



prof. dr hab. n. farm. Łukasz Komsta  
Uniwersytet Medyczny w Lublinie  
Wydział Farmaceutyczny  
Katedra i Zakład Chemii Leków  
ul. Jaczewskiego 4, 20-090 Lublin, tel. 81 4487387, fax 81 4487381

### Recenzja pracy doktorskiej mgr Łukasza Pieszcza

#### *„Zaawansowane podejścia obrazowania i charakteryzacji złożonych próbek wykorzystujące zalety wybranych metod spektroskopowych, chromatograficznych i chemometrycznych”*

WSPÓŁCZESNA technika pomiarowa umożliwia pozyskiwanie ogromnej ilości danych z pojedynczej próbki z zastosowaniem wielu oddzielnych metod badawczych. Algorytmy chemometryczne umożliwiają nie tylko zaawansowaną analizę pozyskanych w ten sposób sygnałów, ale również ocenę, na ile dane zebrane różnymi technikami uzupełniają się, tzn. wnoszą dodatkową, ortogonalną do siebie informację. W przypadku próbek nieheterogenicznych, coraz częściej stosowane są techniki obrazowania, umożliwiające uzyskanie sygnału spektralnego dla wielu punktów próbki. Powstaje wtedy dodatkowy problem chemometrycznej oceny zmienności sygnału wewnątrz jednej próbki i jego ocena w kontekście różnic spektralnych pomiędzy próbkami.

W Instytucie Chemii Uniwersytetu Śląskiego prowadzone są od wielu lat prace nad rozwojem algorytmów chemometrycznych, również do takich zastosowań. Przedłożona do recenzji dysertacja mgr ŁUKASZA PIESZCZA, wykonana pod kierunkiem prof. dr hab. MICHAŁA DASZYKOWSKIEGO stanowi wyodrębnioną część tych prac.

Rozprawa składa się z czterech publikacji doświadczalnych, opublikowanych w *Measurement* (IF = 3.9, 200 pkt.), *Talanta* (IF = 6.1, 100 pkt.), *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* (IF = 2.8, 100 pkt.) oraz *Meat Science* (IF = 3.8, 140 pkt.), jak również liczącego ponad 100 stron polskiego komentarza, zawierającego 111 starannie dobranych pozycji literaturowych. Rozprawa wypełnia 2 pełne sloty publikacyjne ze średnią 135 punktów w slocie, co robi duże wrażenie.

Komentarz jest obszerny i wprowadza czytelnika w szczegółowy sposób w tematykę realizowanych badań. Jest napisany starannym i lekkim językiem, co w przypadku naukowych tekstów nie jest łatwe do osiągnięcia. Struktura przypomina typową dysertację, zawiera również dalsze plany badawcze Autora oraz zestawienie innych osiągnięć.

---

Pierwsza publikacja dotyczy porównania dwóch metod chemometrycznych: szeroko stosowanej metody SIMCA (*soft independent modelling of class analogy*) oraz zaproponowanej przed kilku laty metody OC-PLS (*one class classifier partial least squares*) do klasyfikacji próbek mięsa. Oprócz widm w zakresie bliskiej podczerwieni analizowane próbki zostały zbadane referencyjnymi metodami pod kątem zawartości wody, tłuszczu oraz białka. Otrzymane widma zostały zinterpretowane pod kątem zakresów, w których powyższe trzy cechy mięsa są najbardziej widoczne. Zmiany widma o największej wariancji, zlokalizowane w pierwszej głównej składowej, odzwierciedlały głównie zawartość wody, zaś dwie kolejne główne składowe zawierały cechy widma związane z zawartością tłuszczu. Wykryto również prawdopodobne maskowanie niektórych cech spektralnych przez wodę w części próbek mięsa.

Porównując różne techniki standaryzowania sygnałów spektralnych stwierdzono, że transformacje SNV, MSC oraz ISC podobnie do siebie niwelują różnice pomiędzy próbkami wieprzowiny i jagnięciny, natomiast różnice pomiędzy próbkami wołowiny pozostają widoczne. Zaobserwowano korelacje pomiędzy wartościami pierwszych trzech składowych oraz parametrami mięsa.

Ważnym elementem budowy modelu chemometrycznego jest dobór optymalnej kompleksowości. W pracy zaproponowano nietypowe, lecz bardzo skuteczne podejście walidacji modelu w oparciu o selektywność i specyficzność, które niekiedy owocuje wyborem nieco większej kompleksowości, niż wynikałoby to ze zwykłej walidacji krzyżowej. Jednakże model nie jest przeuczony, a działa lepiej. Wszystkie uzyskane modele miały bardzo dobre zdolności klasyfikacyjne.

---

Druga publikacja dotyczy zastosowania metod chemometrycznych do klasyfikacji odpadów z tworzyw sztucznych w oparciu o obrazowanie hiperspektralne. Aktualność tej tematyki wiąże się z ciągłym brakiem skutecznych metod sortowania odpadów plastikowych pod względem tworzywa, z którego zostały wykonane.

Na podstawie obrazów hiperspektralnych, zarejestrowanych kamerą w świetle żarówki wolframowej, potwierdzono możliwość chemometrycznej klasyfikacji odpadów ze względu na tworzywo zastosowane do wytworzenia. Zaproponowana do tego celu wstępna obróbka polega na obcięciu brzegów obrazu i oddzielenia pikseli tła od klasyfikowanych przedmiotów za pomocą lokalnego progowania (*adaptive thresholding*). Dodatkowo uwzględniano poziom bieli zarejestrowany przy pomocy białego wzorca teflonowego, odbijającego prawie całe promieniowanie w badanym zakresie. Widma były standaryzowane SNV oraz delikatnie wygładzane filtrem SAVITZKY'EGO i GOLAY'A wraz z różniczkowaniem — ostatecznej obróbce poddawano pierwszą pochodną oryginalnych sygnałów.

Różnice pomiędzy tworzywami były wyraźnie widoczne już w technikach eksploracyjnych, co potwierdziło słuszność obranej strategii wstępnej obróbki widm. Do stworzenia modeli zastosowano ponownie technikę OC-PLS, która sprawdziła się w tym zadaniu bez zarzutu.



Trzecia publikacja stanowi ocenę wielokanałowego wideoskanowania TLC przy użyciu własnoręcznie skonstruowanej komory zawierającej świetlówki UV (254 i 366 nm) oraz źródło światła widzialnego. Umożliwia to otrzymanie dziewięciokanałowego obrazu, zawierającego oprócz światła widzialnego fluorescencję w dwóch zakresach nadfioletu. Do sprawdzenia metodyki zastosowane zostały próbki różnych atramentów do piór wiecznych. Obrazy poddawano eliminacji gradientu tła (linii bazowej), wyrównywaniu (*warping*) lub zamianie na macierz GRAMA, a następnie analizowano technikami eksploracyjnymi, w tym dość rzadko stosowanym podwójnym rozkładem wartości osobliwych (*double singular value decomposition*). Porównanie uzyskanych wyników z densytogramami pozwoliło stwierdzić, że pozyskana ilość informacji jest podobna, fotografowanie płytki jest znacznie szybsze, a koszty aparatury znacząco mniejsze.

Trzeba zaznaczyć, że używany do rejestracji zdjęć telefon musi mieć tryb manualnej ekspozycji, ponieważ automatyczna ekspozycja nie zapewnia powtarzalnych warunków rejestracji obrazu. W publikacji znajdują się dane na temat używanych czasów migawki, a cenną dodatkową informacją byłaby dyskusja dotycząca ustawiania ostrości. Automatyka wielu telefonów nie sprawdza się przy oświetleniu UV, a nie każdy telefon umożliwia ręczne sterowanie w tym zakresie. Myślę, że jest to dobry szczegół do przedyskutowania w czasie obrony pracy.



Ostatnia publikacja powraca do tematyki tworzyw sztucznych i proponuje nowatorską metodę oceny wielkości ich cząstek na podstawie obrazowanie hiperspektralnego. Metodyka wstępnej obróbki jest analogiczna do rozpoznawania tworzyw. Zmienność spektralna wynikająca z wielkości cząstek weszła do pierwszej głównej składowej podczas analizy eksploracyjnej, zaś w drugiej znajdowały się zmiany wynikające z efektów rozproszenia. Potwierdza to możliwość odfiltrowania istotnej informacji od pozostałej zmienności sygnałów.

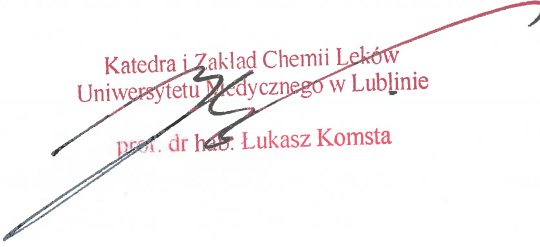
Modelowanie polegało na konstrukcji wstępnego modelu PLS z uśrednionych widm referencyjnych, walidacji tego modelu, a następnie predykcji wielkości cząstki dla każdego piksela celem otrzymania zmiennych zależnych do końcowego modelu stworzonego ze wszystkich pikseli. Otrzymane w ten nowatorski sposób modele charakteryzowały się bardzo wysoką zdolnością predykcyjną.

Rozprawa stanowi całościowy i dobrze wyodrębniony projekt badawczy. Trzy publikacje mają łącznie dwóch autorów — Doktoranta i Promotora, co potwierdza ogromną samodzielność i interdyscyplinarne podejście Autora dysertacji, cechy charakterystyczne dla Śląskiej Szkoły Chemometrycznej. Do rozprawy dołączono wszystkie wymagane oświadczenia współautorów nie budzące najmniejszych zastrzeżeń.

Dostrzegam w opublikowanych wynikach znaczny potencjał i przewiduję istotne zainteresowanie publikacjami przez inne grupy badawcze.

**Podsumowując, praca doktorska mgr Łukasza Pieszcza spełnia wszystkie wymagania stawiane pracom doktorskim, zawiera istotne elementy nowości naukowej i wnioskuje o dopuszczenie Doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego.**

**Dodatkowo ze względu na samodzielność opublikowanych prac, interdyscyplinarność tematyki badawczej, wskaźniki bibliometryczne, a przede wszystkim wkład w rozwój chemometrii wnioskuje o wyróżnienie przedłożonej mi do recenzji pracy.**



Katedra i Zakład Chemii Leków  
Uniwersytetu Medycznego w Lublinie  
prof. dr hab. Łukasz Komsta

Lublin, 4 kwietnia 2022.