

BAYESI MÓDSZEREK A VÍZI KÖRNYEZET MODELLEZÉSÉBEN

avagy a modellezés elkerülhetetlen
szubjektivitása

Honti Márk
MTA Doktori Eljárás Tézisei
Budapest, 2020.

“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 ¹

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

1. ELŐZMÉNYEK ÉS CÉLKITŰZÉS

BAYESI MODELL- KALIBRÁCIÓ

A vízi környezet kutatásának és szabályozásának alapvető segítő eszközei a matematikai modellek. Ezek a környezeti rendszerek rendkívül összetett, fizikai, kémiai, ökológiai és gyakran társadalmi vonatkozásokkal bíró, számtalan kölcsönhatást tartalmazó, változatos szerveződések, melyek teljes megismerésére nincs mód. A modellek tudományos létjogosultsága többértű. Egyrészt a matematikai modellezés segít megjósolni 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.

A modellezés a nem kutatási célú alkalmazásokban is központi szerepet tölt be: környezeti hatásvizsgálatokban, laboratóriumi kísérletek eredményeinek kinyerésében, távérzékeléssel vagy nagy időbeli sűrűségű, automatikus műszerekkel begyűjtött óriási adatbázisok minőségellenőrzésében és értelmezésében.

Kész modellek használói gyakran objektív igazságnak tekintik a modell eredményeit, különösen akkor, ha a modell

az adott szakterületen széles körűen elfogadott és régóta használt. Ezzel szemben a környezeti modellek a vizsgált rendszerek sajátosságai miatt olyan absztrakt állításokból épülnek fel, melyek nem lehetnek általánosan érvényesek, így a modellek eredményei sem tekinthetők objektívnek. A vízi környezet modellezésében ritkán találkozhatunk bárhol és bármikor érvényes, precízen ismert mennyiségekkel és állandókkal, így a modelleket használat előtt ezen rosszul definiált mennyiségek beállításával az adott rendszerre kell igazítani, vagyis kalibrálni kell. A kalibráció sikeressége az igazolás során vizsgálandó, azaz a kalibrált modellt a kalibráció során fel nem használt adatokkal tesztelnünk kell. A tapasztalat szerint a modellek még ezután is számottevő mértékű bizonytalansággal rendelkeznek, vagyis nem pontosan szimulálják a célrendszer viselkedését. Ezt a pontatlanságot a bizonytalanság-vizsgálat során számszerűsíteni kell, mivel mértéke alapvetően befolyásolja a modell eredményeinek hihetőségét. A modellezés folyamatában a kalibráció és a bizonytalanságvizsgálat rejt technikai nehézségeket, az igazolás matematikailag egyszerű (bár gyakorlatilag nehéz eldönteni, hogy a modell tényleg megfelelő-e).

A kalibráció során a modell állandó tulajdonságait leíró paramétereket úgy változtatjuk, hogy a modell viselkedése a lehető legjobban tükrözze a modellezett rendszerre vonatkozó megfigyeléseket. A legjobb egyezéshez tartozó paraméterkombináció(k) jelenti(k) a paraméterek optimális, legvalószínűbb értékét. A bizonytalanság-vizsgálat egyik célja azon paraméter-készletek meghatározása, melyek nem szignifikánsan valószínűtlenebbek, mint maga az optimális megoldás (Hornberger és Spear, 1981; Beven és Binley

1992). Ezután a kapott paraméter-készletek alapján számszerűsíthető a paraméterek bizonytalanságának hatása a modell kimenetére.

A problémát sokszor mindkét folyamatban a modellparaméterek és a modellstruktúra nehéz felismerhetősége okozza (Godfrey és DiStefano 1985). A környezeti modellek rendszerint túl sok paraméterrel rendelkeznek, vagyis számos paraméterkombináció vezethet ugyanahhoz a végeredményhez. Ennek oka, hogy a valós rendszerre vonatkozó megfigyeléseink a modell összetettségéhez képest korlátosak (Jakeman és Hornberger, 1993; Beck 1994).

A paraméterek és a modellszerkezet felismerhetetlensége tehát hátráltatja a modellezést. Véleményem szerint a különböző felismerhetőségi problémák mérséklése jelenleg a modellezés egyik legfontosabb feladata.

A paraméterek felismerhetetlenségén a kalibrációs eljárásokon belül nem lehet segíteni, egyéb információforrás(ok) bevonására van szükség. A bayesi statisztika lehetővé teszi a megfigyelési adatokon túl a paraméterek értékére vonatkozó egyéb információ bevonását. A hagyományos kalibráció azt feltételezi, hogy a kalibrációban csak a modell hibája véletlenszerű, a paraméterek nem valószínűségi változók. Ezért hagyományosan statisztikai megállapítások csak a hibával kapcsolatban tehetők. Ezzel szemben a bayesi statisztikán alapuló kalibráció a valószínűség kiterjesztett értelmezésével a modell paramétereit és strukturális bizonytalanságát is bevonja a statisztikailag kezelhető problémák körébe.

A klasszikus valószínűségi értelmezéstől eltérően a bayesi valószínűség nemcsak tényleges valószínűségi változók esetében, hanem szinte bármivel kapcsolatban értelmezhető. A bayesi 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 megfigyelési adatoktól független *prior* valószínűséget és az adatoktól is függő *poszterior* valószínűséget. A kettő közötti eltérés az adatokból leszűrhető információ hatása a tudásunkra.

A megfigyelésektől függő feltételes valószínűséget a valószínűségszámításból ismert Bayes-tétel alapján számíthatjuk ki — némi átalakítással:

$$P(\theta | Y_O) \propto L(\theta, Y_O) \cdot P(\theta) \quad (1)$$

ahol feltételezzük, hogy a modell szerkezete adott és így a θ paraméterkészlet egyértelműen leírja a modell viselkedését, Y_O a rendszer megfigyelt viselkedése, $L(\theta, Y_O)$ a paraméterek likelihood függvénye, $P(\theta)$ a prior, $P(\theta | Y_O)$ pedig a poszterior valószínűség.

A bayesi kalibráció célja a legnagyobb poszterior valószínűségű modellparaméterek megtalálása. A poszterior valószínűség a likelihood és a prior valószínűség közti kompromisszumnak tekinthető. Emiatt — megfelelően informatív prior eloszlások esetén — bayesi kalibrációval bármilyen paraméter-felismerhetőségi probléma megoldható, hiszen a prior akkor is meghatározható egy

optimális értéket, ha a modell szempontjából a paraméter teljesen érdektelen.

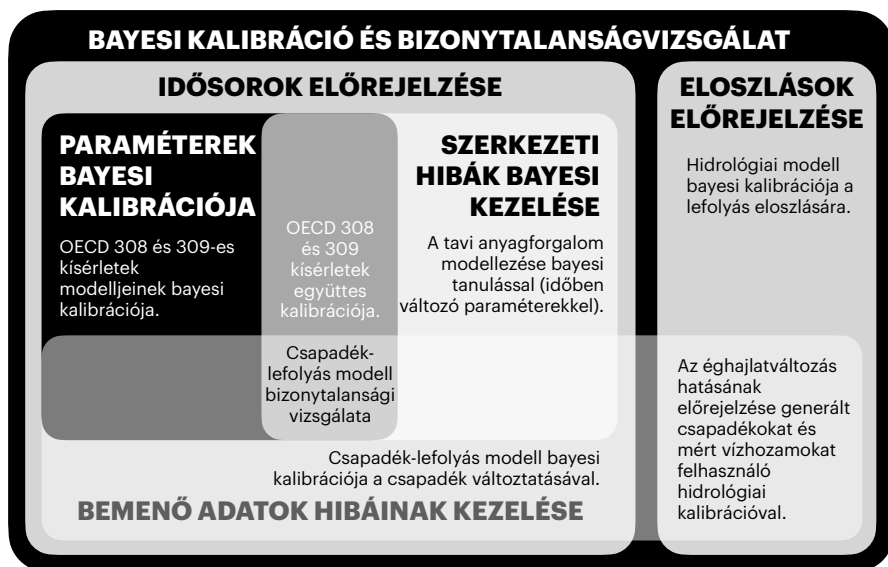
A bayesi statisztika nemcsak a paraméterekre alkalmazható. A vízi környezet szimulációjában szokásos anyagmérleg-alapú modellek a szerkezeti és egyéb nem-parametrikus hibák miatt általában szisztematikus eltéréseket mutatnak a mérési adatsor bizonyos szakaszaitól, ami szöges ellentétben áll a hagyományos modellkalibrációban alkalmazott véletlenszerű hibamoddellel (Sorooshian és Dracup 1980). Kennedy és O'Hagan (2001) kimutatták, hogy a pl. hidrológiai gyakorlatban régóta használt autoregresszív hibamoddell megegyezik a szisztematikus hibák bayesi leírásával. A paraméterek és a szerkezeti eredetű bizonytalanságok bayesi leírását párosítva megcélózható a modellek teljes és konzisztens bayesi kalibrációja és bizonytalanságvizsgálata, amely kiküszöbölheti a nem formális megoldások (pl. Beven és Binley 1992; Gupta és mtsai. 1998) buktatóit. A gyakorlati megvalósításhoz azonban számtalan eset-specifikus nehézséget kell megoldani, amit bizonyít a próbálkozások népes sora (pl. Kavetski és mtsai. 2006; Kuczera és mtsai. 2006; Reichert és Schuwirth 2012).

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

2. FEJLESZTÉSEK

A FELISMERHETŐSÉG JAVÍTÁSA

A bayesi megközelítés a különböző felismerhetőségi problémák esetében másképpen segíthet. Az 1. ábra összefoglalja az általam alkalmazott, ill. továbbfejlesztett bayesi kalibrációs és bizonytalanságvizsgálati módszereket.



1. ábra: Bayesi módszerek a kalibráció és bizonytalanságvizsgálat térképén.

A paraméterek bayesi valószínűségi változónak tekintése (klasszikus bayesi kalibráció) csökkenti a paraméterek bizonytalanságát, ami nagyon fontos az úgynevezett „inverz” modellezési gyakorlatban, vagyis amikor a modell célja a rendszer megfigyelt viselkedése alapján a paraméterek értékének beazonosítása². Ilyen gyakorlat pl. a potenciálisan mikroszennyező gyógyszer/peszticid hatóanyagok környezeti perzisztencia-vizsgálatában az OECD 308 (2002) és 309 (2004) szabvány által leírt szimulációs laboratóriumi kísérletek értelmezése. Bemutattam, hogy a modellezéssel meghatározott paraméterek bizonytalansága jelentősen csökkenthető, ha a kísérlettől független forrásból származó információk alapján meghatározott prior eloszlásokat alkalmazunk a kalibrációban (Honti és Fenner, 2015).

Ha a prior információk nem elégségesek a paraméterek bizonytalanságának csökkentésében (pl. azért, mert a paraméterek jelentős részére nem áll rendelkezésre semmilyen független becslés), akkor a különböző adottságú, de mégis rokon rendszerek (pl. egyazon hatóanyagra ugyanazzal az üledékkel elvégzett OECD 308-as és 309-es kísérlet) együttes modellezése is csökkentheti a paraméterek bizonytalanságát (Honti és mtsai. 2016a). Ez

² Az „inverz” modellezés gyakorlata elvileg hibás, mivel a modell paramétereinek esetlegesen tulajdonított fizikai/kémiai/ökológiai jelentés a kalibráció folyamán a különféle hibák kompenzálása céljából torzul, vagy teljesen elvész, vagyis a kalibrált paraméter-értékeknek nincs jelentésük (Mantovan és Todini, 2006). De ettől még ez a gyakorlat vitathatatlanul létezik (pl. tavi anyagforgalom vizsgálata) és néha fontos döntéseket hoznak meg vele (pl. a később megemlített perzisztencia-vizsgálatban).

a megközelítés azt használja ki, hogy az egyes folyamatok — és paraméterek — felismerhetősége az egyes rendszerekben más és más, vagyis több rendszer együttes bevonása összességében erősebb kondicionálást jelent, mint a rendszerek külön kalibrációja.

A modellek kalibrációja nemcsak a paraméterek miatt problémás. A kalibráció során egy hibákkal terhelt bemenő adatokat használó, hibás szerkezetű modellt próbálunk ráilleszteni szintén hibákkal terhelt megfigyelési adatokra (vö. „mission impossible”). A hagyományos kalibrációs eljárás ezek közül csak a megfigyelési adatok véletlenszerű hibáit ismeri el.

Nem eldönthető, hogy a szimuláció és a megfigyelések közötti eltérésekben mekkora szerepet játszanak a hibás bemenő adatok, illetve a hibás modellszerkezet. A hibák eredetének szétválasztáshoz ismét bayesi kalibrációra és priorok formájában bevont elvárásokra van szükség. Bemutattam (Honti és mtsai. 2011), hogy egy csapadék-lefolyás modell hibája teljes egészében levezethető akár a bemenő adatok hibáiból (pl. a Kirchner-féle „fordított hidrológia” megközelítésével [Kirchner, 2009]), de a strukturális bizonytalanságból is (pl. Reichert és Schuwirth 2012).

A szisztematikus hibák Kennedy-O’Hagan (2001) által kidolgozott bayesi leírása nem alkalmazható abban az esetben, ha a hibafolyamatot időszakos, de jelentős lökések érik a bemenő adatok hibái miatt, hiszen ekkor a szisztematikus hibák eloszlása időről időre változik. Ezért kifejlesztettem a zavart Ornstein-Uhlenbeck statisztikai folyamaton alapuló bayesi hibamodellt, mely csapadék-

lefolysis modelleknel egy idoben képes a szerkezeti, bemenő és megfigyelési adathibák kezelésére (Honti és mtsai. 2013). Az új hibamoddell a csapadék-lefolysis modellek teljes bayesi kalibrációja és bizonytalanság-vizsgálata az idősorok transzformációja nélkül is végrehajtható. Hosszú idősorok esetén a többváltozós eloszlásokat használó, a szisztematikus hibát is tartalmazó hibamoddellik likelihood-számítása technikailag megterhelő, mivel az idősorok hosszával megegyező oldalméretű mátrixok invertálására van szükség (lásd pl. Reichert és Schuwirth 2012). A zavart Ornstein-Uhlenbeck hibamoddellhez kidolgoztam egy, a modell korlátozott hosszúságú memóriáját kihasználó, kernel-alapú iteratív eljárást, mellyel a hosszú idősorok likelihood számítása pár tucat sorból/oszlopból álló mátrixok gyors invertálásával végrehajtható, ellentétben a korábbi megoldásokkal (pl. Reichert és Mieleitner 2009).

A modellezésben jelenlévő számos hibaforrás miatt az idősorok valós bizonytalanságát leírni képes hibamoddellik (mint pl. a csapadék-lefolysis modellezésben a zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamatot használó hibamoddell) meglehetősen bonyolultak. Ráadásul nincs is mindig szükség rájuk. A tavi anyagforgalom modellezésében bemutattam, hogy a rövidtávú idősor-előrejelzéseknél jó megoldás lehet a bayesi tanulás és az időben változó paraméterek alkalmazása (Honti és Istvánovics 2016, Honti és mtsai. 2016b, Istvánovics és Honti 2017). Időben változó paramétereket korábban is alkalmaztak környezeti modellek kalibrációjára, de általában bayesi tanulás nélkül (pl. Kuczera és mtsai 2006, Yang és mtsai. 2007) A bayesi tanulás az (1) egyenlet iteratív alkalmazását jelenti mozgó időablakokban,

vagyis a korábbi iteráció poszteriorja lesz az aktuális modell-illesztés priorja. Az időben változó paramétereknél a szisztematikus hibákat kizárólag a paraméterek változékonyságának tulajdonítjuk és a modell előrejelzései a tanulásra felhasznált időablak környezetében lesznek érvényesek. A paraméterek változékonyságából viszont becsülni tudjuk a rendszer teljes variabilitását is. A tavi anyagforgalmi modellek bayesi bizonytalanságvizsgálata kimutatta, hogy csak oldott oxigén mérésével nem lehet sem a bruttó elsődleges termelés mértékét (Istvánovics és Honti 2017), sem a nettó elsődleges termelés előjelét (Honti és Istvánovics 2019) egyértelműen meghatározni. Nagy gyakoriságú fitoplankton-mérések bevonása javítja a folyamatok felismerhetőségét (Honti és mtsai. 2016b), de a kellő pontosság eléréshez a víz-levegő és üledék-levegő határfelületeken zajló folyamatok mérése is szükséges lenne (Honti és Istvánovics 2019).

Az éghajlatváltozás hatásainak előrejelzésénél rendkívül hosszán extrapolálunk a jövőbe. Mivel ilyenkor a külső peremfeltételek is statisztikai előrejelzéseken alapulnak, gyakran nincs értelme a jövőben bekövetkező események sorrendiségét vizsgálni, vagyis nem az idősorok, hanem a statisztikai eloszlásuk lesz az előrejelzés tárgya. Ha a környezeti modellünk finom időlépésekben jelez előre, egy hosszú előrejelzési idősor eloszlása egyáltalán nem tűnik bizonytalannak a nagy elemszám miatt. Így mindig közel 0 valószínűségű lesz a mért és modellezett eloszlás egyezése. Kifejlesztettem egy olyan közelítő likelihood függvényt, melyben - az idősor-hibamodellekhez hasonlóan - állítható a bizonytalanság mértéke, így az eloszlásra illesztés végrehajtható (Honti és mtsai. 2014). Bemutattam, hogy

eloszlásra illesztéssel a modellezett éghajlati peremfeltételek szisztematikus eltérései is eredményesen korrigálhatóak.

A vízi környezet modellezésében több területen alkalmazott bayesi modellkalibráció és bizonytalanság-vizsgálat tanulságai a következőkben foglalhatók össze:

- A bayesi következtetés matematikai keretet ad a modellek felismerhetetlenségének csökkentéséhez egyébként, 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 mindig 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 az alkalmazott illeszkedési mutatóktól, valamint a felhasznált idősor hosszától, felbontásától, a figyelembe vett statisztikai jellemzőktől, és ezek súlyozásától.
- A modell szerkezete, a hibamodell és a priorok tehát legalább részben szubjektív elemek, melyek alapvetően befolyásolják a modellezés eredményét.

3. KÖVETKEZTETÉSEK

A SZUBJEKTIVITÁS ELKERÜLHETETLENSÉGE

A bayesi kalibráció és bizonytalanságvizsgálat végeredményei, vagyis a kalibrált paraméterek és a modell lehetséges kimenetei a bayesi megközelítés miatt bizonyosan szubjektívek lesznek. Természetesen minden tudományos eredmény szubjektív, hiszen az objektivitás az adott eredmény megkérdőjelezhetetlenségét és későbbi felülbíráhatatlanságát jelentené. A szubjektivitás mértéke viszont tág határok között változhat. Itt a szubjektivitás olyan mértékéről van szó, ahol az eredmény már kimutathatóan függ a modellezést végző személytől. A modellezés szubjektivitása itt azért ennyire nyilvánvaló, mert a bayesi eljárások azt explicit módon vállalják, és módszereket nyújtanak a szubjektivitás és a bizonytalanság propagálására a kiinduló adatoktól és hipotézisektől egészen a végeredményig.

A mindent átszövő szubjektivitás azonban nem a bayesi módszerekből ered, 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 szubjektivitás és a gyakran meglepő mértékű bizonytalanság ellentétben áll a modellek objektivitásáról 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; objektivitása megkérdőjelezhető. A bayesi módszerek alkalmazásával a modellezés átláthatósága 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 bizonyítják, hogy az eredmény még az általában bayesi eljárásra lefordítható szokásos kalibrációs módszerek követésével sem lesz objektív.

A bayesi technikák alkalmazása a hagyományos kalibrációs eljárásokhoz 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 szubjektívitas és a bizonytalanság bizonyos mértékig csökkenthető, főleg több információ bevonásával, de teljesen nem iktatható ki. Ennek oka az, hogy az egyszerűsítés modellezési alapelve és környezeti rendszerek bonyolultsága, valamint teljes megismerhetetlensége miatt mindig hatalmas szakadék fog fennállni a tényleges és a modell-rendszer összetettsége között. A strukturális bizonytalanság (a megismerhetetlenség miatt) és túlszerűsítés (a modellek korlátos bonyolultsága miatt) egyenesen vezet a bizonytalansághoz és a felismerhetetlenséghez. Ezek miatt viszont a modellezési feladatokat csak szubjektív módon lehet megoldani. A szubjektívitas 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 szubjektívitas jelenléte csak arra figyelmeztet, hogy ne fogadjuk el megdönthetetlen igazságnak azt, ami a modellből 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.

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.

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 modellszerkezetenként 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 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 heteroszcedaszticitását, amely számos környezeti modellezési feladatban jellemző a modellek súlyos strukturális hiányosságai miatt. A zavarás jelentősége attól függ, hogy a modellezendő folyamat milyen élelken 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 tanulással 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 hibamodell 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)

KAPCSOLÓDÓ PUBLIKÁCIÓK

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, *Hydrology and Earth System Sciences*, 17(10), 4209-4225, doi:10.5194/hess-17-4209-2013.



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. 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, *Hydrology and Earth System Sciences*, 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.



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.



IRODALOMJEGYZÉK

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.

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.

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.

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.

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.

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.

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.

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.

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.

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.

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.

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.

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.

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.

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.