

Wrocław, 11.05.2021

dr hab. inż. Jacek Reiner, profesor uczelni
Politechnika Wrocławska
Wydział Mechaniczny
Katedra Technologii Laserowych,
Automatyzacji i Organizacji Produkcji
Wyb. Stanisława Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław
jacek.reiner@pwr.edu.pl

Recenzja rozprawy doktorskiej

mgr inż. Zofii Lorenc

pt.: „System do klasyfikacji obiektów warstwowych wykorzystujący techniki spektralne VIS”

Przedmiotem recenzji jest przedłożona rozprawa doktorska mgr inż. Zofii Lorenc pt.: „System do klasyfikacji obiektów warstwowych wykorzystujący techniki spektralne VIS”, zrealizowana pod kierunkiem Profesora dr hab. inż. Leszka Sałbuta oraz promotora pomocniczego dr inż. Sławomira Paśko. Recenzja została wykonana w odpowiedzi na pismo Dziekana Wydziału Mechanicznego Politechniki Warszawskiej Profesora dr hab. inż. Gerarda Cybulskiego (numer pisma WMŁ.521.4.2021) z dnia 15 marca 2021.

1. Obszar problemowy rozprawy

Kontrola jakości produktów naturalnych stanowi bardzo aktualne wyzwanie dla metrologii optycznej i optomechatroniki, często decydując o bezpieczeństwie ludzi, zwierząt i środowiska. Skuteczne rozwiązywanie takich problemów wymaga pozyskania i analizy sygnałów wielowymiarowych, stąd znajdują tu zastosowanie spektrometria i uczenie maszynowe (ML). Metody analizy spektralnej są docenione i powszechnie znane w badaniach naukowych, szczególnie z zakresu chemii i biologii, wyzwaniem, jednakże ciągle pozostaje ich upowszechnienie, limitowane wysokim kosztem aparatury, której składnikiem jest również oprogramowanie analityczne. Obecnie obserwujemy niezwykle dynamiczny rozwój algorytmów i narzędzi uczenia maszynowego, określane jako sztuczna inteligencja. Niezwykle wydajne i tanie procesory strumieniowe, przetwarzają algorytmy uczenia modeli głębokich (*deep learning*), których wyniki pozytywnie zadziwiająca skutecznością, ale również łatwością opracowania. Nie jest wymagana dogłębna wiedza i rozumienie mechanizmów działania modeli, które często powstają metodą przeszukiwania (prób i błędów). Stąd potrzeba obszerności danych (*big data*) i zdolności ich wydajnego przetwarzania. Takie podejście budzi, jednakże uzasadniony niepokój („przekleństwo danych” – sic!), a nawet zagrożenie, gdy odpowiedzialność decyzyjna systemu AI jest kosztowna. Czy decyzja sztucznej inteligencji, będzie odporna na zakłócenia, jak się zachowa w niewalidowanym zakresie pracy, jakie są jej ograniczenia?

Stąd, pomimo presji tempa i redukcji kosztów rozwoju optomechatroniki, w kontekście bardzo wydajnych i tanich GPU/*cloud computing* – wiedza o działaniu i ograniczeniach algorytmów

ML jest ciągle niezbędną.

Wybór, redukcja i selekcja danych pomiarowych, będąca głównym wyzwaniem badawczym dysertacji, jest bardzo ważnym i obszernym obszarem wiedzy nazywanym często „inżynierią cech”. To ona właśnie jest automatyzowana przez sieci konwolucyjne, stanowiące początkowe warstwy sztucznych sieci neuronowych. Jednakże, obecnie podkreśla się, że wiedza *a priori*, o charakterystykach wyrobu, pozwala uprościć proces przeszukiwania, a system inspekcji jest bardziej odporny na zakłócenia, bardziej kompaktowy i tańszy - co jest zasadną motywacją do niniejszych badań.

W powyższym kontekście, podjęcie badań przez Panią mgr inż. Zofię Lorenc, nad metodami oceny produktów naturalnych, które będą bazowały na „taniach” sygnałach z zakresu VIS – uważam za bardzo aktualne i ważne, z punktu widzenia poznawczego i aplikacyjnego. Badania w tym zakresie, wymagają interdyscyplinarności (optomechatronika) i bardzo dojrzałego podejścia informatycznego, do niezwykle obszernego i dynamicznie rozwijającego się obszaru przetwarzania i analizy sygnałów wielowymiarowych (*Big data*), w tym uczenia maszynowego.

2. Kompozycja i treść rozprawy

Na wstępie doceniam formę wydania pracy, przez Wydział Mechatroniki, w postaci „analogowej” – wydrukowanej monografii, co bardzo ułatwia i zachęca do jej studiowania. Rozprawa liczy 120 stron, podzielona została na 5 rozdziałów, zawiera wykaz oznaczeń i spis literatury obejmujący 148 pozycje.

We **Wstępie** Autorka identyfikuje problem, nakreśla obszar swoich badań, w tym ograniczenia i formułuje cel swojej pracy:

Opracowanie systemu wykorzystującego pomiary widma promieniowania z zakresu widzialnego wraz z implementacją metod parametryzacji i redukcji sygnału do klasyfikacji obiektów warstwowych.

Wynika z powyższego, że materiałem badań są sygnały z zakresu spektralnego VIS, oraz problematyka redukcji danych pomiarowych, a obszar aplikacji dotyczy wybranej grupy obiektów - warstwowych, jak np. rozmazy na szkiełkach mikroskopowych, skorupki/osłonki, liście, etc.

Pośród celów szczegółowych najważniejszy poznawczo jest pierwszy: **Analiza sygnału widmowego ze szczególnym uwzględnieniem opracowanej metody parametryzacji z użyciem aproksymacji wielomianowej oraz metody doboru i redukcji widma**; jak również czwarty dotyczący **weryfikacji eksperymentalnej na wybranych przykładach**. Pozostałe cele stanowią ważne kamienie milowe do osiągnięcia celu głównego.

W rozdziale 2. Autorka dokonuje **przeglądu stanu wiedzy**. Przegląd jest adekwatny do zakresu prowadzonych badań. Obejmuje podstawy fizyczne optyki, metody i techniki detekcyjne oraz przetwarzanie sygnałów i klasyfikację cech. Zgodnie z postawionym celem, algorytmy selekcji cech przestudiowane są dogłębnie, choć znajdujemy też nieprzywołane, np. metody grupy *a priori* i *a posteriori*, algorytmy genetyczne, iPLS/rPLS, etc. Cenne są zestawienia uogólniające i podsumowujące, np. Tabela 2.1, Tabela 2.2. Ważne, z punktu metodycznego pracy jest, że omówiono miary oceny jakości klasyfikacji, takie jak krosvalidacja, dokładność klasyfikacji modelu, które zostały wybrane jako mierniki oceny autorskich algorytmów.

W rozdziale 3. Metoda parametryzacji i metoda redukcji sygnału, znajdujemy opis dwóch autorskich metod redukcji wymiarowości: PAW – metoda parametryzacji z użyciem aproksymacji wielomianowej oraz DRW – metoda doboru i redukcji widma. Ilustracje

graficzne, wzory matematyczne i diagramy pozwalają szybko i dokładnie poznać opracowane podejścia. W czytelny, graficzny sposób pokazano wyniki analizy dokładności w funkcji zmiany parametrów PAW (zakresu i skoku) oraz DRW (szerokość i przesunięcie), które zostały obszernie skomentowane.

Ponadto, badany jest wpływ niedokładności i rozdzielczości pomiaru co dostarcza cennej wiedzy metrologicznej o odporności i ograniczeniach opracowanych metod PAW i DRW.

Docenić należy obszernie porównanie wybranych metod selekcji cech z uwzględnieniem różnych metod redukcji wymiarowości przy użyciu różnych klasyfikatorów. Pozwala to ocenić opracowane algorytmy PAW i DWR w kontekście takich znanych narzędzi uczenia maszynowego, jak LDA (liniowa analiza dyskryminacyjna), PCA (analiza składowych głównych), PLS (metoda cząstkowych najmniejszych kwadratów), SFFS (algorytm ruchomej selekcji postępującej), DT (drzewo decyzyjne), ANN (sztuczne sieci neuronowe) czy SVM (maszyna wektorów nośnych). Pośród kryteriów oceny uwzględniono, wymiarowość danych i liczbę próbek, skorelowanie danych, złożoność obliczeniową, interpretację fizyczną, sterowanie procesem decyzyjnym i wymagane doświadczenie operatora.

Rozdział 4. Obejmuje badania eksperymentalne na wybranych dwóch przykładach:

- klasyfikacja jaj kurzych (skorup) pod względem zainfekowania kur patogenem *Mycoplasma Synoviae* oraz
- klasyfikacja miodów pszczołich za względu na pochodzenie botaniczne.

Adaptacyjność systemu wskazana w tytule rozdziału, nie jest niestety szczególnym wyróżnikiem opracowania, gdyż w przedstawionym rozumieniu będzie dotyczyła każdego systemu ML.

Powyższe badania eksperymentalne wymagały od Autorki, zapoznania się z wiedzą dziedzinową problemu (patogeny drobiu hodowlanego, identyfikacja odmianowości miodów) pozyskania i przygotowania próbek badawczych, (Państwowy Instytut Weterynarii w Puławach, oraz Akredytowane Laboratorium Instytutu Ogrodnictwa Puławy), opracowania stanowisk badawczych (dwie konfiguracje optyczne układów spektrometrii odbiciowej i transmisyjnej), zebrania danych pomiarowych (obejmują 2500 i 900 przykładów), opracowania i implementacji algorytmów ich przetwarzania, analizy oraz oceny uzyskanych wyników – zatem przeprowadzenia całego kompletnego procesu badawczego.

Zaprezentowany materiał jest oryginalny, obszerny i wartościowy pod względem poznawczym i użytkowym.

Podsumowanie i wnioski zaprezentowano w rozdziale ostatnim, gdzie wskazano również na kierunki dalszych badań i prac rozwojowych, nad algorytmami i opracowanym systemem inspekcyjnym.

Struktura pracy jest prawidłowa, edycja staranna, materiał graficzny czytelny i komunikatywny. Do błędów edytorskich zaliczam, powtórzenie diagramu z rysunek 4.4 w rysunek 4.5 oraz bardzo nieliczne uchybienia edytorskie, brak numeracji podrozdziałów 2.2.4.1-2.2.4.4

3. Zagadnienia dyskusyjne i uwagi krytyczne

Korzystając z przywileju recenzenta, bardzo proszę o uszczegółowienie lub komentarz do poniższych zagadnień:

- a) Badania autorskiego algorytmu aproksymacji wielomianowej PAW, pod kątem wpływu parametryzacji dotyczące zakresu i skoku, zostały przedstawione na rys. 3.3 i rys. 3.4. Przeprowadzono je na podstawie danych widmowych transmitancji miodów pszczołich. Na

- ile podany przykład można uznać za normatywny dla uogólnionego wnioskowania o ograniczeniach opracowanej metody, czy też jest to wizualizacja dla konkretnego przypadku?
- b) W przykładzie badanych skorup jaj pokazano uśrednione widmo transmitancji wraz z rozstępem międzykwantylowym (rys. 4.6) - co bardzo ułatwia zrozumienie danych, dokonanie wstępnej selekcji zakresu analizy. Brakuje takiej prezentacji, wraz z charakterystyką statystyczną, dla danych widmowych miodów pszczelich, które są podstawą analizy algorytmów PAW i DWR w rozdziale 3.
 - c) Pewien wgląd w charakterystyki transmitancyjne miodów jest możliwy poprzez analizę PCA, wykresy zależności składowych głównych rys. 4.12, gdzie jednakże, brakuje pokazanej współzależności PC1-PC2. (pokazano jedynie PC1-PC3 i PC2-PC3). Proszę dokonać "wglądu", za pomocą PCA, w dane widm transmitancji jaj kurzych - jakie wnioski można sformułować?
 - d) W jaki sposób stwierdzono, że 3 pierwsze komponenty analizy PCA są wystarczające do zamodelowania badanych charakterystyk produktów i dalszego ich przetwarzania? Jaki procent wariacji był nimi wyjaśniany? Czy analiza wykresów wag (*Loadings*), reszt-Q i wskaźnika *Hotellings* T^2 dla badanych zestawów danych może dostarczyć dodatkowej wiedzy o modelowanym problemie?
 - e) W rozdziale 2.2.2.2., omawiającym operacje filtracji, słusznie stwierdzono, że „odpowiednie przygotowanie sygnału do dalszego przetwarzania nie jest oczywiste”. Dalej znajdujemy informacje o metodach korekcji i normalizacji widm, np. MSC (*Multiplicative Scatter Correction*), SNV (*Standard Normal Variate*) a także algorytmach różniczkowych Norrisa-Williamsa (N-W) i różniczkowo-wielomianowym filtrze Savitzki-Golay (S-G).
 - f) Niestety, w dalszej części pracy szczegóły dotyczące parametrów stosowanej filtracji S-G (rzęd wielomianu i szerokość okna) nie zostały przedstawione - według jakiego kryterium jej wyznaczono?
 - g) Powyższa problematyka dotyczy również przygotowania sygnałów do analizy PCA, czy zwrócono uwagę na wpływ centrowania i normalizacji sygnałów?
 - h) Badania dotyczące wpływu niedokładności i rozdzielczości pomiarowej urządzenia na działanie opracowanych metod (rozdział 3.3) są bardzo ważne. Przy wnikliwej analizie metodyki badawczej pojawiają się jednakże wątpliwości, czy "zaszumianie sygnału" przefiltrowanego (S-G), a nie surowego, oraz czy przyjęta metoda decymacji, dają wiarygodną odpowiedź na postawione pytania badawcze?
 - i) Jakość działania opracowanego systemu oceniono w oparciu o dwa wskaźniki dokładności *acc* i *acc.r*, szczegółowo omówione w rozdziale 2.2.5. W przypadku oceny algorytmów klasyfikacji, powszechnie zastosowanie znajdują macierze pomyłek (*confussion matrix*) oraz krzywe ROC (*Receiver Operating Characteristic*), na podstawie których dokonuje się bardziej szczegółowego wglądu w jakość i poprawność modeli klasyfikacyjnych. W jaki sposób taka wiedza mogłaby pozwolić na lepsze dostrojenie systemów decyzyjnych do rozwiązywanych problemów?
 - j) Dlaczego do rozwiązania problemu wykrywania „niebezpiecznych” jaj, od kur zakażonych patogenem *Mycoplasma Synoviae* – zdecydowano na użycie metody transmisyjnej? Jej konsekwencją jest konieczność niszczenia obiektu badań, co z perspektywy użytecznej będzie ograniczeniem. Schemat idei działania opracowanego systemu do klasyfikacji obiektów warstwowych wykorzystującego techniki spektralne VIS (rysunek 4.1) wskazuje bowiem na możliwości akwizycji widma odbiciowego. Metoda wyznaczenia reflektancji opisana w rozdziale 2.22. jest też poparta stosowną zależnością matematyczną 2.11.
 - k) W środowisku uczenia maszynowego, coraz powszechniej, wraz z publikacjami, upowszechnia się przynależące zestawy danych (*datasets*), dzięki temu inni badacze mają możliwość samodzielnej odpowiedzi na szereg szczegółowych pytań oraz wiarygodnego

odniesienia swoich wyników. Proponuję, aby Autorka rozważyła możliwości takiego udostępnienia danych widmowych.

4. Oryginalne osiągnięcia i konkluzja

Recenzowana praca pt. "System do klasyfikacji obiektów warstwowych wykorzystujący techniki spektralne VIS" ma charakter badań eksperymentalnych i aplikacyjnych nad autorskimi algorytmami:

- PAW (metodą parametryzacji sygnału widmowego z użyciem aproksymacji wielomianowej) oraz
 - DRW (metoda doboru i redukcji widma)
- na przykładach klasyfikacji skorup jaj kurzych i miodów pszczelich.

Poprzez realizację niniejszej pracy doktorskiej Autorka wykazała, wiedzę i umiejętności w zakresie metodycznego prowadzenia badań i raportowania ich wyników. Sformułowała problem badawczy i zaplanowała jego realizację, pogłębiła wiedzę teoretyczną w zakresie akwizycji i przetwarzania sygnałów spektralnych i uczenia maszynowego, opracowała i przebadła wiele algorytmów redukcji i selekcji cech, przeprowadziła badania eksperymentalne, opracowywała i zaimplementowała algorytmy uczenia maszynowego, dokonała aplikacji i oceny badanych algorytmów na przykładach rzeczywistych.

Oryginalnym osiągnięciem Doktorantki jest opracowanie i ocena autorskich algorytmów redukcji i selekcji cech PAW i DRW oraz opracowanie i ocena systemów klasyfikacyjnych bazujących na danych widmowych VIS: dla skorup zakażonych jaj kurzych, na poziomie 95%, dla miodów pszczelich, na poziomie dokładności 95%, przetwarzanych autorskimi algorytmami PAW i DRW. Uzyskane wyniki są lepsze od przywołanych, dostępnych danych referencyjnych, choć nie bazują one na tym samym źródle danych.

Cele poznawcze i użyteczne postawione przez Autorkę zostały z sukcesem rozwiązane, w sposób prawidłowy, co mimo zgłoszonych przeze mnie uwag krytycznych i polemicznych, dowodzi przygotowania Doktorantki do prowadzenia badań naukowych i przemysłowych w dyscyplinie Inżynieria Mechaniczna, w której mieści się przedłożona dysertacja.

Wyniki przeprowadzonych badań przez Doktorantkę zostały zakomunikowane na forum międzynarodowym w Journal of the Science of Food and Agriculture, oraz materiałach konferencyjnych Springer.

Stwierdzam, że opiniowana praca mgr inż. Zofii Lorenc spełnia warunki stawiane przez obowiązującą ustawę o stopniach i tytułach naukowych w określeniu do rozpraw doktorskich (Dz. U. Nr 65 poz. 595, z późniejszymi zmianami z dnia 14 marca 2003) i może być dopuszczona do publicznej obrony.

Jacek Reiner



