VÁLASZ

DR. PRÁCSER ERNŐ

OPPONENSI VÉLEMÉNYÉBEN FELTETT KÉRDÉSEIRE

Köszönöm Dr. Prácser Ernő tudományos főmunkatárs úrnak akadémiai doktori értekezésem alapos bírálatát, hasznos észrevételeit és a dolgozat pozitív értékelését. A „Kisebb pontatlanságok” című fejezetben szereplő megjegyzésekkel egyet értek. Az itt felmerült néhány kérdésre röviden válaszolnék. A (48) formulában megjelenő $\mathbf{\Gamma}$ mennyiség az $\mathbf{S}^*$ mátrix első M számú sajátértékét csökkenő sorrendben tartalmazó diagonális mátrix (*Jöreskog, 2007*). Az (54) formula helyett valamely mátrixnormát, vagy az adatmátrixokat oszlopvektorrá transzformálva az Euklideszi-normát alkalmazhatjuk. A (70) tapasztalati összefüggés saját eredményem, melyet a Hydrogeology Journal folyóiratban tettem közzé (*Szabó, 2015*). A bírálat „Megjegyzések” című fejezetében található felvetésekre az alábbiakban szeretnék válaszolni.

1. *„A linearizált inverzió alkalmazásakor a regularizációs paraméter (ε^2) megválasztásával kapcsolatban csak annyit mond, hogy az kezdetben egy adott állandó értéket vesz fel és az iterációs lépések során egy hatványsor szerint csökken.”*

A csillapítási tényező kezdeti értékét próbafuttatások alapján adtam meg, mely inverziós algoritmusonként eltérőnek adódott. Megválasztásánál arra törekedtem, hogy annak értéke minimális legyen, azaz a (3) egyenlet szerint végzett optimalizáció a megoldást fizikai értelemben kevésbé torzítsa. Az ε^2-et iterációról-iterációra fokozatosan csökkentettem annak érdekében, hogy az inverziós eljárás végén elegendően kicsiny legyen (legalább 10^{-4}–10^{-5} nagyságrendű). Tapasztalatom szerint a túlhatározottság növelésével ε^2 kezdeti értéke jelentősen csökkenthető. Szélső esetben, például a genetikus meta-algoritmikus inverziós eljárás esetén ε=0 mellett is stabil és megbízható megoldásra jutunk.

2. *„A 21. oldal alján azt írja, hogy „a többértelmű megoldás elkerülése végett a zónaparamétereket leíró sorfejtési együtthatókat globális optimalizációs módszerrel határozzuk meg. A többértelműség az inverziós feladatoknál elsősorban az előremodellezés tulajdonságaiból (itt válaszfüggvények adódik) és nem jelenthető ki, hogy az inverziós algoritmus megválasztásával ez minden esetben megszüntethető. Például abban a szélsőséges esetben, ha az előremodellezés képletében két paraméternek csak a szorzata*

szerepel, akkor azokat sem a linearizált inverzió, sem a globális optimumkereső algoritmus nem tudja szétválasztani.”

A többértelmű megoldás az inverziós kiértékelés során gyakori probléma, különösen a felszíni geofizikai adatrendszerek feldolgozásánál. Abban az esetben, amikor a modellparaméterek szétválaszthatók a globális optimalizációs módszerekkel hatékonyan elkerülhetjük a lokális minimumhelyeket és ezáltal jelentősen csökkenthetjük a többértelműség kockázatát. A globális inverziós módszerek sikeresen alkalmazhatók, ha a modellparaméterek közötti korreláció nem túl nagy. A mélyfúrási geofizikai értelmezésben pl. nagy kihívást jelent a kisepert és az érintetlen zóna víztelítettségeinek együttes meghatározása, mivel azok egymással (és gyakran más kőzetfizikai mennyiségekkel) szoros kapcsolatban állnak. Emiatt a víztelítettség az inverzió legkevésbé pontosan meghatározható paramétere. A kőzetfizikai jellemzők megbízható meghatározását erősen befolyásolja a válaszfüggvényekben szereplő zónaparaméterek beállítása. Azok önkényes rögzítése helyett javasoltam az intervalluminverziós eljárással történő becslésüket. Azonban ez nem mindig lehetséges, mivel adataink különböző mértékben reagálnak azok megváltozására. Kis paraméter-érzékenységek esetén a globális optimalizáció sem vezethet sikerre. Javasolt paraméter-érzékenységi vizsgálatokra alapozni az inverz feladat modellparamétereinek kiválasztását. Az értekezésben a genetikus meta-algoritmikus inverziós eljárás bemutatásával demonstráltam a zónaparaméterek meghatározásának lehetőségét. Igazoltam, hogy a nagymértékben túlhatározott inverz feladat megoldásával a vizsgált felszínközeli képződmények mátrix- és rétegvízjellemzői megbízható módon származtathatók (*Szabó, 2018*).

3. *„A 33. oldalon a Szerző azt írja, hogy a „A faktorsúlyokkal kifejezett (redukált) korrelációs mátrix szinguláris értékek szerinti felbontásával kapott pozitív (csökkenő sorrendbe állított) szinguláris értékek egymáshoz viszonyított arányából megbecsülhetők az egyes faktorokra eső varianciahányadok.” Ezt részletesebben is ki lehetett volna fejteni. Az ennek megfelelő állítás a főkomponens analízisben azon alapul, hogy a kovarianciamátrix sajátvektorai felhasználásával számítják a főkomponenseket, és ez egy egyértelmű feladat. A faktoranalízis esetén viszont a faktorsúlyok és a faktorok nem határozhatóak meg egyértelműen, a Szerző is beszél a faktorok esetleges forgatásáról. Továbbá a faktorok meghatározása is genetikus algoritmussal történik, ahol szó sincs sajátvektorokról.”*

A gyakorlat szempontjából lényeges kérdés a faktoranalízis eredményének egyértelműsége és a faktorok fizikai értelmezése. A (41) kifejezésben szereplő $\mathbf{FL}^{\mathrm{T}}$ mátrix felbontása nem egyértelmű, mivel bármely $M \times M$ méretű $\mathbf{T}$ ortonormált mátrix esetén fennáll

$$\mathbf{FL}^{\mathrm{T}} = \mathbf{FT}^{\mathrm{T}}\mathbf{TL}^{\mathrm{T}},$$

ahol M a faktorok száma. A fenti egyenletben $\mathbf{T}^{\mathrm{T}}\mathbf{T}$ mátrix egységmátrix, ennél fogva akár végtelen sok egyenértékű megoldás is létezik. A többértelműség megjelenik az $\mathbf{R}$ korrelációs mátrix előállításánál is, mivel (42) kifejezésben szereplő $\mathbf{LL}^{\mathrm{T}} = \mathbf{L}^{*}\mathbf{L}^{*\mathrm{T}}$ mátrix is sokféleképpen előállítható $M \times M$ méretű $\mathbf{V}$ ortogonális mátrixszal ($\mathbf{L}^{*} = \mathbf{LV}$). A faktorsúlyokkal végzett ortogonális transzformáció - geometriai értelemben forgatás - a faktorokra nézve egyenértékű megoldást eredményez.

A mért adatmátrix felbontása során, amikor a faktoregyütthatók értéke nagy, akkor az ahhoz tartozó faktorok a mérési adatokhoz szorosan kapcsolódnak. Egyszerű struktúra esetén (1-hez és 0-hoz közeli együtthatók) a faktorok könnyen értelmezhetők. Bonyolultabb struktúra esetén forgatási módszereket alkalmazunk, mellyel a faktorokat szemléletesebb jelentésű faktorokká alakíthatjuk át. Az értekezésemben ez utóbbi esetén a *varimax* fogatási módszert alkalmaztam (*Kaiser, 1958*). A forgatási módszer a faktorok azon lineáris kombinációját adja, melyre a faktorsúlyok varianciája maximális

$$\mathrm{VAR}(\mathbf{L}) = \sum_{k=1}^{K}\sum_{l=1}^{M}\left(L_{kl}^{2} - \overline{L}_{l}^{2}\right)^{2} = \max,$$

ahol L_{kl} a k-adik szelvény l-edik faktorra eső súlya (K az alkalmazott szondák száma, M a faktorok száma), $\overline{L}_{l}$ az l-edik oszlop súlyainak átlaga. A fenti módszer eredményeképpen azon mérési változók (fúrólyukszelvények) száma kevés lesz, melyhez sok faktor nagy súllyal kapcsolódik. A mért változó ekkor egy vagy csak kisszámú faktorral korrelál erősen, ill. mindegyik faktor kevés számú szelvényt reprezentál. A mátrix műveleteken alapuló *varimax* algoritmust *Sherin* (*1966*) tette közzé.

A bemenő szelvények $\mathbf{R}^{*} = \mathbf{R} - \mathbf{\Psi} = \mathbf{LL}^{\mathrm{T}}$ redukált korrelációs mátrixa az SVD módszer alkalmazásával az alábbi szerint bontható fel

$$\mathbf{R}^{*} = \mathbf{US}_{e}\mathbf{V}^{\mathrm{T}},$$

ahol **U** és **V** $K \times K$ méretű ortogonális mátrixok (K a mért változók száma), $\mathbf{S}_e$ diagonális mátrix a pozitív csökkenő sorrendbe állított szinguláris értékeket tartalmazza, $\mathbf{\Psi}$ a hibavariancia-mátrix. Az értekezésemben a szinguláris értékek felhasználásával számítottam az egyes faktorok által magyarázott varianciahányadokat. A teljes varianciát az $\mathbf{S}_e$ mátrix főátlóbeli elemeinek összege adja, míg az l-edik faktorra eső variancia (százalékban) a következő szerint határozható meg

$$\sigma_l = \frac{S_{e,ll}}{tr(\mathbf{S}_e)} \cdot 100(\%) .$$

A genetikus algoritmussal támogatott faktoranalízis esetén a faktorsúlyokat a priori adottnak tekintettem. Az értéküket a Jöreskog-féle közelítő eljárással számítottam, majd a *varimax* eljárással elforgattam. Az értekezésben közölt FGA-FA eljárás nem számítja a faktorsúlyokat, azok meghatározására fejlesztettem ki az IRFA eljárást. Az evolúciós számításon alapuló faktoranalízis kiterjesztésére egy olyan hiperparaméter optimalizációs eljárást javaslok, mely szimultán becsüli a faktorokat és azok súlyait, ez utóbbiakat - mint hiperparamétereket - egy külső ciklusban képes változtatni és fokozatosan finomítani.

4. *„A 4.3 fejezetben a faktoranalízis (50) képlettel meghatározott feladatát a genetikus algoritmussal oldja meg. Tekintettel arra, hogy ez az* ***f*** *faktorokra vonatkozólag ez egy lineáris feladat, indokolni kellene, hogy miért jobb a genetikus algoritmus a hagyományos, legkisebb négyzetek módszerén alapuló megoldásnál."*

A genetikus algoritmus alkalmazásával egy újszerű megoldási lehetőséget javaslok a hagyományos legkisebb négyzetek elvén alapuló technika mellett. Az új eljárás a globális optimumkeresés ellenére elég gyors és gradiens-számítást nélkülöző megoldást kínál. A módszer kevésbé érzékeny a faktorok kezdeti értékeinek megválasztására (gyakorlatilag startmodell-független). Az egyedek közül elsősorban azokat keresztezi az eljárás, amelyek nagy fitnesz értékekkel rendelkeznek, így minden lépésben hatékonyan kiválasztja a legalkalmasabb modelleket. Mivel párhuzamosan több modellt (faktorértékeket tartalmazó vektort) tökéletesít, az eljárás végén számos optimumhoz közeli megoldást ad, szemben a legkisebb négyzetek módszere által szolgáltatott egyetlen megoldással. A fitnesz függvény alkalmas módosításával (a mért és számított adatok eltérésének súlyozásával) a faktoranalízis robusztifikálható.

Hivatkozott irodalom

Jöreskog K. G., 2007: Factor analysis and its extensions. In: Cudeck R., MacCallum R. C. (eds.), Factor analysis at 100, historical developments and future directions, Lawrence Erlbaum Associates, 47–77.

Kaiser H. F., 1958: The varimax criterion for analytical rotation in factor analysis. Psychometrika 23, 187–200.

Sherin R. J. 1966. A matrix formulation of Kaiser's Varimax criterion. Psychometrika 31(4), 535–538.

Szabó N. P, 2015: Hydraulic conductivity explored by factor analysis of borehole geophysical data. Hydrogeology Journal 23, 869–882.

Szabó N. P., 2018: A genetic meta-algorithm-assisted inversion approach: hydrogeological study for the determination of volumetric rock properties and matrix and fluid parameters in unsaturated formations. Hydrogeology Journal 26, 1935–1946.

Miskolc, 2020. július 31.

Szabó Norbert Péter