



Kraków, 19.11. 2023

Prof. dr hab. Jerzy W. Mietelski  
Zakład Fizykochemii Jądrowej IFJ PAN  
[jerzy.mietelski@ifj.edu.pl](mailto:jerzy.mietelski@ifj.edu.pl)  
+126628392

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. Michała Jędrzejczyka pt. "Establishment of best practices in reducing uncertainties in multigroup cross-sections with Bayesian methods"**

Rozwój techniki reaktorów IV generacji, zwłaszcza wysokotemperaturowych reaktorów grafitowych HTGR, jest jednym z wiodących obecnie kierunków badań w obrębie cywilnej techniki jądrowej w Europie i w Polsce. Nadzieje związane z tym rodzajem reaktora jądrowego, jako źródła energii cieplnej dla potrzeb przemysłu, również w kontekście zredukowania emisji di-tlenku węgla, są ogromne. Równie poważne są wyzwania odnośnie technologii wytwarzania paliwa dla tego rodzaju reaktorów z zapewnieniem maksymalnego bezpieczeństwa ich eksploatacji. Jednym z parametrów tego bezpieczeństwa jest możliwość bardzo precyzyjnego modelowania pracy takiego reaktora, co wymaga ograniczenia niepewności pomiarowych prawdopodobieństw zachodzenie najbardziej podstawowych dla funkcjonowania reaktora procesów. W ten nurt badań wpisuje się recenzowana tu praca doktorska mgr Michała Jędrzejczyka. Praca powstała w Narodowym Centrum Badań Jądrowych w Świerku, jej promotorem jest prof. dr hab. Tomasz Kozłowski a promotorem pomocniczym dr Piotr Kropka.

Przedstawiona do oceny praca doktorska liczy 120 stron maszynopisu w języku angielskim. Przed zasadniczym tekstem znajdują się podziękowania, spis treści, spis ilustracji (zawierający 38 pozycji), spis tabel (zawierający 8 pozycji, pomimo wykazywania tylko 5 tabel, odnoszenie dotyczy też kontynuacji tabel na kolejnych, co jest dosyć niestandardowe i raczej niepotrzebne), czterostronicowy słowniczek terminów i symboli oraz deklaracja dotycząca częściowego pokrywania się tekstu czwartego rozdziału pracy z zawartością publikacji pięcioautorskiej, w której pierwszym autorem (kolejność autorów niealfabetyczna) jest autor ocenianej tu dysertacji. Nie jest podane gdzie ukazała się w/w publikacja, nie jest też ona (co może budzić zdziwienie) wykazana w kończącym dysertację spisie publikacji obejmującym 50 pozycji literaturowych. Krótkie poszukiwania pozwoliły mi jednak ustalić, że wspomniana praca ukazuje się właśnie w najnowszym numerze *Nuclear Engineering and Design*, vol. 414 z datą 1 grudnia 2023. Rozumiem, że w chwili redakcji tekstu ta referencja nie była jeszcze znana. Nawiasem mówiąc nie zauważyłem, by jakakolwiek publikacja z udziałem Autor dysertacji figurowała w spisie literatury znajdującym się na końcu tekstu rozprawy (mam nadzieję, że czegoś nie przeoczyłem), co nie jest oczywiście wymaganą cechą doktoratu.

W tekście pracy, na kolejnych trzech stronach, zaprezentowano streszczenia dysertacji w językach angielskim i polskim. Zasadniczy tekst pracy rozpoczyna się na stronie 20. Całość



podzielona jest na sześć rozdziałów kolejno zatytułowanych (przytaczam brzmienia bez tłumaczeń na język polski):

1. Introduction,
2. Bayesian calibration algorithms,
3. Criticality safety simulation software SCALE and neutron cross-section libraries,
4. Testing Bayesian calibration algorithms on fast enriched uranium systems,
5. Application of MOCABA to reduce uncertainty in cross-sections relevant to HTGRs.
6. Outline of best practices for neutron cross-sections calibration and conclusions.

W pierwszym rozdziale scharakteryzowano pojęcie reaktorów jądrowych IV generacji, przedstawiono też zagadnienie symulacji dynamiki pracy reaktorów jądrowych w tym ideę wykorzystania formalizmu odwrotnych sieci bayesowskich w inżynierii jądrowej. Rozdział kończy omówienie celów pracy oraz następnie sposobu ich realizacji, a tym samym zawartości pracy.

Pierwszym z wymienionych tam celów pracy jest porównanie trzech stosowanych w przedmiotowych zagadnieniach algorytmów: GLLS, MOCABA i SMC-ABC (rozwinęcia tych skrótów w dalszej części recenzji, przy omawianiu zawartości rozdziału drugiego). W ocenie Autora ten ostatni algorytm jest najbardziej ścisły, jednak jest to uzyskane za cenę wymagań co do potencjału obliczeniowego stosowanego sprzętu komputerowego. Celem tego porównania było znalezienie odpowiedzi na pytanie, czy uzyskana większa pewność przewidywań trzeciej metody jest znacząca na tyle, by ponosić większe uogólnione jej koszty. Drugim celem jest zaprezentowanie nowej metody walidacji, niewykorzystywanej dotąd w technologii jądrowej. Metoda ta polega (str. 28) na tak zwanym „syntetycznym eksperymencie” czyli wykorzystaniu wyliczalnych (z posiadanych już z wcześniejszych badań danych empirycznych) nowych, poszukiwanych danych, w miejsce danych doświadczalnych, pochodzących z nowego eksperymentu, dedykowanego uzyskaniu takiej wiedzy. Metoda taka może budzić zrozumiałe obawy względem skutków dla bezpieczeństwa pracy reaktora i stąd jej dogłębne zbadanie ma kluczowe znaczenie dla powodzenia dalszych prac badawczych w danym zagadnieniu.

W rozdziale pierwszym, na stronie 29 Autor formułuje również tezę pracy. Jest nią (w brzmieniu oryginalnym) „There exist improvements in the methodology of conducting Bayesian calibration of neutron cross-sections, which allow for obtaining improved results with a more reliable validation” (w tłumaczeniu na język polski “Istnieją udoskonalenia w metodycie bayesowskiego konstruowania kalibracji neutronowych przekrojów czynnych, które pozwalają uzyskać udoskonalone wyniki z walidacją, na której można bardziej polegać”).

W rozdziale drugim omówiono szczegółowo trzy metody wykorzystujące algorytmy bayesowskiej kalibracji neutronowych przekrojów czynnych w badanych tu problemach. Pierwsza metoda to uogólniona zlinearyzowana metoda najmniejszych kwadratów (ang. General Linearized Least Squares, GLLS). Druga to dwa warianty metody integrującej metody Monte Carlo z metodami bayesowskimi zwane uogólnionymi metodami Monte Carlo-bayesowskich dla polepszonych przewidywań funkcji danych jądrowych (ang. Monte Carlo Bayesian, MOCABA) a trzecia to metoda najbardziej rozwinięta znana pod nazwą metody



przybliżonych obliczeń bayesowskich w wersji sekwencyjnej (ang. Sequential Monte Carlo Approximate Bayesian Computation, SMC-ABC).

W rozdziale trzecim omówiono pakiet SCALE wykorzystywany w obliczeniach parametru powielenia neutronów  $k_{\text{eff}}$  oraz przedstawiono istniejące biblioteki neutronowych przekrojów czynnych. Omówiono też szczegółowo moduły pakietu SCALE o nazwach CSAS5, TSUNAMI i TSURFER, wykorzystane w dalszych obliczeniach. Pierwszy z pakietów został opracowany dla precyzyjnej analizy bezpieczeństwa w obliczeniach parametru powielenia neutronów  $k_{\text{eff}}$ , dwa kolejne służą uwzględnianiu niepewności ocen.

Rozdział czwarty poświęcony jest testom algorytmów bayesowskich kalibracji parametrów wejściowych przekrojów czynnych dla prędkich neutronów w oddziaływaniach ze wzbogaconym uranem. Przedstawiono w nim również ocenę niepewności i walidację metody. Przedstawiono również wnioski z porównania trzech wykorzystywanych w pracy metod. Jak wspomniano, treść tego rozdziału w dużej mierze pokrywa się z treścią wzmiankowanej publikacją.

Rozdział piąty omawia wykorzystanie metody MOCABA do zmniejszenia niepewności dla wartości neutronowych przekrojów czynnych w odniesieniu do reaktora HTGR. We wstępie do tego rozdziału podkreślono, że są to wyniki uzyskana przez Autora dzięki zastosowaniu własnego skryptu opracowanego w języku Python 3.8. Modelowanie zawierało imponującą liczbę 1904 parametrów (str. 81) – wartości neutronowych przekrojów czynnych dla różnych procesów i energii.

Rozdział 6 zawiera podsumowanie pracy oraz przegląd rekomendacji i wniosków wynikających z przeprowadzonych analiz i modelowań. Autor zwraca uwagę, że wyniki trzech metod są na tyle zbieżne, że nie uzasadniają wysiłków czy też uogólnionych kosztów związanych ze stosowaniem najbardziej złożonej procedury sekwencyjnej (SMC-SBC). W rozdziale tym sformułowane są też ogólne wnioski i rekomendacje odnośnie przyszłych badań i poprawnym wykorzystaniu w nich całego aparatu algorytmów stosowanych w modelowaniach.

Praca napisana jest w sposób klarowny i ma czytelną strukturę. Autor jasno prowadzi wywód prezentując kolejne etapy swojej pracy. Czytając tekst odnosi się wrażenie swobodnego poruszania się Autora w przedmiotowej tematyce.

Z recenzenckiego obowiązku trzeba zauważyć, że praca nie jest całkowicie wolna od błędów edycyjnych, lecz jest ich bardzo mało. Drobne uwagi krytyczne dotyczą nielicznych drugorzędnych błędów redakcyjnych lub wręcz typograficznych. Przykładowo: zarówno w angielskim jaki i w polskojęzycznym streszczeniu przywołuje się nazwy metod w formie rozwiniętych akronimów, czyli rozpoczynając każdy wyraz od dużej litery. O ile w języku angielskim spotyka się czasem taką praktykę to nie jest to maniera przyjęta w języku polskim. Drugi przykład - na jednej stronie (nr. 25) znalazły się aż trzy drobne uchybienia: dwukrotne zaczynanie zdania po kropce z małej litery i dwa razy po sobie powtórzone słowo „depends”.

Praca należy do nurtu badań nad rozwojem reaktorów tzw. czwartej generacji. Termin „reaktory jądrowe czwartej generacji” obejmuje szeroki wachlarz na ogół jedynie planowanych lub też już zrealizowanych, ale w prototypach konstrukcji, reaktorów jądrowych, gdzie poszukiwane są z jednej strony zyski wydajności przetwarzania energii, z drugiej strony wzrost



bezpieczeństwa i niezawodności pracy a z trzeciej korzyści natury ekonomicznej. Jak łatwo można spodziewać się, te kierunki są często sprzeczne i trudne do pogodzenia, dlatego proponowane rozwiązania są wielorakie i niespójne. Termin mimo to funkcjonuje. Autor omawia bardzo skrótowo sześć koncepcji zaliczanych do reaktorów IV generacji i prezentuje schematy ich konstrukcji (rys. 1, str. 23). Szkoda, że zamieszczone rysunki są tak zmniejszone, że znajdujące się na nich opisy części składowych są całkowicie nieczytelne, przez co same rysunki tracą bezpośredni walor dydaktyczny i stają się rodzajem li tylko ikonografiki a więc jedynie znaku graficznego. Rysunki te są zaczerpnięte ze strony internetowej, podana referencja jest odniesieniem do nazwy tej strony ale bez podania dokładnego adresu. Jest jednak na tyle dokładna, że z wykorzystaniem wyszukiwarki pozwala dociekliwemu czytelnikowi na szybkie dotarcie do źródła i zaspokojenie ciekawości poznawczej. Prezentacja rysunku 1 na dwóch a może nawet trzech stronach, zamiast na połowie jednej strony, zwiększyłaby walor dydaktyczny pracy, co ma znaczenie dla kolejnych generacji studentów i doktorantów a także innych czytelników.

Konkludując, chcę jednoznacznie stwierdzić, że cele pracy zostały osiągnięte. W szczególności wykazano, wykorzystując dane z 56-grupowej biblioteki danych jądrowych, zawierających wartości przekrojów czynnych ENDF/B VII-1.1, że wszystkie trzy wykorzystywane metody prowadzą do praktycznie tych samych wyników. Wykazano, że stosowanie bardziej rozbudowanej, nowszej metody SMC-ABC nie jest dostatecznie uzasadnione, gdyż nie prowadzi ona do znacząco bardziej dokładnych wyników. Przedstawiono szczegółową analizę niepewności oceny parametru powielenia neutronów  $k_{eff}$ . Autor wnioskuje, że zignorowanie niepewności niekalibrowanych parametrów wejściowych modelu jest częstym i poważnym błędem i powinno się tego unikać. To bardzo mocny i wartościowy wniosek. Autor zwraca też uwagę na znaczenie „syntetycznych eksperymentów” w przedmiotowym zakresie i rekomenduje reguły jakich należy się trzymać na przyszłość.

Jednoznacznie stwierdzam, że praca doktorska mgr. Michała Jędrzejczyka pt. "Establishment of best practices in reducing uncertainties in multigroup cross-sections with Bayesian methods" spełnia wszelkie ustawowe wymogi stawiane obecnie rozprawie doktorskiej, określone w stosownej Ustawie „Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce” i stąd wnoszę o dopuszczenie jej Autora, Pana mgr. Michała Jędrzejczyka, do dalszych etapów postępowania doktorskiego.