

Válasz Bárdossy András 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.

Dr Honti Márk értekezését 2020-ban nyújtotta be. A munka teljes terjedelme 101 oldal. Az értekezés a jelölt 11 nemzetközi publikációjára épül.

Az értekezés 5 fejezetből áll.

A bevezetés a modellkalibráció általánosan használt módszereit ismerteti vázlatosan. Ezt követően környezeti modellek paramétereinek felismerhetőségnek problémáját ismerteti. A környezeti modellek mind korlátozott számú és mérési bizonytalanságokkal terhelt megfigyelések miatt esetenként nagyon bizonytalanok, és paramétereik nem egyértelműen azonosíthatók. Az értekezés célja a felismerhetőség Bayes-i módszerekkel történő segítése.

A második fejezetben a modellszerkezet felismerhetőségének Bayes-i statisztikával való javítását elemi a jelölt. A felismerhetőség javítása nagyon fontos a modell hibájának csökkentéséhez, Formailag a javasolt megoldás jó, de a prior eloszlás és a hibamodellek választása miatt ez a megoldás nem kvantifikálható “szubjektív” hibákhoz vezethet. Ez a probléma a Bayes-i statisztika alapvető gondja, és így nem a csökkenti a jelölt munkájának értékét. A fejezetben ismertetett példa ennek ellenére hasznos és jól dokumentált.

A fejezetben ismertetett eset véleményem szerint gyakori a környezeti modellezésben: a bayesi megközelítés a szubjektivitás árán javítja a modell felismerhetőségét, ugyanakkor ennek hiányában a modell talán objektív(ebb) marad, de használhatósága erősen kérdéses lesz. A túlparaméterezett modellek, a kalibrált paramétereket értelmezni kívánó “inverse modelling” mind gyakran vezetnek olyan zsákutcába, melyből csak a szubjektivitás árán szabadulhatunk. Ezen csapdahelyzet objektív feloldása az lenne, ha beismernénk, hogy környezeti modelljeink többsége nem alkalmas a modellezett rendszer viselkedésének elfogadható pontosságú leírására, de ez gyakorlati szempontból általában nem opció.

A harmadik fejezet egy a környezeti modelleknél felmerülő alapvető problémával, a bemenő adatok hibáinak következményeivel foglalkozik. A vízzel kapcsolatos környezeti modellek rendkívül összetettek, és a befolyásoló tényezők jelentős része térben és időben változó természetű változóktól függ. A modern mérés technika ugyan lehetővé teszi egyes paraméterek finom időbeli gyakorisággal történő mérését, de a megfigyelések térbeli sűrűsége jelentősen megnöveli a modellek hibáját.

Más szempontból nézve nem a modell hibája nő meg, hanem jobban látjuk a ritkább adatok esetén rejtve maradó hibát és azt, hogy milyen rossz is a modellünk.

A legnagyobb probléma itt a modell szerkezeti hibáinak és a mérések hibáinak a modell hibájára való hatásának különválasztása. A környezeti modellezésben gyakran elhanyagolják a bemenő adatok hibáját, és azokat modell paraméterekkel próbálják kompenzálni. A jelölt itt jól felismerte a probléma jelentőséget és különböző megoldási módszereket fejlesztett ki. A módszerek itt is a Bayes statisztikán alapulnak és érdekes használható eredményeket produkálnak. A probléma itt is, mint számos más esetben az, hogy a módszerek speciális a hiba struktúrára vonatkozó feltételezésekből indulnak ki. Ezen hipotézisek ellenőrzése rendkívül nehéz, és sajnos ez a munka sem foglalkozik ezzel a problémával.

A hibamodellel feltételezéseinek ellenőrzése valóban nehéz. A 3. fejezetben bemutatott esetben Reichert és Schuwirth (2012) gyakorlatát követve a legnagyobb poszterior valószínűségű megoldás hibafolyamatán volt ellenőrizhető a hibamodellel jogossága. A függetlennek és normális eloszlásúnak feltételezett "E" hibafolyamat teljesítette ezeket a kritériumokat ([138] bekezdés, 3.5 ábra jobb panel). A memóriával rendelkező "B" hibafolyamat megítélése nehezebb. Kuczera és Kavetski szerint a maximum poszterior valószínűségű megvalósulásának szintén teljesítenie kellene a hibamodellel statisztikai feltételezéseit (eloszlás, autokorreláció), míg Reichert úgy érvel, hogy "B" bayesi folyamat, tehát nem kell ezek teljesülését vizsgálni.

A negyedik fejezetben a modellek időbeli változásával foglalkozik a szerző. Általános modellezési gyakorlat az, hogy egy nem jól működő modellt a modellezők további folyamatokkal és paraméterekkel bővítik, hogy ezzel a modell hibákat redukálják. Sajnos ez az esetek nagy részében csak a modell kalibrációban segít, de a tényleges modellezést nem javítja. Egy másik lehetséges út a modell paraméterek időbeli változásának feltételezése. A paraméterek időbeli változtatása nagymértékben megnöveli a modellező lehetőségeit, de jelentősen korlátozza a modell előrejelzése való alkalmazását mivel a modell jövőbeli paramétereit is becsülni kell. Az időfüggő paraméterek racionális választása szükségessé teszi a paraméterek változásának korlátozását, például különböző folytonosságra vonatkozó feltételekkel. A fejezetben ismertetett tavi oxigén forgalmat leíró modell esetében a szerző egy nagyon komplex modellre alkalmazza egy Bayes-i becslést. Az eredmények jól mutatják a módszer alkalmazhatóságát.

Köszönöm.

Az ötödik fejezetben a elért eredményeket foglalja össze a jelölt. Ezután következnek a tézisek. A téziseket a harmadik kivételével el tudom fogadni. A harmadik tézis módosítását javaslom. Véleményem szerint a modell bemenő adatainak hibáját esetenként meg lehet becsülni és legalábbis részben számszerűsíteni lehet annak következményeit. A jobb modellezés érdekében törekedni kell arra, hogy az adatok és a modell szerkezeti hibait amennyire lehet különválasszuk. A bemenő adatok hibájának időbeli és térbeli heteroszkedaszticitása lehetőséget ad a szerkezeti hibák részbeni elkülönítésére.

Valóban, vannak olyan bemenő adatokat terhelő hibatípusok, melyek jó eséllyel felismerhetők és így a szerkezeti hibáktól elkülöníthetők. Szélsőséges példa a csapadék-lefolyás modellezésből pl. az, ha nem mértünk csapadékot, de mégis jön egy árhullám (nyáron, mert télen a gyors olvadás valóban okozhat ilyet). Ugyanígy tisztán felismerhető szerkezeti probléma lehet pl. a recessziós fázis rossz leírása. Sok esetben, beleértve a 3. fejezetben ismertetett vízgyűjtők modellezését is, a modellt meghajtó impulzusok annyira sűrűn érkeznek, hogy hibáik következményei (a vízhozamban) szinte sosem különülnek el tisztán a mindenképpen jelen lévő szerkezeti hibák következményeitől. A Kirchner (2009) nyomán elvégzett kísérletben

mindkét svájci vízgyűjtőn közel tökéletes egyezést (Nash-Sutcliffe > 0.95) lehetett elérni a mért és a modellezett vízhozam között egy átlagos teljesítményű paraméterkészlettel (NS $\sim 0.6-0.7$) és a bemenő csapadék-adatsor elfogadható mértékű módosításával (20-30% relatív változtatás az egyes napi összegekben a hosszútávú összeg megtartásával). Ugyanilyen jó egyezés volt elérhető a bemenő adatok változatlanul hagyásával, de eseményfüggő modellparaméterek alkalmazásával is, vagyis a végső hiba szinte 100%-ban allokálható volt a bemenő adatokra és a modellszerkezetre is. Jogos megjegyzés, hogy a hibaforrások jobb elkülönítése valószínűleg lehetséges lett volna pl. akkor, ha a szimulációkat nem napi, hanem órás léptéken végezzük, mely láthatóbbá tette volna az időbeli eltéréseket.

Bár egyetértek azzal, hogy a tézis megfogalmazását pontosítani kellene, az eljárás nem engedi a téziszöveg módosítását. A pontosított verzió így hangzana:

“A modell kimenetében **gyakran** 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 hibamodellel a két hibaforrás hatásának mértékére reális feltételezéseket tesz.”

Az értekezés formailag megfelel az MTA doktori értekezéssel szembeni követelményeknek. Az értekezés egyes fejezeteiben a szerző néhány saját publikációjának eredményeit mutatja be. Sajnos a publikációk másolatát a szerző nem mellékelte, így azokat az olvasóknak maguknak kell felkutatni.

Sajnos az MTA online rendszere nem biztosított lehetőséget a kapcsolódó publikációk feltöltésére.

A jelöltnek az MTA Doktora tudományos fokozat odaítélését ajánlom.

A dolgozattal kapcsolatban többek között a következő kérdéseket kívánom tenni:

1. A felismerhetőség javítása Bayes-i statisztikával egyértelműbbé tudja tenni a modell becsült paramétereit, azaz csökkenti azok bizonytalanságát. Vezethet ez a módszer ahhoz, hogy relatíve egyértelműen rossz paramétereket becsülünk? Mennyiben befolyásolja a prior eloszlás választása a modell prediktív hibáját? Lehet a modell hibáját a paraméterek bizonytalanságának becslésére használni?

Igen, a rossz (nem reprezentatív) prior alkalmazása valóban eltérítheti a paramétereket, de a Bayes képlet garantálja, hogy elegendően erős bizonyíték (likelihood) és megfelelő típusú prior esetén a poszterior el tud távolodni a priorban meghatározott magas valószínűségű tartománytól, vagyis az így bevitt hiba hatása korlátozott lehet. (Ezért nem célszerű pl. éles paraméterkorlátokat szabni, hanem inkább a prior valószínűség folytonos csökkenésével kifejezni egy tartomány valószínűtlenségét.) A prediktív hiba a rossz prior miatt természetesen nagyobb lesz, de a fenti mechanizmus miatt nehéz a modellt a nagyon nagy prediktív hiba régiójában tartani, ez inkább csak optimalizálási nehézségeket szokott okozni. A prediktív hiba sokszor nem egyértelműen kötődik a paraméterek bizonytalanságához, oka lehet a szerkezet és a bemenő adatok hibája is. Az mindenesetre szükségszerű, hogy a nagyobb prediktív hibához szélesebb paraméter-bizonytalanság tartozik, de a bizonytalanság abszolútértéke a hibamodellel (is) függ. A hagyományos független hibamodellel például kisebb bizonytalansághoz vezet, mint az autokorrelált hibafolyamat.

2. A bemutatott esetek nagy részében a hiba eloszlására a több változós normális eloszlást használta. Reális ez a feltételezés, vagy csak „kényelmi” okokból lett feltéve?

A hibák eloszlását csak a nagy sűrűségű adatsorokon lehetett érdemben vizsgálni. A 3. fejezet lefolyás-modelljében a normalitás igazolható volt (3.5 ábra). A normalitás feltételezése természetesen kényelmes a hibák egyszerű összeadhatósága miatt és általában biztosítható is a mért és a modellezett adatsorok Box-Cox transzformációjával. Ahol kevés pontra kalibrálunk, ott általában egyéb információ híján feltételezzük a normalitást (és a hibák függetlenségét).

3. A környezeti modellezés Bayes-i statisztikával való alkalmazása a mérési adatok mellett szubjektív feltételezéseket használ. Ebből a szempontból ellentétes manapság divatos csak az adatokra épülő, mesterséges intelligenciát használó modellekkel. Feloldható ez az ellentét? Melyik módszeré a jövő a jelölt szerint?

Ez az ellentét lehet, hogy csak látszólagos. A bayesi modellezés szubjektív feltételezései általában adatokon alapulnak. A környezeti modellezésben meg szokás követelni, hogy a prior eloszlásokat korábbi, akár más, de hasonló rendszereken végzett megfigyelések alapján definiáljuk. Így a tiszta szubjektivitás tulajdonképpen a támogató adatok összeválogatásában, esetleg súlyozásában jelentkezik. Ez az adat-alapú, felügyelet nélkül tanuló modelleknél is így van, a tanító-halmaz, melyet általában mi válogatunk össze, kondicionálja a modellt. Lényeges különbségnek inkább azt látom, hogy a klasszikus modellezésben megszabhatjuk az alkalmazott modell szerkezetét, míg a mesterséges intelligencia termékei minden esetben black box modellnek tekinthetők. Ez kritikus a megváltozott peremfeltételek közötti előrejelzések szempontjából, hiszen ekkor a modell szerkezetében leképeződő tudományos ismeretek legitimálják az előrejelzéseket, vagyis azért hiszünk a modell előrejelzéseiben, mert a modellszerkezet olyan egyenletekre épül, melyeket valamennyire általános(abb) érvényűnek gondolunk. A black box modellek ezért szerintem inkább az operatív előrejelzéseket uralhatják, míg a hagyományos modellek a távlatiakat.

Irodalomjegyzék

Kirchner, J. W. (2009), Catchments as simple dynamical systems: catchment characterization, rainfall-runoff modeling, and doing hydrology backward, *Water Resources Research*, 45, W02429, doi:10.1029/2008WR006912.

Reichert, P., és N. Schuwirth (2012), Linking statistical bias description to multiobjective model calibration, *Water Resources Research*, 48(9), doi:10.1029/2011wr011391.