



**KUJAWSKO-POMORSKIE
CENTRUM NAUKOWO-TECHNOLOGICZNE**
im. prof. Jana Czochralskiego sp. z o.o.
tel. +48 56 65 30 792, [www. centrumczochralskiego.pl](http://www.centrumczochralskiego.pl)
ul. Krasieńskiego 4; 87 100 TORUŃ

Prezes: prof. zw. dr hab. Bogusław Buszewski, dr h.c. mult. czł. rzec. PAN & EASA,

RECENZJA

rozprawy habilitacyjnej pt.:
„Metoda głównych składowych w rozwiązywaniu problemów analizy jakościowej i ilościowej próbek o złożonej strukturze i składzie chemicznym – podejście niestandardowe”
oraz dorobku naukowego **dr Grażyny Czerniak**
z Wydziału Technologii i Inżynierii Chemicznej Politechniki Bydgoskiej
im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich

Informacje ogólne

Dr Grażyna Czerniak studia fizyczne ukończyła w roku 1994 r. na Wydziale Fizyki i Astronomii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu uzyskując stopień *magistra fizyki*. W 2003 roku uchwałą Rady Naukowej Instytutu Fizyki Politechniki Wrocławskiej uzyskała stopień *doktora nauk fizycznych* na podstawie rozprawy: *„Wybrane zagadnienia interpretacji widm elektronów za pomocą głównych składowych i analizy czynnikowej”*. Promotorami rozprawy był prof. dr hab. Ryszard Siuda. Od 1994 – 2003 roku zatrudniona była jako asystent w Zakładzie Fizyki Doświadczalnej Instytutu Matematyki i Fizyki Akademii Rolniczo-Technicznej w Bydgoszczy, a następnie jako adiunkt (do 2006 r. i dalej do 2021) w ATR a następnie w Uniwersytecie Technologiczno-Przyrodniczym w Bydgoszczy. Od 2021 r. zatrudniona jest jako adiunkt w Zakładzie Fizykochemii Powierzchni Wydziału Technologii i Inżynierii Chemicznej UTP a obecnie Politechniki Bydgoskiej.

W 1994 r. ukończyła czterosemestralne Studium Pedagogiczne Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu. W 1996 r. Habilitantka odbyła trzymiesięczny staż (program Tempus) w Zakładzie Chemii Organicznej Wydziału Chemicznego Uniwersytetu w Umeå (Szwecja), gdzie pod okiem prof. P. Galadiego i prof. S. Wolda kształciła się i podnosiła swoje kwalifikacje w zakresie metod chemometrycznych. Ponadto wiedzę swoją uzupełniała, poprzez krótkoterminowe wizyty/staże w: Austrii, Niemczech oraz kurs we Włoszech. Aktywnie współpracowała i współpracuje z ośrodkami akademickimi w Polsce.

Rozprawa habilitacyjna


Przedstawioną do oceny rozprawę habilitacyjną dr Grażyny Czerniak stanowi zbiór spiętych w plik 7 prac, opublikowanych w latach 2014-2025 w czasopiśmie z listy *Journal*

Citation Reports (JCR), opatrzonego wstępnym komentarzem (autoreferat). Wszystkie te prace opublikowane zostały w czasopiśmie o obiegu międzynarodowym tj: *J. Chemom.* (1), *Chemom. Intell. Lab. Syst.* (2), *J. Appl. Phys.* (1), *App. Surface Sci.* (1), *Sci. Tot. Environ.* (1), *J. Environ. Manag.* (1). Badania te odnoszą się do wykorzystania i zastosowania chemometrii i wielowymiarowej analizy statystycznej w interpretacji sygnałów instrumentalnych, co stanowi kontynuację badań podjętych w ramach rozprawy doktorskiej. Zagadnienia te wprawdzie mieszczą się w obszarze nauk ścisłych i przyrodniczych (fizyka, matematyka, chemia), mam jednak wątpliwości co do zakwalifikowania i przypisania ich jako prace czysto chemiczne. Kandydatka będąc fizykiem, stosując metody analizy statystycznej *de facto* matematykę) ubiega się o stopień naukowy doktora habilitowanego **nauk chemicznych!!** Potwierdzeniem moich wątpliwości jest wybór czasopism, w których Habilitantka publikowała wyniki swoich prac!. Łączny tzw. *Impact Factor (IF)* dla tych prac to niezła wartość **33.64**. Niestety nie wiadomo ile razy były one cytowane?, tj jaki był/jest ich oddźwięk w literaturze ?

Analizując osiągnięcia Habilitantki należy zauważyć, że Jej głównym celem było wykazanie nowego, dotychczas nie opisanego potencjału głównych składowych, bazujących na opracowaniu algorytmów oraz schematów postępowania w chemometrii, opartych na dobrze znanej metodzie PCA. Metodologia ta wiele lat temu opisana została w fundamentalnych opracowaniach prof. Bruce R. Kowalskiego z Millikin University, IL (USA). Te nowe metodyki posłużyć miały/mają w sytuacjach gdy metody analizy, typowe dla danej techniki pomiarowej, wykazują istotne ograniczenia. Zatem będąca przedmiotem oceny problematyka jest cenna i ma użyteczny charakter. Stanowi poniekąd niszowy przedmiot studiów badawczych laboratoriów obliczeniowych czy naukowo-rozwojowych. Większość z realizowanych badań, co zauważa Habilitantka opiera się na:

- (i) opracowaniu nowej metody chemometrycznej o nazwie SQPCA (*Score-based Principal Component Analysis*) przeznaczonej do ilościowego oznaczania składników w złożonej mieszaninie a zwłaszcza pojedynczych analitów na podstawie danych typu *first-order data*,
- (ii) opracowania schematów postępowania ze zbiorami danych spektroskopowych, które ze względu na swoją złożoność nie mogą być efektem przetwarzania przy użyciu podejścia klasycznego,
- (iii) opracowanie nowego statystycznego indeksu jakości, w szczególności do monitorowania wielu parametrów fizykochemicznych i biologicznych wód powierzchniowych jednocześnie, oraz wczesnego wykrywania próbek atypowych na przykładzie rzeki Odry.

W tym obszarze doszukać można się pewnych elementów **nowości naukowej**, choć jako chemik-analityk uważam, że nie da się realizować wiarygodnych badań jakościowych i ilościowych, czysto chemometrycznych, bez odpowiednio opracowanych rzetelnych procedur metodyk analitycznych i dobranego instrumentarium. Metrologia *via* chemometria jest jednym z elementów analityki i postępowania analitycznego i może posłużyć do weryfikacji i uwiarygodnienia wyniku pomiarowego. Habilitantka podjęła taką próbę stosując jako narzędzie pakiet do PCA we wszystkich siedmiu pracach stanowiących ekwiwalent osiągnięcia habilitacyjnego. Należy zaznaczyć, że Kandydatka we wszystkich tych pracach jest pierwszą autorką. Jedną z tych prac jest monoautorska. Prace odnoszą się zarówno do modelowania jak i przetwarzania sygnałów i widm instrumentalnych dla potrzeb analizy farmaceutycznej, inżynierii materiałowej jak i analizy środowiskowej. W artykule [A1] przedstawiono algorytm o nazwie „*Score-based Quantitative Principal Component Analysis*” służący do ilościowego oznaczania różnych substancji czynnych w preparatach farmaceutycznych (tabletki) na podstawie widm FTIR. Z analizy tej pracy wynika, że



wg proponowanej procedury możliwe jest jednoczesne ilościowe oznaczanie kilku analitów w obecności nieznanymi związków zakłócających. Osiągnięto to poprzez włączenie do założonego modelu zestawu danych kalibracyjnych bazujących na PCA uzyskanych dla widm dwukierunkowych mieszanin, które są traktowane jako liniowa kombinacja sygnału widmowego wszystkich czystych składników o znanej zawartości analitów. Model ten obejmuje zależność między wynikami dla widma mieszaniny a wynikami dla widma czystego składnika. Skuteczność proponowanej metody została oceniona za pomocą powszechnie stosowanych miar dokładności i porównana z 3 metodami klasycznymi tj.: metodą najmniejszych kwadratów, metodą regresji cząstkowej oraz wielowymiarową rozdzielczością krzywych bazującą na naprzemiennej metodzie najmniejszych kwadratów. Wyniki pokazały, że w widmach wieloskładnikowych układów dwukierunkowych, w przypadkach gdy metody klasyczne nie są w stanie dokładnie przewidzieć stężenia składników, podejście oparte na PCA, **w pewnych okolicznościach, może generować dobre wyniki i może być użyteczna** w przewidywaniach eksperymentalnych.

Podobny charakter, z kontynuacją wcześniejszych badań, ma publikacja [A 2]. Tu Habilitantka przedstawiła aplikację bazującą na ilościowej analizie głównych składowych stosując algorytm SQPCA w pozyskaniu informacji z wieloskładnikowych widm w obecności nieznanymi związków interferujących. Z analizy danych wynika, iż metodologia bazująca na dekonwolucji tych widm może być przydatna w interpretacji danych emisyjnych czy/i NMR. Autorka wskazała możliwość zastosowania tej metody do interpretacji sygnałów uzyskanych dla złożonych, sztucznie stworzonych mieszanin związków organicznych z grupy fenoli czy mieszaniny składającej się z aminokwasu, peptydu, oligosacharydu i alkoholu. Problem w obu tych pracach polega na tym, że w rozważaniach tych brak jest referencyjnych metod instrumentalnych, jako weryfikujących końcowy wynik.

Inny nieco wydźwięk, choć w tym samym nurcie, ma praca [A3] odnosząca się do interpretacji widm kompozytu z udziałem indu i miedzi z depozycją organiczną. Dzięki metodzie tworzenia skumulowanych sum przy użyciu PCA (tzn PC1+PC2, PC1+PC2+PC3, itd.), i na podstawie wektorów ładunków, dokonano interpretacji widm abstrakcyjnych wyróżniając trzy formy fazowe indu; metaliczną, aktywną chemicznie i fazę nieaktywną. Dzięki wizualizacji chemometrycznej możliwe było wykazanie, że podłoże odgrywa ważną rolę podczas osadzania indu na podłożu organicznym (ftalocjaniany). Ponadto wykazano, że w początkowej fazie preferowane jest powstanie zdefiniowanego kompozytu In_2CuPc , zaś w dalszym tworzenia klastrów, na których tworzy się warstwa metaliczna. Bazując na przeprowadzonych rozważaniach z uwzględnieniem energii wiązania (metal-podłoże) dokonano weryfikacji i interpretacji istniejących modeli. Podobne wnioski można wysnuć analizując prace [A4] i [A-5]. W tym przypadku modelowanie chemometryczne wykorzystano do interpretacji widm dyfrakcyjnych (X-ray) podczas identyfikacji związków chemicznych odpowiedzialnych za odpowiedni kolor (tlenki, azotki) podłoża tytanowego pod wpływem promieniowania laserowego. I w tym przypadku metoda głównych składowych posłużyła do modelowania wielu grup jednocześnie, stosując w interpretacji schemat polegający na budowaniu modelu PCA w oparciu o dane referencyjne. Odwrócenie wcześniej zaproponowanego algorytmu pozwoliło na niestandardowe operowanie danymi zarówno referencyjnymi jak i tymi wykorzystanymi w symulacji numerycznej np. określania *via* biplot formowanej kompozycji cienkich warstw złota czy złota z cyną na podłożach ze szkła. Zmiana nośnika z tytanu na rod w wykorzystaniu techniki XPS do pozyskania widm charakterystycznych po laserowym napromieniowaniu, uzupełnionych o obrazowanie z użyciem mikroskopii konfokalnej, wskazuje na wariantowość i możliwość wykorzystania techniki PCA w grupowaniu (analiza klastrowa) i interpretacji dużej ilości danych pomiarowych w charakteryzowaniu powstałych struktur i indywiduów.

Jak bumerang wraca moje wcześniej postawione pytanie; i gdzie tu jest chemia, ta w klasycznym tego słowa rozumieniu? Poza analitami-pierwiastkami czy/i związkami chemicznymi (z nazwy),



podłożami-nośnikami i fizykochemicznymi technikami pomiarowymi niestety nie ma jej. Wszędzie dominuje matematyka i analiza statystyczna, nawet nie chemia obliczeniowa. To prawda, że chemicy zwłaszcza analitycy posługują się analizą PCA do interpretacji danych pomiarowych (mechanizmy) i wizualizacji (modelowanie, obrazowanie, etc).

Ostatnia część pakietu ocenianych prac odnosi się do opracowania nowego statystycznego indeksu jakości (TQ-PCA) rekomendowanego dla oceny i klasyfikacji np. wód [A6] i [A7]. Indeks ten bazuje na teście Hotellinga T^2 , stanowiącego uogólnienie rozkładu testowego t-Studenta. Dzięki temu możliwe jest wielowymiarowe obrazowanie na jednym wykresie jako jednego wskaźnika. Przy czym monitorowane parametry są zwykle skorelowane, co powoduje iż zmiana jednego czynnika wpływa na pozostałe w określony sposób, a nawet małe wzajemne zmiany mają swój udział w zsumowanej kowariancji. Wg danych przedstawionych w obu dyskutowanych pracach [A6] i [A7] zaproponowany model z dużą dozą prawdopodobieństwa był tożsamy w monitorowaniu zagrożenia ekologicznego rzeki Odry dzięki synergii fizykochemicznych i biologicznych deskryptorów i korelacji ich zmienności. Oczywiście, jak w każdej metodzie statystycznej (chemometrycznej) dobór parametrów charakterystycznych opisujących dany obiekt badawczy (układ wieloparametrowy) jest kluczowy. Końcowy wynik zależy od tego które z tych parametrów zostaną zastosowane i skorelowane by sobie nawzajem nie „przeszkadzać”

Analizując te prace widać ich monotematyczność, poprzez użycie standardowo dostępnych pakietów rekomendowanych do analizy PCA, choć odnoszące się do różnych obiektów i aplikacji. Całość zatem nie daje czytelnikowi jednoznacznego poglądu wkładu, jaki wniosła Habilitantka w rozwój dziedziny nauk ścisłych i przyrodniczych zwłaszcza w dyscyplinie chemia. Z drugiej strony nie mam najmniejszej wątpliwości, że powyższe wyniki stanowią znaczący przyczynek w interpretacji wyników pomiarowych i z powodzeniem mogą być wykorzystane w rutynowych badaniach. Pytanie jaki jest ich odzew w literaturze? Stąd doszukanie się spektakularnej nowości nie jest oczywiste i jednoznaczne, choć są elementy interesujące.

Moją ocenę obniża też nieprawidłowa nomenklatura chemiczna stosowana przez Habilitantkę. Takich kwiatków jest parę. Dla przykładu: *koncentracja*, gdy powinno być *stężenie*, *pik* gdy mówimy o *sygnale pomiarowym*. Generalnie autoreferat jest napisany słabym, niejasnym językiem. Zdecydowanie wyżej oceniam plik opiniowanych publikacji. Z drugiej strony nie ma co się dziwić, były one już wcześniej recenzowane i korygowane.

Dorobek naukowo-organizacyjny

Ocenę tej aktywności p. dr Grażyny Czerniak rozpocznę od podsumowania naukometrycznego. Dorobek oceniam umiarkowanie pozytywnie, jako mało zróżnicowany aczkolwiek mieszczący się w głównym kanonie osiągnięcia. Obejmuje on:

- a) oryginalne prace naukowe – 30 w tym 22 prace z listy JCR wg. deklaracji Habilitantki, wg ISI Web of Sciences łączny współczynnik oddziaływania (IF) prac stanowiących ekwiwalent osiągnięcia habilitacyjnego wynosi 33.64, co przekłada się na 910 pkt wg. MNiSW. Liczba cytowań dla wspomnianych wyżej 30 prac wynosi 153. Daje to wartość indeksu Hirscha, $h = 8$.
- b) projekty uzyskane w wyniku konkursów – 3 i 2 edukacyjne (wymiana naukowa) ale jako **wykonawca**,
- c) aktywność konferencyjna krajowa (K) i międzynarodowa (M), w tym referaty – 1M i 4K, komunikaty i postery - 11M i 24K pozycje
- d) wykłady na zaproszenie w instytucjach i gremiach krajowych - 11.

Większość wyszczególnionych prac odnosi się do głównego nurtu ocenianego osiągnięcia tj. chemometrii i analizy statystycznej w kontekście opracowania, na bazie PCA, algorytmów użytecznych w poprawie i korelacji sygnałów dla potrzeb instrumentalnych technik pomiarowych stosowanych w fizyce, chemii, agronomii czy w ocenie produktów rolnych, zabiegów agro-, a nade wszystko/i wpływu zanieczyszczeń środowiska wodnego. Z analizy danych naukometrycznych niestety nie można jednoznacznie wnioskować, które z prac przedstawionych na konferencjach krajowych i międzynarodowych (komunikaty czy/i postery) były osobiście prezentowane przez Habilitantkę. Tym bardziej, że lista tych osiągnięć, w stosunkowo długiej karierze naukowej (od 1994 r), nie jest imponująca. Na podstawie przedłożonego zestawienia nie można też jednoznacznie odnieść się do oddźwięku tych prac w literaturze specjalistycznej (cytowalność), stanowiących ekwiwalent osiągnięcia habilitacyjnego. Tym bardziej, że ogólna liczba cytowań nie jest imponująca (ca. 150). Dobór i wybór czasopism też budzi wątpliwości recenzenta. Tylko nieliczne prace z całego dorobku są publikowane w *stricte* chemicznych periodykach. Większość z nich to prace z pogranicza matematyki/statystyki, fizyki z elementami inżynierii materiałowej, tu nieco chemii, żywności i tu nieco chemii i agronomii. Kandydatka ubiega się o stopień z zakresu **nauk chemicznych** !? Nie najlepiej to świadczy o aktywności naukowej Habilitantki. Choć w ostatnim czasie pewne próby zostały poczynione. Myślę tu o pracach [A6] i [A7]. I znowu mam dylemat; jak interpretować osiągnięcie opublikowane w czasopiśmie (*Sci. Tot. Environ.*), które w 2025 r straciło swoją naukową reputację, i pomimo że nadal jest w bazie Elsevier aktualnie posiada zerowy IF, a w konsekwencji jest poza punktacją MNiSzW). Ja przyjąłem jednak zasadę niezależnej oceny wartości tej publikacji. Muszę stwierdzić, że zarówno prac [A6] oraz ta opublikowana w *J. Environ. Menag.* [A7] podobały mi się najbardziej. Wydaje mi się, że to jednak trochę za mało jak na osiągnięcie habilitacyjne.

Analizując, zatem cały dorobek Habilitantki stwierdzić należy, że nie jest on za bogaty i różnorodny. W jednym przypadku jest Ona jedynym autorem (praca z zakresu chemometrii i analizy statystycznej z 2021 r), pozostałe przypadki to prace wieloautorskie (od 2 do 6 autorów). Należy jednak zaznaczyć, że w ponad połowie prac jest Ona pierwszym autorem. W początkowym okresie widać wpływ prof. R. Siudy, jako mentora, dalej domniemać się można że to Ona była inspiratorką i głównym wykonawcą badań pod wpływem, jak sama pisze na str. 8, *Autoreferatu*, prof. P. Geladi'ego i prof. S. Wold'a z Ūmëa University. Ten aspekt dobrze świadczy o Jej zaangażowaniu i wykorzystaniu swojego potencjału w interdyscyplinarnych grupach badawczych.

W tym punkcie oceny charakterystyki osiągnięć koniecznie należy wspomnieć o działalności dydaktycznej, która jest integralną częścią pracy zawodowej nauczyciela akademickiego. Od momentu zatrudnienia, najpierw w Akademii Rolniczo-Technicznej (od 1994r) po okresie transformacji do Politechniki Bydgoskiej zatrudniona jest na etacie naukowo-dydaktycznym (obecnie jako adiunkt). Zgodnie ze statutem uczelni wyższej realizuje wszelkie formy działalności dydaktycznej tj wykłady, ćwiczenia laboratoryjne, seminaria. Sprawowała też opiekę i promotorstwo nad realizowanymi pracami inżynierskimi (2), magisterskimi (3).Cała ta aktywność dotyczy fizyki, fizyki technicznej i statystyki. Była i jest (?) aktywnym członkiem Polskiego Towarzystwa Fizycznego (sekretarz, współorganizator zjazdu). W ramach promocji nauk ścisłych a zwłaszcza fizyki prowadziła też serię zajęć popularyzatorskich w szkołach średnich pod hasłem „*Fizyka jest spoko*”. Oceniając ten zakres działalności Habilitantki stwierdzam, że nie



budzi on zastrzeżeń recenzenta i zasługuje na docenienie, choć też nie jest imponujący, z tą uwagą że odnosi się do dyscypliny **fizyka** !.

Wspomniana powyżej aktywność zarówno naukowa jak i organizacyjna została zauważona i doceniona w formie wyróżnień i nagród zarówno przez lokalne władze rektorskie (6-cio krotnie) jak i Polskie Towarzystwo Fizyczne (Medal 100 lecia-2021r) i MNiSzW (Medal Edukacji Narodowej-2021 r). Czasopismo *Journal of Chemometrics* (Wiley) wyróżniła Ją Certyfikatem Recenzenta w 2019 r.

Ocena końcowa

Reasumując powyższe uważam, że w świetle obowiązujących przepisów, w stopniu mało przekonywującym, spełnione zostały przesłanki określone w art. 227 Ustawy 2.0 z dnia 20 lipca 2018 r. *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce oraz Dz.U. z 2020 r. poz. 1668 z późniejszymi zmianami*. Przedstawione do oceny materiały stanowią mało wystarczająco bogatą merytoryczną podstawę do ubiegania się przez panią **dr Grażynę Czerniak** o stopień doktora habilitowanego zwłaszcza w dyscyplinie **nauki chemiczne** i dlatego finalną decyzję o ewentualnym poparciu wniosku do Rady Naukowej Dyscypliny Nauki Chemiczne Politechniki Bydgoskiej podejmę na posiedzeniu Komisji Habilitacyjnej, po kolokwium i dyskusji z Habilitantką. Na tym etapie wnoszę **o dopuszczenie** Jej do dalszych etapów wszczętego postępowania.

Stary Toruń, 9 maja 2026 r.


prof. dr hab. Bogusław Buszewski