

Kraków, 2.10.2018

dr hab. inż. Mirosław Zimnoch
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Akademia Górniczo-Hutnicza
im. Stanisława Staszica w Krakowie
AL. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków
email: zimnoch@agh.edu.pl

Recenzja rozprawy doktorskiej
mgr Piotr Kopka

Zastosowane metodologii bayesowskiej w stochastycznej rekonstrukcji zdarzeń
na przykładzie uwolnień niebezpiecznych gazów do atmosfery

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska dotyczy zastosowania metodologii bayesowskiej do rekonstrukcji emisji substancji gazowych do atmosfery przy użyciu modeli dyspersyjnych oraz modelowania odwrotnego. Autor we wstępie wskazuje możliwość zastosowania tej metodologii w systemach wspomagania decyzji do identyfikacji miejsca oraz parametrów źródeł emisji gazów niebezpiecznych w przypadku incydentów związanych z ich awaryjnym uwolnieniem. W rzeczywistości metodologia ta ma dużo szersze zastosowanie nie tylko w badaniach atmosferycznych, ale również np. do analizy map emisji gazów cieplarnianych prowadzonych w ramach badań dotyczących zmian klimatu na Ziemi, zarówno w skali lokalnej (np. emisje metanu z kopalni), jak również regionalnych i globalnych (badania trendów zmian emisji dwutlenku węgla do atmosfery oraz możliwość identyfikacji obszarów za nie odpowiedzialnych. W tym kontekście, praca poprzez udoskonalenie tej metodologii stanowi ważny wkład w ten obszar wiedzy.

Modelowanie dynamiki transportu atmosferycznego należy do jednych z najbardziej złożonych zagadnień obliczeniowych, a zarazem od szeregu lat obserwujemy dynamiczny rozwój metod i modeli numerycznych służących rozwiązywaniu tych zagadnień. Widać stąd, że tematyka jest bardzo aktualna a złożoność procesów fizycznych i chemicznych zachodzących w atmosferze pozostawia wciąż duże pole do rozwoju i udoskonalania wspomnianych metod. W szczególności modelowanie odwrotne, pozwalające na podstawie obserwacji atmosferycznych określać parametry wejściowe modelu, jak wielkości czy położenia źródeł emisji gazów znajduje szereg zastosowań począwszy od modeli operacyjnych służących do analizy bieżącego stanu badanego obiektu (przewidywanie jakości powietrza, ocena zagrożeń spowodowanych sytuacjami awaryjnymi, czy przewidywanie zjawisk ekstremalnych), a skończywszy na długoterminowych analizach zmian zachodzących w systemie klimatycznym, czy badaniu skutków wprowadzania regulacji prawnych czy działań naprawczych mających na celu poprawę stanu środowiska naturalnego. W tym obszarze zastosowań metody bayesowskie należą do najtrudniejszych, ale w zamian oferują możliwość określania nie tylko wartości szukanych parametrów ale również ich rozkładu gęstości prawdopodobieństwa, a co za tym idzie pozwalają rzetelnie szacować niepewności wyników obliczeń.

Praca liczy 156 stron i składa się z 8 rozdziałów oraz dodatku zawierającego wprowadzenie do tematyki atmosferycznych modeli dyspersyjnych oraz opis modeli zastosowanych w badaniach, oznaczonego jako rozdział 9. Na początku pracy autor zamieścił spis treści, słownik oznaczeń oraz streszczenie pracy w języku angielskim. Na końcu pracy umieszczony jest spis rysunków, spis tablic oraz bibliografia, na którą składa się 76 pozycji literaturowych, z czego 24 pozycje zostały opublikowane po 2010 roku, a w 7 przypadkach autorem, bądź współautorem jest doktorant. Przygotowana lista zawiera zarówno pozycje starsze dokumentujące podstawy użytych metod, jak i w dużej części prace publikowane niedawno reprezentujące aktualny stan wiedzy, co świadczy o dobrej orientacji autora w tematyce badawczej. W pracy zamieszczono 38 rysunków w postaci schematów, diagramów, map i wykresów oraz 11 tablic zawierających zestawienia parametrów użytych w modelowaniu oraz zestawienie statystyk uzyskanych wyników. Rozdział 1 stanowi wstęp, w którym opisane są zagrożenia towarzyszące awaryjnym uwolnieniom niebezpiecznych gazów do atmosfery, sformułowany zostaje cel pracy, postawione szczegółowe problemy badawcze oraz streszczona jest struktura pracy. W rozdziale 2 autor wprowadza czytelnika w tematykę stochastycznej rekonstrukcji zdarzeń, a w szczególności formułuje związek między rekonstrukcją zdarzeń a zagadnieniem odwrotnym oraz wymienia i opisuje poszczególne elementy składowe modelu stochastycznej rekonstrukcji zdarzeń. Rozdział 3 poświęcony jest zastosowaniu metodologii bayesowskiej do rekonstrukcji parametrów źródła emisji gazu do atmosfery. Wymienione i szczegółowo opisane są poszczególne składowe analizy jak rozkład a priori, funkcja wiarygodności oraz rozkład a posteriori. Autor opisuje też pojęcie dynamicznych modeli Bayesa pozwalających na analizę danych zależnych od czasu (zarówno obserwacji, jak i możliwych zmian estymowanych parametrów źródła). Rozdział 4 stanowi domknięcie teoretycznej części pracy, w którym autor umieścił opis metod estymacji parametrów modelu, a w szczególności zaprezentował mechanizmy próbkowania wykorzystane do wyznaczenia rozkładu a posteriori parametrów źródła w analizowanych w kolejnych rozdziałach eksperymentach znacznikowych. Na uwagę zasługuje fakt, że autor poza dokonaniem przeglądu istniejących algorytmów próbkowania zaproponował własną oryginalną procedurę przybliżonych obliczeń bayesowskich. Efektywność algorytmów zaprezentowanych w rozdziale 4 została porównana w rozdziale 5 przy użyciu rzeczywistych danych pomiarowych pochodzących z eksperymentu znacznikowego wykonanego w ramach kampanii kopenhaskiej. Eksperyment ten jest najprostszym koncepcyjnie przypadkiem analizowanym w pracy. Polegał on na ciągłej emisji sześćofluorku siarki przez okres około 0.5h na wysokości 115 m n.p.g. w warunkach równowagi obojętnej, lub lekko chwiejnej nad obszarem o niskiej zabudowie. Do rekonstrukcji parametrów źródła posłużyły pomiary średniego stężenia znacznika w okresach 20 minutowych uzyskane z próbek pobranych w około 60 punktach zlokalizowanych na łukach odległych o 2, 4 i 6 km od źródła emisji. Przypadek polegał więc na rekonstrukcji wielkości emisji oraz położenia stacjonarnego źródła dla przypadku w marę homogenicznego obszaru miejskiego o niskiej zabudowie. Porównaniu poddano 4 algorytmy próbkowania (algorytm Metropolisa-Hastingsa (MCMC), algorytm MCMC wraz z mechanizmem sekwencyjnego przekazywania informacji (MCMC-SEQ), Sekwencyjny algorytm Monte Carlo (SMC) oraz Sekwencyjny algorytm przybliżonych obliczeń bayesowskich z wykorzystaniem adaptacyjnych wag (ABC-SMC-AW)). Rozdział 6 zawiera analizę emisji gazu do atmosfery z poruszającego się źródła. Do przeprowadzenia obliczeń wykorzystano dane pomiarowe z eksperymentu „Over-Land Alongwind Dispersion” (OLAD). W tym przypadku znacznikiem był również sześćofluorek siarki, jednak źródło emisji poruszało się po linii prostej z zadaną prędkością. Ponadto w tym przypadku dysponowano znacznie mniejszą ilością punktów pomiarowych stężenia SF₆ (tylko 5), za to parametry meteorologiczne odmiennie od poprzedniego przypadku mierzone były w 6

różnych lokalizacjach. Rekonstrukcja miała na celu określenie 7 różnych parametrów charakteryzujących źródło emisji (położenie x, y , prędkość i kierunek poruszania się źródła, wielkość emisji, czas emisji oraz moment rozpoczęcia emisji). Autor wykazał w tym rozdziale skuteczność zaproponowanej metody rekonstrukcji, co wykazało porównanie uzyskanych rozkładów a posteriori z rzeczywistymi wartościami. Rozdział 7 zawiera analizę najtrudniejszego przypadku dotyczącego uwolnienia gazu na obszarze silnie zurbanizowanym na przykładzie eksperymentu znacznikowego przeprowadzonego w Londynie. W tym przypadku autor musiał zastosować bardziej złożony i wymagający model dyspersyjny „Quick Urban and Industrial Model” (QUIC), umożliwiający obliczenia dla terenu o zróżnicowanej zabudowie i skomplikowanej topografii. Jako algorytm próbkujący został wybrany sekwencyjny algorytm przybliżonych obliczeń bayesowskich z dodaniem algorytmu modyfikacji wag (ABC-SMC-AW). W tym przypadku autor wprowadził szereg modyfikacji, które pozwoliły na znaczne skrócenie obliczeń pozwalając jednocześnie na poprawne określenie położenia źródła emisji. Rozdział 8 zawiera podsumowanie oraz wnioski wyciągnięte z przeprowadzonych obliczeń. Podsumowanie kończy lista publikacji oraz wystąpień konferencyjnych potwierdzających wkład autora w rozwój obszaru wiedzy, dotyczącego stochastycznej rekonstrukcji zdarzeń za pomocą metodologii bayesowskiej.

Praca napisana jest przejrzysto, tok rozumowania jest prezentowany jasno i konsekwentnie. Cel pracy i postawione problemy badawcze są jasno zdefiniowane, a użyte metody i algorytmy precyzyjnie opisane. Uzyskane wyniki ilustrowane są adekwatnymi rysunkami i tabelami. Z całą pewnością doktorant zrealizował założony cel a w szczególności:

- praca zawiera bardzo wartościowy opis stanowiący przegląd dostępnych algorytmów stosowanych w stochastycznej rekonstrukcji zdarzeń stanowiąc cenny materiał dydaktyczny;
- dokonano porównania skuteczności czterech algorytmów próbkowania zastosowanych w stochastycznej rekonstrukcji zdarzeń na przykładzie stacjonarnego źródła emisji SF_6 do atmosfery;
- autor wprowadził szereg autorskich pomysłów zastosowanych do analizy poruszającego się źródła oraz symulacji w terenie zurbanizowanym (algorytm ABC-SMC-AW, wprowadzenie silnie umotywowanych rozkładów a priori, procedura adaptacji harmonogramu progów akceptacji, zastosowanie lokalnego jądra przejścia) osiągając w ten sposób zwiększenie wydajności obliczeń poprzez ograniczenie ilości iteracji uruchamiających model dyspersyjny;
- autor wykazał skuteczność zaproponowanych przez siebie algorytmów do rozwiązania różnorodnych scenariuszy uwolnień gazów do atmosfery uwzględniając źródło stacjonarne oraz ruchome, jak również możliwość wykonywania obliczeń dla skomplikowanej topografii silnie zurbanizowanego terenu.

W pracy brak jest analizy jednego scenariusza, który często ma miejsce w rzeczywistych sytuacjach, a mianowicie możliwości użycia do analizy danych pomiarowych pochodzących z ruchomych punktów pomiarowych. W rzeczywistych sytuacjach często mamy do czynienia właśnie z taką sytuacją, w której po wystąpieniu awarii w rejonie, gdzie nie ma stałej sieci sensorów uruchamia się doraźnie pomiary prowadzone za pomocą aparatury zainstalowanej w samochodzie bądź na pokładzie samolotu czy drona. Zakładam jednak, że taka analiza może zostać wykonana w przyszłości, choć brak jest takiej informacji w podsumowaniu. Analizę uzyskanych wyników dla poszczególnych

eksperymentów utrudnia nieco brak syntetycznego porównania najbardziej prawdopodobnych wartości uzyskanych z procedury rekonstrukcji z wartościami rzeczywistymi. Dane te co prawda zawarte są w tekście, ale syntetyczne zebranie ich na koniec każdego rozdziału ułatwiło by analizę skuteczności wykonanych obliczeń. Mimo, że rozprawa doktorska została napisana bardzo starannie autor nie ustrzegł się drobnych błędów wymienionych poniżej:

- w paragrafie 3.2 na str. 31 autor podaje, że dla dynamicznych modeli Bayesa wszystkie informacje dodatkowe zawarte w elemencie I pozostają niezmiennie dla wszystkich kroków czasowych, podczas gdy w paragrafie 5.2 na str. 58 w danych przekazanych do modelu poprzez parametr I^c zawarte są zależne od czasu parametry meteorologiczne;
- str. 55, w opisie eksperymentu autor użył pojęcia sieci sensorów, podczas gdy w raporcie jest mowa o sieci punktów poboru próbek. O ile mi wiadomo nie istnieją automatyczne sensory pozwalające na pomiar SF_6 na obserwowanych w eksperymencie poziomach stężeń. Niestety zarówno praca, jak i raport prezentujący wyniki eksperymentu nie zawiera opisu metod analitycznych zastosowanych do pomiaru stężeń. Nie wpływa to w żadnym stopniu na prezentowane obliczenia, jednak u osoby zajmującej się pomiarami pozostawia pewien niedosyt;
- str. 73, 4 linijka od dołu zdanie zawiera drobny błąd składniowy;
- na rys 6.2 brak jest opisu osi pionowych;

Dostrzeżone drobne błędy wymienione powyżej nie umniejszają w żadnym stopniu wartości merytorycznej pracy. W mojej ocenie praca doktorska pt: „Zastosowane metodologii bayesowskiej w stochastycznej rekonstrukcji zdarzeń na przykładzie uwolnień niebezpiecznych gazów do atmosfery” spełnia wszystkie warunki stawiane pracom doktorskim i wnioskuje o dopuszczenie mgr Piotra Kopki do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

