

تحلیل حساسیت واریانس مبنا در مدل‌های تعیینی

مجید جانفدا،^۱ داود شاهسونی^۲

تاریخ دریافت: ۱۳۹۱/۱۰/۱۹

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۵/۱۲/۲۵

چکیده:

امکان مطالعه بسیاری از پدیده‌های علمی و طبیعی در شرایط آزمایشگاهی میسر نیست و لذا آنها را در قالب مدل‌های ریاضی بیان و با کدهای کامپیوتری پیچیده، شبیه‌سازی می‌کنند. اجرای مدل کامپیوتری با ورودی‌های متفاوت را آزمایش کامپیوتری می‌نامند. مباحث آماری، در آزمایش‌های کامپیوتری از جایگاه ویژه‌ای برخوردار است. در این مقاله ضمن تشریح ساختار این مدل‌ها، به معرفی و بیان اهمیت تحلیل حساسیت واریانس مبنا می‌پردازیم. تحلیل حساسیت، مجموعه روش‌هایی است که اثربخش بودن پارامترهای ورودی را بر خروجی مدل با شاخص‌های حساسیت تعیین می‌کنند. این شاخص‌ها بر اساس مفاهیم واریانس‌های شرطی بیان می‌شوند. از آن جا که شکل ریاضی این مدل‌ها، به صورت صریح مشخص نیست؛ مسئله برآورد این شاخص‌ها با روش‌های مونته کارلو مبنا مطرح می‌گردد. از طرف دیگر زمان اجرا، چالش جدی در مدل‌های کامپیوتری محسوب می‌شود. طرح نقاط آزمایش ویژه‌ای مبتنی بر اعداد شبه تصادفی، برای کاهش زمان اجرای مدل پیشنهاد شده است. به منظور پرداختن به جنبه عملی، از مدل INCA-N که میزان آلایندگی نیتروژن ورودی به آب رودخانه‌ها را شبیه‌سازی می‌کند، استفاده شده است تا بتوان با شاخص‌های حساسیت متغیرهای تأثیرگذار بر این عامل تهدیدکننده سلامت انسان و محیط زیست را شناسایی کرد.

واژه‌های کلیدی: مدل تعیینی، تحلیل حساسیت واریانس مبنا، اعداد شبه تصادفی، مدل INCA-N.

۱ مقدمه

متغیرهای ورودی مدل است و متأثر از خطای تصادفی نمی‌باشد. بدین معنا که اجرای مدل با ورودی‌های همانند، خروجی یکسانی را تولید می‌کند. از این رو مدل‌های کامپیوتری، مدل‌های تعیینی^۳ نیز نامیده می‌شوند. در واقع اگر $X_1, \dots, X_k$ متغیرهای ورودی مستقل با توزیع احتمال $P_i(x_i)$ ، $i = 1, \dots, k$ باشند، خروجی مدل کامپیوتری ($f(x)$) تابعی چندمتغیره در فضای k -بعدی به صورت $Y = f(x_1, \dots, x_k)$ خواهد بود که معادله ریاضی آن به طور صریح مشخص نیست، اما امکان محاسبه خروجی مدل برای هر دسته از ورودی‌ها وجود دارد.

فقدان خطای تصادفی در آزمایش‌های کامپیوتری منجر به عدم کارایی مفاهیم کلاسیک طرح آزمایش، نظیر بلوک‌بندی، تکرار و تصادفی‌سازی می‌شود. ساختار و ویژگی‌های مدل

امکان مطالعه و بررسی بسیاری از پدیده‌های علمی در شرایط آزمایشگاهی بنا بر هزینه‌های گزاف اجرایی، طولانی بودن زمان اجرا و عملی نبودن انجام آزمایش به خصوص در پدیده‌های زیست‌محیطی، مقدور نیست. محققان این پدیده‌ها را با مدل‌های ریاضی بیان می‌کنند. این مدل‌ها شامل معادلات دیفرانسیل معمولی با مشتقات جزئی خطی یا غیرخطی می‌باشند. برنامه یا کد کامپیوتری را که قادر به حل عددی این دستگاه معادلات پیچیده باشد، مدل کامپیوتری و اجرای مدل با ورودی‌های متفاوت را آزمایش کامپیوتری گویند [۵]. خروجی آزمایش‌های کامپیوتری بر خلاف آزمایش‌های فیزیکی، فقط تابعی از

^۱ کارشناس ارشد آمار دانشگاه صنعتی شاهرود، ایران

^۲ گروه آمار دانشگاه صنعتی شاهرود، ایران

^۳ deterministic model

^۴ surrogate model

^۵ sensitivity analysis

شده از پشتوانه منطقی بیشتری برخوردار باشند و نتایج حاصل از این تصمیم‌گیری تا حد امکان بهینه شود. می‌توان از این ابزار برای ساده‌سازی مدل، کشف خطاهای فنی مدل و شناسایی نواحی بحرانی مدل بهره جست. لذا تحلیل حساسیت، رویکردی مهم در مدیریت و پژوهش تلقی می‌شود.

تحلیل حساسیت از دیدگاه آماری به صورت «مطالعه چگونگی تخصیص عدم قطعیت خروجی یک مدل به منابع عدم قطعیت موجود در ورودی‌های مدل» تعریف می‌شود [۱۶]. به بیان دیگر تحلیل حساسیت، به منظور ارائه روشی برای تعیین تأثیر پارامترهای ورودی بر خروجی مدل مطرح می‌شود [۱۹]. تحلیل حساسیت واریانس مبنا^۶ از کارایی مناسبی در تحلیل حساسیت مدل‌های خطی و غیرخطی برخوردار است. میزان اهمیت هر یک از متغیرهای ورودی بر اساس شاخص‌های حساسیت مبتنی بر مفاهیم واریانس شرطی تعیین می‌شود [۱]. این روش نخستین بار در دهه ۱۹۷۰ مطرح شد [۸، ۴، ۳، ۲]. در همین زمینه شاخص‌های حساسیت دیگری تحت عنوان اندازه حساسیت یا نسبت همبستگی پیشنهاد شده است [۱۴، ۱۲، ۱۰، ۷، ۶].

۱.۲ شاخص حساسیت مرتبه اول

بنا بر رابطه تجزیه واریانس بر حسب عامل شرطی X_i داریم

$$V(Y) = V_{X_i}(E_{X_{-i}}(Y|X_i)) + E_{X_i}(V_{X_{-i}}(Y|X_i)), \quad (1)$$

که در آن نماد X_{-i} به معنای همه متغیرها به جز متغیر X_i است. اندازه حساسیت خروجی مدل (Y) نسبت به متغیر X_i مطابق رابطه (۲) بیان می‌شود:

$$V_i = V(Y) - E_{X_i}(V_{X_{-i}}(Y|X_i = x_i)) \quad (2)$$

دلیل این تعریف آن است که اگر متغیر X_i را در مقدار x_i ثابت نگه داریم، می‌توانیم تأثیر آن را بر خروجی مدل با

$$V(Y|X_i = x_i)$$

بیان کنیم. اما از آنجا که مقدار x_i می‌تواند در تکیه‌گاه X_i تغییر کند، تأثیر تثبیت متغیر X_i به صورت $E(V(Y|X_i = x_i))$ و کاهش در عدم قطعیت برابر با $V(Y) - E(V(Y|X_i = x_i))$ خواهد بود. این کمیت به مقیاس Y وابسته بوده که با تقسیم آن

کامپیوتری سبب مطرح شدن موضوعاتی از قبیل طرح آزمایش، مدل‌های کامپیوتری، انتخاب مدل‌جانشین،^۴ عدم قطعیت و تحلیل حساسیت^۵ می‌شود که نقش آمار در آن‌ها حیاتی است [۱۳]. طرح نقاط آزمایش مدل‌های کامپیوتری با توجه به مسئله زمان اجرای مدل اهمیت فراوانی دارد. فقدان طرح نقاط آزمایش مناسب علاوه بر تحمیل هزینه اجرای مدل، ممکن است موجب رخداد خطای نوع اول (بی‌اهمیت دانستن یک متغیر با اهمیت) و خطای نوع دوم (با اهمیت تلقی کردن یک متغیر بی‌اهمیت) شود. همچنین انتخاب مدل جانشین تابع f به منظور کاهش هزینه زمان اجرا با روش‌های پیشرفته آماری و یادگیری ماشین انجام می‌شود [۵]. تحلیل عدم قطعیت، خود یک مسئله آماری است. شناسایی عوامل تأثیرگذار بر خروجی مدل توسط تحلیل حساسیت، در عین پیچیدگی مدل، کثرت عوامل ورودی، اثرهای متقابل آن‌ها و زمان‌بر بودن اجرای مدل از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است و موجب ساده‌سازی مدل و تفسیر بهتر نتایج در مسائل مدیریت ریسک و تصمیم‌گیری می‌شود [۱۸]. در این مقاله از میان کاربردهای یاد شده به موضوع تحلیل حساسیت پرداخته‌ایم که لازمه آن مطالعه مقدماتی طرح آزمایش مدل‌های کامپیوتری است.

۲ تحلیل حساسیت

تعدد و تنوع متغیرهای ورودی در مدل‌های کامپیوتری سبب پیچیدگی آنها می‌شود. لذا مسئله ساده‌سازی مدل حائز اهمیت است. این موضوع با شناسایی متغیرهای با اهمیت و کنار گذاشتن متغیرهای بی‌اهمیت و در قالب تحلیل حساسیت بررسی می‌شود. اندازه‌های حساسیت، میزان اهمیت هر یک از متغیرهای ورودی را مشخص می‌کنند. تأثیرگذار بودن یا بی‌تأثیر بودن متغیرها و اثرهای متقابل آن‌ها در مدیریت بحران و ریسک از جایگاه ویژه‌ای برخوردار است. از طرف دیگر، هزینه‌های تحمیلی، نگهداری و کنترل متغیرها تصمیم‌گیری را با چالش جدی مواجه می‌سازد. از این رو برای تصمیم‌گیری بهتر، به‌ویژه در مواقع بحرانی، باید متغیرهای با اهمیت قابل کنترل و غیر قابل کنترل، کم‌اهمیت و بی‌اهمیت شناسایی شوند. از این رو تحلیل حساسیت از دیدگاه مدیریتی موجب می‌شود تا تصمیمات اتخاذ

^۶ variance based sensitivity analysis

^۷ first order sensitivity index

۲.۲ اثر کل

هما و سالتلی [۶] این شاخص را تحت عنوان شاخص حساسیت کل^۹ یا اثر کل معرفی کردند. این شاخص را با نماد S_T نشان می‌دهیم و شامل همه اثرهایی است که متغیر مربوط در آن دخیل است. به عنوان مثال اگر خروجی مدل، تابعی از سه متغیر باشد، اثر کل X_1 به صورت $S_{T_1} = S_1 + S_{12} + S_{13} + S_{123}$ تعریف می‌شود.

به منظور ارائه یک اندازه برای اثر کل متغیر X_i ، واریانس خروجی مدل را به نوعی دیگر و با شرط ثابت نگه داشتن همه متغیرهای ورودی به جز X_i ، یعنی X_{-i} ، مطابق با رابطه (۵) تجزیه می‌کنیم.

$$V(Y) = V(E(Y|X_{-i})) + E(V(Y|X_{-i})). \quad (5)$$

بنا بر تعریف شاخص حساسیت مرتبه اول می‌توان $V(E(Y|X_{-i}))$ را به عنوان اثر مرتبه اول X_{-i} در نظر گرفت. لذا $E(V(Y|X_{-i})) = V(Y) - V(E(Y|X_{-i}))$ دربرگیرنده همه اثرهایی است که متغیر X_i به نوعی در آن مشارکت دارد. با تقسیم طرفین معادله بر $V(Y)$ شاخص حساسیت کل مطابق با رابطه (۶) به دست می‌آید.

$$S_{T_i} = \frac{E(V(Y|X_{-i}))}{V(Y)} = 1 - \frac{V(E(Y|X_{-i}))}{V(Y)}. \quad (6)$$

با استفاده از اثر کل و اثر اصلی می‌توان اثرهای بین متغیر X_i و سایر متغیرهای ورودی را اندازه‌گیری کرد. برای این منظور کافی است مقدار $S_{T_i} - S_i$ محاسبه شود.

۳.۲ محاسبه شاخص حساسیت مرتبه اول

اگر X_j ها مستقل از هم و هر یک از آن‌ها دارای توزیع احتمال $P_j(x_j)$ باشد، میانگین و واریانس Y و واریانس‌های شرطی به صورت زیر محاسبه می‌شوند.

$$E(Y) = \int_{\Omega^k} YP(\mathbf{x})d\mathbf{x} = \int \dots \int f(x_1, \dots, x_k) \times \prod_{i=1}^k P_i(x_i)dx_i$$

$$V(Y) = \int \dots \int f^2(x_1, \dots, x_k) \prod_{i=1}^k P_i(x_i)dx_i - E^2(Y)$$

^۸ additive

^۹ total sensitivity index

بر واریانس Y ، عدد مطلق به دست آمده (رابطه (۳)) را شاخص حساسیت مرتبه اول^۷ یا اثر اصلی متغیر i ام می‌نامند.

$$S_i = \frac{V_i}{V(Y)} = \frac{V(E(Y|X_i = x_i))}{V(Y)}, \quad (3)$$

که همواره $0 \leq S_i \leq 1$ است. مسلماً هر قدر اهمیت متغیر X_i در خروجی مدل کمتر باشد، واریانس Y کمتر دستخوش تغییر قرار می‌گیرد و $E(V(Y|X_i = x_i))$ به $V(Y)$ نزدیک‌تر بوده، $V_i = V(Y) - E(V(Y|X_i = x_i))$ دارای مقدار کمتری خواهد بود (و برعکس). می‌توان شاخص حساسیت مرتبه دوم را با ثابت نگه داشتن متغیرهای X_i و X_j مطابق با رابطه زیر اندازه‌گیری کرد.

$$S_{ij} = \frac{V_{ij}}{V(Y)} = \frac{V(E(Y|X_i, X_j))}{V(Y)} - S_i - S_j, \quad (4)$$

که در آن $V(E(Y|X_i, X_j))$ اندازه اثر توأم متغیرهای X_i و X_j بر خروجی مدل (Y) است. به همین ترتیب، شاخص‌های مراتب بالاتر تعریف می‌شوند. اهمیت شاخص‌های حساسیت مراتب بالاتر زمانی آشکار می‌شود که نتوان حساسیت خروجی مدل را تنها با شاخص حساسیت مرتبه اول تبیین کرد. ثابت می‌شود که مجموع همه اثرهای مرتبه اول، دوم و مراتب بالاتر برابر با یک است [۱]؛ یعنی

$$\sum_{i=1}^k S_i + \sum_{1 \leq i < j \leq k} S_{ij} + \dots + S_{1,2,\dots,k} = 1$$

این بدان معنا است که اگر مجموع اثرهای اصلی متغیرها $\sum_{i=1}^k S_i = 1$ باشد، اثرهای متقابل بین متغیرها وجود نخواهند داشت و مدل مورد بررسی را جمعی^۸ گویند، اگر $\sum_{i=1}^k S_i \leq 1$ باشد، مدل را غیرجمعی نامند. شایان ذکر است که هزینه محاسباتی اثرهای متقابل ورودی‌های مدل با افزایش تعداد ورودی‌ها، به صورت نمایی افزایش می‌یابد و عملاً محاسبه شاخص‌های حساسیت مرتبه دوم، سوم و مراتب بالاتر ناممکن می‌شود و مقرون به صرفه نمی‌باشد. در نتیجه بسیاری از محققان به دنبال شاخص جایگزینی بودند که علاوه بر کاهش هزینه‌های محاسباتی، حاوی اطلاعات مفیدی در خصوص اثرهای متقابل باشد. سرانجام هما و سالتلی [۶] شاخصی را تحت عنوان شاخص حساسیت کل معرفی کردند.

در محاسبه شاخص‌های حساسیت، دو چالش اساسی وجود دارد:
الف) بعد فضای انتگرال برابر با $2^K - 1$ است.
ب) رابطه ریاضی ورودی - خروجی (f) به طور صریح مشخص نیست.

این چالش‌ها سبب طرح مسئله تقریب انتگرال‌ها و در نتیجه برآورد شاخص‌های حساسیت می‌شوند.

۳ برآورد شاخص‌های حساسیت

۱.۳ برآورد شاخص حساسیت مرتبه اول

برای برآورد اثر اصلی S_j در رابطه (۸) می‌باید U_j ، $E(Y)$ و $V(Y)$ برآورد شوند.

الف) برآورد U_j

ساختار انتگرال U_j در رابطه (۹) به گونه‌ای است که برای تقریب انتگرال با روش مونته کارلو، این ایده به وجود می‌آید که دو ماتریس A و B با N سطر توسط اعداد تصادفی تولید شوند که هر سطر این دو ماتریس، معرف یک بردار k تایی از مقادیر شبیه‌سازی شده برای متغیرهای $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_k)$ به صورت زیر باشد [۸]

$$A = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & \dots & x_{Nk} \end{bmatrix},$$

$$B = \begin{bmatrix} x'_{11} & x'_{12} & \dots & x'_{1k} \\ x'_{21} & x'_{22} & \dots & x'_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x'_{N1} & x'_{N2} & \dots & x'_{Nk} \end{bmatrix}.$$

از آن‌جا که در عبارت $f(x_1, \dots, x_k)f(x'_1, \dots, x'_k)$ مقدار متغیر زام بردار $(x'_1, \dots, x'_k)$ از بردار $(x_1, \dots, x_k)$ انتخاب شده است، باید به‌ازای هر یک از X_i ها ماتریس جدیدی بر مبنای ماتریس B تولید شود که فقط ستون زام آن برگرفته از ستون زام ماتریس A باشند. بدین منظور، ماتریس‌های جدید $(C_1, \dots, C_k)$ را طوری می‌سازیم که

$$\begin{aligned} V(E(Y|X_j)) &= \int E^Y(Y|X_j = x_j)P_j(x_j)dx_j - E^Y(Y) \\ &= U_j - E^Y(Y) \end{aligned} \quad (V)$$

که در آن

$$U_j = \int \int \dots \left(\int f(x_1, \dots, x_k) \prod_{i=1, i \neq j}^k P_i(x_i)dx_i \right)^2 \times P_j(x_j)dx_j.$$

و $\mathbf{X} = (X_1, \dots, X_k)$ است. اکنون می‌توان شاخص حساسیت مرتبه اول را به صورت رابطه (۸) بازنویسی کرد

$$S_j = \frac{V(E(Y|X_j))}{V(Y)} = \frac{U_j - E^Y(Y)}{V(Y)}. \quad (A)$$

ایشیگامی و هما [۸] برای سهولت محاسبه U_j پیشنهاد کردند که توان دوم یک انتگرال، به صورت حاصل ضرب دو انتگرال با دو آرگومان متفاوت محاسبه شود، یعنی

$$\begin{aligned} \int E^Y(Y|X_j = x_j)P_j(x_j)dx_j &= \int \int \dots \int f(x_1, \dots, x_j, \dots, x_k) \prod_{i=1, i \neq j}^k P_i(x_i)dx_i \\ &\times \int \dots \int f(x'_1, \dots, x_j, \dots, x'_k) \prod_{i=1, i \neq j}^k P'_i(x'_i)dx'_i P_j(x_j)dx_j \\ &= \int \dots \int f(x_1, \dots, x_k) \prod_{i=1}^k P_i(x_i)dx_i \\ &\times f(x'_1, \dots, x_j, \dots, x'_k) \prod_{i=1, i \neq j}^k P'_i(x'_i)dx'_i. \end{aligned} \quad (9)$$

۴.۲ محاسبه شاخص حساسیت کل

نحوه محاسبه $V(E(Y|X_{-j}))$ در شاخص حساسیت کل

$$S_{Tj} = 1 - \frac{V(E(Y|X_{-j}))}{V(Y)}$$

به شرح زیر است. در این جا نماد X_{-j} به معنای همه متغیرها به جز متغیر زام است

$$\begin{aligned} V(E(Y|X_{-j})) &= E(E^Y(Y|X_{-j})) - E^Y(Y) \\ &= \int \dots \left(\int f(x_1, \dots, x_j, \dots, x_k)P_j(x_j)dx_j \right)^2 \\ &\times \prod_{i=1, i \neq j}^k P_i(x_i)dx_i - E^Y(Y). \end{aligned} \quad (10)$$

با در نظر گرفتن جمله اول عبارت فوق با نماد U_{-j} شاخص حساسیت کل به صورت زیر بازنویسی می‌شود

$$S_{Tj} = 1 - \frac{V(E(Y|X_{-j}))}{V(Y)} = 1 - \frac{U_{-j} - E^Y(Y)}{V(Y)}. \quad (11)$$

۲.۳ برآورد شاخص حساسیت کل

از آنجا که برآوردگرهای $E(Y)$ و $V(Y)$ در بندهای ب و ج بخش قبل معرفی شدند، برای برآورد کردن شاخص حساسیت کل در رابطه (۱۱) کافیت یک راهکار محاسباتی برای عبارت

$$U_{-j} = \int \dots \int f(x_1, \dots, x_j, \dots, x_k) \prod_{i=1, i \neq j}^k P_i^*(x_i) dx_i \\ \times f(x_1, \dots, x'_j, \dots, x_k) P_j(x_j) dx_j P_j(x'_j) dx'_j$$

پیشنهاد شود. با توجه به ماتریسهای A و B در عبارت X_i ها $f(x_1, \dots, x'_j, \dots, x_k)$ لازم است به ازای هر یک از X_i ها ماتریس جدیدی بر مبنای ماتریس A تولید شود که فقط ستون j ام آن بر گرفته از ماتریس B باشد، یعنی

$$D_j = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x'_{1j} & \dots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x'_{2j} & \dots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & \dots & x'_{Nj} & \dots & x_{Nk} \end{bmatrix}.$$

بنا بر این با روش انتگرال گیری مونت کارلو U_{-j} مطابق زیر برآورد می شود.

$$\hat{U}_{-j} = \frac{1}{N-1} \sum_{r=1}^N f(x_{r1}, \dots, x_{rk}) \times \\ f(x_{r1}, \dots, x_{r(j-1)}, x'_{rj}, x_{r(j+1)}, \dots, x_{rk}) \\ = \frac{1}{N-1} \sum_{r=1}^N f(A)_r f(D)_r \quad (13)$$

هزینه محاسبه هر U_{-j} برابر با N و در نهایت هزینه محاسبه شاخص کل همه متغیرهای ورودی، $N \times K$ خواهد بود. موارد بیان شده در فصل ۳ را می توان در الگوریتم زیر خلاصه کرد.

۴ الگوریتم برآورد اثر اصلی و اثر کل

سالتی [۶] برای برآورد شاخصهای حساسیت، راهکار زیر را معرفی کرد.

۱. ماتریسی به ابعاد $N \times 2K$ از اعداد تصادفی تولید و دو ماتریس A و B را که هر کدام شامل نیمی از نمونههای تولید شده هستند در نظر می گیریم. در این جا K تعداد متغیرهای ورودی مدل و N اندازه نمونه است. پیشنهاد سبل [۲۰]، استفاده از اعداد شبه تصادفی^{۱۰} برای شبیه سازی است.

تنها تفاوت ماتریس B و C_j در ستون j ام باشد؛ یعنی

$$C_j = \begin{bmatrix} x'_{11} & x'_{12} & \dots & x_{1j} & \dots & x'_{1k} \\ x'_{21} & x'_{22} & \dots & x_{2j} & \dots & x'_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x'_{N1} & x'_{N2} & \dots & x_{Nj} & \dots & x'_{Nk} \end{bmatrix}.$$

با روش انتگرال گیری مونت کارلو، برآورد U_j به صورت زیر خواهد بود [۱۵].

$$\hat{U}_j = \frac{1}{N-1} \sum_{r=1}^N f(x_{r1}, \dots, x_{rk}) \times \\ f(x'_{r1}, \dots, x'_{r(j-1)}, x_{rj}, x'_{r(j+1)}, \dots, x'_{rk}) \\ = \frac{1}{N-1} \sum_{r=1}^N f(A)_r f(C)_r \quad (12)$$

که در آن N اندازه نمونه است.

ب) برآورد $E^*(Y)$

به منظور برآورد $E^*(Y)$ در رابطه $\hat{S}_j$ می توان از میانگین ماتریس A یا B یا تلفیقی از آن دو ماتریس استفاده کرد [۱۴].

$$\hat{E}^*(Y) = (\hat{E}(y))^* = \left(\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_A^j \right)^2, \\ \hat{E}^*(Y) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_A^j y_B^j$$

ج) برآورد $V(Y)$

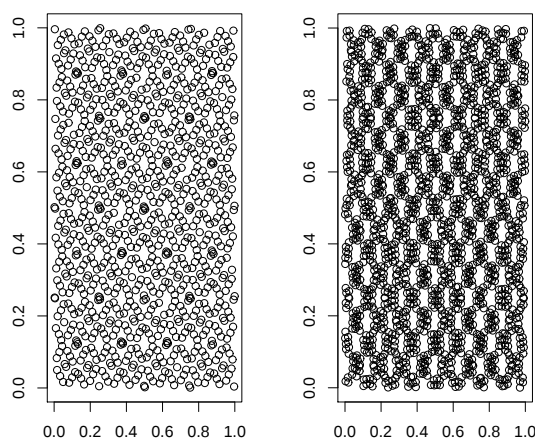
برای برآورد $V(Y)$ می توان از ماتریس A به صورت زیر استفاده کرد.

$$\hat{V}(Y) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (y_A^j)^2 - \hat{E}^*(Y).$$

بنا بر آنچه گفته شد، برآورد اثر اصلی مستلزم اجرا و محاسبه خروجی مدل به ازای هر یک از N سطر ماتریسهای A ، B و $C_1, \dots, C_K$ بوده که تعداد کل دفعات اجرای مدل برای برآورد اثر اصلی همه متغیرها برابر با $N(K+2)$ است. اگر زمان هر اجرای مدل را t فرض کنیم، زمان کل مورد نیاز برای برآورد اثرات اصلی برابر با $t \times N(K+2)$ خواهد بود، که با توجه به ثابت بودن t و K ، نقش N بسیار مهم است.

^{۱۰} Quasi random number

و سبب خطای قابل ملاحظه‌ای در برآورد انتگرال‌ها می‌شود. از آن‌جا که مدت زمان اجرای مدل‌های کامپیوتری نیز به‌عنوان هزینه تلقی می‌شود، باید الگوریتمی طراحی شود که با کمترین تعداد نقاط، بیشترین اطلاعات رفتاری تابع را در اختیار قرار دهد و خطای تقریب به کمترین مقدار خود کاهش یابد. در کنار مسئله خطای تقریب انتگرال، موضوع سرعت همگرایی برآوردها نیز بسیار حائز اهمیت است. بسیاری از پژوهشگران برای حل این مسائل، از اعداد تصادفی کاذب^{۱۱} استفاده می‌کنند [۲۱]. دنباله اعداد شبه تصادفی، نسخه پیشرفته اعداد شبه تصادفی است. این دنباله اعداد به‌منظور برخورداری از سطح بالای یکنواختی نقاط آزمایش در فضاهای چندبعدی طراحی شده است که اعضای آن از نظر آماری مستقل از هم نیستند [۹]. نرخ همگرایی توابع با استفاده از این دنباله در مقایسه با روش یکنواخت و کاذب بسیار بیشتر است [۱۱]. دنباله اعداد شبه تصادفی فضای متغیرهای ورودی را کاوش می‌کنند و امکان پوشش یکنواخت فضای متغیرها را فراهم می‌سازد [۱۶]. دنباله‌های سبل و فاوهر^{۱۲} و نیدریتز^{۱۳} نمونه‌هایی از این دنباله‌ها هستند. دنباله سبل یک طرح آزمایش مناسب و کارآمد در این زمینه محسوب می‌شود [۲۱]. شکل ۱ نمودار پراکنش دو متغیر از دنباله سبل را در فضاهای دو و بعدی با اندازه‌های نمونه و نشان می‌دهد.



شکل ۱. نمودار پراکنش دنباله شبه تصادفی در فضای دوبعدی (چپ) و فضای ۳۰ بعدی (راست)

$$A = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & \dots & x_{Nk} \end{bmatrix},$$

$$B = \begin{bmatrix} x_{1(k+1)} & x_{1(k+2)} & \dots & x_{1(2k)} \\ x_{2(K+1)} & x_{2(K+2)} & \dots & x_{2(2k)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{N(K+1)} & x_{N(K+2)} & \dots & x_{N(2k)} \end{bmatrix}.$$

۲. ماتریس‌های جدید C_i را با ترکیب دو ماتریس A و B می‌سازیم. ماتریس C_i همان ماتریس B است که ستون i ام آن از ماتریس A گرفته شده است.

۳. خروجی مدل را برای همه سطرهاى ماتریس‌های A ، B و $C_1, \dots, C_k$ محاسبه می‌کنیم تا بردارهای خروجی N تایی

$$Y_A = f(A), \quad Y_B = f(B), \quad Y_{C_i} = f(C_i), \quad i = 1, \dots, k$$

به‌دست آیند.

۴. برآورد شاخص حساسیت مرتبه اول و کل هر یک از متغیرهای ورودی مدل، مطابق با رابطه‌های (۱۵) و (۱۶) بیان می‌شوند.

$$\hat{S}_i = \frac{\hat{E}(Y|X_i)}{\hat{V}(Y)} = \frac{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_A^j \cdot y_{C_i}^j - f^2}{\frac{1}{N} (\sum_{j=1}^N y_A^j)^2 - f^2} \quad (14)$$

$$\hat{S}_{T_i} = 1 - \frac{\hat{E}(Y|X_{-i})}{\hat{V}(Y)} = 1 - \frac{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_B^j \cdot y_{C_i}^j - f^2}{\frac{1}{N} (\sum_{j=1}^N y_A^j)^2 - f^2} \quad (15)$$

که $f^2 = \hat{E}(Y) = (\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_A^j)^2$ است. در روابط فوق، رهیافت کاهش هزینه محاسبات لحاظ شده است.

۱.۴ اعداد شبه تصادفی

روش مونته‌کارلو رایج‌ترین روش تقریب انتگرال است. اعداد تصادفی تولید شده با این روش، کل فضا را پوشش نمی‌دهند. با افزایش تعداد متغیرهای ورودی، این فضای خالی به ابرفضاهایی تبدیل می‌شود که اطلاعات رفتاری تابع در آن‌ها موجود نیست

^{۱۱} Pseudo random number

^{۱۲} Faure

^{۱۳} Niederreiter

۵ مدل نیتروژن ورودی به آب رودخانه

نیتروژن یک آلاینده منابع آب است که آثار سوئی بر سلامت انسان و سایر جانداران دارد که مدل سازی آن از اهمیت بسزایی برخوردار است. مدل کامپیوتری INCA-N^{۱۴} یک مدل فرآیندمبنا و نیمه توزیعی است که جریان نیتروژن ورودی به آب رودخانه را شبیه سازی می کند [۲۲، ۲۳، ۲۴]. پارامترهای ورودی مدل در سه دسته تقسیم بندی شده و مشخصات آنها در جدول ۱ ذکر شده است. خروجی این مدل شامل سری های زمانی برآورد روزانه میزان جریان آب و غلظت آمونیاک و نیترات در ایستگاه های مختلفی است که در طول میسر اصلی رودخانه قرار دارند. به منظور تکمیل کردن خروجی مدل، این سه سری زمانی توسط رابطه زیر با هم ترکیب شده، میزان بار نیتروژن غیرآلی روزانه را نتیجه می دهد.

(غلظت نیترات + غلظت آمونیاک) $\times$ دبی آب = بار نیتروژن
مقدار بار نیتروژن، یک سری زمانی هفت ساله است. خروجی نهایی، با میانگین گیری از متوسط های سالانه به دست آمده که آن را "متوسط سالانه بار ورودی نیتروژن غیرآلی ورودی به آب رودخانه" می نامند. منطقه مورد مطالعه در این مقاله، حوضه آبریز رودخانه Tweed در اسکاتلند و انگلستان است. اطلاعات دما، رطوبت و بارش در ایستگاه های واقع در مسیر اصلی رودخانه به مدت ۷ سال اندازه گیری و داده های مربوط ثبت شده است. در این مطالعه، مدل INCA-N سامانه ای از پارامترهای نرخ تبدلات نیتروژنی ($X_{15} - X_9$) به عنوان ورودی مدل در نظر گرفته شده است. سایر پارامترهای ورودی در مقدار میانگین دامنه تغییراتشان ثابت هستند. در واقع مدل INCA-N را تابعی از هفت متغیر در نظر گرفته ایم. برای تحلیل حساسیت با روش سالتلی، اندازه نمونه اولیه را برابر با در نظر گرفته ایم که هزینه محاسبات آن (تعداد اجراهای مدل) برابر با $9 \times 1000 \times (2 + K) = N$ است. نقاط آزمایش روش سالتلی با استفاده از دنباله شبه تصادفی توسط نرم افزار R تولید شده است. ویژگی اعداد شبه تصادفی این است که اعداد به صورت غیر تصادفی (تعیینی) تولید می شوند و فضای متغیرهای ورودی را به طور یکنواخت پوشش می دهند. تعیینی بودن دنباله اعداد شبه تصادفی امکان برآورد شاخص های حساسیت را در اندازه های نمونه کمتر از اندازه نمونه اولیه و بدون اجرای مجدد مدل مقدور می سازد. از آنجا که اندازه

نمونه اولیه را در نظر گرفته ایم، روند همگرایی مقادیر برآورد شده شاخص های حساسیت در اندازه های نمونه کوچکتر نیز قابل رؤیت خواهد بود. به عنوان نمونه شکل های ۲ و ۳ به ترتیب روند همگرایی اثر اصلی و اثر کل متغیرهای بیشترین میزان جذب (X_{11}) و ثابت نیتروژن هوا (X_{10}) را نشان می دهند. برآورد اثر اصلی و اثر کل این دو متغیر در اندازه نمونه پایدار می شود. مقدار همگرایی اثر کل متغیر X_{11} در حدود ۰/۵ و اثر اصلی آن تقریباً برابر با ۰/۴۵ می باشد، این مقادیر حاکی از مؤثر بودن این متغیر در واریانس خروجی مدل دارد. برآورد اثر اصلی و کل متغیر ثابت نیتروژن هوا به مقدار صفر گرایش دارد. این بدان مفهوم است که X_{10} متغیر بی تأثیر در واریانس خروجی مدل است. سایر متغیرهای مورد بررسی از نظر پایداری رفتار مشابه داشتند.

۱.۵ نتایج تحلیل حساسیت با اندازه نمونه بهینه

از آنجایی که برآورد شاخص های حساسیت اکثر متغیرهای ورودی مدل در اندازه نمونه ۴۰۰۰ پایدار شد، اندازه نمونه مناسب را ۴۰۰۰ در نظر گرفته و اثرات اصلی و کل را با جزئیات بیشتر مورد بررسی قرار می دهیم. جهت بررسی عدم قطعیت برآوردها، این فرآیند را ۵۰ بار تکرار نموده که نتایج حاصل در جدول (۲) و فاصله اطمینان بوت استرپی در شکل های (۴) و (۵) گنجانده شده است. با توجه به میانگین مقادیر برآورد شده اثر اصلی و اثر کل در جدول (۲) مهمترین پارامترهای تأثیرگذار بر متوسط بار نیتروژن سالانه به ترتیب عبارتند از میزان جذب توسط گیاهان (X_{11})، نرخ نیترات زدایی (X_9)، آلی سازی (X_{14}) و نرخ معدنی سازی (X_{13}). میزان اثر سایر متغیرها بسیار ناچیز است و می توان از آن ها صرفه نظر نمود. جدول (۳) اثرات متقابل بین متغیرها و سایر متغیرهای ورودی مدل نشان می دهد. فواصل اطمینان اثر اصلی و اثر کل (شکل های ۴ و ۵) متغیرهای مدل به درک بهتر این مسئله کمک می کنند.

۶ بحث و نتیجه گیری

هدف مقاله حاضر معرفی و بکارگیری روش تحلیل حساسیت واریانس مبنای سالتلی با شاخص های تحلیل حساسیت بود. این شاخص ها بر اساس مفاهیم به ظاهر ساده واریانس شرطی،

^{۱۴} Integrated Nitrogen of Catchment

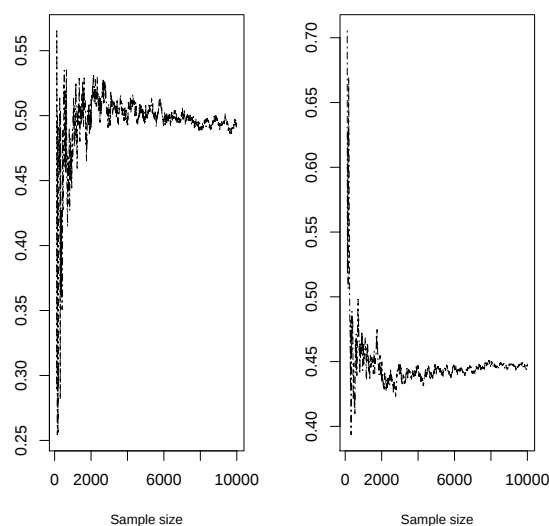
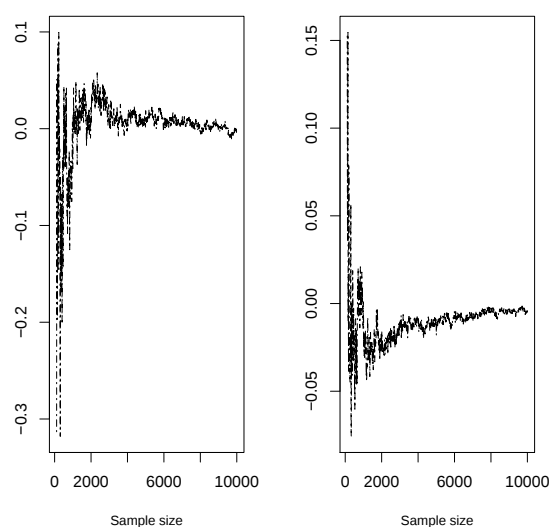
به گونه‌ای زیبا توانسته است سرمنشا ایجاد سرفصل بزرگی در تحلیل حساسیت مدل‌های تعیینی باشند. ساختار شاخص‌های حساسیت مرتبه اول و کل به گونه‌ای است که علیرغم صریح نبودن فرم ریاضی مدل قادر به شناسایی میزان اهمیت متغیرها و وجود اثرات متقابل بین آن‌ها است. زمان اجرای مدل از جمله پارامترهای کلیدی در زمینه تحلیل حساسیت است که موجب معرفی طرح آزمایش مدل‌های کامپیوتری شده است. در این مقاله به منظور برآورد شاخص‌های حساسیت و کاهش تعداد اجراهای مورد نیاز مدل، از رهیافت سالتلی و اعداد شبه تصادفی استفاده شد. عدم قطعیت برآوردگرهای با فواصل اطمینان بوت‌استرپی محاسبه شد. نتایج مورد مطالعاتی، مدل INCA-N در رودخانه Tweed، نشان داد چهار متغیر میزان جذب توسط گیاهان، نرخ نیترات زدایی، آلی‌سازی و نرخ معدنی‌سازی به ترتیب مهمترین عوامل موثر بر نیتروژن ورودی به آب رودخانه محسوب می‌شوند. بنا بر این می‌توان با کنترل این عوامل که نقش تعیین‌کننده بر نیتروژن آب دارند، از آسیب‌ها و پیامدهای ناشی از تاثیر این آلاینده آب کاست. از آن‌جا که مجموع اثرات اصلی مدل تقریباً برابر با یک است می‌توان نتیجه گرفت مدل INCA-N بر حسب پارامترهای نرخ تبادلات نیتروژنی، یک مدل تقریباً جمعی است که ناچیز بودن اثرات متقابل بین متغیرهای ورودی نیز حاکی از این حقیقت است.

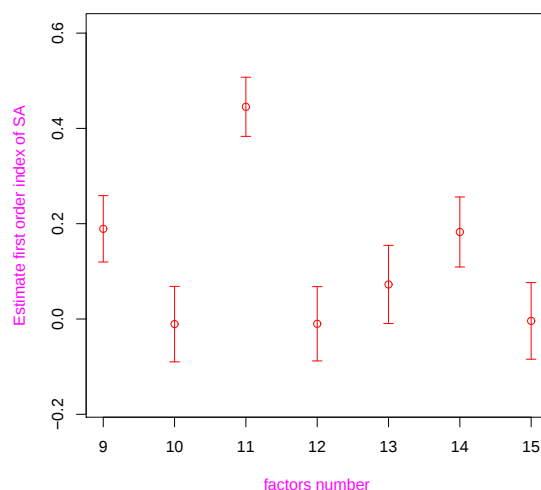
جدول ۱. مشخصات پارامترهای ورودی مدل INCA-N

دامنه تغییرات	واحد	نام متغیر	گروه
[۰, ۰/۰۱]	m^3/s	جریان سطحی: X_1	شرایط آغارین
[۰, ۱۰]	mg N/l	نیترات سطحی: X_2	
[۰, ۲]	mg N/l	آمونیم سطحی: X_3	
[۱۰ * ۵, ۲/۱۰ * ۷]	m^3	اندازه زه کش سطحی: X_4	
[۰, ۰/۰۱]	m^3/s	جریان زیرسطحی: X_5	
[۰, ۱۰]	mg N/l	نیترات زیر سطحی: X_6	
[۰, ۲]	mg N/l	آمونیم زیرسطحی: X_7	
[۱۰, ۲۰]	m^3	اندازه زه کش زیرسطحی: X_8	
[۰, ۰/۰۱]	mol/day	نیترات زدایی: X_9	نرخ تبادلات
[۰, ۰/۰۱]	kg N/ha/day	ثابت نیتروژن هوا: X_{10}	
[۰, ۰/۰۵]	mol/day	نیترات جذبی گیاهان: X_{11}	
[۸۰, ۱۴۰]	kg N/ha/year	بیشینه نیترات جذبی: X_{12}	
[۰, ۱]	mol/day	معدنی‌سازی: X_{13}	
[۰, ۰/۱]	mol/day	آلی‌سازی: X_{14}	نیتروژنی
[۰, ۰/۰۵]	mol/day	آمونیم جذبی گیاهان: X_{15}	
[۱۰۰, ۱۷۰]	Mm	کمبود رطوبت خاک: X_{16}	
[۰/۰۵, ۵]	day	زمان ماندگاری خاک در آب: X_{17}	
[۱۰ * ۵, ۲/۱۰ * ۷]	day	زمان ماندگاری آب در زیرزمین: X_{18}	
[۰/۰۱, ۱]	M	بیشترین اندازه نگهداری آب در خاک: X_{19}	

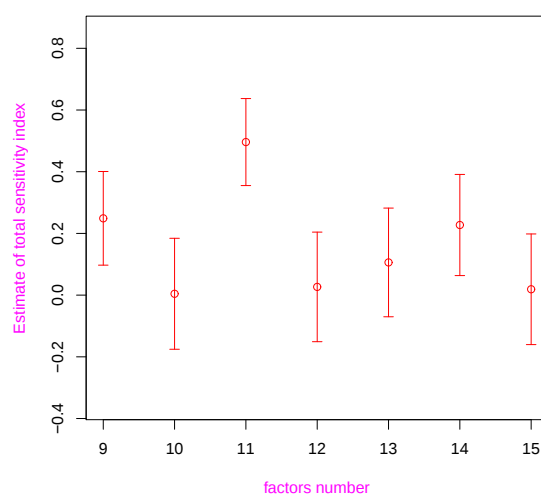
جدول ۲. کران‌های بالا و پایین متغیرهای مدل INCA-N در اندازه نمونه ۴۰۰۰

متغیر	رتبه	اثر اصلی			اثر کل		
		Upper	Center	Lower	Upper	Center	Lower
X_9	۲	۰/۰۷	۰/۱۹	۰/۳۱	-۰/۰۴	۰/۲۵	۰/۵۱
X_{10}	۷	-۰/۱۵	-۰/۰۱	۰/۱۳	-۰/۳	۰	۰/۳۱۱
X_{11}	۱	۰/۳۲	۰/۴۴	۰/۵۷	۰/۲۵	۰/۵	۰/۷۴
X_{12}	۶	-۰/۱۴	-۰/۰۱	۰/۱۳	-۰/۲۸	۰/۰۳	۰/۲۲۱
X_{13}	۴	-۰/۰۶	۰/۰۷	۰/۲۱	-۰/۱۹	۰/۱۰	۰/۴۰
X_{14}	۳	۰/۰۷	۰/۱۸	۰/۳۱	-۰/۰۵	۰/۲۲	۰/۵۱
X_{15}	۵	-۰/۱۴	۰	۰/۱۳	-۰/۲۹	۰	۰/۲۲

شکل ۲. اثر اصلی (سمت راست) و اثر کل (سمت چپ) متغیر X_{11} شکل ۳. اثر اصلی (سمت راست) و اثر کل (سمت چپ) متغیر X_{10}



شکل ۴. فاصله اطمینان ۰/۹۵ اثر اصلی متغیرهای مدل



شکل ۵. فاصله اطمینان ۰/۹۵ اثر کل متغیرهای مدل

مراجع

- [1] Archer, G. E. B. saltelli, A. and Sobol I.M. (1997), Sensitivity measures, Anova-like techniques and the use of bootstrap, *Journal of Statistical Computation and Simulation*, **58**, 99-120.
- [2] Cuiker, R.I Schaiby, J. H. and Schular, A. G. (1975). Study of the sensitivity of coupled measures, Anova-like techniques and the reaction system to uncertainties in rate coefficient III analysis of approximation, *Journal of Chemical Physics*, **63**, 1140-1149.
- [3] Cuiker, R.I. Fourtin, K. E. and Schular, A. G. (1973). Study of the sensitivity of coupled measures, Anova-like techniques and the reaction system to uncertainties in rate coefficient. I theory, *Journal of Computational Physics*, **26**, 1-42.

- [4] Cuiker, R.I Levine, H. and Schular, A. G. (1978). Nonlinear sensitivity analysis of multiparameter model systems, *Journal of Computational Physics*, **26**, 1-42.
- [5] Fang, K.T. Runze, L. and Sudjianto, A. (2006). *Design and modeling for computer experiments*, 1 edition, Chapman and Hall/CRC.
- [6] Homma, T. and Saltelli, A. (1996). Important measures in global sensitivity analysis of nonlinear model systems, *Relia. Engineering and system safety*, **52**, 1-17.
- [7] Iman, R. and Hora, S. (1990). A robust measure of uncertainty importance for use in fault tree analysis, *Risk analysis*, **10(3)**, 401-403.
- [8] Ishighami, T. and Homma, T. (1996). An Important Qualification Technique Uncertainty Analysis for Computer Model, in: *Proceeding of the Isuma 90. First International Symposium on Uncertainty Modeling and Analysis*, University of Maryland, 3-5 December.
- [9] Karaivanova, A., Dimov, I., and Ivanovska, S. (2001). A quasi-Monte Carlo method for integration with improved convergence, *Large-Scale Scientific Computing*, 158-165.
- [10] Krzykacz-Hausman, B. (1990). Gesellschaft fuer reaktor sicherheit (GRS) Mbh. Technical report GSR, 1700, garching.
- [11] Levy, G. (2002). A introduction to quasi-random number integration with improved convergence . NAG Ltd, Oxford, Uk.
- [12] McKay, M. (1996). Variance based methods for assessing uncertainty importance in nureg-1150 analysis, Technical report LA-UN-96-2695, Los almos laboratories.
- [13] Sacks, J. Welch, W. J. Mitchell, T. J. and Wynn, H. P. (1989). Design and analysis of computer experiments, *Statistical Science*, **4**, 409-435.
- [14] Saltelli, A. Andres, T.H. and Homma, T. (1993). Some new techniques in sensitivity analysis of model output, *Computational Statistics and Data Analysis*, **15**, 211-238.
- [15] Saltelli, A. (2002). Making best use of model valuations to compute sensitivity analysis indices, *Computer physics communication*, **145**, 280-297.
- [16] Saltelli, A. Annoni, P. Azzini, I. Compolongo, F. Ratto, M. and Tarantola, S. (2010). Varince based sensitivity analysis of model output. Design and estimate for the total sensitivity index, *Computer physics communaction*, **181**, 259-270.
- [17] Saltelli, A. Ratto, M. Andres, T. Compolongo, F. Cariboni, J. and Gatelli, D. (2008). *Golobal sensitivity analysis the primer*, 1 edition, john wiley and sons ltd.
- [18] Saltelli, A. Tarantola, S. Compolongo, F. and Ratto, M. (2004). *Sensitivity analysis in practice*, 1 edition, John Wiley and Sons ltd.

- [19] Santner, T.J. Williams, B. J. and Notz, W. I. (2003). *The design and analysis of computer experiments*, 1 edition, Springer, New York ltd.
- [20] Sobol, I.M. (1998). On quasi-monte carlo integrations, *Math. and computation experiment*, **47**, 103-112.
- [21] Sobol, I.M. (1993). Sensitivity analysis for non-linear mathematical model, *Mathematical Modeling and Computational Experiment*, **1**, 407-414.
- [22] Wade, A. J. Durand, P. Beaujouan, V. Wessel, W. W. Raat, K. J. Whitehead, P.G. Buterfield, D. Rankinen k. leptiso, A. (2002). A nitrogen model for European catchment: INCA, new model structure and equation, *Hydrology and earth system science*, **6**, 559-582.
- [23] Whitehead, P.G. Wilson, E. J. Buterfield, D. (1998a). A semi-distributed nitrogen model for multiple source assessment in catchment (INCA): model structure and procces equation, *Science of the total enviroment*, **210/211**, 547-558.
- [24] Whitehead, P.G. (1990). Modeling nitrate from agriculture to public water supplies, *Philosophical Transactions of the Royal Society*, **329**, 403-410.