

Lublin, 22 sierpnia 2023 r.

Dr hab. inż. Tomasz N. Kołtunowicz, prof. uczelni
Katedra Urządzeń Elektrycznych i Techniki Wysokich Napięć
Wydział Elektrotechniki i Informatyki
Politechnika Lubelska

Recenzja rozprawy doktorskiej pod tytułem:

„Zastosowanie spektroskopii klasy NIR SCAN do ekspresowych badań spektroskopowych obiektów ze zmieniającymi się w czasie parametrami optycznymi”

autorstwa Pana por. mar. mgra inż. Marka Mateusza Gąsiorowskiego,

promotor prof. dr hab. Aleksy Patryn,

promotor pomocniczy dr hab. inż. Leszek Bychto, prof. PK

1. Podstawa formalna recenzji

Podstawę opracowania recenzji stanowią uchwała Komisji do przeprowadzenia czynności w postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie Automatyka, Elektronika, Elektrotechnika i Technologie Kosmiczne Rady Naukowej Dyscypliny Automatyka, Elektronika, Elektrotechnika i Technologie Kosmiczne Politechniki Koszalińskiej z dnia 20 czerwca 2023 r., pismo Prorektora ds. Nauki Politechniki Koszalińskiej Pana dra hab. inż. Błażeja Bałasza, prof. PK z dnia 21 czerwca 2023 r. oraz umowy o dzieło nr DK 18 z dnia 21 czerwca 2023 r.

2. Ocena rozprawy

2.1. Ogólna charakterystyka rozprawy

Recenzowana rozprawa przygotowana została w formacie A4. Jej objętość wynosi 125 stron. Praca składa się z 8 ponumerowanych rozdziałów poprzedzonych *wykazem skrótów i oznaczeń* oraz *streszczeniami w języku polskim i angielskim*. Rozdziały zatytułowane są następująco: 1. *Wstęp*, 2. *Cel, teza oraz zakres pracy*, 3. *Przegląd stanu wiedzy w obszarach związanych z tematyką rozprawy*, 4. *Wprowadzenie techniczne*, 5. *Badania własne*, 6. *Sztuczne sieci neuronowe – metoda analizy widm NIR*, 7. *Podsumowanie*, 8. *Literatura*.

2.2. Tematyka rozprawy

Za cel Doktorant postawił sobie wykorzystanie spektroskopii bliskiej podczerwieni (NIR) do błyskawicznych pomiarów materiałów wykazujących zmienne właściwości optyczne w dziedzinie czasu oraz opracowanie skutecznego narzędzia do badania zmian

procesów zachodzących w materiałach na skutek starzenia, zmiany stanu skupienia, krzepnięcia bądź monitorowania skutków oddziaływania czynników zewnętrznych.

Uważam, że cel pracy jest ambitny i w wystarczającym stopniu spełnia wymagania stawiane rozprawom doktorskim.

Teza pracy zostały sformułowane w sposób jasny i brzmi następująco: *„Wykorzystanie urządzenia klasy NIR Scan w połączeniu z metodami analizy jako skuteczne narzędzie badania materiałów wykazujących zmienne właściwości optyczne w dziedzinie czasu”*.

Przyjęta teza pracy jest poprawna i sformułowana w odpowiedni sposób.

Stwierdzam, iż praca ma charakter multidyscyplinary a tematyka rozprawy doktorskiej dotyczy zagadnień aktualnych i istotnych tak dla elektroniki, elektrotechniki jak i dyscyplin pokrewnych.

2.3. Charakterystyka poszczególnych rozdziałów rozprawy

Rozdział pierwszy zawiera krótkie wprowadzenie do tematyki, którą zajmował się Doktorant podczas realizowania swojej pracy doktorskiej.

W **rozdziale drugim** Autor przedstawia cel, tezę oraz zakres swojej pracy.

Przegląd stanu wiedzy związanej z tematyką rozprawy Doktorant zamieścił w **rozdziale trzecim**. Jest to najdłuższy rozdział przedstawiony na 38 stronach i jednocześnie jest on rozdziałem teoretycznym przedstawiającym aktualny stan wiedzy w kraju i na świecie. Pierwszą część rozdziału Autor poświęca zagadnieniom fizycznym, które są związane ze spektroskopią NIR, zmiennością widm oraz optymalizacją procesów analizy z wykorzystaniem wstępnego przetwarzanie danych (IDP). Przedstawił techniki badawcze dotyczące spektroskopii wykorzystywane w celu badania materiałów. Zwrócił uwagę na fakt, iż występują duże trudności w interpretacji wyników z uzyskanych widm NIR ze względu na występowanie dużego tła stanowiącego zaszumienie. Uzyskane dane w procesie badawczym mogą być obarczone wieloma błędami w postaci niespójności, niedokładności oraz niepewności. W kolejnej części rozdziału Autor przedstawił przykłady zastosowania spektrometrii w różnych dziedzinach życia (kontrola żywności, rolnictwo, medycyna, przemysł farmaceutyczny, chemia, kosmetologia) oraz wybrane metody analizy widm NIR (analiza za pomocą transformaty Fouriera, regresja liniowa – PCA, regresja liniowa – PLS, wielokrotna regresja liniowa – MLR, liniowa analiza dyskryminacyjna – LDA, dwuwymiarowa analiza korelacyjna – 2D COS, sztuczne sieci neuronowe – SSN). W końcowych podrozdziałach Doktorant przedstawił i scharakteryzował nowoczesne materiały perowskitowe – grupa minerałów półprzewodnikowych znajdujących zastosowanie w fotokatalizatorach, fotoogniwach i bateriach. Ostatni podrozdział rozdziału trzeciego zawiera informacje o wykorzystaniu elementów sztucznej inteligencji do badań materiałów perowskitowych.

W rozdziale czwartym Doktorant przedstawił stosowaną w badaniach widm aparaturę badawczą. Przedstawił koncepcję wykorzystania spektrometru DLP Nirscan Nano EVM firmy Texas Instruments (USA) do przeprowadzania badań widm NIR różnego rodzaju obiektów. Opisał dane techniczne urządzenia oraz sposób komunikacji z oprogramowaniem wykorzystywanym do analizy uzyskanych wyników. Stosowany do badań spektrometr pracuje w zakresie długości fali od 900 nm do 1700 nm tj. nie w pełnym zakresie podczerwieni mieszczącym się w przedziale od 800 nm do 2500 nm. Jako oprogramowanie sterujące pracą spektrometru Autor rozprawy wykorzystał oprogramowanie dostarczone przez producenta – dało to możliwość na sprawne sterowanie, zapis oraz podstawową wizualizację uzyskanych wyników z przeprowadzonych badań. Widma zapisywane były w formacie CSV oraz DAT co dało możliwości do dalszej, szerszej analizy uzyskanych wyników. Autor przedstawił stanowisko badawcze zawierające: spektrometr DLP Nirscan Nano EVM, jednostkę komputerową, oraz oprogramowanie składające się z DLP NIRscan Nano GUI (sterujące spektrometrem), program Excel (proste obliczenia i podstawowe wizualizacje) oraz program Matlab (analiza serii pomiarowych z wykorzystaniem sztucznych sieci neuronowych).

Rozdział piąty zatytułowany „*Badania własne*” zawiera zrealizowane na potrzeby rozprawy doktorskiej wyniki badań oraz ich analizę. Badaniom poddane zostały trzy grupy materiałów: materiały pochodzenia biologicznego, materiały smolisto-kleiste oraz docelowa grupa materiałów, a mianowicie materiały stosowane do budowy perowskitowych ogniw słonecznych. W rozdziale tym znajduje się dużo wykresów zmian refleksyjności w funkcji długości fali badanych próbek. Opisu wyników dla najbardziej istotnych próbek (materiały perowskitowe, próbki: 104B, 104D, 105B, 105D, 112B, 112C, PCB6B, PCB6C) dokonał Autor w formie tabelarycznej – Tabela nr 8. Uznał, iż do dalszych badań związanych z analizą widm NIR wykorzystywane będą próbki 104B, 112B, PCB6C. W celu uzyskania skutecznej metody analizy widm dalsze badania prowadzone będą z wykorzystaniem sztucznych sieci neuronowych (SSN).

Rozdział szósty zawiera informacje o sztucznych sieciach neuronowych (SSN) i wykorzystaniu ich w celu interpretacji uzyskanych wyników. Jako środowisko programistyczne do modelowania SSN Autor wybrał program Matlab w wersji 2021b zawierający gotowe rozwiązania w postaci bibliotek „*deep learning*” (sieci o określonej strukturze i zdefiniowane 11 metod ucznia się). Autor zaproponował własną koncepcję programu związaną z wczytywaniem danych, obsługą zdefiniowanych metod i konfiguracją oprogramowania. W programie zastosowano sieci o budowie „*feedforward*” określające przepływ danych od ustalonego wejścia (określane są zadania do wykonania) do wyjścia (brak sprzężenia zwrotnego). Są to sieci jednokierunkowe, które są częściej stosowane i wykazują większą skuteczność niż sieci rekurencyjne (tworzenie sprzężeń zwrotnych tworzących liczne i skomplikowane pętle – trudność z osiągnięciem stanu ustalonego). Jako

dane na wejściu przyjmowane są trzy parametry: długość fali świetlnej w nm, wartość reflektanci oraz czas realizacji pomiaru.

Przeprowadzone badania symulacyjne miały posłużyć określeniu czy zmiany widm mogą być śledzone za pomocą SSN a wyznacznikiem poprawności pracy sieci była wartość błędu średniokwadratowego (MSE – *Mean Square Error*). Im niższy błąd tym sieć neuronowa lepiej radzi sobie z prognozowaniem na danych testowych. Następnie Autor rozprawy określił metody uczenia, które są najskuteczniejsze dla danej grupy materiałów. Przedstawia wyniki badań dla SSN jako analizy widm NIR trzech próbek (112C, PCB6, 104B) w dwóch konfiguracjach od strony: F – folia oraz E – elektroda, których rezultatem było określenie wartości błędu MSE na wyjściu. Autor testował sztuczne sieci neuronowe (SSN) przetwarzając surowe widma NIR, poddanych wstępnemu przetwarzaniu danych (IDP – *Initial Data Preprocessing*) oraz widma przetworzone z zamysłem minimalizacji błędu na wyjściu sieci.

Po analizie surowych widm zaobserwowano, że dla zbadanych próbek metody uczenia się uzyskują niskie wartości błędów w zakresie od 3 do 5,5 z jednym odstępstwem, gdzie dla próbki PCB6CE zaobserwowano błędy w zakresie od 10 do 60). Autor podsumowując stwierdza, że liczba z zakresu od 60 do 80 neuronów w warstwie jest wystarczająca aby zapewnić odpowiedni proces uczenia się; metoda *trainngdm* całkowicie się nie sprawdza w procesie uczenia się sieci – została pominięta w dalszych analizach; błąd MSE dla wszystkich metod jest na podobnym poziomie.

Analiza widm poddanych wstępnemu przetwarzaniu danych (IDP) miała na celu redukcję wartości MSE. Zastosowano ograniczenie zakresu analizowanych próbek o 50 i 100 nm na granicach zakresu pomiarowego dla całej serii pomiarowej. W formie tabelarycznej Autor przedstawił porównanie wartości średnich MSE pracy sieci oraz wariancji dla całej serii od 10 do 200 neuronów ukrytych dla trzech przykładowych próbek (104BF, 112CF, PCB6CF). W tabelach zestawiono wyniki uzyskane dla poszczególnych 10 metod uczenia się dla wstępnego przetwarzania danych oraz bez IPD. We wszystkich trzech przypadkach proces standaryzacji prowadził do zwiększenia średniej wartości MSE oraz zwiększenia wariancji.

Autor wykorzystując wytrenowaną i przetestowaną sieć opracował dalszą część programu, która pozwalała na rozpoznawanie próbek w danej serii określając dokładny indeks próbki i dzień pomiaru. Sztuczna sieć neuronowa jest używana jako narzędzie do redukcji wymiarowości danych wejściowych wczytywanych jako widma (długość fali i wartość reflektanci).

Doktorant znając najlepsze metody uczenia się (metoda „*trainlm*”) oraz optymalną liczbę neuronów (50 neuronów w warstwie ukrytej) mógł zaproponować odpowiedni model sieci neuronowej w celu skutecznego rozpoznawania widm losowych. Przeprowadził testy dla trzech próbek (104B, 112C, PCB6C) o dwóch typach (F i E). Program za każdym razem dobrze określał indeks oraz dzień pomiaru – nie występowały problemy związane

z niejednoznacznością a sztuczne sieci neuronowe są bardzo skuteczne w rozpoznawaniu. Czas trenowania i testowania wynosił ok. 20 sekund a proces rozpoznawania ok. 5 sekund – całkowity czas określenia indeksu widma oraz dnia wynosił ok. 25 sekund.

Jak stwierdza Autor rozprawy uzyskane wyniki i obserwacje mogą w sposób skuteczny być wykorzystane do rozbudowy programu do rozpoznawania losowych próbek materiałów stosowanych do perowskitowych ogniw słonecznych – parametrów jakościowych ogniwa, diagnostyki sprawności ogniwa.

W rozdziale siódmym przedstawiono podsumowanie oraz wnioski wynikające z rozprawy doktorskiej.

Bibliografia pracy zawiera 89 pozycji literatury światowej i krajowej tematycznie związanych z rozprawą.

3. Główne osiągnięcia rozprawy

Rozprawa ma charakter eksperymentalno-symulacyjny uwzględniający modelowanie matematyczne. Uzyskane wyniki podczas pracy nad rozprawą mogą być podstawą do utworzenia dużej bazy danych wzorców widm procesów starzenia różnego rodzaju materiałów (od spożywczych do stosowanych w elektronice).

W celu udowodnienia założonej w rozprawie tezy Autor:

- dokonał przeglądu literatury w zakresie tematyki związanej z realizowaną pracą,
- zaproponował metodykę pomiarową,
- stworzył bazę danych zawierającą widma materiałów,
- stworzył program umożliwiający implementację sztucznych sieci neuronowych do analizy widm,
- przeprowadził badania materiałów wykazujących zmienne właściwości optyczne w dziedzinie czasu,
- przeprowadził analizy uzyskanych wyników i porównał ich wyniki określając efektywność oraz stopień przydatności zastosowanych metod w kontekście analizy widm materiałów stosowanych w elektronice wykazujących zmienne w czasie właściwości optyczne w zakresie podczerwieni,
- wskazał potencjalny obszar zastosowania zaproponowanej metody analizy.

W mojej opinii, Doktorant w stopniu znacznym opanował tematykę dotyczącą rozprawy, zarówno w zakresie teoretycznym jak i eksperymentalno-praktycznym. Potwierdzeniem tego jest dobra znajomość problemów technologicznych i naukowych związanych z metodami analizy widm bliskiej podczerwieni oraz wykorzystania urządzeń klasy NIR Scan.

4. Ocena sposobu edycji pracy i uwagi formalne

Rozprawa przygotowana została w sposób poprawny. Podział treści jest logiczny i uporządkowany. Szata graficzna jest staranna. Praca została zredagowana poprawnie. Sposób przedstawienia treści jest zadowalający. Graficzne przedstawienie w postaci rysunków i wykresów uważam za wystarczające – jednakże większość rysunków zamieszczonych w rozprawie jest słabej jakości. Wszystkie pozycje bibliograficzne zamieszczone w spisie literatury mają swoje odniesienie w treści rozprawy. Praca została napisana poprawnie pod względem językowym, ale Autor nie ustrzegł się błędów gramatycznych i usterek edycyjnych, interpunkcyjnych oraz stylistycznych. Do ważniejszych błędów można zaliczyć:

1. W *Wykazie skrótów i oznaczeń* należałoby dla przytoczonych anglojęzycznych rozwinąć skrótów podać ich polskie odpowiedniki.
2. We *Wstępie* w pierwszym akapicie możemy przeczytać „*Może być zastosowana z powodzeniem zastosowań w procesie kontroli parametrów jakościowych, klasyfikacji czy rozpoznawania*”. Niestety często w pracy można znaleźć tego typu błędy związane z konstrukcją zdania.
3. Pożądanym byłoby przed zastosowaniem skrótu użyć go w układzie z pełną nazwą w pierwszym miejscu wystąpienia nazwy i skrótu jak zostało to przedstawione w przypadku *bliskiej podczerwieni* – „*Analiza widm w bliskiej podczerwieni (NIR) ...*”. W podobny sposób należało przedstawić inne frazy, które następnie są przedstawiane jako skróty – np.: sztuczne sieci neuronowe, itp.
4. Podpisy pod rysunkami powinny zawierać wszystkie informacje dotyczące danego rysunku i powinny tworzyć integralną część podpisu, np. rysunek 3.1.5 – rysunek składa się z trzech oznaczonych jako A), B), C) różnych rysunków a informacja co przedstawiają powinna znaleźć się w podpisie pod rysunkiem.
5. W pracy można znaleźć wiele fragmentów tekstu z błędami gramatycznymi i stylistycznymi np. str. 80 „*Taki stan rzeczy również może płynąć negatywnie na dalszy proces analizy uzyskanych pomiarów ...*” – zapewne Autor miał na myśli „*Taki stan rzeczy również może wpłynąć negatywnie na dalszy proces analizy uzyskanych pomiarów ...*”
6. W całej pracy występują tzw. „sieroty” (np. w, i, o, z itp.) oraz „wdowy” (np.: do, na, od, dla) na końcach wierszy. Należy się wystrzegać tego typu błędów edytorskich.
7. Na rysunkach, które są zaczerpnięte z zagranicznej literatury należałoby przedstawić opisy w języku polskim – rysunki 4.2.2 (str. 54), 4.2.6 (str. 58).
8. Podobnie z tabelami zamieszczonymi w rozprawie – tabele nr 2, 3 (str. 55).
9. Powtórzenie rysunków – rysunek 4.2.4 składa się z dwóch rysunków zamieszczonych w pracy wcześniej (rysunki 4.1.1 oraz 4.1.2). W moim odczuciu wystarczył dać odnośnik do rysunków zamieszczonych we wcześniejszym podrozdziale.
10. Zgodnie z opisami pod rysunkami 4.2.7 oraz 4.2.8 zamieniono pozycjami rysunki.

11. Słaba jest jakość graficzna rysunków zamieszczonych w pracy – szczególnie tych związanych z widmami powstałych w programie Matlab. Do lepszej interpretacji wyników należałoby zamieścić rysunki w lepszej rozdzielczości.
12. Autor naprzemiennie używa dużych i małych liter do opisu osi rzędnych i odciętych (str. 99 – duże litery X, Y; str. 100 – małe litery x, y). Należało by ujednolicić w całej pracy stosowanie wielkości liter opisujących osie.

5. Uwagi merytoryczne

1. W nawiązaniu do wykresów zamieszczonych w rozdziale 5 *Badania własne*, w moim odczuciu Autor mógł pokusić się o głębszą interpretację uzyskanych wyników. Dokładniejszy opis zmian widm dla każdej z próbek.
2. Wykresy 5.3.11-5.3.14 oraz 5.3.15-5.3.20 przedstawiają tę samą informację dla próbek 104B, 112C i PCB6C. Jaki był cel takiej prezentacji biorąc pod uwagę fakt, że pierwsza grupa wykresów jest mało czytelna?
3. Wykresy 5.3.21-5.3.26 przedstawiają porównanie surowych widm reflektancji z widmami poddanymi normalizacji funkcją *zscore*. Jaki efekt przyniosła normalizacja?
4. Dlaczego została wybrana taka, a nie inna metoda SSN zaproponowana przez Doktoranta? Czy Doktorant brał pod uwagę wykorzystanie innej?
5. Stosowany do badań spektrometr pracuje w zakresie długości fali od 900 nm do 1700 nm tj. nie w pełnym zakresie podczerwieni mieszczącym się w przedziale od 800 nm do 2500 nm. Czy doktorant brał pod uwagę użycie innego narzędzia o szerszym zakresie pomiarowym?
6. Jak widzi Doktorant perspektywy praktycznego zastosowania wyników uzyskanych przy realizacji rozprawy doktorskiej? Jakie dalsze kierunki badań zapoczątkowanych w przedstawionej rozprawie są zdaniem jej Autora najbardziej obiecujące?

6. Wnioski końcowe

Moje uwagi nie obniżają pozytywnej oceny recenzowanej rozprawy – są raczej podpowiedzią, która zwraca uwagę na kierunki dalszych badań czy dalszego naukowego rozwoju Doktoranta. Praca ma wyraźny aspekt aplikacyjny. Moim zdaniem jest to duże osiągnięcie Doktoranta. Pan mgr inż. Marek Gąsiorowski jest współautorem trzech artykułów naukowych opublikowanych w czasopismach znajdujących się w bazach Web of Science i Scopus oraz dwóch opublikowanych w materiałach konferencyjnych i czasopiśmie a prace te dotyczyły recenzowanej rozprawy i zostały w niej zacytowane.

Uważam, że recenzowana rozprawa doktorska autorstwa Pana mgr inż. Marka Gąsiorowskiego pod tytułem: „*Zastosowanie spektroskopii klasy NIR SCAN do ekspresowych badań spektroskopowych obiektów ze zmieniającymi się w czasie parametrami optycznymi*” spełnia wymagania stawiane przez Ustawę w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych

w dyscyplinie naukowej automatyka, elektronika, elektrotechnika i technologie kosmiczne i wnoszę do Rady Dyscypliny Naukowej Automatyka, Elektronika, Elektrotechnika i Technologie Kosmiczne Politechniki Koszalińskiej o dopuszczenie jej do publicznej obrony.



Dr hab. inż. Tomasz N. Kołtunowicz, prof. uczelni
Politechnika Lubelska