتر می‌باشد (Singh et al., 2010; Neuman, 2003; Lu et al., 2013; Ye et al., 2010). احتمال پسین مدل $p(M_k|D)$ در این روش از طریق زیر محاسبه می‌گردد (Ye et al., 2004):

Table 2. The result of model selection criteria and model probability for Experiment q=111

جدول ۲- نتایج معیار انتخاب مدل و احتمالات پسین مدل در وضعیت q=111

q=111								
Models	CDE1	CDE2	MIM1	MIM2	P- CDE1	P- CDE2	P- MIM1	P- MIM2
AIC	-185.83	-218.08	-259.05	-257.08	0.00	0.00	72.80	27.20
AICc	-185.69	-217.63	-258.13	-255.48	0.00	0.00	79.00	21.00
BIC	-184.43	-215.27	-254.85	-251.48	0.00	0.00	84.40	15.60
KIC	-197.84	-223.49	-259.34	-251.47	0.00	0.00	98.10	1.90

Table 3. The result of model selection criteria and model probability for Experiment q=2.69

جدول ۳- نتایج معیار انتخاب مدل و احتمالات پسین مدل در وضعیت q=2.69

q=2.69								
Models	CDE1	CDE2	MIM1	MIM2	P- CDE1	P- CDE2	P- MIM1	P- MIM2
AIC	-229.11	-245.67	-239.79	-237.92	0.02	93.1	4.9	1.9
AICc	-228.95	-245.19	-238.79	-236.19	0.03	95.1	3	1.1
BIC	-227.78	-243.01	-235.79	-232.60	0.05	96.8	2.6	0.5
KIC	-238.44	-248.22	-246.84	-239.43	0.5	65.7	33	0.8

در روش KIC خطای Ce_k نه تنها در بخش لگاریتم تشابهات منفی نقش دارد بلکه در بخش ماتریکس فیشر نیز موثر خواهد بود و این واژه به صورت $|X^T C_{ek} X|$ نوشته خواهد شد. اگر محاسبات احتمالات مدل با استفاده از معیارهای انتخاب مدل از خطای مدل صرف نظر نماید نتایج خروجی احتمالات مدل قطعیت پایینی خواهد داشت.

با توجه به اینکه داده‌های استفاده شده در مدل‌های ستون تجربی، داده‌هایی از نوع سری زمانی می‌باشند، بنابراین احتمال وجود همبستگی زمانی بین داده‌ها و در نتیجه خطای مدل بالا می‌باشد و این هم همبستگی در صورتی که به مقدار زیادی باشد نتایج احتمال مدل را تحت تأثیر قرار خواهد داد. بنابراین در این بخش محاسبات مجدد احتمال مدل بعد از حذف همبستگی زمانی بین داده‌ها صورت گرفته است. در هر دو وضعیت سرعت جریان بالا و پایین و در هشت مدل تعادلی و غیر تعادلی انتقال، همبستگی زمانی با روش مدل اتورگرسیون سری p مورد بررسی قرار گرفته است. در وضعیت سرعت جریان بالا و در مدل تعادلی انتقال (CDE1)، همبستگی زمانی با روش مدل اتورگرسیون سری p مورد بررسی قرار گرفته است. در شکل ۲ نمودار ACF و PCF برای مدل CDE1 ارائه گردیده است. قسمت‌های خط چین در نمودار معادل فاصل اطمینان ۹۵ درصد می‌باشد که از رابطه $\pm 2/\sqrt{N}$ به دست آمده است (N: تعداد داده استفاده شده در مدل سری زمانی).

مدل سری زمانی به صورت $AR(1)$ اجرا گردید. در شکل ۳ نمودار ACF و PCF برای مدل CDE1 بعد از اجرای مدل سری زمانی ارائه گردیده است. در شکل ۴ نمودارهای PACF در مدل‌های CDE2، MIM1 و MIM2 نیز ارائه گردیده است. در وضعیت سرعت جریان پایین نیز در هر چهار مدل تعادلی و غیر تعادلی، همبستگی زمانی با روش مدل اتورگرسیون سری p مورد بررسی قرار گرفته است و مراحل مربوط به مدل سری زمانی شبیه به وضعیت سرعت جریان بالا روی آن‌ها اجرا گردید و برای جلوگیری از ازدحام نتایج در اینجا فقط نتایج نهایی مربوط به این مدل‌ها ارائه گردیده است.

۲-۷- صحت سنجی^{۱۲}

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

اگر $f_k(B_k)$ نمایانگر مدل M_k با پارامتر B_k و دارای خطای مدل n_k خطای اندازه‌گیری \mathcal{E} و خطای کل e_k باشد در این حالت داده مشاهداتی D را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$D = f_k(B_k) + e_k = f_k(B_k) + n_k + \mathcal{E} \quad (23)$$

با فرض اینکه e_k دارای توزیع گوسین و با میانگین صفر و ماتریکس کواریانس Ce_k باشد، آنگاه واژه لگاریتم منفی تشابهات (NLL) در معادلات معیار انتخاب مدل به صورت زیر نوشته خواهد شد (Finsterle and Zhang, 2011):

$$NLL = -2\ln[L(B_k|D)] = N\ln(2\pi) + \quad (24)$$

$$\ln|C_{ek}| + r^T C_{ek}^{-1} r$$

در داده‌های مشاهداتی سری زمانی $D_t = \{D_1, D_2, \dots, N\}$ خواهیم داشت:

$$D_t = f_k(B_k) + e_{k,t} \quad t = 1, 2, \dots, N \quad (25)$$

در این بررسی خطای اندازه‌گیری یعنی \mathcal{E} وجود ندارد و برابر با صفر می‌باشد.

مدل‌های سری زمانی متفاوتی در شبیه‌سازی همبستگی زمانی در حذف خطای مدل $e_{k,t}$ وجود دارد، این مدل‌ها شامل: مدل اتورگرسیون سری p یا $AR(p)$ ، مدل میانگین متحرک سری q یا $MA(q)$ و مدل ترکیبی از این دو حالت از اتورگرسیون سری p و میانگین متحرک سری q یا $ARMA(p,q)$ می‌باشند.

در این بررسی از مدل اتورگرسیون سری p یا $AR(p)$ استفاده گردیده است. در این روش کواریانس Ce_k از طریق فرمول زیر محاسبه می‌گردد (Lu et al., 2013):

$$C_{ek} = \delta^2 V \quad (26)$$

$$V = \begin{bmatrix} 1 & p_1 & \dots & p_{N-1} \\ p_1 & & & \vdots \\ \vdots & & & p_1 \\ p_{N-1} & \dots & p_1 & 1 \end{bmatrix} \quad (27)$$

$$p_1 = a_1 p_{1-1} + a_2 p_{1-2} \quad (28)$$

p_1 برابر با ضریب همبستگی در لگ اول می‌باشد و a پارامتر مدل سری زمانی می‌باشد. در حالتی که $AR(1)$ باشد ماتریکس V را می‌توان به صورت زیر نوشت (Seber and Wild, 2003):

$$V = \begin{bmatrix} 1 & a & \dots & a^{N-1} \\ a & & & \vdots \\ \vdots & & & a \\ a^{N-1} & \dots & a & 1 \end{bmatrix} \quad (29)$$

وضعیت سرعت جریان بالا $q=111$ از داده‌ها و نتایج کالیبراسیون چهار مدل مشابه در وضعیت سرعت بالا $q=36.7$ در ستون دیگر استفاده گردید.

اعتبارسنجی مدل نیاز به روشی جهت امتیاز بندی مدل‌های مختلف با توجه به قابلیت مدل‌ها در پیش‌بینی می‌باشد (Foglia et al., 2007؛ Zhang and Yang, 2015)؛ (Good, 2013). در این بررسی برای صحت سنجی چهار مدل در

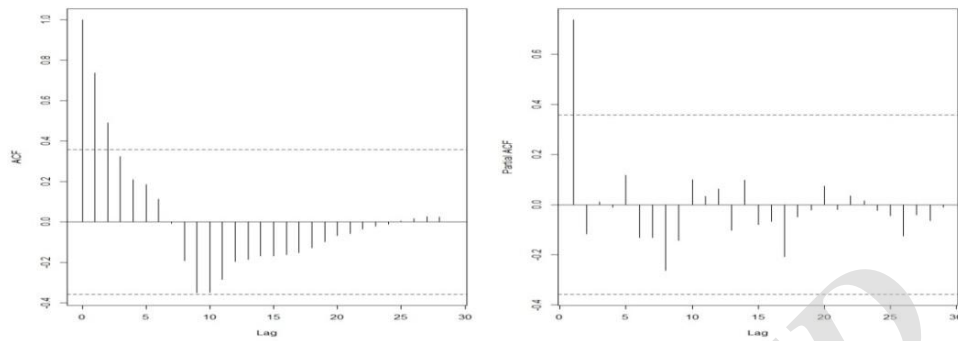


Fig. 2. ACF and PACf plots for exploring the number of p in AR (p) model (CDE1)

شکل ۲- نمودار ACF و PACF برای شناسایی عدد p در مدل AR(p) برای مدل CDE1

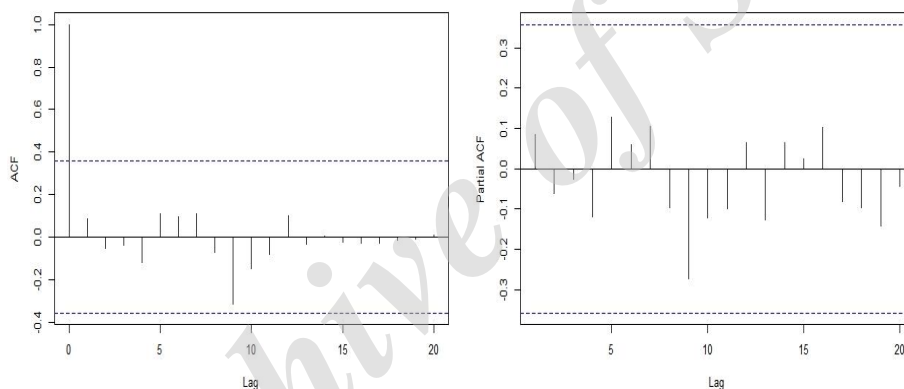


Fig3: ACF and PACf plots after calculating of correlation

شکل ۳- نمودار ACF و PACF بعد از اجرای مدل سری زمانی در مدل CDE1

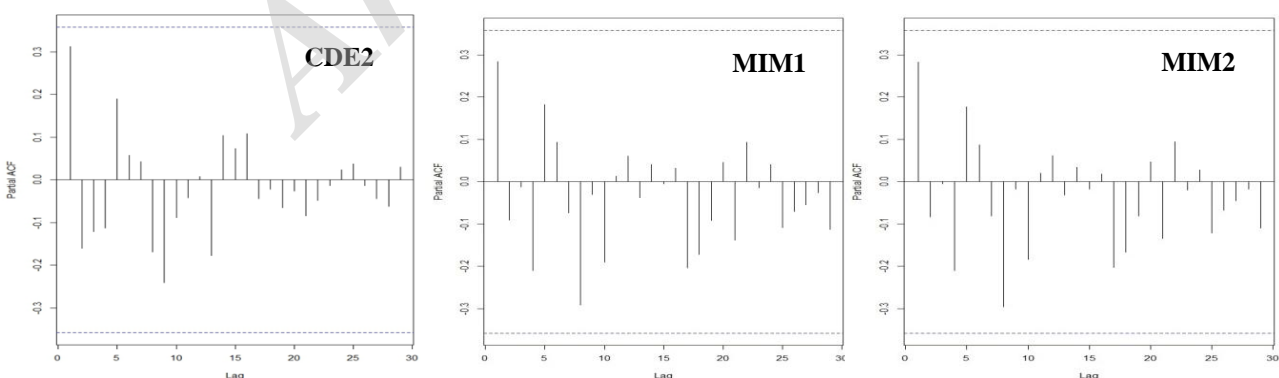


Fig. 4. ACF and PACf for CDE2, MIM1 and MIM2 models for exploring the number of p in AR (p) model

شکل ۴- نمودار PACF برای شناسایی عدد p در مدل AR(p) برای مدل‌های CDE2، MIM1 و MIM2

برای صحت سنجی چهار مدل در وضعیت سرعت جریان پایین $q=2.69$ از داده‌ها و نتایج کالیبراسیون چهار مدل مشابه در وضعیت سرعت پایین $q=2.71$ 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. در محاسبات احتمال مدل مجدداً همبستگی بین داده‌ها اندازه‌گیری و خطای مدل از داده‌ها حذف گردید و برای جلوگیری از ازدحام نتایج، احتمالات مدل فقط در وضعیت بعد از اجرای مدل‌های سری زمانی ارائه گردیده است.

به عنوان مثال در ابتدا مدل CDE1 در وضعیت $q36.7$ کالیبره گردید و بعد از کالیبراسیون پارامترهای این مدل در مدل CDE1 در وضعیت $q111$ قرار داده شد و بدون انجام فرایند کالیبراسیون، میزان خطای جذر میانگین مربعات، مجموع مربعات باقی‌مانده و روش‌های معیار انتخاب مدل محاسبه گردید. این عمل برای مدل‌های CDE2، MIM1 و MIM2 نیز انجام گرفت.

و به عنوان یک مثال در وضعیت سرعت جریان پایین مدل MIM1 در وضعیت $q2.71$ کالیبره گردید و بعد از کالیبراسیون پارامترهای این مدل در مدل MIM1 در وضعیت $q2.69$ قرار داده شد و بدون انجام فرایند کالیبراسیون، میزان خطای جذر میانگین مربعات، مجموع مربعات باقی‌مانده و روش‌های معیار انتخاب مدل محاسبه گردید. این عمل برای مدل‌های CDE1، CDE2 و MIM2 نیز انجام گرفت.

۳- بحث و بررسی

متفاوت بودن شکل نمودار پیشروی در دو وضعیت $q111$ و $q2.69$ در شکل ۱ به دلیل تفاوت در سرعت جریان آب تریتیوم دار در دو ستون می‌باشد. به طوری که در وضعیت سرعت جریان بالا ردياب در خروجی ستون به دلیل حرکت سریعتر در ستون خاک، سریعتر شناسایی شده و در فاصله زمانی کوتاه‌تری به حداکثر مقدار خود رسیده است (قسمت بالا رونده منحنی پیشروی) و در نهایت به طور کامل از ستون خارج می‌گردد (قسمت پایین رونده نمودار پیشروی) همه این مراحل در وضعیت سرعت جریان پایین نسبت به سرعت جریان بالا با تأخیر انجام می‌گیرد. با توجه به نمودار پیشروی (شکل ۱)، 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 و امتیازات مربوط به آن در جدول ۱، در مدل MIM2 مشاهده می‌شود. بنابراین در هر دو وضعیت سرعت جریان بالا و پایین، کالیبره کردن تعداد بیشتری پارامتر منجر به بهبود کیفیت مدل می‌شود (این کیفیت فقط از دیدگاه میزان برازش بین داده‌های محاسباتی و مشاهداتی می‌باشد). (Tang et al. 2009) نیز در مطالعه خود به بررسی RMSE مدل‌های جایگزین پرداختند و ایشان اشاره کردند که در وضعیت سرعت جریان بالا بین RMSE در مدل CDE2 و MIM1 اختلاف زیادی است ($0.247 - 0.121$)، در حالی که در وضعیت سرعت جریان پایین اختلاف زیادی بین مقدار RMSE در این دو مدل دیده نمی‌شود ($0.126 - 0.125$). با توجه به جدول ۱ و مقادیر عدم قطعیت پارامتر برای پارامتر پراکنده‌گی که بین هر چهار مدل در هر دو وضعیت مشترک می‌باشد، کمترین عدم قطعیت پارامتر در وضعیت سرعت جریان بالا در مدل MIM1 و در وضعیت سرعت جریان پایین در مدل CDE2 مشاهده می‌گردد.

۳-۱- روش معیار انتخاب مدل (AIC، AICC، BIC و KIC) بر اساس روش میانگین‌گیری بیزین در محاسبه احتمالات مدل

در روش‌های انتخاب معیار، مدلی که کمترین مقدار IC را داشته باشد بالاترین احتمال مدل به آن تعلق می‌گیرد. با توجه به جدول ۲ در همه روش‌ها بالاترین احتمال مدل و کمترین عدم قطعیت در وضعیت سرعت بالا در مدل MIM1 می‌باشد چون در این وضعیت کمترین مقدار AIC، AICC، BIC و KIC در این مدل دیده می‌شود و بیشترین احتمال مدل در همه روش‌ها مربوط به مدل MIM1 می‌باشد ($0.72/8$ ، $0.78/8$ ، $0.84/4$ و $0.89/1$). با توجه به جدول ۳ در وضعیت سرعت جریان پایین بالاترین احتمال مدل در همه روش‌ها در مدل CDE2 مشاهده می‌گردد، چون در این وضعیت کمترین مقدار AIC، AICC، BIC و KIC در مدل CDE2 دیده می‌شود و بیشترین احتمال مدل در همه روش‌ها مربوط به این مدل می‌باشد ($0.93/1$ ، $0.95/1$ ، $0.96/8$ و $0.65/7$). توزیع احتمالات به خصوص در وضعیت سرعت جریان بالا بین مدل‌های مختلف پایین می‌باشد. در هر دو وضعیت سرعت جریان بالا و پایین، کمترین عدم قطعیت در مدل CDE1 مشاهده می‌گردد و بنابراین پارامتر محاسبه شده در این مدل قابلیت اطمینان پایینی دارد.

۳-۲- محاسبات سری زمانی در وضعیت سرعت جریان بالا (q=111)

محاسبات سری زمانی در حذف همبستگی در داده‌هایی با ماهیت سری زمانی برای اولین بار توسط Lu et al. (2013) صورت گرفت. نتایج بررسی‌های ایشان نشان داد که حذف همبستگی بین داده‌ها به خصوص در مدل‌هایی با درجه بالای همبستگی، تأثیر بسزایی در تغییر نتایج احتمالات مدل دارد. در آن مطالعه قبل از حذف همبستگی یکی از مدل‌های جایگزین در روش KIC احتمال ۱۰۰ درصد را به خود اختصاص داده بود که بعد از حذف همبستگی احتمال به ۵۶ درصد رسید. بنابراین با توجه به اهمیت تأثیر این همبستگی در نتایج خروجی احتمال مدل در این مطالعه نیز سعی بر حذف همبستگی بین داده‌های سری زمانی گردید. با توجه به نمودار ACF (شکل ۲)، به دلیل اینکه مقدار ACF در تعداد معینی از لگ‌ها به صفر نرسیده است بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که مدل سری زمانی Ap در محاسبه خطای مدل و حذف همبستگی بین داده‌ها مناسب می‌باشد (Cryer and Chan, 2008). در نمودار PACF تعداد لگ‌هایی که مقدار بالاتری از خط فاصله اطمینان دارند، به عنوان مقدار p در مدل سری زمانی $AR(p)$ تعیین می‌گردند. با توجه به نمودار PCF در شکل ۲ عدد p در مدل CDE1 برابر با یک می‌باشد، بنابراین مدل سری زمانی به صورت $AR(1)$ اجرا گردید. بعد از اجرای مدل در صورت حذف همبستگی بین داده‌ها، همه لگ‌ها در نمودار PACF باید زیر خط فاصله اطمینان واقع شده باشند. همان طور که در شکل ۳ مشاهده می‌گردد این مدل به درستی اجرا گردیده است و مقدار پارامتر مدل سری زمانی (a)، 0.74 محاسبه گردیده است. بعد از قرار دادن این مقدار پارامتر در محاسبه کواریانس Ce_k (رابطه ۲۶)، محاسبات مجدد لگاریتم منفی تشابهات و در نهایت معیارهای انتخاب مدل و احتمال مدل برای CDE1 مجدداً محاسبه گردید.

با توجه به نمودارهای PACF در شکل ۴، در مدل‌های CDE2، MIM1 و MIM2 همه لگ‌ها زیر خط فاصله اطمینان واقع شده‌اند بنابراین همبستگی بین داده‌ها در این مدل‌ها وجود ندارد و مقدار p در اینها برابر با صفر می‌باشد. برای محاسبه ماتریکس کواریانس خطا در این مدل‌ها از ماتریکس دیاگونال استفاده گردید و اعداد واقع در دیاگونال ماتریکس، واریانس باقی‌مانده مشاهداتی و محاسباتی قرار داده شد. در این مدل‌ها نیز محاسبات مجدد لگاریتم منفی تشابهات و در نهایت معیارهای انتخاب مدل و احتمال مدل انجام گردید. نتایج معیار انتخاب مدل و احتمالات مدل بعد از اجرای مدل سری زمانی

در جدول ۴ آمده است. با توجه به جدول مشاهده می‌شود که مدل CDE1 تغییرات قابل ملاحظه‌ای در احتمال مدل نشان می‌دهد ولی در کل به دلیل اینکه احتمال این مدل در مقایسه با مدل MIM1 بسیار پایین می‌باشد، تغییر مقدار احتمال این مدل تأثیر بالایی روی احتمالات دیگر مدل‌ها نداشته است.

۳-۳- محاسبات سری زمانی در وضعیت سرعت جریان پایین (q=2.69)

در وضعیت سرعت جریان پایین و در مدل تعادلی انتقال (CDE1)، همبستگی زمانی با روش مدل اتورگرسیون سری p مورد بررسی قرار گرفته است. مدل سری زمانی به صورت $AR(1)$ ، برای این مدل اجرا گردید و مقدار پارامتر مدل سری زمانی (a)، 0.41 محاسبه شد. بعد از قرار دادن این مقدار پارامتر در محاسبه کواریانس Ce_k ، محاسبات مجدد لگاریتم منفی تشابهات و در نهایت معیارهای انتخاب مدل و احتمال مدل برای CDE1 مجدداً محاسبه گردید. در مدل‌های CDE2، MIM1 و MIM2 همبستگی بین داده‌ها در این مدل‌ها وجود نداشت. برای محاسبه ماتریکس کواریانس خطا در این مدل‌ها از ماتریکس دیاگونال استفاده گردید. در این مدل‌ها نیز محاسبات مجدد لگاریتم منفی تشابهات و در نهایت معیارهای انتخاب مدل و احتمال مدل انجام گردید. نتایج معیار انتخاب مدل و احتمالات مدل بعد از اجرای مدل سری زمانی در جدول ۵ آمده است. با توجه به جدول مشاهده می‌شود که حذف همبستگی در مدل CDE1 تغییرات قابل ملاحظه‌ای در احتمال مدل به خصوص در روش KIC ایجاد نموده است و دلیل این امر این است که در روش KIC، خطای مدل در بخش فیشر معادله نیز اجرا می‌گردد.

با توجه به احتمالات محاسبه شده مدل‌ها از طریق روش‌های انتخاب معیار و بعد از حذف خطای مدل از داده‌های سری زمانی، می‌توان نتیجه گرفت که در وضعیت سرعت جریان بالا، بالاترین احتمال مدل و کمترین عدم قطعیت در مدل MIM1 و در وضعیت سرعت جریان پایین، بالاترین احتمال مدل در 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 و طی فرایند دیفیوژن تعادل فیزیکی بین بخش متحرک و غیر متحرک برقرار

Table 4. The result of model selection criteria and model probability for Experiment q=111 after correlation
 جدول ۴- نتایج معیار انتخاب مدل و احتمالات پسین مدل در وضعیت سرعت بالا q=111 بعد از حذف همبستگی در داده‌ها

q=111								
	CDE1	CDE2	MIM1	MIM2	P- CDE1	P- CDE2	P- MIM1	P- MIM2
AIC	-123.50	-131.95	-173.89	-171.92	0.00	0.00	72.90	27.10
AICc	-123.36	-131.50	-172.97	-170.32	0.00	0.00	79.00	21.00
BIC	-122.10	-129.15	-169.69	-166.31	0.00	0.00	84.40	15.60
KIC	-129.97	-129.46	-165.50	-157.68	0.00	0.00	98.00	2.00

Table 5. The result of model selection criteria and model probability for Experiment q=2.69 after correlation
 جدول ۵- نتایج معیار انتخاب مدل و احتمالات پسین مدل در وضعیت سرعت پایین q=2.69 بعد از حذف همبستگی در داده‌ها

q=2.69								
	CDE1	CDE2	MIM1	MIM2	P- CDE1	P- CDE2	P- MIM1	P- MIM2
AIC	-155.29	-166.22	-160.17	-158.41	0.40	93.20	4.50	1.90
AICc	-155.14	-165.74	-159.17	-156.67	0.50	95.00	3.60	1.00
BIC	-153.96	-163.56	-156.18	-153.08	0.80	96.30	2.40	0.50
KIC	-157.05	-159.88	-158.13	-150.86	14.60	59.80	24.90	0.70

بهتری نسبت به مدل‌های CDE دارد و بیان نمودند که در وضعیت سرعت جریان پایین مدل CDE در توصیف داده‌های مشاهداتی مدلی مناسب می‌باشد.

۳-۴- صحت سنجی مدل‌های جایگزین انتقال آلاینده

بعد از صحت سنجی مدل‌ها نتایج خطای جذر میانگین مربعات برای دو وضعیت سرعت جریان بالا و پایین در جدول ۶ آمده است. با توجه به جدول در وضعیت سرعت جریان بالا بهترین عملکرد از نظر خطای جذر میانگین مربعات در مدل MIM1 و در وضعیت سرعت جریان پایین مدل MIM2 مشاهده می‌شود. بنابراین مدل‌های MIM قابلیت بالاتری نسبت به مدل‌های CDE در صحت‌سنجی مدل از دیدگاه کیفیت برازش بین داده‌های مشاهداتی و محاسباتی دارند و دلیل این امر محاسبه تعداد پارامترهای بیشتر در مدل MIM نسبت به مدل CDE می‌باشد. محققان زیادی بیان نمودند که افزایش تعداد پارامتر در مدل‌های مفهومی جایگزین هرچند که باعث افزایش کیفیت برازش بین داده‌های محاسباتی و مشاهداتی می‌گردد ولی صرفاً منجر به کیفیت پیش‌بینی آن مدل نمی‌شود (Engelhardt et al., 2014; Hill, 2006; Simmons and Hunt, 2012; Haitjema, 2011). نتایج روش‌های انتخاب مدل و احتمالات مدل در جدول‌های ۷ و ۸ در تأیید این گفته آمده است و احتمالات مدل در این بخش نیز نتایج قبل از صحت سنجی مدل را تأیید می‌نماید. در وضعیت سرعت جریان بالا، بالاترین احتمال مدل

می‌گردد، بنابراین در این وضعیت مدل CDE با فرض اینکه کل آب موجود در محیط متخلخل در تعادل فیزیکی است، توصیف مناسبی برای بررسی جریان آب در این خاک می‌باشد. در همه روش‌ها در وضعیت سرعت جریان پایین، مدل CDE1 و مدل MIM2 و در وضعیت سرعت جریان بالا، کمترین احتمالات مدل را مدل‌های CDE1 و CDE2 به خود اختصاص داده‌اند. بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که در بررسی‌های چند مدلی، اعتماد به نتایج برازش مدل بعد از کالیبراسیون کافی نمی‌باشد و محاسبات احتمال مدل‌ها الزامی است. لازم به ذکر است که محاسبات احتمالات مدل بر روی داده‌های دو ستون با وضعیت سرعت جریان بالا (q36.7) و وضعیت سرعت جریان پایین (q2.71) نیز صورت گرفته است و نتایج احتمالات مدل در وضعیت قبلی را تأیید نمودند. جهت جلوگیری از ازدحام جداول مربوطه ارائه نگردیده است. نتایج کلی در این دو وضعیت نشان می‌دهد که در همه روش‌های محاسباتی احتمالات مدل در وضعیت سرعت جریان بالا (q36.7)، بالاترین احتمال مدل و کمترین عدم قطعیت به مدل MIM1 و در وضعیت سرعت جریان پایین (q2.71)، بالاترین احتمال مدل به CDE2 تعلق گرفت.

نتایج به دست آمده در این مطالعه در تأیید با نتایج مطالعات (Tang et al., 2009) می‌باشد. ایشان برای مقایسه بین مدل‌های جایگزین (CDE1، CDE2 و MIM1) از روش مونت کارلو و آنالیز حساسیت استفاده نمودند. با توجه به هر دو روش ایشان به این نتیجه رسیدند که در وضعیت سرعت جریان بالا مدل MIM عملکرد

برای بررسی عدم قطعیت مدل جهت رسیدن به مدل قابل اعتماد با بهترین برآورد از پارامترهای ستون خاک تهیه گردید.

در محاسبات عدم قطعیت به دلیل اینکه احتمال مدل پسین در مدل‌های مفهومی مختلف انتقال، به یک مدل تعلق گرفته است، انتخاب مدل صورت می‌گیرد و جهت انجام پیش‌بینی‌های بعدی نیازی به اعمال روش‌های میانگین‌گیری نمی‌باشد. در وضعیت سرعت جریان پایین هر چند که بهترین برازش در منحنی پیشروی در مدل MIM2 وجود دارد ولی در بررسی‌های عدم قطعیت، این مدل دارای احتمال پایین و درجه بالایی از عدم قطعیت می‌باشد و بیشترین احتمال مدل در CDE2 وجود دارد.

در مدل MIM1 و در وضعیت سرعت جریان پایین، بالاترین احتمال مدل در CDE2 مشاهده می‌گردد. در واقع بهترین عملکرد مدل در صحت‌سنجی با توجه به نتایج احتمالات مدل، در وضعیت سرعت جریان بالا در MIM1 و در وضعیت جریان پایین در CDE2 مشاهده می‌شود.

۴- نتیجه‌گیری

در این مطالعه چهار مدل مفهومی تعادلی و غیر تعادلی جایگزین انتقال شامل CDE1، CDE2، MIM1 و MIM2 در دو ستون تجربی با دو وضعیت سرعت جریان بالا (q111) و پایین (q2.69)

Table 6. The result of RMSE and model ranking according cross validation result
جدول ۶- نتایج خطای جذر میانگین مربعات و امتیاز بندی مدل بر اساس آن بعد از صحت سنجی مدل‌ها

	Model	RMSE	Ranking		Model	RMSE	Ranking
q=111	CDE1	0.046	3	q=2.69	CDE1	0.033	3
	CDE2	0.063	4		CDE2	0.032	2
	MIM1	0.037	1		MIM1	0.037	4
	MIM2	0.043	2		MIM2	0.03	1

Table7. The result of model selection criteria and model probability for cross validation in Experiment q=111 by Experiment q=36.7

جدول ۷- نتایج معیار انتخاب مدل و احتمالات پسین مدل در وضعیت صحت سنجی مدل‌های سرعت بالا q=111 با وضعیت q=36.7

	CDE1	CDE2	MIM1	MIM2	P- CDE1	P- CDE2	P- MIM1	P- MIM2
AIC	-115.5	-94.0	-137.6	-127.8	0.0	0.0	99.2	0.8
AICc	-115.4	-93.6	-136.7	-126.2	0.0	0.0	99.5	0.5
BIC	-114.1	-91.2	-133.4	-122.2	0.0	0.0	99.6	0.4
KIC	-122.5	-101.3	-138.1	-125.4	0.0	0.0	99.8	0.2

Table 8. The result of model selection criteria and model probability for cross validation in Experiment q=2.69 by Experiment q=2.71

جدول ۸- نتایج معیار انتخاب مدل و احتمالات پسین مدل در وضعیت صحت سنجی مدل‌های سرعت پایین q=2.69 با وضعیت q=2.71

	CDE1	CDE2	MIM1	MIM2	P- CDE1	P- CDE2	P- MIM1	P- MIM2
AIC	-132.3	-133.8	-131.0	-128.0	26.6	56.5	13.7	3.2
AICc	-132.1	-133.3	-130.0	-126.3	31.3	56.5	10.6	1.7
BIC	-130.9	-131.1	-127.0	-122.7	44.6	48.6	6.1	0.7
KIC	-135.1	-136.4	-133.0	-131.0	28.9	56.9	10.4	3.8

- Anamosa PR, Nkedi-Kizza P, Blue WG, Sartain JB (1990) Water movement through an aggregated, gravelly oxisol from Cameroon. *Geoderma* 46(1):263-281
- Anderson MP, Woessner WW (1992) Applied groundwater modeling—simulation of flow and advective transport. Academic Press. Inc, New York, 381 p
- Bear J, Verruijt A (1987) Modeling groundwater flow and pollution. Springer Science & Business Media. Berlin, 414p
- Comegna V, Coppola A, Sommella A (2001) Effectiveness of equilibrium and physical non-equilibrium approaches for interpreting solute transport through undisturbed soil columns. *Journal of Contaminant Hydrology* 50(1):121-138
- Engelhardt I, Aguinaga JG, Mikat H, Schüth C, Liedl R (2014) Complexity vs. simplicity: groundwater model ranking using information criteria. *Groundwater* 52(4):573-583
- Finsterle S, Zhang Y (2011) Error handling strategies in multiphase inverse modeling. *Computers & Geosciences* 37(6):724-730
- Foglia L, Mehl SW, Hill MC, Perona P, Burlando P (2007). Testing alternative ground water models using cross-validation and other methods. *Groundwater* 45(5):627-641
- Foglia L, Mehl SW, Hill MC, Burlando P (2013) Evaluating model structure adequacy: The case of the Maggia Valley groundwater system, Southern Switzerland. *Water Resources Research* 49(1):260-282
- 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
- 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)
- Hill MC (2006) The practical use of simplicity in developing ground water models. *Groundwater* 44(6):775-781
- Hoeting J, Madigan D, Raftery A, Volinsky C (1999) Bayesian model averaging: A tutorial. *Statistical Science* 14(4):382-401

در وضعیت سرعت جریان بالا به دلیل عدم برقراری تعادل فیزیکی بین بخش متحرک و غیر متحرک، بیشترین احتمال به مدل غیر تعادلی MIM1 تعلق گرفت. مدل‌های MIM1 در وضعیت سرعت جریان بالا و CDE2 در وضعیت سرعت جریان پایین در مرحله صحت سنجی مدل نیز بالاترین احتمال را نسبت به بقیه مدل‌ها دریافت نمودند.

در این مطالعه از طریق بررسی ستون‌های تجربی نشان دادیم که تعریف مدل‌های جایگزین انتقال و بررسی عدم قطعیت در این مدل‌ها منجر به انتخاب بهترین و مناسب‌ترین مدل جهت تفسیر ستون تجربی و بهبود پیش‌بینی‌های حاصل از آن خواهد گشت. نتایج نشان می‌دهد که با توجه به احتمالات مختلف محاسبه شده بین مدل‌های مفهومی جایگزین، اعتماد به یک مدل مفهومی منفرد در فرایند مدل‌سازی آب زیرزمینی منجر به ایجاد پیش‌بینی‌های غیر صحیح و در نهایت تصمیمات مدیریتی در رابطه با آن مدل با خطر شکست مواجه خواهد شد.

۵- سپاسگزاری

از پروفسور Ming Ye در دانشگاه ایالتی فلوریدا و از آقای دکتر Guoping Tang در آزمایشگاه ملی اوک ریج^{۱۳} جهت راهنمایی‌های ارزنده ایشان در پیشبرد اهداف تحقیق قدردانی و تشکر می‌نماییم.

پی‌نوشت‌ها

- 1- Breakthrough Curves (BTC)
- 2- Convection Dispersion Model
- 3- Mobile Immobile Model
- 4- Fraction of Mobile Water (β)
- 5- Mass transform coefficient (ω)
- 6- Model Averaging
- 7- Immobile
- 8- Dispersivity (λ)
- 9- Pulse Duration (T)
- 10- Bayesian Model Averaging (BMA)
- 11- Maximum Likelihood Bayesian Model Averaging (MLBMA)
- 12- Cross Validation (CV)
- 13- Oak Ridge National Laboratory

۶- مراجع

Akaike H (1974) A new look at the statistical model identification. *IEEE transactions on automatic control* 19(6):716-723

- inverse estimation of statistical data-and model-parameters. *Water Resources Research* 47(7)
- Rojas R, Feyen L, Dassargues A (2008) Conceptual model uncertainty in groundwater modeling: Combining generalized likelihood uncertainty estimation and Bayesian model averaging. *Water Resources Research* 44(12)
- Schwarz G (1978) Estimating the dimension of a model. *The annals of statistics* 6(2):461-464
- Seber GAF, Wild C (2003) *Nonlinear Regression*. John Wiley. New York, 768 p
- Simmons CT, Hunt RJ (2012) Updating the debate on model complexity. *GSA Today* 22(8):28-29
- Singh A, Mishra S, Ruskauff G (2010) Model averaging techniques for quantifying conceptual model uncertainty. *Groundwater* 48(5):701-715
- 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 filed tracer experiments. *US Salinity Laboratory*, 132p
- Tsai F, Li X (2010) Reply to comment by Ming Ye et al. on “Inverse groundwater modeling for hydraulic conductivity estimation using Bayesian model averaging and variance window”. *Water Resources Research* 46(2)
- Van Genuchten MT, Wierenga PJ (1976) Mass transfer studies in sorbing porous media I. Analytical solutions. *Soil Science Society of America Journal* 40(4):473-480
- Ye M, Neuman SP, Meyer PD (2004) Maximum likelihood Bayesian averaging of spatial variability models in unsaturated fractured tuff. *Water Resources Research* 40(5)
- Ye M, Neuman SP, Meyer PD, Pohlmann K (2005) Sensitivity analysis and assessment of prior model probabilities in MLBMA with application to unsaturated fractured tuff. *Water Resources Research* 41(12)
- Hu Q, Brusseau ML (1995) Effect of solute size on transport in structured porous media. *Water Resources Research* 31(7):1637-1646
- 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
- Lu D, Ye M, Meyer PD, Curtis GP, Shi X, Niu XF, Yabusaki SB (2013) Effects of error covariance structure on estimation of model averaging weights and predictive performance. *Water Resources Research* 49(9):6029-6047
- Lukjan A, Swasdi S, Chalermyanont T (2016) Importance of alternative conceptual model for sustainable groundwater management of the Hat Yai Basin, Thailand. *Procedia Engineering* 154:308–316
- Nettasana T(2012) Conceptual model uncertainty in the management of the Chi River Basin, Thailand. Thesis, University of Waterloo
- Neuman SP (2003) Maximum likelihood Bayesian averaging of uncertain model predictions: Stochastic Environmental Research and Risk Assessment 17(5):291-305
- Newman SP, Wierenga PJ (2003) Comprehensive strategy of hydrogeologic modeling and uncertainty analysis for nuclear facilities and sites. Project, University of Arizona
- Padilla IY, Yeh T, Conklin MH (2000) The effect of water content on solute transport in unsaturated porous media. *Water Resources Research* 35 (11):3303–3313
- Parker JC, Van Genuchten MT (1984) Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments. *Virginia Agricultural Experiment Station* 84(3)
- Riva M, Panzeri M, Guadagnini A, Neuman SP (2011) Role of model selection criteria in geostatistical

- assessing groundwater conceptual model uncertainty. *Groundwater* 48(5):716-728
- Zhang Y, Yang Y (2015) Cross-validation for selecting a model selection procedure. *Journal of Econometrics* 187(1):95-112
- Zhang Y, Yang G, Li S (2014) Significance of conceptual model uncertainty in simulating carbon sequestration in a deep inclined saline aquifer. *Journal of Hazardous, Toxic, and Radioactive Waste* 19(3)
- 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, Pohll GM, Reeves DM (2010) A model-averaging method for

Archive of SID