

Prof. dr hab. inż. Robert Burduk
Politechnika Wrocławska
Wydział Informatyki i Telekomunikacji
Ul. Wybrzeże Stanisława Wyspiańskiego 27
50-370 Wrocław

Wrocław, dnia 05.09.2024 r.

RECENZJA

rozprawy doktorskiej mgr. inż. Krzysztofa Pałczyńskiego
zatytułowanej: „**Badania algorytmów sztucznej inteligencji i ich
odpowiednich modyfikacji w procesie modelowania komórek biologicznych
oraz wykrywania wybranych chorób onkologicznych i kardiologicznych**”

Recenzja rozprawy doktorskiej mgr. inż. Krzysztofa Pałczyńskiego została sporządzona w związku z powołaniem przez Senat Politechniki Bydgoskiej im. Jana i Jędrzeja Śniadeckich, piszącego niniejszą recenzję, uchwałą z dnia 26 czerwca 2024 r.

Kryteria oceny dysertacji wynikają z przepisów zawartych w art. 187 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478). Rozprawę doktorską mgr. inż. Krzysztofa Pałczyńskiego stanowi zbiór opublikowanych i powiązanych tematycznie artykułów naukowych, który spełnia wymagania zawarte w art. 187 punkt 3 oraz punkt 4 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478).

Problem badawczy i jego znaczenie

Zakres recenzowanej rozprawy dotyczy szerokiej i dynamicznie rozwijającej się problematyki wykorzystania metod sztucznej inteligencji w naukach związanych z chemią oraz medycyną. W szczególności Doktorant koncentruje się na zagadnieniu dotyczących wspomaganie diagnostyki chorób onkologicznych oraz kardiologicznych. Zaproponowane autorskie rozwiązania dotyczące modyfikacji metod uczenia maszynowego zostały dedykowane problemowi klasyfikacji ostrej białaczki limfoblastycznej oraz chorób

kardiologicznych dla trzech różnych zbiorów etykiet klas. Innym wątkiem badawczym przedstawionym w dysertacji jest opracowanie metod sztucznej inteligencji dedykowanych modelowaniu szlaków biochemicznych, co wpisuje się w nurt badań związanych z chemią informatyczną.

Tematyka podjęta przez mgr. inż. Krzysztofa Pałczyńskiego jest interesująca, w pełni uzasadniona oraz odpowiada na wyzwania współczesnej informatyki technicznej, której metody znajdują zastosowanie w innych naukach. W szczególności interdyscyplinarności dysertacji dotyczy wykorzystania zaproponowanych modyfikacji algorytmów sztucznej inteligencji w problemach wywodzących się potrzeb nauk chemicznych oraz medycznych.

Struktura pracy oraz wiedza Autora

Rozprawę doktorską mgr. inż. Krzysztofa Pałczyńskiego stanowi zbiór dziesięciu opublikowanych i powiązanych tematycznie artykułów naukowych:

1. Kloska, S., Pałczyński, K., Marciniak, T., Talaśka, T., Nitz, M., Wysocki, B. J., ... & Wysocki, T. A. (2021). Queueing theory model of Krebs cycle. *Bioinformatics*, 37(18), 2912-2919.
IF'23 = 4,4 MNiSW = 200 cytowania WoS=7
2. Kloska, S. M., Pałczyński, K., Marciniak, T., Talaśka, T., Miller, M., Wysocki, B. J., ... & Wysocki, T. A. (2022). Queueing theory model of pentose phosphate pathway. *Scientific reports*, 12(1), 4601.
IF'23 = 3,8 MNiSW = 140 cytowania WoS=11
3. Kloska, S. M., Pałczyński, K., Marciniak, T., Talaśka, T., Miller, M., Wysocki, B. J., ... & Wysocki, T. A. (2023). Conversion of fat to cellular fuel—Fatty acids β -oxidation model. *Computational Biology and Chemistry*, 104, 107860.
IF'23 = 2,6 MNiSW = 70
4. Kloska, S. M., Pałczyński, K., Marciniak, T., Talaśka, T., Miller, M., Wysocki, B. J., ... & Wysocki, T. A. (2022). Queueing theory model of mTOR complexes' impact on Akt-mediated adipocytes response to insulin. *PLoS One*, 17(12), e0279573.
IF'23 = 2,9 MNiSW = 100 cytowania WoS=2
5. Kloska, S. M., Pałczyński, K., Marciniak, T., Talaśka, T., Wysocki, B. J., Davis, P., & Wysocki, T. A. (2023). Integrating glycolysis, citric acid cycle, pentose phosphate pathway, and fatty acid beta-oxidation into a single computational model. *Scientific Reports*, 13(1), 14484.

- IF'23 = 3,8 MNiSW = 140 cytowania WoS=4
6. Pałczyński, K., Śmigiel, S., Gackowska, M., Ledziński, D., Bujnowski, S., & Lutowski, Z. (2021). IoT application of transfer learning in hybrid artificial intelligence systems for acute lymphoblastic leukemia classification. *Sensors*, 21(23), 8025.
IF'23 = 3,4 MNiSW = 100 cytowania WoS=9
7. Pałczyński, K., Ledziński, D., & Andrysiak, T. (2022). Entropy Measurements for Leukocytes' Surrounding Informativeness Evaluation for Acute Lymphoblastic Leukemia Classification. *Entropy*, 24(11), 1560.
IF'23 = 2,1 MNiSW = 100
8. Śmigiel, S., Pałczyński, K., & Ledziński, D. (2021). ECG signal classification using deep learning techniques based on the PTB-XL dataset. *Entropy*, 23(9), 1121.
IF'23 = 2,1 MNiSW = 100 cytowania WoS=35
9. Śmigiel, S., Pałczyński, K., & Ledziński, D. (2021). Deep learning techniques in the classification of ECG signals using R-peak detection based on the PTB-XL dataset. *Sensors*, 21(24), 8174.
IF'23 = 3,4 MNiSW = 100 cytowania WoS=17
10. Pałczyński, K., Śmigiel, S., Ledziński, D., & Bujnowski, S. (2022). Study of the few-shot learning for ECG classification based on the PTB-XL dataset. *Sensors*, 22(3), 904.
IF'23 = 3,4 MNiSW = 100 cytowania WoS=18

Zamieszczone oświadczenia współautorów publikacji naukowych wchodzących skład zbioru powiązanych tematycznie artykułów naukowych pozwalają stwierdzić, iż wkład mgr. inż. Krzysztofa Pałczyńskiego w ich przygotowanie jest znaczący i obejmuje najważniejsze aspekty merytoryczne oraz badawcze niezbędne w procesie przygotowania publikacji naukowej. Dodatkowo stosowny opis wykonanych prac badawczych, które wykonał mgr. inż. Krzysztof Pałczyński znajduje się w sekcji *Author Contributions/CRedit authorship contribution statement* większości publikacji.

Wymienione artykuły naukowe przypisane są do dyscypliny informatyka techniczna i telekomunikacja zgodnie z załącznikiem do komunikatu Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 5 stycznia 2024 r. w sprawie wykazu czasopism naukowych i recenzowanych materiałów z konferencji międzynarodowych. Należy zauważyć, że publikacje naukowe, które są podstawą o ubieganie się mgr. inż. Krzysztofa Pałczyńskiego o stopień doktora są już zauważone przez światowe środowisko naukowe, czego dowodem są sto trzy (na dzień sporządzenia niniejszej recenzji) cytowania w bazie WoS (bez autocytowań).

Zbiór omawianych publikacji opatrzony jest opracowaniem, które składa się z: wykazu artykułów wchodzących w skład cyklu wraz z uzasadnieniem spójności tematycznej, wstępu zawierającego cel i zakres badań, dwóch rozdziałów przedstawiających streszczenia prac wchodzących w cykl powiązanych tematycznie artykułów naukowych wraz z autorskimi modyfikacjami algorytmów uczenia maszynowego, kopii artykułów naukowych będących podstawą o ubieganie się Autora dysertacji o nadanie stopnia doktora, wniosków końcowych, bibliografii, kopii oświadczeń współautorów dotyczących wkładu do każdej publikacji wchodzącej w skład cyklu powiązanych publikacji, literatury, streszczenia w języku polskim oraz angielskim.

Rozdział *Wstęp* zawiera podpunkt *Hipoteza badawcza, cel i zakres badań*, w którym Autor przedstawił pięć tez badawczych, które zostały udowodnione poprzez odpowiednie badania eksperymentalne. Argumenty służące udowodnieniu postawionym tezom znajdują się w rozdziałach nr 4 oraz 5 dysertacji. Należy zwrócić uwagę, że tytuł podrozdziału jest nieco mylący ponieważ Autor nie sformułował hipotezy badawczej.

Rozdział *Metody badań i wyniki modelowania komórek biologicznych* zawiera wprowadzenie to podjętej przez Doktoranta tematyki związanej z chemią informatyczną oraz opisuje wyniki badań, które ukazały się w publikacjach [1-5]. Natomiast rozdział *Metodyka badań w procesie wspomaganie wykrywania wybranych chorób onkologicznych i kardiologicznych* zawiera opis badań oraz uzyskane wyniki, które ukazały się w publikacjach [6-10]. Wspomniane dwa rozdziały zawierają treść, która wskazuje, że mgr. inż. Krzysztof Pałczyński posiada ogólną wiedzę z zakresu metod uczenia maszynowego oraz chemii informatycznej.

Spis literatury liczy 77 pozycji. Cytowane prace dobrane są prawidłowo, są aktualne i odnoszą się do omawianych w pracy problemów.

Pod względem redakcyjnym praca napisana jest poprawnie. W dysertacji znajdują się drobne błędy redakcyjne oraz dotyczące znaczenia wyrażenia (np. str. 8 – „Każda kolumna przechowuje inny typ danych”, typ danych w poszczególnych kolumnach tabeli może się powtarzać, zatem cytowane stwierdzenie jest błędne; str. 9 – „punktu procentowego jakości przetwarzania”, co to jest jakość przetwarzania z punktu widzenia klasyfikacji?; str. 50 – „posiada trzy stopnie dokładności etykiet”, poprawnie to: trzy różne zbiory etykiet klas; separatorem dziesiętnym w tabelach jest kropka zamiast przecinka; brak dat dla publikacji o numerach 36 oraz 39; pozycja [8] z cyklu publikacji zamieszczona jest w dysertacji dwukrotnie, natomiast brak jest kopii pozycji [9]).

Wkład Autora — oryginalne osiągnięcia

Oryginalne osiągnięcia mgr. inż. Krzysztofa Pałczyńskiego przedstawione w dysertacji dotyczą opracowania modyfikacji algorytmów uczenia maszynowego, które zostały wykorzystane w modelowaniu szlaków metabolicznych, rozpoznawaniu ostrej białaczki limfoblastycznej oraz chorób kardiologicznych. W szczególności oryginalne osiągnięcia Doktoranta dysertacji dotyczą:

1. Zaproponowania wykorzystania teorii kolejek, wywodzącej się z badań operacyjnych do modelowania szlaków metabolicznych. Zastosowanie teorii kolejek pozwala na uniknięcie sytuacji, w której stężenie metabolitu jest mniejsze od zera, co jest wadą stosowania w modelowaniu szlaków metabolicznych równań różniczkowych.
2. Zaproponowania postaci funkcji strat wykorzystywanych w algorytmie genetycznych biorącym udział w modelowaniu szlaków metabolicznych. Zaproponowane funkcje strat dedykowane są do odpowiednich szlaków metabolicznych, które były modelowane podczas prac badawczych prowadzonych przez mgr. inż. Krzysztofa Pałczyńskiego (cykl Krebsa [1], szlak pentozofosforanowy [2], beta-oksydacja kwasów tłuszczowych [3], odpowiedź komórkowa na insulinę [4], szlak obejmujący prace glikolizy wraz z wcześniej wymienionymi szlakami [5]).
3. Opracowania grupowania genów w chromosomie algorytmu genetycznego, który odzwierciedla odpowiednie reakcje chemiczne w szlaku metabolicznym. Warunkiem grupowania jest przynależenie danych kodowanych w chromosomie do jednej reakcji chemicznej, modelowanej za pomocą równania Michaelisa-Menten.
4. Opracowania metody klasyfikacji limfocytów osób chorych na ostrą białaczkę limfoblastyczną, która uwzględnia obraz otoczenia limfocytów, a nie obraz całego zdjęcia mikroskopowego.
5. Opracowania dwu modalnej architektury sieci neuronowej CNN dedykowanej do rozpoznawania chorób kardiologicznych bazującej na analizie sygnału EKG. Zaproponowana dodatkowa modalność uwzględnia różne miary entropii sygnału EKG.
6. Opracowania architektury głębokiej sieci neuronowej wykorzystującej technikę *few-short learning* dla sygnału EKG do klasyfikacji chorób kardiologicznych.

Wymienione osiągnięcia świadczą o umiejętności samodzielnego prowadzenia pracy naukowej przez mgr. inż. Krzysztofa Pałczyńskiego oraz o oryginalnym rozwiązaniu problemu naukowego jakim jest zaproponowanie modyfikacji metod uczenia maszynowego wraz z ich

wykorzystaniem w modelowaniu szlaków metabolicznych, rozpoznawaniu ostrej białaczki limfoblastycznej oraz chorób kardiologicznych.

Uwagi krytyczne i dyskusje

W zaproponowanej przez Doktoranta metodzie klasyfikacji limfocytów, która uwzględnia obraz ich otoczenia obiekt zakrywający limfocyt jest prostokątem. Wykorzystanie obiektu bardziej zbliżonego do kształtu limfocyta np. elipsy lub koła pozwoliłoby na zakrycie mniejszej powierzchni istotnej z punktu widzenia zaproponowanej metody, czyli otoczenia limfocyta.

W analizie wyników klasyfikacji ostrej białaczki limfoblastycznej lub chorób kardiologicznych znajduje się często stwierdzenie, że zaproponowane przed mgr. inż. Krzysztofa Pałczyńskiego modyfikacje algorytmów uczenia maszynowego uzyskują lepsze wyniki od algorytmów referencyjnych o podaną wartości wykorzystanej metryki oceny jakości klasyfikacji. Wykorzystanie odpowiednich testów statystycznych pozwoliłoby na analizę wyników w szerszym kontekście, w szczególności na stwierdzenie, czy uzyskane wyniki są statystycznie istotne.

W artykule [6] jako model referencyjny przyjęto głęboką sieć neuronową o architekturze MobileNet v2 uczoną na zbiorze *ImageNet*. Zbiór ten nie jest tożsamy z wykorzystanym w badaniach zbiorem ALL-IBD. Model referencyjny był zatem uczony na innym zbiorze danych.

W opisie wykorzystanego algorytmu XGBoost Autor mylnie stosuje pojęcie parametru metody uczenia maszynowego. Hiperparametry podawane są przez użytkownika, natomiast wartości parametrów wyliczane są podczas działania wybranego algorytmu uczenia maszynowego. Stwierdzenie „Model ten posiadał 100 drzew, każde mające 64 liście. Oznacza to, że łącznie model posiadał 6400 parametrów” odnosi się do jednego z hiperparametrów algorytmu XGBoost jakim jest maksymalna liczba węzłów terminalnych (liści). Dodatkowo Autor nie wspomina jaka była stosowana technika szukania najlepszego zestawu hiperparametrów w przeprowadzonych badaniach eksperymentalnych.

Podsumowanie

Reasumując stwierdzam, iż mgr inż. Krzysztof Pałczyński posiada ogólną wiedzę z zakresu metod sztucznej inteligencji, która mieści się w dyscyplinie informatyka techniczna i telekomunikacja. Lektura dysertacji pozwala stwierdzić, że Autor zaprezentowała na jej łamach umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej, której efekty zostały

opublikowane jako zbiór powiązanych tematycznie artykułów naukowych przypisanych zgodnie z załącznikiem do komunikatu Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 5 stycznia 2024 r. do dyscypliny informatyka techniczna i telekomunikacja.

Wobec powyższego, recenzowana praca spełnia wymagania zdefiniowane przez artykuł 187 Ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U. z 2021 r. poz. 478). Konkludując, wnoszę o przyjęcie rozprawy oraz dopuszczenie mgr. inż. Krzysztofa Pałczyńskiego do publicznej obrony.

Jednocześnie mając na uwadze fakt, że jedna z publikacji mgr. inż. Krzysztofa Pałczyńskiego ukazała się w czasopiśmie *Bioinformatics*, któremu zgodnie ze stosownym komunikatem MNiSW przypisano 200 punktów oraz fakt, że liczba cytowań (bez autocytowań) prac Doktoranta w bazie WoS wynosi sto trzy wnoszę o wyróżnienie rozprawy mgr. inż. Krzysztofa Pałczyńskiego.

