

A leggyakoribb érték (MFV) módszerének alkalmazása a hidrogeológiai modellezésben

Szűcs Péter

Hidrogeológiai-Mérnökgeológiai Intézeti Tanszék, Miskolci Egyetem, 3515. Miskolc-Egyetemváros I

Zákányi Balázs

Hidrogeológiai-Mérnökgeológiai Intézeti Tanszék, Miskolci Egyetem, 3515. Miskolc-Egyetemváros I

1. BEVEZETÉS

A leggyakoribb érték (angolul „Most Frequent Value”, MFV eljárás) módszerét (Steiner (ed) 1991, 1997) a Miskolci Egyetem Geofizikai Tanszékén dolgozták ki. Dr. Steiner Ferenc professzor úr által vezetett kutatócsoport dolgozta ki az elméleti háttérét ennek az igen robusztus és hatékony geostatisztikai eljárásnak mintegy 30 éve. Ma már a eljárást széles körben sikerrel alkalmazzák különböző földtudományi problémák megoldására. A leggyakoribb érték módszer elve az információ veszteség (I-divergencia) minimalizálásából ered. Az MFV módszernek jelentős előnyei vannak a „maximum likelihood” elvből kiinduló klasszikus statisztikai módszerekkel szemben. Az MFV algoritmus és a globális optimalizáció együttes alkalmazása egy hatékony új eszköz lehet a hidrogeológia, illetve a vízföldtani modellezés inverz feladatainak megoldásában (Szűcs et al. 2006). A javasolt új eljárás alkalmazhatóságát és előnyeit szintetikus és valós adatrendszerrel felhasználásával mutatjuk be.

A különböző típusú vízföldtani modellezés egyik fő célja egy olyan jól működő modell felállítása, ami a hidrogeológiai megfigyeléseket kellő mértékben visszaadja. Matematikai megközelítésből optimalizációt végzünk, hogy megtaláljuk a megoldást (Lee 1999). Ez alapján a hidrogeológiai modell paramétereinek az optimális értékét határozzuk meg az inverz módszerrel. Az inverz folyamat során egy speciális hiba függvényt, vagy más néven egy célfüggvényt minimalizálunk, ami a különbséget vagy eltérést jellemzi a mért és a modellparaméterekkel számított adatok között. Földtudományi alkalmazásokban a célfüggvénynek általában számos minimuma és maximuma van a többdimenziós paraméterterben. A klasszikus, ún. lokális minimumhely kereső algoritmusok sokszor elakadnak valamelyik lokális minimumban, ahelyett hogy megtalálnák a globális minimumot. (Sen & Stoffa 1995). A globális optimalizációs módszerek alkalmazása éppen ezért lehetne széleskörű a különböző hidrogeológiai problémák megoldásában.

Legtöbb esetben a globális optimalizációs módszerek Monte Carlo becslésen alapulnak. A genetikus algoritmus mellett (GA), a Simulated Annealing (SA) globális optimalizáció az egyik legelterjedtebben alkalmazott minimalizálási eljárás a földtudományi és a mérnöki gyakorlatban. Az SA algoritmus könnyen programozható, és ma már még az ismeretlen paraméterek nagy száma esetén is kellően gyors.

A modell paramétereknek bizonyos értékeket adva a számított vagy teoretikusan mért adatokat származtatunk. Ez képezi a direkt problémát. A direkt feladat megoldása szolgáltatja a matematikai kapcsolatot a modell paraméterek és a számított vagy szimulált adatok között. A pontos direkt feladat megoldás alapvető fontosságú egy hatékony inverz algoritmushoz. Numerikus módszerek alkalmazása nagy szerepet kap a kívánt pontosságú direkt feladat számításban.

2. AZ INVERZ FELADAT A HIDROGEOLÓGIAI MODELLEZÉSBEN

A vízbázis-védelmi programokban vagy egyéb területeken alkalmazott hidrogeológiai inverz feladat során egy szintetikus adathalmazt állítunk elő az előzetesen felvett modellparaméterek segítségével. Az így számított adatokat hasonlítjuk össze a mért adatokkal. Amennyiben az illeszkedés mértékét elfogadhatónak találjuk, az aktuális modellparamétereket megoldásként fogadjuk el. Ellenkező esetben, a modell paramétereket módosítjuk, hogy egy új számított adathalmazt állítsunk elő. Ezt követően az illesztést újra végrehajtjuk. Az egész procedúra így folytatódik, míg a mért és számított adatok közötti illeszkedés kielégítő nem lesz. Ilyen szempontból tehát az inverz feladat optimalizálást jelent. A célfüggvény értéke az alkalmazott inverz módszer megbízhatóságáról és pontosságáról szolgáltat információt. A legegyszerűbb inverz számításoknál lineáris kapcsolat áll fenn a mért adatok és modellparaméterek között. Sajnos ezek az egyszerű inverz problémák nagyon ritkák a hidrogeológiában, illetve a hidrodinamikai és transzport modellezés során.

Az esetek döntő többségében a hidrogeológiai modellezésben diszkrét adatokat használunk. A legegyszerűbb mód az adatainkat egy oszlopvektorba helyezni (Sen & Stoffa 1995):

$$d_{measured} = [d_1, d_2, d_3, \dots, d_{ND}]^T \quad (1)$$

ahol ND az adatok száma, T a mátrix transzponált műveletet jelenti. Hasonlóan a modell paramétereit is egy oszlopvektorba tehetjük:

$$m = [m_1, m_2, m_3, \dots, m_{NM}]^T \quad (2)$$

ahol NM a modellparaméterek számát jelenti. A számított adatokat egy g operátor függvény segítségével a direkt feladat megoldásaként kapjuk:

$$d_{cal} = g(m) \quad (3)$$

Amennyiben a kapcsolat a modellparaméterek és a számított adatok között nem lineáris, a Taylor soron alapuló linearizált módszerek vezethetők be a megoldás egyszerűsítésére. A Taylor-sor másod és magasabb rendű tagjait elhanyagolva a következő egyenletet kapjuk.

$$\Delta d = G_0 \Delta m, \text{ ahol } \Delta d = d_{measured} - d_{cal}, \text{ és } G_0 \text{ az érzékenységi mátrix.} \quad (4)$$

Az érzékenységi mátrix magában foglalja a számított adatok modellparaméterek szerinti parciális deriváltjait. Fontos kérdés annak tisztázása, hogy egyedi megoldás létezik e vagy sem (egzisztencia), és hogy a megoldás stabilnak tekinthető vagy nem (stabilitás és konvergencia). Az L_2 norma esetében a modell paraméterekre a megoldás a következő. A gyakorlatban a túlhatározott rendszerek alkalmazása a leggyakoribb (Sen & Stoffa 1995). Ebben az esetben a mért adatok száma (ND) nagyobb vagy sokkal nagyobb, mint a modellparaméterek száma (NM). Így az alábbi kifejezés nyerhető.

$$\Delta m_{est} = [G^T G]^{-1} G^T \Delta d \quad (5)$$

Gyakran előfordul, hogy a mért adatok egy diagonális W mátrixszal súlyozhatók, valamilyen egyéb többletinformáció alapján. Az elterjedt Marquardt–Levenberg algoritmust alkalmazva, az (5) egyenlet iterációs megoldása az alábbi módon módosítható (Marquardt 1970):

$$\Delta m_{est} = [G^T W G + \alpha I]^{-1} G^T W \Delta d \quad (6)$$

ahol α az ún. Marquardt paraméter, amely értéke fokozatosan tart nullához az iteráció során. Ezért a Marquardt–Levenberg módszer, amelyet gyakran Ridge-regresszióknak is neveznek, az iterációk kezdetén tulajdonképpen gradiens módszerként működik. Ezt követően fordul a Gauss–Newton módszerbe az optimális megoldás közelében. Annak ellenére, hogy a Marquardt–Levenberg algoritmus nagyobb stabilitást biztosít, a hatékonysága még mindig erősen függ a startmodell paramétereinek kezdeti értékétől.

Amennyiben a hidrogeológiai célfüggvénynek több lokális minimuma van, a fentebb említett lokális minimumhely kereső algoritmusok nem a globális minimumot szolgáltatják megoldásként “nem megfelelő” startmodell esetén. A következő egyszerű minimumhely kereső próbát végeztük el. Egy kétdimenziós szinusz kardinális hibafüggvényt definiáltunk a következőképpen:

$$z(x, y) = 1.1 - \sin c(x) \sin c(y) \quad (7)$$

A függvény által leírt felületnek számos lokális és csak egyetlen globális minimuma van az $x = 0$, $y = 0$ helyen. Ha a Levenberg–Marquardt algoritmust az $x = 3.5$ és $y = 0$ pontból indítjuk, az $x = 3.53$ és $y = 0$ helyen található lokális minimumot kapjuk megoldásként. A kísérletet többször megismételtük különböző kezdeti értékekkel, hogy leellenőrizzük a globális minimumkeresés hatékonyságát. A globális minimumot a Levenberg–Marquardt módszerrel csak akkor értük el, ha a kezdőpont a globális minimum körüli „völgy” oldalain belül volt. A Simulated Annealing algoritmus könnyen megoldja ezt a feladatot anélkül, hogy elakadna egy lokális minimumban.

3. GLOBÁLIS OPTIMALIZÁCIÓ, A „SIMULATED ANNEALING” MÓDSZERE

A genetikus algoritmus (GA) mellett, a Simulated Annealing (SA) vagy a „szimulált hűtés” módszerét széles körben alkalmazzák a globális minimumhely megtalálására a különböző mérnöki és természettudományi optimalizációs problémákban (Sen & Stoffa 1995). Kirkpatrick és társai (1983) megmutatták, hogy a Metropolis és társai (1953) által ajánlott fém olvadékok viselkedésének analógiájára felépített matematikai algoritmus olyan optimalizációs problémákra használható, ahol a minimalizálandó célfüggvény a fémek energiaállapotának felel meg, a kontroll paraméter pedig a hőmérsékletnek. Napjainkban számos újabb módosított módszere létezik a klasszikus Metropolis algoritmusnak. Ezek közül az Ingber (1989) által bevezetett Very Fast Simulated Annealing (VFSA), vagy magyarul a nagyon gyors szimulált hűtés módszer tűnik a leggyorsabbnak és leghatékonyabbnak sokváltozós problémák esetében.

A klasszikus Metropolis algoritmus előállítása egy adott hidrogeológiai problémára viszonylag egyszerű. A kezdeti modell paraméter vektort jelöljük m_i -vel, ekkor a célfüggvény (vagy hibanorma) $E(m_i)$ -ként adható meg. Ezt követően pedig egy új paraméter vektort (m_j) és a hozzá tartozó célfüggvényt $E(m_j)$ generálhatunk. A célfüggvény értékében történő változás a következőképpen írható fel:

$$\Delta E_{ij} = E(m_j) - E(m_i) \quad (8)$$

Ha $\Delta E_{ij} \leq 0$, az új m_j paraméter vektort minden esetben elfogadjuk. Ezzel szemben, ha $\Delta E_{ij} > 0$, az m_j paraméter vektor elfogadásának valószínűségét a következő egyenlet formájában adjuk meg:

$$P = \exp\left(-\frac{\Delta E_{ij}}{T}\right) \quad (9)$$

ahol T a hőmérsékletnek felel meg. Ezt az elfogadási feltételt Metropolis kritériumnak nevezzük. Ez a kritérium biztosítja annak a lehetőségét, hogy az algoritmus ne akadjon el a lokális minimum helyeken. A hőmérséklet az előre felvett hűtési ütemnek megfelelően követve csökkentjük. A jól megválasztott és megfelelő hűtési ütem garantálja a módszer konvergens viselkedését. A hűtési ütem tekintetében azonban a hőmérséklet csökkentésének helyes megválasztása nem könnyű feladat. Számos szerző bemutatta, hogy a hőmérséklet túl gyors csökkentése a célfüggvény lokális minimumhelyében való elakadást eredményezheti. Az ajánlott választás, ha az n -edik iterációban a hőmérséklet arányos $1/\ln(n+1)$ kifejezés értékével (Szűcs és Civan 1996).

Ingber (1989) módosította a Metropolis algoritmust, és bevezette a Very Fast Simulated Annealing (VFSA) módszert, amely sokkal rövidebb futási időt igényel sokparaméteres modellek esetén. Ebben az esetben az alapelv az, hogy minden egyes modell paraméternek különböző nagyságú tartománya van, amelyek különböző mértékben befolyásolják a hibafüggvényt.

4. A LEGGYAKORIBB ÉRTÉK MÓDSZERE (MFV)

Az optimalizálási módszeren kívül, a cél- vagy hibafüggvénynek szintén nagy szerepe van a hidrogeológiai inverzió vagy a hidrodinamikai és transzport modellezés során a modellparaméterek számításában. Az alkalmazott statisztikai norma meghatározza az optimalizálás hatékonyságát egy adott hibaeloszláshoz. Számos korábbi földtudományi alkalmazáson és példán keresztül bizonyítást nyert (Steiner 1972, Steiner 1988, Ferenczy et al 1990, Steiner és Hajagos 1994, Szűcs és Civan 1996), hogy a leggyakoribb érték elvének (MFV) alkalmazása számos előnyt nyújthat a hidrogeológiában, szemben a legkisebb négyzetes vagy egyéb hagyományos statisztikai módszerekkel. Ha a fentebb említett módon a mért és számított adatvektorok rendelkezésre állnak, akkor a különbség vektor elemeit a következőképpen definiálhatjuk:

$$X_i = d_i^{measured} - d_i^{cal} \quad (10)$$

Ezek után például egy általános hidrodinamikai modellezési probléma optimalizációja a következőképpen definiálható. A mért és számított vízszintek különbségének normája minimum kell, hogy legyen. A legtöbb esetben a legkisebb négyzetek elvét alkalmazzák. A klasszikus statisztika a normál eloszlás elvén alapul, amely matematikailag könnyen definiálható az X_i különbségvektorral: az a modell paraméter vektor a legjobb, amely teljesíti az alábbi feltételt:

$$\sum_{i=1}^{ND} X_i^2 = \text{minimum}. \quad (11)$$

Habár ez a minimum feltétel igen elterjedt, számos hátránya van a hatékonyság és rezisztencia vonatkozásában. Steiner (1965) vezette be a maximum reciprokok elvét a Miskolci Egyetemen. Ezen elv esetén az a modell paraméter vektor tekinthető a legjobbnak, amely az alábbi feltételt teljesíti:

$$\sum_{i=1}^{ND} \frac{1}{X_i^2 + S^2} = \text{maximum}. \quad (12)$$

ahol az S skála paraméter jellemzi a mérési hibát. Ha összevetjük a fentebb definiált elveket, akkor nyilvánvaló, hogy a (11) egyenlet a kieső adatokra igen érzékeny. Ha egy, vagy több X_i nagy mérési hibával terhelt, ez a körülmény bizonyos esetekben teljesen a valóságtól eltérő, félrevezető eredményhez vezethet. Ezzel szemben a (12) kifejezés értéke csak elhanyagolható mértékben változik nagyon nagy X_i különbség előfordulásakor. Ezt a tulajdonságot rezisztenciának nevezzük. Tehát a legkisebb négyzetek elve nem tekinthető rezisztensnek, míg a (12) egyenlettel egy rezisztens statisztikai eljárást kapunk.

A maximális reciprok összeg módszerét alkalmazva a Steiner Ferenc által vezetett geostatisztikai kutatócsoport kifejlesztette a leggyakoribb érték (MFV) eljárást (Steiner 1988 és 1990, Hajagos és Steiner 1991, Steiner (ed) 1991 és 1997). Egy statisztikai módszert akkor nevezhetünk "MFV" eljárásnak, ha az X_i eltéréseknek leggyakrabban kicsi (vagy közel nulla) értékei vannak. A (12) egyenlet feltétele biztosítja, hogy az X_i különbségek döntő többsége a lehető legkisebb legyen (nem számít, hogy közben néhány X_i érték nagyon nagy). Következésképpen olyan statisztikai eljárások, amelyek a (12) egyenletből származnak, MFV módszernek nevezhetők. Bebizonyítható, hogy a következő feltétel eredménye szintén az MFV eljárásba sorolható:

$$\prod_{i=1}^{ND} (X_i^2 + S^2) = \text{minimum.} \quad (13)$$

Egyetlen ismeretlen esetén, például ha a helyparamétert (T) kívánjuk meghatározni, mind a (12), mind a (13) egyenlet valóban a "leggyakoribb értéket" adja olyan vonatkozásban, hogy a d_i^{measured} mért értékek a T környezetében fordulnak elő leggyakrabban. (Ebben az esetben $X_i = d_i^{\text{measured}} - T$).

E témakörben megjelent legutóbbi könyv szerzői (Steiner (ed) 1997) az MFV eljárást "modern statisztikai módszereknek" hívják. Az biztos, hogy a "modern" jelző nem adja vissza hűen a közel négy évtized azon időtartamát, amelyen keresztül a kutatások és a módszer kifejlesztése folyt az MFV algoritmus megszületésétől kezdve (Steiner 1965). Sajnos csak kevés szakember tudja valójában mit jelent az MFV módszer. A klasszikus statisztika vezető szerepe még napjainkban is talán magyarázható annak a régi dogmának az elfogadásával, hogy "a hibák eloszlása mindig normális" (Steiner & Hajagos 1995). Szűcs (1994) bemutatta, hogy milyen félrevezető lehet a szakemberek részére, ha olyan statisztikai próbákat használnak, mint például a χ^2 -próba. A Monte Carlo szimulációk bebizonyították, hogy a χ^2 -teszt nem ajánlható a gyakorlatban előforduló földtudományi eloszlások normalitás vizsgálatára. Még ha a minták eléggé különböznek is a Gauss eloszlástól, a χ^2 -teszt elfogadja, mint normális eloszlásút a leggyakrabban alkalmazott magas szignifikancia szinteken. Ennek eredményként, amikor χ^2 -tesztet alkalmazunk, a Gauss anyaeloszlás látszólag domináns jelenléte hozzájárulhat a hagyományos (nem robusztus és rezisztens) statisztikai algoritmusok túléléséhez. Feltételezve a mérések normális eloszlását, a klasszikus becslések a „maximum likelihood” elvén alapulnak. Az MFV algoritmus egy teljesen más elvi megközelítést követ. Az MFV módszer az I-divergencia minimalizálásának elérésére törekszik (Steiner (ed) 1997). Az I-divergenciát relatív entrópiának vagy információvesztésnek is nevezhetjük.

A klasszikus L_p normák helyett, az ún. P_k normákat definiálhatjuk a leggyakoribb érték módszerén alapulva ((6) egyenlet):

$$P_k = \varepsilon \left[\prod_{i=1}^{ND} \left(1 + \frac{(d_i^{\text{measured}} - d_i^{\text{cal}})^2}{(k\varepsilon d_i^{\text{measured}})^2} \right) \right]^{\frac{1}{2ND}} \quad (14)$$

Egyetlen ismeretlen esetén, azaz, ha a helyparamétert (T) kell meghatározni, a következő dupla iterációs formula használható a T és az ε számítására:

$$T = \frac{\sum_{i=1}^{ND} X_i W_i(X_i)}{\sum_{i=1}^{ND} W_i(X_i)} \quad (15)$$

ahol a súlyok $W_i(X_i)$ és a dihézió a következőképpen számítható:

$$W_i(X_i) = \frac{(k\varepsilon)^2}{(k\varepsilon)^2 + (X_i - T)^2} \quad (16)$$

$$\varepsilon^2 = \frac{3 \sum_{i=1}^{ND} (X_i - T)^2 (W_i(X_i))^2}{\sum_{i=1}^{ND} (W_i(X_i))^2} \quad (17)$$

Emellett az is bizonyított, hogy az MFV eljárás nem csak rezisztens, hanem robusztus is. A robusztusságot általában kvalitatív értelemben használják: egy statisztikai eljárás hatékonysága nem túl érzékeny az eloszlástípus megváltozására. A T becslésének véges asszimptotikus szórásnégyzete van, azaz a nagy számok törvénye mindig teljesül a leggyakoribb érték számításaira. A legkisebb négyzetek módszere nem teljesíti ezt a törvényt, ha például a hiba eloszlása Cauchy típusú (Steiner (ed) 1991, 1997). Steiner (ed) (1991, 1997) bebizonyította, hogy a medián elvén alapuló L_1 - módszer az összes lehetséges földtudományi hibaeloszlást figyelembe véve 50.1 % hatásfokú, ami sokkal több, mint a klasszikus statisztikai módszerek (az L_2 normán alapuló) hatásfoka, amely nem több mint 7.8 %. Az MFV- módszerek statisztikai hatásfoka jelentősen nagyobb, mint az L_1 - vagy L_2 - eljárásoké. A P_k normák hatásfoka több mint 90 %.

Ezek után érdemes részletesebben beszélni az MFV eljárás magas statisztikai hatásfokáról. Elméletileg egy statisztikai eljárás hatásfokának a legpontosabb definíciója a következő (Dutter 1987):

$$\text{Statisztikai hatásfok} = 100 (\text{kinyert információ} / \text{összes információ}) \% \quad (18)$$

Az nem kérdéses, hogy ez a definíció adja vissza a valódi tartalmát a statisztikai hatásfoknak, de szükségünk van egy a gyakorlatban használható definícióra ennek a fontos mennyiségnek a numerikus számítására (Hajagos és Steiner 1995). A következő formula kielégíti ezt a kívánalmat:

$$e = 100 (\text{minimális asszimptotikus szórásnégyzet} / \text{asszimptotikus szórásnégyzet}) \% \quad (19)$$

A nevező számítható az aktuális alkalmazott statisztikai eljárásra. A számláló az ún. Cramer-Rao határ, amely szinte minden matematikai statisztikai kézikönyvben megtalálható. A Cramer-Rao határ ($A_{\min}^2$) az f_a szupermodell adott paraméterére a következő szerint számítható (Steiner (Ed) 1997):

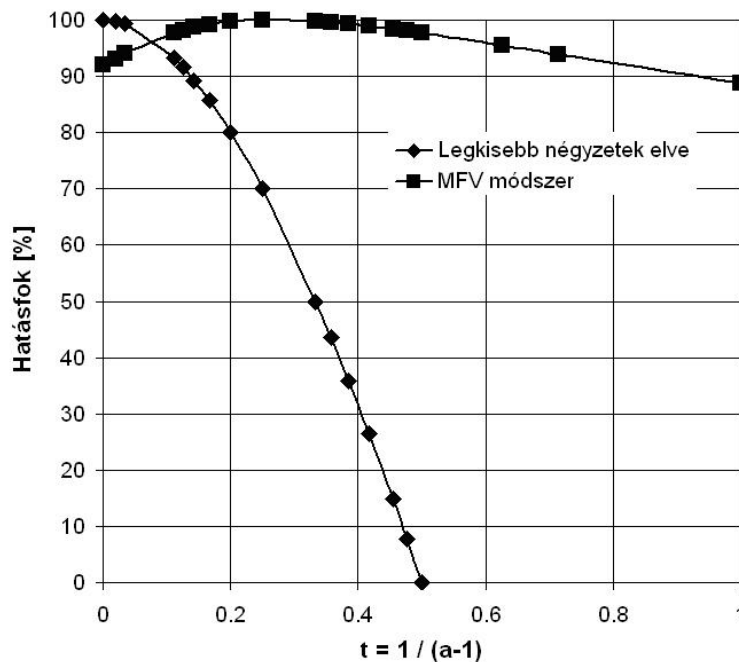
$$A_{\min}^2 = \frac{a+2}{a(a-1)} \quad (20)$$

Steiner (Ed) (1997) szintén levezette az asszimptotikus szórásnégyzet értékét a legkisebb négyzetek és az MFV eljárásra. Ismerve ezeket az összefüggéseket, a hatásfok a legkisebb négyzetek és az MFV eljárásra szintén levezethető, ha az aktuális hibaeloszlás az f_a szupermodell családból származik. Mint azt korábban említettük, az f_a szupermodell a valós földtudományi adatok és hibaeloszlások igen széles tartományát képes reprezentálni az “a” szupermodell paraméter változtatásával (Gausstól Cauchy típusig).

$$e(L_2) = \frac{(a+2)(a-3)}{a(a-1)} \quad (21)$$

$$e(MFV) = \frac{(a+2)}{a(a-1)A_{MFV}^2} \quad (22)$$

A 1. ábra ezeket a hatásfokokat mutatja a $t = 1/(a-1)$ függvényében. Ez az egyszerű paraméter transzformáció előnyös, mert míg “a” értéke 2-től ∞ -ig változik, addig a “t” értéke 0 és 1 között marad. A transzformált t értéket felhordva az abszcisszára, a 1. ábra világosan megmutatja mit is jelent a robusztusság valójában. A legkisebb négyzetek módszere 100 %-os hatásfokkal működik Gauss hibaeloszlás esetén. Ez nem csoda, hiszen a legkisebb négyzetes becslés Gauss hibaeloszlás esetére lett kidolgozva. Ezt követően azonban a hatásfok élesen csökken nulláig, ha különböző súlyosabb szárnyakkal bíró eloszlásunk van. Ez az oka, amiért oly veszélyes a legkisebb négyzetek elvének alkalmazása bármely eloszlásra. Ezzel a viselkedéssel szemben, az MFV módszer igen nagy hatásfokot ($> 90\%$) ad függetlenül az eloszlás típusától. Az MFV módszer a legjobb becslés a geostatistikai eloszlásra ($a = 5$), ahol a hatásfok értéke 100 %. A bemutatott hatásfok értékek alapján az MFV módszer robusztus jellege vitathatatlan.

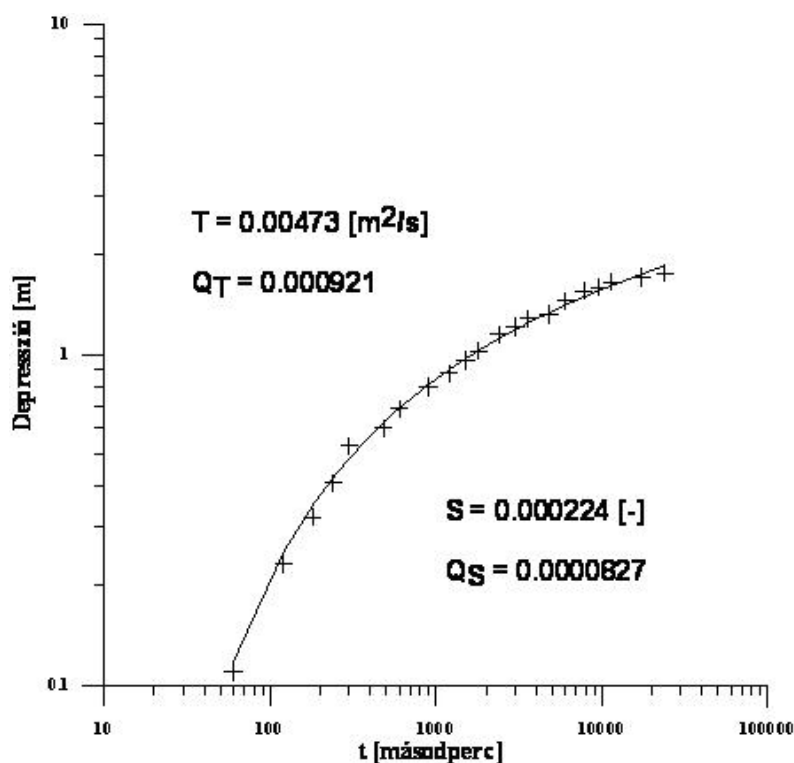


1. ábra. A hatásfok görbéje a legkisebb négyzetek és az MFV módszerre az $f_a(X)$ szupermodell család esetén.

5. ALKALMAZÁS SZINTETIKUS ÉS TEREPI PROBLÉMÁKBAN

Az MFV módszer alkalmazása igen széleskörű lehet a hidrogeológiában, illetve a hidrodinamikai és transzport modellezés területein. Különböző minimalizálendő kifejezések, célfüggvények, helyparaméterek és hibaparaméterek, sőt még regresszióanalízis is definiálható az MFV módszer használatával a hidrogeológia különböző problémáiban. Egy hidrogeológiai vizsgálat keretében két különböző kútban történt vízszintmérés, ahol erős korreláció van a vízszintek között a beszűrőzött rétegek közötti hidraulikus kapcsolat miatt. Ez a jelenség nagyon gyakran előfordul az üledékes rendszerek esetében, ahol az egyes vízadó rétegek között átszivárgás lép fel. A vízszintek között fennálló erős kapcsolatot az általánosított és robusztifikált korrelációs tényező szintén megadta (Steiner (Ed) 1997). A hagyományos lineáris korrelációs tényező csak gyenge kapcsolatot mutatott a kieső adatok miatt. Ezzel szemben az MFV módszer elhanyagolja a kieső adatokat és a valós lineáris fizikai korrelációt szolgáltatja.

Szűcs (2002), és Szűcs és Ritter (2002) sikeresen alkalmazta az MFV módszert az Észak-Magyarországi Regionális Vízművek illetékességi területén különböző vízbázis-védelmi célú próbaszivattyúzások kiértékelésében. Egy az MFV elvén alapuló geostatistikai módszer lett kifejlesztve a hidraulikus paraméterek meghatározására, és többletinformációként sor került ezen paraméterek bizonytalanságának meghatározására, amely szükséges a megbízható hidrodinamikai modellezéshez. A javasolt algoritmus jól helyt állt stabilitás és robusztusság szempontjából. Ez az új módszer bizonyítást és minősítést nyert különböző próbaszivattyúzás kiértékelési módszerekre (Theis, Jacob, Hantush, Neuman, Witherspoon, stb.) is. A fő előnye a javasolt inverziós eljárásnak, hogy egyetlen mért terepi adathalmaz használatával a hidraulikus modellparaméterek bizonytalanságát vagy megbízhatóságát szintén meg lehet adni az MFV módszer és a Monte Carlo szimuláció segítségével (2. ábra). A kidolgozott módszer alkalmazhatóságát és előnyeit számos északkelet-magyarországi régióból származó vízbázis-védelmi modell fejlesztését bemutató esettanulmányok példáján keresztül bizonyítottuk.



2. ábra. Próbaszivattyúzási adatok értékelésénél a vízföldtani paraméterek és azok bizonytalanságának meghatározása az MFV módszer alkalmazásával.

Marsily és társai (2000) egy kiváló áttekintő cikket írtak a hidrogeológiában előforduló inverz problémákról. A cikk bemutatta, hogy mennyire sokrétű és kihívásokkal teli ez a kutatási terület. Habár Carrera és Neuman (1986a, b, c) egy nagyon jó összefoglalását adtak a hidrogeológiai modellezésben használt standard inverz technikákról, még mindig sok tennivaló akad, hogy a gyakorlati szakemberek számára napi rutin feladattá tegyék az inverziós algoritmusokat. A következő esettanulmányok az MFV módszer inverziós alkalmazására mutatnak be néhány egyszerű példát a hidrodinamikai modellezés kalibrációs eredményeinek meghatározásához. A nyugalmi vízszint becslése, ami az áramlási modellből származik, közismerten alkalmazott a modell kalibráció alapjaként. A kalibráció azon modellparaméterek kiválasztásának folyamata, amelyekkel jó illeszkedést érünk el a becsült (vagy számított) és a mért vízszintek között (Hill 1998). Gyakorlatilag a kalibráció egy inverz eljárás. Leggyakrabban a kalibrációt a szakember gyakorlati tapasztalatán alapuló ún. trial-and-error módszerrel hajtják végre. A fentebb leírt matematikai megközelítésen alapuló kalibrációs módot automatikus kalibrációnak nevezik a hidrodinamikai modellezésben (Hill 1992). A célfüggvény, mint kalibrációs kritérium (Anderson & Woessner 1992) leggyakrabban az átlagos hiba, az abszolút hiba (L_1 norma) és a négyzetes hiba (RMS error, L_2 norm). A vízszinteket tekintve az RMS hiba a következőképpen definiálható:

$$RMSE = \left[\frac{1}{ND} \sum_{i=1}^{ND} (h_i^{measured} - h_i^{calculated})^2 \right]^{0.5} \quad (23)$$

Kutatásainkban a fentebb említett P_k normát alkalmaztuk modell kalibrációs célokra. Mivel sosem tudjuk a valós adatok és a hiba vagy eltérés eloszlását előre, a $P_{k=2}$ norma a leginkább javasolható modellezési célokra. A definíciója a következő:

$$P_{k=2} = \varepsilon \left[\prod_{i=1}^{ND} \left(1 + \frac{(h_i^{measured} - h_i^{cal})^2}{(2\varepsilon)^2} \right) \right]^{\frac{1}{2ND}} \quad (24)$$

Az MFV módszer és a globális optimalizáció előnyeinek demonstrálására két fő példa kerül bemutatásra. Először a fentebb leírt módszer szintetikus adatokon próbáltuk kis és teszteltük. Majd egy vízbázis védőterületének lehatárolása példáján keresztül mutattuk meg és illusztráltuk a javasolt módszer előnyeit.

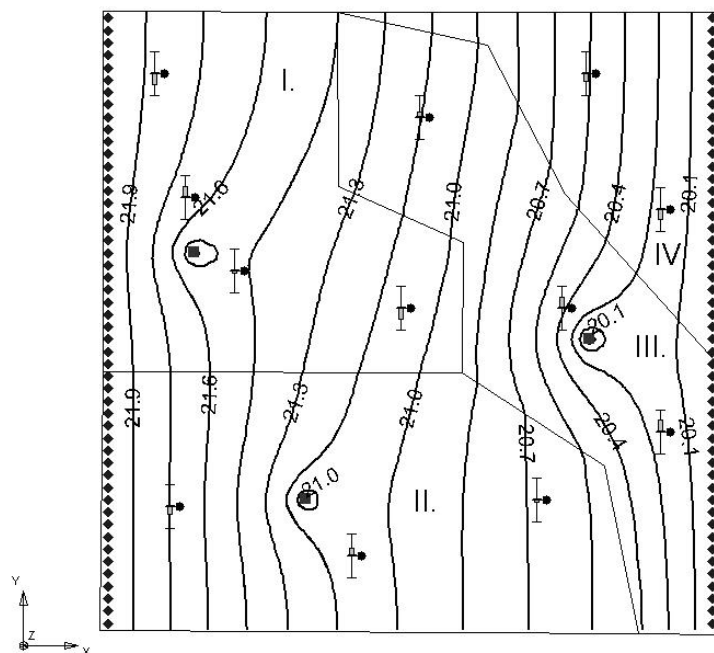
Modellezési teszt probléma

Egy egyszerű, nyílttükű egyréteges, steady-state hidrodinamikai modellt készítettünk a javasolt globális optimalizáció (SA) és az MFV módszer viselkedésének leírására és szemléltetésére. A modell x-y irányú kiterjedése 1 km * 1 km. A modell réteg teteje 25 m-en van, az alja 0 m-en. Az alkalmazott cellaméret 20 m. Konstans 0.0003 m/nap beszivárgás értéket alkalmaztunk a grid háló tetejére. Négy poligont különítettünk el a vízádban bekövetkező geológiai változékonyság reprezentálására. A horizontális szivárgási tényezőt minden egyes poligonra állandónak tételeztük fel. Állandó nyomásszintű határfeltétel alkalmaztunk a nyugati és keleti határon a természetes nyugatról keletre történő talajvízáramlás modellezésére. Egy-egy termelőkút lett elhelyezve az I. (- 400 m³/s), II (- 500 m³/s) és III (- 300 m³/s) poligonokban. A IV. poligonban nem található kút. Mivel túlhatározott rendszereket részesítünk előnyben bármely statisztikai interpretációnál, 12 figyelőpontot helyeztünk el a modellben a kalibrációhoz. Munkánk és a szimuláció során modellezési környezetként a Groundwater Modeling System 4.0 (Environmental Modeling Research Laboratory (EMRL) of Brigham Young University 2002) programcsomagot alkalmaztuk a tesztfeladat megoldása során. Az

adott modellparamétereken alapulva képesek voltunk felépíteni az áramlási modellt a MODFLOW- 2000 csomag (Harbough et al. 2000) segítségével. Az áramlási modell felépítése az aktuális modellparamétereken alapulva az ún. direkt feladat megoldása. A vízszintek a 12 megfigyelőpontban pontosan meghatározhatóak. Valós mért vízszintadatok szimulálására a megfigyelőpontokban, 2 % véletlen jellegű geostatistikai hibát ültettünk rá a pontos vízszintekre. Mivel megvolt a hidrogeológiai modellünk és a “mért adatok”, az inverz számítások elkezdődhetek. A GMS 4.0 program háromféle beépített lehetőséget biztosít automatikus inverz paraméterbecslésekre. Ezek a PEST (Watermark Numerical Computing, Doherty 2000), a UCODE (Poeter & Hill 1998), és a MODFLOW- 2000 PES (Hill et al. 2000) eljárások. Ezek hasonlóak hatékonyságban és mindegyik a klasszikus statisztikai megközelítésen alapul (Filep et al. 2002). A MODFLOW-2000 PES (Harbaugh et al. 2000) módszert választottuk ki az általunk kifejlesztett, MFV eljárásán alapuló globális optimalizációs (Metropolis Simulated Annealing) inverziós módszerrel (jelöljük MFV– SA) való összehasonlító kutatáshoz. Az MFV– SA inverz módszer hozzá lett kapcsolva a közismert MODFLOW- 2000 csomaghoz, amely a direkt feladat megoldást szolgáltatja. A jól ismert és most bevezetett hibafüggvények mellett (az RMSE és a P-norma), a (25) egyenletben megadott relatív modell távolságot (RM) szintén alkalmaztuk az összehasonlított inverziós eljárások pontosságának jellemzésére (Dobróka et al. 1991).

$$RM = \left(\frac{1}{NM} \sum_{i=1}^{NM} \left(\frac{m_i^o - m_i}{m_i^o} \right)^2 \right)^{1/2} \quad (25)$$

ahol NM a modell paraméterek száma (NM= 4 a jelen esetünkben), m_i^o az i-edik valódi modellparaméter értéke (jelen példa esetén áteresztőképesség), m_i az aktuális inverziós eljárással becsült i-edik modellparaméter. Szintetikus adatok felhasználása esetén a relatív modell távolság szintén használható, mivel az általunk előre felvett modell ismert, míg terepi probléma esetén ezt a paramétert nem tudjuk számítani, mivel a valós modellt sosem ismerjük pontosan.



3.ábra. A leggyakoribb értékes inverziós eljárással kapott vízszintek az áramlási modellben

Az általunk használt MFV módszer a klasszikus Simulated Annealing globális optimalizáció keresésén alapult, mivel csak négy modell paraméterünk volt. Természetesen nagyobb hidrodinamikai modellek esetében, a Very Fast Simulated Annealing jobban ajánlható a futási idő lecsökkentése érdekében. A Metropolis (SA) algoritmusban a következő paramétereket használtuk:

Kezdeti hőmérséklet: $T_0 = 1.0$; Végso hőmérséklet: $T_f = 0.0001$.

A hőmérséklet csökkentési tényező: $\alpha = 0.975$; az iterációk száma minden egyes hőmérsékleten: $R(t) = 300$.

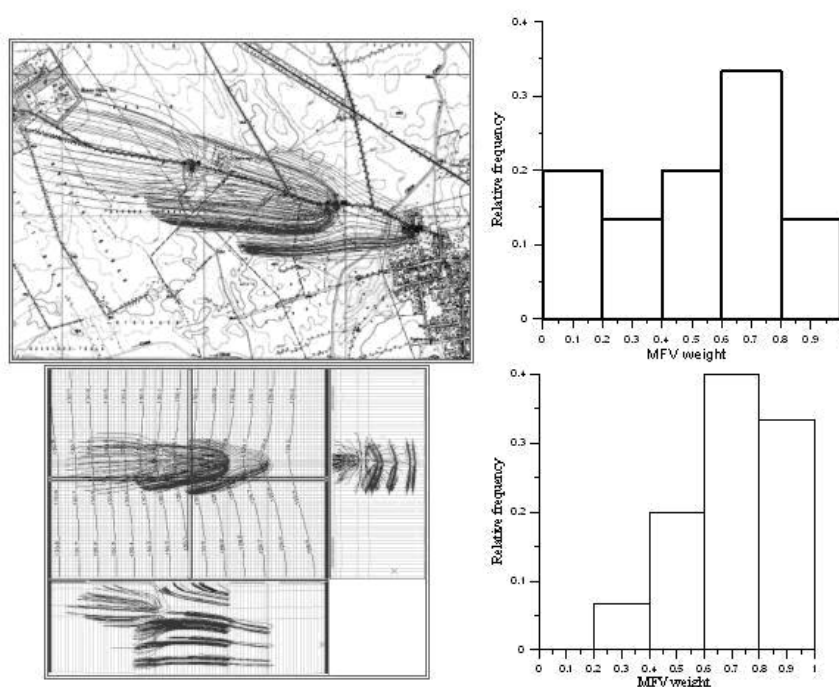
A kapott eredmények világosan mutatják, hogy bár a célfüggvény értékei (RMSE és P norma) nincsenek messze egymástól, nagy különbség van a relatív modelltávolság (RM) értékeiben. A relatív modell távolság fele akkora az MFV módszeren alapuló inverziós eljárás alkalmazása esetén. A 3. ábra közel ugyanazt az áramlási képet mutatja, mint az eredeti modell. A négy poligon, ahol az áteresztőképesség értékei különböznek, szintén látszódnak mindkét ábrán. Természetesen még az MFV- SA módszer sem képes visszaadni az eredeti modell paramétereket, de ez megérthető. A hidrogeológiai problémákban az jelent nehézséget, hogy a tényleges térbeli vízszinteloszlást sosem ismerjük tökéletesen (Anderson és Woessner 1992). Ebben a példában is csak 12 "mért adat" áll rendelkezésre. Ezért olyan fontos minden a nyomásszintekhez kötődő információ becslése. Ezért mondhatjuk, hogy a magas hatásfokú statisztikai módszerek olyan elkerülhetetlenek a kiértékelés alatt.

Terepi modellezési probléma

Az MFV- n alapuló inverz modellezés előnyei számos terepi példán is bemutatatható. Ugyanakkor egy inverz modellező programot előállítani nem könnyű feladat. A saját szubrutin hozzácsatolása a standard modellező csomagokhoz szintén bonyolult. Éppen ezért a legtöbb gyakorlati szakember a hozzáférhető modellező csomagokat használja hidrogeológiai értékelésekhez. Ez az oka, amiért itt bemutatjuk, hogy az MFV eljárás milyen könnyen és előnyösen alkalmazható a hidrogeológiai értékelés javítására, még ha a szakemberek a széles körben alkalmazott, professzionális modellező csomagokat alkalmazzák előszeretettel, mint a Groundwater Modeling System (GMS) vagy a Processing Modflow (Chiang & Kinzelbach 2001). Habár az említett programokban az inverziós modulok is be vannak építve, mint PEST, UCODE vagy MODFLOW- 2000 PES, a trial- and- error kalibráció még mindig gyakrabban alkalmazott (Kovács 2004). A következő vízbázisvédelmi példa azt demonstrálja, hogyan alkalmazható az MFV eljárás a hidrodinamikai modell kalibrációs eredményeinek javítására a hagyományos „trial- and- error” eljárás esetén is.

A sérülékeny vízbázisok védőterületeinek kijelölésénél a hidrodinamikai modellezés eredményére építünk. Hazánkban hasonlóan, mint más országokban ezek a védőövezetek, amelyekben belül a megengedhető tevékenységeket szabályozzák, időbeli védelmet nyújtanak. Például 20 napos, 180 napos, 5 vagy 50 éves elérési időkhöz kötött védőövezetéről beszélhetünk. A 4. ábra az MFV súlyok használatával végzett trial- end- error kalibráció végső eredményét mutatja egy vízbázisvédelmi projektnél az 50 éves elérési időre. Ebben az esetben a Processing Modflow 5.3 csomag volt a modellező környezet. Mivel nincs elképzelésünk az eltérések eloszlásának típusára vonatkozóan, a $k=2$ érték használatát részesítettük előnyben. A trial- end- error kalibráció minden egyes lépésében, az MFV súlyok nagyon látványos és hasznos információt nyújtanak minden megfigyelőpontra az aktuális áramlási modell állapotról az illeszkedés jóságának vonatkozásában. Minél közelebb van az MFV súly az 1- hez, annál jobb az illeszkedés a mért és számított adatok között az aktuális megfigyelési pontban. A modellezés eredményeként előálló súlyok egyenkénti értékelése mellett, az MFV súlyok hisztogramja szintén hasznos információt ad a kalibráció állapotáról. A 4. ábra mutatja, hogy a hisztogramot nagy relatív gyakoriság értékek jellemzik a kis MFV súlyoknál a kalibráció folyamatának az elején. Az alsó hisztogramot, ami jelentősen eltér a felsőtől, a trial- end- error kalibráció végén kaptuk. Ha a kalibrációt jól végeztük és a mért adatok megbízhatóak, a hisztogramnak nagy relatív gyakoriságot kell mutatnia az MFV súlyok nagyobb

intervallumában. Ily módon, az eltérésekből származtatott MFV súlyok könnyen gyorsíthatják a trial- and- error kalibrációt.



4. ábra. Kalibrált áramlási modell az 50 éves elérési időhöz tartozó védőövezet lehatárolásához a celldömölki vízmű esetében. Jobb oldalon az MFV súlyok két hisztogramja található a kalibrációs eljárás alatt. Fent a kalibráció egy korai, míg az alsó a kalibráció végén kapott hisztogramot mutat.

6. ÖSSZEFOGLALÁS

A jelen tanulmány keretében elvégzett vizsgálatok alapján a következő megállapításokat tehetjük:

1. A leggyakoribb érték módszere sikeresen alkalmazható a különböző típusú hidrogeológiai modellezési problémák megoldására. A könnyen alkalmazható robusztus és rezisztens geostatistikai eljárás nagy határfokot és rezisztens viselkedést biztosít. Az MFV módszeren alapuló ún. P normák használata előnyös lehet inverz paraméterbecslésekben.
2. A globális optimalizáció alkalmazásának a hidrodinamikai és transzport modellezésben sokkal elterjedtebbé kell válnia a közeljövőben. A nagy megbízhatóságú VFSA („Very Fast Simulated Annealing”) módszer nem kívánja meg a modell paraméterek kezdeti értékének a tényleges értékekhez közel eső becslését.
3. A leggyakoribb érték módszerén alapuló automatizált paraméterbecslő eljárás fejlesztettünk ki, amelyet hozzákapcsoltunk a MODFLOW– 2000 referencia programhoz, annak érdekében, hogy a különböző modellek kalibrációját nagyobb pontossággal lehessen végrehajtani. Természetesen ez a modell paraméterek pontosabb meghatározását is jelenti.
4. A vízszint és egyéb típusú hidrogeológiai adatok leggyakoribb érték szerinti súlyozása könnyen használható a modellezési eredmények javítására a hagyományos „trial- and- error” kalibrációs folyamat során. Így például a területhasználati korlátozást jelentő vízbázisvédelmi célú védőterületek kijelölése nagyobb pontossággal és megbízhatósággal történhet.

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A szerzők köszönetüket fejezik ki az Országos Tudományos Kutatási Alapnak (szerződés szám: OTKA 048329), a GVOP programnak (GVOP- 3.1.1.- 2004- 05- 0187/3.0) és a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj Program Kuratóriumának.

IRODALOM

- Anderson M.P., Woessner W.W., 1992: Applied Groundwater Modeling. Academic Press, San Diego, Calif., 381 p.
- Carrera J., Neuman S.P., 1986a: Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions. 1. Maximum likelihood method incorporating prior information. *Water Resources Research*, **22** (2): 199- 210.
- Carrera J., Neuman S.P., 1986b: Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions. 2. Uniqueness, stability and pollution algorithms. *Water Resources Research* **22**(2): 211- 227.
- Carrera J., Neuman S.P., 1986c: Estimation of aquifer parameters under transient and steady state conditions. 3. Application to synthetic and field data. *Water Resources Research* **22** (2): 228- 242.
- Chiang W.H., Kinzelbach W., 2001: *3D Groundwater modeling with PMWIN. A simulation system for modeling groundwater flow and pollution*. Springer- Verlag, 346 p.
- Dobróka, M., Gyulai, Á., Ormos, T., Csokás, J. Dresen, L., 1991, Joint inversion of seismic and geoelectric data recorded in an underground coal mine. *Geophysical Prospecting* **39**: 643- 665.
- Doherty J., 2000: PEST, *Model Independent Parameter Estimation, fourth edition*, program documentation, Watermark Numerical Computing, p. 249.
- Dutter, R., 1987: *Mathematische Methoden in der Montangeologie*. Vorlesungsnotizen. Manuscript, Leoben.
- Environmental Modeling Research Laboratory (EMRL) of Brigham Young University (2002): Groundwater Modeling System (GMS 4.0), Tutorial Manual.
- Ferenczy, L., Kormos, L., Szucs, P., 1990. *A new statistical method in well log interpretation*, Paper O, in 13th European Formation Evaluation Symposium Transactions: Soc. Prof. Well Log Analysts, Budapest Chapter, 17pp.
- Filep Gy., Kovács B., Lakatos J., Madarász T., Szabó I. 2002: *Szennyezett területek kármentesítése*. Szerkesztette: Szabó Imre, Miskolci Egyetemi Kiadó, pp. 1-483.
- Hajagos, B., Steiner, F., 1991. Different measures of the uncertainty. *Acta Geod. Geoph. Mont. Hung.*, **26**: 183- 189.
- Hajagos, B., Steiner, F., 1995. Symmetrical stable probability distributions nearest lying to the types of the supermodel $f_a(x)$. *Acta Geod. Geoph. Hung.*, **30**(2- 4): 463- 470.
- Harbaugh A.W., Banta E.R., Hill M.C., McDonald M.G., 2000: *MODFLOW- 2000, The U.S. Geological Survey Modular Ground Water Model– User guide to modularization concepts and the groundwater flow process*. U.S. Geological Survey, Open File Report 00- 92.
- Hill M.C., 1992: *A computer program (MODFLOWP) for estimating parameters of a transient, three dimensional ground water flow model using nonlinear regression*. U.S. Geological Survey, Open File Report 91- 484.
- Hill M.C., 1998: *Methods and Guidelines for Effective Model Calibration*. U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations Report 98- 4005.
- Hill M.C., Banta E.R., Harbaugh A.W., Anderman E.R., 2000: *MODFLOW- 2000, The U.S. Geological Survey Modular Ground Water Model– User Guide to the Observation, Sensitivity, and Parameter Estimation Processes and Three Post Processing Programs*. U.S. Geological Survey, Open File Report 00- 184.
- Huber, P.J., 1981. *Robust statistics*. Wiley, New York, NY, 308 pp.
- Ingber, L., 1989: Very fast simulated reannealing. *Mathl. Comput. Modeling*, **12**(8): 967- 993.

- Kirkpatrick, S., Gelatt, C.D., Jr., Vecchi, M.P., 1983: Optimization by simulated annealing. *Science*, **220**: 671- 680.
- Kitandis P.K., 1997: *Introduction to geostatistics: Applications to hydrogeology*. Cambridge University Press, p. 249.
- Kovács, B., 2004: *Hidrodinamikai és transzport modellezés I.* (Processing MODFLOW környezetben. Miskolci Egyetem, Műszaki Földtudományi Kar, Szegedi Tudomány Egyetem, Ásványtani, Geokémiai és Kőzettani Tanszék, GÁMA-GEO Kft., pp. 1-159.
- Lee, T- C., 1999: *Applied Mathematics in Hydrogeology*. Lewis Publishers and CRC Press LLC, ISBN 1- 56670- 375- 1.
- Lines, T.R., Treitel, S., 1984. Tutorial: A review of least squares inversion and its application to geophysical problems. *Geophysical Prospecting*, **32**: 159- 186.
- Marsily de Gh., Delhomme J.P., Coundrain Ribstein A., Lavenue A.M., 2000: Four Decades of Inverse Problems in Hydrogeology. Paru dans Geophysical Society of America, Special paper **348**: 1- 28.
- Marquardt, D.W., 1970: Generalized inverses, Ridge regression, biased linear estimation, and nonlinear estimation. *Techometrics* **12**: 591- 612.
- Menke, W., 1984: *Geophysical Data Analysis: Discrete Inverse Theory*, Academic Press.
- Metropolis, N., Rosenbluth, A., Rosenbluth, M, Teller, A., Teller, E., 1953: Equations of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, **21**: 1087- 1092.
- Poeter E.P., Hill M.C., 1998: *Documentation of UCODE. A Computer Code for Universal Inverse Modeling*. U.S. Geological Survey, Water Resources Investigations Report 98- 4080.
- Sen, M., Stoffa, P.L., 1995: *Global Optimization Methods in Geophysical Inversion. Advances in Exploration Geophysics 4*. Elsevier.
- Steiner, F., 1965. *Interpretation of Bouguer maps* (in Hungarian). Dissertation. Manuscript. Miskolc, 80- 94.
- Steiner, F., 1972. Simultane interpretation geophysikalischer messdatensysteme. Review *Pure and Applied Geophysics*, **96**: 15- 27.
- Steiner, F., 1988. The most frequent value procedures. *Geophysical Transaction* 34(2- 3), 226p.
- Steiner, F., 1990. *The Bases of Geostatistics* (in Hungarian). Tankönyvkiado, Budapest, Hungary, 363pp.
- Steiner, F., (Editor), 1991. *The Most Frequent Value. Introduction to a Modern Conception Statistics*. Akademia Kiado, Budapest, Hungary, 314pp.
- Steiner, F., Hajagos, B., 1994. Practical definition of robustness. *Geophys. Trans.*, **38**: 193- 210.
- Steiner, F., Hajagos, B. 1995. Determination of the parameter errors (demonstrated on a gravimetric example) if the geophysical inversion is carried out as the global minimization of arbitrary norms (demonstrated by the P_c norm). *Magyar Geofizika*, **36**: 261- 276.
- Steiner, F., (ed.) 1997: *Optimum methods in statistics*. Akademia Kiado, Budapest.
- Szűcs, P., 1994. Comment on an old dogma: 'the data are normally distributed'. *Geophysical Transactions* **38**: 231- 238.
- Szűcs P., Civan F., 1996: Multi layer well log interpretation using the simulated annealing method. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, **14**: 209- 220.
- Szűcs P., 2002: *Inversion of pumping test data for improved interpretation*. microCAD 2002, International Scientific Conference, University of Miskolc, A: Geoinformatics, pp. 107- 112, March 7- 8.
- Szűcs P., Civan F., Virág M., 2006: Applicability of the most frequent value method in groundwater modeling. *Hydrogeology Journal*, **14**: 31- 43, Springer- Verlag.
- Szűcs, P., Ritter Gy., 2002: Improved interpretation of pumping test results using simulated annealing optimization. ModelCARE 2002, Proceedings of the 4th International Conference on Calibration and Realibility in Groundwater Modeling. Prague, Czech Republic, 17- 20 June 2002. *Acta Univ. Carolinae – Geol.* **46**(2/3):. 238- 241.