

Prof. dr hab. Wojciech Dębski
Instytut Geofizyki PAN

Warszawa, 27.08.2021

**Recenzja rozprawy doktorskiej
mgr. inż. Katarzyny Anny Miernik**

**”Zastosowanie metod optymalizacji globalnej w rozwiązaniu
łączonego zagadnienia odwrotnego w wariancie Pareto dla
wybranych danych geofizycznych”**

Wstęp

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska pt. *”Zastosowanie metod optymalizacji globalnej w rozwiązaniu łączonego zagadnienia odwrotnego w wariancie Pareto dla wybranych danych geofizycznych”* mgr. inż. Katarzyny Anny Miernik została przygotowana w Katedrze Geoinformatyki i Informatyki Stosowanej na Wydziale Geologii, Geofizyki i Ochrony Środowiska Akademii Górniczo-Hutniczej pod kierownictwem dr hab. inż. Tomasza Danka.

Praca poświęcona jest zastosowaniu metodyki Pareto (inwersji wieloparametrowej) do zagadnienia obrazowania płytkich struktur geologicznych wraz z rozwojem dedykowanego oprogramowania i jego wstępnymi testami. Ten właśnie aspekt metodologiczny jest w mojej ocenie najważniejszym elementem tej pracy. Stanowi on najbardziej wartościowy element recenzowanej pracy, dzięki któremu jest ona naukowo wartościowa, co stanowi podstawę do jej publicznej obrony.

Opis rozprawy

Recenzowana rozprawa doktorska liczy 85 strony, w tym część główna (wraz z aneksami) to 70 stron. Podzielona jest ona na 6 rozdziałów (jeden nie wymieniony w spisie treści) posiada indeks używanych skrótów, a także spis literatury, tablic i rysunków. Spis literatury zawiera 45 pozycje, a doktorant jest współautorem 3 prac zamieszczonych na liście (w tym raz pierwszym). Podział materiału rozprawy na rozdziały jest przeprowadzony w sposób logiczny. Pracę rozpoczyna krótki wstęp, który wraz z rozdziałem 2 wprowadza nas w tematykę rozważań oraz podaje motywację podjęcia opisanych badań.

Następny rozdział stanowi wprowadzenie do zagadnień optymalizacji globalnej (rozdział 3) oraz dość szczegółowy opis implementacji wybranych algorytmów numerycznych (rozdział 4). W rozdziale tym zawarte są również opisy wykonanych testów na danych syntetycznych oraz otrzymane wyniki w tym interesujące porównania dotyczące zrównoleglenia kodów obliczeniowych. Rozdział 5 to niezwykle zwięzłe zebranie wyników oraz doświadczeń nabytych w czasie testów numerycznych. Ostatni rozdział (a w zasadzie załącznik/aneks) to techniczny opis zbudowanego oprogramowania oraz przykład jego użycia - rodzaj instrukcji obsługi. Recenzowana praca, jak widać z powyższego opisu ogólnego jest niezwykle spójna.

Opis merytoryczny

Techniki inwersyjne pojawiają się wszędzie tam gdzie interesujące nas informacje nie mogą być otrzymane bezpośrednio z obserwacji badanego obiektu. Jednym z geofizycznych przykładów takiej sytuacji jest mapowanie budowy skorupy ziemskiej a w szczególności poszukiwanie i dokumentowanie złóż surowców mineralnych - centralne zagadnienie geofizyki poszukiwawczej. Nie jest więc zaskakujące, że właśnie ta dziedzina nauki wniosła i ciągle wnosi niezwykle cenny wkład w rozwój technik inwersyjnych. Recenzowana praca wpisuje się w ten ogólny trend podejmując zagadnienie relatywnie nowe, a mianowicie prowadzenie efektywnej inwersji danych obserwacyjnych o różnym charakterze jak grawimetrycznych magnetycznych sejsmicznych itp. Klasyczne podejście do analizy tak różnorodnych danych obserwacyjnych polegało na konstruowaniu osobnych modeli w oparciu o dane różnego typu a następnie próbę ich ``uzgodnienia'' w celu stworzenia jednego kompleksowego rozwiązania. Podejście takie jest z wielu powodów nieefektywne co zaowocowało wieloma pracami badawczymi w których starano się wykonywać inwersję wszystkich danych równocześnie (ang. Joint inversion). Metodologicznie jest to podejście niewątpliwie poprawne, choć w praktyce napotyka mnóstwo problemów technicznych powodujących, że otrzymane rozwiązania są niezwykle subiektywne, a więc potencjalnie mało wartościowe. Próby obejścia

wspomnianych problemów zwróciły uwagę badaczy w kierunku metod optymalizacji wielokryterialnych. Jedną z takich metod jest technika Pareto zastosowana w recenzowanej pracy. Niewątpliwie jest to technika która w zastosowaniach geofizyki poszukiwawczej może wnieść istotną poprawę dokładności i efektywności obrazowania struktur geologicznych. Z tego punktu widzenia, bardzo cieszy podjęcie prac badawczych w tym zakresie, ale też ich przełożenie na konkretne implementacje oprogramowania gotowego do stosowania w warunkach komercyjnych. Powyższy aspekt metodologiczny jest w mojej ocenie najważniejszym elementem dzięki któremu recenzowana praca spełnia warunki ustawy o stopniach naukowych. Najważniejszym, choć nie jedynym gdyż wnosi ona także ciekawe elementy do samej teorii inwersji, czego wydaje się, że Autorka nie w pełni jest świadoma. Do tego elementu wrócę na koniec tej części recenzji.

Omawiając merytoryczną stronę pracy należy wyróżnić kilka elementów które omówię w kolejności ich prezentacji w pracy. Pierwsze dwa rozdziały pracy (Wprowadzenie i Zarys inwersji łączonej) mają za zadanie między innymi przedstawić podjętą problematykę i podstawy podjętych badań. Niestety Autorka robi to niezwykle pobieżnie a na dodatek dopuszcza się wielu nieścisłości. W efekcie te dwa wprowadzające rozdziały są najsłabszą częścią pracy i postawiają niezwykle niedosyt. Gdyby nie fakt, że od lat pracuję nad rozwojem teorii inwersji miałbym bardzo poważne problemy ze zrozumieniem o co Autorce chodzi w tej części jaką metodologię zamierza stosować. Czytając pracę pierwszy raz po lekturze tych pierwszych rozdziałów miałem wrażenie, że Autorka nie do końca wie co robiła. Zabrakło mi w tych rozdziałach szerszego wprowadzenia do teorii inwersji (nawet tylko zogniskowanego na technice optymalizacyjne) jak i elementów potrzebnych do oceny efektywności zaproponowanych rozwiązań. Zabrakło mi też, choć to już element nieco subiektywny przedstawienia historii rozwoju teorii inwersji prowadzącego do zastosowania optymalizacji wielokryterialnej. Przecież pomysły tego rodzaju pojawiały się w pracach dotyczących algorytmów próbkowania Monte Carlo (Gibbs-sampler) czy też inwersji "transdimensional" zaproponowanej między innymi przez Sambrida w zakresie tomografii sejsmicznej w oparciu o niezwykle algorytm Green'a - Reversible Jump Markov Chain Monte Carlo.

Nie znalazłem w pracy kluczowej z punktu widzenia optymalizacji wielokryterialnej dyskusji o możliwych niejednoznaczności ich źródeł i konsekwencjach dla inwersji różnych zbiorów danych. Oczywiście jest bowiem pytanie jak błędy pojawiające się w różnych zbiorach danych (grawitacyjnych MT, itp) wpływają na wynikowy front Pareto a więc i wynik inwersji. Co z informacjami a priori, które przecież pojawiają się już w momencie wyboru funkcji kosztów (użytych norm, dokładności (parametr sigma we wzorze 2.4). itp. A które są odpowiedzialne za to co Autorka nazywa wagowaniem i skalowaniem.

Stwierdzenie podane przez Autorkę w kilku miejscach, że podejście wielokryterialne usuwa tę trudność jest tylko częściowo prawdziwe, a Autorka w pracy nie podaje faktycznie żadnych przykładów potwierdzających taką tezę. Dobrym przykładem byłoby zamieszczenie analizy porównawczej dla danych syntetycznych przetwarzanych proponowanym algorytmem jak i klasycznymi

metodami z różnym ``wagowaniem''.

Rozdział 3 (Optymalizacja) jest dokładnym zaprzeczeniem dwu pierwszych rozdziałów. Pomimo różnych drobnych niedostatków edytorskich czytałem ten rozdział z naprawdę dużą przyjemnością. Wyraźnie czuje się, że Autorka doskonale zna i rozumie przedstawianą problematykę. Opis techniki Pareto zalet (i ograniczeń) metod optymalizacyjnych przedstawiony jest niezwykle jasno i logicznie. To samo dotyczy opisu nowoczesnych algorytmów optymalizacyjnych, rozumie się ich działanie i w zasadzie można tworzyć własne aplikacje numeryczne. Jest to niewątpliwie bardzo wartościowa część pracy.

Jednym z celów postawionych sobie w ramach pracy doktorskiej przez Autorkę było stworzenie funkcjonalnej aplikacji do inwersji wielokryterialnej. Jest to oczywiście wartościowy element, choć z mojej perspektywy traktuję go jako element bardziej techniczny niż badawczy. Rozdział 4 pracy poświęcony jest dokładnemu opisowi stworzonej implementacji. Nie jest to jednak opis czysto techniczny – swojego rodzaju podręcznik użytkownika – ten znajduje się w rozdziale Załącznik, ale raczej opis zastosowanych algorytmów, powiązań bloków funkcjonalnych, sposobów poprawy efektywności obliczeń przez zrównoleglanie itp. Jak wspomniałem z mojego punktu widzenia ta część ma charakter bardziej techniczny, niemniej jest to część jak najbardziej wartościowa z punktu widzenia całości wykonanej pracy i wkładu doktorantki w rozwój nowych technik inwersyjnych. Już rzut oka na długość tego rozdziału pokazuje, że stanowi on główny element pracy, a zapewne był (jak wiem z własnego doświadczenia) elementem najbardziej czasochłonnym. Moją jedyną uwagą do tej części jest to, że zamieszczone tam testy syntetyczne zyskałyby znacznie, gdyby znalazły się w oddzielnym rozdziale. W aktualnym stanie rzeczy giną one w opisie implementacji MARIA, wprowadzanych kolejnych udoskonaleniach i trudno wydobyć z nich ważne informacje. Kolejnym efektem ubocznym zastosowanego podejścia do testów syntetycznych jest ich bardzo rozproszony, a przez to dość niespójny i niepełny opis. Brakuje podstawowego opisu wykonanych symulacji, użytych parametrów itp. Na przykład analizując na rysunkach 4.18-4.19 i 4.22-4.23 wyniki dopasowania krzywych czytelnik chciałby wiedzieć jak dane syntetyczne zostały zaszumione. Pojawiające się gdzieś w tekście stwierdzenie, że użyto ``białego szumu gaussowskiego'' jest co najmniej enigmatyczne a na pewno niewystarczające.

Czytając rozdział czwarty i analizując wyniki testów syntetycznych nieodparcie odnosiłem wrażenie, że zaprojektowane one zostały jedynie do sprawdzenia poprawności stworzonego kodu, a nie zaproponowanej metodologii. Uważam, że jest to pewien brak pracy. Praca zyskałaby bardzo na rozszerzeniu zakresu testów. Na przykład bardzo pouczające byłoby porównanie wyników inwersji dla różnych modeli startowych. Otrzymalibyśmy wówczas bardzo konkretne potwierdzenie na ile metoda jest nieczuła na model startowy. Tymczasem użycie modelu startowego (rys. 4.9) niezwykle podobnego do modelu ``prawdziwego (rys 4.9) w jednym z testów pozostawia pytanie bez odpowiedzi. Z punktu widzenia merytorycznego pozostałe rozdziały w zasadzie nie wnoszą

już merytorycznie nowych elementów a jedynie stanowią podsumowanie I pewne usystematyzowanie informacji przekazanych wcześniej, nie będą ich więc dalej omawiać.

Na zakończenie tej części chciałbym powrócić do wspomnianego już wcześniej elementu zdecydowanie niezwykle ważnego który pojawił się w rozdziale 4 i powtórzony został w rozdziale 5, a który w zasadzie nie został wyeksponowany w pracy a zdecydowanie na to zasługuje. Chodzi mi o fragment tekstu ze strony 46 zaczynający się od słów: Głównym wnioskiem powyższych rozważań jest fakt, że chcąc odzyskać wiarygodne informacje o lokalizacji ciała....” mający swoje źródło w tekście na stronie 44 w paragrafie zaczynającym się od słów: “Wiele różnych modeli końcowych wskazuje podobne dopasowanie krzywych...”.

Te dwa fragmenty tekstu pokazują na bardzo ważny i trudny problem z którym spotkała się Autorka pracy - niejednoznacznością rozwiązań. Przedstawiona dyskusja potwierdza tylko znany fakt, że w metodach wielokryterialnych niejednoznaczność staje się jeszcze poważniejszym problemem niż przy ``zwykłej inwersji``. Widoczne jest to zwłaszcza gdy nasze funkcje celu są de facto funkcjonalami tzn. dane obserwacyjne i wyniki syntetyczne nie są zbiorami oddzielnych, niezależnych wielkości ale, tak jak w analizowanych przykładach ciągłymi funkcjami; mówiąc prościej gdy ``dopasowujemy`` do siebie funkcje a nie skończone wektory. Autorka pracy analizując wyniki testów zauważa, że sposobem na ograniczenie tej niejednoznaczności (tu w zakresie odtworzenia kształtu niejednorodności) jest analiza grupowa modeli a nie pojedynczych modeli. Technika Pareto umożliwia taką analizę. Jest to **niezwykle ważna** i się bardzo trafna uwaga. Podobna, choć nie tak explicite sformułowana sugestia tego typu pojawiła się w kontekście inwersji probabilistycznej (Bayesowskiej) która też pozwala na analizę całych podzbiorów rozwiązań (Probabilistic Inverse Theory,doi:10.1016/S0065-2687(10)52001-6). Wydaje się, że podjęcie refleksji nad teorią inwersji właśnie w kierunku grupowej analizy posteriori może być kluczem do znaczącego rozwoju samej teorii i jej praktycznych aplikacji.

Jak już wspomniałem, cytowana powyżej konkluzja Autorki, zagubiona pośród wielu innych wyników pracy, a więc chyba niedoceniona przez samą piszącą pracę zdaje się być kluczowym naukowym osiągnięciem przedstawionej do recenzji pracy.

Uwagi edytorskie

Czytając recenzowaną pracę stwierdziłem pewne niedociągnięcia edytorskie. Wiele z nich miało charakter czysto edytorski/językowy. I tak Autorka notorycznie posługuje się codziennym żargonem ``komputerowym'' pisząc na przykład o ``forward solverach''. Pomimo bycia dalekim od puryzmu językowego takie określenia, choć w pełni akceptowalne i zrozumiałe w codziennej komunikacji w tekście pracy doktorskie jednak mnie rażą. Nieco poważniejszym mankamentem pracy jest pewna niestaranność w pojawiających się w pracy wzorach matematycznych. Najbardziej widoczna jest niespójność w ich numerowaniu. Są one bowiem numerowane w rozdziale 2, w rozdziale 3 numeracja jest całkowicie pominięta, a w rozdziale 4 na początku występuje a później tajemniczo ``znika''. Podane wzory zawierają też błędy i nieścisłości. I tak, np. we wzorze 2.1 nie wiadomo czego dotyczy znak transpozycji (T) - wektora M czy też operatora G , nie mówiąc o tym, że jego obecność w tym (ogólnym) wzorze jest zupełnie niepotrzebna. W opisie wzoru 2.3 brakuje wyjaśnienia co to jest $F(M)$ a wyśnienie znaczenia M^* jest błędne. Błędny jest także wzór 2.4 gdzie pojawia się różnica $d_i - m_i$, co biorąc pod uwagę, że d i m są wektorami z innych przestrzeni wektorowych nie ma po prostu sensu. Mogę tylko domniemywać, że jest to prosty błąd drukarski bo powinno być $d_i - G_i(m)$. Niestety, również opisy wzorów zawierają pewne nieścisłości wynikające z pewnej niefrasobliwości Autorki w posługiwaniu się takim pojęciami jak na przykład dane obserwacyjne (potencjalnie mierzalne) oraz dane pomiarowe/rzeczywiste - a więc aktualnie zmierzone wartości danych obserwacyjnych. Nieścisłości takie pojawiają się głównie w rozdziale 2 ale także i we wstępie prowadząc do pewnych nieścisłości. Kolejne niedociągnięcie edytorskie to zmiana notacji, a przynajmniej brak wyjaśnienia w rozdziale 3. Pojawiają się tu bowiem nowe oznaczenia niewyjaśnione (strona 13 pracy) z których pierwsze miejsce zajmuje symbol X . Analiza tekstu wskazuje, że wektor X i poprzednio używany M to te same wektory, ale czy na pewno tak jest, tego nie wiem a Autorka nie wyjaśnia. Na stronach 13/14 Autorka definiuje dwa rozwiązania (silne i słabe) w sensie Pareto. Definicja ta jest niezwykle niejasna i wymaga ewidentnego rozwinięcia i poprawy gdyż w podanej postaci nie ma ona zbyt sensu. Liczę, że Autorka wyjaśni tę sprawę w czasie obrony pracy. Ostatecznym mankamentem pracy edytorskiego typu jest niezbyt szczęśliwa (choć poprawna) definicja rozwiązań zdominowanych na końcu podrozdziału 3.1 W pierwszej chwili wydająca się ona zupełnie zbędna. Pewną ciekawostką edytorską jest też brak punktu ``Załączniki'' w spisie treści na początku pracy choć taki rozdział istnieje.

Podsumowanie

Pewne uwagi krytyczne odnośnie rozprawy sformułowane w niniejszej recenzji dotyczą głównie strony edytorskiej pracy i związane są raczej ze zbyt

pośpiesznym (według mojej oceny) przygotowaniem oraz mało krytycznym stosunkiem Autorki do napisanej rozprawy. nie zaś części merytorycznej wykonanych badań. Te oceniam, jako ważne i wnioskuję o dopuszczenie rozprawy doktorskiej mgr. inż. Katarzyny Anny Miernik pt. *"Zastosowanie metod optymalizacji globalnej w rozwiązaniu łączonego zagadnienia odwrotnego w wariancie Pareto dla wybranych danych geofizycznych"* do publicznej obrony. Tym samym potwierdzam, że w mojej ocenie recenzowana rozprawa doktorska odpowiada wymogom aktualnej ustawy o stopniach naukowych.


Wojciech Dębski