

# Válasz Bolla Marianna 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.

Mint a szerző a mottóban is írja, nem komplex modellekkel foglalkozik, hanem a valós adatokat, feltételeket és elvárásokat mindinkább kielégítő eszközöket használ a vízi környezet modellezéséhez. Ehhez a Bayes módszertant választja, ami ugyan Thomas Bayes XVIII. századi eredményéhez nyúlik vissza, de napjainkban is újabb és újabb továbbfejlesztett változataival találkozunk. Maga a Bayes tétel egy nagyon egyszerű megfigyelésen alapul a feltételes valószínűség kiszámítására a feltétel és következményét jelentő esemény megfordítására vonatkozóan. Ez akkor érdekes, ha ún. teljes eseményrendszerünk van, és az eseményrendszer tagjainak valószínűségére van egy ún. prior eloszlásunk. Ez az ‘a priori’-nak is nevezett eloszlás tapasztalás előtti, azaz a kísérlet elvégzése előtt is rendelkezésünkre áll (előzetes megfigyelések, információk vagy szubjektív elképzelések alapján). A kísérlet elvégzése után a tapasztalatot figyelembe véve számítható ki az ‘a posteriori’ (tapasztalat utáni) eloszlás. A prior eloszlás szubjektív választása körül filozofikus viták bontakoztak ki, ui. Bayes eredeti elképzelése egyenletes eloszlású priorra vonatkozott. Később Laplace ezt tetszőleges diszkrét eloszlásra cserélte. Ennél is később, a XX. század első felében, mikor a modern statisztikát lényegében megalapította az angolszász iskola R. A. Fisher vezetésével (amihez a svéd H. Cramér és az indiai C. R. Rao is hozzájárultak), a Bayes tétel alapján a Bayes módszert, mint becslési módszert vezették be. Ennél már az eloszlás paraméterének prior eloszlásából határozzák meg a paraméter posterior eloszlását a konkrét megfigyelés (tapasztalat) alapján. A posterior valószínűségek maximalizálása a paraméterben fontos feladat a disszertációban, azonban a jelölt nem tárgyalja a Bayes becslések négyzetes rizikót minimalizáló tulajdonságát, amikor is a paraméter feltételes várhatóértékét kell venni a feltételben álló tapasztalati megfigyelésre, és így a becslés az adott megfigyelés függvényévé, azaz statisztikává válik. Formálisan ez a feltételes várhatóérték vevés csak speciális elméleti háttéreloszlások esetén végezhető el, azonban a gyakorlatban is vannak numerikus statisztikai algoritmusok a feltételes várható érték számolására mintából (pl. Breiman-Fiedler ACE algoritmus, Györfi László nemparaméteres regressziója vagy Dempster-Laird-Rubin EM algoritmus). Kicsit hiányoltam ezeket a disszertációból.

*Valóban, a hangsúly a teljes poszterior eloszlás feltérképezésén volt.*

Ugyanakkor Jelölt bizonyítja jártasságát abban, hogy a vízügyi adatok vonatkozásában hogyan lehet optimális stratégiákat kidolgozni. Visszatérve a Bayes módszer aktualitására, azt sikeresen alkalmazták a XXI. század elején az Air France Rio de Janeiróból Párizsba tartó járatának lezuhanása után a fekete doboz megtalálására az Atlanti-óceánban. Néhány év

sikertelen keresés elteltével ui. a francia hatóságok az US Navy egy (hölgy) szakértőjéhez fordultak, aki historikus időjárási és áramlástan adatokat bevive a priorba, posterior valószínűségeket tudott adni a fekete doboz megtalálására az óceánban behatárolt (de azért elég nagy) terület egyes régióiban való megtalálhatóságra. Kisebb módosítások után a keresés sikerre is vezetett a legnagyobb posterior valószínűségű régióban.

A dolgozat négy fejezetre oszlik, melyek alapján hat tézist fogalmaz meg a jelölt.

A Bevezetésben Jelölt irodalmi áttekintést ad a hagyományos (nem bayesi módszereken alapuló) modellezési gyakorlatról. A felismerhetetlenség és dekompozíció által előállított műtermékeket saját esettanulmányokon mutatja be (Honti és Stamm, 2010; Honti és Istvánovics, 2019). A klasszikus modellkalibráció mellett, ahol a referencia-adatok  $L(\theta, Y_O)$  likelihoodját maximalizálják  $\theta$ -ban a paraméterterén, a log-likelihood függvényen keresztül, Jelölt belátja, hogy Gauss eloszlás esetén a likelihood maximalizálása ekvivalens a hibatag legkisebb négyzetes minimalizálásával. (Itt a hiba az  $Y_O$  referencia adatok és az  $Y_M(\theta)$  determinisztikus modell kimenet közt értendő.) Ismerteti a GLUE (Generalized Likelihood Uncertainty Estimation) eljárást (Beven és Binley, 1992), ami a Hornberger–Spear-féle érzékenységvizsgálat továbbfejlesztésének tekinthető. Ez azon alapul, hogy a kalibráció célfüggvény-értéke szempontjából egyenértékű (behavioural) paraméterkészletek nem feltétlenül korlátozódnak a paraméterter egy részére. Ezért a teljes paraméterteret lefedő Monte–Carlo mintázást végeznek. A vízi ökoszisztéma anyagcseréjét a limnológia kezdetei óta általában az oxigénben kifejezett nettó elsődleges termeléssel (Net Ecosystem Production, NEP) jellemzik. Ez a GPP (Gross Primary Production) és R (a teljes ökoszisztéma légzése) különbségeként időben kifejezhető. Ha a NEP pozitív, akkor az ökoszisztéma autotróf, ha negatív, akkor hetero- vagy disztróf. Jelölt állítása szerint a GPP és R napi (rövid távú) értékei közti lineáris korreláció nagy része a hibaterjedés műterméke, ami elfedi a napi kapcsolat valószínűsíthetően hiszteretikus jellegét (Honti és Istvánovics, 2019). A paraméterek és modellszerkezet felismerhetetlensége így a modellek alkalmazhatóságát hátráltatja.

Ezzel szemben a bayesi paraméterbecslés külső információk bevonásával javítja a paraméterek felismerhetőségét, ha az információ a kísérlettől független forrásból származik. A hagyományos kalibráció feltételezi, hogy a kalibrációban csak a modell hibája véletlen, a paraméterek nem valószínűségi változók; itt a tradicionális statisztikai következtetés csak a hibára vonatkozhat. Ezzel ellentétben, a bayesi statisztikán alapuló kalibráció a modell paramétereit és strukturális bizonytalanságát is bevonja a vizsgálatokba. A bayesi paraméterbecslés külső információk bevonásával javítja a paraméterek felismerhetőségét, de nem tudja az összes felismerhetetlenségi problémát megoldani. A különböző modellszerkezetek strukturális egyenértékűsége csak akkor küszöbölhető ki, ha a kérdéses szerkezeti elemeket befolyásoló paraméterekre nagyon pontos információ áll rendelkezésre vagy több olyan rendszert tudnak egyszerre kalibrálni, ahol a paraméterek kifejeződése eltérő mértékű. Strukturális egyenértékűsége Jelölt példaként hozza fel az OECD 308-as kísérletet, melyben három modellváltozatot egyenértékűnek találtak. Az OECD 309-es kísérlet bevonása a kalibrációba viszont segített, mert pontosította az aerob lebomlás sebességét, és ennek alapján a 308-asbeli anaerob bomlás sebessége is kevésbé bizonytalanná vált (Honti és Fenner, 2015; Honti és mtsai, 2016).

A Bayes becslés alapegyenlete

$$\mathbb{P}(\theta|Y_O) = \frac{L(\theta, Y_O)\mathbb{P}(\theta)}{\int L(\theta, Y_O)\mathbb{P}(\theta) d\theta}$$

ahol  $P(\theta)$  a  $\theta$  paraméter megfigyelési adatoktól független prior (azaz tapasztalás előtti),  $P(\theta|Y_O)$  pedig a megfigyelés (tapasztalás) utáni valószínűsége;  $L(\theta, Y_O)$  a likelihood függvény, mely nem más, mint  $f(Y_O|Y_M(\theta))$ , azaz a mintaelemek adott modell és paraméter melletti sűrűségfüggvénye (folytonos esetben, a kevésbé tipikus diszkrét esetben pedig súlyfüggvényt kell használni). A számláló egy adott paraméterértékre vonatkozik, a nevezőben viszont a teljes paramétertéren kell integrálni (diszkrét esetben összegezni). Mivel a nevező már nem függ a paramétertől, a poszterior valószínűségek nagyságrendjét a számláló jellemzi. A kalibráció ezek után a posterior valószínűség maximalizálása  $\theta$ -ban, amelyben a normáló tényező nem játszik szerepet, csak a prior és a likelihood egyensúlya. Ha a prior eloszlás egy pont körül koncentrálódik, akkor a posterior is egyetlen optimális paraméterkombinációt jelöl ki a többdimenziós paramétertérben. Viszont a prior dominanciája esetén a kalibrációnak nem sok értelme van, mert az adatokból a modell keveset tanul. Másfelől, egy nem informatív prior eloszlás (pl. egyenletes a paramétertéren) a hagyományos likelihood maximalizását eredményezi, ami a szokásos kalibrációhoz vezet.

A szisztematikus hibák bayesi leírása (Kennedy–O’Hagan hibamodel, 2001) nem alkalmazható, amikor a hibafolyamatot időszakos, de jelentős lökések érik a bemenő adatok hibái miatt, mert ekkor a szisztematikus hibák eloszlása időben változik. Erre a helyzetre fejlesztette ki Jelölt a zavart Orstein–Uhlenbeck folyamaton alapuló bayesi hibamodelt. Ez csapadék-lefolyás modelleknél egy időben képes a szerkezeti, bemenő és megfigyelési adathibák kezelésére (Honti és mtsai, 2013). Az új hibamodel jelentősége, hogy vele a csapadék-lefolyás modellek teljes bayesi kalibrációja és bizonytalanságvizsgálata az idősorok transzformációja nélkül is végrehajtható. A zavart Orstein–Uhlenbeck hibamodelhez Jelölt kidolgozott egy, a modell korlátozott hosszúságú memóriáját kihasználó, kernel-alapú iteratív eljárást, mellyel hosszú idősorok likelihood számítása viszonylag kisméretű mátrixok invertálásával megoldható, szemben a régebbi gyakorlattal. A tavi anyagforgalom modellezésében Jelölt bemutatta, hogy a rövidtávú idősor- előrejelzéseknél jó megoldást ad a bayesi tanulás és időben változó paraméterek alkalmazása (Honti és Istvánovics, 2016; Honti és mtsai, 2016; Istvánovics és Honti, 2017). Időben változó paramétereket ugyan régebben is alkalmaztak környezeti modellek kalibrációjára, de bayesi tanulás nélkül. Jelölt az alapegyenletet alkalmazza iteratív módon a mozgó időablakokban, ahol a megelőző iterációs lépés poszteriorja lesz a következő iterációs lépés priorja.

Az éghajlatváltozás hatásai hosszútávúak, ezeknél nincs értelme a bekövetkező események sorrendiségét vizsgálni, itt nem maga az idősor, hanem annak statisztikai eloszlása az előrejelzés tárgya. Jelölt kifejlesztett egy olyan közelítő likelihood függvényt, melyben az idősor-hibamodelhez hasonlóan állítható a bizonytalanság mértéke és az eloszlásra illesztés végrehajtható (Honti és mtsai, 2014). Jelölt továbbá bemutatta, hogy az eloszlásra illesztéssel a modellezett éghajlati peremfeltételek szisztematikus eltérései is sikeresen korrigálhatók.

Úgy gondolom, az értekezéssel Jelölt elérte célját: bemutatta, hogyan lehet a vízi környezet modellezésében a kalibrációt és a bizonytalanságvizsgálatot fejleszteni bayesi módszerekkel. Mivel univerzálisan érvényes (objektív) kalibráció nem létezik még egy adott témakörön belül sem, a modellek eredményei nem szükségszerűen összehasonlíthatók és általánosíthatók. Ugyanakkor a bayesi eljárások biztosítják a modellezési gyakorlatok reprodukálhatóságát, mivel a szubjektivitást okozó elemek explicit módon megjelennek benne, ezért egyértelműen dokumentálhatók. Ezzel jelölt egyfajta mesterséges intelligenciát épít, bár ezt nem mondja disszertációjában.

*Köszönöm.*

Kicsit hiányolom a gépi tanulásra építő modern statisztikai algoritmusok (EM, ACE) említését és használatát. Erre vonatkoznak Jelöltnek feltett kérdéseim is. Ettől függetlenül a doktori mű tudományos eredményeit és a kapcsolódó publikációkat (többségükben vezető nemzetközi folyóiratokban jelentek meg, és többnyire Jelölt az első szerző) elegendőnek tartom az MTA doktora cím megszerzéséhez a nyilvános védés kitűzését javaslom.

*Köszönöm.*

A Jelöltnek feltenni kívánt kérdéseim:

1. A Bayes módszer szubjektivitása alkalmas-e mesterséges intelligencia építésére vízügyi adatokon?

*A bayesi tanulás két évtizede még önmagában is mesterséges intelligenciának számított (Russel és Norvig, 2000). Ebből a szempontból az alkalmasságot az értekezés demonstrálta. Mára a mesterséges intelligencia területén a felügyelet nélkül tanuló rendszerekre és a nagy adathalmazok elemzésére terelődött a hangsúly. A szubjektivás viszont a modern mesterséges intelligenciában is áthatóan jelen van:*

*“Maga a mesterséges intelligencia nem szubjektív, mivel olyan algoritmusokon és matematikai modelleken alapul, amelyeket arra terveztek, hogy adatokat dolgozzanak fel, és az adatok alapján előrejelzéseket vagy döntéseket hozzanak. A mesterséges intelligencia fejlesztésében és alkalmazásaiban viszont szerepet játszhat az emberi elfogultság és szubjektivás.*

*Például a mesterséges intelligencia modellek képzéséhez használt adatok elfogultak lehetnek vagy tükrözhetnek bizonyos szubjektív nézőpontokat. Ha a mesterséges intelligencia rendszer képzéséhez használt adatok nem elég sokszínűek vagy nem reprezentálják a valós világot, az eredményül kapott modell elfogult vagy torz lehet. Emellett a mesterséges intelligencia rendszer tervezési és programozási módja is tükrözheti a fejlesztők elfogultságát vagy szubjektív nézeteit.*

*Ezért fontos biztosítani, hogy a mesterséges intelligencia rendszereket etikus és felelősségteljes módon fejlesszék és használják, megfelelő ellenőrzésekkel és ellensúlyokkal, amelyek megakadályozzák, hogy az elfogultság és a szubjektivás befolyásolja az eredményeket.” – ChatGPT v. Mar23 a következő kérdésre: “Is artificial intelligence subjective?”*

*A mesterséges intelligencia potenciális vízügyi alkalmazási területei azok, ahol a modellezés eddig is egyre növekvő szerepet kapott, így valószínű, hogy a közeljövő fejlesztései a komplex előrejelző és optimalizáló rendszerekre fókuszálnak.*

2. A Bayes becslés feltételes várhatóérték képzése elvégezhető-e a gyakorlatban, ill. tervezik-e ehhez olyan modern statisztikai algoritmusok használatát, mint az EM (Expectation–Maximization hiányos adatokra) és ACE (Alternating Conditional Expectation) nemparaméteres regresszióra, kernel alapú simításokkal?

*Az értekezés teljességére érvényes az a feltételezés, hogy a bemutatott környezeti modellek alapvetően rosszak, vagyis nem képesek az elvégezhető mérések pontosságával leírni a modellezett rendszerek viselkedését (vö. “all models are wrong”). Így a modellezés fókuszában nem a legvalószínűbb előrejelzés (vagy paraméterkészlet) állt, hanem a szimulációk bizonytalansága. A bizonytalanságot mindenhol a teljes poszterior paramétereloszlás Markov chain Monte Carlo (MCMC) mintázásával vizsgáltam. A láncok konvergenciájának biztosításához általában 2 külön futtatás volt szükséges, a konvergenciát a Gelman-Rubin feltétel teljesülése jelezte. Ez a nem túl hatékony, de általánosan alkalmazható algoritmus nagyon sok modellfuttatást igényel (esetenként több száz ezret), így a modelleket olyan környezetben kellett implementálni, amely szokásos személyi számítógépeken is nagyon*

gyorsan fut (pl. 20 év napi lefolyás-modellezése kb. 1 mp alatt). Az MCMC-ben használt egyszerű Metropolis algoritmus konvergenciájának gyorsításához szükség volt a poszterior valószínűség előzetes maximalizálására, ami a mintázás kezdőpontjaként szolgált. Ez a futtatások gyorsasága miatt kivitelezhető volt az optimalizálandó függvénnyel kapcsolatban szinte semmilyen feltételt nem szabó, de abszolút nem hatékony Nelder-Mead algoritmus többszöri futtatásával, ahol a sikeres konvergencia után addig indult újra és újra a folyamat, míg ugyanabba a pontba nem érkezett. Ez a se nem modern, se nem hatékony matematikai eljárás nem alkalmazható abban az esetben, ha a modelleket nem lehet szinte korlátlan ismétléssel lefuttatni. Így a jövőben szükséges lesz a hatékonyabb, modern módszerek alkalmazására. Az ACE és EM algoritmusok véleményem szerint bayesi kontextusban is segíthetnek a legjobb paraméterkészlet megtalálásában. Ugyanakkor jelenleg bizonytalanságvizsgálat, vagyis a teljes poszterior feltérképezése a leginkább számításigényes feladat, ezt pl. emulátorok alkalmazásával lehet gyorsítani.

## Irodalomjegyzék

Russell, S. J., és Norvig, P. (2000). Mesterséges intelligencia modern megközelítésben. Panem-Prentice Hall. ISBN: 2399994352836