

Válasz Abonyi János opponensi véleményére a “Bayesi módszerek a vízi környezet modellezésében — avagy a modellezés elkerülhetetlen szubjektivitása” c. MTA doktori értekezésről

Honti Márk, 2023. május 4.

Köszönöm konstruktív megjegyzéseit. A továbbiakban a bírálat normál szöveggént, a válaszok pedig *kékkel kiemelve* olvashatók.

A modell alapú szimulációs, tervezési, optimalási, irányítási és hibadiagnosztikai eljárások alkalmazásában rejlő lehetőségek kiaknázása a vízgazdálkodás területén is olyan jelentős kutatási kérdéseket vet fel, melyek nem csak tudományos szempontból érdekesek, hanem ökológiai, gazdasági és társadalmi szempontból is jelentősek. Bár a modell alapú megoldások előnyei egyértelműek és megkérdőjelezhetetlenek, elterjedésük és széles körű alkalmazásuk elsődlegesen a modellparaméterek identifikációjának nehézségei miatt korlátozottak. Honti Márk doktori dolgozatában kiváló érzékkel mutat rá arra, hogy elsődlegesen a paraméterek és a modellszerkezet felismerhetetlensége az, amely a modellek alkalmazását hátráltatja. Kutatásainak célkitűzése, miszerint ezeket a felismerhetetlenségi problémákat mérsékelje, időszerű, az alkalmazási területtől függetlenül helytálló és rendkívüli jelenőséggel bír.

A doktori mű nem csak a témaválasztást tekintve kiemelkedő, hanem stílusa, nyelvezete, felépítése kapcsán is példaértékű.

Köszönöm.

Honti Márk felvállalta, hogy magyar nyelvű dolgozatával a szakmai nyelvet is ápolja, gyarapítja, mely feladat különösen nehéz akkor, amikor úttörő munkát végez és a szűkebben értelmezett tématerületén elvétve található magyar nyelvű irodalom. Sajnos a szerzőt elkerülték a hazai irányításelmélet területén született kapcsolódó irodalmak, így a dolgozat szóhasználata nem cseng össze az ebben a körben alkalmazott terminológiával. Mindez természetesen nem von le a mű értékéből, ugyanakkor javaslom, hogy a jövőben inkább a rendszeridentifikáció fogalomköre kapcsán a paraméter identifikáció és az identifikálhatóság fogalmakat alkalmazza. Ennek tükrében, opponensi véleményemben „szerkezeti felismerhetetlenség” helyett a „strukturális identifikálhatóság” szókapcsolatot használom.

Valóban, a (vízi) környezeti rendszerek modellezésének magyar terminológiájából hiányzó, vagy csak általam nem ismert szakkifejezéseket igyekeztem magyarítani olyan módon, hogy kerüljem a magyar szabályok szerint leírt, de latin kifejezéseket. Ez ténylegesen okozhat eltéréseket az irányításelmélet hazai bevett terminológiához képest.

A közel 90 oldalas dolgozat felépítése példaértékű, rendkívül hasznosak a fejezetek elején olvasható vázlatos összefoglalások.

Köszönöm.

A dolgozat bevezetése jól definiálja és érzékelteti a paraméter identifikáció és az strukturális identifikálhatóság problémakörét. A fejezetet élmény olvasni, a szerző nagyon didaktikusan vezeti fel log-likelihood fogalmát. Ez a fejezet elsődlegesen a második tézist ismertető második fejezetet vezeti fel, így számomra enyhe hiányérzetet kelt, ugyanis elmaradt az egyes fejezetekhez/tézisekhez kapcsolódó általánosabb és célirányosabb problémafelvezetés.

A fejezetekhez kapcsolódó problémafelvetés valóban nincs. Az 1. fejezet első blokkja ([1]-[5] bekezdés) vázolja az értekezés általános gondolatmenetét. Az 1. fejezet célja a state-of-the-art ismertetése, így ahhoz nem kapcsolódik tézis. Az értekezés további fejezeteiben ismertetett szerteágazó problémákat azok bayesi kezelési módja köti össze (a szerteágazást a téziszfüzet 1. ábrája "térképi" formában ábrázolja). Ezek az esettanulmányok elvileg mindig az adott problémafelvetéssel kezdődnek. Átfogó, általános problémafelvezetés talán a felismerhetőség/identifikáció hiányának és eme hiány sokféleségének további hangsúlyozása lehetne az értekezés elején.

A második fejezet az első tézishoz kapcsolódóan egy Bayes technikán alapuló módszert javasol az identifikálhatósági problémák megoldására. A fejezethez kapcsolódó legnagyobb értékének azt tartom, hogy rendkívüli alaposággal és igényességgel igazolja az OECD 308 kísérlet kapcsán hogy az identifikált paraméterek bizonytalansága jelentős mértékben csökkenthető külső információ bevonásával.

Az eredmények jelentőségét nem megkérdőjelezve, hanem elsődlegesen a további kutatásokat inspirálva szeretném felhívni arra a figyelmet, hogy a példa kapcsán is

- hasznos lenne figyelmet fordítani az identifikálhatóság „klasszikus” módon történő elemzésére, azaz a Fisher információs mátrix felírására és elemzésére,
- a Fisher információs mátrix sajátértékén és determinánsán alapuló identifikálhatóság minősítésére (A, D optimális kísérletek),

Az illeszkedés szempontjából egyenértékű modellváltozatok (B–D) közötti választás a probléma jellege miatt nem matematikai alapokon történt. Az OECD 308-as kísérletekben általunk vizsgált vegyületek egy részéről ismert volt, hogy anaerob körülmények között nem bomlanak (ez a C és D változatnak felel meg), mások pedig igen (ez lehet a B változat, ha az aerob és anaerob bomlási sebesség nem különbözik jelentősen, vagy a D változat, ha igen). Mivel a cél az OECD 308 általánosan használható modelljének megalkotása volt, így azt a változatot választottuk, amely mindkét esetet le tudta írni (D). Amikor nem áll rendelkezésre ilyen tudás a rendszerről, valóban célszerű lenne a modellek Fisher információs mátrixa alapján dönteni. A mátrix amúgy könnyen előállítható az MCMC mintázás során, így alkalmazása nem igényelne további számítási erőforrásokat.

- esetleg a ma nagyon divatos Markov chain Monte Carlo (MCMC) módszert alkalmazni (példaként érdemes beletekinteni a Ensemble Kalman filter for dynamic state estimation of power grids stochastically driven by time-correlated mechanical input power címet viselő cikkbe),

A kiválasztott modellváltozat (D) bizonytalanságvizsgálata MCMC mintázással történt.

- kiemelni, hogy a klasszikus paraméteridentifikációban a regularizáció eszköztárát is hasonló célok érdekében alkalmazzuk (ahol a Bayes módszerek szintén szerepet kapnak) és külső információt mint paraméter korlátokat is bevihetjük (melyre számomra a legszebb példa: Grey-box modelling and identification using physical knowledge and Bayesian techniques)

Igen, a paraméterkorlátok használata és a bayesi kalibráció / paraméteridentifikáció matematikailag nagyon hasonló. A paraméterek korlátozása egyenértékű a korlátos, egyenletes eloszlású priorok használatával. Az ilyen "éles" értékhatárok alkalmazása ugyanakkor sok esetben vitatható, hiszen az eljárás a paraméter-érték elhanyagolható mértékű változása mellett vált teljes elfogadásról teljes elutasításra vagy fordítva. Ez indokolt lehet egy megadott értelmezési tartomány szélein (pl. egy csak pozitív értékekre értelmezhető paraméter elfogadhatósága ugrásszerűen megváltozik 0-ban), de leggyakrabban csak a prior és a likelihood közötti racionális kompromisszum kialakulását hátráltatja (pl. a likelihoodban tükröződő erős bizonyíték esetén is megakadályozza az eltávolodást a priorban magas valószínűségű paraméter-értéktartománytól).

A harmadik fejezet egy szintén égető problémának megoldására, az adatok szisztematikus (mérési) hibáinak kezelésére fókuszál. A fejezet első része egy kiváló, elemző szemléletű értékelést ad a hidrológiai modellezésben alkalmazott hibakezelési eljárásokról, majd ismerteti a második és a harmadik tézis alapján adó, a szerző által kidolgozott zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamatmodellre épülő eljárást, mely alkalmas a gyors és a lassú hibafolyamatok szimultán kezelésére. A módszer kiemelendő értéke, hogy a bizonytalanságokat figyelembe véve alkalmas előrejelzésekre.

Köszönöm.

Az eredmények jelentőségét nem megkérdőjelezve, hanem elsődlegesen a további kutatásokat ösztönözve szeretném felhívni arra a figyelmet, hogy

- érdemes lenne kiemelni, hogy az OU modelleket széles körben alkalmazzák állapotbecslési feladatokban,
- az OU modelleket szokás Particle Filter (PF) algoritmusokkal is alkalmazni (érdekes, ide vágó példa: Dynamic rating curve assessment in unstable rivers using Ornstein–Uhlenbeck processes),
- a PF algoritmusok alkalmazását azért is érdemes megfontolni, mert alkalmasak a nem normál eloszlású nulla várható értékű hibák kezelésére.
- a szerző által kifejlesztett algoritmus alapján hatékony hibadetektáló és idősor szegmentáló algoritmus fejleszthető.

Igen, az OU hibamodellek nagyon elterjedtek, még a hidrológiában is. PF algoritmusok bevetésére nem volt szükség, mivel az értekezés összes modelljénél alkalmazott primitív, de robusztus matematikai eszköztár (beágyazott iteratív numerikus optimalizáció majd hosszú MCMC mintázás) szállította a teljes poszterior képviselő mintát, valamint a maximum poszterior valószínűségű megoldást is.

A fejezetben leírt hibamodellel nemcsak a mérési, hanem a szerkezeti hibák kezelésére is szolgál. A fejezet célja egy olyan hibamodellel kifejlesztése volt, amely lehetővé teszi, hogy a hibás bemeneti adatokkal meghajtott, hibás mérések alapján bekalibrált hibás szerkezetű modellt használva is becsülhessük a modellezett változó (a vízgyűjtőről történő lefolyás) valós idősorának valószínű megvalósulásait. A javasolt módszer kezeli a csapadék-lefolyás modellezés tipikus hibáinak jónéhány sajátosságát (állapottól függő korreláció és heteroszkedaszticitás), de egy adott pillanatban nem normális eloszlású hibákra jelenleg nem alkalmazható. A legnagyobb poszterior valószínűségű modellszimulációhoz tartozó hibák eloszlása nem utalt arra, hogy a normalitás feltételezése alaptalan lenne (3.5 ábra). A nem-

normális hibák matematikai kezelése kompozit-hibamodellben (ahol többféle hiba összeadódik) problémás és jellemzően növeli a hiba-paraméterek számát.

Az új hibamodell valóban képes lenne a valószínűtlen értékkel rendelkező pontok kiszűrésére, de még nem készítettem belőle operatív monitoringot támogató változatot.

A negyedik fejezet az ötödik tézis eredményeihez kapcsolódóan arra a rendkívül hasznos alapelve épít, hogy a modell strukturális hiányosságainak kezelésére kiváló eszköz, ha a modell paramétereit időben változóknak tekintjük. A paraméterek folyamatos frissítésére egy bayesi tanulási technika kerül kidolgozásra. A kidolgozott szekvenciális bayesi tanulási technika alkalmazásával elkerülhető az identifikált paraméterek túlzott ingadozása.

A szerző felismeri, hogy új állapotváltozók bevonásával bár a modell komplexitása nő, több visszacsatolásra, azaz több információ bevonására nyílik lehetőség. A kérdést rendkívül alaposan járja körbe egy nyíltvízi ökoszisztéma egyszerűsített anyagforgalmát leíró modell kapcsán.

Az eredmények jelentőségét nem megkérdőjelezve, hanem elsődlegesen a további kutatásokat sugalmazva szeretném felhívni arra a figyelmet, hogy

- Időben változó modelleket széles körben alkalmaznak dinamikus rendszerek leírásában akkor, ha a rendszer időben változó és/vagy a modell összetettsége elmarad a rendszer komplexitásától. A megoldás „szélsőséges” megvalósítási módja az úgynevezett LTV rendszermodell (Linear Time-Varying Model)

Valóban, a bemutatott példák is mind olyan modelleket tartalmaznak, melyek jelentősen egyszerűbbek, mint a jelenleg elfogadott, kellően részletesnek tartott modellek. A 4.5 ábrán látható eredmények mögött álló modell tulajdonképpen LTV-nek is tekinthető, mivel két, csak lineáris tagokat tartalmazó közönséges differenciálegyenletből áll.

- A folyamatos paraméter identifikációja hatalmas, a szerző által kidolgozott megoldás rekurzív paraméteridentifikációs algoritmusok osztályába esik.
- A rekurzív Bayes becslők már a 90-es évektől fejlődnek. Bár elsődlegesen a navigációs és nyomkövetési problémák kapcsán alkalmazottak, állapotbecslő eljárásokban is elterjedtek.

Igen, a szekvenciális tanulás / rekurzív Bayes becslés régóta létezik, de az automatikus mérési módszerek tömeges megjelenése előtt csak kevés esetben alkalmazták szennyvíztisztítókön kívül vízminőségi modellekre.

- Az időben változó paraméterek becslésére állapotbecslő algoritmusok is alkalmazhatók (nem véletlen tehát, hogy OU modellekkel is történik a feladat megoldása (pl. Adaptive Sequential MCMC for Combined State and Parameter Estimation))

A vízi környezet modellezésére is használtak OU paraméter-dinamikájú modelleket (pl. Reichert és Mieleitner 2009), ezek kezelése azonban számítási szempontból nehéz, ha a modell nem lineáris és a kalibrációhoz használt idősorok hosszúak. Ekkor ugyanis nem csak a paramétereket képviselő OU folyamat meta-paraméterei ismeretlenek, de még meta-paramétereken túl is meg kell találni, hogy az OU folyamat mely egyetlen realizációja vezetett a kalibrációs időszakban megfigyelt viselkedéshez. Ha a modell bizonytalan, ezt az eljárást pl. egy MCMC mintázás keretében többeszer meg kell ismételni. A szekvenciális tanulás a folytonosan változó paraméterek egyfajta digitalizációjának tekinthető, ahol a paramétereket a mozgó időablakon belül állandónak tételezzük fel. Az ismertett alkalmazásokban így lehetett

szekvenciális MCMC-t végezni. Jelenleg ezt jó kompromisszumnak látom, de talán (pl. a bírálatokban javasolt) fejlettebb számítási módszerek segítségével ez az akadály kiküszöbölhető.

Az összefoglalás modellidentifikációval (tudatosan kerülöm a modell kalibráció szót, amely használatának okát érteni vélem, ugyanakkor sem a nemzetközi, sem a hazai irodalommal nem konform) kapcsolatos megállapításai a szóhasználatától függetlenül teljes mértékben helyesek és rendkívül fontosak.

Ez a terminológiai különbség kivételesen nem a fordítási tevékenységem eredménye. A "kalibráció" vizes és környezeti kérdésekben a 70-es évektől bevett kifejezés hazai és nemzetközi téren is.

A tézisekről:

Az első tézis megállapítása bár más területen ismert, hidrológiai rendszerek modellezése kapcsán rendkívül jelentős, a kidolgozott demonstrációs példával pedig olyan tudományos eredménynek tekinthető, amely ezen a területen MTA doktor a fokozat megszerzésének alapjául szolgálhat.

Köszönöm.

A második tézis fontos megállapítást tesz a modell paraméterek értelmezhetőségével kapcsolatban. A tézist elfogadom, ugyanakkor az eredmények jelentőségét nem megkérdőjelezve, hanem elsődlegesen a további kutatásokat inspirálva szeretném felhívni arra a figyelmet, hogy

- Fehér- és a szürke doboz modellekre épülő modellezési technikák kapcsán bevett gyakorlat, hogy nem csak a modellezés pontosságára, hanem a paraméterek értelmezhetőségére is figyelmet fordítunk és a paraméterekre vonatkozó korlátokkal, regularizációval, vagy netán bayesi eszköztárral keresünk kompromisszumot az értelmezhetőség és az előrejelzési képesség között.

A környezeti modellezésben – valószínűleg a modellek jelentős szerkezeti bizonytalansága és gyatra előrejelzőképessége miatt – szinte mindig szükség lenne a paraméterek értelmezhetőségének fent említett védelmére. Ugyanakkor nehéz az értelmezhetőség biztosítása akkor, ha a paraméter absztrakt (mérhetetlen) és a szakirodalom, illetve a modellezési gyakorlatban szerzett ismeretek szerint gyakran nagyságrendeket ölelhet át. Az értekezés általánosan a bayesi eszköztár használatát javasolja, de az esettanulmányok bemutatják, hogy a paraméterek még ezután is természetesen a korlátozó feltételezések helytállóságától függően maradnak értelmezhetők. A feltételezéseinkről pedig szinte mindig tudjuk, hogy hibásak.

A harmadik tézis az adatokban rejlő hibák és a modell szerkezeti hibáinak megkülönböztethetőségének vonatkozásában teljes mértékben helytálló megállapításokat tesz, így annak elfogadását javaslom.

Köszönöm.

Az eredmények jelentőségét nem megkérdőjelezve, hanem elsődlegesen a további kutatásokat inspirálva szeretném felhívni arra a figyelmet, hogy

- Már lineáris fekete doboz rendszerek kapcsán értelmezhető hibamodellek is lehetőséget adnak a hibák részleges elkülönítésére (lásd ARX (kimeneti hiba), Box-Jenkins modell)

Hibák elkülönítése akkor lehetséges, ha a hatásuk forrásonként megkülönböztethető. A dinamikus modellekben a nem kimeneti típusú hibák lenyomata általában autokorrelált, így az input és a strukturális hibák következménye nagyon hasonló. A bemutatott zavart Ornstein-Uhlenbeck folyamat is közeli rokona az ARX modellnek, viszont szerkezetében tartalmazza azokat az ismert mechanizmusokat, melyeknek egy lefolyásmodellben input hibák jelenlétében működniük kell.

- Állapottér alapú modellezésben a kimeneti egyenlet hibamodelljével szoktuk kezelni a mérési / adatokban rejlő hibát és az állapotátmeneti modell hibamodelljével szoktuk reprezentálni a modell struktúrában rejlő hibákat.

Ez matematikailag nagyon hasonló a disszertáció 3. fejezetében használt keretrendszerhez. A fő kérdés itt is az, hogy találunk-e megfelelő hibamodellt az egyes komponensekhez és szükség esetén meg tudjuk-e támogatni a hasonló következményekkel járó hibák megkülönböztetését alkalmas hibaparaméter-priorokkal. Például a Kennedy-O'Hagan hibamodellben a mérési hibák függetlenek, a szerkezeti hibák következményei autokorreláltak a modell memóriája miatt. Itt a hiba-autokorreláció nagysága általában nehezen felismerhető, ugyanakkor mértékének tükröznie kellene a modell memóriájának hosszát. Ezért a Kennedy-O'Hagan hibamodell paraméterei általában akkor identifikálhatóak, ha az autokorrelációra egy informatív prior eloszlást veszünk fel.

A negyedik tézist a dolgozat legfontosabb eredményének tartom.

Köszönöm.

Az ötödik, rekurzív identifikációra (szekvenciális tanulásra) vonatkozó tézist szintén olyan tudományos eredménynek tartom, amely az MTA doktora fokozat megszerzésének alapjául szolgálhat.

Köszönöm.

Az eredmények jelentőségét nem megkérdőjelezve, hanem elsődlegesen a további kutatásokat inspirálva szeretném felhívni arra a figyelmet, hogy

- érdemes folyamatosan minősíteni az új mérésekben rejlő információ tartalmát és ez alapján szabályozni a paraméterfrissítési folyamatot (pl. Fortescue módszere szerint, lásd: Adaptation and tracking in system identification—A survey, An adaptive forgetting strategy for on-line identification of multivariable processes)

Igen, köszönöm a javaslatot. Az információtartalom minősítése részben megvalósul a bayesi tanulás során, hiszen a poszterior paraméter-eloszlás csak akkor fog jelentősen eltérni a priortól, ha az újonnan bevont adatok információtartalma kellően erősen kondicionálja a likelihood függvényt. Nem informatív adatok esetén a paraméterek állandóak maradnak, illetve nagyon lassan változnak. A nem formális következtetésen alapuló eljárásokkal, pl. a GLUE módszerrel szembeni kritika egyik alapja az, hogy információgazdálkodásuk nem feltétlenül racionális, vagyis nem képesek súlyozni az információ tartalma és mennyisége szerint. A formális eljárások esetében a statisztikai alapok ezt garantálják. Ugyanakkor az értekezésben alkalmazott formális iteratív módszer implicit módon is befolyásolta a folyamat memóriáját: a rögzített hosszúságú számítási időablak miatt a közelmúlt eseményei csak a prior formájában maradtak fenn. A javasolt adaptív felejtési stratégiából áttemelhető lenne a betanítási ablak

effektív hosszának (vagyis hogy meddig van a korábbi adatoknak értékelhető súlya) rugalmas változtatása.

A hatodik tézis véleményem szerint rendkívül fontos üzenetet hordoz a hidrológiai modellek fejlesztésével foglalkozók számára azzal, hogy felhívja a figyelmet a modellbizonytalanság kezelésének fontosságára.

Köszönöm.

A dolgozat és a szerző jelentős eredményeket ért el ezen a téren, a tématerület nemzetközi szinten is elismert kutatója, így a doktori munka tudományos eredményeit elegendőnek tartom az MTA doktori cím megszerzéséhez és a nyilvános védés kitűzését javaslom.

Kérdések: Opponensi véleményemben számos lehetőséget felvettem. Ezek számossága és összetettsége messze meghaladja azt a keretet, amely elvárható lenne, hogy a doktori eljárás kapcsán diszkutálásra kerüljenek. Mindezek alapján kérem, válasszon ki három olyan javaslatot, amelyet a fentiek közül hasznosnak tart és vizsgálja meg ezek alkalmazhatóságát, relevanciáját.

Választott javaslatok:

- 1. Az Ornstein-Uhlenbeck folyamat formájában változó paraméterek ígéretes lehetőséget nyújtanak folyamatosan tanuló modellek létrehozásához. Ehhez ki kellene fejleszteni azt a gazdaságosan kivitelezhető számítási eljárást, amivel az ilyen modellek bizonytalanságvizsgálata elvégezhető lenne.*
- 2. A Fisher információs mátrix segítené a modellek közti választást és az érzékenységvizsgálatot, valamint elkészítése könnyen beilleszthető lenne a szokásos MCMC mintázásba.*
- 3. Vizsgálandó, hogy az adaptív felejtési stratégia változó felejtési rátája hogyan szinkronizálható a klasszikus bayesi tanulással és a nemtriviális hibamodellekkel.*