Prof. Beata Walczak
Instytut Chemii
Uniwersytet Śląski
Katowice
e-mail:beata.walczak@us.edu.pl

Katowice, 1.09.2020

Ocena

działalności naukowej, dydaktycznej i organizacyjnej Pana dr Tomasza Wróbla

Pan dr Tomasz P. Wróbel ukończył studia na Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego i w 2010 r. uzyskał tytuł magistra chemii w zakresie 'Advanced Spectroscopy in Chemistry' (w ramach Erasmus Mundus Master Programme, Universte de Science et Technologie Lille 1, Lille, Francja).

Po ukończeniu studiów rozpoczął kształcenie w ramach Studium Doktoranckiego, prowadzonego przy Wydziale Chemii Uniwersytetu Jagiellońskiego i uwieńczone w 2014 r. obroną pracy doktorskiej pt. „Atherosclerotic tissues and cells analysis by means of vibrational spectroscopy imaging and chemometrics", wykonanej pod kierunkiem pani prof. dr hab. Małgorzaty Barańskiej.

W latach 2010-2014 pan dr T. Wróbel pracował jako asystent naukowy w Jagiellońskim Centrum Rozwoju Leków (JCET), Kraków, Polska, w latach 2014-2017 Kandydat odbył staż naukowy (Beckman Institute Postdoctoral Fellow) w University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana,

USA, a następnie (w latach 2017-2019) pracował jako adiunkt w Instytucie Fizyki Jądrowej Polskiej Akademii Nauk, Kraków, Polska. Obecnie pracuje jako adiunkt badawczy w Narodowym Centrum Promieniowania Synchrotronowego SOLARIS, Uniwersytet Jagielloński, Kraków, Polska.

Ocena całokształtu dorobku zawodowego

Pan dr Tomasz Wróbel ma bardzo obszerny dorobek naukowy/publikacyjny, organizacyjny oraz dydaktyczno-wychowawczy.

1. Dorobek naukowy/publikacyjny

Według informacji zawartej w bazie Scopus (na dzień 2.09.2020) Kandydat jest współautorem **46 publikacj**i w czasopismach z listy filadelfijskiej, **cytowanych 561** razy. **Indeks Hirscha** tychże prac wynosi **14** (11 bez autocytowań). Prace te zostały opublikowane w tak prestiżowych czasopismach, jak: *Analyst* (5), *Scientific Reports* (4), *Vibrational Spectroscopy* (4), *Journal of Biophotonics* (3), *Analytica Chimica Acta* (2), *Applied Spectroscopy* (2), itd.

Liczba 120 współautorów dobrze świadczy o rozwiniętej współpracy Kandydata z różnymi krajowymi i zagranicznymi ośrodkami naukowymi.

Pan dr Tomasz Wróbel jest także współautorem 5 rozdziałów w monografiach naukowych. Imponuje również Jego udział w krajowych i międzynarodowych konferencjach i sympozjach naukowych (28 przed doktoratem i 23 po doktoracie), posterów, referatów i wykładów, w tym również wykładów na zaproszenie imienne).

W CV Habilitanta znajdujemy także informację o stażach naukowych Kandydata, takich, jak czterotygodniowy pobyt w Imperial College London, Wielka Brytania (2013), trzytygodniowy staż w Forcas Research Institute, Dublin Institute of Technology, Irlandia (2011), trzytygodniowy staż w Pracowni Chemometrii Środowiska na Uniwersytecie Gdańskim w ramach programu 'Wiking' (2010), dwutygodniowe praktyki w Zakładzie Toksykologii Instytutu Ekspertyz Sądowych w Krakowie (2009.) oraz staż naukowy w Zespole Proteomiki na Uniwersytecie Sciences et Technologie w Lille, Francja (2009).

Kandydat aktywnie uczestniczy w pracach zespołów realizujących różnorodne projekty badawcze. W trzech spośród ośmiu zrealizowanych projektów pan dr T. Wróbel był kierownikiem projektu, a obecnie kieruje projektem Grant Sonata (NCN 2018/31/D/ST4/01833) oraz jest wykonawcą w projekcie FTIR@SOLARIS (MNiSW).

O międzynarodowym uznaniu dorobku naukowego Kandydata świadczy również jego działalność jako recenzenta dla takich czasopism naukowych, jak *Analyst, Analytica Chimica Acta, Analytical Chemistry, Applied Spectroscopy, Cells, Spectrochimica Acta, Journal of Biophotonics* i *Plos One*, oraz uczestnictwo w zespołach oceniających wnioski o finansowanie badań, czy też o przyznanie nagród naukowych.

Ponadto Habilitant jest członkiem krajowych i międzynarodowych towarzystw naukowych, takich, jak:

- American Chemical Society,
- Society for Applied Spectroscopy,
- Biomedical Engineering Society, oraz
- Polskiego Towarzystwa Chemicznego.

Wyrazem uznania dla dotychczasowej działalności naukowej Kandydata są liczne nagrody i stypendia, takie, jak:

- Polska Nagroda Inteligentnego Rozwoju w kategorii ‘Naukowiec Przyszłości’ za realizację grantów Homing i Sonata (2019),
- Stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla Wybitnych Młodych Naukowców (2018),
- Beckman Fellowship udzielone Kandydatowi przez Beckman Institute for Advanced Science and Technology, University of Illinois at Urbana-Champaign, Illinois, USA,
- Stypendium START 2014 dla młodych naukowców, przyznawane przez Fundację na rzecz Nauki Polskiej (FNP),
- Nagroda Coblentz Student Award „William G. Fataley” za osiągnięcia naukowe w roku 2013,
- Stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego za wybitne osiągnięcia naukowe dla doktorantów w roku akademickim 2012/13,

- Stypendium przyznane na odbycie stażu w Londynie w ramach programu 'Społeczeństwo-Technologie-Środowisko',
- Specjalne stypendium dla studentów studiów doktoranckich, przyznawane przez Krakowskie Konsorcjum Naukowe im. Mariana Smoluchowskiego (2012/2013),
- Stypendium 'Doctus' (3 lata) Małopolskiego Centrum Przedsiębiorczości,
- Stypendium naukowe dla 5% najlepszych doktorantów na Wydziale Chemii UJ (w latach akademickich 2010/11, 2012/13 i 2013/14).

2. Dorobek dydaktyczny i popularyzacyjny

Habilitant posiada bogate doświadczenie dydaktyczne. Prowadził on zajęcia różnego typu, takie, jak kursy, konwersatoria, seminaria i szkolenia. Tytuły tychże zajęć, takie jak np.:

- Fizyka w pigułce,
- Podstawy Matlab,
- Podstawy metody Partial Least Squares (PLS) Regression,
- Analiza spektroskopowa produktów naturalnych. Obrazowanie ramanowskie,
- Spektroskopia molekularna,
- Multivariate Analysis in Chemistry,

świadczą o ich interesującej różnorodności oraz o szerokich kompetencjach Kandydata jako dydaktyka.

Dr T. Wróbel sprawował też opiekę naukową nad czterema magistrantami oraz nad dwoma doktorantami. Jest promotorem dwóch prac magisterskich.

Poza aktywnością typowo dydaktyczną, Kandydat aktywnie uczestniczy w popularyzacji nauki, biorąc udział w takich przedsięwzięciach jak np.: organizacja i udział w pokazie chemicznym 'Alchemia czterech żywiołów' w ramach Nocy Naukowej (2008), wykład w ramach Dni Fizyka Medycznego (2018), czy też oprowadzanie wycieczek po centrum Solaris (2020).

3. Dorobek organizacyjny

Habilitant pełnił rolę członka komitetu naukowego trzech konferencji:

- The 1st International Virtual Conference on Advanced Scientific Results SCIECONF-2013);
- The 1st Global Virtual Conference (GV-CONV 2013);
- The 1st Virtual International Conference on Advanced Research in Scientific Areas (ARSA-2012);

oraz rolę członka komitetu organizacyjnego dwóch konferencji:

- Modern Raman and Infrared Imaging Techniques' (Kraków, Polska, 2010),
- XXXI National School of Chemistry, Murzasichle, Polska, 2009.

Do osiągnięć organizacyjnych Kandydata należy również zaliczyć jego aktywność w Samorządzie Studenckim, jako reprezentanta doktorantów do Rady Wydziału Chemii UJ, kierowanie pracownią chemometrii oraz pracę w zespole kierującym Priorytetowym Obszarem Badawczym (POB), 'BioS' w ramach IDUB, UJ.

Obecnie aktywnie uczestniczy w różnych gremiach eksperckich oceniających wnioski o finansowanie badań, o przyznawanie nagród, czy też wnioski konkursowe o charakterze naukowym i dydaktycznym. Np. począwszy od 2018 r. Kandydat jest ekspertem Fundacji na rzecz Nauki Polskiej oraz Narodowej Agencji Wymiany Akademickiej.

Podsumowując, ogólny dorobek publikacyjny, dydaktyczny i organizacyjny w pełni upoważniają pana dr Tomasza Wróbla o ubieganie się o stopień naukowy dr habilitowanego.

Ocena merytoryczna rozprawy habilitacyjnej

Na rozprawę habilitacyjną sklada się 11 publikacji ogłoszonych drukiem w prestiżowych czasopismach naukowych z listy filadelfijskiej, takich, jak: *Scientific Data, Analytica Chemica Acta, Scientific Reports, Analytical Chemistry, Analyst, Vibrational Spectroscopy, Spectroscopy* oraz *PLoS ONE*. Dwie z tych publikacji to prace przeglądowe, pozostałe zaś to oryginalne publikacje naukowe. Stanowią one cykl jednotematyczny, zatytułowany: Badanie wpływu czynników eksperymentalnych

oraz przetwarzania danych na zawartość informacji o składzie chemicznym w spektroskopowym obrazowaniu IR.

W swoim wniosku Kandydat przedstawia zwięzły opis prac wchodzących w skład cyklu habilitacyjnego, dyskutując następujące zagadnienia:

- wpływ rozdzielczości przestrzennej (publikacje H10 i H8),
- wpływ substratu (publikacja H7),
- wpływ polaryzacji (publikacja H6),
- wpływ nowych źródeł IR (publikacje H9 i H5),
- wpływ szumu i odszumiania (publikacje H1-H4),

które decydują o zawartości informacji w widmach absorpcyjnych polimerów i tkanek ludzkich oraz o możliwościach interpretacyjnych uzyskanych wyników.

Dokumenty złożone przez Kandydata zawierają również oświadczenia współautorów, określając procentowy udział tychże w poszczególnych publikacjach.

Jak każda względnie nowa technika analityczna, obrazowanie IR wymaga zrozumienia i określenia wpływu różnorodnych czynników eksperymentalnych na jakość wykonanych pomiarów oraz na końcowe wyniki analizy danych. Systematyczne badania Kandydata z pewnością wnoszą znaczący wkład w rozwój techniki obrazowania IR oraz rozszerzają możliwości jej wykorzystania w różnych dziedzinach nauki i techniki, a zwłaszcza w diagnostyce medycznej. Należy również podkreślić, że badania te wymagały znajomości nie tylko nowoczesnych metod spektralnych, ale również zaawansowanych metod analizy danych.

Doceniając dorobek naukowy Kandydata, chciałabym jednak podzielić się kilkoma uwagami, które mogą Mu się przydać na dalszych szczeblach kariery naukowej. Otóż, doskonale zdając sobie sprawę z faktu, iż publikacje wchodzące w skład cyklu habilitacyjnego zostały już wcześniej pozytywnie ocenione przez wielu ekspertów, na przykładzie pracy H2 chciałabym mimo wszystko wyrazić pewne zastrzeżenia odnośnie do sposobu prezentacji wyników przeprowadzonych przez Kandydata badań.

Artykuł H2 zatytułowany: 'Influence of denoising on classification results in the context of hyperspectral data: High Definition FT-IR imaging', opublikowany w prestiżowym czasopiśmie Analytica Chimica Acta, jest poświęcony badaniom wpływu różnych metod eliminacji szumu na wyniki klasyfikacji obrazów FT-IR metodą Random Forest (RF). Cel pracy jest dobrze sprecyzowany, a badany problem jest bardzo ważny dlatego, iż efektywna eliminacja szumu umożliwia zmniejszenie liczby skanów obrazów, a tym samym skrócenie czasu ich rejestracji. Autorzy badają takie metody eliminacji szumu, jak Savitzky-Golay filter (SG), Wavelets (WV), Principal Component Analysis (PCA) i Minimum Noise Fraction (MNF); oraz Deep Neural Network (DNN) i Median Filter.

Uwagi:

- Autorzy posługują się bardzo niejednoznacznym i często mylącym słownictwem, np. badane przez nich metody eliminacji szumu dzielą na spectral techniques and spatial techniques, co oczywiście nie ma sensu, gdyż metody te mogą być stosowane niezależnie od sposobu prezentacji danych. Innymi słowy, ta sama metoda może być użyta do eliminacji szumu zarówno z widm, jak i z obrazów (spectral and spatial).
- Str. 40: O zastosowanej transformacjo falkowej czytelnik znajdzie w artykule tylko jedno zdanie: 'Bior wavelet family with 4 decomposition levels was applied in this work.' Znaczy to, że nawet nie wiadomo, jaka transformacja falkowa była zastosowana (a jest ich kilka), ani – co bardzo ważne – jaką metodę progowania współczynników falkowych zastosowano.
- Str. 41: o stosowanej w badaniach metodzie Deep Neural Network Autorzy pracy napisali: 'The second method of spatial denoising was possible thanks to the deep neural network implemented in Matlab software', brak jednak jakichkolwiek szczegółów na temat użytych parametrów i struktury sieci. Czy Deep Neural Network był użyty do eliminacji szumu, a jeśli tak, to co stanowiło zmienną zależną?
- Str. 41: 'A pixel level validation was performed by a random 50:50 split of pixels from each of the classes from all cores'. Zbędna, a przede wszystkim błędna, jest walidacja przeprowadzona dla indywidualnych pikseli, bo te są zagnieżdżone w poszczególnych obrazach i fakt ten musi być wzięty pod uwagę na etapie walidacji modelu. Należałoby zatem usunąć cały paragraf 3.1. Autorzy piszą o przedstawionych w tym paragrafie wynikach jako o 'optimistic performance measure', podczas gdy jest to po prostu błędna walidacja.

- Str. 40: Typically noise is expected not to occupy first PCs, therefore, only the first ones are used for signal reconstruction. Proszę wziąć pod uwagę, że szum nie ulega kompresji i wnosi swój wkład do wszystkich czynników głównych.

Reasumując, efektywność metod eliminacji szumu determinowana jest dwoma czynnikami:

- typem sygnału instrumentalnego (stacjonarny/niestacjonarny) oraz

- typem szumu.

Autorzy pracy nie dyskutują jednak tych zasadniczych właściwości sygnału i szumu, lecz badają metody odszumiania, które mają dobrze zdefiniowane zakresy zastosowania i dla badanych obrazów mogą z definicji być suboptymalne. Jestem niezmiernie zaskoczona faktem, że można zajmować się eliminacją szumu nie wiedząc jednocześnie, o jaki konkretnie szum chodzi.

Ponadto, ani w artykule, ani w suplemencie Autorzy pracy nie podają żadnych szczegółów odnośnie do sposobu optymalizacji metod eliminacji szumu. Przykładowo, aż trudno uwierzyć, że ten sam – czwarty – poziom rozdzielczości stosowany w przypadku obu typów obrazów (5.5 oraz 1.1) jest dla nich obu optymalny. Zmiana rozdzielczości obrazu (binning) z 5.5 µm na 1.1 µm to nic innego, jak eliminacja kilku poziomów rozdzielczości w transformacji falkowej (patrz strona 40: Based on the High Definition (HD) data a more common IR imaging pixel size (5.5 µm) was obtained by binning the HD dataset.'). Skuteczność takich metod, jak eliminacja szumu w domenie falkowej, zależy od stosowanej transformacji, typu falki, poziomu rozdzielczości oraz przede wszystkim, od zastosowanej metody progowania (thresholding). Reguły progowania (czyli doboru poziomu wartości progowej współczynników falkowych) zależą również od typu szumu. Inaczej postępujemy w przypadku szumu białego, a inaczej wówczas, gdy mamy do czynienia z szumem proporcjonalnym do sygnału lub skorelowanym.

Jeśli metoda MNF prowadzi do lepszych wyników niż PCA, znaczy to, że potrzebny jest proces 'wybielania szumu', czyli, że szum w oryginalnych danych nie jest szumem białym (gaussowskim) i że koniecznie należy przeprowadzić transformację sygnałów tak, aby móc stosować eliminację szumu w domenie falkowej. W świetle powyższego (tj. użycia transformacji falkowej (WT) do eliminacji szumu nie gaussowskiego) złe wyniki uzyskane dla WT stają się zrozumiałe. Tak więc wyniki i wnioski Autorów artykułu H2 (z pominięciem przedstawionego przeze mnie komentarza) ich zdaniem pozwalają na stwierdzenie, iż najpotężniejsza metoda eliminacji szumu, która

zrewolucjonizowała wszystkie dziedziny nauki wymagające wzmacniania niestacjonarnych sygnałów instrumentalnych jest suboptymalna w porównaniu z takimi metodami, jak PCA, czy też MNF.

Mimo wybranych uwag krytycznych, jakie przykładowo przedstawiłam w odniesieniu do pracy H2, wchodzącej w skład cyklu habilitacyjnego Kandydata, jednocześnie doceniam fakt, iż Jego zainteresowania i ambicje naukowe posiadają charakter interdyscyplinarny, łączący stosunkowo odległe, a jednocześnie wysoce wyspecjalizowane dziedziny, jakimi są spektroskopia wibracyjna oraz chemometria. Doceniam także obiektywną, dużą potrzebę podejmowania tego typu wysiłków, zawsze obarczonych ryzykiem i jednocześnie stanowiących najprawdziwsze wyzwanie naukowe.

Reasumując i biorąc pod uwagę bogaty dorobek publikacyjny, dydaktyczny oraz organizacyjny Kandydata, wnioskuję o dopuszczenie Pana dr Tomasza Wróbla do dalszych etapów przewodu habilitacyjnego.

Beata Walczak

Prof. dr hab. Beata Walczak