

Recenzja

rozprawy doktorskiej Pani mgr **Aleksandry Michalskiej** pt. „Zastosowanie spektrometrii Ramana w badaniu niebieskich lakierów samochodowych - ocena wartości dowodowej widm w podejściu klasycznym oraz z zastosowaniem metod chemometrycznych i statystycznych”, wykonanej w Instytucie Ekspertyz Sądowych im. Prof. dra Jana Sehna w Krakowie,
pod kierunkiem dr hab. Grzegorza Zadory, profesora w Instytucie Ekspertyz Sądowych w Krakowie.

Pani mgr Aleksandra Michalska urodziła się w roku 1984 w Wadowicach. W roku 2007 ukończyła studia magisterskie na Wydziale Chemii UJ (praca magisterska pt. „Badanie morfologii, struktury i składu chemicznego charakterystycznych cząstek powystrzałowymi metodami fizykochemicznymi”), po czym odbyła studia podyplomowe na Uniwersytecie Ekonomicznym w Krakowie (praca dyplomowa pt. „Przygotowanie pracowni badania mikrośladów do akredytacji”). W latach 2007-2016 była zatrudniona w Instytucie Ekspertyz Sądowych w Krakowie na stanowisku technika analityka, a obecnie w Pracowni Badania Mikrośladów w wyżej wymienionym Instytucie jest zatrudniona jako asystent i biegły z zakresu fizykochemicznych badań kryminalistycznych. Odbyła szereg specjalistycznych szkoleń, m.in. z zakresu technik mikroskopowych, systemów zarządzania jakością i metrologii chemicznej.

Aktywność naukowa, dydaktyczna i organizacyjna Doktorantki

Pani mgr Aleksandra Michalska jest współautorką 8 prac opublikowanych w czołowych czasopismach fachowych. Łączny współczynnik oddziaływania (IF) wynosi ok. 18.4. Doktorantka jest współautorką także dwóch innych prac naukowych opublikowanych w Problems of Forensic Sciences i Forensic Science and Technology, a także rozdziału w naukowym wydawnictwie książkowym „Analytical Techniques in Forensic Sciences”. Jest współautorką 64 wystąpień (ustnych lub posterowych) podczas konferencji i seminariów naukowych krajowych i międzynarodowych, w tym 16 prezentowanych osobiście przez

Doktorantkę oraz 49 innych wystąpień, których była współautorką. Brała udział, jako wykonawca, w 2 grantach naukowych i 6 tematach badawczych Instytutu Ekspertyz Sądowych w Krakowie.

W zakresie działalności dydaktycznej Doktorantka prowadziła, w Instytucie Ekspertyz Sądowych w Krakowie, ćwiczenia „Zastosowanie spektroskopii ramanowskiej w analizie mikrośladów” dla studentów chemii Uniwersytetu Śląskiego. W zakresie działalności organizacyjnej – uczestniczyła w komitetach organizacyjnych 3 międzynarodowych seminariów dotyczących badań kryminalistycznych.

Struktura oraz treść rozprawy doktorskiej.

Recenzowana rozprawa doktorska składa się z ogólnego omówienia osiągnięć Autorki (strony: 9-70). Omówienie to składa się z „części teoretycznej” i „części eksperymentalnej” oraz spisu literatury cytowanej liczącego 50 pozycji. Osiągnięcia Autorki, stanowiące istotę Jej pracy doktorskiej, zostały szczegółowo przedstawione w 6 oryginalnych pracach, których współautorką jest Pani Aleksandra Michalska, opublikowanych w czołowych czasopismach fachowych (łączna wartość parametru IF ok. 15.8). Prace te zostały zawarte w załączniku B do rozprawy doktorskiej, przy tym, do każdej pracy dołączone są oświadczenia współautorów dotyczące ich udziału w realizacji pracy, z których wynika, że Doktorantka wniosła istotny wkład do realizacji badań opisanych w publikacjach. Powyższe uzupełnia spis treści, podziękowania, streszczenie rozprawy (w języku polskim i angielskim), wykaz stosowanych skrótów oraz inne załączniki (A – tabele i rysunki, C – życiorys Autorki dotyczący jej kariery naukowej i zawodowej oraz D – wykaz dorobku naukowego, dydaktycznego, organizacyjnego i opiniodawczego Autorki).

Tematyka recenzowanej pracy doktorskiej dotyczy problemu porównawczego, tj. weryfikacji hipotezy o wspólnym pochodzeniu próbek niebieskich lakierów samochodowych – dowodowej i porównawczej, w oparciu o widma Ramana. Takie badania odpowiednich widm zwykle opierają się na ich wizualnym porównywaniu, co okazuje się postępowaniem mało skutecznym, zwłaszcza w przypadku podobnych widm. W swojej pracy doktorskiej Autorka zastosowała zobiektywowane podejście do powyższego problemu porównawczego wykorzystując modele oparte na ilorazie wiarygodności LR (Likelihood Ratio). Problem

wielowymiarowości Autorka rozwiązywała redukując liczbę zmiennych, z zachowaniem możliwie największej ilości istotnej informacji zawartej w oryginalnych danych (widmach). W tym celu testowała wykorzystanie pola powierzchni pod wybranymi pasmami w widmie, dyskretną transformację falkową oraz wybrane metody chemometryczne, w tym podobieństwo próbek mierzone kilkoma miarami odległości. Efektywność konstruowanych modeli LR oceniała poziomem odpowiedzi błędnych oraz w oparciu o empiryczną entropię krzyżową. Wspomniane modele LR uwzględniały zmienność wewnątrzobiekтовую (niejednorodność) badanych próbek. Autorka pokazała, że wykorzystanie modeli LR jest efektywniejsze od wizualnego porównywania widm. Drugim ważnym zagadnieniem przedstawionym w recenzowanej rozprawie doktorskiej jest ocena wpływu warunków (parametrów) pomiarowych na wyniki analizy porównawczej badanych próbek lakierów. Dotyczy to, między innymi, parametrów wstępnego naświetlania próbek lakierów charakteryzujących się fluorescencją uniemożliwiającą uzyskanie użytecznej informacji w standardowym pomiarze ramanowskim. Ponad to, wykazała, że w ogniskowaniu promienia lasera na powierzchni próbki należy stosować obiektyw powiększający 50-krotnie.

Obecnie, bardzo krótko scharakteryzuję wspomniane powyżej oryginalne prace Doktorantki stanowiące integralną część rozprawy doktorskiej.

W pracy opublikowanej w *Journal of Forensic Sciences*, **59**, 943-949 (2014) wykorzystując widma Ramana zidentyfikowano pigmenty w 66 próbkach lakierów samochodowych. Fluorescencję efektywnie wygaszano stosując technikę wstępnego naświetlania próbek, co pokazano na odpowiednich wykresach (Fig. 4). Uzyskano wysoką „moc” rozróżniania próbek (97% - 99%).

W pracy opublikowanej w *Vibrational Spectroscopy*, **74**, 6-12 (2014) przedstawiono wyniki bardziej dogłębnego badania procesu wstępnego naświetlania fluoryzujących próbek lakierów, m.in. pokazano empiryczne zależności stopnia redukcji fluorescencji od czasu naświetlania.

W pracy opublikowanej w *Journal of Raman Spectroscopy*, **46**, 772-783 (2015) wykazano większą skuteczność podejścia opartego na modelach LR w rozróżnianiu próbek lakierów w porównaniu z wizualnym badaniem widm Ramana. Ocenę efektywności oparto

na liczbie błędnych odpowiedzi oraz w oparciu o empiryczną entropię krzyżową (w przypadku modeli LR).

W pracy opublikowanej w *Analytical and Bioanalytical Chemistry*, **407**, 3357-3376 (2015) przedstawiono wyniki interpretacji widm FTIR próbek polimerów z elementów samochodowych oraz widm Ramana lakierów samochodowych w celach porównawczych. Zastosowano podejście oparte o modele LR efektywnie redukując liczbę zmiennych z wykorzystaniem dyskretnej transformacji falkowej.

W pracy opublikowanej w *Analytica Chimica Acta*, **931**, 34-46 (2016) przedstawiono podejście, w którym na etapie poprzedzającym tworzenie modeli LR wykorzystano metody chemometryczne (LDA, odległości) w celu kompresji danych (widm). Wykazano, że zaproponowane hybrydowe podejście do problemu porównawczego może być skuteczne także w przypadku wielowymiarowych danych.

W pracy opublikowanej w *Forensic Science International*, **282**, 60-73 (2018) szczegółowo zbadano wpływ warunków pomiarowych na widma Ramana próbek lakierów samochodowych i wyniki interpretacji tych widm w oparciu o modele LR. W szczególności uwzględniono takie parametry pomiarowe jak moc lasera i czas naświetlania związane z etapem procesu wstępnego naświetlania fluoryzujących próbek oraz powiększenie w układzie optycznym, które testowano przy dwóch wybranych długościach fali lasera.

Uwagi, zapytania oraz problemy do dyskusji (podczas obrony pracy doktorskiej)

Uwagi:

1. Nie podoba mi się stosowane w rozprawie określenie „długość lasera”, albo „zmiana długości lasera” (strony 15 i 26), zamiast „długość fali lasera”.
2. Również, wolałbym, aby zamiast określenia „podejście ilorazu wiarygodności” (strony 16 i 31 oraz „Spis treści” pkt. 8.2.2) stosowane było „podejście oparte na ilorazie wiarygodności”.
3. Na stronie 19 brakuje wyjaśnienia symbolu „ Θ ”.
4. Na stronie 21 (u dołu) zamiast „równanie” powinno być „równaniem”.
5. Na stronie 26 (pkt.6), zamiast określenia „ogniskowanie się lasera” wolałbym - „ogniskowanie się promienia/wiązki promieniowania lasera”.

6. Na stronie 47 (7 l. od góry) zamiast „...obecności...” powinno być „...obecnością...”.
7. W tabeli 11 (strona 51) nie znajduję indeksu „b”.
8. W opisie Rys. 14 (strona 61) Autorka pisze o niebieskich punktach, których na rysunku nie widać (znajdują się one na rysunku w odpowiedniej publikacji Autorki).
9. Komentarz do podpisu do Rys. A2 (strona 74): Tabela S2 nie jest wprost przedstawiona w zacytowanej publikacji Autorki, ale jako „supporting information”.

Powyższe, zauważone przeze mnie usterki w tekście wstępnej części rozprawy są drugorzędne i nie mają wpływu na moją bardzo pozytywną ocenę recenzowanej pracy doktorskiej.

Problemy do dyskusji:

1. Na stronie 41 Autorka pisze: „Drugi z testowanych modeli ... znacząco zmniejszał poziom odpowiedzi błędnych ($F_p = 1.6\%$ i $F_n = 6.7\%$...). Niemniej jednak model ten bardzo mocno wspierał niepoprawne hipotezy ($C_{lr,exp}$ ponad 100% bez względu na rodzaj zastosowanej procedury rekonstrukcji widm)”. Wydawać się może, że w powyższej wypowiedzi tkwi sprzeczność. Proszę o odpowiednie wyjaśnienie wątpliwości.
2. W jaki sposób Doktorantka, jako biegły, przedstawiłaby przed sądem wynik porównania dowodowej próbki lakieru samochodowego z próbką porównawczą wyrażony konkretną wartością LR (np. 10^3) otrzymaną w oparciu o procedurę zaproponowaną w publikacji nr 5 ?

Podsumowanie recenzji

Tematyka recenzowanej rozprawy doktorskiej dotyczy bardzo ważnego dla nauk sądowych i sądownictwa problemu jakim jest weryfikacja hipotezy o wspólnym pochodzeniu próbek – dowodowej i porównawczej. Porównanie takie opiera się na wynikach badań chemicznych lub/i fizykochemicznych oraz odpowiedniej interpretacji tych wyników. W swojej pracy doktorskiej Pani mgr Aleksandra Michalska skupiła się na porównywaniu próbek niebieskich lakierów samochodowych w oparciu o ich widma Ramana oraz wykorzystaniu modeli opartych na ilorazie wiarygodności. Badania, szczegółowo opisane

w sześciu publikacjach Doktorantki, dotyczyły zarówno samej procedury doświadczalnej związanej z uzyskiwaniem widm zawierających użyteczną informację o próbkach lakierów, jak i nowatorskich podejść matematycznych pozwalających na ekstrakcję z tych widm możliwie największej ilości informacji umożliwiającej rozróżnianie próbek.

Wysoko oceniając recenzowaną rozprawę doktorską Pani mgr Aleksandry Michalskiej wnoszę o jej wyróżnienie, co motywuję następująco. Zasadniczą część pracy stanowi sześć spójnych tematycznie oryginalnych prac Autorki opublikowanych w czołowych czasopismach fachowych, chemicznych i kryminalistycznych, o międzynarodowej cyrkulacji (łącznie IF ≈ 15.8). Prace te charakteryzują się bardzo wysokim poziomem naukowym a przedstawione w nich wyniki wnoszą istotny wkład do nauk sądowych.

Wniosek końcowy

Opiniowaną rozprawę doktorską Pani mgr Aleksandry Michalskiej oceniam wysoko. Dlatego stwierdzam, że rozprawa ta bez zastrzeżeń spełnia, z nadmiarem, formalne i zwyczajowe warunki stawiane pracom doktorskim, w szczególności rozprawa spełnia warunki wymienione w Art. 13 ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki, z dnia 14 marca 2003 r. (z późniejszymi zmianami). W związku z powyższym, stawiam wniosek o dopuszczenie Pani mgr Aleksandry Michalskiej do dalszych etapów przewodu doktorskiego.



Prof. dr hab. Andrzej Parczewski

Zakopane, 12 stycznia 2018 r.