

Prof. zw. dr hab. inż. Zdzisław S. Hippe  
*Katedra Systemów Ekspertowych i Sztucznej Inteligencji*  
Wyższa Szkoła Informatyki i Zarządzania  
ul. Sucharskiego 2, 35-225 Rzeszów

## RECENZJA

rozprawy doktorskiej p. mgr **Agnieszki Martyny**, pt.

*Differentiation of microtraces based on their features obtained using advanced instrumental analytical techniques, supported by chemometric tools and likelihood ratio approach for forensic purposes.*

*Recenzję opracowano na zlecenie Pani Dziekan Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie, z dnia 25 maja 2016 r.*

### **1. Ocena tematu i zamierzeń rozprawy**

Ocenę tematu rozprawy doktorskiej p. mgr **Agnieszki Martyny** (zwanej dalej *Autorką*) należy rozpocząć komentarzem o realizacji badań związanych z częścią doświadczalną doktoratu, które – dzięki współpracy Wydziału Chemii U.J. z Instytutem Ekspertyz Sądowych im. Prof. Jana Sehna w Krakowie, IES, – zostały wykonane we wspomnianym Instytucie. Ten tryb przebiegu doktoratu nadaje zamierzeniom rozprawy szczególną wartość, ponieważ jej cele naukowe są ściśle związane z procedurami stosowanymi w sądownictwie, w dziedzinie ekspertyz sądowych.

Tematyka badań zrealizowanych przez *Autorkę* dotyczy – najogólniej biorąc – problematyki budowania modeli chemometrycznych, umożliwiających zastosowanie wybranych metod badawczych (z pogranicza statystyki, uczenia maszynowego, obrazowania, i in.) w zaawansowanym przetwarzaniu i interpretacji danych pomiarowych, dotyczących głównie analizy chemicznej pewnych obiektów, a na tej podstawie – ich identyfikacji lub/oraz klasyfikacji. Obiektami tymi są tzw. mikroślady, pozostawione w miejscu wypadku drogowego (nawet zakończonego kalectwem lub śmiercią osoby poszkodowanej), spowodowanego przez „nieznany” pojazd, w domyśle – pojazd opuszczający miejsce wypadku bez udzielenia pomocy oraz wykonania obowiązujących kierowcę rutynowych czynności. Charakteryzując bliżej badane mikroślady można przyjąć, że będą to fragmenty tworzyw sztucznych lub/oraz metali, okruchy szkła, okruchy emalii samochodowych, itp., wykorzystywane dla celów identyfikacji sądowo-prawnej. Ukierunkowanie zastosowań modeli chemometrycznych wyłącznie na obszar chemii analitycznej, implikowałoby formalne ograniczenie badań do spełnienia najprostszego modelu, to znaczy modelu obliczeniowego, w którym badane obiekty są reprezentowane za pomocą cyfr lub liczb, zaś relacje pomiędzy obiektami mogą być opisane z zadowalającą dokładnością stosując na ogół bardzo proste zależności matematyczne. Jednak *Autorka* świadomie i konsekwentnie sięga do arsenału metod oraz procedur chemometrii, które wykorzystują bardziej zaawansowane modele informatyczne, a więc model morfologiczny (związany z przetwarzaniem informacji) oraz model semantyczny (związany z przetwarzaniem wiedzy). Ocena tematu oraz zamierzeń rozprawy daje podstawę do wydania opinii, że podjęty przez *Autorkę* obszar zainteresowań doskonale nadaje się do osiągnięcia nieznanymi, niepublikowanymi do tej pory wyników, spełniających wymagania aktualnie stawiane doktoratom z chemii. Temat rozprawy uznaję za bardzo nowoczesny, trudny w realizacji, interesujący teoretycznie oraz obiecujący praktycznie.

## **2. Zawartość i ocena merytoryczna rozprawy**

Tę część recenzji – ze względów porządkowych – poprzedziłem omówieniem układu rozprawy, a na tym tle – w odniesieniu do niektórych zagadnień – podałem w sposób bardzo ogólny pewne uwagi lub/oraz pytania. W ten sposób, nie rozbudowując niepotrzebnie re-

cenzji, łatwiej można wskazać istotne wartości i osiągnięcia rozprawy (oraz nasuwające się wątpliwości). Oczywiście uwagi te w żadnym stopniu nie podważają zasadniczych wartości doktoratu: niektóre z tych pytań mogą być przedmiotem dyskusji podczas publicznej obrony pracy, zaś inne stwarzają pole do ewentualnych dalszych przemyśleń oraz badań. Miejsca (w tekście) związane z moimi uwagami, zostały wskazane stosując znaną konwencję odniesień: np. *na str. 8<sup>12</sup>* (ósma strona, wiersz 12 od góry), *należy zmienić ...*

Rozprawę rozpoczyna pięciostronicowe (ale nienumerowane) streszczenie w języku angielskim (*Abstract*). Następnie mamy także pięciostronicowe (też nienumerowane) *Streszczenie* w języku polskim. Dalszy tekst rozprawy został opracowany w całości w języku angielskim, co nie stanowi istotnego novum w procedurze nadawania stopnia naukowego doktora w polskich uczelniach, a niekiedy jest nawet rutynowym postępowaniem, podchwyconym przez Ministerstwo Nauki i Szkolnictwa Wyższego.

Napisanie w obcym języku obszernego i zwięzłego tekstu, mającego wszystkie cechy dobrego raportu naukowego, pozytywnie świadczy o przygotowaniu *Autorki* do prowadzenia prac badawczych w międzynarodowych zespołach oraz swobodnej umiejętności ogłaszania wyników swoich badań w anglojęzycznych publikatorach, dominujących we współczesnym świecie nauki. Do samego poziomu edytorskiego rozprawy odniosę się bardziej szczegółowo w trzeciej części recenzji (Ocena poziomu edytorskiego); teraz jedynie chciałbym podkreślić, że wybór języka angielskiego do przedstawienia tekstu rozprawy wpłynął może nawet korzystnie na tok narracji, a w wielu przypadkach ułatwił uniknięcie raf, związanych ze spolszczeniem niektórych kłopotliwych terminów oraz pojęć. Tezy naukowe recenzowanej rozprawy doktorskiej odnoszą się bowiem do niezwykle trudnej problematyki zaawansowanego przetwarzania danych eksperymentalnych, wychodzącego poza tradycyjne i klasyczne już schematy.

Powracając do zasadniczego nurtu recenzji, po spisie treści mamy rozdziałki *Abbreviations*, a potem *Symbols*. Byłoby lepiej, gdyby w tym drugim elemencie (*Symbols*), objaśniane symbole były uporządkowane i alfabetyzowane. Dalej rozpoczyna się część teoretyczna rozprawy (nie uwidoczniła w spisie treści, *Contents*), składająca się z **pięciu** rozdziałów. Ana-

lizując merytoryczne treści rozprawy, a dokładniej – treść części teoretycznej, można doszyc, że jest ona adresowana jakby do dwu odrębnych grup czytelników: do 1. specjalistów z dziedziny procedur sądowych i prowadzenia dowodu racji przed wymiarem sprawiedliwości (czyli do osób nie posiadających niezbędnej wiedzy na temat chemii, budowy strukturalnej cząsteczek chemicznych, analizy śladowej, katalizy, metod separacji związków, usuwania z środowiska reakcji substancji balastujących) oraz do 2. chemików (domyślnie, osób nie posiadających wymaganej wiedzy na temat pułapek ekspertyz sądowych, wskazywania winnych podejrzenia o przestępstwo, czy wskazywania domniemanego przestępcy). Ten dualizm celów spowodował, że w pierwszym rozdziale części teoretycznej (***Introduction***) Autorka zdecydowała się na podanie przekonującego zarysu hipotez towarzyszących podejmowaniu decyzji w procesach sądowo-dowodowych (tutaj na str. 1<sup>o</sup> po *every contact leaves a trace* brak odnośnika literaturowego). W rozdziale drugim części teoretycznej (***Forensic analyses of plastic microtraces generated during car accidents***), zostały zamieszczone trafnie dobrane treści na temat materiałów stosowanych do produkcji niektórych części samochodów, a dalej – budowy przestrzennej polimerów używanych do formowania zderzaków oraz lamp samochodowych, osłon, i niektórych części nadwozia pojazdów mechanicznych. Najważniejszą jednak treścią omawianego rozdziału jest bardzo dobry, zupełnie wystarczający przegląd informacji na temat podstaw teorii metod analitycznych, stosowanych w analizie identyfikacyjnej wspomnianych mikro-fragmentów po wypadkach drogowych. Mamy zatem opis teorii zaawansowanych metod spektrometrii w podczerwieni, różnych wariantów metod wysokorozdzielczej chromatografii gazowej oraz spektrometrii mas. Rozdział trzeci (***Likelihood ratio approach as a tool for reporting the evidential value of physicochemical data***) zawiera omówienie podstawowych zrębów informacji o tego typu interpretacji danych analitycznych, interpretacji prowadzonej niejako w “ulubiony” sposób w europejskiej sieci ośrodków ekspertyz sądowych. Tu natychmiast narzuca się pytanie: *co dalej?* Lub inaczej wyrażając tę myśl: *jakie inne metody, oprócz ilorazu wiarygodności, mogą (aktualnie, lub w przyszłości) zostać zaakceptowane do oceny wyników analiz chemicznych w ekspertyzach sądowych?* Rozdział czwarty (***Data dimensionality reduction techniques***) jest niewątpliwie potrzebny w odniesieniu do przyjętego przez Autorkę zamysłu realizacji badań w rozprawie. Natomiast po zapoznaniu się z jego treścią, nasuwają się następujące pytania: *czy rzeczywiście warto redukować wymiarowość danych?* Lub inaczej: *czy proces odwrotny (zwięk-*

szenie wymiarowości danych) nie polepszyłyby dyskryminacji badanych obiektów, a zatem czy nie zwiększyłyby wiarygodności badań fizykochemicznych w odniesieniu do wymagań ekspertyz sądowych? Za taką myślą może przemawiają znane fakty: •częste (i bardzo korzystne) stosowanie podejścia, znanego pod nazwą konstruktywnej indukcji cech, zwiększającej liczbę atrybutów opisujących (a zatem zwiększającej celowo wymiarowość danych) oraz •niekłopotliwy i bezpłatny dostęp do superkomputerów o dużej mocy obliczeniowej, które niejako w mgnieniu oka mogą uporać się z przetwarzaniem danych o dowolnej wymiarowości, nawet typu *big data*. Rozdział piąty części teoretycznej (*Preprocessing techniques for spectra and chromatograms*) jest celowy i nie wymaga komentarzy.

Część doświadczalna pracy (także nie uwidoczniła w spisie treści, *Contents*), zawiera pięć kolejnych rozdziałów. Rozdział szósty (*Aim of the research*) informuje o naukowych zamierzeniach *Autorki* w planowanych badaniach związanych z pracą doktorską. Rozdział siódmy (*Materials and methods*) zawiera precyzyjny opis przygotowania próbek do badań, a także dane na temat ścisłych warunków pracy stosowanej aparatury (spektrometru podczerwieni, chromatografu gazowego oraz spektrometru mas). W rozdziale ósmym (*Results and discussion*) *Autorka* dokładnie opisuje sposoby objaśniania uzyskanych wyników badań, metody tworzenia własnych, hybrydowych modeli (wzbogacanych dodatkowymi procedurami statystyczno-chemometrycznymi), z odniesieniem do interesująco rozbudowanej koncepcji współczynnika wiarygodności – z normalnym rozkładem wewnątrz-próbkowym oraz rozkładem między-próbkowym. Rozdział dziewiąty (*Other application of likelihood ratio for physicochemical data*) zawiera bardzo zwięzły komentarz na temat innych obszarów oraz możliwości wykorzystania współczynnika wiarygodności, np. w analizie autentyczności próbek win. Tekst części doświadczalnej pracy kończy ostatni rozdział (*Summary and conclusions*), przejrzyste omawiający uzyskane wyniki badań, ich nowatorstwo naukowe oraz możliwości dalszych zastosowań. Tu nurtują mnie także kolejne pytania: *jak zachowują się opracowane hybrydowe modele chemometryczne podczas analizy przypadków sprzecznych?* Oraz: *jak rozwiązano zagadnienia niepewności danych?*

Obowiązki recenzenta wymagają wspomnienia, że część doświadczalna pracy zawiera jeszcze: *List of Figures*, *List of Tables* oraz *Bibliography* (w sumie, anglojęzyczna część pracy

zawiera 187 stron). Pracę zamyka dodatkowy załącznik (*Appendix A*), podsumowujący personalne informacje o *Autorce*, Jej wykształceniu, odbytych szkoleniach, osiągnięciach zawodowych i dorobku naukowym.

Więcej uwagi należy poświęcić pozycji *Bibliography*. Obejmuje ona 116-cie odnośników do prac własnych oraz obcych. Rozkład odnośników literaturowych – pokazujący pośrednio nowoczesność badań *Autorki* – jest następujący: 6 odnośników z r. 2016 (6/2016), dalej 14/2015, 3/2014, 10/2013, 5/2012, 6/2011, 8/2011, 40/2009-2000, 11/1999-1990, 9/lata wcześniejsze, + 4 odnośniki internetowe. Piszę o tym z takimi szczegółami, ponieważ bibliografia rozpraw doktorskich jest niezwykle ważnym ogniwem w łańcuchu poszukiwania prawdy. Teksty rozpraw są dostępne w bibliotekach, a także w sieci: dlatego ich zestawienia literaturowe mogą być – moim zdaniem – ważnym zaczynem podjęcia kolejnych badań, na przykład próby potwierdzenia, lub obalenia tez związanych z określoną bibliografią. Tu niejako wkrada się chęć wyrażenia żalu, że zestawienie bibliografii w tak wyróżniającej się rozprawie nie jest alfabetyczne, jakby powieli przypadkowe numery omawianych publikacji. Można tego było uniknąć stosując system harwardzki, zalecany przez największego światowego wydawcę literatury naukowej (*Springer International Publishing Switzerland*). Stosując wspomniany system cytowania literatury, mamy natychmiastową (podczas czytania tekstu) informację [*kto* i *kiedy*] opublikował daną pracę (algorytm, metodę, procedurę, system, itp.), a dodatkowo znikają kłopoty z przenumerowywaniem wykazu literatury, w przypadku konieczności wstawienia do tekstu dodatkowego odnośnika.

Podsumowując tę część recenzji (**Zawartość i ocena merytoryczna rozprawy**) stwierdzam, że badania realizowane przez *Autorkę*, w tym szczególnie zastosowanie własnych, hybrydowych modeli chemometrycznych oraz specyficznych wariantów ich realizacji, prowadzone były poprawnie i we właściwy sposób. Za najistotniejsze i oryginalne elementy recenzowanej rozprawy doktorskiej uznaję:

- opracowanie własnych, hybrydowych modeli chemometrycznych, umożliwiających wybór różnych wariantów parametrów sterujących optymalizację ich pracy oraz ustalenie w wielu przypadkach właściwej sekwencji metod objaśniania analizowanych danych;

- świadczą o dobrej znajomości problemu opracowanie nowej koncepcji metod minimalno-odległościowych i ich włączenie do chemometrycznej interpretacji badanych obiektów;
- krytyczną analizę danych zaczerpniętych z różnych dziedzin nauki, w tym z zakresu trudnych i realnych problemów współczesnej chemii i chemometrii oraz ich perfekcyjną analizę przy pomocy własnych, hybrydowych modeli;
- obszerne i dobrze udokumentowane otrzymanymi wynikami badania przetwarzania danych rzeczywistych, prowadzone z zamysłem ujawniania ukrytej w nich informacji i wiedzy.

### **3. Ocena poziomu edytorskiego rozprawy**

Praca doktorska *Autorki* jest przygotowana z dużą starannością edytorską, zwłaszcza jeśli chodzi o rysunki oraz tablice ilustrujące wykonane badania. Z punktu widzenia jasności narracji, tekst rozprawy jest napisany nie budzącym wątpliwości językiem. Jako tzw. czepliwy recenzent, miałem trudności ze znalezieniem i wskazaniem tzw. „literówek”: *chapeau bas*, chyba ich nie ma. Natomiast chciałbym polemizować z tytułem pracy, który jest bardzo nieudolny. Poniżej powielam jego treść:

***Differentiation of microtraces based on their features obtained using advanced instrumental analytical techniques, supported by chemometric tools and likelihood ratio approach for forensic purposes***

Przede wszystkim – jest za długi, ponadto w ogóle nie wskazuje o co chodzi w pracy. Niewłaściwie użyto pojęcia „*Differentiation of*”; raczej powinno być „*Difference beween*”. W drugiej części tytułu mamy znów porównanie niewłaściwych logicznie pojęć: *chemometric tools* (zatem *fizycznych narzędzi*) z *likelihood ratio* czyli z ... abstrakcją.

### **4. Konkluzja końcowa**

Mgr Agnieszka Martyna, na podstawie starannego rozeznania literaturowego sformułowała interesujące naukowo i ważne praktycznie cele pracy doktorskiej. Posługując się prawidłowo dobraną metodyką badawczą opartą o przenikające się wzajemnie techniki naukowe, stosując

opracowane przez siebie hybrydowe modele chemometryczne, uzyskała wartościowe poznawczo wyniki. Przeprowadzone badania, dobrze udokumentowane w pracy, zakończyły się pełnym sukcesem. W konsekwencji może się to istotnie przyczynić do tworzenia – zależnie od typu analizowanych danych – optymalnych sekwencji procedur identyfikacyjno-predykcyjnych. Realizacja badań przedstawionych w recenzowanej rozprawie wymagała dobrej znajomości chemii oraz analizy chemicznej, znajomości głównych działów chemometrii, metod analizy statystycznej, a także niektórych zasad uczenia maszynowego: dodatkowo, umiejętności łącznego wykorzystania zaawansowanych narzędzi nowoczesnej chemii. Wymienione powyżej, uzasadnione w recenzji argumenty, upoważniają mnie do stwierdzenia, że rozprawa doktorska p. mgr Agnieszki Martyny, zatytułowana *Differentiation of micro-traces based on their features obtained using advanced instrumental analytical techniques, supported by chemometric tools and likelihood ratio approach for forensic purposes*, spełnia bez zastrzeżeń warunki określone w art. 13 ustawy z dnia 14 marca 2003 r. o stopniach i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule naukowym w zakresie sztuki (opublikowanej w Dz. U. z 2003 r., nr 65 poz. 595 z późniejszymi zmianami). Biorąc pod uwagę: •wysoki poziom naukowy oraz jakość recenzowanej rozprawy, a także •udokumentowany dorobek naukowy doktorantki (9 publikacji w trakcie realizacji doktoratu, z sumarycznym współczynnikiem oddziaływania = 24.591), z przekonaniem stawiam wniosek by P.T. Komisja ds. przewodu doktorskiego rekomendowała Wysokiej Radzie Wydziału Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego w Krakowie:

- a) dopuszczenie rozprawy p. mgr Agnieszki Martyny do kolejnych etapów przewodu doktorskiego, oraz
- b) nadanie p. mgr Agnieszce Martynie stopnia doktora nauk chemicznych z wyróżnieniem, w przypadku pomyślnego przebiegu wymaganych etapów przewodu.

Rzeszów, 25 lipca 2016

