

Recenzja

W postępowaniu habilitacyjnym dr Grażyny Czerniak

„Metoda głównych składowych w rozwiązywaniu problemów analizy jakościowej i ilościowej próbek o złożonej strukturze i składzie chemicznym - podejście niestandardowe”

Podstawa formalna

Przedmiotem recenzji jest praca habilitacyjna dr Grażyny Czerniak, adiunkta naukowo-badawczego w Zakładzie Fizykochemii Powierzchni Wydziału Technologii i Inżynierii Chemicznej Politechniki Bydgoskiej.

Recenzja została sporządzona zgodnie z wymaganiami określonymi w art. 219 *warunki nadania stopnia doktora habilitowanego* ust.1 pkt 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce [Dz. U. 2023, poz. 742] w związku z powołaniem mnie w skład Komisji habilitacyjnej jako recenzenta, przez Senat Politechniki Bydgoskiej im. Jana i Jędrzeja Śniadeckiego w Bydgoszczy, nr 14/478 w dniu 23 lutego 2026 roku.

1. Ocena parametrów formalnych oraz dorobku naukowego

Kandydatka nie ubiegała się uprzednio o nadanie stopnia doktora habilitowanego. Jej ścieżka naukowa związana jest z trzema ośrodkami naukowymi w Polsce – Wydziałem Fizyki i Astronomii Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu, Instytutem Fizyki Politechniki Wrocławskiej oraz Wydziałem Technologii i Inżynierii Chemicznej Politechniki Bydgoskiej. Dr Grażyna Czerniak po uzyskaniu stopnia doktora nauk fizycznych w dniu 15 kwietnia 2003 r. i przepracowaniu 9-ciu lat jako asystent w Zakładzie Fizyki Doświadczalnej Instytutu Matematyki i Fizyki Akademii Techniczno-Rolniczej w Bydgoszczy, od 2003 do 2021 roku pracowała w tej samej instytucji naukowej, która w 2006 zmieniła nazwę na Uniwersytet Technologiczno – Przyrodniczy w Bydgoszczy. Od 2021 roku pracowała jako adiunkt w Zakładzie Fizykochemii Powierzchni Instytutu Matematyki i Fizyki i w 2025 roku w związku z likwidacją Instytutu Matematyki i Fizyki pozostała w wymienionym Zakładzie na Wydziale Technologii i Inżynierii Chemicznej Politechniki Bydgoskiej.

Dane scientometryczne wskazane przez Habilitantkę (z datą odczytu 17. 12. 2025) a dotyczące całości Jej dotychczasowego dorobku kształtują się następująco: liczba publikacji 22 (Web of Science); liczba cytowań publikacji 166; - bez autocytaowań 153 (Web of Science); indeks Hirscha (h-index): 8 (Web of Science).

1

Dr Grażyna Czerniak swojej pracy habilitacyjnej nadała tytuł: „Metoda głównych składowych w rozwiązywaniu problemów analizy jakościowej i ilościowej próbek o złożonej strukturze i składzie chemicznym - podejście niestandardowe” i oparła ją na cyklu 7. powiązanych tematycznie artykułów naukowych zgodnie z art. 219 ust.1. pkt 2b ustawy.

2. Ocena osiągnięcia naukowego będącego przedmiotem postępowania habilitacyjnego

Przedstawiony do recenzji dorobek naukowy obejmuje 7 prac naukowych powiązanych tematycznie, obejmujący lata: 2014, 2017 2018, 2020, 2021, 2024, 2025. Jedna praca jest monoautorska, trzy są dwuautorskie, i pozostałe trzy są wieloautorskie. Grupa współautorów jest szeroka a współautorami są znani naukowcy w Polsce (Zakład Chemii Nieorganicznej i Analitycznej, Collegium Medicum w Bydgoszczy UMK w Toruniu, Zakład Elektroniki Politechniki Wrocławskiej) oraz z zagranicy (University of Manitoba Departament of Civil Engeneering , Kanada; Norwegian University of Science and Technology). Opisany przez Habilitantkę zakres Jej indywidualnego wkładu w powstanie poszczególnych publikacji nie pozostawiają wątpliwości co do wiodącej roli dr Grażyny Czerniak w powstaniu publikacji. We wszystkich publikacjach dr Grażyna Czerniak jest autorem korespondującym, pierwszym autorem i autorem koncepcji niestandardowego podejścia chemometrycznego. Pod względem eksperymentalnym wkład Habilitantki obejmuje opracowanie oraz formalny opis podstaw matematycznych metody SQPCA (Score-based Principal Component Analysis) – nowego podejścia opartego na analizie kształtów sum wektorów ładunków. Zaproponowana koncepcja umożliwia integrację informacji pochodzących z obrazów mikroskopowych próbki z wynikami analizy XPS (X-ray Photoelectron Spectroscopy). Ponadto Habilitantka wprowadziła nowy indeks statystyczny, wykorzystywany do kontroli jakości wody oraz prognozowania zakwitów złotych alg. Są to prace, w których Habilitantka wykazała szerokie kompetencje w zakresie praktycznego zastosowania zaproponowanych algorytmów chemometrycznych opartych na PCA, a także umiejętność nie tylko wnikliwej analizy, lecz również syntezy uzyskanych wyników, prowadzącej do tworzenia spójnych i dobrej jakości publikacji naukowych.

Moim zadaniem, jako recenzenta pracy habilitacyjnej nie jest szczegółowa analiza opublikowanych prac naukowych a wskazanie, będące wyrazem osobistej oceny istotnego wkładu osoby ubiegającej się o nadanie stopnia doktora habilitowanego w rozwój określonej dyscypliny naukowej albo artystycznej.

Pierwszą pracą w cyklu habilitacyjnym dr Grażyny Czerniak jest publikacja, która opisuje rozszerzoną metodę PCA – SQPCA (Score-based Principal Component Analysis), która służy do analizy ilościowej w sytuacjach, gdy skład próbki nie jest w pełni znany, a dane pochodzą z pojedynczej techniki pomiarowej. Zaproponowano algorytm chemometryczny oparty na PCA, stanowiący bardziej ogólną metodę analizy ilościowej, nazwany przez Autorki SQPCA. Kluczowa idea tej metody opiera się na szczególnej właściwości PCA, zgodnie z którą główne składowe odzwierciedlają proporcje głównych składników w mieszaninie [A1]. Metodę zweryfikowano, a uzyskane wyniki wskazały na jej duży potencjał w analizie ilościowej. Niskie koszty oraz niewielka czasochłonność w porównaniu z innymi metodami chemometrycznymi stosowanymi do oznaczania substancji w próbkach wieloskładnikowych o nieznanym składzie stanowią główną zaletę zaproponowanej metody. W kolejnej pracy [A2] opracowano nowe zastosowanie SQPCA do rozwiązywania wymagającego problemu oznaczania pojedynczego analitu w złożonej mieszaninie bez konieczności uwzględniania pozostałych składników. Skuteczność metody została wykazana na podstawie analizy ilościowej dwóch rzeczywistych eksperymentalnych zbiorów danych zawierających nakładające się widma związków, pochodzących z dwóch technik analitycznych: spektroskopii fluorescencyjnej oraz spektroskopii magnetycznego rezonansu jądrowego (NMR). Wydajność tego podejścia porównano również z wynikami dostępnymi w literaturze dla tych zbiorów danych. Ponadto przedstawiono wskazówki dotyczące tworzenia przyjaznej użytkownikowi, szybkiej procedury o potencjalnym zastosowaniu w wielu obszarach chemii. Rozwijająca się koncepcja ilościowej analizy głównych składowych opartej na wynikach (Score-based Quantitative Principal Component Analysis, SQPCA) została przedstawiona jako obiecujące narzędzie uzupełniające obok dobrze znanych algorytmów wielowymiarowych stosowanych w badaniach spektroskopowych dotyczących oznaczania ilościowego składników mieszanin. Jak wskazują uzyskane wyniki, dokładność predykcji metody SQPCA, posiadającej przewagę drugiego rzędu, jest porównywalna ze skutecznością klasycznych algorytmów wielowymiarowych. W pracy [A3] wykazano, że analiza zmian w widmach fotoelektronowych w nadfiolecie (UPS) z wykorzystaniem analizy głównych składowych (PCA) wskazuje na współistnienie dwóch typów faz indu: reaktywnej oraz niereaktywnej, których zachowanie ma istotne znaczenie dla funkcjonowania urządzeń opartych na wielowarstwowych półprzewodnikach metaloorganicznych. Kluczowe informacje dotyczące oddziaływań typu metal–ligand organiczny uzyskano na podstawie dwuwymiarowego wykresu (biplotu). Ten charakterystyczny sposób prezentacji danych upraszcza interpretację widm UPS oraz umożliwia identyfikację istotnych cech widma, takich jak położenia energetyczne pików oraz zależności



(korelacje) między nimi. Kolejna praca [A4] przedstawia możliwość zastosowania wielowymiarowej analizy danych w technice dyfrakcji rentgenowskiej (XRD) do wspomaganie identyfikacji związków chemicznych. Zaproponowano podejście oparte na wielowymiarowej analizie statystycznej dyfraktogramów rentgenowskich. Wykorzystano analizę głównych składowych (PCA) do określenia, które wzorce z bazy danych referencyjnych wykazują powiązania z analizowanymi próbkami pod względem ich składu. Zastosowanie biplotu PCA umożliwiło porównanie eksperymentalnych „odcisków palców” dyfrakcyjnych próbek Au-Sn i Ti-O z charakterystycznymi cechami wzorców zawartych w bazie danych. W analizie wykorzystano zewnętrzny zbiór danych w postaci profili referencyjnych w celu zbadania zależności między nimi a zmierzonymi dyfraktogramami. Uzyskane wyniki wskazują na istotność statystyczną obserwowanych zależności oraz wysoką zdolność różnicowania składu chemicznego próbek. W kontekście identyfikacji składu chemicznego zastosowanie biplotu PCA pozwala na szybkie, spójne i akceptowalne wyniki, zgodne z rezultatami uzyskiwanymi metodami standardowymi. Połączenie danych XRD z metodami eksploracyjnej analizy statystycznej, takimi jak PCA, może również wspomagać identyfikację składników obecnych w niewielkich ilościach. W pracy [A5] pokazano potencjał łączenia informacji pochodzących z danych obrazowych mikroskopii optycznej z wysoko rozdzielczą spektroskopią fotoelektronów rentgenowskich (XPS), co pozwoliło uzyskać nowe spojrzenie na rozkład właściwości chemicznej na złożonej powierzchni. Metody wielowymiarowej analizy statystycznej (MVA) zostały zastosowane do opisu różnic w stopniu narażenia na utlenianie różnych obszarów polikrystalicznej próbki rodu w skali milimetrowej. Zastosowanie analizy skupień (CA) w przetwarzaniu obrazów cyfrowych ma kluczowe znaczenie w diagnostyce folii wykonanej z polikrystalicznego rodu. Wykazano, że możliwe jest ilościowe określenie wpływu podatności powierzchni próbki na proces utleniania, przy czym powierzchnia ta składa się z wielu krystalitów o zróżnicowanym rozmiarze i orientacji. Aby rozwiązać ten problem, zaproponowano podejście oparte na połączeniu metod CA i PCA w celu stworzenia reprezentatywnego zestawu widm XPS do analizy rozkładu (dekompozycji) chemicznej. Wyniki pokazują, że technika PCA, choć nie jest optymalna do generowania czystych składowych chemicznych w wieloskładnikowych zbiorach danych ze względu na „mieszanie składowych”, umożliwia szczegółowe zrozumienie złożonej powierzchni. Istotną częścią osiągnięć naukowych Habilitantki jest opracowanie nowego indeksu statystycznego nazwanego TQ_PCA, służącego do kontroli jakości próbek wody powierzchniowej oraz przedstawiono jego potencjał w zakresie wczesnego wykrywania katastrof ekologicznych [A6]. Habilitantka zbudowała model oparty na PCA, który dodatkową



wykorzystuje dwie statystyki (T^2 Hotellinga i Q -reszty), aby wykrywać nieprawidłowości w działaniu systemu. Statystyka T^2 ocenia odchylenie próbki w przestrzeni modelu PCA, natomiast statystyka Q mierzy część sygnału niewyjaśnioną przez model, co razem umożliwia skuteczne wykrywanie anomalii. Skuteczność proponowanego wskaźnika została przetestowana z użyciem danych jakości wody z rzeki Odry, obejmujących okres największej katastrofy ekologicznej w najnowszej historii europejskich rzek. Zaproponowany wskaźnik wykazał bardzo dobrą skuteczność analizy dla zestawu danych fizykochemicznych jakości wody ze stacji polskich oraz zestawu danych fizykochemicznych i biologicznych ze stacji niemieckiej we Frankfurcie, potwierdzając wcześniejsze doniesienia. Zastosowanie tej metody z jednej strony wspiera standardowe metody badania a przestrzenne mapowanie pojedynczego wskaźnika jakości jest łatwiejsze w użyciu dla decydentów i może być w przejrzysty sposób prezentowane społeczeństwu. Z drugiej strony, metoda TQ_PCA mogłaby zostać wdrożona w systemach monitoringu online jako narzędzie wczesnego ostrzegania. W pracy przedstawiono ogólny sposób działania wskaźnika statystycznego TQ_PCA jego wielowymiarowy charakter oraz uniwersalność. Praca [A7] jest kontynuacją wykorzystania statystycznego wskaźnika jakości wód do charakteryzowania rozkładu szkodliwych zakwitów glonów. Jednak najważniejszym wynikiem tego badania jest wykazanie potencjału wskaźnika TQ_PCA jako nowego narzędzia do wykrywania zmian w środowisku wodnym jeszcze przed wystąpieniem szkodliwych zakwitów glonów. Celem proponowanej metody monitoringu online jest pomoc władzom w poprawie sezonowego prognozowania zakwitów glonów szkodliwych (HABs). Badanie to może również przyczynić się do lepszego zrozumienia systemów wodnych w odpowiedzi na inne czynniki środowiskowe. Prognozowanie przyszłych zakwitów złotych alg może mieć kluczowe znaczenie dla ekosystemów wodnych. Wyniki niniejszego badania wykazały, że statystyczny wskaźnik jakości wód może w ujęciu jakościowym odtwarzać sezonową dynamikę występowania *Prymnsium Parvum* na obszarze rzeki Odry w Polsce. Uwzględnienie czynników biologicznych (reprezentowanych tutaj dla stacji Frankfurt/Oder) byłoby informacyjne i użyteczne do bardziej efektywnego badania zakwitów za pomocą wskaźnika TQ_PCA.

Podsumowując, opracowaniu algorytmów chemometrycznych oraz schematów postępowania w chemometrii, opartych na metodzie PCA, która znajduje zastosowanie w sytuacjach, gdy metody analizy typowe dla danej techniki pomiarowej wykazują istotne ograniczenia jest istotnym osiągnięciem dr Grażyny Czerniak. Przedstawione prace są oryginalne, bardzo dobrze

przeprowadzone są badania literaturowe oraz drobiazgowa analiza i wyważone wnioski. Są to prace opublikowane w dobrych czasopismach naukowych (Chemom. Intell. Lab. Syst., IF=3,7, 2 publikacje; J. Appl. Phys., IF= 2, 43; J. Chemom., IF=1,5; App. Surf. Sci.; IF=6,62; Sci.Tot. Environ., IF=8,2; J. Environ. Manag., IF=8,0).

Prace mają charakter interdyscyplinarny, co wynika z istoty chemometrii jako dziedziny łączącej metody chemii analitycznej z narzędziami statystyki wielowymiarowej oraz informatyki, służącymi przetwarzaniu i interpretacji danych pomiarowych. Zgodnie z oświadczeniem Habilitantki, eksperymenty chemiczne zostały przeprowadzone przez współautorów publikacji lub opierały się na danych wcześniej upublicznionych.

3. Ocena udziału w projektach badawczych oraz współpraca z otoczeniem

Dr Grażyna Czerniak umieściła w autoreferacie informację jako współwykonawca kilku projektów międzynarodowych. W latach 1995- 1998 była członkiem zespołu realizującego projekt TEMPUS, SJEP 09418-95 „Modernisation and Curricula Development of Physical Measurement Technology Courses”. Kandydatka brała udział w dwóch projektach w ramach współpracy naukowej z ośrodkami naukowymi w Niemczech, 5769/R05/07 oraz Austrii OeAD PL-12/218 WTZ Polen. Dr Grażyna Czerniak odbyła krótkoterminowy staż w Niemczech w Instytucie Analizy Roślin w Quedlinburgu oraz 3 miesięczny staż na Wydziale Chemicznym Umea, Szwecja. Współpracuje z naukowcami z kraju w Collegium Medicum UMK i z zagranicy dr Beata Gorczyca (Kanada) i prof. Frank Westad (Norwegia).

4. Ocena działalności dydaktycznej i organizacyjnej oraz popularyzującej naukę

Habilitantka od wielu lat prowadzi systematyczną działalność dydaktyczną w ramach pracy na uczelni wyższej. Obecnie jako adiunkt badawczo-dydaktyczny realizuje zajęcia laboratoryjne i rachunkowe z fizyki technicznej, inżynierii środowiska, informatyki, technologii chemicznej, technologii żywności i żywienia człowieka oraz bioinżynierii. Dr Grażyna Czerniak aktywnie uczestniczy w procesie dydaktycznym jako opiekunka 3 prac magisterskich i 2 prac inżynierskich. Była także członkiem Rady Programowej kierunku Fizyka Techniczna i pełniła funkcję opiekuna roku. Habilitantka opracowała materiały do ćwiczeń projektowych z

6

przedmiotu „Metody opracowywania wyników pomiarów i obserwacji”. Prowadziła szkolenia dla pracowników naukowo-dydaktycznych Wydziału Budownictwa, Architektury i Inżynierii Środowiska UTP w Bydgoszczy pt. „Właściwa interpretacja rezultatów badań i ich analiza statystyczna”. Działalność pedagogiczna Habilitantki związana jest również ze szkolnictwem średnim: kilka lat współorganizowała zawody finałowe Wojewódzkiego Konkursu Fizycznego; pełniła funkcje obserwatora podczas egzaminu maturalnego z fizyki; jest jednym z autorów kalendarza na rok 2024 „Fizyka jest spoko”; wielokrotnie brała udział w projektach dydaktycznych dla młodzieży, których celem było przypomnienie zdobytej wiedzy z fizyki i jej poszerzenie. W zakresie działań organizacyjnych Habilitantka wspomina o aktywnym udziale jako członek i skarbnik w Polskim Towarzystwie Fizycznym oraz o aktywnym udziale w przygotowaniu krajowych i międzynarodowych wydarzeń naukowych. Za tę aktywność została uhonorowana medalem 100-lecia Polskiego Towarzystwa Fizycznego oraz licznymi nagrodami Rektora. Wśród osiągnięć Habilitantki godne uwagi są otrzymane nagrody za działalność naukową: certyfikat recenzenta przyznany w 2019 roku przez zespół redakcyjny czasopisma *Journal of Chemometrics* (WILEY); Medal Komisji Edukacji Narodowej, 2021; stypendium Rektora dla wyróżniających się asystentów; 7 nagród zespołowych Rektora II stopnia za osiągnięcia w działalności naukowej; 5 nagród indywidualnych Rektora za wyróżniające się osiągnięcia w działalności naukowej.

Podsumowanie i rekomendacja

Stwierdzam, że cykl publikacji przedstawionych przez dr Grażynę Czerniak spełnia ustawowe kryteria wymagane do ubiegania się o stopień doktora habilitowanego, jednocześnie podkreślam niewątpliwą wpływ prac na rozwój niestandardowego podejścia do modelowania matematycznego z użyciem głównych składowych w celu rozwiązania konkretnych problemów z zakresu analizy jakościowej i ilościowej próbek o złożonej strukturze i składzie chemicznym.

Stwierdzam także, że dorobek naukowy dr Grażyny Czerniak odpowiada art. 219 *warunki nadania stopnia doktora habilitowanego* ust. 1 pkt 2 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz.U.2023, poz.742) i wnioskuję do Rady Naukowej Politechniki Bydgoskiej im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich o nadanie dr Grażynie Czerniak stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie nauki chemiczne.

Poznań, 12 maja 2026

