

Honti Márk

Bayesi módszerek a vízi környezet modellezésében

avagy a modellezés elkerülhetetlen szubjektivitása

Tartalomjegyzék

1	Bevezetés	3
1.1.	Hagyományos modellezési gyakorlat: a kezdetektől a GLUE-ig	5
1.2.	A kalibráció és a bizonytalanság-vizsgálat problémái: A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetősége	13
2	A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetőségének javítása	23
2.1.	Modellparaméterek bayesi kalibrációja	23
2.2.	Felismerhetetlen paraméterek egy „egyszerű” rendszerben	26
2.3.	Folyamatok felismerhetőségének javítása új rendszerek bevonásával	30
2.4.	Értelmezhető-e a kalibrált paraméterek?	35
3	Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése	37
3.1.	Szerkezeti hibák bayesi kezelése	39
3.2.	A bemeneti- és szerkezeti-hibák kölcsönhatása	43
3.3.	A zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamat	46
3.4.	Napi hidrológiai modell hibájának leírása zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamatokkal	49
3.5.	Eloszlások előrejelzése szerkezeti és bemeneti hibák jelenlétében	60
4	Strukturális hiányosságok kezelése a modellen belül időben változó paraméterekkel	69
4.1.	Bayesi tanulás a tavi oxigénforgalom modellezésében	73
5	Összefoglalás és tézisek	83
5.1.	Összefoglalás	83
5.2.	Tézisek	85
	Irodalomjegyzék	89

Ábrák jegyzéke

1.1.	A modellalkotás folyamata.	8
1.2.	Felismerhetőségi probléma egy egyszerű regresszióban.	16
1.3.	Konceptcionális csapadék-lefolyás modell tározóinak felismerhetőségi problémái.	17
1.4.	A gázcsere-becslés hibaparamétereinek azon tartománya, ahol a nettó termelés-gázcsere korreláció alulbecsült.	20
1.5.	A légzés-becslés hibaparamétereinek azon tartománya, ahol a bruttó termelés-légzés korreláció alulbecsült.	20
2.1.	Az OECD 308-as kísérlet folyamatábrája.	29
2.2.	Paraméterek bizonytalansága prior eloszlásokkal és azok nélkül.	30
2.3.	Víz- és üledékbeli lebomlási tényezők az OECD 308-as kísérletben.	31
2.4.	Az OECD 308-as kísérlet 4 különböző modellje	33
2.5.	Paraméterek poszterior eloszlása együttes és külön kalibrációban.	34
3.1.	Bizonytalansági források a csapadék-lefolyás modellezésben	39
3.2.	A bemeneti- és szerkezeti-bizonytalanság egyenértékűsége	45
3.3.	A zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamat varianciájának időbeli változása	49
3.4.	Hagyományos hibamodellek és a zavart OU hibamodell összehasonlítása - idősorok	55
3.5.	Hagyományos hibamodellek és a zavart OU hibamodell összehasonlítása - statisztikai feltételezések	56
3.6.	Hagyományos hibamodellek és a zavart OU hibamodell összehasonlítása - előrejelzési trajektóriák	57
3.7.	Hagyományos hibamodellek és a zavart OU hibamodell összehasonlítása - modell állapotváltozók	58
3.8.	A kvantilis- és az idősor-bizonytalanság hatása az eloszlásra	63
3.9.	Vízhozamkvantilisek eloszlásai különböző kalibrációs eljárásokkal	67
4.1.	Vízhozameloszlás kalibrált optimuma hozzáadandó szisztematikus hibatag esetén	70
4.2.	Az illeszkedés és kalibrációs időszak hosszának kapcsolata	71

Ábrák jegyzéke

4.3. Oxigénforgalmi paraméterek felismerhetetlensége	75
4.4. Oxigénforgalmi modell paraméterének időbeli változása	77
4.5. Egyszerű oxigénforgalmi modell paramétereinek időbeli változása .	78
4.6. Nyíltvízi ökoszisztéma egyszerűsített anyagforgalmi vázlata	79
4.7. Mért és modellezett algabiomassza három tóban	81

„Complex models are rarely useful (unless for those writing their dissertations).

The mathematical technique of modelling consists of ignoring this trouble and speaking about your deductive model in such a way as if it coincided with reality.”

(Vladyimir Igorjevics Arnold*)

*On teaching mathematics. Russ. Math. Surveys 53(1): 229–236 (1998)

1 Bevezetés

■ *A vízi környezet modellezésének jelentősége* ■ *Miért kell ezeket a matematikai modelleket kalibrálni?* ■ *Irodalmi áttekintés a hagyományos, vagyis nem bayesi módszereken alapuló modellezési gyakorlatról* ■ *A felismerhetetlenség és dekompozíció együttes által előállított műtermékek bemutatása saját esettanulmányokon* (Honti és Stamm, 2010; Honti és Istvánovics, 2019)

[1] A vízi környezet kutatásának és szabályozásának alapvető eszközei a matematikai modellek. Ezek a környezeti rendszerek rendkívül összetett, fizikai, kémiai, ökológiai és gyakran társadalmi részekkel bíró, számtalan kölcsönhatást tartalmazó, változatos szerveződések (pl. több ezer km^2 kiterjedésű vízgyűjtő, vagy éppen néhány cm mély vizet és üledéket tartalmazó lombik) melyek teljes megismerésére még a legkisebb rendszerek esetében sincs mód. A modellek tudományos létjogosultsága többértű: egyrészt a matematikai modellezés segítségével próbáljuk a rendszer alapvető tulajdonságait és viselkedését megragadni, hogy a hiányos ismereteink ellenére is megjósolhassuk a rendszert érő természetes vagy mesterséges hatások esetleges következményeit. Másrészt a modellek segítségével megvizsgálhatjuk, hogy a rendszerre vonatkozó, matematikai vagy logikai formába öntött (rész)hipotéziseinket megcáfolja-e a rendszer megfigyelhető viselkedése. Harmadrészt a modellek segítenek felismerni az adott rendszerről rendelkezésre álló tudás vagy megfigyelési adatok legfontosabb hiányosságait.

[2] A modellezés a nem kutatási célú alkalmazásokban is központi szerepet tölt be. Környezeti hatásvizsgálatokban a hatások becslésének elsődleges eszköze, melynek segítségével eldöntjük, hogy egy adott beruházás vagy beavatkozás milyen mértékben terheli vagy éppen javítja a környezet állapotát. Modellezéssel értelmezzük összetett laboratóriumi kísérletek eredményeit is. A gyógyszer- és peszticid-hatóanyagok környezeti perzisztenciáját például szabványosított kísérletekből modellezéssel állapítjuk meg, így döntve el, hogy a hatóanyag piacra dobható-e. A távérzékeléssel vagy nagy időbeli sűrűségű, automatikus műszerekkel begyűjtött óriási adatbázisok minőségellenőrzése és értelmezése is modellekkel történik.

Kész modellek használói gyakran objektív igazságnak tekintik a modell [3] eredményeit, különösen akkor, ha a modell „kanonizált”, vagyis az adott célra széles körűen elfogadott és régóta használt. Főleg akkor, ha pl. elismert állami szervek (pl. az USA Környezetvédelmi Ügynöksége) szorgalmazzák a modell alkalmazását. Ezzel szemben a környezeti modellek a vizsgált rendszerek bonyolultsága és/vagy a teljes megismerhetőség hiánya miatt olyan absztrakt állításokból épülnek fel, melyek nem lehetnek általánosan érvényesek, így a modellek eredményei sem tekinthetők objektívnek. Az általános érvényesség hiánya könnyen illusztrálható *Streeter és Phelps* (1925) klasszikus vízminőségi modelljén. Ez a vízfolyásokba bocsátott szennyvíz „lebomlását” és az ennek következtében fellépő időleges oxigénhiányt (amit a szervesanyagot lebontó bakteriális biomaszra fokozott légzése okoz) két könnyen mérhető állapotváltozó egyszerű függvényeként írja le, elhanyagolva a valóságban végbemenő, de a mai napig nehezen megfigyelhető, komplex történéseket. A Streeter-Phelps modell két paramétere, a lebontási tényező és a gázcsere-állandó számos folyamat* eredőjeként veszi fel aktuális értékét. A vízi környezet modellezésében tehát ritkán találkozhatunk a fizikai modelleknél megszokott, bárhol és bármikor érvényes, precízen ismert állandókkal. Emiatt ezeket a modelleket használat előtt az adott rendszerre kell igazítani, de a tapasztalat szerint még az adott esetre szabott modellek esetében is számottevő mértékű bizonytalanság marad, amit számszerűsíteni kell. Az előbbi munkafolyamatot kalibrációnak, az utóbbit bizonytalanság-vizsgálatnak nevezik.

A környezeti modellek korlátozott érvényessége a kezdetek óta motiválja [4] a modellfejlesztőket, hogy ezt a problémát a paraméterek és folyamatok absztrakciós szintjének csökkentésével, vagyis a modell-folyamatok részletességének növelésével oldják meg. Ez azonban oda vezet, hogy a mérhető/megfigyelhető (vagyis: bizonyítható, illetve cáfolható) modellrészek aránya csökken, vagyis a szerkezeti absztrakció csökkenésével a szerkezeti bizonytalanság növekszik, ami aztán a továbbra is szükséges kalibrációban és bizonytalanság-vizsgálatban gondokat okoz.

Értekezésem célja a vízi környezet modellezésében a kalibráció és a bizonytalanságvizsgálat fejlesztése bayesi statisztikai módszerekkel. A bayesi statisztika formálisan kezelhetővé teszi a modellezés szubjektív elemeit, valamint rámutat, hogy a szubjektivitás minden mai modellezési gyakorlat elkerülhetetlen része.

Az értekezés felépítése:

- A hagyományos modellezési gyakorlat ismertetése a kezdetektől a *Gene-*

*Pl. a bakteriális biomasz mennyiségi és minőségi átalakulása a szennyezés bebocsátási helye alatt, a szervesanyag összetételének relatív változása a lebonthatóság függvényében, a különböző tápanyagok limitáló szerepe, illetve a gázcsere intenzitásának változása a meteorológiai és hidraulikai körülmények függvényében.

1. fejezet: Bevezetés

ralised Likelihood Uncertainty Estimation (GLUE) eljárásig

- A bayesi modellkalibráció alapelvei
- Fejlesztések a kalibráció és a bizonytalanság-vizsgálat területén
- Általános következtetések

1.1. Hagyományos modellezési gyakorlat: a kezdetektől a GLUE-ig

■ *Irodalmi áttekintés a hagyományos, vagyis nem bayesi módszereken alapuló modellezési gyakorlatról*

A modellalkotás folyamata

- [7] A környezeti modellalkotás folyamatát *Beck* (1983) és *Somlyódy és van Straten* (1986) ismerteti (1.1. ábra). A modell a valóságról alkotott rész-hipotézisek többé vagy kevésbé bonyolult halmaza, a modell szerkezete pedig ezen hipotézisek matematikai vagy logikai formája és ezek összekapcsolódása (*Beck*, 2014).
- [8] A vízi környezet modellezésében legtöbbször determinisztikus, dinamikus idősor-modelleket használunk, ezért a továbbiakban feltételezzük, hogy ilyen modellről van szó[†]. Az ilyen modellek különböző tárolók és pufferek közötti anyag- és energiáramokat számolnak ki a rendszer állapota és a külső behatások függvényében, leggyakrabban differenciálegyenletek megoldásával. A modell-rendszerek aktuális állapotát egyértelműen jellemzik a tárolók és pufferek állapotai ill. mennyiségei, melyeket állapotváltozóknak (*state variables*) nevezünk. Az ilyen rendszerek markoviak, mivel a jelenlegi állapot ismerete elegendő egy jövőbeli hatásra adott válasz becsléséhez, nem szükséges a régebbi hatások ismerete. A modell differenciálegyenletei a tárolók és pufferek változásait írják le a fluxusok segítségével, vagyis jellemzően anyag- és/vagy energiamérleget írnak le. A differenciálegyenletek determinisztikusak, vagyis nem tartalmaznak véletlenszerű komponenseket. A fluxusokat az állapotváltozók értékei és a külső hatások mellett a rendszer időben állandó (*time-invariant*) tulajdonságai befolyásolják, melyeket paramétereknek nevezünk. A paraméterek lehetnek jól definiált fizikai, ritkábban kémiai, biológiai tulajdonságok, melyek rendszerfüggetlenek és emiatt ismertek (pl. a víz viszkozitása, nehézségi gyorsulás,

[†]Bár *Beck* (2014) nagy jövőt jósolt az alternatív modellszerkezeteknek, mint a fuzzy logikai hálózatok, mesterséges neurális hálózatok, stb. Ezek egyrészt nem, vagy csak nagyon lassan terjednek, másrészt ugyanazok a problémák terhelik őket, mint a hagyományos szerkezetű, egyenleteken alapuló, folyamatokat leíró modelleket.

1.1. Hagyományos modellezési gyakorlat: a kezdetektől a GLUE-ig

stb.), de lehetnek olyan – gyakran aggregált – fizikai/kémiai/biológiai/ökológiai mennyiségek, melyek rendszer-specifikusak és ezért értékük előre nem, vagy csak hozzávetőlegesen ismert (pl. összegyülekezési idő egy vízgyűjtőn, lebomló vegyület felezési ideje a környezetben, algatársulás maximális növekedési rátája, stb.). A paraméterek ezen második csoportját a kalibrációnak nevezett folyamat segítségével állíthatjuk be, amihez a peremfeltételekre és a rendszer válaszára vonatkozó, összetartozó adatokat használunk fel. A kalibráció célja a modellezett rendszer viselkedésének minél pontosabb reprodukálása. A klasszikus modellezési gyakorlat feltételezi, hogy ha a modell a valóságban megfigyelt peremfeltételek között nem a valós rendszer viselkedésének megfelelően működik, azt a nem ismert paraméterek hibás értékei okozzák.[‡] A modell ismert peremfeltételek között mutatott viselkedése általában közelíthető a valós rendszeréhez a nem ismert paraméterek értékeinek változtatásával. Ezen kalibrálható paraméterek optimális értéke az, ahol a modell kimenete a lehető legnagyobb mértékben hasonlít a megfigyelésekre. A hasonlóság mértékét a modellező objektív (statisztikai vagy egyéb módon) vagy szubjektív formában (pl. vizuális összehasonlítás) definiálhatja.

A környezeti modellek többsége kalibrációra szorul. Még a „tisztán fizikai” [9] hidrodinamikai modellek esetében is megjelennek olyan rendszertulajdonságok, melyek pontosan nem ismertek és közvetlenül nem mérhetők az absztrakció vagy a térbeli aggregáció magas foka miatt (pl. ártér egyes részeinek effektív érdessége), így a kalibráció bevallottan vagy rejtett módon része a legtöbb modellezési feladatnak.

A környezeti modellek kalibrálható paraméterei legtöbbször eltérő [10] érzékenyséűek, vagyis a modell kimenete eltérő mértékben reagál megváltoztatásukra. Ez a kalibráció során kihasználható, hiszen az érzékeny paraméterekre koncentrálna a kalibrációs feladat dimenzióinak száma gyakran jelentősen csökkenthető. Különösen komplex, sokparaméteres modelleknél elég a paraméterek töredékét megváltoztatni a kívánt illeszkedés eléréséhez. Ezért szokásos a kalibráció előtt elvégezni a paraméterek érzékenységének lokális vagy regionális vizsgálatát. A lokális vizsgálatban egy adott modellállapotban, a többi paraméter értékének rögzítésével vizsgálják a paraméter egységnyi perturbációjának hatását a modell kimenetére. A regionális vizsgálatban többféle modellállapot és paraméterkombináció kiértékelésével állapítják meg a paraméterek érzékenységét.

A kalibrált környezeti modell paraméterei általában bizonytalanok, vagyis [11] kissé, vagy akár jelentősen eltérő paraméterértékekkel is az optimálishoz hasonló

[‡]A valóságban gyakran előfordul, hogy nem [csak] a modell paraméterei rosszak, hanem a szerkezete [az egyenletek], és/vagy a peremfeltételekre, illetve a valós rendszer viselkedésére vonatkozó megfigyelések [is].

1. fejezet: Bevezetés

illeszkedés érhető el (*Beck és van Straten*, 1983). Ez a bizonytalanság kihat a modell használatára is, mivel az eltérő paraméterértékek a kalibrációétól eltérő peremfeltételek és modellállapotok között már nem feltétlenül működnek hasonlóan. Így a modell előrejelzéseinek értelmezéséhez nemcsak a paraméterek bizonytalanságát kell becsülnünk, hanem azoknak a modell kimeneteire gyakorolt hatását is. Ha más bizonytalansági forrás nincs, akkor a paraméterek bizonytalansága jelöli ki a determinisztikus modell előrejelzéseinek bizonytalanságát.

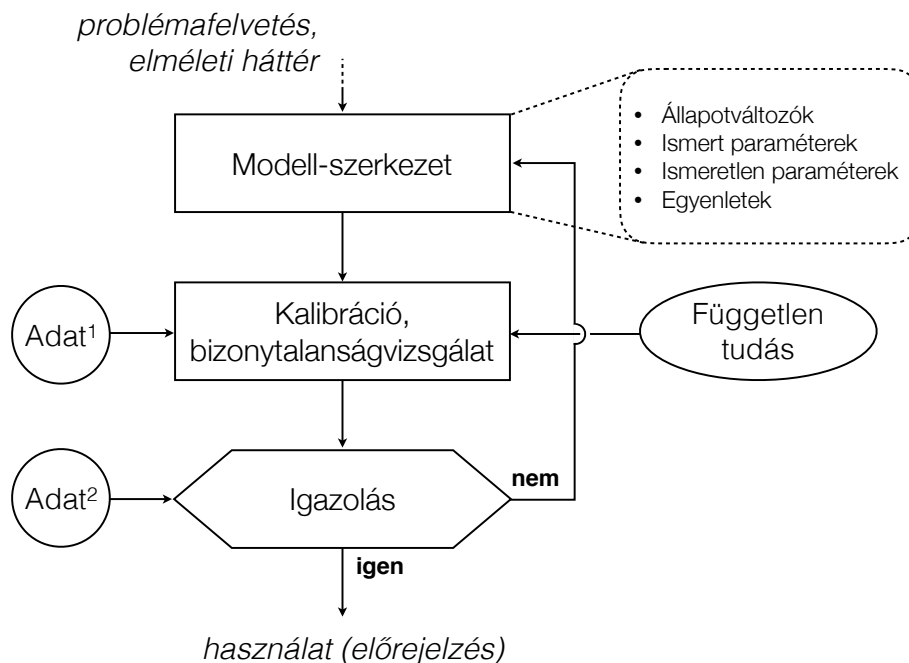
- [12] A kalibráció (és bizonytalanság-vizsgálat) elvégzése után bizonyítani kell, hogy a kalibrált paraméterek valóban olyan, a rendszerre jellemző és időben állandó értékeket vettek fel, melyek eltérő peremfeltételek között is megfelelően működnek. Ellenkező esetben a kalibráció eredménye kontextus-függőnek tekinthető és a modell nem használható általános, a kalibráció során felhasználttól eltérő peremfeltételek között vagy a kalibráció során tapasztalttól eltérő rendszerállapotok szimulációjára. Ez a bizonyítás az igazolás (*validation*), ahol be kell mutatni, hogy a modell a kalibráció során nem használt peremfeltételek mellett futtatva is még elfogadható mértékű eltérést produkál a mérési adatokhoz képest.
- [13] Az igazolás sikeres teljesítése után kerülhet sor a modell tényleges használatára, ami jellemzően kissé eltérő peremfeltételek melletti futtatást jelent. Ha a modellezés célja a hipotézisvizsgálat volt, akkor az igazolás már maga az eredmény, mivel sikeres teljesítése azt jelenti, hogy az adatok a modellbe épített feltételezéseket nem cáfolják egyértelműen. Ez a vizsgálat persze további adatokkal tetszés szerint folytatható.
- [14] A modellezés idealizált folyamata nem ér véget a modell használatával. Ideális esetben a modell alkalmazása után begyűjtött adatokkal megvizsgálható, hogy a modell számításai valóban beváltak-e. A módszer megegyezik az igazolásával. Ha a modell nem vált be, megvizsgálható, hogy melyik paraméter, illetve modell mechanizmus okolható ezért, így a modell kalibrációja vagy szerkezete – további alkalmazás reményében – javítható.
- [15] A következő (1.1. és 1.1.) fejezetekben a kalibráció hagyományos gyakorlatát és a bizonytalanság-vizsgálat kezdeti módszereit tekintjük át, majd ismertetjük ezek problémáit (1.2. fejezet).

Kalibráció

Klasszikus modellkalibráció

- [16] A kalibráció során a modell nem pontosan ismert tulajdonságait, vagyis a paramétereket kell úgy optimalizálni, hogy a modell által számított eredmények minél jobban egyezzenek az ezekre a mennyiségekre rendelkezésre álló megfigyelésekkel vagy más referencia-adatokkal. Ez tulajdonképpen azonos a regresszió problémájával. A modell kimenet és a megfigyelések illeszkedésének

1.1. Hagyományos modellezési gyakorlat: a kezdetektől a GLUE-ig



1.1. ábra. A modellalkotás folyamata Beck (1983) és Somlyódy és van Straten (1986) nyomán. Az 1 és 2 index a rendszerre vonatkozó megfigyelési adatok független részhalmazait jelöli. A független tudás a modellszerkezetbe be nem épített egyéb információkat jelenti.

jellemzésére általában statisztikai mutatókat használunk, mivel feltételezzük, hogy a modell előrejelzései és a megfigyelések közötti különbség (a hiba) véletlenszerű. A hagyományos illeszkedési mutató, az eltérések négyzetösszege is ezen a háttéren alapul.

Egy adott paraméter-kombináció (θ) likelihoodja[§] adott referencia-adatok [17] (Y_O) mellett megegyezik a megfigyelések valószínűségével az adott paraméterek mellett:

$$L(\theta, Y_O) = p(Y_O | \theta) \quad (1.1)$$

A kalibráció célja annak a paraméterkombinációnak a megtalálása, amely a [18] legnagyobb likelihoodhoz tartozik. A likelihood kiszámításához tehát $p(Y_O | \theta)$ -t kell kiszámítani. Ehhez különböző statisztikai feltevések szükségesek a modell-

[§]A likelihood *retrospektív* valószínűség. Míg a valószínűség előzetes becslés a rendszer viselkedésére a rendszerjellemezők (paraméterek) függvényében, a likelihood utólagos becslés a paraméterekre a rendszer viselkedésének ismeretében.

1. fejezet: Bevezetés

eredmények és a referencia-adatok eltéréseiről, mely feltételezéseket összefoglaló néven hibamodellnek nevezünk. Egy adott θ -hoz egyértelműen kiszámítható a determinisztikus modell kimenete ($Y_M(\theta)$), hiszen a bemenő adatok és a peremfeltételek nem változnak. Ez a determinisztikus kimenet sztochasztikussá válik, ha egy véletlenszerű hibatagot (E) adunk hozzá, amely leírja a különbséget a modell eredményei és a megfigyelések között:

$$Y_O = Y_M(\theta) + E \quad (1.2)$$

- [19] A (1.2) egyenletben megfogalmazott feltevés már a hibamodell része, hiszen elképzelhető – és a gyakorlatban elő is fordul –, hogy a mérések és a modell eredmények közötti különbség nem egyetlen véletlenszerű komponensből származik, illetve a hiba nem feltétlenül a két adatsor különbségeként értelmezendő. A (1.2) egyenlet alapján a hibatag kifejezhető:

$$Y_O - Y_M(\theta) = E \quad (1.3)$$

vagyis E sűrűségfüggvényének (f_E) ismeretében:

$$p(Y_O | \theta) = f_E(Y_O - Y_M(\theta)) \quad (1.4)$$

- [20] Ha feltételezzük, hogy E fehér zaj, vagyis 0 várható értékű, σ szórású független, normális eloszlású sorozat ($E_i = \sigma \cdot \varepsilon$, ahol ε egy független, standard normál eloszlású véletlen sorozat eleme), akkor az i -edik Y_O és $Y_M(\theta)$ párra:

$$L(\theta, Y_{O,i}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(Y_{O,i} - Y_{M,i}(\theta))^2}{2\sigma^2}\right) \quad (1.5)$$

- [21] A függetlenség feltételezése miatt a teljes idősorokra a likelihood az egyes elemek likelihoodjából szorzással képzendő:

$$L(\theta, Y_O) = \prod_i \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(Y_{O,i} - Y_{M,i}(\theta))^2}{2\sigma^2}\right) \quad (1.6)$$

- [22] Számítógépeken a szokványos IEEE 754 szabvány szerinti lebegőpontos számábrázolás és 64 bites számméret mellett a legkisebb kezelhető pozitív szám 10^{-300} körül van. Hosszú mérési adatsoroknál és nagyobb abszolút hibaértékeknel ($Y_{O,i} - Y_{M,i}(\theta)$ nagysága függ a mértékegységektől) az (1.6) egyenlet könnyedén kiszaladhat ebből a tartományból, azaz a likelihood kisebb lesz, mint 10^{-300} . Így számítási szempontból előnyösebb a likelihood helyett annak logaritmusát használni:

$$\log L(\theta, Y_O) = -\frac{n}{2} \log(2\pi) - \frac{n}{2} \log(2\sigma^2) - \frac{1}{2\sigma^2} \sum_i (Y_{O,i} - Y_{M,i}(\theta))^2 \quad (1.7)$$

1.1. Hagyományos modellezési gyakorlat: a kezdetektől a GLUE-ig

ahol n a hibaadatsor hossza. A kalibráció szempontjából az (1.7) egyenletből csak azok a részek fontosak, amelyek két paraméterkombináció esetén különböznek, hiszen az optimalizáláshoz csak ezek szükségesek. Így az (1.7) a következő alakra csökkenthető:

$$-\log L(\theta, Y_O) \propto \sum_i (Y_{O,i} - Y_{M,i}(\theta))^2 \quad (1.8)$$

ahol \propto az arányosság jele. Tehát a bemutatott egyszerű, független normális eloszlású hibamodell alkalmazásakor -1 -gyel történő szorzás után a likelihood arányos a négyzetes hibaösszeggel, vagyis az optimális megoldás a legkisebb négyzetes hibához tartozik.

Egyéb, likelihood-szerű mértékek

Az illeszkedés minőségének leírására nemcsak a likelihood használható. A modellezési gyakorlatban elterjedt a Pearson-féle korreláció négyzete (determinációs együttható, r^2), a Nash-Sutcliffe index (*Nash és Sutcliffe, 1970*), az átlagos négyzetes hiba (RMSE, amely közel áll a klasszikus log-likelihoodhoz), a legnagyobb abszolút hiba és számos más informális hibamérték használata. Tökéletes modell és hibátlan adatok esetén bármely szokványos hibamérték a tökéletes illeszkedésnél venné fel optimumát, csakúgy, mint a klasszikus, formális likelihood. A valóságban viszont tökéletes illeszkedés nem érhető el és a különböző hibamértékek alapján optimálisnak tekinthető megoldások különböznek. [23]

Bizonytalanság-vizsgálat

Logikai alapon is könnyen és szemléletesen indokolható, hogy miért kell a kalibrált paraméterek bizonytalanságát vizsgálni. Ha az elérhető legjobb illeszkedés nem tökéletes, tehát az optimális paraméterkészlet hibája nem zero, akkor várható, hogy a kalibrációs eljárás megpróbálja a modellt a hibákra is ráilleszteni, hiszen a jószág egyetlen kritériuma a lehető legjobb likelihood érték elérése. Ez azt jelenti, hogy a véges számú megfigyelésre illesztett (tökéletes) modell a „valós” paramétereket csak bizonytalan módon találja el. Az optimális megoldásnak tehát hibák jelenlétében nem kell pontosan egybeesnie a valósággal, vagyis az optimális megoldás bizonytalan. A bizonytalanság-vizsgálat célja azon paraméter-készletek meghatározása, melyek nem szignifikánsan valószínűtlenebbek, mint maga az optimális megoldás. Ezután a paraméter-készletek alapján számszerűsíthető a paraméterek bizonytalanságának hatása a modell kimenetére. [24]

1. fejezet: Bevezetés

A Hornberger–Spear-féle érzékenységvizsgálat

- [25] *Hornberger és Spear* (1981) eredetileg arra dolgozta ki regionális érzékenységvizsgálatát, hogy akkor is kalibrálhassunk egy modellt, ha a kalibrációs adatbázis erősen hiányos, vagy csak kvalitatív adatokat tartalmaz. Ilyen helyzetekben a modell kimenete és a megfigyelések közötti statisztikai kapcsolat gyenge, vagy egyáltalán nem értelmezhető, azt azonban a modellező meg tudja ítélni, hogy a modell a rendszerről rendelkezésre álló tudásnak megfelelően viselkedik-e. A vizsgálatban először a paraméterek lehetséges értelmezési tartományán egyenletes eloszlású Monte-Carlo mintázást végzünk, majd az eredmények alapján minden paraméter-kombinációt besorolunk a reális, vagy jól viselkedő (eredetileg: *behavioural*) vagy a nem reális, rosszul viselkedő (*non-behavioural*) megoldások csoportjába. Így a *behavioural* csoport paraméterkészlete jelenteti a használható paramétertartományt és velük lehet kiszámolni a modell eredmények bizonytalanságát (*Hornberger*, 1980). Ezután összehasonlíthatjuk az egyes paraméterek marginális eloszlását a két csoportban és az eredeti mintában. Ha a marginális eloszlások különböznek, az az adott paraméter érzékenységet jelzi, ami statisztikai próbákkal számszerűsíthető. Ellenkező esetben vagy érzéketlen a rendszer az adott paraméterre, vagy erős korreláció áll fenn bizonyos paraméterek között, ami a paraméterek közötti kovariancia elemzésével vizsgálható (*Spear*, 1980). A paraméterek érzékenysége ugyanakkor nem feltétlenül jelzi a felismerhetőségük mértékét, hiszen egy érzékeny paraméter elfogadhatóan teljesítő értékei is nagyon széles tartományban szóródhatnak (*Wagner és mtsai.*, 2002).

A Generalized Likelihood Uncertainty Estimation (GLUE) eljárás

- [26] A GLUE eljárás (*Beven és Binley*, 1992) a Hornberger–Spear-féle érzékenységvizsgálat továbbfejlesztéseként tekinthető. Azon a felismerésen alapul, hogy a kalibráció célfüggvény-értéke szempontjából egyenértékű (*behavioural*) paraméterkészletek nem feltétlenül korlátozódnak a paraméterter egy részére, ezért ha a bizonytalansági tartományt a legjobb megoldás véges környezeteként adjuk meg, az valótlan lehet. Első lépésként az eredeti Hornberger–Spear érzékenységvizsgálathoz hasonlóan a teljes paraméter-teret lefedő Monte-Carlo mintázást végzünk. A modell-eredmények alapján minden paraméterkombináció kap egy *likelihood* értéket, mely most – a 1.1. fejezetben bemutatott statisztikai értelmezéstől eltérően – tágran értelmezett teljesítmény-indikátor lesz: egyetlen kritériuma, hogy zéró értéket vegyen fel a nem jellemző viselkedést produkáló paraméterekre, tehát azokra, amelyek elfogadhatatlan illeszkedést produkálnak a mért adatokra, vagy olyan paraméterértékeket tételeznek fel, melyek igazoltan nem fordulhatnak elő (*Beven és Binley*, 1992). A továbbiakban minden szignifikánsan nem zéró likelihooddal bíró megoldást

1.1. Hagományos modellezési gyakorlat: a kezdetektől a GLUE-ig

lehetségesnek tételezünk fel. A megtartott (*behavioural*) paraméterkészletek likelihood-összegének normalizálásával előállíthatók a paraméterek marginális eloszlásai, valamint a *behavioural* paraméterkészletek futtatási eredményeiből (opcionális likelihood-szerinti súlyozással) a modell kimenetének bizonytalansági tartománya.

A GLUE módszer jellemzőiből kiemelendő, hogy bár a likelihood számítási [27] módszerét explicit módon definiálnunk kell, maga a definíció lehet szubjektív (pl. fuzzy függvénnyel definiált). Ezt *Beven és Binley* (1992) azzal indokolja, hogy a modellezési gyakorlatban amúgy is ritkán teljesülnek a klasszikus likelihood számításnál tett feltételezések (lásd 1.1. fejezet). A másik szubjektív tényező a Monte-Carlo mintázásnál használandó paraméter-tartomány kijelölése.

A GLUE eljárás számos előnnyel rendelkezik a megelőző, egyszerű Monte-Carlo módszerekhez képest. Az illeszkedési mérték, a likelihooddal való súlyozás, az új adatok bevonásának és a modell frissítésének explicit definíciója átláthatóbbá és megismételhetővé teszi a bizonytalanság vizsgálatát. Ugyanakkor a könnyű gyakorlati alkalmazhatóság érdekében bevezetett túlzott pragmatizmus hátrányokkal jár. [28]

Christensen (2004) ismert szerkezetű és paraméterezettségű modell által [29] generált adatokon bemutatta, hogy a GLUE által lehatárolt bizonytalansági tartományok informális likelihood mértékek használata esetén nem feltétlenül konvergálnak a modell eredeti kimenetéhez. *Stedinger és mtsai.* (2008) rámutatnak, hogy az informális mértékeknel a zero likelihoodtól való szignifikáns eltérés definíciója is szubjektív, tehát a *behavioural* készlet is az. *Mantovan és Todini* (2006) kimutatta, hogy a GLUE módszertan nem tesz eleget a tanulás alapvető statisztikai szabályainak. Bár *Beven és Binley* (1992) kifejezetten említi, hogy a GLUE módszertan kiterjeszhető szekvenciális tanulásra, vagyis az eredeti futtatásban nem használt adatok asszimilációjára, az informális likelihood mértékek használata miatt nem teljesül a „több adat = pontosabb becslés” alapelve. Ez a probléma kiküszöbölhető, ha a GLUE eljárásban formális, statisztikai likelihood függvényt használnak (*Stedinger és mtsai.*, 2008), ekkor a GLUE algoritmus a tulajdonképpen bayesi módon tanul (*Mantovan és Todini*, 2006).

A módszer védelmében *Beven és mtsai.* (2007, 2008) úgy érvelnek, hogy [30] – az említett problémák ellenére – a gyakorlatban a formális statisztikai módszerek nem jobbak a GLUE-nál, hiszen a hibamodellekben használt statisztikai feltételezések ritkán teljesülnek, így a formális módszerek elméleti előnyei kihasználhatatlanok. A GLUE módszer eredményei, hasonlóan a formális statisztikai következtetés eredményeihez, természetesen függenek a módszer alkalmazása során tett (szubjektív) feltételezésektől. Így *Beven* (2006) szerint nem is várható el, hogy a GLUE alapján lehatárolt bizonytalansági tartományok eleget tegyenek a statisztikai oldalról támasztott követelményeknek, vagyis hogy az előrejelzés

1. fejezet: Bevezetés

bizonytalansági tartománya adott (nagy) valószínűséggel tartalmazza a tényleges kimenetet. Ezzel a kitételrel azonban a módszer létjogosultsága kérdőjeleződik meg (*Stedinger és mtsai.*, 2008).

1.2. A kalibráció és a bizonytalanság-vizsgálat problémái: A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetősége

■ *A felismerhetetlenség és dekompozíció együtteses által előállított műtermékek bemutatása saját esettanulmányokon (Honti és Stamm, 2010; Honti és Istvánovics, 2019)*

A modellekkel szembeni szkepszis

- [31] A környezeti modellek rendszerint túlzottan sok paraméterrel rendelkeznek, amennyiben számos paraméterkombináció ugyanahhoz a végeredményhez vezet. Ezt az általános jelenséget *Beven és Binley (1992) equifinality*-nek, *van Straten és Keesman (1991)* azonos mértékben valószínű paraméterkészleteknek, *Klepper és mtsai. (1991)* elfogadható (paraméter)készleteknek nevezték. A túlparametrizáltság egyrészt azt jelenti, hogy a modell kimenetének optimalizációjával nem minden paramétert ismerhetünk fel, vagyis nem mindegyiknek tudjuk egyértelműen megállapítani az optimális értékét (*Jakeman és Hornberger, 1993; Beck, 1994*). *Gupta és mtsai. (1998)* felvetették, hogy a kalibrációs célfüggvény több dimenzióssá tétele (többcélú kalibráció – *multi-objective calibration*) javíthatja a paraméterek felismerhetőségét, de csak akkor, ha az egyes kalibrációs célok a lehető legkevésbé függenek össze egymással. Másrészt könnyű belátni, hogy – ha a modell szerkezete olyan, hogy paraméterei matematikai értelemben felismerhetők lennének – a túlparaméterezettség abból fakad, hogy a modellezett rendszerre vonatkozó megfigyeléseink korlátosak. Jó példa erre a szokásos hidrológiai csapadék-lefolyás modellezés: az egyes egyenértékű paraméterkombinációk eltérő belső rendszerállapotból állítják elő ugyanazt a vízhozam-idősort. Ezek a paraméterkombinációk csak azért tekinthetők egyenértékűnek, mert a rendszer belső állapotáról (pl. talajnedvesség, telített felületek nagysága, aktív talajvízkészletek, stb.) általában semmilyen információval nem rendelkezünk, a megfigyelt vízhozam-idősor a modell kalibrációjának egyetlen támpontja. A túlparaméterezettség tehát mérsékelhető a modellezett rendszer megfigyelt jelenségeinek bővítésével is.
- [32] A szinte elkerülhetetlen túlparametrizálás és bizonytalanság miatt a modellek rendszer- és alkalmazás-specifikusak, nem használhatóak általánosan (*Beck,*

1.2. A kalibráció és a bizonytalanság-vizsgálat problémái: A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetősége

1987). Az ebből logikusan következő – és a gyakorlatban számtalanszor bizonyított – „minden célra másféle modellt” alapelv megkérdőjelezi a modellezés létjogosultságát is, hiszen ha a modell csak arra a célra és azon körülményekre jó, melyekre kalibrálták, akkor a kalibrációs adatbázis már minden elérhető ismeretet tartalmaz, amit a modellezésből meg lehetne tudni. Az 1980-as évek második feléig az elérhető mérési lehetőségeket figyelembe véve egyetlen összetettebb, átfogó környezeti modell sem állta volna ki a Karl Popper[¶] által a természettudományok területén a tudományosság alapvető feltételének tekintett egyértelmű megcáfolhatósági próbáját (Beck, 1987). Az adathelyzet az automatikus mérési eljárások elterjedésével sem javult. Bár bizonyos jelenségek azóta nagy idő- vagy térbeli felbontásban mérhetők, a legtöbb környezeti modell állapotváltozói és főbb fluxusai ma sem figyelhetők meg ezekkel a módszerekkel. Emellett a mérési lehetőségek kibővülésével párhuzamosan zajló számítástechnikai fejlődés és az egyes környezeti folyamatokról rendelkezésre álló tudás bővülése a modellek összetettségét is megnövelte. A környezeti modellek gyakorlati felismerhetetlensége azt sugallja, hogy a legegyszerűbb környezeti rendszerektől eltekintve a modellek nem lehetnek jól definiáltak a szó fizikai vagy kémiai modelleknél használatos értelmében (Beck és van Straten, 1983). Ebből következően a környezeti modellekre támaszkodó hosszútávú előrejelzés és tervezés erősen kétséges, hacsak a modellezési gyakorlat önmaga nem ébreszt hasznos gondolatokat (Beck és van Straten, 1983).

A modellek ilyenén problémái még jobban felerősödnek, ha egyes, ismert [33] hibákkal rendelkező komplex modelleket egy adott részterület standardizált leírásaként fogadunk el és kontroll nélküli alkalmazásukkal jelentős, hosszútávú döntéseket hozunk (Pilkey és Pilkey-Jarvis, 2007).

Felismerhetőség elméletben és gyakorlatban

A kalibráció nehézségét és a bizonytalanság-vizsgálat szükségességét a modell- [34] paraméterek és a modellstruktúra nehéz felismerhetősége okozza. Godfrey és DiStefano (1985) az következő elméleti eseteket különböztette meg:

- Egyértelmű felismerhetőség: csak egyetlen egy paraméterkészlet vagy struktúra vezet ugyanahhoz a kimenethez.
- Lokális felismerhetőség: véges sok egyenértékű készlet vagy struktúra vezet ugyanahhoz a kimenethez.
- Felismerhetetlenség: végtelenül sok egyenértékű készlet vagy struktúra létezik.

[¶]Karl Popper: Logik der Forschung/The Logic of Scientific Discovery/A tudományos kutatás logikája

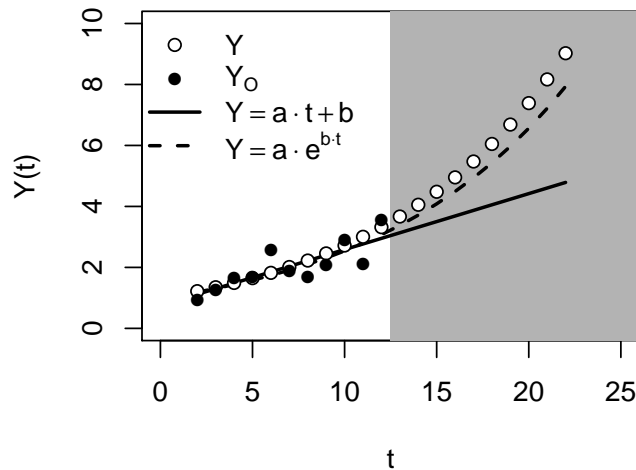
1. fejezet: Bevezetés

- [35] A gyakorlati felismerhetőség követelménye az elméleti felismerhetőség (lokális vagy egyértelmű), mégpedig a kalibrációhoz rendelkezésre álló adatok tükrében. E kitétel nagyon fontos, mivel komplex modelleknél gyakran előfordul, hogy egy adott kalibrációs adatkészleten a modell jelentős alrendszerei nem gyakorolnak számottevő hatást a kimenetre, így paramétereik és egyenleteik még akkor is felismerhetetlenné válnak, ha elméletileg felismerhetők (pl. hóval kapcsolatos hidrológiai folyamatok nem kalibrálhatók egy fagymentes időszak adatai alapján, a fitoplankton növekedésének tápanyaglimitációja nem kalibrálható egy hipertróf, nagy fénykioltású víztestben, stb.).
- [36] A felismerhetőség, vagy annak hiánya alapvetően meghatározza a modell használhatóságát. A paraméterek felismerhetetlensége nyomán az egyenértékű paraméterkészletek kiterjedt altereket fedhetnek le, ami azután alapvetően hibás eredményekhez vezet, amikor a modellt a kalibrációtól eltérő peremfeltételek mellett használjuk (pl. ha a fentebb példaként említett hidrológiai modellt egy olyan időszakra futtatjuk, melyben vannak fagyos és csapadékos napok). Alapelveként leszögezhető, hogy a kalibrációs adatkészleten tanúsított egyenértékű működés egyáltalán nem garantálja az egyenértékűséget eltérő körülmények között, tehát az előrejelzési bizonytalanság meghaladja a kalibráció bizonytalanságát (1.2. ábra). A felismerhetetlenség akkor is gondokat okoz, ha a modell célja a beépített hipotézisek vizsgálata. A statisztikai hipotézisvizsgálathoz hasonlóan a modellezés közvetlenül nem igazolhatja a hipotézist, csak cáfolhatja vagy rámutathat a cáfolat hiányára. Ebből következik, hogy ha a megfigyelt jelenség többféleképpen is magyarázható, akkor modellezéssel nem dönthető el, hogy a valóságban mi történik. Mivel a környezeti problémák összetettek és a modellezett rendszerekről a bonyolultságukhoz képest kevés, a hipotézisvizsgálatban felhasználható információval rendelkezünk, gyakorlati szempontból a problémák jelentős része a többféleképpen is magyarázható – más szóval az egyértelműen nem cáfolható^{||} – kategóriába sorolandó.
- [37] A modellek igazolása a (némileg) eltérő peremfeltételek melletti megbízható működést vizsgálja, tehát elvileg kiszűri a felismerhetőségi problémák okozta gondok egy részét. Ez azonban nem mindig hajtható végre értelmesen. Az éghajlatváltozással kapcsolatos előrejelzések jó része például olyan jövőbeli peremfeltételeket tételez fel, amelyek jelenleg nem figyelhetőek meg, vagyis a modell igazolására felhasználható adatok sincsenek róluk. A felismerhetőségi problémák a modellezés határozatlanságát jelzik, amire racionális válasz lehet pl. további információk bevonása a modellezésbe, vagy a modellezés eredményeitől függő döntések elhalasztása. Ezen okokból egy felismerhetőségi probléma feltárása még akkor is fontos, ha maga a probléma amúgy nem hárítható el.

[38]

^{||}v.ö. Popper definíciójával

1.2. A kalibráció és a bizonytalanság-vizsgálat problémái: A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetősége



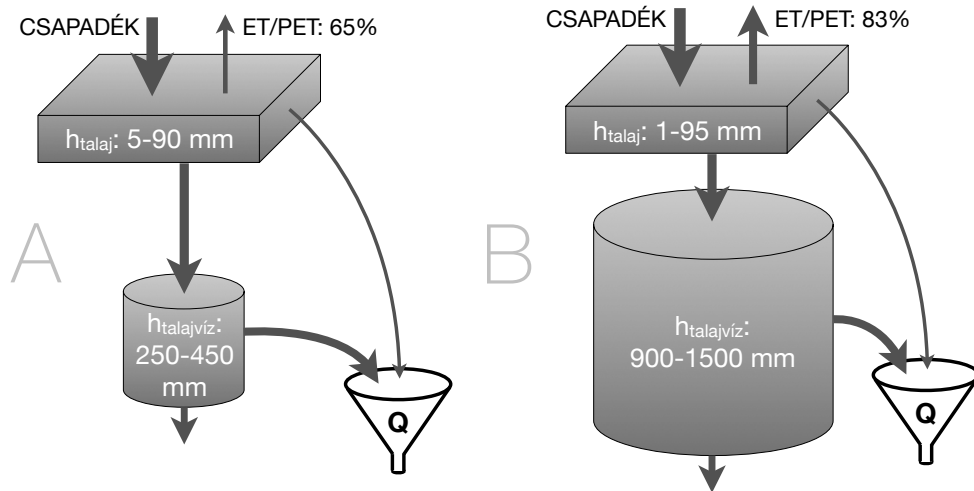
1.2. ábra. Felismerhetőségi probléma egy egyszerű regresszióban. Az idősor első, normális eloszlású, független hibákkal megfigyelhető szakaszára (Y_0) illesztett lineáris és exponenciális modell ($r^2 = 0.81$ mindkét esetben) eltérően viselkedik a kalibrációs időszakon kívül (szürke terület). Y a tényleges idősor.

Bonyolultabb modellek esetében a felismerhetőségi problémák előfordulásának esélye fokozott, mivel a modellszerkezet és a paraméterek felismeréséhez szükséges adatmennyiség az összetettséggel arányosan növekszik. Emiatt részesítik előnyben az azonos teljesítményűnek bizonyuló modellek közül az egyszerűbb szerkezetű, kevesebb paraméterrel rendelkező változatokat (v.ö. Occam borotvája, Akaike Information Criterion). Míg a kalibrálandó paraméterek száma a bonyolultság jó indikátora, a szerkezeti egyszerűség nem osztályozható ennyire egyértelműen. A 1.2. ábra esetében például a leírandó probléma jellegétől függ, hogy a lineáris (pl. állandó külső utánpótlást kapó folyamat) vagy az exponenciális (pl. öngerjesztő folyamat) szerkezet tekinthető-e nyilvánvalóbbnak.

A szerkezeti felismerhetetlenséghez nem szükséges egyazon jelenséget [39] különböző matematikai struktúrákkal leíró, alternatív modellek létrehozása. A paraméterek szélsőséges felismerhetetlensége akár matematikailag azonos, de viselkedésükben radikálisan eltérő modellekhez is vezethet. Példaként ismét csapadék-lefolyás modellt veszünk (1.3. ábra). A rendszerben tározott vízmennyiség határozza meg az alaphozam stabilitását és ezáltal a szóban forgó vízgyűjtőn jelenleg még ritka száraz időszakokban tanúsított viselkedést. Az éghajlatváltozás miatt a száraz időszak gyakorisága várhatóan nőni fog, de az alkalmazott modell és a rendelkezésre álló adatok alapján nem állapítható meg, hogy ez a folyó

1. fejezet: Bevezetés

hozamát mennyiben fogja befolyásolni.



1.3. ábra. A logSPM koncepcionális csapadék-lefolyás modell (*Kuczera és mtsai.*, 2006) tározóinak felismerhetőségi problémája a svájci Gürbe vízgyűjtőjére kalibrálva (*Honti és Stamm*, 2010). ET/PET: a potenciális evapotranspiráció ténylegesen megvalósuló hányada. Az egyenértékű megoldásokhoz tartozó Nash-Sutcliffe index: A=57%, B=55%.

Felismerhetetlenség okozta műtermékek

- [40] A felismerhetetlenség az előrejelzési bizonytalanságon és az eldönthetetlen hipotézisvizsgálatokon kívül más, de alapvetően rokon-jellegű problémákat is okozhat. A vízi környezet modellezésében gyakori, hogy a modellezett és megfigyelhető állapotváltozót több, ellentétes irányú és külön-külön nem, vagy csak nehezen megfigyelhető folyamat befolyásolja. Ilyenkor ezen folyamatok paraméterei csak annyira felismerhetők, amennyire a folyamatok aktivitása és mértéke egymástól karakterisztikusan elkülönül. Ilyen például a vízminőségi modellekben a fitoplankton biomassza – növeli a szaporodás, csökkenti a pusztulás és a növényevő szervezetek táplálkozása; üledékdinamikai modellekben a lebegőanyag mennyisége – növeli a felkeveredés, csökkenti a kiülepedés; vagy bármilyen olyan modell, amely transzportfolyamatokat tartalmaz – a helyi koncentrációt növeli az ideszállított anyag, csökkenti az elfelé mutató transzport. A felszíni vizekben az oldott oxigén (DO) koncentrációja is eleget tesz ezeknek a feltételeknek: a transzportot elhanyagolva a fotoszintézis növeli, a teljes ökoszisztéma légzése csökkenti a koncentrációt, a levegő-víz határfelületen zajló

1.2. A kalibráció és a bizonytalanság-vizsgálat problémái: A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetősége

gázcsere mindkét irányú változást okozhat az aktuális telítettségtől függően. Az anyagcsere oldott oxigénen alapuló modellezési gyakorlata remekül demonstrálja, hogy a felismerhetetlenség okozta bizonytalanság milyen műtermékeket okoz a kalibráció eredményeiben (Honti és Istvánovics, 2019).

A vízi ökoszisztéma anyagcseréjét a limnológia kezdetei óta leggyakrabban az oxigénben kifejezett nettó elsődleges termeléssel (*net ecosystem production*, NEP) jellemzik (Odum, 1956). A transzportfolyamatokat elhanyagoló oxigénforgalmi egyenlet a következő (Hoellein és mtsai., 2013):

$$\frac{dDO(t)}{dt} = GPP(t) - R(t) + X(t) \quad (1.9)$$

ahol dDO/dt a vízben oldott oxigén koncentrációjának időbeli változása, GPP a bruttó elsődleges termelés (*gross primary production*), R a teljes ökoszisztéma légzése, X pedig a gázcsere, melynek iránya akkor pozitív, ha a levegőből a vízbe irányul (minden folyamat mértékegysége [$\text{mg L}^{-1} \text{d}^{-1}$]). Mivel az (1.9) egyenletben csak GPP és R biológiai folyamat, a NEP a kettő különbsége:

$$NEP(t) = GPP(t) - R(t) \quad (1.10)$$

Ha a NEP pozitív, akkor az ökoszisztéma autotróf. Ha negatív, akkor az ökoszisztéma hetero- vagy disztróf (Odum, 1956; Hoellein és mtsai., 2013). A NEP, GPP és R folyamatok meghatározása az anyagcsere-vizsgálatok fő célja (Staehr és mtsai., 2011), mivel a limnológusok nagy ökológiai fontosságot tulajdonítanak értékeiknek és a köztük mutatkozó összefüggéseknek, melyekből távlati következtetéseket vonnak le (del Giorgio és Peters, 1994; Van de Bogert és mtsai., 2007; Solomon és mtsai., 2013).

Az oxigénforgalmi modellezés jelenleg szokásos menete az, hogy a mért DO koncentrációból kiszámítják dDO/dt -t, majd egy kiválasztott empirikus modellel X-et (Hanson és mtsai., 2008; Staehr és mtsai., 2010; McNair és mtsai., 2015). A kettő különbsége adja a nettó elsődleges termelést: $NEP = dDO/dt - X$. Végül GPP és R a NEP hasonló dekompozíciójával adódik, kihasználva, hogy éjszaka nincs fotoszintézis, ekkor tehát $R = NEP$. Mivel X számtalan meteorológia és hidraulikai tényezőtől függ, leírására változatos empirikus modellek állnak rendelkezésre (Cole és Caraco, 1998; Dugan és mtsai., 2016). Az egyes modellek között előforduló nagyságrendi különbségek azt jelzik, hogy a gázcsere becslése egy adott helyen és időben rendkívül bizonytalan, ami a NEP értékét is bizonytalanná teszi.

Ha a becsült (X^*) és a valódi gázcsere között az alábbi viszonyt feltételezzük:

$$X^*(t) = X(t) (1 + e_X(t)) \quad (1.11)$$

1. fejezet: Bevezetés

ahol e_X egy normális eloszlású véletlen folyamat β_X átlaggal és ε_X szórással (β_X jeleníti meg X becslésének szisztematikus hibáját, ε_X a véletlenszerű hibákat), akkor

$$\text{Var}[X^*] = \text{Var}[X](1 + \beta_X)^2 + \varepsilon_X^2 \left(E[X]^2 + \text{Var}[X] \right) \quad (1.12)$$

[45] Mivel a gázcsere mindig az egyensúly irányába hat, így természetes vizekben és hosszú távon a várható értéke elhanyagolható a varianciájához képest, vagyis:

$$\text{Var}[X^*] \approx \text{Var}[X] \left((1 + \beta_X)^2 + \varepsilon_X^2 \right) \quad (1.13)$$

[46] dDO/dt-t jellemzően a biológiai folyamatok irányítják, így az függetlennek tekinthető X-től és X^* -tól. Ezért:

$$\text{Var}[\text{NEP}] = \text{Var}[\text{dDO/dt}] + \text{Var}[X] \quad (1.14)$$

és

$$\text{Var}[\text{NEP}^*] = \text{Var}[\text{dDO/dt}] + \text{Var}[X^*] \quad (1.15)$$

[47] dDO/dt és X függetlensége miatt:

$$\text{Cov}[X, \text{NEP}] = -\text{Var}[X] \quad (1.16)$$

és

$$\text{Cov}[X^*, \text{NEP}^*] = -\text{Var}[X^*] \approx -\text{Var}[X] \left((1 + \beta_X)^2 + \varepsilon_X^2 \right) \quad (1.17)$$

amiből az X és a NEP közötti korreláció a valóságban:

$$\text{Corr}[X, \text{NEP}] = -\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\text{Var}[\text{dDO/dt}]}{\text{Var}[X]}}} \quad (1.18)$$

és a becslés szerint:

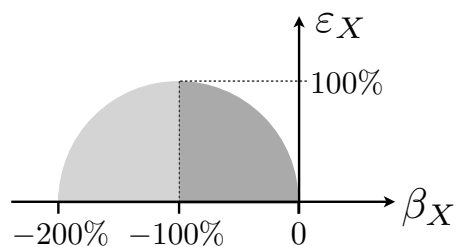
$$\text{Corr}[X^*, \text{NEP}^*] = -\frac{1}{\sqrt{1 + \frac{\text{Var}[\text{dDO/dt}]}{\text{Var}[X]((1+\beta_X)^2 + \varepsilon_X^2)}}} \quad (1.19)$$

[48] Ez azt jelenti, hogy a korreláció X^* és NEP^* között – akár jelentősen – meghaladja a tényleges korrelációt X és NEP között, ha X^* varianciája meghaladja X varianciáját. Ez akkor teljesül, ha:

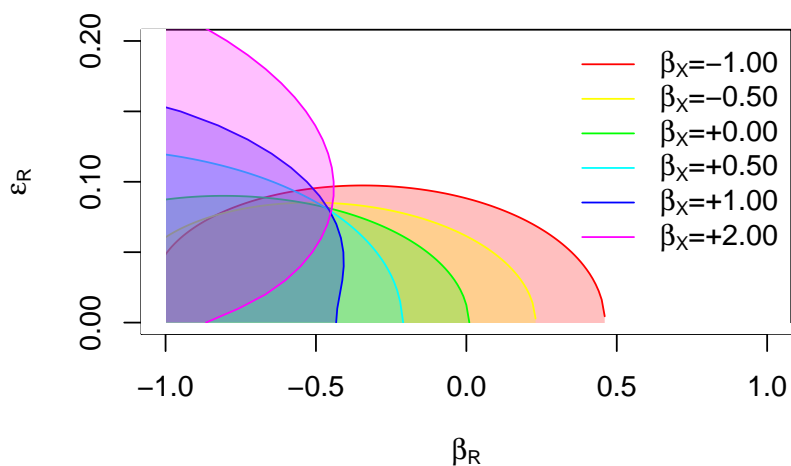
$$\beta_X^2 + 2\beta_X > -\varepsilon_X^2 \quad (1.20)$$

[49]

1.2. A kalibráció és a bizonytalanság-vizsgálat problémái: A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetősége



1.4. ábra. A gázcsere-becslés hibaparamétereinek azon tartománya, ahol $\text{Var}[X^*] \leq \text{Var}[X]$ (szürke területek). A világosabb területen a becslés annyira rossz, hogy a gázcsere előjele sem helyes.



1.5. ábra. R^* hibaparamétereinek azon tartománya, ahol $\text{Corr}[GPP^*, R^*] \leq \text{Corr}[GPP, R]$ (R^* hibáit ugyanúgy parametrizálva, mint X^* -ét, vagyis ε_R a relatív hiba várható értéke, β_R a szórása). A színek a β_X különböző értékeinél érvényes területeit jelentik. Mivel a területek lehatárolásában szerepet játszik a kiinduló DO és R adatok (ko)varianciája, így ez az ábra nem általános érvényű.

1. fejezet: Bevezetés

Az (1.20) egyenletből nyilvánvaló, hogy X^* véletlenszerű hibái minden esetben növelik a látszólagos korrelációt, míg a szisztematikus eltérések csökkenthetik is azt, ha $\beta_X < 0$, vagyis alulbecslésről van szó (1.4. ábra).

- [50] Hasonló módon kimutatható, hogy a GPP és R közötti becsült korrelációt is torzítják X^* és R^* becslési hibái, mégpedig úgy, hogy a korreláció alulbecslési tartománya igen szűk (1.5. ábra). Ha R^* véletlenszerű hibái meghaladják a 15%-ot, akkor a GPP és R közötti korrelációt mindenképpen felülbecsüljük.
- [51] Az oxigénforgalmi vizsgálatokban tapasztalható becslési bizonytalanságot tekintve kijelenthető, hogy a GPP és R napi (rövid távú) értékei közötti lineáris korreláció nagy része a hibaterjedés műterméke, amely teljesen elfedi a napi kapcsolat valószínűsíthetően hiszteretikus jellegét (*Honti és Istvánovics, 2019*). A véletlenszerű hibák az (1.9) és (1.10) egyenletek linearitása miatt fokozzák a lineáris korrelációt. Ezen jelenség miatt a hasonló, bizonytalan dekompozícióval kapott értékek közötti összefüggések (ez esetben: ökológiai) értelmezése a jelenlegi gyakorlat ellenére kerülendő, míg a becslési bizonytalanság pl. további mérések bevonásával csökkenthető. Ezek a jelenségek az összes, a fejezet elején bemutatott dekompozíciós problémát hasonlóan érintik.
- [52] A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetetlensége tehát a modellek alkalmazását majd minden szempontból hátráltatja. Véleményem szerint a különböző felismerhetőségi problémák mérséklése jelenleg a modellezés egyik legfontosabb feladata.

2 A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetőségének javítása

■ *A bayesi paraméter-kalibráció szokásos menete* ■ *A bayesi kalibráció szükségességének illusztrálása egy laboratóriumi rendszer saját fejlesztésű modelljével (Honti és Fenner, 2015)* ■ *A strukturális bizonytalanság csökkentése adatok és modellek bevonásával, saját esettanulmány (Honti és Fenner, 2015; Honti és mtsai., 2016a).* ■ *A modell-paraméterek értelmezésével kapcsolatos problémák összefoglalása*

2.1. Modellparaméterek bayesi kalibrációja

■ *A bayesi paraméter-kalibráció szokásos menete*

[53] A paraméterek felismerhetetlenségén csak a kalibrációs módszer fejlesztésével nem lehet segíteni, egyéb információforrás(ok) bevonására van szükség. Előfordulhat, hogy a paraméterek elméletileg felismerhetők lennének, csak a megfigyelési adathalmaz nem tartalmazott minden részfolyamat szempontjából releváns időszakokat. Ekkor a megfigyelési adatok kiterjesztése segíthet. Gyakran előfordul azonban, hogy a paraméterek továbbra is felismerhetetlenek maradnak, például elméleti felismerhetetlenség miatt. Ezekben az esetekben más megoldásra van szükség.

[54] A bayesi statisztika lehetővé teszi a megfigyelési adatokon túl a paraméterek értékére vonatkozó egyéb információ bevonását a kalibrációs eljárásba és ezzel elméletileg lehetővé teszi bármilyen felismerhetőségi probléma megoldását*. A hagyományos kalibráció azt feltételezi, hogy a kalibrációban csak a hiba, vagyis

*Valóban, még a kalibrációs adathalmaz teljes információhiánya esetén is lenne optimum: a paramétereket kondicionáló prior eloszlás sűrűségfüggvényének maximuma. Lásd később.

2.1. Modellparaméterek bayesi kalibrációja

a modell eredményei és megfigyelési adatok közötti különbség véletlenszerű, maguk a mégoly ismeretlen paraméterek nem igazi valószínűségi változók, és így statisztikai megállapítások csak a hibával kapcsolatban tehetők. Ezzel szemben a bayesi statisztikán alapuló kalibráció a valószínűség kiterjesztett értelmezésével a modell paramétereit is bevonja a statisztikailag kezelhető körbe.

A klasszikus valószínűségi értelmezéstől eltérően a bayesi valószínűség nemcsak [55] tényleges valószínűségi változók esetében, hanem bármivel kapcsolatban értelmezhető. A bayesi értelmezésű valószínűség a klasszikus valószínűség és gyakoriság helyett bizonytalan információt, tudást, véleményt, elvárást jelöl, és ezen definíciónak köszönhetően eredendően szubjektív. A bayesi következtetési folyamatban megkülönböztetjük a bizonyítéktól, vagyis a megfigyelési adatoktól független, a bizonyíték figyelembe vétele előtt érvényes *prior* valószínűséget és a bizonyítéktól és adatoktól is függő, az adatok elemzése utáni *poszterior* valószínűséget. A kettő közötti eltérés tekinthető a bizonyítékból hasznosított információ tudásunkra gyakorolt hatásának.

A bizonyítéktól függő feltételes valószínűséget általánosan a [56] valószínűségi számításból ismert Bayes-tétel alapján számíthatjuk ki:

$$P_{z_1|z_2} = \frac{P_{z_1,z_2}}{P_{z_2}} = \frac{P_{z_2|z_1} P_{z_1}}{P_{z_2}} = \frac{P_{z_2|z_1} P_{z_1}}{\int P_{z_2|\zeta_1} P_{\zeta_1} d\zeta_1} \quad (2.1)$$

ahol z_1 és z_2 tetszőleges események. A bayesi statisztikai értelmezés szerint z_1 a rendszer előzetesen megjósolt, z_2 pedig a ténylegesen megfigyelt viselkedését jelenti, ekkor P_{z_1} a prior, $P_{z_1|z_2}$ a poszterior valószínűség. A korábbi jelölésrendszert használva a (2.1) egyenlet átírható (elhanyagolva a modell bemenő adataitól való függés megjelenítését):

$$P(\theta | Y_O) = \frac{f(Y_O | Y_M(\theta)) \cdot P(\theta)}{\int f(Y_O | Y_M(\vartheta)) \cdot P(\vartheta) d\vartheta} = \frac{L(\theta, Y_O) \cdot P(\theta)}{\int L(\vartheta, Y_O) \cdot P(\vartheta) d\vartheta} \quad (2.2)$$

ahol a θ paraméterkészlet egyértelműen leírja a modell megjósolt viselkedését, hiszen determinisztikus modellekkel foglalkozunk, valamint $f(Y_O | Y_M(\theta)) = L(\theta, Y_O)$ a paraméterek likelihood függvénye, $P(\theta)$ a prior, $P(\theta | Y_O)$ pedig a poszterior valószínűség. A modell paraméterek (θ) valószínűségi kezelése nem képzelhető el a bayesi kereteken kívül, mivel ezek egyáltalán nem tekinthetők klasszikus értelemben vett valószínűségi változónak, így a (2.2) egyenlet alkalmazása valamely modell kalibrációjában egyértelműen szubjektív, bayesi alapokat jelez.

A (2.2) egyenlet törtjeinek nevezője a megfigyelt adatok (Y_O) feltétlen [57] valószínűségét jelképezi. Mivel ez a kalibrációban ez nem játszik szerepet, a

2. fejezet: A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetőségének javítása

képletből kihagyható. Így jutunk a gyakorlatban alkalmazott egyszerű arányossági képletéhez:

$$P(\theta \mid Y_O) \propto L(\theta, Y_O) \cdot P(\theta) \quad (2.3)$$

ahol $L(\theta, Y_O)$ a hagyományos módon számított likelihood.

- [58] A bayesi kalibráció célja a legnagyobb poszterior valószínűségű modellparaméterek megtalálása. A (2.3) egyenletből látható, hogy a hagyományos likelihood alapú kalibrációtól eltérően a kalibráció célfüggvénye nemcsak a modell illeszkedésétől és így közvetve a megfigyelt adatoktól függ, hanem figyelembe kell venni a modell paramétereire vonatkozó prior elvárásokat és elképzeléseket is. A poszterior valószínűség így a likelihood és a prior valószínűség közti formális kompromisszumnak tekinthető. A prior és a likelihood relatív súlyát a kalibrációs adatok paraméterekre vonatkozó információtartalma (mely természetesen a modellszerkezet függvénye is) határozza meg. Kevés, vagy csekély információtartalmú kalibrációs adatoknál a prior dominál. Ha a prior valószínűség rendelkezik *egy jól meghatározott* optimummal, akkor a poszterior valószínűség még teljesen semmitmondó, konstans likelihood és tetszőlegesen bonyolult modellszerkezet mellett is ki fog jelölni egyetlen optimális paraméterkombinációt, vagyis a felismerhetőségi probléma technikai értelemben megoldódik. A bayesi kalibrációval tehát a felismerhetőségi probléma kezelhető, ha a kalibrációs adathalmaztól független egyéb információ, illetve tudás alapján a modell minden paraméterére informatív prior eloszlás hozható létre. Ugyanakkor a prior dominanciája esetén a kalibrációnak nem sok értelme van, hiszen az adatokból a modell nem tanul sokat.
- [59] A prior eloszlás tehát döntően befolyásolhatja a poszterior eloszlás formájában jelentkező végeredményt, így meghatározásakor *óvatosan* kell eljárni. A bayesi kalibráció tudományos alkalmazásakor a prior definíciószerű szubjektivitása ellenére is igyekeznek azt lehetőleg objektív adatokon nyugvó, módszertani szempontból megalapozottan előállítani (Jaynes, 1986). Pusztán statisztikai értelemben ez nem lenne szükségszerű. A szubjektivista iskola nézetei szerint a prior és az egész bayesi statisztika szubjektív volta miatt akármilyen, objektíven nem igazolható tudományos hiedelem vagy elvárás is megfogalmazható prioroként, hiszen az eredmény úgyis szubjektív lesz (Nau, 2001). A (2.3) egyenletből viszont tisztán látszik, hogy a túl magabiztosan megfogalmazott (keskeny sűrűségfüggvényű) prior eloszlás elnyomhatja a likelihoodot és ezzel csökkentheti a kalibrációs adatokból való tanulás eredményességét. Az egyáltalán nem informatív prior eloszlás, amely bármely paraméterkombinációhoz ugyanazt a valószínűséget rendeli, visszaadja a hagyományos kalibráció egyenletét: a poszterior egyenlő lesz a likelihooddal.

2.2. Felismerhetetlen paraméterek egy „egyszerű” rendszerben

■ *A bayesi kalibráció szükségességének illusztrálása egy laboratóriumi rendszer saját fejlesztésű modelljével (Honti és Fenner, 2015)*

A környezeti modellek sokszor rossz leíró és előrejelző teljesítményét gyakran [60] magyarázzák azzal, hogy ezek a rendszerek nyíltak, a mérési lehetőségek korlátai miatt szerkezetük, állapotuk és a bennük fellépő kölcsönhatások teljes mértékben nem megismerhetők. A megismerhetőség hiánya miatt a rendszerre alkalmazott modell paramétereit csak bizonytalan módon határozhatjuk meg. E magyarázat alapján azt várhatnánk, hogy ellenőrzött laboratóriumi körülmények között tartott kísérleti rendszereket pontosabban lehet modellezni. A gyakorlat viszont azt mutatja, hogy laboratóriumban, egészen egyszerű, zárt rendszerekben is előállhatnak olyan modellezési problémák, amikor a paraméterek felismerhetősége rendkívül gyenge.

A gazdaság és a társadalom különböző szektoraiban használt számtalan szintetikus vegyület többsége életciklusa során eljut a felszíni és felszín alatti vizekbe. A peszticidek (főként gyom-, rovar-, gombaölőszerek) közvetlenül, vagy hidrológiai folyamatok útján jutnak a vizekbe. A gyógyszer-hatóanyagok és különböző ipari vegyületek a csatorarendszeren és a szennyvíztisztón keresztül érik el a folyókat. A jellemzően az éptőanyagok védelmét szolgáló biocidek a záporvízzel és a városi lefolyással utaznak. Ezen anyagok funkciójuknak megfelelően erősen bioaktívak, kis koncentrációban (ng L^{-1} – $\mu\text{g L}^{-1}$) is jelentős a hatásuk a vízi környezetben, ezért mikroszennyezőknek nevezzük őket. A vízi ökoszisztémák állapotának megőrzése érdekében ezt a kitettséget elfogadható mértéken kell tartani. A mikroszennyezők egy része állandóan jelen van a felszíni vizekben. Némelyek a környezetben hamar lebomlanak, de az állandó kibocsátás miatt folyamatos a jelenlétük, vagyis pszeudo-perzisztensek. Mások nehezebben bomlanak, emiatt még időszakos kibocsátás mellett is képesek felhalmozódni a környezetben és/vagy az élőlényekben, valamint nagy távolságokat megtenni a környezetben. Ez a tényleges perzisztencia. A környezeti hatás szempontjából az úgynevezett PBT (*Persistent-Bioaccumulative-Toxic*) anyagok jelentik a legnagyobb kockázatot, mivel itt a széleskörű jelenlét, a bioakkumuláció és a drasztikus biológiai hatás együttesen adottak. Emiatt a vegyületek környezetvédelmi engedélyezése során azt kell bemutatni, hogy az adott vegyületre a PBT kombináció nem áll fenn. Ennek egyik pillére a perzisztencia vizsgálata.

Szerves, hidrofób[†] mikroszennyezők engedélyezési eljárása során azok [62] környezeti perzisztenciáját az OECD által szabványosított 308-as jelű kísérleti

[†]Vagyis az üledékbe vándorlásra és ott felhalmozódásra esetlegesen hajlamos.

2. fejezet: A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetőségének javítása

eljárás (OECD, 2002) szerint víz-üledék rendszerben kell vizsgálni (European Commission, 2011). Az OECD 308-as kísérlet a „szimulációs” kísérletek családjába tartozik, a környezetben található, élővíz-üledék rendszerek viselkedését hivatott tükrözni laboratóriumi körülmények között. Eredményeit használják a vegyületek környezeti perzisztenciájának vizsgálatában és expozíciós modellekben is. Az adott vegyület engedélyezési eljárásában bizonyítandó, hogy a vegyület nem perzisztens, vagyis vízben 40, üledékben pedig legfeljebb 120 nap alatt lebomlik a beadagolt mennyiség fele (European Commission, 2011).

[63] A kísérlet körülményeit a szabvány viszonylag pontosan definiálja. A zárt kísérleti rendszerben 1:3 – 1:4 térfogatarányban élővizekből származó előinkubált üledék és víz található. Előírt határok között változhat a vízoszlop magassága (6-12 cm) és az üledékréteg vastagsága (2-3 cm) is, ügyelve a megadott víz-üledék arány betartására. A teljesen pangó víztérbe a kísérlet kezdetekor bejuttatják a radioaktívan jelölt vizsgálandó vegyületet (P, *parent compound*), majd 60-100 napig kb. 10 alkalommal figyelik, hogy a vegyület hogyan bomlik le a vízben és az üledékben más szerves vegyületekké (M), illetve szén-dioxiddá. Minden méréskor két párhuzamosan inkubált rendszert dolgoznak fel. A víztérből pipettázással, az üledékből homogenizálás után vesznek reprezentatív mintákat, az illékony fázist kémiai csapdák fogják fel.[‡]

[64] Az OECD 308-as kísérlet ugyan zárt, szabványos felépítésű laboratóriumi rendszer, mégis összetett és teljességében nem megismerhető az elvégezhető mérések korlátai miatt. A vizsgált anyag vízben és üledékben mérhető mennyiségét nemcsak a lebomlás, hanem a víz- és üledékfázisok közötti anyagtranszport is befolyásolja. A víztérbe juttatott vegyület a hidrofóbia mértékétől függő sebességgel a vízből az üledékbe vándorol, ahol ezen anyagáram miatt a víz-üledék határfelületről lefelé koncentráció-gradiens alakul ki (Honti és Fenner, 2015; Shrestha és mtsai., 2016). Ugyanakkor a pangó víztér miatt az üledék oxigén-utánpótlása lassú, így a felső, pár mm vastag határréteg kivételével az üledék még akkor is anaerob lesz, ha a víztér aerob (Honti és Fenner, 2015; Shrestha és mtsai., 2016). A redox- és koncentrációviszonyok ezen változékonysága miatt a biokémiai folyamatok jellege és sebessége is eltérő az üledék egyes rétegeiben.

[65] A homogenizált mintavétel miatt az üledékbeli viszonyok változékonysága nem mérhető meg, így a víz- és üledékfázisokban található átlagos vegyületmennyiség időbeli változásából kell a kiindulási vegyület környezeti viselkedése szempontjából reprezentatív felezési időt kiszámítani. Mivel tervezői szerint az OECD 308-as kísérlet a környezeti viszonyokat jól utánzó „szimulációs” teszt,

[‡]A mérést nehezíti, hogy az üledékrészecskéken számottevő, kémiailag nem kivonható maradék (NER – *non-extractable residue*) képződik, így a vízből, az üledékből és a gázfázisból kivont összesített radioaktivitás néha jelentősen elmarad az eredetileg hozzáadott mennyiségtől.

2.2. Felismerhetetlen paraméterek egy „egyszerű” rendszerben

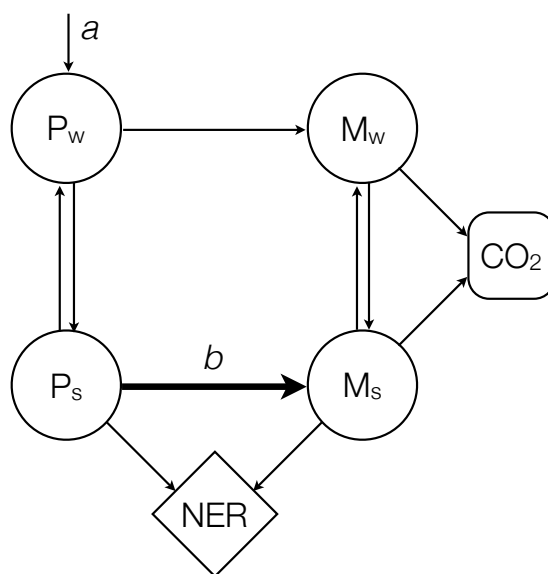
eredetileg a kérdéses vegyület (üledékben történő) lebomlását a teljes rendszerre vonatkoztatott disszipációs vagy átalakulási felezési idővel ($DissT_{50,ts}$) jellemezték. A teljes víz-üledék rendszerben P átalakulása a rendszer zártsága miatt csak lebomlással történhet, így $DissT_{50,ts}$ valóban a rendszerben található összes P együttes lebomlási felezési idejével ($DegT_{50,ts}$) egyenlő. Hatékony biológiai lebontáshoz jelentős mikrobiológiai aktivitásra van szükség. A rendszerben található bakteriális biomassza nagy része az üledékben, és annak is a vízoszloppal határos, aerob átmeneti zónájában tömörül, így feltételezhető, hogy P lebontása is döntően itt történik (*ter Horst és Koelmans*, 2016). A lebomlási folyamatok koncentrációja viszont azt jelenti, hogy a megfigyelt, rendszer-léptékű lebomlás nagyban függ a fázisok közötti transzportfolyamatok sebességétől és ezáltal a kísérleti rendszer geometriai jellemzőitől (*Honti és Fenner*, 2015; *ter Horst és Koelmans*, 2016). Ezért az OECD 308-as kísérletekből levezetett $DegT_{50,ts}$ értékek a vegyület élővizekben mutatott viselkedése szempontjából nem reprezentatívak.

A $DegT_{50,ts}$ hiányosságai régóta ismertek (*FOCUS*, 2006, 2014). A mérhető adatok köre alapján felmerült, hogy külön-külön kellene becsülni a mikroszennyezők felezési idejét a víz- és üledékfázisban ($DissT_{50,w}$ és $DissT_{50,sed}$), hiszen ezek a vízben és üledékben mért P idősorokból közvetlenül számolhatók. Azonban a fázisok közötti transzport lehetősége miatt sem a víz, sem az üledékfázis nem tekinthető zárt rendszernek, vagyis a disszipációs felezési idő egyik esetben sem egyenlő a lebomlási felezési idővel. A $DissT_{50,w}$ indikátor esetében az üledékbe irányuló transzport hatása akár nagyságrendekkel is meghaladhatja a lebomlást, hiszen erősen hidrofób vegyület a gyors adszorpció miatt még bármilyen lebomlás nélkül is hamar eltűnik a víztérből. A transzport hatása a $DissT_{50,sed}$ esetében általában ellenkező előjelű, vagyis a tényleges lebomlás gyorsabb lehet, mint a disszipáció alapján becsült érték. Ezen problémák miatt az egyes fázisokra vonatkozó disszipációs felezési idő még kevésbé alkalmas az anyag környezetben tanúsított viselkedésének jellemzésére, mint a $DegT_{50,ts}$ (*Honti és Fenner*, 2015).

A megoldás a tényleges lebomlási folyamatokat tükröző, fázis-specifikus felezési idők ($DegT_{50,w}$ és $DegT_{50,sed}$) használata lenne, ezek azonban nem vezethetők le közvetlenül a mérési eredményekből (*FOCUS*, 2006). A $DegT_{50,w}$ és $DegT_{50,sed}$ indikátorok becsléséhez modellezésre van szükség, ahol a feladat a fázisok közötti transzport és a lebomlás hatásának elválasztása (*FOCUS*, 2006). Az e célra alkalmazott egyszerű modellek szimulálják a vegyületek átalakulását a víz- és üledékfázisban, valamint leírják a fázisok közötti anyagáramot (*Honti és Fenner*, 2015). A homogenizált mintavétel és az anyagáramokra vonatkozó megfigyelések hiánya miatt azonban a tényleges lebomlás és a transzport nem választható el egyértelműen, vagyis a folyamatok paraméterei csak bizonytalanul becsülhetők. A fázisok közötti transzport sebességétől függően még a lebomlás

2. fejezet: A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetőségének javítása

helye sem állapítható meg, vagyis strukturális bizonytalanság is fennáll. Egyes erősen hidrofób anyagok ugyan gyorsan az üledékbe vándorolnak, de az ott keletkezett kevésbé hidrofób bomlástermékeik visszadiffundálhatnak a vízoszlopba, azt a látszatot keltve, hogy a lebomlás a víztérben történt. A modellezési probléma tehát a rendszer látszólagos egyszerűsége ellenére rendkívül összetett (2.1. ábra). A kísérletből meghatározandó üledékbeli biológiai lebomlás kezdetén és végén elhelyezkedő állapotváltozókat (P_s és M_s) egyszerre több, ismeretlen nagyságú folyamat táplálja és fogyasztja, így a paraméterek becslése bizonytalan (v.ö. 1.2. fejezet).

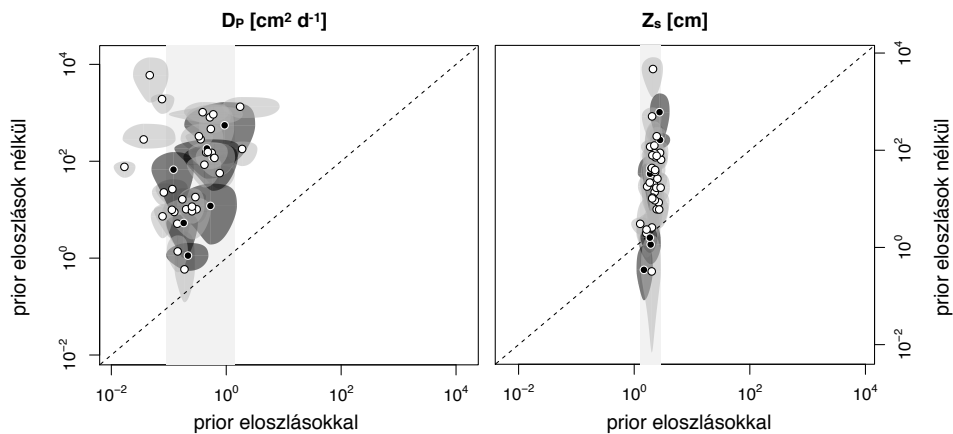


2.1. ábra. Az OECD 308-as kísérletben zajló folyamatok (Honti és Fenner, 2015). a: a kiindulási anyag befecskendezése a rendszerbe, b: biológiai lebomlás az üledékben (az egész kísérlet célja, hiszen a tapasztalatok szerint ez a fő lebomlási pálya, valamint az OECD 308-as kísérletből kinyert felezési időkre az üledékhatárérték vonatkozik). P: kiindulási anyag, M: bomlástermék, NER: kémiai kivonhatatlan maradék. A w és s indexek a vízoszlopban és az üledékben lévő frakciókat jelentik.

- [68] A megoldás független adatok bevonása és ezzel a rendszer szabadsági fokainak csökkentése. Az egyes, az OECD 308 kísérletben eredményeiből közvetlenül nem eredeztethető, de a kísérleti meta-adatokból, vagy más adatforrásokból becsülhető paraméterekre a becslés pontosságától függően konfidens (szűk) prior eloszlásokat veszünk fel. Ilyen paraméterek a mikroszennyező szorpciós tulaj-

2.3. Folyamatok felismerhetőségének javítása új rendszerek bevonásával

donságait jellemző víz-üledék megoszlási hányados, az üledék porozitása és szervesanyag-tartalma, valamint a víz- és az üledékoszlop magassága.



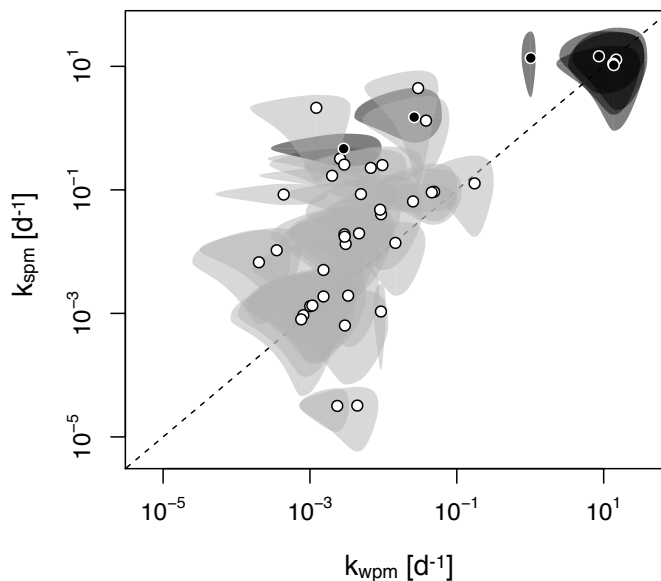
2.2. ábra. Kalibrált paraméterek értéke számos OECD 308 kísérletre (körök) és bizonytalanságuk (foltok) prior eloszlásokkal, illetve nélkülük (Honti és Fenner, 2015). D_p : diffúziós állandó, Z_s : üledékvastagság. A függőleges szürke sávok a hihető értéktartományt és egyben a kijelölt prior eloszlások 95%-os konfidenciásávját jelentik.

A bayesi kalibráció és benne a prior eloszlások segítségével jelentősen [69] csökkenthető a kalibrált paraméterek bizonytalansága (2.2. ábra), vagyis a fázisok közötti transzport és a helyi lebomlás szétválasztható a vízben és az üledékben is (2.3. ábra). Mindemellett a prior eloszlások gondoskodnak arról, hogy a kalibrált paraméterek a fizikailag és kémiai lehetséges tartományban maradjanak (lásd a paraméterek irreális értékeit priorok nélkül a 2.2. ábrán). A nem hidrolizáló anyagok vízbéli lebomlásának sebessége kevés kivételtől eltekintve lassabb, mint az üledékbeli lebomlásé, ami annak tudható be, hogy ezek a jellemzően hidrofób anyagok nagyobb koncentrációban vannak jelen az üledékben, ahol a lebontó biomassa is nagyobb (2.3. ábra).

2.3. Folyamatok felismerhetőségének javítása új rendszerek bevonásával

- A strukturális bizonytalanság csökkentése adatok és modellek bevonásával, saját esettanulmány (Honti és Fenner, 2015; Honti és mtsai., 2016a)

2. fejezet: A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetőségének javítása



2.3. ábra. A víz- (k_{wpm}) és üledékbeli (k_{spm}) lebomlási tényezők kalibrált értékei (körök) és bizonytalanságuk (felhők, 95%-os bizonytalansági tartomány) publikusan elérhető, peszticidekre és gyógyszer-hatóanyagokra végzett OECD 308-as kísérletek adataiból (Honti és Fenner, 2015). A felhők eltérő színe kémiaileg különböző viselkedésű csoportokat jelöl: a feketével jelölt anyagok hidrolizálnak, a szürkével jelöltek nem.

[70] Az OECD 308-as rendszer modelljének bayesi kalibrációja a mérési idősoroktól független információ bevonásával csökkenti a paraméterek bizonytalanságát, viszont nem képes a modell szerkezeti bizonytalanságait kiküszöbölni. A szorpciós tulajdonságok (vagyis a megoszlási hányados) bizonytalanságának csökkentésével tisztázható, hogy a lebomlás mekkora hányada zajlik az üledékben és a víztérben, de az üledéken belül továbbra is bizonytalan marad a lebomlás helye (aerob határreteg, anaerob mély-üledék, illetve mindkettő) és mechanizmusa. Ugyanaz a megfigyelési adatsor megmagyarázható különböző redox állapotokhoz kötött bomlási folyamatokkal és a hozzájuk tartozó diffúziós sebességekkel (Honti és Fenner, 2015). A kísérletek eredményeinek értelmezését segítő FOCUS munkacsoport (*Forum for Co-ordination of pesticide fate models and their USE*[§]) által javasolt modellek (2.4. ábra A és B) vagy az üledék állandó és teljes elkeveredtségét feltételezik, ami ellentétben áll az üledékben megfigyelhető erős gradiensekkel, vagy egy, az idővel mélyülő diffúziós réteget használnak, melyen

[§]<http://esdac.jrc.ec.europa.eu/projects/focus-dg-sante>

2.3. Folyamatok felismerhetőségének javítása új rendszerek bevonásával

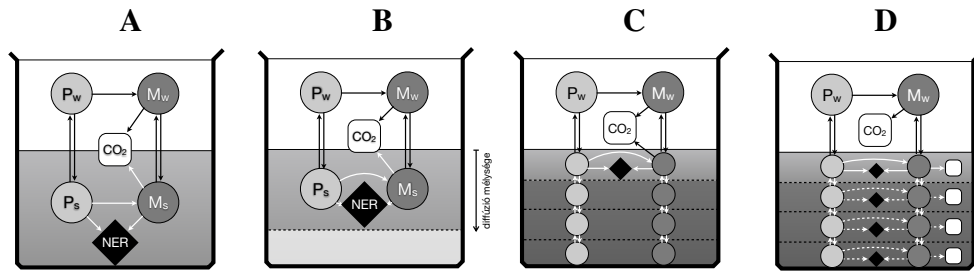
belül szintén teljes elkeveredettséget tételeznek fel. Ez utóbbi ugyan egyszerűsített formában figyelembe veszi azt, hogy a kísérlet folyamán a vizsgált anyag fokozatosan az üledékbe vándorol, de továbbra is feltételezi, hogy a lebomlás az anaerob rétegekben ugyanolyan gyors, mint az aerob határrétegben. A *Honti és Fenner* (2015) által kifejlesztett modellek (2.4. ábra C és D) a diffúzió jelenségét több, lefelé egyre vastagodó üledékréteg felhasználásával pontosabban írják le. A lebomlás vagy csak az aerob határrétegre korlátozódik (2.4. ábra C), vagy az anaerob rétegekben is végbemegy, de lassabban (2.4. ábra D).

A legegyszerűbb, egyetlen, teljesen elkevert üledék-kompartmentet tartalmazó modell (2.4. ábra A) kivételével a három másik változat nagyjából ugyanolyan pontosan képes leírni a megfigyelt adatokat (*Honti és Fenner*, 2015). Ez azt jelenti, hogy az adatok alapján nem dönthetünk a diffúzió és az üledékbeli lebomlás konkurrens, egymást kizáró magyarázatai között. A feltételezett mechanizmusok ugyanakkor a gyakorlat – és a kísérlet eredményeinek értelmezése – szempontjából eltérő következtetésekhez vezetnek. Ha a C jelű modellszerkezet érvényes, akkor az üledék vastagsága nem fontos, vagyis a környezeti lebontást csak a víztérfogat és az üledékfelület aránya szabja meg. A B esetben a meghatározó tényező a víz:üledék térfogat-arányra módosul, míg a D változat valahol B és C között helyezkedik el az anaerob bontás relatív sebességétől függően. A mechanizmus bizonytalansága természetesen kihat a paraméterekre is. A C változat kalibrált lebomlási tényezői jóval nagyobbak a B és D esetekre kapott értékeknél, hiszen a vizsgált anyag sokkal rövidebb ideig tartózkodik a vékony aerob határrétegben, mint a vastag anaerob rétegben, vagyis az idősorokban megfigyelt lebomlást a C változatban kevesebb idő alatt kell előállítani.

Matematikai szempontból a D változat jelenti az optimális megoldást, hiszen ott az anaerob bomlás relatív sebességének beállításával mind a B (az anaerob bomlás sebessége ugyanakkora, mint az aerob bomlásé), mind a C (az anaerob bomlás sebessége 0) változat viselkedése reprodukálható. Így a szerkezeti bizonytalanság átkonvertálódott paraméter-bizonytalansággá. Ez azonban az alapproblémát nem oldja meg: ha nincs az anaerob bomlás relatív sebességére érdemleges információnk (informatív prior), akkor a bizonytalanságvizsgálat eredménye az lesz, hogy a valóság bármi lehet a B és C modellváltozatok között húzódó skálán (az anaerob bomlás relatív sebességének poszterior eloszlása egyenletes lesz 0 és 100% között).

Az eddig bevont prior információk jellemzően az OECD 308-as kísérletek meta-adataiból származtak (pl. vízoszlop magasság, üledék szervesanyag-tartalma, stb.), ezek között azonban nincsenek a lebomlás helyének tisztázását segítő adatok. A megoldást az OECD 308-asnál újabb, OECD 309-es kísérlet (*OECD*, 2004) bevonása jelenti, melyet napjainkban növényvédőszeres engedélyeztetésekor az OECD 308-assal párhuzamosan végeznek el. Ebben a

2. fejezet: A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetőségének javítása



2.4. ábra. Az OECD 308-as kísérlet különböző modelljei. A: homogén, teljesen elkeveredett üledék, B: fokozatos diffúzió az üledékben, C: diffúzió az üledékrétegek között, lebomlás csak a legfelső, aerob határrétegben van, D: mint C, de anaerob lebomlással a mélyebb üledékrétegekben is van. P_w : eredeti vegyület a vízfázisban, P_s : eredeti vegyület az üledékben, M_w : bomlástermékek a vízfázisban, M_s : bomlástermékek az üledékben, NER nem-kivonható maradék (szilárd fázis).

kísérletben a bejuttatott hatóanyag vízben történő lebomlását vizsgálják kevés üledék (1:1000 vagy kisebb víz-üledék tömegarány) jelenlétében. A rendszer az OECD 308-astól eltérően folyamatosan kevert és teljesen aerob. Az OECD 309 a keverés és a lebegtetett üledék miatt fizikailag jóval egyszerűbb, mint a 308-as, viszont az üledék és a lebontó biomassza csekély mennyisége miatt jellemzően nagyon kevés abszolút lebontást produkál, vagyis a felezési idő becslésére – a hidrolizáló vagy nagyon gyorsan lebomló anyagokat kivéve – kevésbé alkalmas^[74].

[74] Mivel az OECD 309-es kísérletben csak aerob lebomlás történik, az abból kinyert információ használható lenne az OECD 308-asban jelen lévő anaerob bizonytalanság csökkentésére. Ez azonban a két rendszer eltérései miatt nem hajtható végre a felezési idők vagy a különböző fázisokban tapasztalható lebomlási sebességek egyszerű átvételével, vagyis az OECD 309-es eredményei közvetlenül nem használhatók az OECD 308-as számára prior eloszlásként. A rendszerek összekapcsolásához közös nevezőre kell hozni őket, vagyis olyan modell-szerkezetet kell előállítani, amely különböző töménységű víz-üledék rendszerekre alkalmazható.

[75] A k'_{bio} hipotézis (Honti és mtsai., 2016a) feltételezi, hogy egy adott víz-üledék rendszerben az aerob lebomlás sebessége arányos az oldott állapotban lévő (hozzáférhető) anyagmennyiséggel és a szervesanyag-koncentrációval, mely

^[74]A hidrolízis mérésére az OECD 309 túl bonyolult és drága, az egyszerűbb OECD 111 kifejezetten erre szolgál. Gyorsan bomló (*readily biodegradable*) anyagokra a szimulációs kísérleteket a perzisztencia nyilvánvaló hiányában nem kell elvégezni.

2.3. Folyamatok felismerhetőségének javítása új rendszerek bevonásával

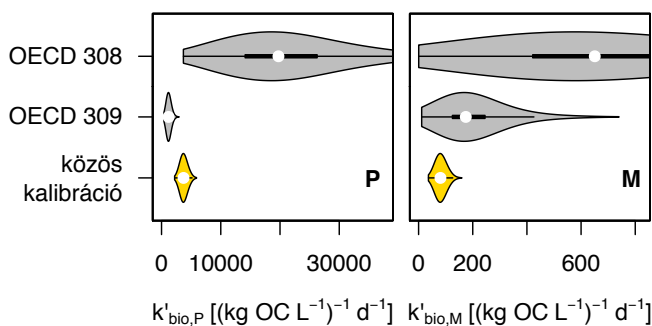
utóbbi a lebontó biomassza indikátora:

$$k = k'_{\text{bio}} f_{\text{aq}} \text{TOC} \quad (2.4)$$

ahol k a lebomlás elsőrendű kinetikai állandója [d^{-1}], f_{aq} az oldott frakció aránya [-], TOC a szervesanyag-koncentráció [g L^{-1}], k'_{bio} pedig szervesanyagra normalizált lebomlási állandó [$\text{L d}^{-1} \text{g}^{-1}$].

A k'_{bio} hipotézis segítségével a változó töménységű víz-üledék fázisokban tapasztalható lebomlási tényezőket dekompozícióval közös nevezőre hozhatjuk. A hipotézis természetesen csak azonos üledék- és biomassza-minőség esetén alkalmazható. Az azonos üledékkel és vízzel végzett OECD 308-as és 309-es rendszerek ezután együtt kalibrálhatóak, feltételezve, hogy k'_{bio} és a szorpciós tulajdonságok a két rendszerben azonosak^{||}. [76]

Az együttes kalibrációra az egyes paraméterek felismerhetősége eltérően reagál. Az anaerob lebomlás relatív sebessége természetesen nem ismert az aerob OECD 309-es rendszerből, így annak felismerhetősége önállóan nem javul. A mindkét rendszerben jelen lévő folyamatoknál az együttes kalibráció több releváns adatot és ezzel jóval erősebb kondicionálást jelent, ami ezen paraméterek bizonytalanságát csökkenti (*Honti és mtsai.*, 2016a). Ilyen paraméter a k'_{bio} is (2.5. ábra). [77]



2.5. ábra. A kiindulási vegyületre és a bomlástermékekre vonatkozó k'_{bio} paraméter poszterior eloszlása együttes és külön kalibrációban (*Honti és mtsai.*, 2016a). A $k'_{\text{bio,M}}$ paraméter az M széndioxidá bomlására vonatkozik. Vegyület: pyriproxifen; üledék forrása: Wenne-folyó.

[78]

^{||}Elhanyagolva a híg szuszpenzió és az üledék közötti minőséget: eltérő a részecskék szabad felülete.

2. fejezet: A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetőségének javítása

Az együttes kalibráció – vagyis új adatok bevonása eltérő, de kompatibilis rendszerből – csak akkor működhet eredményesen, ha a kalibrálandó modell minden érintett rendszert képes a közös paraméterekkel elfogadható minőségben leírni. A modell-szerkezet cáfolatának tekinthető, ha a külön-külön kalibráció működik, de az együttes nem. Az adott esetben – érdekes módon – a kiindulási vegyület k'_{bio} eloszlásai az OECD 308-as és a 309-es kísérletben nem lapolnak át jelentősen. A közös kalibrációval kialakított kompromisszum egyik külön kalibrációban sem kapott szignifikáns poszterior valószínűséget, mégsem járt a modell illeszkedésének számottevő csökkenésével. Ez arra utal, hogy még a közös kalibráció mellett is maradt a modellnek annyi szabadsági foka, hogy ezt az eltérést kompenzálni tudja.

2.4. Értelmezhetők-e a kalibrált paraméterek?

■ *A modell-paraméterek értelmezésével kapcsolatos problémák összefoglalása*

A 1.2., 2.2. és 2.3. fejezetben olyan elterjedt, alkalmazott modellezési gyakorlatokat ismertünk meg, ahol a végtermék a modell paramétereinek kalibrált értéke. A 1.2. fejezet bemutatta, hogy a hibaterjedés hogyan állíthat elő teljesen fiktív paraméter-értékeket, de ezen kívül egyéb nehézségek is vannak.

[79] A bayesi kalibráció (2.1. fejezet) nyilvánvalóvá teszi, hogy a kalibrált paraméterek értéke bármekkora felismerhetetlenség esetén szubjektív lesz a priorok bevonása miatt. Ez akkor is fennáll, ha a felismerhetetlenséget nem bayesi módon kezeljük, például egyes paraméterek alapértelmezett értéken hagyásával, vagy elfogadható tartományok kijelölésével, mivel ezek a megoldások is átfordíthatóak priorokra (fix érték: Dirac-delta prior, tartomány: egyenletes eloszlás prior a tartományon). A modell-alkotók ritkán említik meg a kiszámított paraméterek elkerülhetetlen szubjektivitását, a modellezés eredményeit objektívnek tekintik.

[80] A kalibrált paraméterek értelmezését tovább nehezíti, hogy a modellszerkezetnek és a paramétereknek tulajdonított fizikai/kémiai/biológiai jelentés a kalibráció során általában elvész, mivel a kalibrációs algoritmus a kalibrációs adatokon és a prior eloszlásokon kívül mást nem vehet figyelembe. Ennek legnyilvánvalóbb jele a modellező számára értelmetlenül kalibrált paraméterekkel jól működő modell. A 2.2. fejezet modelljében a vízoszlop magasságát jelző paraméter kalibrált értéke az egyes kísérletekben prior eloszlás nélkül 3 cm és 30 m (!) között változott, míg a valóságban az OECD szabvány szerint 6 és 9 cm közötti vízborítást állítanak be. Az akár több nagyságrendbeli vagy előjelbeli eltérések oka, hogy az adott paraméter szempontjából a kalibrációs adathalmaz nem tartalmaz értékelhető információt, a paraméter maga nem túlzottan érzékeny,

2.4. Értelmezhetők-e a kalibrált paraméterek?

vagy hatása tökéletesen kompenzálható más paraméterek elállításával (vagyis összefoglalva: nem felismerhető).

A jelentésmódosulás minden modellkalibrációnál fellép, hiszen a modellszerkezet nem lehet tökéletes, a kalibrációs adatbázis nem lehet tökéletesen reprezentatív, a megfigyelések nem lehetnek hibamentesek, a prior pedig sohasem objektív. A felismerhetetlenség, a megfigyelések hibái, a modellszerkezet tökéletlensége és a prior eloszlások eltérése a valóságtól mind belső kompenzációs folyamatokat indítanak be a kalibráció során. Ezek végeredményeként a paraméterek ismeretlen tartalmú és mértékű jelentésmódosuláson mennek át. A módosulás az összes fenti tényező hatását tükrözi, így elméletileg különböző modell-szerkezetekkel, más-más prior eloszlással, vagy eltérő hibamoddellel kapott kalibrált paraméterek nem összehasonlíthatók. A gyakorlat ezt nem veszi figyelembe. Az OECD 308-as kísérletben például a rendszer felezési idejének kiszámításához a FOCUS útmutató 3 eltérő modell-szerkezet közül javasol választani (FOCUS, 2006). [81]

A poszterior paraméter eloszlás a determinisztikus modell szerkezetétől és az alkalmazott hibamoddeltől is függ (Mantovan és Todini, 2006). A modell szerkezetet és a hibamoddelt azonban a paraméterek értéke nem befolyásolja. Az egyirányú kapcsolat miatt a modell paraméterei végső soron puszta matematikai segédeszközöknek tekintendők, melyekkel a tökéletlen determinisztikus modell kimenete állítható, függetlenül az a priori nekik tulajdonított jelentéstől. Emiatt a bayesi kalibráció még tetszőlegesen szigorú prior eloszlás alkalmazásakor sem garantálja, hogy az elvárásainknak megfelelő poszterior paramétereket kapunk. A modellszerkezet és a valóság közti elkerülhetetlen különbség bizonyos mértékben mindig torzítja a kalibrált paramétereket, így a bayesi kalibráció és bizonytalanság-vizsgálat egyetlen értelmezhető termékének a modell-kimenet optimális értéke és bizonytalansági tartománya tekinthető (Doherty és Christensen, 2011). Ez a nem tökéletesen felismerhető modellek nem bayesi kalibrációjára is igaz. [82]

A paraméterek értelmezésének kiterjedt gyakorlata tehát elméletileg helytelen. A gyakorlati alkalmazhatóság attól függ, hogy a paraméterek jelentésének módosulása korlátozott mértékű marad-e a kalibráció során. Ezt azonban nehéz utólag igazolni, mivel a nyilvánvalóan hihetetlen értékek (pl.: negatív bruttó elsődleges termelés, méteres vízborítás az OECD 308 lombikjában, stb.) hiánya nem jelenti a jelentésmódosulás hiányát. A paraméterek értelmezhetetlensége a belőlük számolt folyamatsebességeket is érinti. Ha a folyamatokra nincs referencia-adat, amivel igazolni lehetne, hogy a számított értékek jól tükrözik a valóságot, akkor a kalibrált modellben számolt folyamatsebességeket nem tekintjük megbízhatónak. [83]

3 Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése

■ *Szerkezeti hibák hatásainak bayesi kezelése Kennedy és O'Hagan (2001) módszerével* ■ *A szerkezeti és bemeneti hibák hatásainak megkülönböztethetlensége, saját esettanulmány (Honti és mtsai., 2011)* ■ *Az általam kifejlesztett zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamat, és alkalmazása csapadék-lefolyás modellek kalibrációjában (Honti és mtsai., 2013)* ■ *Eloszlások illesztésére szolgáló, saját fejlesztésű közelítő likelihood függvény és alkalmazása hosszútávú hidrológiai előrejelzésben (Honti és mtsai., 2014)*

[84] A vízminőségi modellezés az automatikus, nagy időbeli gyakorisággal mérő műszerek elmúlt évtizedbeli megjelenése óta ugyanazzal a problémával került szembe, amivel a hidrológiai modellezés már régóta küzd: a nagy gyakoriságú, hosszú adatsorok egyértelműen megmutatják, hogy a hagyományos modellkalibrációhoz használt statisztikai feltételezések (véletlenszerű, független, normális eloszlású hibák) nem állják meg a helyüket. A mérések és a számított eredmények között szisztematikus eltérések vannak, a hibák a mérések sűrű időlépésein erősen autokorreláltak és helyenként egyáltalán nem véletlenszerűek. A szisztematikus eltérések okai a modellek szerkezetében keresendők.

[85] Modelljeink dinamikus rendszerek viselkedését írják le, és a modellezett rendszerekhez hasonlóan memóriával rendelkeznek (többnyire az állapotváltozókon keresztül). Számos hibatípus (bemenő adat hibája, folyamat sebességének hibás becslése, konverziós hibák, fontos folyamatok elhanyagolása) nyomot hagy az állapotváltozók értékén és ezáltal az akár csak pillanatnyilag fennálló hiba-okok is tartósan fennálló diszkrepanciát okozhatnak a mért és a számított mennyiségek között. Ha a mérések gyakorisága a modellezett rendszer és ezáltal a modell memóriájához képest nagy, akkor nyilvánvalóvá válik, hogy az hibák döntő része nem a klasszikus, a méréseket terhelő független, véletlen hiba osztályába tartozik.

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése

A korábban általános, ritkább mérések esetében a fent említett modell-problémák ugyanúgy fennálltak, de a ritkás adatsorok nem tették egyértelművé jelenlétüket. Ez részben annak köszönhető, hogy a kalibráció során a modell illeszkedni próbál az esetleges hibákra is, amit kevés mérési pont esetén sikeresebben tesz meg. Ekkor egy-egy szisztematikus hiba csak legfeljebb néhány szomszédos megfigyelést terhel és így a hiba potenciálisan sokféle módon kompenzálható, míg nagy sűrűségű adatoknál a szisztematikus hiba jól látszik és nem összetéveszthető egy-egy magányos kilógó ponttal.

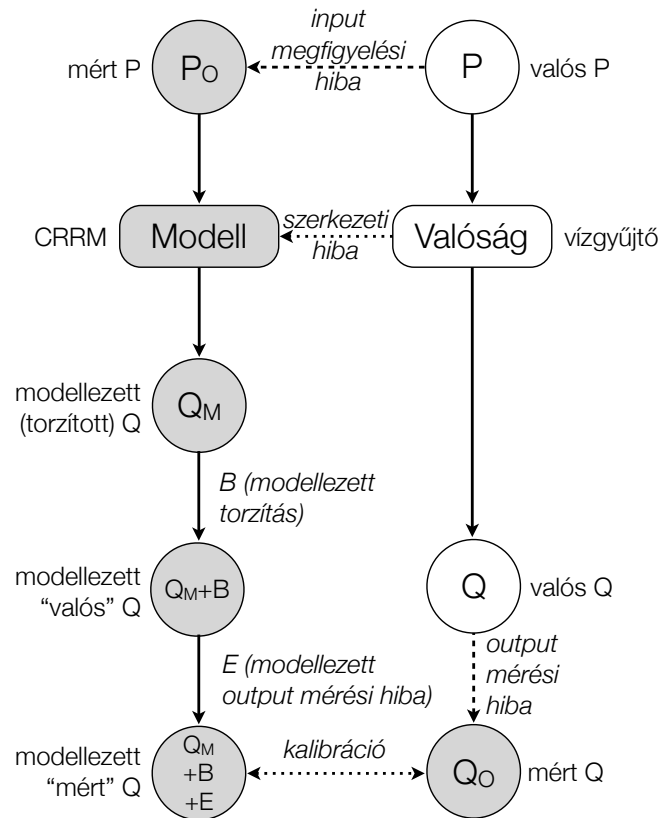
A szisztematikus eltérések miatt a hagyományos kalibrációs eljárásokat és a bizonytalanságvizsgálatot módosítani kell, mivel a nagy sűrűségű adatsorokon nem teljesülő statisztikai feltételezések torzítják a modellek előrejelzéseit. [86]

A modellezést terhelő hibák sokfélesége egy hidrológiai példán keresztül illusztrálható. A csapadék-lefolyás modellezés jól definiált és viszonylag egyszerű hidrológiai feladat. A mért csapadékkintenzitás és becsült potenciális evapotranspiráció felhasználásával kell modellezni egy adott vízgyűjtőről távozó vízhozamot. A hibaforrások az alábbiak lehetnek (3.1. ábra): [87]

- A modellezéshez használandó bemenő adatok hibával terheltek. A legfontosabb bemenő adat, a csapadékkintenzitás a nagy időbeli és területi változékonyság miatt még kisebb vízgyűjtőkön is csak jelentős bizonytalansággal mérhető. Másrészt – összevont paraméterű, koncepcionális modell esetén – még a nagy pontossággal megfigyelt területi átlagcsapadék sem bizonyosan reprezentatív a vízgyűjtő egészének hidrológiai válaszára nézve, más szóval a lefolyásgeneráló területek egyenlőtlen eloszlása miatt nem mindegy, hogy a vízgyűjtőn belül hol esik több eső vagy hó. A potenciális evapotranspiráció becslése is bizonytalan.
- A kalibrációhoz és igazoláshoz felhasznált vízhozam adatok is hibásak. A leolvasást esetlegesen terhelő véletlenszerű hibák mellett gyakoriak a szisztematikus hibák is, például a mérőszelvény eltérései vagy hibás, illetve nem kellően részletes Q-H görbe miatt.
- Az alkalmazott modellek, beleértve az osztott paraméteres vízgyűjtőmodelleket is, radikális egyszerűsítéseken és empiriákon alapulnak, így nem képesek tökéletesen leírni a vízgyűjtő valós folyamatait.

Összességében tehát megállapíthatjuk, hogy a fenti hidrológiai modellezési feladatban hibás adatokból, hibás algoritmussal kell kiszámolnunk a vízhozamot, amit azután hibás mérésekkel vethetünk össze. Ez a megállapítás azonban bármely környezeti modellezési feladatra igaz, hiszen ismereteink általában az adatok és a mechanizmusok tekintetében is hiányosak, illetve hibásak. [88]

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése



3.1. ábra. A bizonytalansági források megjelenése a csapadék-lefolyás modellezésben (Honti és mtsai., 2013). P: csapadék, Q: vízhozam. A modellező a szürke elemeket ismeri.

3.1. Szerkezeti hibák bayesi kezelése

■ Szerkezeti hibák hatásainak bayesi kezelése Kennedy és O'Hagan (2001) módszerével

[89] A különböző hibaforrások hatásai összegezve jelennek meg a mért és a számított mennyiségek közötti eltérések formájában. Az egyes források természetére és fontosságára csak az aggregált hibaidősor dekompozíciójából következtethetünk. Kennedy és O'Hagan (2001) ezen probléma megoldása érdekében megalkotta a szerkezeti hibák kezelésének bayesi módszertanát. Ha véletlenszerű és szerkezeti hibák egyszerre vannak jelen, akkor a kalibrációs probléma nem oldható meg klasszikus statisztikai eszközökkel, hiszen a hibás modellegyenletek következményeként fellépő eltérések még a legnagyobb

3.1. Szerkezeti hibák bayesi kezelése

jóindulattal sem tekinthetők valószínűségi változónak. A megoldást a bayesi statisztika alkalmazása jelentette, hiszen ebben bármilyen ismeretlen állapot vagy folyamat kezelhető, nem szükséges a véletlenszerűség tételes fennállása. A szerkezeti hibák, mivel hatásuk szisztematikus, időnként erősen autokorrelált formában jelennek meg az aggregált hibaidősorban. Ezt *Kennedy és O'Hagan* (2001) autoregresszív statisztikai folyamattal modellezte, feltételezve, hogy az aggregált hibafolyamat keletkezésénél a különböző eredetű hibák összeadódnak.

Ha a determinisztikus (hidrológiai vagy bármilyen más környezeti) modell [90] által számított kimenetet Y_M -mel, a megfigyelt kimenetet Y_O -val, a (nem ismert) valós kimenetet Y -nal, a szisztematikus szerkezeti hibát B -vel (az angol *bias* – torzítás szóból) a kalibrációhoz használt adatokat terhelő klasszikus, véletlenszerű hibát pedig E -vel jelöljük, akkor *Kennedy és O'Hagan* (2001) a következő feltételezéseket tette:

$$Y_O = Y + E \quad (3.1)$$

$$Y = Y_M + B \quad (3.2)$$

$$Y_O = Y_M + B + E \quad (3.3)$$

A modellt tehát kétféle hiba terheli: a valós kimenet és a modell közötti szisztematikus eltérések, melyek a modell szerkezeti hibáinak következményei (B) és a megfigyelésekre rakódó véletlenszerű hiba (E). Ennek a megkülönböztetésnek akkor van értelme, ha a mérési adatsorunk elegendően sűrű ahhoz, hogy B és E eltérő statisztikai tulajdonságait érzékeltetni tudjuk. Ha méréseink ritkábbak, mint a modell vagy B memóriájának hossza, akkor az egyébként szisztematikus hibák is véletlenszerűnek fognak tűnni. A (3.1) egyenlet gyakorlati relevanciája kicsi, hiszen Y (a tényleges kimenet) ismeretlen a megfigyelési hibák miatt. A (3.2) egyenlet a már kalibrált modellel végzett előrejelzéseknél fontos: mivel az előrejelzés célja a valós mennyiségek (Y) meghatározása, így előrejelzéskor az $Y_M + B$ mennyiségeket kell az előrejelzés végtermékeinek tekinteni. Mivel B sztochasztikus folyamat, így az amúgy determinisztikus modellel végzett előrejelzés B hozzáadása után maga is sztochasztikussá válik.

A modellek kalibrációja a megfigyelt és modellezett kimenet összevetésén [92] alapul, így a (3.3) egyenlet alapján végzendő. A (3.3) egyenletben tükröződik a már említett probléma, vagyis a különböző hibaforrások hatásainak elválasztása az aggregált hibaidősorban. Itt a mérések és a determinisztikus modell eredményei közötti különbség a szerkezeti hiba és a megfigyelési hiba összege:

$$(Y_O - Y_M) = (B + E) \quad (3.4)$$

Modellek formális statisztikai alapon végzett kalibrációjánál ki kell tudnunk [93] fejezni egy adott paraméterkészlet likelihoodját a megfigyelt kimenet tükrében.

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése

Ez megköveteli, hogy ismerjük az aggregált hibaidősort eloszlását. Ha a klasszikus kalibráció feltételezéseivel élünk (csak egy hibakomponens van: E, mely homoscedasztikus* fehér zaj, vagyis $B = 0$), akkor a likelihood közvetlenül az egyetlen hibakomponens eloszlásából számítható. Az így kapott log-likelihood pedig a normál eloszlás feltételezése miatt arányos lesz a megfigyelt és modellezett értékek közötti különbségek négyzetösszegével – innen ered a közkeletű négyzetes hiba. Ha több hibaforrás is van, akkor az aggregált hibaidősort eloszlása csak az összes komponens együttes figyelembevételével (itt B és E) számítható ki. Egy adott megfigyelt (y_O) és számított (y_M) pont-párra a likelihood függvény a következő integrállal fejezhető ki (Reichert és Schuwirth, 2012):

$$f(y_M | y_O) = \int f_E(y_O - y_M - b) \cdot f_B(b) db \quad (3.5)$$

ahol f_E és f_B jelöli B és E sűrűségfüggvényét. A (3.5) egyenlet azt fejezi ki, hogy a likelihood számításánál a hibakomponensek közötti felismerhetőségi probléma miatt B és E összes olyan kombinációját számba kell venni, amely kiadja az adott aggregált hibát. Több hibakomponens esetén a tovább fokozódó felismerhetőségi problémák miatt újabb integrálás(ok) válnak szükségessé. A kalibráció gyakorlati kivitelezése szempontjából fontos, hogy az aggregált hibaeloszlás analitikusan kifejezhető legyen, ellenkező esetben egyetlen likelihood számításhoz is számtalan iterációt kellene végezni.

- [94] Ezen okokból mind Kennedy és O'Hagan (2001), mind a módszert továbbfejlesztő Bayarri és mtsai. (2007) valamint Reichert és Schuwirth (2012) is feltételezték, hogy B és E eloszlása minden időpontban normális és várható értéke nulla, vagyis egy teljes adatsorra mindkét hibakomponens egy-egy többváltozós normál eloszlással írható le. Ebben az esetben $B + E$ is egy nulla várható értékű többváltozós normális eloszlást követ (Reichert és Schuwirth, 2012):

$$f(Y_M | Y_O) \propto \frac{1}{\sqrt{\det(\Sigma_E + \Sigma_B)}} \cdot \exp\left(-\frac{1}{2} [Y_O - Y_M]^T (\Sigma_E + \Sigma_B)^{-1} [Y_O - Y_M]\right) \quad (3.6)$$

ahol Σ_E és Σ_B az E és B hibakomponensek többváltozós normál eloszlásainak kovariancia mátrixai. A paraméterekre vonatkozó prior eloszlások bevonásával a paraméterek (θ) poszterior valószínűsége a likelihood alapján a szokásos módon számítható:

$$P(\theta | Y_O) \propto P(\theta) \cdot f(Y_M | Y_O) \quad (3.7)$$

*vagyis mindig ugyanazt a statisztikai eloszlást követő

3.1. Szerkezeti hibák bayesi kezelése

A szerkezeti hibák hatásának ezen statisztikai leírása a klasszikus fehér zaj feltevéshez képest jelentősen javíthatja a modell előrejelző képességét azáltal, hogy realisabb statisztikai feltételezéseket fogalmaz meg a hibák tulajdonságairól (Reichert és Schuwirth, 2012). A módszer alkalmazhatóságának feltétele, hogy a szisztematikus eltérések megfelelően leírhatók legyenek a B autoregresszív folyamattal. Ez sokszor teljesül például a vízben oldott oxigén napi koncentrációváltozásai esetében (Reichert és Schuwirth, 2012; Honti és mtsai., 2016b; Istvánovics és Honti, 2017) és ritkán a hidrológiai modellezésben is (Del Giudice és mtsai., 2013). [95]

A szisztematikus hibákra illesztett autoregresszív folyamat nem volt előzmény nélküli a hidrológiában. Az AR(1) modellt már évtizedekkel ezelőtt alkalmazták autokorrelált hibafolyamatok leírására (Sorooshian és Dracup, 1980) és azóta is használatban van (Bates és Campbell, 2001; Yang és mtsai., 2007; Frey és mtsai., 2011). A Kennedy és O'Hagan (2001) által javasolt hiba-rendszerben ez a hagyományos eljárás azzal egyenértékű, hogy E-t elhanyagolhatónak, B-t pedig markovi folyamatnak tételezzük fel, valamint egyenletes prior eloszlásokat használunk – azaz nincsenek a paraméterekkel szemben támasztott elvárásaink. A hagyományos AR(1) hibafolyamat nem bayesi értelmezése nem kidolgozott. Klasszikus statisztikai értelemben a szerkezeti hibák nem vezetnek valódi sztochasztikus eltérésekhez, hiszen esetükben *episztemikus* bizonytalanságról[†] van szó, vagyis a csak háttérben sejtethető determinisztikus folyamatok megismerhetősége korlátozott. [96]

A csapadék-lefolyás modellezésben a tipikus hibafolyamat nem *homoszcedasztikus*, ami kompenzálható Box-Cox (Honti és mtsai., 2014) vagy más nemlineáris transzformáció (Del Giudice és mtsai., 2013) alkalmazásával. Ekkor mind a mért, mind a modellezett adatsort transzformáljuk, majd a transzformált térben számoljuk a likelihoodot. A transzformáció *heteroszcedasztikus*[‡] teszi a hibákat, pl. nagyobb modellezett értékekhez szélesebb hibaeloszlást feltételez. Megfelelő transzformáció esetén a transzformált hibaidősor homoszcédasztikus és normális eloszlású, vagyis megfelel a hibamodell statisztikai feltételeinek. A széles körben használt log-transzformáció, ami megfelel egy $\lambda = 0$ paraméterrel végzett Box-Cox transzformációnak, az eredetileg additív hibamodellt multiplikatívává alakítja át és így az abszolút hibából relatív hibát állít elő (miközben a hibamodell additív, a hibák pedig abszolútak maradnak a transzformált térben). [97]

[†]A bizonytalanság két alapvető fajtája: az *aleatorikus* (*aleatory*) bizonytalanság valódi véletlenszerűségből táplálkozik, az *episztemikus* (*epistemic*) bizonytalanság pedig nem véletlenszerű folyamatok esetében az a „kiszámíthatatlanság”, amely az ismereteink hiányosságából fakad (Kiureghian és Ditlevsen, 2009).

[‡]A hibaidősor statisztikai eloszlása időről időre változik.

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése

3.2. A bemeneti- és szerkezeti-hibák kölcsönhatása

■ *A szerkezeti és bemeneti hibák hatásainak megkülönböztethetlensége, saját esettanulmány (Honti és mtsai., 2011)*

[98] A csapadék-lefolyás modellezésben a szisztematikus eltérések általában jól láthatóan a csapadékeseményekhez kötődnek és emiatt feltételezhető, hogy a hibák jelentős részét a csapadékadatsorok nem elhanyagolható bizonytalansága okozza, ami viszont nem szerepel a *Kennedy és O'Hagan* (2001) által megalkotott keretrendszerben. Még a csapadék pillanatnyi intenzitásának lokális mérésekor is feltételezhető 5–20% bizonytalanság (*Ciach*, 2003; *Villarini és mtsai.*, 2008), ami a területileg reprezentatív csapadékmennyiség becslésénél még napi léptéken is számottevő pontatlanlansághoz vezethet (vö. 3.1. ábra). Nem közvetlenül a vízgyűjtőn lévő csapadékmérőnél és nagy intenzitású, de kis kiterjedésű konvektív csapadékeseményeknél (tipikusan nyári zivatar) a probléma odáig fokozódhat, hogy a csapadékmérő környezetét érintő vihar a modellezett vízgyűjtőre egyáltalán nem is terjed ki és így nem változtatja meg a vízhozamot, illetve megfordítva: a vízgyűjtőről kiinduló árhullámot esetleg a mérőhálózaton észrevétlenül átcsusszant csapadék hajtja meg. Ezekben az esetekben az idősorok transzformációja nem kínál megoldást, mivel már nincs közvetlen kapcsolat a mért bemenő adatok alapján számolt modelleredmények és a valós vízhozam között.

[99] A bemenő adatok pontatlanságát és ennek következményeit a hidrológiai modellezésben már régen felismerték és újabban megpróbálták bevonni a bizonytalansági vizsgálatokba is (*Kavetski és mtsai.*, 2006; *Ajami és mtsai.*, 2007; *Vrugt és mtsai.*, 2008). A hibás bemenő adatok miatt még egy elméletileg tökéletes modell sem tudná pontosan szimulálni a megfigyelt vízhozamot. *Kavetski és mtsai.* (2006) valamint *Vrugt és mtsai.* (2008) csapadékeseményenként változó szorzótényezőket vezettek be és az ezekkel módosított csapadékösszegeket használták fel a modell futtatásához. A tényezők értékét a többi paraméterrel együtt, a kalibráció során határozták meg.[§] A szorzótényezők jelentősen megnövelték a paraméterter dimenzióinak számát, így nehézkessé tették a kalibrációt és a poszterior eloszlás mintázását. *Ajami és mtsai.* (2007) a csapadékeseményekhez alkalmazandó szorzótényezőket minden likelihood számításához előre kisorsolták egy normális eloszlásból, majd ezeket együttesen skálázták két új paraméter, a bemenő hiba várható értéke és varianciája segítségével, melyeket kalibráltak. Ezzel elkerülték a kalibrálandó paraméterek számának megsokszorozódását, de a sorsolt szorzótényezők véletlenszerűsége

[§]A szorzótényezőket az előrejelzéskor már nem használják, hiszen ott a csapadék hibáját referencia-adatok hiányában nem tudjuk becsülni. A szorzótényezők funkciója csak az, hogy a modell paraméterei ne torzuljanak a bemeneti hibáktól.

3.2. A bemeneti- és szerkezeti-hibák kölcsönhatása

miatt a poszterior eloszlás reprezentatív mintázása így is nagyon sokáig tartott.

[100]

A pontatlan bemenő adatok hatása közvetett, a hibás adatok áthaladnak a determinisztikus csapadék-lefolyás modellen és így az eredeti bemenő hibáknak a modell szerkezete által eltorzított változata jelentkezik az aggregált hibaidősorban. Emiatt a szerkezeti- és a bemeneti-eredetű hibák csak nehezen választhatók szét. *Kirchner* (2009) felvetette, hogy a szokásos hidrológiai modellezési eljárás visszafelé is elvégezhető lenne, vagyis a vízhozamból következtethetnénk az azt előállító csapadék nagyságára. Ezen eljárásban a modellezés során fellépő összes bizonytalanságot a bemeneti hibáknak tulajdonítjuk.

[101]

A szerkezeti és bemeneti hibák elválasztási nehézségeit azzal szemléltethetjük, ha összehasonlítjuk a két hibatípus kizárólagosságát feltételező kalibrációs eljárás eredményeit (*Honti és mtsai.*, 2011). Az első esetben egy, előzőleg hagyományos módon kalibrált lefolyásmodell paramétereit rögzítjük, majd a vízhozamból visszafelé kalibráljuk az azt előállító csapadék-idősort (*Kirchner*, 2009). Az együtt kalibrálandó paraméterek számának kordánban tartása érdekében a kalibráció csapadékeseményenként történik, a mért csapadékintenzitásokat pedig prior várható értékeként használjuk. A második esetben *Kuczera és mtsai.* (2006) valamint *Reichert és Mieleitner* (2009) nyomán a szerkezeti bizonytalanságot a determinisztikus modell paramétereinek időbeli változékonyságával kezeljük: minden árhullám-eseményhez külön paraméterkészletet kalibrálunk, de a bemenő csapadék-idősort pontosnak fogadjuk el (az időben változó paraméterek jelentőségéről és részleteiről lásd a 4. fejezetet).

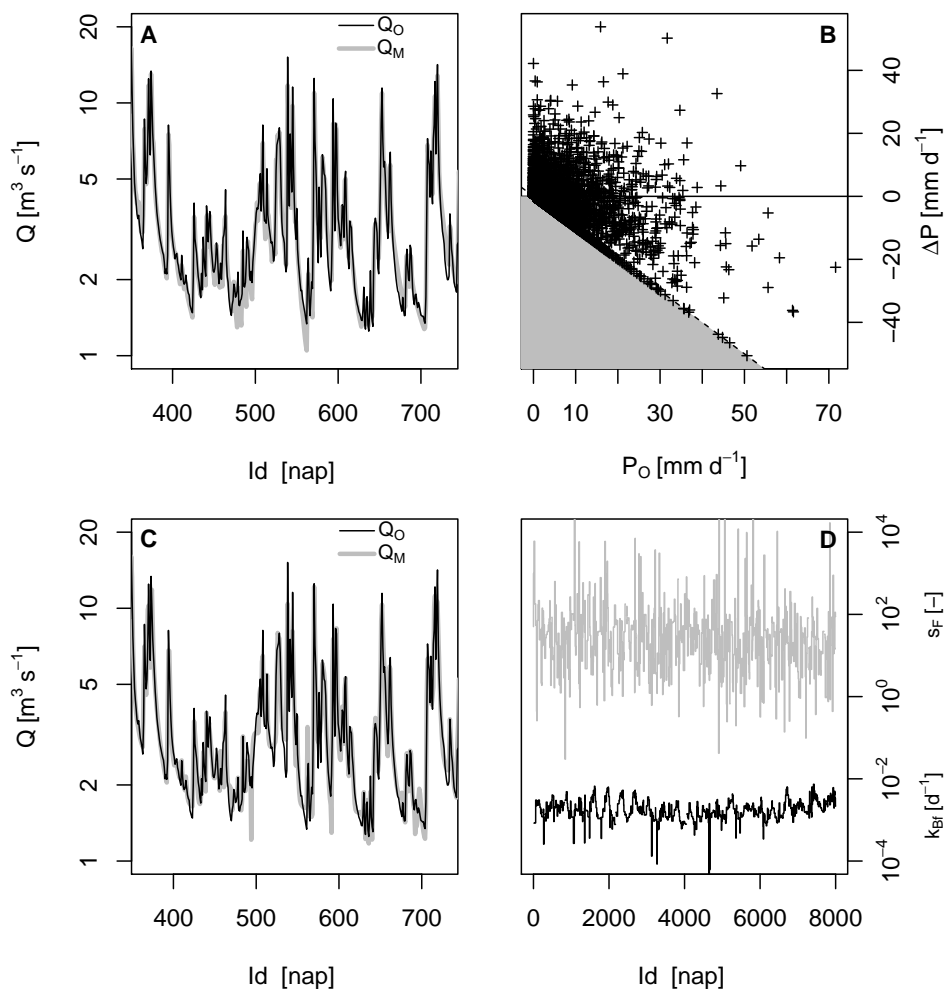
[102]

A számos szabadsági foknak köszönhetően mindkét módszer majdnem tökéletes illeszkedést ad a mért vízhozam adatsorra (3.2. ábra). A modell által leírt és a tényleges variancia arányát mutató Nash-Sutcliffe index az első esetben 98%, a másodikban 93% volt, míg a hagyományos modellkalibrációval 55% volt a legjobb eredmény. Ez azt jelenti, hogy a mindkét hibafajta kizárólagosságának feltételezésével teljesen megmagyarázhatjuk a modellezés során felmerülő hibákat, vagyis az aggregált hibaidősor alapján nem dönthető el, hogy a hibákat a bemenő adatok pontatlanságai, avagy a modellszerkezet hiányosságai okozták-e.

[103]

Mivel általában mind a csapadékmérések és más bemenő adatok megfigyelésének pontatlansága, mind pedig a modellszerkezet hiányosságai nyilvánvalók, a fenti sarkított feltételezések nem állják meg a helyüket. Olyan likelihood függvényre van tehát szükség, amely egyszerre tudja kezelni a bemenő adatok és a modellszerkezet hiányosságait, lehetőleg alacsony erőforrásigénnyel. A megoldáshoz egy újfajta autoregresszív folyamatot alkalmazunk a szisztematikus hibák leírására a *Kennedy és O'Hagan* (2001) által megalkotott keretrendszerben.

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése



3.2. ábra. A bemeneti- és szerkezeti-bizonytalanság egyenértékűsége a Gürbe vízgyűjtőn (Svájc) a logSPM (Kuczera és mtsai., 2006) modellel (Honti és mtsai., 2011). A-B: a bemenő csapadékadatsor kalibrációja. A: a számított vízhozam (Q_M) illeszkedése a mértre (Q_O) (részlet, log-skála), B: a mért csapadék és a kalibrált csapadékkorrektíós-tényezők kapcsolata. A szürke régióban a korrekciós tényező nem értelmezett, mivel negatív csapadékot eredményezne. C-D: eseményfüggő paraméterek. C: a számított vízhozam illeszkedése a mértre. D: Két modellparaméter, a telítettségi függvény alakparaméterének (s_F) és az alaphozam tényezőjének (k_{Bf}) kalibrált időbeli változása.

3.3. A zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamat

■ Az általam kifejlesztett zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamat

A bemeneti hibák által befolyásolt szisztematikus hiba (B a (3.2) egyenletben) [104] leírására az Ornstein-Uhlenbeck folyamat módosított változatát használjuk majd fel. A módosítás abban áll, hogy a modell bemenő adatai külső zavaró tényezőként hatnak a szisztematikus hibák sztochasztikus folyamatára. A módosítás ismeretése előtt bemutatom az eredeti Ornstein-Uhlenbeck folyamatot.

Az Ornstein-Uhlenbeck folyamat

Az Ornstein-Uhlenbeck (OU) folyamat, vagy más néven a Gauss-Markov folyamat [105] egy olyan időben folytonos sztochasztikus folyamat, amely minden időpontban normális eloszlású és adott átlagérték körül ingadozik. Az OU folyamat a diszkrét AR(1) autoregresszív folyamat folytonos változatának is tekinthető.

Ha az átlagérték nulla, akkor a B-vel jelölt Ornstein-Uhlenbeck folyamatot a [106] feltétel nélküli varianciájával (σ_B^2)[¶] és a korrelációs távolság inverzével (β) az alábbi sztochasztikus differenciálegyenletben definiálhatjuk:

$$dB(t) = -\beta B(t) + 2\beta \sigma_B^2 dW(t) , \quad (3.8)$$

ahol a W(t) az úgynevezett Wiener folyamat értéke a t időpontban.

Ezt az egyenletet integrálva kapjuk B feltételes eloszlását. A folyamat várható [107] értéke:

$$E [B(t_i) | B(t_{i-1}) = b] = b \exp \{-\beta |t_i - t_{i-1}|\} . \quad (3.9)$$

Az OU folyamat definíciója szerint (3.8) a véletlen komponens független a [108] folyamat aktuális értékétől. Emiatt a folyamat varianciája is kifejezhető a folyamat várható értékétől függetlenül:

$$\text{Var} [B(t_i) | B(t_{i-1}) = b] = \sigma_B^2 (1 - \exp \{-2\beta |t_i - t_{i-1}|\}) . \quad (3.10)$$

Hasonlóan a varianciához, a folyamat korábbi és későbbi értékei közötti [109] kovariancia is csak az időbeli távolságtól és a t_{i-1} időpontban tapasztalható varianciától (σ_B^2) függ:

$$\text{Cov} [B(t_i), B(t_{i-1})] = \sigma_B^2 \exp \{-\beta |t_i - t_{i-1}|\} , \quad (3.11)$$

és ez alapján a diszkrét időpontokra értelmezett kovariancia mátrix a következő:

$$\Sigma_B(i, j) = \sigma_B^2 \exp \{-\beta |t_i - t_j|\} . \quad (3.12)$$

[¶]A feltétel nélküli variancia az a variancia, ami a folyamatot hosszú idejű szabad fejlődés után jellemzi. σ_B^2 nem függ az időtől.

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése

Az Ornstein-Uhlenbeck folyamat aszimptotikus varianciájának időbeli változása

[110] Az OU folyamat stacioner varianciája a feltétel nélküli variancia (σ_B^2). Az adott időpillanatban ténylegesen tapasztalható (aszimptotikus) variancia a stacioner varianciához konvergál a folyamat kezdeti állapotától függetlenül^{||}.

[111] Ha a t_{i-1} időpontban a folyamat normális eloszlású $\varsigma_B^2(t_{i-1})$ varianciával, akkor a t_i időpontban a variancia a következő értéket veszi fel:

$$\varsigma_B^2(t_i) = \sigma_B^2 + \left(\varsigma_B^2(t_{i-1}) - \sigma_B^2 \right) \exp \{-2\beta(t_i - t_{i-1})\}, \quad (3.13)$$

[112] A feltételes variancia kifejezéséhez egyszerűen be kell helyettesítenünk $\varsigma_B^2(t_{i-1})$ helyére nullát, így az (3.10) egyenlethez hasonló alakhoz érkezünk:

$$\varsigma_B^2(t_i) = \sigma_B^2 \left(1 - \exp \{-2\beta |t_i - t_{i-1}|\} \right). \quad (3.14)$$

[113] Az aszimptotikus variancia időbeli változását az (3.13) egyenlet deriváltjával fejezhetjük ki differenciálegyenlet alakban:

$$\frac{d\varsigma_B^2}{dt} = 2\beta \left(\sigma_B^2 - \varsigma_B^2 \right). \quad (3.15)$$

[114] Ezen differenciálegyenlet megoldása valóban kielégíti a feltételes varianciával szemben az (3.13) egyenletben támasztott követelményeket, ha a $\varsigma_B^2 = \sigma_B^2$ és $t_i - t_{i-1} = \infty$ peremfeltételeket használjuk az integrálásakor.

A zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamat modellje

[115] Feltételezzük, hogy a hibafolyamat varianciája nem állandó (így a hibafolyamat *heteroscedasztikus*, vagyis feltétel nélküli eloszlása időben nem állandó). A variancia változását egy meghajtó folyamathoz kötjük. A meghajtó folyamat megváltoztatja az OU folyamat stacioner varianciáját, amelyhez a tényleges variancia konvergálni fog. A meghajtó folyamat hiányában a *homoscedasztikus* (időben állandó eloszlású) OU folyamat szabályai lépnek érvénybe.

[116] Az egyszerűség kedvéért a feltétel nélküli (*unconditional*) szórás és a meghajtó folyamat (P) intenzitása között lineáris kapcsolatot tételezünk fel (\varkappa együtthatóval): $\left[\sigma_B^2 + (\varkappa P)^2 \right]$. Mivel β nem változik, az aszimptotikus variancia időbeli változását leíró (3.15) egyenlet továbbra is alkalmazható:

$$\frac{d\varsigma_B^2}{dt} = 2\beta \left(\left[\sigma_B^2 + (\varkappa P)^2 \right] - \varsigma_B^2 \right). \quad (3.16)$$

^{||}Az aszimptotikus variancia függ az időtől. Ha a folyamatot egy ismert pontból indítjuk a t időpillanatban, akkor ott $\varsigma_B^2(t) = 0$. Később $\varsigma_B^2(t + \infty) \rightarrow \sigma_B^2$.

3.3. A zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamat

A $B(t_i)$ folyamatnak a $B(t_0)$ kezdeti értéktől függő eloszlása egy adott t_i [117] időpillanatban ekkor:

$$B(t_i) = B(t_0) \exp(-\beta |t_i - t_0|) + \int_{s=t_0}^{t_i} \varsigma_B(s) \exp(-\beta |t_i - s|) dW(s) . \quad (3.17)$$

Ha a P meghajtó-intenzitás egy Δt időlépésben állandó, akkor a tényleges [118] pillanatnyi variancia az időlépés végén a következőképpen alakul:

$$\varsigma_B^2(t + \Delta t) = \sigma_B^2 + (\varkappa P)^2 + \left(\varsigma_B^2(t) - \sigma_B^2 - (\varkappa P)^2 \right) \exp\{-2\beta \Delta t\} . \quad (3.18)$$

Ha az időlépések hossza állandó, akkor ez átrendezhető a következő diszkrét [119] alakra, mely hasonlít a (3.13) egyenetre (3.3. ábra):

$$\varsigma_{B_i}^2 = \sigma_B^2 + \left(\varsigma_{B_{i-1}}^2 - \sigma_B^2 \right) \exp\{-2\beta \Delta t\} + (\varkappa P)^2 \quad (3.19)$$

ahol

$$\varkappa = \varkappa \sqrt{1 - \exp\{-2\beta \Delta t\}} . \quad (3.20)$$

Így elkülöníthető a meghajtó folyamatnak a tényleges varianciára gyakorolt [120] zavaró hatása az átlaghoz való automatikus konvergenciától, amely az eredeti OU folyamatban is jelen van.

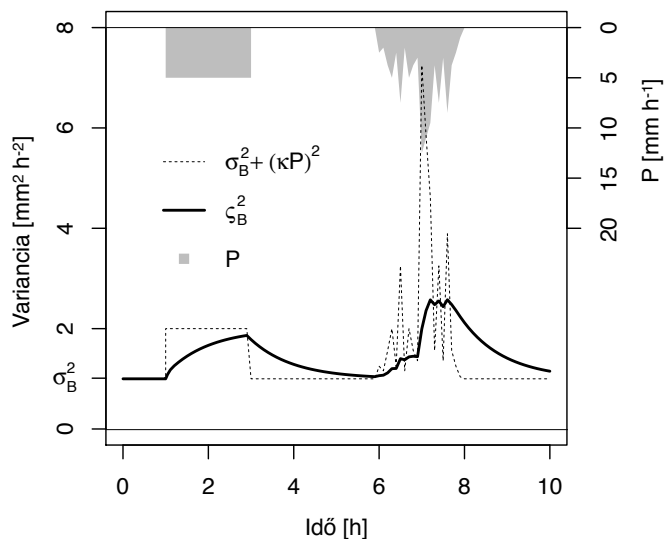
Ha összehasonlítjuk a zavartalan OU folyamat aszimptotikus varianciáját a [121] t_i és t_{i-1} időpontokban, akkor a két időpont között állandó intenzitású P zavaró folyamat által okozott növekmény felfogható egy független, standard normál eloszlású $Z(t_i)$ véltelen szám és $\varkappa P$ szorzataként. Függetlensége miatt Z nem változtatja meg a kovarianciát két egymást követő megfigyelési pont között:

$$\begin{aligned} \text{Cov} [B(t_{i-1}), B(t_i) + \varkappa P Z(t_i)] &= \text{Cov} [B(t_{i-1}), B(t_i)] + \\ &\quad + \varkappa P \text{Cov} [B(t_{i-1}), Z(t_i)] \\ &= \text{Cov} [B(t_{i-1}), B(t_i)] . \end{aligned} \quad (3.21)$$

Hasonló megállapítást tehetünk nem egymás melletti megfigyelési pontok [122] esetén, vagyis amikor a zavaró folyamat intenzitása a két pont között nem állandó. A későbbi megfigyelési pontban a zavarás hatása számos független, normális eloszlású zaj integráljaként jelenik meg, ahol a zavarás hatása az idő előrehaladtával lecseng (lásd a (3.17) egyenletet). A dW és B közötti függetlenség miatt:

$$\begin{aligned} \text{Cov} [B(t_i), B(t_0)] &= \text{Cov} [B(t_0) \exp\{-\beta |t_i - t_0|\}, B(t_0)] \\ &= \text{Var} [B(t_0)] \exp\{-\beta |t_i - t_0|\} \\ &= \sigma_B^2(t_0) \exp\{-\beta |t_i - t_0|\} \end{aligned} \quad (3.22)$$

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése



3.3. ábra. A csapadék által zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamat feltétel nélküli $(\sigma_B^2 + (\kappa P)^2)$ és aszimptotikus (ζ_B^2) variációjának időbeli változása egy szabályos négyszögimpulzus és egy „természetes” lefolyású csapadékesemény alatt. Az összes csapadék mindkét esetben 10 mm volt 2 óra leforgása alatt.

- [123] Ha ezt általánosítjuk tetszőleges diszkrét megfigyelési pontokra, akkor a következő kovariancia mátrixhoz jutunk:

$$\Sigma_B(i, j) = \begin{cases} \zeta_B^2(t_i) & \text{ha } i = j \\ \zeta_B^2(t_i) \exp(-\beta |t_j - t_i|) & \text{ha } i < j \\ \zeta_B^2(t_j) \exp(-\beta |t_i - t_j|) & \text{ha } i > j \end{cases} \quad (3.23)$$

- [124] A zavart OU folyamat tehát a szabályos OU folyamathoz hasonlóan még mindig Gauss-Markov folyamat, hiszen a kovariancia lecsengésének mintázata továbbra is exponenciális.

3.4. Napi hidrológiai modell hibájának leírása zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamatokkal

- A zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamat alkalmazása csapadék-lefolyás modellek kalibrációjában (Honti és mtsai., 2013)

- [125]

3.4. Napi hidrológiai modell hibájának leírása zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamatokkal

Reichert és Schuwirth (2012) példáját követve a csapadék-lefolyás modellezés aggregált hibafolyamata véletlenszerű (E) és szisztematikus (B) komponensekre bontható:

$$Q_O = Q + E = [Q_M + B] + E. \quad (3.24)$$

ahol Q_O a mért vízhozam, Q a tényleges (ismeretlen) vízhozam, Q_M pedig a modellezett vízhozam. Reichert és Schuwirth (2012) értelmezésétől eltérően itt a zaj-szerű E nem csupán a vízhozammérési hibákat jelenti, mivel a vízhozammérés során szisztematikus hibák is gyakoriak (pl. a Q-H görbék hibáinak köszönhetően). A bemenő adatok hibáinak hatását nem célszerű a hibák lefolyás-moddellen keresztüli propagálásával leírni, ahogyan azt sokan teszik (Kavetski és mtsai., 2006; Ajami és mtsai., 2007; Vrugt és mtsai., 2008), mivel ez a számítási igény ugrásszerű növekedéséhez vezet. Ekkor viszont a hibamodellnek kell képesnek lennie a determinisztikus lefolyásmodell csapadékra adott *a priori* ismeretlen válaszána emulációjára. A koncepcionális lefolyásmodellekben szokásos módon a hibamodell is feloszthatjuk gyorsan, illetve lassan reagáló részekre, a felszíni és felszínalatti lefolyás analógiájára. A gyors szerkezeti hibafolyamat ($B_f(P)$) csak csapadékos napokon aktív, memóriája nincs; a lassú hibafolyamat ($B_s(P)$) viszont erősen autokorrelált. Így a (3.24) egyenlet a következőképpen alakul át:

$$Q_O = Q + E = [Q_M + B_f(P) + B_s(P)] + E. \quad (3.25)$$

Ezen hibamodell-szerkezet alapján a likelihood függvény $B_f(P)$, $B_s(P)$ és E [126] meghatározásával alakítható ki. Mindegyik komponens esetében feltételezzük, hogy a hibakomponensek eloszlása minden időpontban normális és a várható érték mindig nulla. Így egy adatsorra minden komponens leírható egy sokváltozós normális eloszlással, ahol minden változó az adott idősor egy elemének felel meg, így az adott változóra vonatkozó marginális eloszlás a hibakomponens eloszlása az elem helyzete által meghatározott időpontban. A többváltozós normál eloszlást a várható értékek vektorával és a kovariancia mátrixszal szokás definiálni. Mivel a hibakomponensek esetében feltételezzük, hogy a várható érték nulla, elegendő a kovariancia mátrixot megadni.

A mérési zaj

Feltételezzük, hogy a méréseket terhelő zaj (E) normál eloszlású, független, σ_E [127] szórású, nulla várható értékű. Így E paraméterkészlete (ψ) csak egyetlen elemből, σ_E -ből áll, a kovariancia mátrix pedig:

$$\Sigma_E(i,j) = \begin{cases} \sigma_E^2 & \text{ha } i = j \\ 0 & \text{ha } i \neq j \end{cases}, \quad (3.26)$$

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése

A gyors hibafolyamat

- [128] Egy csapadék-lefolyás modell csapadékra adott válasza linearizálható. A linearizált változatban a csapadék arányosan változtatja a lefolyást. Valós vízgyűjtők csapadék-lefolyás függvénykapcsolata nemlineáris és függ a vízgyűjtő belső állapotától – így a lineáris egyszerűsítés csak egy-egy adott modellállapot szűk környezetében közelíthetné jól a tényleges lefolyást. A hidrológiában mégis régóta elterjedt a korlátlanul érvényes lineáris lefolyásfüggvény, vagyis a lefolyási tényező használata. A gyors hibafolyamat (B_f) leírásához a lefolyási tényezőt használjuk, de azt nem a csapadékra és a lefolyásra, hanem ezek hibáira alkalmazzuk. Normális eloszlású csapadék-hiba esetén a lineáris kapcsolatnak köszönhetően a vízhozam ebből eredő hibája is normális eloszlású lesz. A lefolyási hiba szórása (σ_r [$m^3 d^{-1}$]) a csapadék relatív hibájának szórásából (σ_{pm} [-]), a csapadékintenzitásból (P [$m d^{-1}$]) és az egész vízgyűjtőre értelmezett lefolyási tényezőből (c_r [m^2]) számítható:

$$\sigma_r = \sigma_{pm} P c_r \quad (3.27)$$

A gyakorlatban ismeretlen értékű két állandót, a lefolyási tényezőt és a csapadék relatív hibáját összevonva:

$$\sigma_r = \kappa_f P \quad (3.28)$$

- [129] Mivel $B_f(P)$ a lefolyás hibáját írja le, így varianciája csak akkor nem nulla, ha az adott napon éppen esik az eső ($P > 0$). A (3.28) egyenlet egyszerű szerkezetét használva $B_f(P)$ kovariancia mátrixa a következő:

$$\Sigma_{B_f}(i, j) = \begin{cases} (\kappa_f P_i)^2 & \text{ha } i = j \\ 0 & \text{ha } i \neq j \end{cases}, \quad (3.29)$$

ahol $P(t_i)$ a csapadékintenzitás a t_i időpontban. Így $B_f(P)$ az E folyamathoz hasonlóan csak egy paraméterből (κ_f) álló paraméterkészlettel (ξ_f) rendelkezik.

A lassú hibafolyamat

- [130] A lassú hibafolyamat a csapadék hibás észleléséből és a szerkezeti problémákból származó autokorrelált hibákat képviseli. Hidrológiai szempontból ezek a felszíni lefolyásnál lassabban reagáló lefolyási útvonalakhoz (felszínalatti lefolyás, alaphozam) kötött hibák. A kiindulási alap ugyanaz, mint a gyors hibafolyamat esetében, a csapadék hibája lineárisan változtatja a hibafolyamat szórását. Az autokorreláltság miatt azonban a hibák hatása nem enyészik el a következő időlépésben,

3.4. Napi hidrológiai modell hibájának leírása zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamatokkal

így a korábbi hibák hatását is figyelembe kell venni. Erre a zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamat (lásd: 3.3. fejezet) ad lehetőséget. Az OU folyamat megzavarása (κP a (3.19) egyenletben) a (3.28) egyenlet alapján történik. A lassú hibafolyamat kovariancia mátrixa ekvidisztáns adatsorra (pl. napi értékek):

$$\Sigma_B(i, j) = \begin{cases} \varsigma_{B_i}^2 & \text{ha } i = j \\ \varsigma_{B_i}^2 \exp(-\beta |j - i|) & \text{ha } i < j \\ \varsigma_{B_j}^2 \exp(-\beta |i - j|) & \text{ha } i > j \end{cases} \quad (3.30)$$

ahol

$$\varsigma_{B_i}^2 = \sigma_B^2 + \left(\varsigma_{B_{i-1}}^2 - \sigma_B^2 \right) \exp \{-2\beta \Delta t\} + (\kappa_s P)^2 \quad (3.31)$$

ahol κ_s a lassú hibafolyamat lefolyási tényezője [m^2], σ_B^2 [$m^6 d^{-2}$] a lassú hibafolyamat feltétel nélküli alapvarianciája, ami megfelel a minden időpontban aktív, ismeretlen szerkezeti hibák hatásának, Δt [d] az időlépések hossza, β [d^{-1}] pedig a lassú hibafolyamat korrelációs idejének inverze. A lassú hibafolyamat paraméterkészlete (ξ_s) tehát 3 elemből áll: σ_B , β , és κ_s .

Posterior valószínűség és likelihood

A zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamatra épülő (ZOU) hibamodellben a posterior valószínűség sűrűségfüggvénye a szokásos módon számítható, a prior valószínűségeknél az egyes hibafolyamatok saját paramétereit is figyelembe kell venni: [131]

$$f(\theta, \psi, \xi_f, \xi_s \mid \mathbf{Q}_O) \propto f(\theta, \xi_f, \xi_s, \psi) L(\theta, \mathbf{Q}_O) \quad (3.32)$$

A poszterior valószínűséghez szükséges likelihood függvényben az aggregált hibafolyamat sokváltozós normális eloszlását használjuk: [132]

$$L(\theta, \mathbf{Q}_O) \propto \frac{1}{\sqrt{\det(\Sigma_{E+B_f+B_s})}} \quad (3.33)$$

$$\cdot \exp \left(-\frac{1}{2} [\mathbf{Q}_O - \mathbf{Q}_M]^T (\Sigma_{E+B_f+B_s})^{-1} [\mathbf{Q}_O - \mathbf{Q}_M] \right) \quad (3.34)$$

A $\Sigma_{E+B_f+B_s}$ együttes kovariancia mátrix előállításának nem egyszerű feladat. [133] Számítási szempontból E , B_f és B_s megkülönböztetése hátrányos lehetne, hiszen a Kennedy és O'Hagan (2001) valamint Reichert és Schuwirth (2012) által javasolt (3.5) egyenlet csak 2 komponensre érvényes, további komponensekkel többszörös integrálást kellene végrehajtani. Normális eloszlások esetén viszont a kompozit hibafolyamat is normális marad, kovarianciamátrixa a komponensek mátrixainak összege (Reichert és Schuwirth, 2012; Honti és mtsai., 2013).

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése

[134] Az Ornstein-Uhlenbeck folyamatok előnye a *Kennedy és O'Hagan* (2001) valamint *Reichert és Schuwirth* (2012) által javasolt általános gaussi autoregresszív folyamatokkal szemben a markovi tulajdonságban rejlik. Hosszú, nagy időbeli felbontású adatsoroknál a hibakomponensek kovariancia mátrixai óriási méretűre híznak. B_f és E kovariancia mátrixának esetében a tárolás technikailag megoldható lenne ritka mátrixok formájában, de az aggregált hibafolyamat kovariancia mátrixa B_s miatt teli mátrix, aminek invertálása súlyos numerikus problémát jelentene. Az Ornstein-Uhlenbeck folyamatok markovi tulajdonsága miatt B_s esetében a kovariancia időbeli lecsengése exponenciális, ami megkönnyíti a likelihood (3.34) egyenlet szerinti számításánál szükséges kovarianciamátrix-invertálást és az előrejelzést:

1. *Rybicki és Press* (1995) kimutatták, hogy egy Gauss-Markov folyamat inverz kovariancia mátrixa (itt $\Sigma_{B_s}^{-1}$) szimmetrikus és tridiagonális. Ezen felül megalkottak egy algoritmust az ilyen kovariancia mátrix inverzének kiszámítására. Azonban $(E + B_f + B_s)$ már nem markovi folyamat, így az invertálási eljárás az aggregált hibafolyamat kovariancia mátrixára nem alkalmazható. Mivel Σ_E^{-1} és $\Sigma_{B_f}^{-1}$ diagonális mátrix, így az $\Sigma_E^{-1} + \Sigma_{B_f}^{-1} + \Sigma_{B_s}^{-1} = (\Sigma_E + \Sigma_{B_f})^{-1} + \Sigma_{B_s}^{-1}$ összeg is tridiagonális. Szimmetrikus tridiagonális mátrixok invertálhatók *Usmani* (1994) eljárásával. A likelihood függvényben szereplő inverz kovariancia mátrix kifejezhető a következő alakban is: $\Sigma_{E+B}^{-1} = (\Sigma_E + \Sigma_{B_f} + \Sigma_{B_s})^{-1} = (\Sigma_E + \Sigma_{B_f})^{-1} - (\Sigma_E + \Sigma_{B_f})^{-1} \left((\Sigma_E + \Sigma_{B_f})^{-1} + \Sigma_{B_s}^{-1} \right)^{-1} (\Sigma_E + \Sigma_{B_f})^{-1}$, tehát nem szükséges egyetlen általános teli mátrix invertálása sem a (3.34) egyenlet kiszámításához (Σ_{B_f} ugyan teli mátrix, de markovi folyamathoz tartozik).
2. A $B_s(P)$ folyamat előrejelzésben használandó megvalósulása csak a legutolsó megfigyelés értékétől függ, így a teljes előrejelzési időszakra generálható a (3.31) egyenlet által leírt feltételes eloszlással. Általános autoregresszív folyamatok esetében a teljes megfigyelési időszak használta szükséges (*Reichert és Schuwirth*, 2012).

[135] A $B_s(P)$ folyamat időben exponenciálisan csökkenő memóriája miatt a fent részletezett analitikus egyszerűsítések mellett lehetőség nyílik a numerikus megoldás optimalizálására is. Bár $\Sigma_{E+B}^{-1} = (\Sigma_E + \Sigma_{B_f} + \Sigma_{B_s})^{-1}$ egy általános teli mátrix, hiszen $E(P) + B_f(P) + B_s(P)$ összege már nem markovi folyamat, de az átlótól távolodva itt is gyorsan csökken a kovariancia. Ez azt jelenti, hogy egy bizonyos idő elteltével az aggregált hibaidősor elemei kvázi függetlenek a megelőző értékektől.

3.4. Napi hidrológiai modell hibájának leírása zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamatokkal

Egy kellően hosszú emlékezési időtartam (m , ez esetben 10 nap) segítségével [136] a likelihood kiszámítása darabokban is lehetséges, ami a kezelendő mátrixok méretét nagyságrendekkel is csökkentheti. Az algoritmus a Σ_{E+B}^{-1} invertált kovariancia mátrix 2 példányát használja fel. Az egyik példány m , míg a másik $m + 1$ dimenziós. Ezeket a mátrixokat kernelként használva számítjuk ki az egész idősor likelihoodját. Először az r aggregált hibaidősor első m elemének likelihoodját számítjuk ki a (3.34) egyenlettel és a vonatkozó méretű mátrixszal. Ezután minden következő elemre a feltételes likelihoodot állítjuk elő ($i = m + 1$ -től növekszik):

$$f(r_i | r_{i-1}, \dots, r_{i-m}) = \frac{f(r_i, r_{i-1}, \dots, r_{i-m})}{f(r_{i-1}, \dots, r_{i-m})}. \quad (3.35)$$

A teljes (közelítő) likelihood az első m elem likelihoodjának és a következő [137] elemek feltételes likelihoodjának szorzata:

$$f(r_n, \dots, r_1) \approx f(r_m, \dots, r_1) \prod_{i=m+1}^n f(r_i | r_i, \dots, r_{i-m}). \quad (3.36)$$

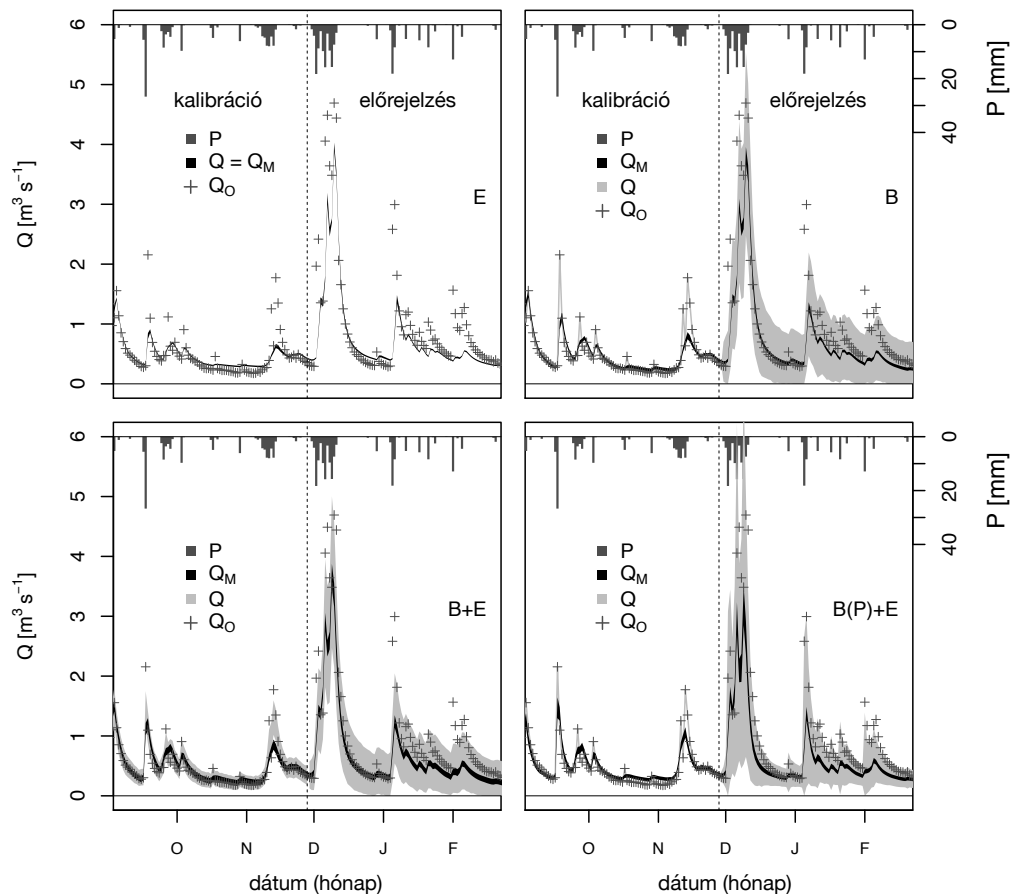
Mivel a két kovariancia kernel mérete eltérő, így szükséges a likelihood számításakor a normális eloszlás f sűrűségfüggvényéből gyakran elhanyagolt $1/\sqrt{2\pi}^k$ tag szerepeltetése a (3.35) és (3.36) egyenletekben $k = m$ és $m + 1$ értékkel az alkalmazott mátrix méretének megfelelően.

A ZOU hibamodell alkalmazásának előnyei és hátrányai

A ZOU hibamodell a *homoszcedasztikus* elődeivel ellentétben a [138] vízhozamadatsorok nemlineáris transzformációja nélkül is működik (*Honti és mtsai.*, 2013; *Del Giudice és mtsai.*, 2013). Az ezen hibamoddellel számított legjobb megoldás nem különbözik jelentősen a már ismert hibamoddellekkel számított maximum posterior valószínűségű változattól, a kalibrációs időszakra és az előrejelzésekre számított bizonytalansági tartomány viszont teljesen eltérően alakul (3.4. ábra). Napi vízhozamokra alkalmazva a ZOU hibamodell biztosította a legmegfelelőbb bizonytalansági tartományt (*Honti és mtsai.*, 2013). A hagyományos hibamoddellekkel ellentétben a ZOU hibamodell nem túlságosan optimista (vagyis nem becsüli alul a modell bizonytalanságát) de nem is túl pesszimista (3.4. ábra). A jobb teljesítmény a hibamoddellek mögött álló statisztikai feltételezések igazolásánál is jelentkezik, a függetlennek és normálisnak feltételezett E hibakomponens a ZOU hibamodellben teljesíti leginkább ezeket a kritériumokat (3.5. ábra).

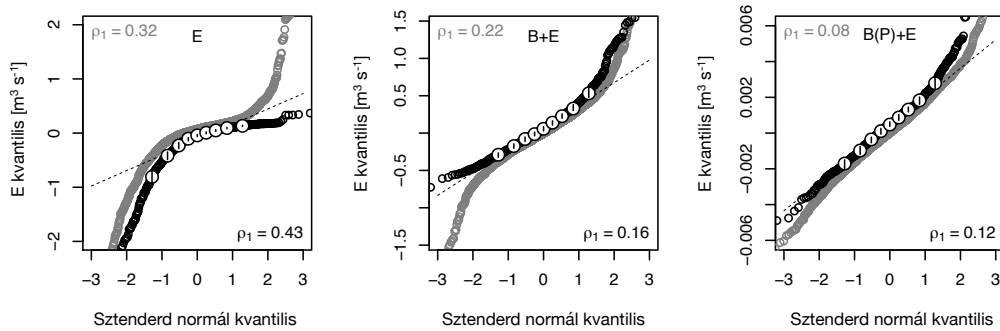
Megjegyzendő, hogy nincs abban konszenzus, hogy a bayesi szisztematikus [139] hiba-folyamatokra (B) alkalmazhatók-e hagyományos statisztikai próbák és más vizsgálatok, mint a QQ diagram. Peter Reichert (személyes közlés) szerint nem,

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése



3.4. ábra. Vízhozam idősorok a kalibrációs és az előrejelzési időszakban hagyományos hibamodellekkel és a zavart OU hibamodellel. A sötétszürke sáv a parametrikus bizonytalanságot jelzi és mindenhol jól közelíti az optimális megoldást. Hibamodellek: E - független, azonos eloszlású fehér zaj, B - autoregresszív hibafolyamat, B+E - állandó szisztematikus hiba és megfigyelési hiba együtt, B(P)+E - az itt ismertetett hibamodell. Az adatok a Mönchaltorfer Aa vízfolyásból származnak (Honti és mtsai., 2013).

3.4. Napi hidrológiai modell hibájának leírása zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamatokkal



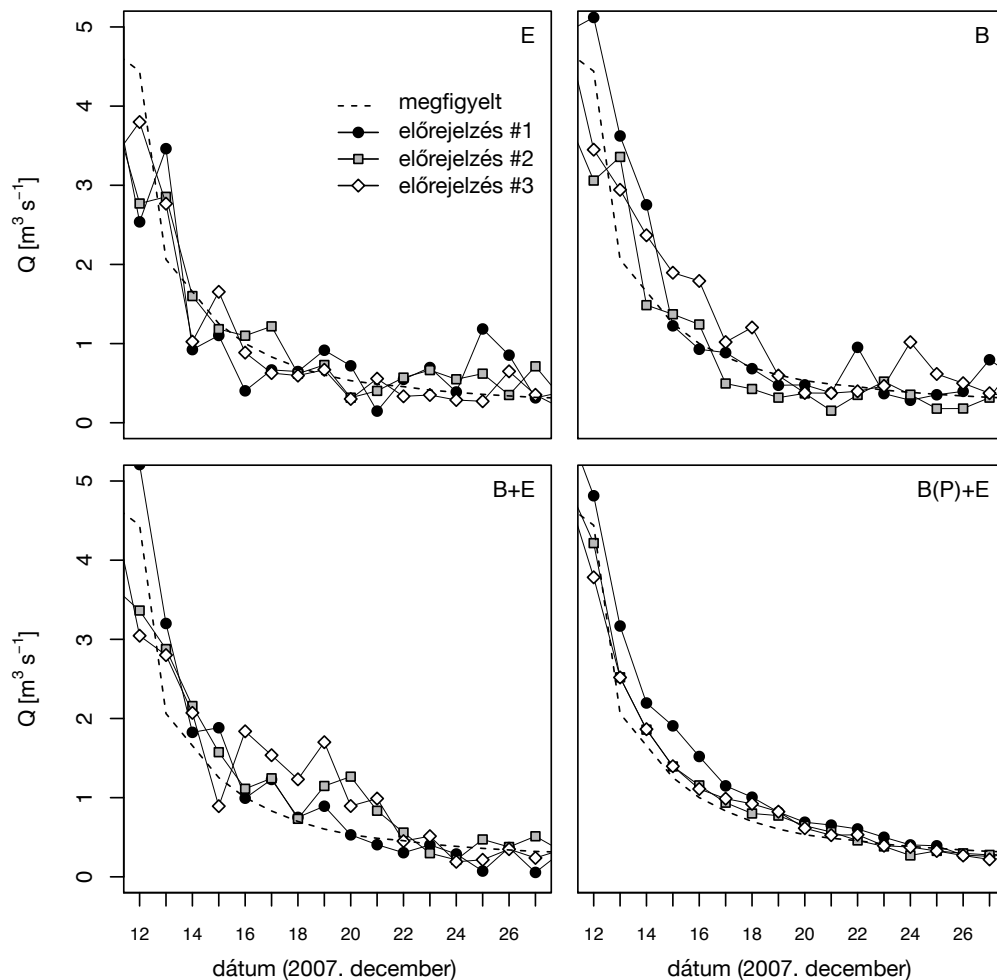
3.5. ábra. A független, normális eloszlásúnak feltételezett megfigyelési hiba (E) kvantilisei a sztenderd normál eloszlás kvantilisei ellenében. Az ilyen QQ diagramokon az egyenes vonalra eső pontok jelzik az illeszkedést az x tengelyen ábrázolt feltételezett eloszláshoz. ρ_1 : E egylépéses autokorrelációja, amit minden esetben 0-nak tételezünk fel. Hibamodellek: E - független, azonos eloszlású fehér zaj, B - autoregresszív hibafolyamat, B+E - állandó szisztematikus hiba és megfigyelési hiba együtt, B(P)+E - ZOU hibamodell. Fekete körök és feliratok: kalibráció, szürke körök és feliratok: validáció. Az adatok a Mönchaltorfer Aa vízfolyásból származnak (Honti és mtsai., 2013).

mert a B folyamatok bayesi értelmezésűek, így nem kell megfelelniük a klasszikus valószínűségi követelményeknek. Dmitri Kavetski (személyes közlés) szerint igen, mert az előrejelzési bizonytalanság helyes felmérése azon múlik, hogy a B folyamat modellje mennyire felel meg a hibamodellben kifejezett feltételeknek. Erre a bayesi statisztika nem ad iránymutatást, a klasszikus statisztika pedig elvileg nem érvényes, bár a likelihood kiszámításában felhasználjuk. Ugyanakkor a hibamodell feltételezéseinek utólagos ellenőrzése segíthet a legmegfelelőbb hibafolyamat kiválasztásában.

A ZOU folyamat további előnye, hogy az egyes, a valós vízhozamra vonatkozó előrejelzési trajektóriák ($Y_M + B$) lefutása megfelel a csapadék-lefolyás modellektől várt viselkedésnek. Statikus hibamodellekkel csak az előrejelzési trajektóriák sokasága rajzol ki árhullámképre részleteiben is emlékeztető alakzatokat, az egyes trajektóriák magukban még a recessziós, sőt az alaphozamú fázisokban is csúcsokkal tagoltak (3.6. ábra). [140]

A hibamodell megválasztása természetesen befolyásolja a kalibráció és a bizonytalanságvizsgálat eredményeit. A mindössze független, normális eloszlású megfigyelési hibát tartalmazó legegyszerűbb hibamodell a parametrikus bizonytalanság tekintetében túlzottan optimista, mivel azt feltételezi, hogy az egyes hibák pillanatnyi hatásúak, nincsenek időben elnyúló következményeik. A ka- [141]

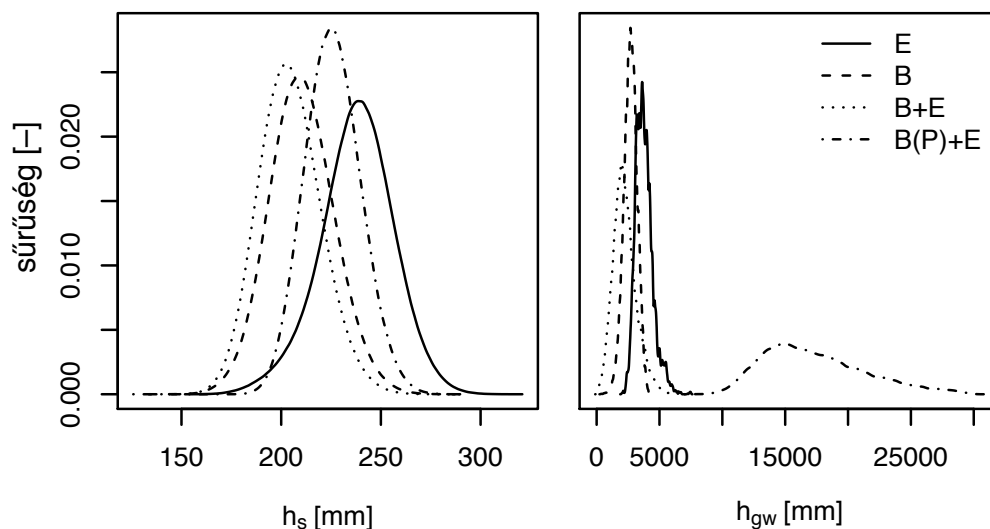
3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése



3.6. ábra. Néhány előrejelzési trajektória egy tetszőlegesen kiválasztott recessziós fázisban különböző hibamodellekkel. Hibamodellek: E - független, azonos eloszlású fehér zaj, B - autoregresszív hibafolyamat, B+E - állandó szisztematikus hiba és megfigyelési hiba együtt, B(P)+E - ZOU hibamodell. Az adatok a Mönchaltorfer Aa vízfolyásból származnak (Honti és mtsai., 2013).

3.4. Napi hidrológiai modell hibájának leírása zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamatokkal

libráció során tehát azok a paraméterkombinációk választódnak ki, melyek minél hamarabb eltűntetik a hibák következményeit. Ilyen paraméterkészlet csak az optimum közvetlen környezetében fordul elő, így a becsült parametrikus bizonytalanság szűk lesz. Ezzel szemben a különböző autoregresszív hibamodellek megengedőbbek a szisztematikus eltérésekkel, így több paraméterkombinációt is elfogadhatónak tartanak, vagyis a parametrikus bizonytalanságot szélesebbre (a valóshoz közelebre) becsülik. A hibamodellek által jelzett bizonytalanság valódisága a fentebb említett, vitatott legitimitású utólagos statisztikai tesztekkel vizsgálható számszerűen (pl.: Hány validációs mérési pont esett az előrejelzés bizonytalansági tartományába? A validációs pontok mennyire járták be a bizonytalansági tartományt? stb.). A hibamodellek feltételezései függenek a leginkább elkerülni kívánt hibatípusoktól, így az egyes autoregresszív hibamodellek sem ugyanazt az eredményt adják. Az eltérő paraméterkészletek miatt a kalibrált modell állapotváltozói is erősen függenek a felhasznált hibamodellektől (3.7. ábra), így eltérő peremfeltételek melletti előrejelzés esetén a rendszer viselkedése hibamodellenként jelentősen változhat.



3.7. ábra. Az átlagos talajnedvesség (h_s) és átlagos talajvíztározás (h_{gw}) gyakorisági eloszlása a kalibrációs időszakban különböző hibamodellekkel. Hibamodellek: E - független, azonos eloszlású fehér zaj, B - autoregresszív hibafolyamat, B+E - állandó szisztematikus hiba és megfigyelési hiba együtt, B(P)+E - ZOU hibamodel. Az adatok a Mönchaltorfer Aa vízfolyásból származnak (Honti és mtsai., 2013).

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése

Ahogy az a B_f és B_s hibafolyamat definíciójából látszott, a ZOU hibamodell tulajdonképpen egy sztochasztikus, lineáris lefolyásmodell a csapadékadatsor hibáira ültetve. A ZOU hibamodell felfogható a főleg szemléltetési célból használt *abc* lineáris hidrológiai modell (Fiering, 1967) implementációjának is. Ezt a modellt egyszerűsége, valamint az állapotváltozók és paraméterek könnyű értelmezhetősége miatt rendszerelemzési célból is gyakran használják (Kuczera, 1982; Vogel és Sankarasubramanian, 2003; Huard és Mailhot, 2006). A vízgyűjtő egyetlen tárolóból (S) áll. A P csapadék állandó, a paraméterek által meghatározott arányban oszlik el a beszivárgás ($a \cdot P$) és a párolgás ($b \cdot P$) között, a maradék pedig azonnal lefolyik ($(1 - a - b) \cdot P$). A c paraméter határozza meg az alaphozamot az S tározott mennyiség függvényében:

$$\frac{dS}{dt} = a \cdot P - c \cdot S \quad (3.37)$$

és így

$$Q = (1 - a - b) \cdot P + c \cdot S. \quad (3.38)$$

- [143] Ez a modellszerkezet egy az egyben megfeleltethető a ZOU hibamodellnek. Ha a csapadékadatok hibáját a P/P_M aránnyal jellemezzük, feltételezve, hogy a várható érték 1, a szórás pedig σ_{pm} , akkor κ_s , κ_f valamint β kifejezhető az *abc* modell paramétereivel a (3.28) egyenlet alapján:

$$\kappa_f = \sigma_{pm} \cdot (1 - a - b) \quad (3.39)$$

és

$$\kappa_s = \sigma_{pm} \cdot a \cdot c \quad (3.40)$$

és

$$\beta = -\log(1 - c) \quad (3.41)$$

- [144] A bemenő adatok hibáinak ezen recept szerinti kezelése egyéb modellekre is kiterjeszhető: az ismeretlen eredetű szerkezeti hibákat leíró *homoszcedasztikus* B folyamat és az alkalmazott determinisztikus modell linearizált változatára épülő, a bemenő adatok hibái által meghajtott sztochasztikus folyamat együtt alkalmasak a szisztematikus eltérések bayesi modellezésére.

- [145] A ZOU hibamodell nem minden csapadék-lefolyás modellezési problémára a legjobb hibamodell. A bemutatott példában a ZOU hibamodell a 43 km² vízgyűjtőterületű Mönchaltorfer Aa vízfolyás (Svájc) napi átlagos vízhozamain futott (Honti és mtsai., 2013). Ebben a 10 éves időtartamot lefedő adatsorban a vízgyűjtő csekély beépítettsége miatt az árhullámok recessziós fázisa lassan, több

3.5. Eloszlások előrejelzése szerkezeti és bemeneti hibák jelenlétében

napon keresztül cseng le, és az alaphozam sem teljesen stabil. *Del Giudice és mtsai.* (2013) kimutatták, hogy egy kisméretű, városi vízgyűjtő esetében a ZOU hibamodellt módosítani kellett. A 11 ha területű Sadová vízgyűjtőn (Csehország) 2 perces időbeli felbontású vízhozam adatokra alkalmazva késleltetést kellett beépíteni a hibamodellbe, mivel ilyen finom időbeli felbontásnál a vízhozamválasz nem a csapadékesemény időlépésében jelentkezik, így B_f és B_s varianciája a valós árhullámhoz képest túl korán nőtt meg. Az így módosított ZOU modell a nem transzformált vízhozam-idősorra már a 3 vizsgált hibamodell (E, B + E, módosított ZOU) közül a legjobban teljesített, azonban a B_s hibakomponens autokorreláltságát jelentősen felülbecsülte, ami az előrejelzési bizonytalanság túlzott kiszélesedéséhez vezetett. Ennek oka az volt, hogy a városi vízgyűjtő alaphozam-értékei időlépésről időlépésre nagyon stabilak és nagyon erősen autokorreláltak voltak a sűrű mintavételezés miatt. Emellett a gyors árhullám-levonulás miatt a vízhozamidősor nagy részét az alaphozam töltötte ki. Ez a két hatás együttesen a β paraméter jelentős csökkenését okozta, és ezáltal az egész aggregált hibafolyamat nagyon erősen autokorrelálttá vált. Mivel nem választottuk külön a ZOU hibamodellben a stacioner és az eseményfüggő autokorrelációt, így végeredményben a *Reichert és Schuwirth* (2012) által leírt B + E hibamodell és a log-sinh transzformáció (*Wang és mtsai.*, 2012) együttes alkalmazása az előrejelzési bizonytalanság jobb becslését biztosította.

A klasszikus E fehér zaj hibamodellhez képest a ZOU hibamodell, és általában [146] a szisztematikus hibákat statisztikailag helyesen leíró hibamodellek az idősor-előrejelzésekre becsült bizonytalanság növekedéséhez vezetnek, vagyis a statisztikai eszköztár fejlesztése rávilágított, hogy a klasszikus kalibrációs eljárás jelentősen alulbecsüli a modellezés bizonytalanságát (*Reichert és Schuwirth*, 2012; *Honti és mtsai.*, 2013; *Del Giudice és mtsai.*, 2013).

3.5. Eloszlások előrejelzése szerkezeti és bemeneti hibák jelenlétében

- *Eloszlások illesztésére szolgáló, saját fejlesztésű közelítő likelihood függvény és alkalmazása hosszútávú hidrológiai előrejelzésben (Honti és mtsai., 2014)*

A 3.4 fejezetben ismertetett ZOU hibamodell a modellezett idősor bizonytalanságának megfelelő feltárását, vagyis a mért és számított idősorok közötti eltérések statisztikailag minél pontosabb leírását célozta meg. A bemenő adatok bizonytalanságának figyelembevételére is azért volt szükség, mert gyakran a meghajtó adatsor hibái tehetők felelőssé az időbeli és amplitúdóbeli hibák többségéért. A különböző hibakomponensek szerepe és fontossága azonban függ a modellezés

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése

céljától, vagyis attól, hogy a modellt milyen felbontású idősorok, illetve milyen egyéb statisztikai mutatók kiszámítására akarjuk használni.

[148] A mért és számított idősorok minél jobb illeszkedését célzó kalibráció – a hibamodell fajtájától függetlenül – tökéletes modell és pontos megfigyelések esetén garantálná a teljes egyezést. Ekkor a megfigyelt és számított mennyiségek összes statisztikai jellemzője is megegyezne. A tökéletes modellek és a hibával terhelt megfigyelések világában azonban az optimális megoldás sosem fog egyezni a valós – a mérési pontatlanság miatt amúgy sem ismert – mennyiségekkel (3.1. ábra). A mérések és modell eredmények között megmaradó különbséget a sztochasztikus jellegű hibamodell írja le. A hibamodell, mint sztochasztikus tag hozzáadása a determinisztikus modell eredményeihez elkerülhetetlenül megnöveli az eredmények varianciáját, ezért a gyakorlatban a kalibrált determinisztikus modellek „vonakodnak” a megfigyelési adatsor legnagyobb és legkisebb pontjaira illeszkedni. A hibafolyamat hozzáadásával az eredmények extrém értékei majd úgyis kifelé tolnak, azaz az extrém pontokra való illeszkedés hibák jelenlétében statisztikai szempontból szücségtelen. Az idősorokhoz adott véletlenszerű hibák a variancia növekedésén keresztül megváltoztatják az eloszlásfüggvény alakját. Az átlag alatti kvantilisok csökkennek, az átlag feletti növekednek. A szimulált és a megfigyelt eloszlások tehát akkor egyeznek, ha a determinisztikus modell a megfigyelteől eltérő eloszlást generál.

[149] Ez problémát jelenthet azokban az esetekben, amikor a modell eredményeit nem idősoroként, hanem valamilyen aggregált formában tervezzük felhasználni. Ilyen, gyakran előforduló eset a teljes statisztikai eloszlás, vagy kiválasztott kvantilisok modellezése. Az eloszlás használatakor az időzítés nem játszik szerepet, így a modell ilyen típusú hiányosságai jelentéktelenné válnak. Az amplitúdó-hibák is csak akkor fontosak, ha összességében megváltoztatják az eloszlás alakját. Ezeket a szempontokat egy idősor-alapú likelihood függvény nem tudja figyelembe venni. A hosszú idősorokból számított kvantilisok klasszikus statisztikai becslési bizonytalansága még az extrém tartományokban is olyan kicsi, hogy a mért és számított kvantilisok közötti csekély eltérések is nulla közelébe rontják a számított likelihoodot. Más szóval nagy elemszám esetén a legkisebb eloszlásbeli hiba is valószínűtlenné teszi a modell alkalmazhatóságát. A gyakorlatban is használható eloszlás illesztéshez tehát szükség van egy olyan likelihood függvényre, amellyel az optimalizáció sikeresen végrehajtható, valamint a bizonytalanság tartománya a modell illeszkedési képességeinek megfelelően szabályozható.

Kvantilisok közelítő likelihood függvénye

[150] A megfigyelt kvantilisok halmazát \mathbf{q}^0 -val jelöljük. Az egyes α_i valószínűségekhez tartozó kvantilisok jele q_i^0 . A modellezett kvantilisokat ($\mathbf{q}(\theta)$), melyek függnek a modell paramétereitől (θ), a modellezett idősorokból számítjuk ki. $F(\mathbf{y} \mid \theta)$

3.5. Eloszlások előrejelzése szerkezeti és bemeneti hibák jelenlétében

a modellezett idősor eloszlása a θ paraméterek függvényében, míg $f(\mathbf{y} | \theta)$ a vonatkozó sűrűségfüggvény.

Feltételezzük, hogy a kvantilisok egy \mathbf{E} hibával terheltek, így [151]

$$\mathbf{q}^o = \mathbf{q}(\theta) + \mathbf{E} \quad (3.42)$$

Stuart és Ord (1994) kimutatta [§10.10], hogy egy eloszlásból vett független [152] mintákra \mathbf{E} közelítőleg normális eloszlású nulla várható értékkel, \mathbf{E} varianciája pedig α -tól, valamint $f(\mathbf{y} | \theta)$ -tól függ:

$$\sigma_\alpha^2 = \frac{1}{n} \alpha (1 - \alpha) \frac{1}{f(q_\alpha(\theta))^2} \quad (3.43)$$

ahol n a felhasznált \mathbf{y} idősor hossza. Ezen variancia-becslés hibája $O(\frac{1}{n})$ rendű.

Ez a tétel független mintákra vonatkozik, ezért a (3.43) egyenlet autokorrelált [153] minta esetén alulbecsüli σ_α^2 értékét. A kvantilisok likelihoodjának kiszámításához még a további feltételezések szükségesek:

1. \mathbf{y} korrelációs ideje nagyságrendekkel rövidebb, mint a megfigyelési időszak hossza (pl. \mathbf{y} néhány napig autokorrelált, míg a megfigyelési időszak több év hosszú), így $\mathbf{q}(\theta)$ elemei független mintából számított kvantilisoknak tekinthetők.
2. n helyett bevezetjük az n^* effektív mintaszámot, ahol $1 \leq n^* \leq n$. Az új paraméter és n viszonya jellemzi a mért és számított kvantilisok közötti egyezés minőségét. Ha $n = n^*$, akkor az illesztett eloszlásfüggvény bizonytalansága megegyezik a mért eloszlásfüggvény mintavételi pontatlanságával, tehát a modellezés által hozzáadott bizonytalanság jelentéktelen. Ha $n^* \ll n$, akkor \mathbf{E} -t a modellhez köthető bizonytalanság uralja.

E feltételezésekkel a likelihood függvény a következőképpen alakul: [154]

$$p(\mathbf{q}_\alpha^o | \theta) = \mathcal{N} \left[\mu = \mathbf{q}_\alpha(\theta), \sigma_\alpha^2 = \frac{1}{n^*} \alpha (1 - \alpha) \frac{1}{f(q_\alpha(\theta))^2} \right] \quad (3.44)$$

$f(q_\alpha(\theta))$ az $\mathbf{y}(\theta)$ modellezett idősorból KDE (*kernel density estimator*) módszerrel számítható. A kernel eloszlása normális, szórása:

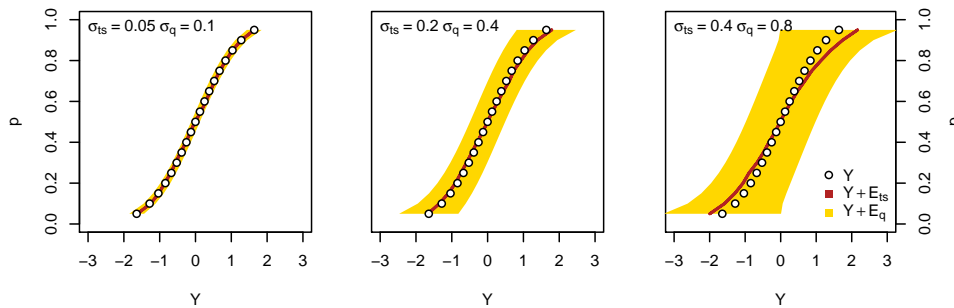
$$\sigma_k = 0.79 n^{-0.2} (q_{0.25}(\mathbf{y} | \theta) - q_{0.75}(\mathbf{y} | \theta)) . \quad (3.45)$$

Előrejelzéskor a hibával terhelt kvantilisok több lépésben állíthatók elő. [155] Először a determinisztikus modellel a bemenő adatok és a paraméterek

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése

segítségével előállítjuk $y(\theta)$ -t, majd abból $q(\theta)$ -t. A második lépésben a hibaeloszlásból veszünk mintát, amihez szükséges $y(\theta)$ sűrűségfüggvényének kiszámítása is. Végül a (3.44) valószínűségi egyenlettel kisorsoljuk a hibával terhelt kvantilis értéket.

- [156] Ez a likelihood függvény lehetővé teszi a kvantilis hibáinak kifejezését. Míg az idősor-hiba hozzáadása csak az eloszlás alakját nyújtja meg, a kvantilis-likelihood közelítő függvénye a bizonytalanság mértékét változtatja (3.8).



3.8. ábra. A kvantilis- és az idősor-bizonytalanság különbségének szemléltetése (Honti és mtsai., 2014). σ_{ts} az idősor-hiba szórása, σ_q pedig a mediánra vonatkozó kvantilis hibáé. Az eredeti szintetikus Y idősor normális eloszlású ($n = 2000$).

Vízhozam-eloszlások előrejelzése

- [157] A hidrológiai előrejelzés fontos területe az éghajlatváltozás nyomán megváltozó vízhozamok vizsgálata különböző éghajlati forgatókönyvek mellett. A jelenleg érvényes konszenzus alapján ezen távoli előrejelzések legfontosabb bizonytalansági tényezője maga az éghajlat, vagyis annak előrejelzési bizonytalansága (Wilby és Harris, 2006; Graham és mtsai., 2007; Prudhomme és Davies, 2009; Kay és mtsai., 2009; Kingston és Taylor, 2010; Arnell, 2011; Hughes és mtsai., 2011; Gosling és mtsai., 2011). Csak kevesen kérdőjelezték meg az éghajlati adatok bizonytalanságának domináns szerepét (Ludwig és mtsai., 2009; Zambrano-Bigiarini, 2010; Abbaspour és mtsai., 2009).

- [158] Az éghajlati előrejelzések valóban bizonytalanok, nem utolsósorban azért, mert a jövőre vonatkozó üvegházhatású gáz kibocsátás is megjósolhatatlan. Az előrejelzések így az Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC) által szabványosított néhány kibocsátási forgatókönyvön alapulnak. A kibocsátásokat és a sugárzási kényszereket globális éghajlati modellek (GCM, Global Climate Model) alakítják valódi időjárassá. A mai GCM-ek bevallottan számos gond-

3.5. Eloszlások előrejelzése szerkezeti és bemeneti hibák jelenlétében

dal küzdenek a kontinentális léptéknél kisebb jelenségek szimulációjában (Xu, 1999; Blöschl és Montanari, 2010; Ehret és mtsai., 2012), sőt egyes szerzők szerint teljesítménymutatóik alapján egyáltalán nem is jók semmire (Koutsoyiannis és mtsai., 2008; Koutsoyiannis, 2010). Az ismert nehézségek miatt így a jövő éghajlatára vonatkozó szimulációk eredményeit a *forecast* (előrejelzés) szó helyett a *projection* (~előrevetítés) szóval illetik (IPCC, 1995). Az éghajlatváltozás hidrológiai hatásainak vizsgálata során a bizonytalan jövőbeli éghajlaton kialakuló vízhozamokat és bizonytalanságukat kell előrejelezni. Az előrejelzés során legtöbbször nem idősorokat, hanem eloszlásokat vizsgálunk, mivel a hosszútávú előrejelzésben az időzítés kevésbé játszik szerepet.

Az éghajlatváltozás hatásainak vizsgálata közben a csapadék-lefolyás modellek éghajlatváltozástól független hibáit is figyelembe kell venni. A 3.2. fejezet bemutatta, hogy idősorok modellezésénél a bemeneti hibák kiemelkedően fontosak. Ez eloszlások esetében sokkal kevésbé számít. Az egy pontban végzett csapadékmennyiség-mérés pontossága növekszik az aggregációs időszak hosszával (Villarini és mtsai., 2008), nem elhanyagolható mértékben éppen azért, mert hosszú időszakot tekintve az időzítési (vagyis amikor a mérőponton nem akkor kezd esni, amikor a vízgyűjtőn) és reprezentativitási (amikor egy vihar érinti a vízgyűjtőt, de a mérőt nem, míg egy másik vihar esetleg az ellenkezőjét teszi) hibák jelentéktelenné válnak. Így kijelenthető, hogy éves léptéken a vízgyűjtő szempontjából a pillanatnyi intenzitás szempontjából mégoly „pontatlan” csapadékmérő is viszonylag jól reprezentálhatja a csapadék éves eloszlását. A bemeneti hibák hatását tehát elhanyagolhatjuk. [159]

A távoli jövőre történő előrejelzéshez** általában statisztikai modellek generált szintetikus csapadék-idősorokat használnak. Az időjárásgenerátor-hidrológiai modell páros alkalmazhatóságának feltétele az, hogy a jelen klimatikus viszonyaira generált csapadékból szimulált vízhozam statisztikai tulajdonságai egyezzenek meg a megfigyelttel. A gyakorlatban ezt az eloszlás egyezésével azonosítják.†† [160]

Az idősorra való illesztés nélküli kalibráció a hidrológiában viszonylag gyakori. Montanari és Toth (2007) a mért és a modellezett vízhozam-idősor spektrális tulajdonságainak egyezését használták célfüggvényként. Blazkova és Beven (2009) GLUE-alapú bizonytalanság-vizsgálatában kiválasztott vízhozam-kvantilisek megfelelő egyezése is szerepelt az elfogadhatóság kritériumaként. Westerberg és mtsai. (2011) lefolyásmodelljüket a vízhozam-tartóssági görbe alapján illesztették, informális, háromszög alakú likelihood függvényvel. A kvantilisek [161]

**Elvileg az előrevetítés szó jobban illene ide, de a modellezésben általában az előrejelzést használják minden olyan számításra, amikor a modell eredményeit nem hasonlítjuk mérési adatokhoz, és beállításait sem módosítjuk.

††A statisztikai csapadék-generálás miatt az idősorok tényleges egyezésére nincs esély, a generált csapadékok csak statisztikai tulajdonságaikban egyeznek egymással és a valós csapadékkal.

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése

közelítő likelihoodjával (3.5. fejezet) ugyanezt a problémát formális statisztikai eszközökkel is megoldhatjuk.

[162] Az éghajlatváltozás hatásainak modellezésénél determinisztikus modellként ismét a *Kuczera és mtsai.* (2006) által kifejlesztett majd *Honti és mtsai.* (2013) által módosított egyszerű hidrológiai modellt, a logSPM-et használjuk. A modellt két különböző alapelv szerint, összesen háromféle módon kalibráljuk. A TS (*time-series*) rövidítéssel jelzett variációban idősor-kalibrációt hajtunk végre, a ZOU hibamodell alkalmazásával. A K rövidítéssel jelzett változatokban a 3.5. fejezet hibamodelljét alkalmazzuk. A K1 (kvantilis 1) variációban az modellt a megfigyelt időjárással meghajtva illesztjük a megfigyelt vízhozam-eloszlásra. A K2 (kvantilis 2) verzióban a jelen éghajlatra generált szintetikus csapadék-adatsor segítségével illesztjük a modellt a megfigyelt vízhozam-eloszlásra, vagyis itt a meghajtó adatok és a kimenet egymástól függetlenek.

[163] A jövőre vonatkozó előrejelzés a következő stációkból (St) épül fel:

St 1: Előrejelzés a megfigyelt időjárási adatokon (1981-2010).

St 2: Előrejelzés az 1981-2010 közötti éghajlat alapján generált szintetikus időjárási adatokon.

St 3: Előrejelzés a jövő stacionárius éghajlatát tükröző, szintetikus időjárási adatokon (2035-2064).

[164] Az 1. és 2. lépések eredményeinek összehasonlításával igazoljuk az eljárást. Ha az ezekben kapott eloszlások elfogadható mértékben egyeznek a megfigyelt vízhozam-eloszlással, akkor az időjárás-generátor-hidrológiai modell páros kielégtően működik, a végeredmény közvetlenül a 3. lépés kimenete (maga a vízhozam-eloszlás). Ha az egyezés nem megfelelő, akkor az éghajlatváltozás relatív hatása a 2. és 3. lépés eredményei közötti különbség (vagyis a vízhozam-eloszlás egyes valószínűségekhez tartozó százalékos változása). Ez utóbbi esetben a jövő vízhozam-eloszlásához ezt a relatív változást rá kell vetíteni a mért vízhozam-eloszlásra, azonban ekkor a modell-lánc nyilvánvaló hiányosságai miatt a végeredmény megbízhatósága kérdéses.

[165] A K1 és K2 változatokban az idősor illeszkedése nem szempont, így nem feltétlenül szükséges olyan determinisztikus modellt használni, amely képes az idősor megfelelő szimulációjára. A közös determinisztikus modell használata azonban egyrészt segít a kalibrációs eljárások összehasonlításában, másrészt az alkalmazott csapadék-lefolyás modell olyan egyszerű (összesen 6 paramétere van), hogy nehezen lehetne jelentősen kisebb, közvetlenül a vízhozam-kvantiliseket szimuláló modellt találni.

[166]

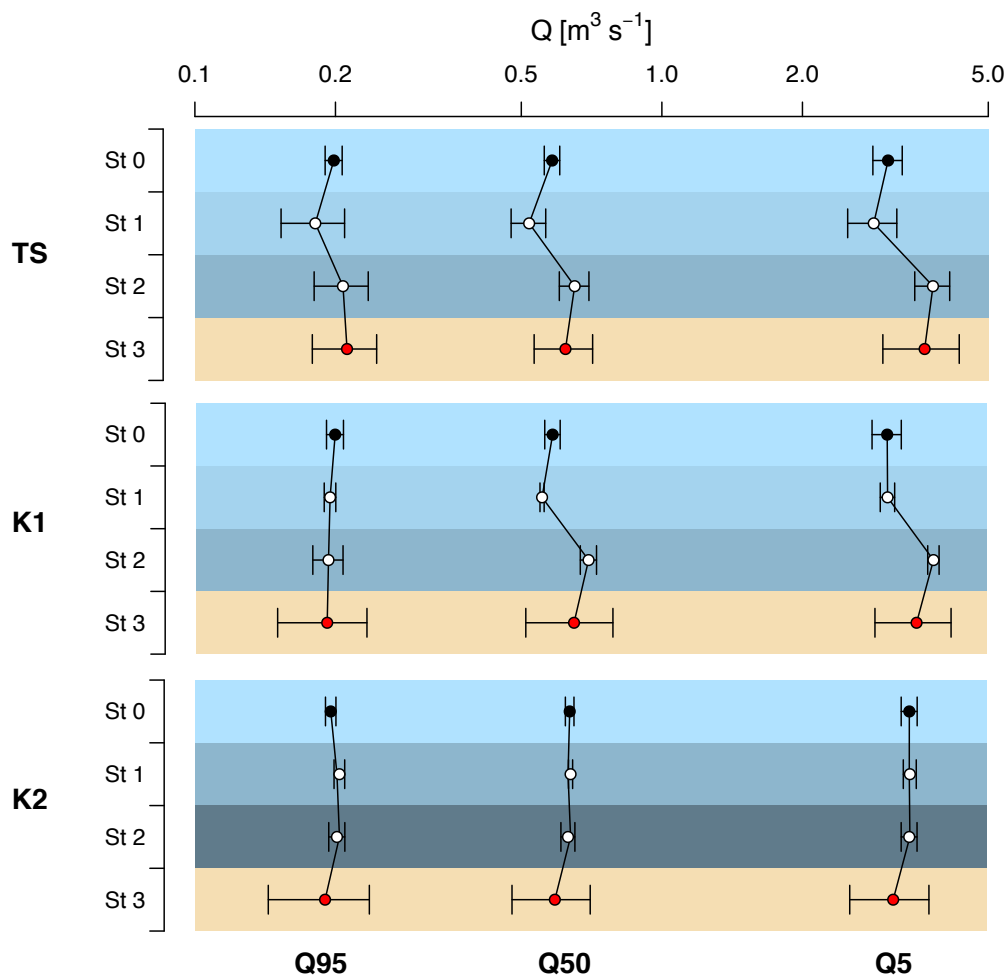
3.5. Eloszlások előrejelzése szerkezeti és bemeneti hibák jelenlétében

A kalibráció és bizonytalanság-vizsgálat után az előrejelzés a számítási módszerek ismeretében elvárható eredményeket hozta (3.9). A TS változat jelentős eltolódást és bizonytalanságot mutatott már az St 1 lépésben is, vagyis a kalibrált modell még a ténylegesen megfigyelt csapadék-adatok alapján sem tudta jól reprodukálni az eloszlást. A további lépésekben a hibák nem múltak el, ami a végén ahhoz vezetett, hogy a számított éghajlat-változási hatás a hibákhoz képest elhanyagolhatóan mutatkozott. Az eloszlások illesztésén alapuló K1 és K2 változatok jóval kisebb bizonytalanságot mutattak az St 1 és St 2 lépésekben, tehát a validációjuk sikeresebb volt. A K1 változatban az St 1 lépés eredményei még jól egyeztek a megfigyelésekkel, a generált csapadékok bevonása azonban már – a TS változathoz hasonlóan – a modellezett kvantilisok eltolódását okozta. Ez azt jelzi, hogy az időjárás-generátor hibái számottevően befolyásolták a hidrológiai modell eredményeit. A K2 változat ezt a problémát küszöbölte ki azáltal, hogy közvetlenül a generált csapadékokra kalibráltuk, ami a hidrológiai modell paraméterein keresztül kompenzálta a csapadék-generátor hibáit is.

Az éghajlatváltozás hatása, vagyis az St 2 és St 3 lépések közötti különbség, [167] minden kalibrációs módszerben hasonlóan adódott, a fő különbség a változás mellett megjelenő bizonytalanság mértékében jelentkezett. A várható értékek alapján az adott vízgyűjtőn minden kvantilis enyhén vagy elhanyagolhatóan csökkenni fog a jövőben. A klimatikus eredetű bizonytalanság minden esetben nagy volt, de ez a TS módszerben nagyjából megegyezett a hidrológiai és időjárás-generátor-eredetű bizonytalansággal, míg a K változatokban ez utóbbi jóval kisebb volt.

Érdekességként megemlíthető, hogy az alkalmazott hidrológiai modell annyira [168] kötött szerkezetű, hogy a K1 módszerrel kalibrált modell a megfigyelt csapadékadatokon futtatva elég jó illeszkedést állított elő a megfigyelt vízhozam-idősorra is. Így bár az árhullámok időzítése egyáltalán nem szerepelt a kalibráció szempontjai között, és a modell szabadon előállíthatott volna a megfigyeltre egyáltalán nem hasonlító idősorokat, a determinisztikus modell optimális beállításai mégis hasonlóak voltak a két kalibrációs változatban.

3. fejezet: Hibával terhelt bemenő adatok és modellalgoritmusok kezelése



3.9. ábra. Vízhhozamkvantilisok (balról jobbra: 95%, 50%, 5% tartósság) előrejelzett eloszlásai a különböző előrejelzési lépésekben a TS, K1 és K2 kalibrációs eljárásokban (Honti és mtsai., 2014). St 0: a megfigyelt vízhozam-adatsorból számolt kvantilis. A K2 változatban St 1 megegyezik St 2-vel. Ideális esetben az St 0-2 lépésekben számolt kvantilisok pontosan egymás alatt vannak és bizonytalanságuk csekély.

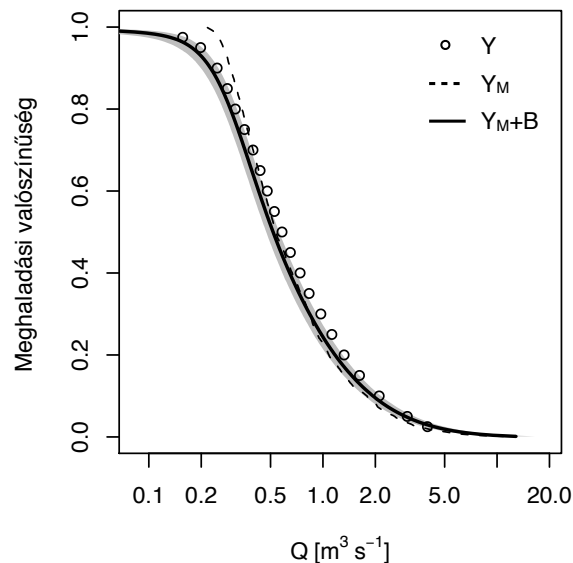
4 Strukturális hiányosságok kezelése a modellen belül időben változó paraméterekkel

■ *Az utólag hozzáadott hibafolyamat hátrányai, valamint az állandó paraméterek és a strukturális hiányosságok konfliktusa az irodalom és saját esettanulmányok alapján* ■ *Fejlesztéseim az időben változó paraméterek területén (Honti és mtsai., 2016b; Istvánovics és Honti, 2017)*

[169] A modellek szerkezeti- vagy input-eredetű hibáinak kezelésére a 3. fejezet mutatott be módszereket az egyszerű bayesi leírástól a modell linearizált változatát tartalmazó összetett hibamodellig. Ezen módszerek lényege, hogy a hibát a 3.1. ábra szellemében a modell kimenetéhez hozzáadandó sztochasztikus tagként tekintik. Az így kalibrált modell tehát akkor jó, ha a valóság (Y) a modell kimenet és a szisztematikus hibatag összegével ($Y_M + B$) egyezik. Ebből következik, hogy – a szisztematikus hibák elkerülhetetlensége esetén – a modell optimális kimenete nem egyezhet meg a valósággal (4.1. ábra). Ez viszont kompromittálja a modellünknek tulajdonított fizikai vagy más jelentést. Hiába szerkesztjük meg modellünket pl. az anyagmegmaradás elvének tiszteletben tartásával, ha a végén hozzáadandó sztochasztikus hiba-tag ezt felülírja. Ezen felül az esetleg közvetlenül mérhető paramétereknek sem vesszük nagy hasznát, hiszen a modellnek nem a tényleges viselkedést, hanem azt az állapotot kell előállítania, amely a hibamodell által megjeleníthető folyamat hozzáadása után válik egyenlővé a valósággal. Ezek a súlyos ellentmondások motiválják az időben változó paraméterek alkalmazását, melyek a modell szerkezetén belül, utólagosan hozzáadandó szisztematikus hibatag nélkül kezelik az elkerülhetetlen strukturális és input-eredetű hibákat.

[170]

4. fejezet: Időben változó paraméterek

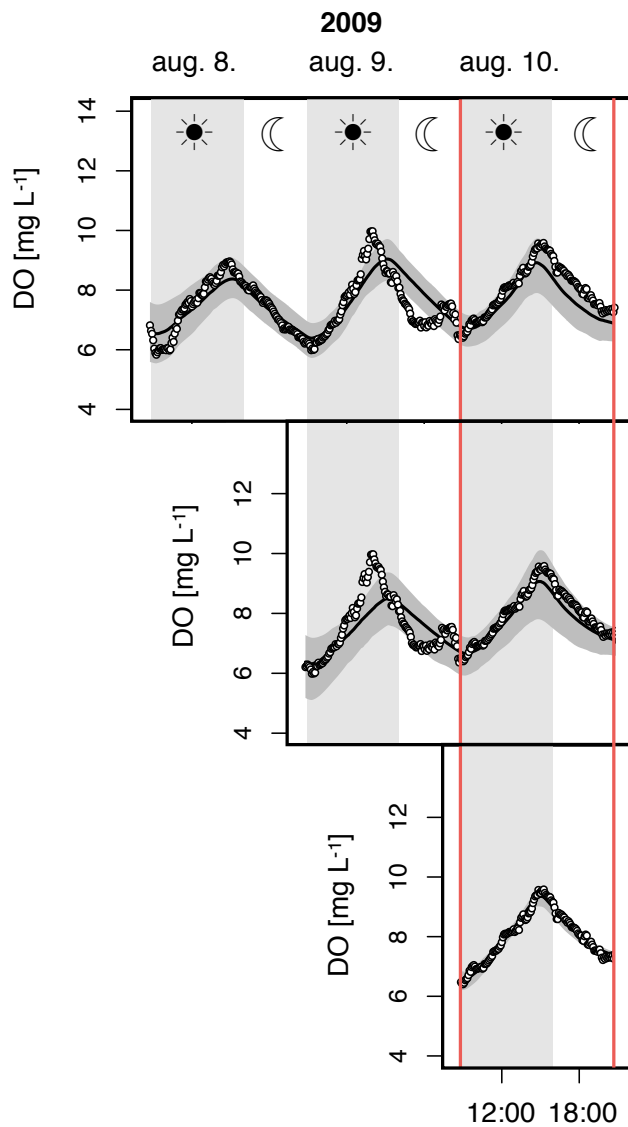


4.1. ábra. Vízhozameloszlások hozzáadandó szisztematikus hibatag esetén (*Honti és mtsai.*, 2013). A mérések (Y) és a hibataggal bővített modell-kimenet ($Y_M + B$) eloszlása egyezik, tehát az idősor-alapon elvégzett kalibráció sikeres volt. Ugyanakkor a modell (Y_M) és a mérések közötti eltérés az extrém tartományokban jelentős (a vízhozam-tengely beosztása logaritmikus).

A modellek paramétereit olyan részben ismert, vagy ismeretlen rendszer tulajdonságokat jelölnék, melyek értéke időben állandó. A modellek lényegét adó egyszerűsítések miatt az állandóság nem mindig teljesül. A kalibráció során kiderülhet, hogy bizonyos paraméter-értékek jól működnek a kalibrációs adathalmaz egyes részein, másokon viszont egyáltalán nem (4.2. ábra). A hidrológiában az egyszerűbb csapadék-lefolyás modelleknél ez gyakran előfordul, ezért lehet pl. a konstans lefolyási tényezőt feltételező modelleket egy-egy vihar-árhullám párosra jól kalibrálni. Hosszabb időszakot felölelő megfigyeléseknél az ilyen drasztikus egyszerűsítés már nem működik: a talajnedvesség-viszonyok és a vegetációs állapot megváltozása fokozatosan változtatják a lefolyási tényezőt (*Merz és mtsai.*, 2006), vagyis a modell állandó lefolyási tényezővel nem fog végig jól működni. A kalibráció ráadásul megpróbál statisztikailag észszerű kompromisszumot kötni, így a jó illeszkedésű szakaszok rovására próbálja a rosszabbakat javítani, végeredményként sehol sem hagyva tökéletes illeszkedést.

Az állandó lefolyási tényező csapadék-lefolyás modell problémája nyilvánvalóan az, hogy a modell túlzottan egyszerűsít, a lefolyási tényező valójában változik, tehát valójában nem lehetne modell-paraméter. A megoldás [171]

4. fejezet: Időben változó paraméterek



4.2. ábra. Oldott-oxigén modell illeszkedése 1-3 napos kalibrációs időszakokkal (Balaton, *Honti és mtsai.* (2016b) nyomán). Körök: mért adatok, fekete vonal: legjobb illeszkedés, sötétszürke sáv: 95%-os bizonytalansági tartomány. A világosszürke sávok a nappalokat jelzik. Az augusztus 10-ei napra az illeszkedés jelentősen javul, ha a kalibrációba nem vesszük be a megelőző napokat.

4. fejezet: Időben változó paraméterek

logikus módja a modell bonyolítása, vagyis a lefolyási hányadot ki kell venni a paraméterek közül és a körülmények függvényévé kell tenni, ami természetesen új paraméter (és esetleg állapotváltozó) bevonását teszi szükségessé.* Hasonló „túlegyszerűsítés” mindenféle környezeti modellben előfordul, de a hatás gyakran nem vezethető vissza egy-egy paraméterre, például a paraméterek közötti kölcsönhatások miatt. Ilyenkor a modell-szerkezet fejlesztése nehéz, hiszen nem tudjuk, hogy melyik részt kellene megjavítanunk. Még ha tudjuk is, hogy a modell mely részei szorulnak fejlesztésre, sajnálatos módon a modell bonyolítása gyakran csak az illeszkedési problémáknak csak csekély hányadát oldja meg (*Reichert és Mieleitner, 2009*).

Ez a helyzet kezelhető, ha elvetjük a paraméterek szokásos definícióját, vagyis [172] a paraméterek továbbra is rendszer-tulajdonságokat jelölnek, de már nem kell időben állandónak lenniük. Ez a beismerés tulajdonképpen a szerkezeti bizonytalanság átkonvertálása paraméter-bizonytalansággá (*Reichert és Mieleitner, 2009*). Egyszerűbb esetben a kalibrációt (vagyis a paraméterek kikövetkeztetését a megfigyelési adatokból) rövidebb időszakokra vagy egyes eseményekre végezzük, ezeken belül pedig a paramétereket állandónak tételezzük fel. Az időszakok lehatárolása történhet hagyományos esemény-definíciók alapján (pl. csapadék-lefolyás modellek esetén egy-egy vihar-árhullám páros alkot egy eseményt, az esemény elejét a csapadék kezdete jelzi, az esemény végét a vízhozam visszatérése az alaphozam környékére), szezonálisan (pl. külön kalibráció a nedves és száraz évszakokra (*Yang és mtsai., 2007*)), a rendszer belső állapota alapján (*Romanowicz és mtsai., 2006*), vagy a külső behatások függvényében (*Merz és mtsai., 2011*). A lényeg egyrészt az, hogy a kalibrálási egység elég rövid legyen ahhoz, hogy a paraméterek ezalatt ne változzanak meg jelentősen. Másrészt viszont túl rövid kalibrálási egységbe nem fér bele elég információ a rendszer működéséről, ekkor a paraméterek nem lesznek felismerhetők. A részletekben történő kalibráció nem támaszt különösebb matematikai vagy számítási problémát, ezért szükség esetén gyakran alkalmazzák (*Romanowicz és mtsai., 2006; Yang és mtsai., 2007; Van de Bogert és mtsai., 2007; Merz és mtsai., 2011*).

A kalibrációs adathalmaz darabolásának alternatívája az, hogy a modellpa- [173] raméterek változását időben folytonosnak tételezzük fel. *Reichert és Mieleitner (2009)* bemutatta, hogy hogyan kalibrálható egy csapadék-lefolyás modell[†], ha egy-egy paramétere folytonos sztochasztikus folyamatként[‡] változik. A vizsgálat célja az volt, hogy azonosítsák azt a paramétert, melynek időbeli változtatása a legjobban javítja a modell illeszkedését a mért adatokra. Már egyetlen folytonosan

*Pl. a már ismertett logSPM modell a *saturated path* családba tartozik, a lefolyási tényezőt az átlagos talajnedvesség nemlineáris függvényeként számolja. Ez az eredeti, egy lefolyási tényező helyett 2 paramétert jelent (*Kuczera és mtsai., 2006*).

[†]Már megint a logSPM!

[‡]Már megint az Ornstein-Uhlenbeck folyamat!

4. fejezet: Időben változó paraméterek

változó paraméter bevonása is rendkívül bonyolulttá tette a likelihood számítást (Reichert és Mieleitner, 2009). Ironikus módon a kiugróan legnagyobb illeszkedésbeli javulást a csapadékmérések hibáit korrigálni hivatott szorzótényező (*rainfall multiplier*) okozta (Reichert és Mieleitner, 2009). Ez azt jelenti, hogy a modell szerkezeti hiányosságai szinte maradéktalanul kompenzálhatóak voltak az input változtatásával. Ez ugyanaz a megállapítás, amire eltérő módszerekkel Kirchner (2009) és a 3.2. fejezet jutott. A többi modellparaméter egyenkénti változtatgatása nem vezetett jelentős mértékű javuláshoz (Reichert és Mieleitner, 2009), tehát a számítási igény növekedése és a likelihood algoritmus bonyolultsága nem hozta a várt eredményt.

[174] Az irodalom tükrében tehát a kalibrációs adatkészlet feldarabolásával kapott, időben diszkrét módon változó paraméterek tűnnek technikailag megvalósítható megoldásnak. Az esemény-alapon, vagy csak általánosan darabokban végrehajtott kalibráció hátránya, hogy az így kapott paraméter-készletek között nem szükségszerűen van összefüggés. Ha a modell paraméterei gyengén, vagy egyáltalán nem felismerhetők – ami tipikus a környezeti modellezésben – akkor a részletekben végrehajtott kalibráció után az egyes paraméterek időbeli változása gyakran több nagyságrenden átívelő, teljesen véletlenszerű ingadozás lehet. Ilyen amplitúdójú és sebességű változást nehéz valósnak tekinteni, hiszen modell-paramétereink a modellezett rendszer valamilyen valós vagy absztrakt tulajdonságát hivatottak jelölni, azok meg ritkán produkálnak ekkora változékonyságot[§].

[175] Ha a technikai nehézségek ellenére mégis időben folytonosan változó paramétereket alkalmazunk, akkor az időbeli változást leíró statisztikai folyamat biztosítja a paraméterek értékeinek időbeli konzisztenciáját. Reichert és Mieleitner (2009) példájában a paraméterek Ornstein-Uhlenbeck folyamat alapján változhatnak, tehát az átlag körüli stabilitás és az autokorreláció biztosított. A legjobb mégis az lenne, ha a kétféle megközelítést ötvözni lehetne, vagyis könnyen és gyorsan lehetne úgy részletekben kalibrálni, hogy a paraméter-értékek időbeli változása hihető mintázatot mutasson.

4.1. Bayesi tanulás a tavi oxigénforgalom modellezésében

■ *Fejlesztéseim az időben változó paraméterek területén (Honti és mtsai., 2016b; Istvánovics és Honti, 2017)*

[§]Nem is beszélve az előrejelzéskor megjelenő hatalmas bizonytalanságról.

4.1. Bayesi tanulás a tavi oxigénforgalom modellezésében

Az időben változó paraméterek folytonosságának biztosítása

Az 1.2. fejezetben már futólag megismert oxigénforgalmi modellezés a strukturális hiányosságok állatorvosi lovának is tekinthető. A tavi ökoszisztéma oxigénforgalmát olyan modellekkel próbáljuk leírni, amelyek az ökoszisztéma belső mechanizmusait teljesen figyelmen kívül hagyják[¶]. Az alkalmazott szerkezetek végletes egyszerűsítéseket tartalmaznak, ezért az ökoszisztéma változásának jellemző időléptékén – azaz néhány napon túl – az utólagosan hozzáadott szisztematikus hibafolyamat nem opció: a hiba nagysága többnyire meghaladná a modell kimenetét. [176]

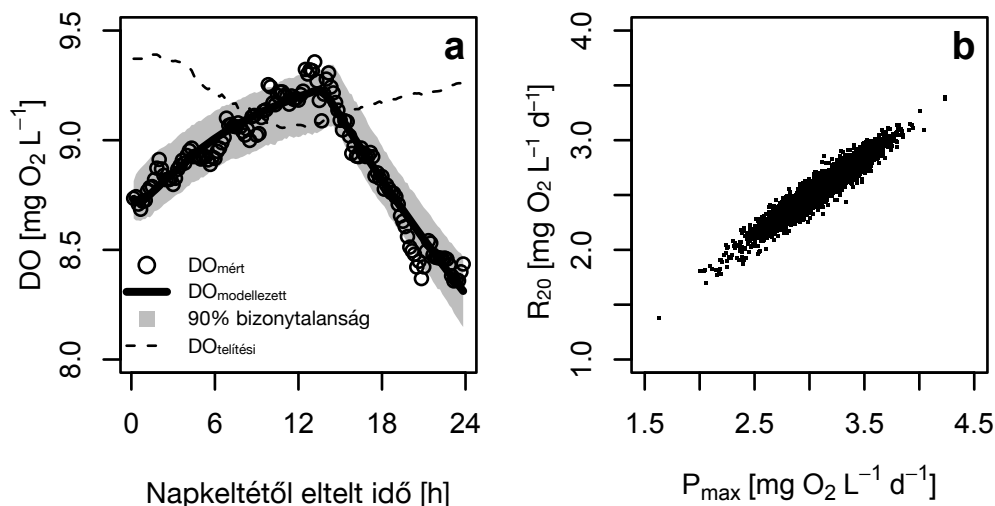
A tipikus, a rendszert csak a levegő felé nyitottnak képzelő, helyi^{||} oxigénforgalmi modellben az egész ökoszisztémára vonatkozó, hőmérséklet-normalizált légzési ráta (R_{20}), vagy a teljes autotróf közösség maximális elsődleges termelése (P_{\max}) paraméterek (*Hanson és mtsai.*, 2008; *Staeher és mtsai.*, 2010), miközben ezek nyilvánvalóan nem lehetnek időben állandó rendszerjellemzők, mivel függenek a környezeti körülményektől, az ökoszisztéma szerkezetétől, a különböző biomassa-frakciók nagyságától, stb. A szokásos eljárás éppen ezért a modell 1-3 nap hosszúságú ablakokra történő kalibrációja, mellyel a paraméterek aktuális (1-3 napi) értékei megkaphatók. Ez a kalibráció egyértelmű, a paraméterek felismerhetők, hiszen a rendszernek az előre kiválasztott empirikus gázcsere-függvényre nincs ráhatása és emiatt nincs fölös szabadsági foka: a gázcsere kivonása után kapott éjszakai oxigén-változást a légzés határozza meg, a nappalit pedig a légzés és az elsődleges termelés összege. Az 1.2. fejezetben azonban láttuk, hogy a rendszer elveszti jól-definiáltságát, ha a gázcsere valós bizonytalanságát figyelembe vesszük, vagyis nemcsak a légzést és a termelést kalibráljuk. Ekkor egy napi mérésorozatot számtalan gázcsere–légzés–elsődleges termelés kombinációval meg tudunk magyarázni (4.3. ábra b). [177]

Felismerhetetlen paraméterekkel már a napról napra történő kalibráció során hatalmas kilengéseket kapunk az egyes paraméterek értékeiben. *Solomon és mtsai.* (2013) munkájában például a légzés a szomszédos napok között rendre többszörös változásokat mutatott nagyjából állandó hőmérsékleten. Bár az ökoszisztéma-tulajdonságok változására számítanunk kell, ilyen fokú instabilitást egyértelműen a felismerhetetlenség okozta műterméknek tarthatunk. A nagyfokú instabilitás abból ered, hogy a napok független kalibrációja során mindig csak az adott nap információ-készletét használjuk fel, a modellnek nincs semmilyen előélete: bár elvárunk némi stabilitást az ökoszisztémától, de mégsem vesszük figyelembe, hogy milyen eredményeket kaptunk a megelőző napokban. [178]

[¶]Részben érthető módon, hiszen a teljes ökoszisztéma modellezésére nincs mód: egy „teljes” modell rendkívül sok felismerhetetlenségi problémával küzdene.

^{||}a laterális transzportfolyamatokat elhanyagoló

4. fejezet: Időben változó paraméterek



4.3. ábra. Oxigénforgalmi modell fő paramétereinek felismerhetetlensége (*Honti és mtsai.*, 2016b). Egy Balatonban mért napi oxigén-profil szimulációja *Holtgrieve és mtsai.* (2010) oxigénforgalmi modelljével (a). Az oxigénforgalmi paraméterek nagy valószínűségű értékeinek szoros összefüggése és ebből eredő bizonytalansága (b).

A paraméterek stabilitását a kalibrációs ablakok között a bayesi tanulás módszerével javíthatjuk (*Honti és mtsai.*, 2016b; *Staehr és mtsai.*, 2016). Minden ablakban bayesi kalibrációt végzünk (lásd 2.1. fejezet), ahol az adott nap prior eloszlása az előző nap poszteriorja (i a kalibrációs ablak indexe):

$$P(\theta_i) = P(\theta_{i-1} \mid Y_{O,i-1}) \propto L(\theta_{i-1}, Y_{O,i-1}) \cdot P(\theta_{i-1}) \quad (4.1)$$

[180] Az első kalibrációs ablak prior eloszlását ($P(\theta_0)$) a bayesi kalibrációban szokásos módon definiálnunk kell, hiszen ott még nincs olyan megelőző adat, amire a fenti képlet használhatnánk.

[181] Ez a szekvenciális tanulási eljárás feltételezi, hogy a paraméterek értékei stabilak, kivéve ha az adott kalibrációs ablak adatai elég erős bizonyítékot szolgáltatnak ennek ellenkezőjére. Egy teljesen felismerhetetlen paraméter esetében a poszterior eloszlás végig az elsőként megadott prior marad. Egy aznap felismerhetetlen paraméter megőrzi előző napi eloszlását. Legalább részben felismerhető paraméter esetén a kalibrációs ablakok közötti változás sebessége az információtartalomtól függ. Hirtelen ugrás csak nagyon erős bizonyíték esetén történik, hiszen ez azt jelenti, hogy a poszterior eloszlás élesen elválik a priortól, és nem csak a szokásos, kismértékű koncentrálódás következik be.

4.1. Bayesi tanulás a tavi oxigénforgalom modellezésében

A szekvenciális bayesi tanulás alkalmazásával elkerülhető a kalibrált paraméterek túlzott ingadozása és a hihetetlen értékek – mint pl. negatív légzési ráta – előfordulása is (4.4. ábra). A paraméterek relatív stabilitásának ilyen fajta biztosítása különösen hasznos ökológiai modellezésben, mert tükrözi az ökoszisztémák rezilienciáját. [182]

A szimulált adatsorok folytonosságának biztosítása

A bayesi tanulás alkalmazása a napi kalibrációban biztosítja a paraméterek elvárható stabilitását és folytonosságát. A napi kalibráció viszont sem önmagában, sem a bayesi tanulással kiegészítve nem garantálja, hogy a napi szimulált adatsorok legalább közelítően folytonosak legyenek, vagyis a kalibrációs ablakok határán találkozzanak. Ez – az esztétikai probléma mellett – nem kívánt szabadsági fokot nyit a rendszerben. Az alkalmazott hibamodelltől és az elérhető illeszkedés mértékétől függően olyan megoldások is elfogadhatónak tűnnek, melyeket a másnapi idősor kezdeti szakasza egyértelműen cáfol. [183]

Az oxigénforgalmi modellek hiányosságai nemcsak hosszútávon jelentkeznek, ezért az időben változó paraméterek bevetése még nem old meg minden kalibrációs problémát. Még napon belül is jelentős szisztematikus hibák tapasztalhatók, melyek miatt a kalibrációt statisztikai szempontból csakis ezeket figyelembe vevő hibamoddellel ajánlatos elvégezni. Ez pl. lehet a szisztematikus hibákat bayesi módon leíró hibamodell (*Reichert és Schuwirth, 2012*). [184]

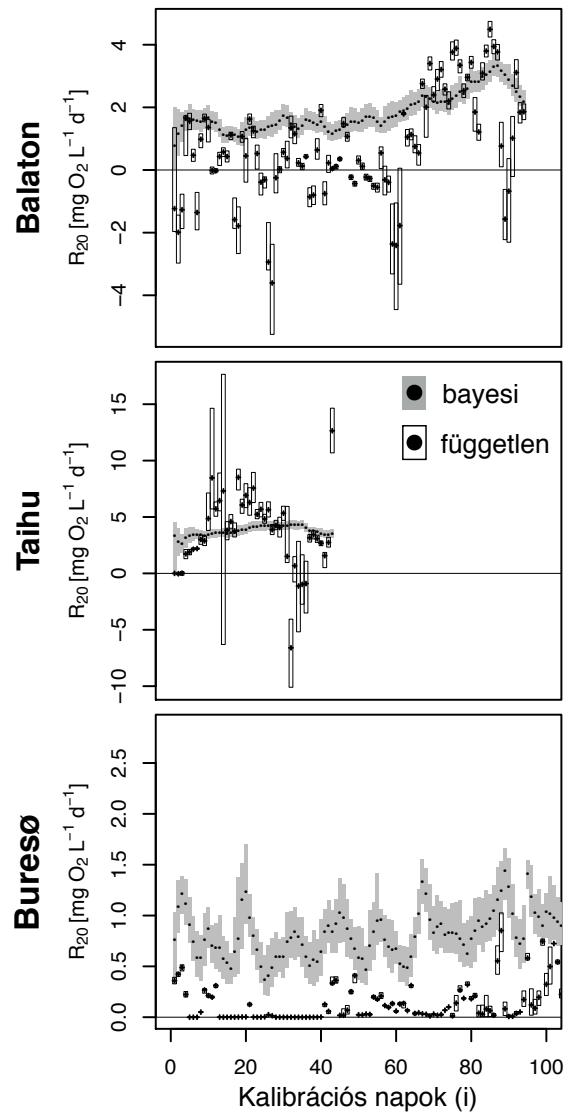
Az autoregresszív hibamodellek (pl. OU hibafolyamat) esetén a napi kalibráció különös hajlamot mutat a kalibrációs ablak utolsó részében az illesztés elrontására. A későn elkövetett hibák az ablak közeli határa miatt a modellek memóriája ellenére sem gyűrűzhetnek tovább, így jelentőségük is kisebb, mint az ablak elején vagy a közepén fellépő hibáké. A kalibráció során lezajló kompromisszum-keresés tehát előszeretettel rontja el a nap végi illeszkedést, megszakítva ezzel a napok közti folytonosságot. [185]

Ennek elkerülésére 3 napos kalibrációs ablakokat alkalmazhatunk, melyek a korábbi megoldásoktól eltérően átlapolnak, vagyis a következő kalibrációs lépésben csak 1 nappal tolódnak el (*Honti és mtsai., 2016b*). Az ablakra kalibrált paraméterek a középső napot reprezentálják, a két szélső nap szerepe a folytonosság biztosítása, valamint azon tranziens megoldások kiszűrése, melyek egyetlen nap adatait még hihetően leírják, de 3 nap alatt kiszaladnak a mérések tartományából. [186]

A modellszerkezet robusztusságának növelése

A tavi metabolizmus modelljei az ökoszisztéma anyagcseréjét az oxigénforgalom modellezésével próbálják leírni. Az oxigénforgalom azonban csak az anyagcsere [187]

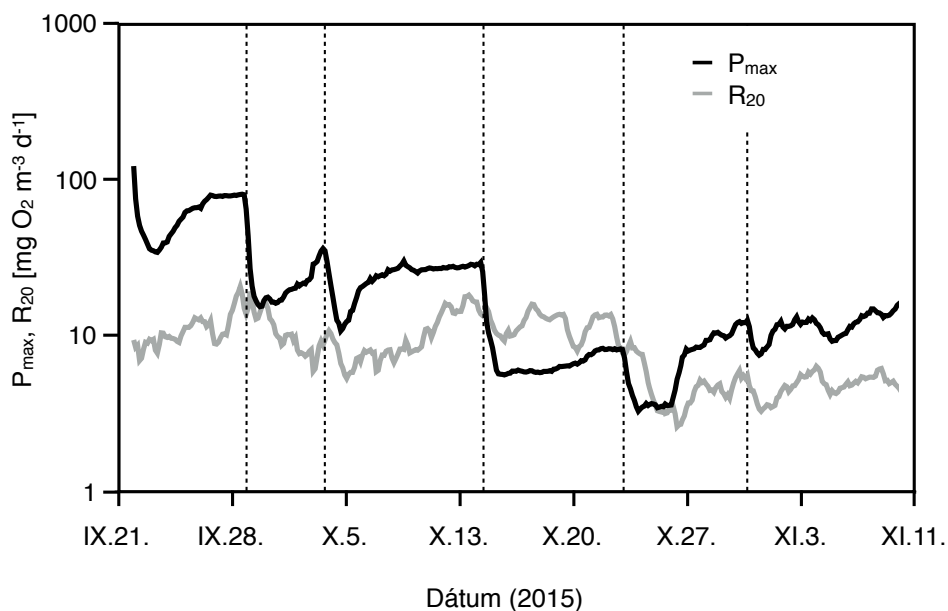
4. fejezet: Időben változó paraméterek



4.4. ábra. Oxigénforgalmi modell légzési paraméterének (R_{20}) időbeli változása bayesi, illetve naponként független kalibrációval három különböző tóban (Honti és mtsai., 2016b). A dobozok a paraméter 95%-os bizonytalansági tartományát, a fekete pontok az optimális értéket jelölik.

4.1. Bayesi tanulás a tavi oxigénforgalom modellezésében

bizonyos folyamataihoz kötődik (4.6. ábra), így csak az oxigén modellezésével nem követhetjük a teljes metabolizmust. Ugyanakkor a metabolizmus folyamatai egyértelműen függenek az ökoszisztéma különböző funkcionális csoportjaitól, amit a hagyományos modellek teljesen figyelmen kívül hagynak. Ennek következménye az, hogy a bayesi tanulással kalibrált, az ökoszisztéma komplexitását teljesen figyelmen kívül hagyó, egyszerű oxigénforgalmi modellek hirtelen és jelentős ugrásokat produkálnak bizonyos paramétereiknél, melyek ellentmondanak még az időben változó paraméterekre is vonatkozó „*viszonylag stabil rendszerjellemző*” definíciónak (4.5. ábra).

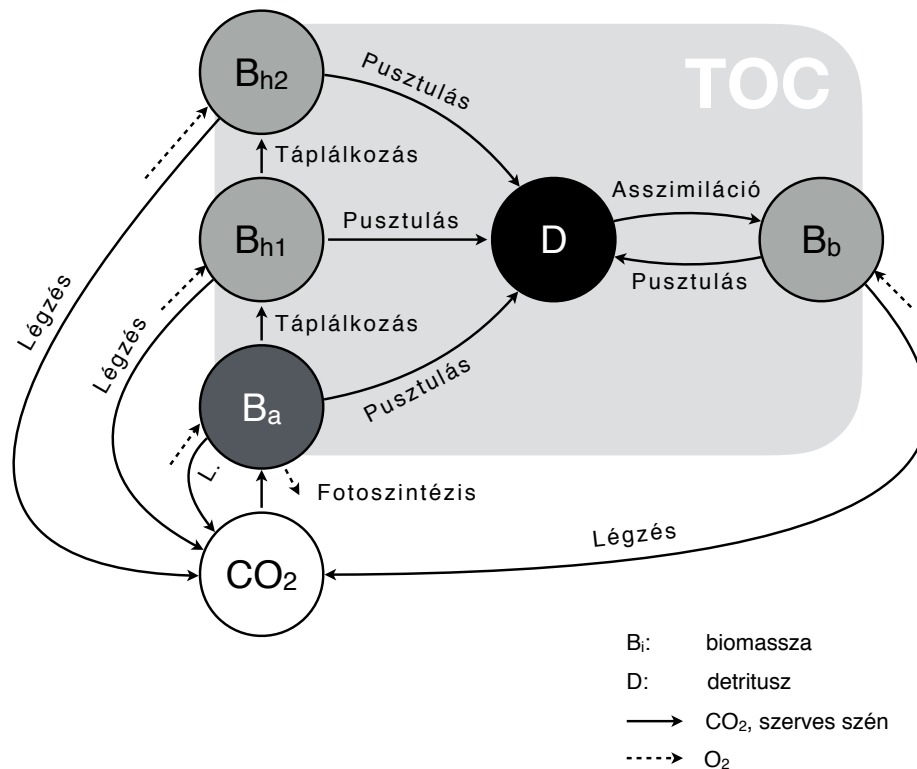


4.5. ábra. Egyszerű oxigénforgalmi modell paramétereinek (P_{\max} és R_{20}) időbeli változása bayesi tanuláson alapuló kalibrációval (Honti és Istvánovics, 2016). A szaggatott vonalak a termelékenység hirtelen változásait jelzik. Adatok: Városligeti-tó, Budapest.

Az oxigénforgalom és más ökoszisztéma-jellemzők kapcsolata összetett. Az [188] elsődleges termelés és a légzés bizonyosan befolyásolja a teljes biomasszát, de a pontos összefüggéshez ismerni kellene a biomassza megoszlását a különböző trofikus szintek között. Még egy transzporfolyamatok által egyáltalán nem érintett ökoszisztémára is csak közelítőleg igaz a $d\text{TOC}/dt \propto d\text{O}_2/dt$ egyenlet a nem aerob anyagcsere-útvonalak miatt (Istvánovics és Honti, 2017), a $dB_i/dt \propto d\text{O}_2/dt$ típusú összefüggések pedig még nagyobb bizonytalanságokkal terheltek. Mégis, a biomassza és az oxigénforgalom közötti összefüggések figyelembe vétele segíthet

4. fejezet: Időben változó paraméterek

a modell robusztusságának növelésében. Mivel a metabolizmus hatékonysága, vagyis az egységnyi biomasszához kötődő légzési potenciál vagy maximális fotoszintetikus termelékenység fiziológiai okokból szűkebb tartományban változhat, mint a biomassza, így a biomassza-specifikus termelékenységi és légzési ráták jobban megfelelnek a paraméterekkel szemben támasztott követelményeknek, mint a bruttó elsődleges termelés, vagy a légzés (Honti és mtsai., 2016b; Istvánovics és Honti, 2017).



4.6. ábra. Nyíltvízi ökoszisztéma egyszerűsített anyagforgalmának vázlata Honti és Istvánovics (2019) nyomán. B_a : autotróf biomassza, B_{h1} és B_{h2} : heterotróf biomassza, D : detritusz, B_b : bakteriális biomassza, TOC: összes szerves szén. A rövid szaggatott nyilak jelzik az oxigénfelvételt és leadást.

[189] A paraméterek változékonysága tehát csökkenthető, ha az oxigénforgalmi modellünket biomassza-specifikus paraméterekkel írjuk fel, valamint felveszünk egy vagy több új állapotváltozót a modellbe, melyek a különböző biomassza-frakciókat képviselik (Honti és mtsai., 2016b; Staehr és mtsai., 2016; Istvánovics

4.1. Bayesi tanulás a tavi oxigénforgalom modellezésében

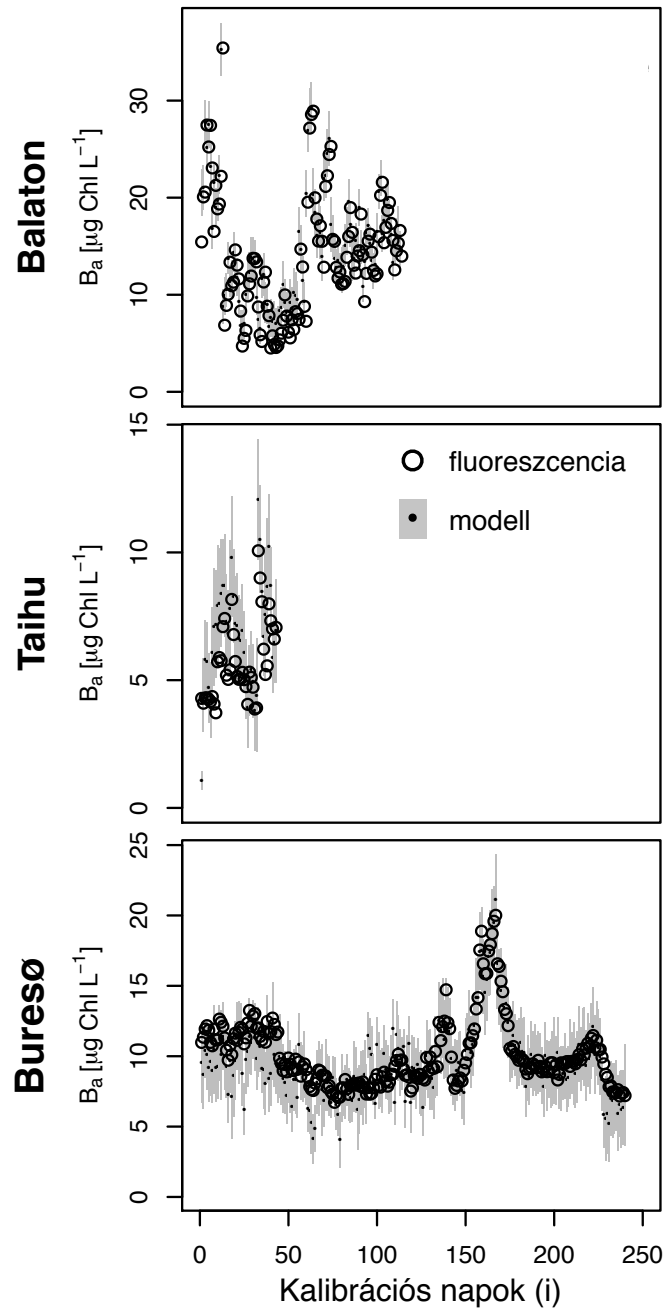
és Honti, 2017)**. Ez a változtatás önmagában megnövelné a modell bizonytalanságát, hiszen ugyanakkora kalibrációs adathalmaz mellett több paraméterrel és állapotváltozóval a felismerhetőség romlik. Ugyanakkor az új állapotváltozó(k) segítségével olyan adatokat is bevonhatunk a kalibrációba, melyek a hagyományos megközelítésben használhatatlanok. A nagy gyakoriságú, fluoreszcencián alapuló mérési módszerek napi gyakorisággal követhetővé teszik a fitoplankton biomassáját (lásd pl. *Istvánovics és mtsai.*, 2005), valamint egyes fotoszintetikus paramétereit (*Honti és Istvanovics*, 2011). Ezek az adatok természetesen nem elhanyagolható bizonytalansággal terheltek, így bemenő adatként történő alkalmazásuk nem javasolt. A bayesi kalibrációt kihasználva a paraméterekre vonatkozó prior eloszlásként viszont gond nélkül bevethetők, hiszen ekkor az oldott-oxigén adatok szükség esetén felülírhatják az ezekben az adatsorokban rejlő hibás értékeket. A több adat bevonása tehát a szerkezet bonyolítása ellenére robusztusabbá teheti a modellt. Ez azért lehetséges, mert a szerkezeti bővítés biztos tudáson alapul, tehát a bevitt szerkezeti bizonytalanság elhanyagolható (a fotoszintézis és az alga biomassza közötti kapcsolat szoros, fotoszintézis nélkül nem keletkezhet alga biomassza), valamint a szerkezeti bővítéssel érintett folyamatok szerepe a teljes oxigénforgalomban jelentős.

A gyakorlati nehézség ezzel az, hogy a biomassza az összetettebb [190] oxigénforgalmi modellben a visszacsatolások miatt nem paraméter, hanem állapotváltozó (*Honti és mtsai.*, 2016b). Állapotváltozóra prior eloszlás csak közvetett formában alkalmazható, pl. a kezdeti értékre. Ezért a mért fluoreszcencia adatokat kétféleképpen is figyelembe kell venni: egyrészt az algabiomassza kezdeti értékére vonatkozó klasszikus prior eloszlásként (pl. a kezdeti érték priorja a mérés 60-140%-a közé esik), másrészt a kalibráció likelihood függvényében. A likelihood az oxigén-adatokhoz való illeszkedés mellett attól is függ, hogy a modellezett napi átlag-biomassza mennyire egyezik meg a mérésekkel. Ezzel a megoldással tulajdonképpen többcélú (*multi-objective*) kalibrációt végzünk.

A tapasztalatok szerint még az egyszerű oxigénforgalmi modellek is rendelkez- [191] nek elegendő szabadsági fokkal ahhoz, hogy egyszerre tudnak stabil biomassza-specifikus paramétereket és a méréseknek megfelelő biomassza-dinamikát produkálni (4.7. ábra). Az ilyen megoldás a csak oxigéneen alapuló anyagcsere-modellezésénél hihetőbb, mivel nem mond ellen a biomassza-méréseknek, valamint az ökoszisztéma rövid távú stabilitásáról és rezilienciájáról szóló ismereteknek.

** Analóg módon azzal, ahogy az OECD kísérletekben biomassza-specifikussá tettük az elsőrendű lebomlási tényezőket (2.3. fejezet).

4. fejezet: Időben változó paraméterek



4.7. ábra. Fluoreszcenciával mért és oxigénforgalmi modellel illesztett alga-biomassza (B_a) három tóban (*Honti és mtsai.*, 2016b). A szürke sávok a modell 95%-os bizonytalansági tartományát jelzik.

5 Összefoglalás és tézisek

5.1. Összefoglalás

[192] A modellkalibráció és bizonytalanság-vizsgálat bayesi módszereit áttekintve a következő megállapítások tehetők:

- A bayesi következtetés matematikai keretet ad a modellek felismerhetlenségének csökkentéséhez egyéb, a kalibrációs adatkészlettől független információk bevonásával.
- A szisztematikus hibák bayesi kezelése lehetővé teszi a hibafolyamatok statisztikailag helyesebb leírását és ezáltal a modell bizonytalanságának realisabb becslését.
- A bayesi módon kalibrált modell kimenete függ a modell szerkezetétől, a felhasznált adatoktól, a hibamodelltől és a prioroktól.
- A modell jósága, vagyis az illeszkedés minősége függ attól, hogy milyen időszakon és milyen időbeli felbontással futtatunk.
- A kalibráció végeredménye függ a kiértékelt illeszkedési mutatóktól, valamint az alkalmazott idősor hosszától, felbontásától, a figyelembe vett statisztikai jellemzőktől, valamint az ezek súlyozásától.
- A modell szerkezete, a hibamodell és a priorok legalább részben szubjektív elemek. A szerkezeti szubjektivitás demonstrálható az egyazon célra fejlesztett (hiba)modellek sokféleségével. A priorok szubjektivitásának mértéke függ a prior előállításakor követett iskolától, de még objektivista megközelítés esetén sem garantálható, hogy a prior valóban mentes lesz szubjektív elemektől.

[193] A végeredmény, vagyis a kalibrált paraméterek és a modell kimenete mind ezen tényezők miatt bizonyosan szubjektív lesz. Természetesen minden tudományos eredmény szubjektív, hiszen az objektivitás az adott eredmény

5.1. Összefoglalás

megkérdőjelezhetetlenségét jelentené. A szubjektív mértéke viszont tág határok között változhat. Itt a szubjektív olyan mértékéről van szó, ahol az eredmény már kimutathatóan függ a modellezést végző személytől. A modellezés szubjektív itt azért ennyire nyilvánvaló, mert a bayesi eljárások azt explicit módon vállalják, és módszereket nyújtanak a szubjektív és a bizonytalanság propagálására a kiinduló adatoktól és hipotézisektől egészen a végeredményig.

A mindent átszövő szubjektív azonban nem a bayesi módszerekből ered, [194] fő forrása a környezeti modellezésben általános felismerhetetlenség és bizonytalanság. Ez azt jelenti, hogy a nem bayesi technikákkal végrehajtott modellezés szükségszerűen ugyanannyira szubjektív, mint a bayesi, legfeljebb a modellező nem vesz róla tudomást. A felismerhetetlenség és bizonytalanság kiiktatását szolgáló tisztán matematikai módszerek (ismeretlen paraméterek fixálása, *ad hoc* modellszerkezet alkalmazása, stb.) elrejtik a meglévő bizonytalanságot, és ezáltal hiteltelenítik a modell eredményeit.

A szubjektív és a gyakran meglepő mértékű bizonytalanság ellentétben áll [195] a modellek objektívításáról a nem-modellezőkben kialakult képpel, és ami ennél sokkal súlyosabb probléma, a modellek számos bevett alkalmazási módjával is. A modelleken alapuló engedélyezési eljárások, hatásvizsgálatok azt feltételezik, hogy a modellek eredményei egzakt természetűek, ezért egymás között összehasonlíthatók és abszolút értelemben értékelhetők. A bemutatott esetekben a modellek paraméterei, szerkezete, eredményei mind bizonyos mértékű felismerhetetlenségbe burkolódtak. A példákban szereplő modellek nem voltak bonyolultabbak vagy különlegesebbek a gyakorlatban alkalmazott modelleknél, sőt a bizonytalanság-vizsgálat számítási igényei miatt inkább egyszerűbb szerkezetekről volt szó. Ez azt mutatja, hogy egy környezeti modellezési gyakorlat eredménye általában nem tisztázott és nem dokumentált mértékben a modellező nézeteit, intuícióját tükrözi; objektív mértékű megkérdőjelezhető. A bayesi módszerek alkalmazásával a modellezés transzparenciája növelhető, mivel a módszerek kiemelik azokat a szubjektív döntést igénylő elemeket, melyek dokumentálása a modellezés reprodukálhatóságát segíti. A bizonytalanság a bayesi modellezés folyamán végig figyelemmel kísérhető. A bayesi statisztika szubjektív alapvetései pedig egyértelművé teszik, hogy az eredmény még a szokványos tudományos szinten sem lesz objektív.

A bayesi technikák alkalmazása a hagyományos kalibrációs eljárásokhoz [196] képest jelentősen nagyobb modell-bizonytalanságot eredményez. Ez nem a bayesi megközelítés hibája, hanem épp ellenkezőleg, annak következménye, hogy a hagyományos eljárásokban elhanyagolt bizonytalanságok láthatóvá válnak. A szubjektív és a bizonytalanság bizonyos mértékig csökkenthető, főleg több információ bevonásával, de teljesen nem iktatható ki. Ennek oka az, hogy a környezeti rendszerek bonyolultsága és teljes megismerhetetlensége miatt mindig hatal-

5. fejezet: Összefoglalás és tézisek

mas szakadék fog fennállni a tényleges és a modell-rendszer összetettsége között. A strukturális bizonytalanság (a megismerhetetlenség miatt) és túl-egyszerűsítés (a modellek korlátos bonyolultsága miatt) egyenesen vezet a bizonytalansághoz és a felismerhetetlenséghez. Ezek miatt viszont a modellezési feladatokat csak szubjektív módon lehet megoldani. A szubjektivitás nem jelenti azt, hogy a modellezés szükségtelen vagy haszontalan volna. A modellek segítenek egzakt matematikai struktúrákba foglalni az összetett környezeti rendszerről alkotott hipotéziseinket, ezért szilárdabb alapon nyugszanak, mint a szakértői becslések. A szubjektivitás jelenléte csak arra figyelmeztet, hogy ne fogadjuk el megdönthetetlen igazságnak azt, ami a modelltől kijön. Az óvatosság különösen indokolt, ha a felhasználni kívánt eredmény nem a modell elsődleges kimenete, vagyis nem a kalibrációban is szereplő idősor-típus, hanem pl. paraméter, nem mért állapotváltozó, vagy olyan statisztikai jellemző, amire nem kalibráltuk a modellt.

[197] A bayesi módszerek előnyei akkor használhatók ki a legnagyobb mértékben, ha a modellezendő rendszerről sok, lehetőleg nagy időbeli felbontású adattal rendelkezünk. Ekkor a hibafolyamat statisztikai tulajdonságai részletesen megismerhetők, a modell előrejelzési bizonytalansága jól becsülhető. A környezetre vonatkozó mérési adatok körének bővítése és az időbeli felbontás sűrítése tehát növeli a modellek használhatóságát. Kevés adat esetén a bayesi kalibráció visszatükrözi előzetes elvárásainkat és tudásunkat, vagyis a modellezés eredménye nem különbözik jelentősen a modellezés nélkül is megtehető szakértői becslésektől. Ugyanakkor a bayesi munkafolyamat követése még ilyenkor is segít explicit módon megfogalmazni a becslések kiindulási feltételezéseit és a becslés logikáját.

5.2. Tézisek

1. **A bayesi paraméterbecslés külső információ bevonásával javítja a paraméterek felismerhetőségét, de nem tudja az összes felismerhetőségi problémát megoldani. A strukturális felismerhetőség továbbra is fennállhat. Különböző modellszerkezetek *strukturális egyenértékűsége* csak akkor küszöbölhető ki, ha kérdéses szerkezeti elemeket befolyásoló paraméterekre nagyon pontos információval rendelkezünk, vagy több olyan rendszert tudunk egyszerre kalibrálni, ahol az kérdéses folyamatok és paraméterek kifejeződése eltérő mértékű.**

Strukturális egyenértékűsége jó példa az OECD 308-as kísérlet modellezése. Ebben három modell-változat egyenértékűnek bizonyult még ugyanazokkal a paraméter-priorokkal is, a vegyületek perzisztenciájára vonatkozó végkövetkeztetés azonban modell- szerkezetként nagyon eltérőnek adódott, ami alapvetően befolyásolná a

vizsgált vegyületek hivatalos besorolását. Az üledékbeli lebontás paramétereinek pontosabb ismerete megoldhatta volna a problémát, de a pontosítás a kísérleti eredmények mellé csatolt adatokból nem volt lehetséges. Az OECD 309-es kísérlet bevonása a kalibrációba viszont segített, hiszen az aerob 309-es kísérlet segítségével pontosítható az aerob lebomlás sebessége, ami alapján a 308-asban az anaerob bomlás sebessége is kevésbé bizonytalanná válik.

Honti és Fenner (2015), Honti és mtsai. (2016a).

2. **A kalibrált paraméterek elemzése csak a vonatkozó feltételek ismeretében és tudatában lenne ajánlott, szemben a mai gyakorlattal. A paraméterek elemzése és értelmezése ellen szól a kondicionáltság, vagyis az, hogy gyakorlatilag még az azonos modellel kapott paraméterek sem feltétlenül összehasonlíthatók, ha a bemenő adatok hibái, az alkalmazott hibamodell, valamint a kalibráció módja nem ugyanolyan. Ugyanilyen erős ellenérv az, hogy a strukturális hibák miatt a kalibrálás során a paramétereknek tulajdonított jelentés torzul, vagy teljesen elvész.**

A bayesi módon kalibrált paraméterek kondicionáltsága nyilvánvalóvá teszi, hogy a paraméterek jelentése a kalibráció során megváltozik. Ezért ezek értelmezése nem ajánlott. Mégis, számos területen elterjedt gyakorlat az inverz-modellezés, vagyis bizonyos paraméterek kikövetkeztetése mérési adatsorokból. Ez matematikailag megegyezik a kalibrációval, a különbség csak annyi, hogy a kalibrált paramétereket nem előrejelzéshez használjuk (ami teljesen legitim még a kondicionáltság mellett is), hanem értelmezzük őket. Ilyen alkalmazás például a perzisztencia-vizsgálat vagy az oxigénforgalmi modellezés.

Honti és mtsai. (2013), Honti és Fenner (2015), Honti és mtsai. (2016b), Honti és Istvánovics (2019)

3. **A modell kimenetében nem különböztethető meg a bemeneti adatok hibáinak következménye a modell szerkezeti hibáinak következményeitől. Ezért olyan hibamodelleket lenne indokolt használni, ahol ezt a két hibaforrást együttesen tudjuk kezelni. A bemeneti és strukturális hibák közti felismerhetetlenség csak úgy javítható, ha a hibamodell a két hibaforrás hatásának mértékére reális feltételezéseket tesz.**

Ilyen feltételezést tehetünk a mérési hibák és a szisztematikus hibák statisztikai tulajdonságaira vonatkozóan, megadva ezen meta-paraméterek prior eloszlását (pl. a csapadék-lefolyás modell esetében

5. fejezet: Összefoglalás és tézisek

a csapadék-mérés hibájának varianciájára, a szerkezeti hibák okozta hibafolyamat varianciájára és autokorrelációjára). A hibamodell szerkezetébe kódolva is tehetünk hasonló feltételezéseket. A klasszikus hibamodell szerint a modell szerkezete és a bemenő adatok is pontosak, a hibák csak a kimenet méréseiben vannak. A Kennedy-O'Hagan hibamodell feltételezi, hogy a kimenet mérési hibái nem autokorreláltak, a bemenő adatok pontosak. A Kirchner-féle fordított, lefolyás-csapadék modellezési eljárás feltételezi, hogy minden kimeneti hiba a bemenő csapadékadatokból hibás megfigyeléséből ered.

Honti és mtsai. (2011), Honti és mtsai. (2013)

4. **A szisztematikus hibák hagyományos bayesi leírása (a Kennedy-O'Hagan hibamodell) csak erős transzformációval alkalmazható eseményvezérelt folyamatokra, mint pl. a csapadék-lefolyás modellezés. Ezen hagyományos leírás kiterjesztése a bemeneti adatok hibáira már transzformáció nélkül is képes a valóságnak megfelelő hibaadatsort generálni. A bemenő adatok hibái zavart sztochasztikus folyamattal (mint pl. a zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamattal) írhatók le. A hibamodellben a szisztematikus komponenst célszerűen a determinisztikus modell sztochasztikus, de linearizált változata képviselje.**

A zavart autoregresszív folyamat alkalmazása kezeli a hiba-adatsorok heteroscedaszticitását, amely számos környezeti modellezési feladatban jellemző a modellek súlyos strukturális hiányosságai miatt. A zavarás jelentősége attól függ, hogy a modellezendő folyamat milyen élenken reagál a peremfeltételek változásaira és hogy ezek a változások mennyire ismertek. Lassú reakció vagy ismeretlen behatás esetén visszatérhetünk a zavartalan bayesi hibafolyamathoz.

Honti és mtsai. (2013), Del Giudice és mtsai. (2013)

5. **A szekvenciális bayesi tanulóssal elkerülhető az időben változó paraméterek folytonos kezelésének számítási problémája, ugyanakkor a modell szerkezetén belül kezelhető a strukturális bizonytalanság. Az alkalmazhatósághoz biztosítani kell az adatsorok folytonosságát és normalizálni kell a kalibrálandó modell szerkezetét úgy, hogy az időben változatható paraméterek várhatóan kismértékű ingadozást mutassanak.**

A szerkezeti hibák modellen belül történő kezelése megőrzi a modellekbe kódolt feltételezéseket, pl. az anyagmegmaradás elvét. A fokozatos bayesi tanulás ellenkező bizonyítékok hiányában biztosítja a

paraméterek időbeli stabilitását, ami a környezeti rendszerek általános rezilienciáját tükrözi. A rövid távú kalibrációs lépések okozta stabilitási és folytonossági problémák kiküszöböléséhez átfedő kalibrációs ablakok alkalmazása javasolt.

Honti és mtsai. (2016b), Istvánovics és Honti (2017)

- 6. A bayesi modellkalibráció megvilágítja, hogy univerzálisan érvényes (objektív) kalibráció még egy adott témakörön belül sem létezik, a kalibrált modell csak a kalibrációs adatok, a modell szerkezet, a hibamodellel és a kiértékelt statisztikai mutatók függvényében értelmezhető (vagyis a kalibrált modell ezeken kondicionált). Ebből következik, hogy a modellek eredményei nem szükségszerűen általánosíthatók és összehasonlíthatók. A modellek eredményein alapuló döntéseknél a bizonytalanság legalább közelítő ismerete szükséges, melynek biztosítása a modellező felelőssége.**

A bayesi eljárások követése biztosítja a modellezési gyakorlatok reprodukálhatóságához szükséges átláthatóságot, hiszen a szubjektivitást okozó elemek explicit módon megjelennek benne, ezért egyértelműen dokumentálhatók. A kondicionáltság és a bizonytalanság ismerete szükséges minden, a modell eredményein alapuló döntés meghozatalához. Ezek nélkül a modell eredménye nem különbözik egy egyszerű, dokumentálatlan módon meghozott szakértői becsléstől.

Honti és mtsai. (2013), Honti és mtsai. (2014), Honti és Fenner (2015), Honti és mtsai. (2016b)

Irodalomjegyzék

- Abbaspour, K., M. Faramarzi, S. Ghasemi, és H. Yang (2009), Assessing the impact of climate change on water resources in iran, *Water Resources Research*, 45(10), W10434, doi:10.1029/2008WR007615.
- Ajami, N. K., Q. Duan, és S. Sorooshian (2007), An integrated hydrologic Bayesian multimodel combination framework: confronting input, parameter and model structural uncertainty in hydrologic prediction, *Water Resources Research*, 43, W01403, doi:10.1029/2005WR004745.
- Arnell, N. (2011), The relationship between climate forcing and hydrological response in UK catchments, *Hydrology and Earth System Sciences*, 15, 897–912.
- Bates, B. C., és E. P. Campbell (2001), A Markov Chain Monte Carlo Scheme for parameter estimation and inference in conceptual rainfall-runoff modeling, *Water Resour. Res.*, 37(4), 937 – 947, doi:10.1029/2000WR900363.
- Bayarri, M. J., J. O. Berger, R. Paulo, J. Sacks, J. A. Cafeo, J. Cavendish, C.-H. Lin, és J. Tu (2007), A framework for validation of computer models, *Technometrics*, 49(2), 138 – 154, doi:10.1198/004017007000000092.
- Beck, M. B. (1983), A procedure for modelling, in *Mathematical modelling of water quality: streams, lakes, and reservoirs*, Wiley-IIASA International Series on Applied Systems Analysis, kötet. 12, edited by G. Orlob, fej. 5, p. 11–41, Wiley, Chichester, UK.
- Beck, M. B. (1987), Water quality modeling: A review of the analysis of uncertainty, *Water Resources Research*, 23(8), 1393–1442, doi: 10.1029/wr023i008p01393.
- Beck, M. B. (1994), Understanding uncertain environmental systems, in *Predictability and nonlinear modeling in natural sciences and economics*, edited by J. Grasman és G. van Straten, pp. 294–311, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, NL, doi:10.1007/978-94-011-0962-8.

- Beck, M. B. (2014), Handling uncertainty in environmental models at the science–policy–society interfaces, in *Error and Uncertainty in Scientific Practice*, edited by M. Boumans, G. Hon, és A. C. Petersen, fej. 5, p. 97–136, Pickering & Chatto.
- Beck, M. B., és G. van Straten (Szerk.) (1983), *Uncertainty and Forecasting of Water Quality*, 388 pp., Springer Berlin Heidelberg, doi: 10.1007/978-3-642-82054-0.
- Beven, K. (2006), A manifesto for the equifinality thesis, *Journal of Hydrology*, 320(1-2), 18–36, doi:10.1016/j.jhydrol.2005.07.007.
- Beven, K., és A. Binley (1992), The future of distributed models: Model calibration and uncertainty prediction, *Hydrological Processes*, 6(3), 279–298, doi:10.1002/hyp.3360060305.
- Beven, K., P. Smith, és J. Freer (2007), Comment on „hydrological forecasting uncertainty assessment: Incoherence of the GLUE methodology” by pietero mantovan and ezio todini, *Journal of Hydrology*, 338(3-4), 315–318, doi: 10.1016/j.jhydrol.2007.02.023.
- Beven, K. J., P. J. Smith, és J. E. Freer (2008), So just why would a modeller choose to be incoherent?, *Journal of Hydrology*, 354(1-4), 15 – 32.
- Blazkova, S., és K. Beven (2009), A limits of acceptability approach to model evaluation and uncertainty estimation in flood frequency estimation by continuous simulation: Skalka catchment, Czech Republic, *Water Resources Research*, 45, W00B16, doi:10.1029/2007WR006726.
- Blöschl, G., és A. Montanari (2010), Climate change impacts - throwing the dice?, *Hydrological Processes*, 24, 374–381.
- Christensen, S. (2004), A synthetic groundwater modelling study of the accuracy of GLUE uncertainty intervals, *Hydrology Research*, 35(1), 45–59.
- Ciach, G. J. (2003), Local random errors in tipping-bucket rain gauge measurements, *J. Atmos. Oceanic Technol.*, 20(5), 752–759, doi: 10.1175/1520-0426(2003)20<752:lreitb>2.0.co;2.
- Cole, J. J., és N. F. Caraco (1998), Atmospheric exchange of carbon dioxide in a low-wind oligotrophic lake measured by the addition of SF₆, *Limnology and Oceanography*, 43(4), 647–656, doi:10.4319/lo.1998.43.4.0647.

Irodalomjegyzék

- del Giorgio, P. A., és R. H. Peters (1994), Patterns in planktonic P:R ratios in lakes: Influence of lake trophy and dissolved organic carbon, *Limnology and Oceanography*, 39(4), 772–787, doi:10.4319/lo.1994.39.4.0772.
- Del Giudice, D., M. Honti, A. Scheidegger, C. Albert, P. Reichert, és J. Rieckermann (2013), Improving uncertainty estimation in urban hydrological modeling by statistically describing bias, *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 17(10), 4209–4225, doi:10.5194/hess-17-4209-2013.
- Doherty, J., és S. Christensen (2011), Use of paired simple and complex models to reduce predictive bias and quantify uncertainty, *Water Resour. Res.*, 47, W12534, doi:10.1029/2011WR010763.
- Dugan, H. A., R. I. Woolway, A. B. Santoso, J. R. Corman, A. Jaimes, E. R. Nodine, V. P. Patil, J. A. Zwart, J. A. Brentrup, A. L. Hetherington, S. K. Oliver, J. S. Read, K. M. Winters, P. C. Hanson, E. K. Read, L. A. Winslow, és K. C. Weathers (2016), Consequences of gas flux model choice on the interpretation of metabolic balance across 15 lakes, *Inland Waters*, 6(4), 581–592, doi:10.5268/IW-6.4.836.
- Ehret, U., E. Zehe, V. Wulfmeyer, K. Warrach-Sagi, és J. Liebert (2012), HESS Opinions „Should we apply bias correction to global and regional climate model data?”, *Hydrology and Earth System Sciences*.
- European Commission (2011), COMMISSION REGULATION (EU) No 253/2011 of 15 March 2011 amending Regulation (EC) No 1907/2006 of the European Parliament and of the Council on the Registration, Evaluation, Authorisation and Restriction of Chemicals (REACH) as regards Annex XIII, *Off. J. Eur. Union*, L69, 7–12.
- Fiering, M. B. (1967), *Streamflow synthesis*, Harvard University Press, Cambridge, MA.
- FOCUS (2006), FOCUS Guidance Document in Estimating Persistence and Degradation Kinetics from Environmental Fate Studies on Pesticides in EU Registration, *Tech. Rep. EC Document Reference SANCO/10058/2005 version 2.0*, Report of the FOCUS Work Group on Degradation Kinetics.
- FOCUS (2014), FOCUS Guidance Document in Estimating Persistence and Degradation Kinetics from Environmental Fate Studies in Pesticides on EU Registration, *Tech. Rep. version 1.1*, Report of the FOCUS Work Group on Degradation Kinetics.

- Frey, M. P., C. Stamm, M. K. Schneider, és P. Reichert (2011), Using discharge data to reduce structural deficits in a hydrological model with Bayesian inference approach and the implications for the prediction of critical source areas, *Water Resour. Res.*, 47, W12529, doi:10.1029/2011WR009993.
- Godfrey, K., és J. DiStefano (1985), Identifiability of model parameter, *IFAC Proceedings Volumes*, 18(5), 89–114, doi:10.1016/s1474-6670(17)60544-5.
- Gosling, S., R. Taylor, N. Arnell, és M. Todd (2011), A comparative analysis of projected impacts of climate change on river runoff from global and catchment-scale hydrological models, *Hydrology and Earth System Sciences*, 15, 279–294.
- Graham, L., J. Andreasson, és B. Carlsson (2007), Assessing climate change impacts from an ensemble of regional climate models, model scales and linking methods - a case study on the lule river basin, *Climatic Change*, 81(1), 293–307.
- Gupta, H. V., S. Sorooshian, és P. O. Yapo (1998), Toward improved calibration of hydrologic models: Multiple and noncommensurable measures of information, *Water Resources Research*, 34(4), 751–763, doi:10.1029/97wr03495.
- Hanson, P. C., S. R. Carpenter, N. Kimura, C. Wu, S. P. Cornelius, és T. K. Kratz (2008), Evaluation of metabolism models for free-water dissolved oxygen methods in lakes, *Limnology and Oceanography: Methods*, 6(9), 454–465, doi:10.4319/lom.2008.6.454.
- Hoellein, T. J., D. A. Bruesewitz, és D. C. Richardson (2013), Revisiting Odum (1956): A synthesis of aquatic ecosystem metabolism, *Limnology and Oceanography*, 58(6), 2089–2100, doi:10.4319/lo.2013.58.6.2089.
- Holtgrieve, G. W., D. E. Schindler, T. A. Branch, és Z. T. A'mar (2010), Simultaneous quantification of aquatic ecosystem metabolism and reaeration using a bayesian statistical model of oxygen dynamics, *Limnology and Oceanography*, 55(3), 1047–1063, doi:10.4319/lo.2010.55.3.1047.
- Honti, M., és K. Fenner (2015), Deriving persistence indicators from regulatory water-sediment studies – opportunities and limitations in OECD 308 data, *Environmental Science & Technology*, 49(10), 5879–5886, doi:10.1021/acs.est.5b00788.
- Honti, M., és V. Istvanovics (2011), Online monitoring of phytoplankton light response curves using a novel delayed fluorescence device,

Irodalomjegyzék

- Lakes & Reservoirs: Research & Management*, 16(2), 153–158, doi:10.1111/j.1440-1770.2011.00458.x.
- Honti, M., és V. Istvánovics (2016), Short-term dynamic forecast of dissolved oxygen concentration with a simple metabolic model and bayesian learning, XXXIII. SIL Congress, 3 August 2016, Torino, Italy.
- Honti, M., és V. Istvánovics (2019), Error propagation during inverse modeling leads to spurious correlations and misinterpretation of lake metabolism, *Limnology and Oceanography: Methods*, 17, 17–24, doi:10.1002/lom3.10293.
- Honti, M., és C. Stamm (2010), Application of the delta change scenarios for stream hydrology on the swiss plateau, ETH Zürich ZHydro 2010 seminar, 8 November 2010, Zürich, Switzerland.
- Honti, M., C. Stamm, és P. Reichert (2011), Integrated uncertainty assessment of a simple CRR model, European Geosciences Union General Assembly 2011.
- Honti, M., C. Stamm, és P. Reichert (2013), Integrated uncertainty assessment of discharge predictions with a statistical error model, *Water Resources Research*, 49(8), 4866–4884, doi:10.1002/wrcr.20374.
- Honti, M., A. Scheidegger, és C. Stamm (2014), The importance of hydrological uncertainty assessment methods in climate change impact studies, *Hydrol. Earth Syst. Sci.*, 18(8), 3301–3317, doi:10.5194/hess-18-3301-2014.
- Honti, M., S. Hahn, D. Hennecke, T. Junker, P. Shrestha, és K. Fenner (2016a), Bridging across OECD 308 and 309 data in search of a robust biotransformation indicator, *Environmental Science & Technology*, 50(13), 6865–6872, doi:10.1021/acs.est.6b01097.
- Honti, M., V. Istvánovics, P. A. Staehr, L. S. Brighenti, M. Zhu, és G. Zhu (2016b), Robust estimation of lake metabolism by coupling high frequency dissolved oxygen and chlorophyll fluorescence data in a Bayesian framework, *Inland Waters*, 6(4), 608–621, doi:10.5268/IW-6.4.877.
- Hornberger, G. (1980), Eutrophication in Peel inlet–I. the problem-defining behavior and a mathematical model for the phosphorus scenario, *Water Research*, 14(1), 29–42, doi:10.1016/0043-1354(80)90039-1.
- Hornberger, G. M., és R. C. Spear (1981), An approach to the preliminary analysis of environmental systems, *Journal of Environmental Management*, 12(1), 7–18.

- Huard, D., és A. Mailhot (2006), A Bayesian perspective on input uncertainty in model calibration: Application to hydrological model "abc", *Water Resour. Res.*, 42(7), W07416, doi:10.1029/2005WR004661.
- Hughes, D., D. Kingston, és M. Todd (2011), Uncertainty in the water resources availability in the Okavango River Basin as a result of climate change, *Hydrology and Earth System Sciences*, 15, 931–941.
- IPCC (1995), *Ipc Second Assessment Report: Climate Change 1995 (SAR), Tech. rep.*, The United Nations Intergovernmental Panel on Climate Change.
- Istvánovics, V., és M. Honti (2017), Coupled simulation of high-frequency dynamics of dissolved oxygen and chlorophyll widens the scope of lake metabolism studies, *Limnology and Oceanography*, doi:10.1002/lno.10615.
- Istvánovics, V., M. Honti, A. Osztóics, H. M. Shafik, J. Padisák, Y. Yacobi, és W. Eckert (2005), Continuous monitoring of phytoplankton dynamics in lake balaton (hungary) using on-line delayed fluorescence excitation spectroscopy, *Freshwater Biology*, 50(12), 1950–1970, doi:10.1111/j.1365-2427.2005.01442.x.
- Jakeman, A. J., és G. M. Hornberger (1993), How much complexity is warranted in a rainfall-runoff model?, *Water Resources Research*, 29(8), 2637–2649, doi:10.1029/93wr00877.
- Jaynes, E. (1986), Bayesian methods: General background, in *Maximum Entropy and Bayesian Methods in Applied Statistics*, edited by J. H. Justice, pp. 1–25, Cambridge University Press, doi:10.1017/cbo9780511569678.003.
- Kavetski, D., G. Kuczera, és S. Franks (2006), Bayesian analysis of input uncertainty in hydrological modeling: 1. Theory, *Water Resources Research*, 42, W03407, doi:10.1029/2005WR004368.
- Kay, A., H. Davies, V. Bell, és R. Jones (2009), Comparison of uncertainty sources for climate change impacts: flood frequency in England, *Climatic Change*, 92, 41–63.
- Kennedy, M. C., és A. O'Hagan (2001), Bayesian calibration of computer models, *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Statistical Methodology)*, 63(3), 425–464, doi:10.1111/1467-9868.00294.
- Kingston, D., és R. Taylor (2010), Sources of uncertainty in climate change impacts on river discharge in a headwater catchment of the Upper Nile Basin, Uganda, *Hydrology and Earth System Sciences*, 14, 1297–1308.

Irodalomjegyzék

- Kirchner, J. W. (2009), Catchments as simple dynamical systems: catchment characterization, rainfall-runoff modeling, and doing hydrology backward, *Water Resources Research*, 45, W02429, doi:10.1029/2008WR006912.
- Kiureghian, A. D., és O. Ditlevsen (2009), Aleatory or epistemic? does it matter?, *Structural Safety*, 31(2), 105–112, doi:10.1016/j.strusafe.2008.06.020.
- Klepper, O., H. Scholten, és J. P. G. D. V. Kamer (1991), Prediction uncertainty in an ecological model of the oosterschelde estuary, *Journal of Forecasting*, 10(1-2), 191–209, doi:10.1002/for.3980100111.
- Koutsoyiannis, D. (2010), HESS Opinions „A random walk on water”, *Hydrology and Earth System Sciences*, 14, 585–601.
- Koutsoyiannis, D., A. Efstratiadis, N. Mamassis, és A. Christofides (2008), On the credibility of climate predictions, *Hydrological Sciences Journal*, 53, 671–684.
- Kuczera, G. (1982), On the relationship between the reliability of parameter estimates and hydrologic time series data used in calibration, *Water Resources Research*, 18(1), 146 – 154.
- Kuczera, G., D. Kavetski, S. Franks, és M. Thyer (2006), Towards a Bayesian total error analysis of conceptual rainfall-runoff models: Characterising model error using storm-dependent parameters, *Journal of Hydrology*, 331(1-2), 161 – 177, doi:doi:10.1016/j.jhydrol.2006.05.010.
- Ludwig, R., I. May, R. Turcotte, L. Vescovi, M. Braun, J.-F. Cyr, L.-G. Fortin, D. Chaumont, S. Biner, I. Chartier, D. Caya, és W. Mauser (2009), The role of hydrological model complexity and uncertainty in climate change impact assessment, *Advances in Geosciences*, 21, 63–71.
- Mantovan, P., és E. Todini (2006), Hydrological forecasting uncertainty assessment: Incoherence of the GLUE methodology, *Journal of Hydrology*, 330(1-2), 368–381, doi:10.1016/j.jhydrol.2006.04.046.
- McNair, J. N., M. R. Sesselmann, S. T. Kendall, L. C. Gereaux, A. D. Weinke, és B. A. Biddanda (2015), Alternative approaches for estimating components of lake metabolism using the free-water dissolved-oxygen (FWDO) method, *Fundamental and Applied Limnology / Archiv für Hydrobiologie*, 186(1), 21–44, doi:10.1127/fal/2015/0626.
- Merz, R., G. Blöschl, és J. Parajka (2006), Spatio-temporal variability of event runoff coefficients, *Journal of Hydrology*, 331(3-4), 591–604, doi: 10.1016/j.jhydrol.2006.06.008.

- Merz, R., J. Parajka, és G. Blöschl (2011), Time stability of catchment model parameters: Implications for climate impact analyses, *Water Resources Research*, 47(2), doi:10.1029/2010wr009505.
- Montanari, A., és E. Toth (2007), Calibration of hydrological models in the spectral domain: An opportunity for scarcely gauged basins?, *Water Resources Research*, 43, W05434, doi:10.1029/2006WR005184.
- Nash, J., és J. Sutcliffe (1970), River flow forecasting through conceptual models part i — a discussion of principles, *Journal of Hydrology*, 10(3), 282–290, doi:10.1016/0022-1694(70)90255-6.
- Nau, R. F. (2001), De Finetti was right: Probability does not exist, *Theory and Decision*, 51(2/4), 89–124, doi:10.1023/a:1015525808214.
- Odum, H. T. (1956), Primary production in flowing waters, *Limnology and Oceanography*, 1(2), 102–117, doi:10.4319/lo.1956.1.2.0102.
- OECD (2002), *OECD Guidelines for the Testing of Chemicals, Section 3. Test No. 308: Aerobic and Anaerobic Transformation in Aquatic Sediment Systems*, OECD Publishing, doi:10.1787/9789264070523-en.
- OECD (2004), *OECD Guidelines for the Testing of Chemicals, Section 3. Test No. 309: Aerobic Mineralisation in Surface Water – Simulation Biodegradation Test*, OECD Publishing, doi:10.1787/9789264070547-en.
- Pilkey, O. H., és L. Pilkey-Jarvis (2007), *Useless Arithmetic – Why Environmental Scientists Can't Predict the Future*, 248 pp., Columbia University Press.
- Prudhomme, C., és H. Davies (2009), Assessing uncertainties in climate change impact analyses on the river flow regimes in the uk. part 2: future climate, *Climatic Change*, 93(1-2), 197–222.
- Reichert, P., és J. Mieleitner (2009), Analyzing input and structural uncertainty of nonlinear dynamic models with stochastic, time-dependent parameters, *Water Resources Research*, 45(10), doi:10.1029/2009wr007814.
- Reichert, P., és N. Schuwirth (2012), Linking statistical bias description to multiobjective model calibration, *Water Resources Research*, 48(9), doi:10.1029/2011wr011391.
- Romanowicz, R. J., P. C. Young, és K. J. Beven (2006), Data assimilation and adaptive forecasting of water levels in the river severn catchment, united kingdom, *Water Resources Research*, 42(6), doi:10.1029/2005wr004373.

Irodalomjegyzék

- Rybicki, G. B., és W. H. Press (1995), A class of fast methods for processing irregularly sampled or otherwise inhomogeneous one-dimensional data, *Physical Review Letters*, 74, 1060 – 1063.
- Shrestha, P., T. Junker, K. Fenner, S. Hahn, M. Honti, R. Bakkour, C. Diaz, és D. Hennecke (2016), Simulation studies to explore biodegradation in water–sediment systems: From OECD 308 to OECD 309, *Environmental Science & Technology*, 50(13), 6856–6864, doi:10.1021/acs.est.6b01095.
- Solomon, C. T., D. A. Bruesewitz, D. C. Richardson, K. C. Rose, M. C. V. de Bogert, P. C. Hanson, T. K. Kratz, B. Larget, R. Adrian, B. L. Babin, C.-Y. Chiu, D. P. Hamilton, E. E. Gaiser, S. Hendricks, V. Istvánovics, A. Laas, D. M. O'Donnell, M. L. Pace, E. Ryder, P. A. Staehr, T. Torgersen, M. J. Vanni, K. C. Weathers, és G. Zhu (2013), Ecosystem respiration: Drivers of daily variability and background respiration in lakes around the globe, *Limnology and Oceanography*, 58(3), 849–866, doi:10.4319/lo.2013.58.3.0849.
- Somlyódy, L., és G. van Straten (Szerk.) (1986), *Modeling and Managing Shallow Lake Eutrophication – With Application to Lake Balaton*, 386 pp., Springer Berlin Heidelberg, doi:10.1007/978-3-642-82707-5.
- Sorooshian, S., és J. A. Dracup (1980), Stochastic parameter estimation procedures for hydrologic rainfall-runoff models: Correlated and heteroscedastic error cases, *Water Resources Research*, 16(2), 430–442, doi:10.1029/wr016i002p00430.
- Spear, R. (1980), Eutrophication in Peel inlet–II. identification of critical uncertainties via generalized sensitivity analysis, *Water Research*, 14(1), 43–49, doi:10.1016/0043-1354(80)90040-8.
- Staehr, P. A., D. Bade, M. C. V. de Bogert, G. R. Koch, C. Williamson, P. Hanson, J. J. Cole, és T. Kratz (2010), Lake metabolism and the diel oxygen technique: State of the science, *Limnology and Oceanography: Methods*, 8(11), 628–644, doi:10.4319/lom.2010.8.0628.
- Staehr, P. A., J. M. Testa, W. M. Kemp, J. J. Cole, K. Sand-Jensen, és S. V. Smith (2011), The metabolism of aquatic ecosystems: history, applications, and future challenges, *Aquatic Sciences*, 74(1), 15–29, doi:10.1007/s00027-011-0199-2.
- Staehr, P. A., L. S. Brighenti, M. Honti, J. P. A. Christensen, és K. C. Rose (2016), Global patterns of light saturation and photoinhibition of lake primary production, *Inland Waters*, 6(4), 593–607, doi:10.5268/IW-6.4.888.

- Stedinger, J. R., R. M. Vogel, S. U. Lee, és R. Batchelder (2008), Appraisal of the generalized likelihood uncertainty estimation (GLUE) method, *Water Resour. Res.*, *44*, W00B06, doi:10.1029/2008WR006822.
- Streeter, M. W., és E. B. Phelps (1925), A study of the pollution and purification of the ohio river, iii. factors concerned in the phenomena of oxidation and reaeration, *U.S. Pubic Health Serv Bull*, *146*, 35–42.
- Stuart, A., és J. Ord (1994), *Kendall's Advanced Theory of Statistics, Volume 1: Distribution Theory*, Wiley.
- ter Horst, M. M., és A. A. Koelmans (2016), Analyzing the limitations and the applicability domain of water–sediment transformation tests like OECD 308, *Environmental Science & Technology*, *50*(19), 10,335–10,342, doi: 10.1021/acs.est.6b02906.
- Usmani, R. (1994), Inversion of Jacobi's tridiagonal matrix, *Comput. Math. Appl.*, *27*, 59 – 66.
- Van de Bogert, M. C., S. R. Carpenter, J. J. Cole, és M. L. Pace (2007), Assessing pelagic and benthic metabolism using free water measurements, *Limnology and Oceanography: Methods*, *5*(5), 145–155, doi:10.4319/lom.2007.5.145.
- van Straten, G., és K. J. Keesman (1991), Uncertainty propagation and speculation in projective forecasts of environmental change: A lake-eutrophication example, *Journal of Forecasting*, *10*(1-2), 163–190, doi:10.1002/for.3980100110.
- Villarini, G., P. V. Mandapaka, W. F. Krajewski, és R. J. Moore (2008), Rain-fall and sampling uncertainties: A rain gauge perspective, *J. Geophys. Res.*, *113*(D11), doi:10.1029/2007jd009214.
- Vogel, R. M., és A. Sankarasubramanian (2003), Validation of a watershed model without calibration, *Water Resources Research*, *39*(10), 1292 – 1298, doi: 10.1029/2002WR001940.
- Vrugt, J. A., C. J. F. ter Braak, M. P. Clark, J. M. Hyman, és B. A. Robinson (2008), Treatment of input uncertainty in hydrologic modeling: doing hydrology backward with Markov chain Monte Carlo simulation, *Water Resources Research*, *44*, W00B09, doi:10.1029/2007WR006720.
- Wagener, T., M. J. Lees, és H. S. Wheater (2002), A toolkit for the development and application of parsimonious hydrological models, in *Mathematical Models of Large Watershed Hydrology*, edited by V. P. Singh és D. K. Frevert, fej. 4, p. 914, Water Resource Publications LLC., Highlands Ranch, CO, USSA.

Irodalomjegyzék

- Wang, Q. J., D. L. Shrestha, D. E. Robertson, és P. Pokhrel (2012), A log-sinh transformation for data normalization and variance stabilization, *Water Resources Research*, 48(5), doi:10.1029/2011wr010973.
- Westerberg, I., J.-L. Guerrero, P. Younger, K. Beven, J. Seibert, S. Halldin, J. Freer, és C.-Y. Xu (2011), Calibration of hydrological models using flow-duration curves, *Hydrology and Earth System Sciences*, 15, 2205–2227, doi: 10.5194/hess-15-2205-2011.
- Wilby, R., és I. Harris (2006), A framework for assessing uncertainties in climate change impacts: Low-flow scenarios for the river thames, uk, *Water Resources Research*, 42(2), W02419, doi:10.1029/2005WR004065.
- Xu, C.-Y. (1999), Climate change and hydrologic models: A review of existing gaps and recent research developments, *Water Resources Management*, 13, 369–382.
- Yang, J., P. Reichert, K. C. Abbaspour, és H. Yang (2007), Hydrological modelling of the chaohe basin in china: Statistical model formulation and bayesian inference, *Journal of Hydrology*, 340(3-4), 167–182, doi: 10.1016/j.jhydrol.2007.04.006.
- Zambrano-Bigiarini, M. (2010), On the effects of hydrological uncertainty in assessing the impacts of climate change on water resources, Phd thesis, University of Trento, Italy.

Köszönetnyilvánítás

Köszönöm Istvánovics Vera mindenre kiterjedő segítségét és Józsa János kitartó biztatását. Köszönöm Kathrin Fennernek, Christian Stammnak, Peter Reichertnek és Somlyódy Lászlónak az inspiráló együttműködést.