

Zakład Metrologii i Modelowania Procesów Agrofizycznych

Instytut Agrofizyki PAN w Lublinie

Recenzja

Pracy doktorskiej pt. „Metodyczne aspekty wyznaczania kształtu cząstek frakcji piaszczystej osadów z wykorzystaniem mikroskopii optycznej” wykonanej przez mgr Agatę Sochan w Zakładzie Biogeochemii Środowiska Przyrodniczego Instytutu Agrofizyki im. Bohdana Dobrzańskiego PAN w Lublinie pod kierunkiem dr hab. Andrzeja Bieganowskiego, prof. nadzw. IA PAN

Uwagi wstępne

Praca doktorska Pani mgr Agaty Sochan, wykonana pod kierunkiem dr hab. Andrzeja Bieganowskiego, prof. IA PAN w Zakładzie Biogeochemii Środowiska Przyrodniczego Instytutu Agrofizyki PAN w Lublinie dotyczy bardzo ważnego z punktu widzenia wielu dziedzin nauki, w tym agrofizyki, zagadnienia określania cech teksturalnych osadów mineralnych. Cechy te są bardzo ważnym źródłem informacji o warunkach środowisk, w których były deponowane, warunkach fizyko-chemicznych w trakcie ich ewolucji, określaniu wieku osadów, odtworzeniu charakteru procesów postsedymentacyjnych, np. wietrzenia w profilach glebowych, etc. Z punktu widzenia agrofizyki, a szczególnie badań nad właściwościami wodnymi i cieplnymi gleb, badania kształtu i wielkości ziaren kwarcowych frakcji piaszczystej mają znaczenie wręcz fundamentalne, gdyż wpływają one w sposób istotny na charakter wielu procesów i wielkości istotnych parametrów glebowych. Pomimo istnienia wielu metod wyznaczania kształtu cząstek frakcji piaszczystej osadów, większość z nich obarczonych jest dużą dozą subiektywizmu. Dodatkowo, wyniki otrzymywane różnymi metodami są niekoherentne i dlatego często trudne do interpretacji. Dlatego próba stworzenia metodyki obiektywnej i efektywnej wyznaczania kształtu cząstek frakcji piaszczystej osadów z wykorzystaniem mikroskopii optycznej i zaawansowanych metod statystycznych, zaprezentowana w pracy doktorskiej Pani mgr Agaty Sochan, jest bardzo ważnym chociaż trudnym zadaniem badawczym.

Szczegółowa analiza pracy

Przedstawiona do recenzji praca doktorska liczy 133 strony. Zawiera 19 (w części bardzo rozbudowanych) tabel, 21 (czarno-białych jak i kolorowych) rysunków oraz 185 pozycji literaturowych, głównie obcojęzycznych oraz dane z 2 stron internetowych. Tytuł pracy sformułowany jest poprawnie i w pełni uwzględnia zawarte w niej treści. Praca składa się z wykazu najważniejszych oznaczeń oraz siedmiu rozdziałów: wstępu, przeglądu piśmiennictwa, celu, materiału i metody, wyników i dyskusji, wniosków oraz literatury.

We wstępie Autorka przedstawia przesłanki podjęcia tematu wyznaczania kształtu cząstek osadów mineralnych, tzn. istotność tej tematyki w wielu dziedzinach nauki takich jak geologia, geomorfologia, sedymentologia czy też gleboznawstwo oraz brak w chwili obecnej w pełni obiektywnych i automatycznych metod pomiarowych tej wielkości. Wprowadza również do metodyki pomiaru i interpretacji dwuwymiarowego obrazu mikroskopowego w celu opisu kształtu trójwymiarowych cząstek. Już w tej pierwszej części pracy widać z jak skomplikowaną tematyką doktorantka ma do

czynienia i jak naglące są potrzeby rozwiązania metodycznego problemu obiektywnego i zautomatyzowanego określania kształtu cząstek materialu glebowego.

Rozdział przeglądu piśmiennictwa, chociaż nie jest zbyt rozbudowany dobrze wprowadza w metodologię badań kształtu cząstek. Rozdział ten Autorka podzieliła na cztery podrozdziały, w których kolejno zajmuje się genezą i podstawowymi definicjami dotyczącymi kształtu cząstek, parametrami kształtu i wielkości cząstek, metodami wyznaczania kształtu cząstek frakcji piaszczystej osadów oraz mikroskopią optyczną jako metodą badania kształtu cząstek. W mojej ocenie, fakty przedstawione w tym rozdziale świadczą o bardzo dobrym rozeznaniu w klasycznej i najnowszej literaturze dotyczącej tematyki badań i o tym, że Doktorantka podejmując temat była dobrze przygotowana do części doświadczalnej.

Rozdział ten przygotowany został w sposób bardzo usystematyzowany. Na uwagę zasługuje fakt, że Autorka uwzględniła bardzo szeroką gamę parametrów wielkości i kształtu cząstek na podstawie definicji zawartych w wielu (najczęściej obcojęzycznych) źródłach. Wymagało to skomplikowanej pracy tłumaczenia ze źródeł i ujednoczenia nazewnictwa wielu parametrów, często odmiennie definiowanych w literaturze. Wszystkie definicje poparte są wzorami matematycznymi, a usystematyzowana symbolika poszczególnych wielkości jest bardzo przejrzysta. Dodatkowo, Autorka dołączyła na wstępie pracy wykaz najważniejszych oznaczeń, co w znacznym stopniu ułatwia posługiwanie się stosowanymi symbolami. Szkoda tylko, że w wykazie tym zabrakło jednostek stosowanych wielkości fizycznych. Powinno to być uzupełnione w przypadku publikacji pracy. W rozdziale tym Autorka nie ustrzegła się drobnych nieścisłości i niedopowiedzeń. Definiując grupy wzorcowe zaokrąglenia według Powersa (str. 35) powieliła te same wartości parametru zaokrąglenia dla różnych grup (według opisu wartość 0.17 dotyczy zarówno cząstek bardzo kanciastych jak i kanciastych, itd.). Autorka powinna rozwinąć definicję stosowanego wymiaru fraktalnego (opisanego wzorem 27), nawiązując do klasycznej teorii fraktali i różnych wymiarów fraktalnych (np. związek z wymiarem fraktalnym Hausdorffa-Besicovitcha). Również wydaje się, że rys. 8, który ma obrazować trzy komponenty kształtu, tj. formę, zaokrąglenie i strukturę powierzchni, czyni to bez komentarza w sposób bardzo nieprecyzyjny.

Rozdział drugi kończy się bardzo ważną konstatacją, iż większość stosowanych dotychczas metod określania kształtu cząstek osadów obarczonych jest dużą dozą subiektywności, co potwierdza konieczność poszukiwania nowych bardziej obiektywnych metod klasyfikacji kształtu badanych cząstek, które pozwalałyby bezpośrednio lub pośrednio określać ich genezę. Jest to bardzo istotne wprowadzenie do celu badań.

Cele badań zostały sprecyzowane jasno i wyraźnie. Podzielone zostały na jeden cel główny, którym jest opracowanie metody pozwalającej w sposób obiektywny zaklasyfikować cząstki do poszczególnych klas zaokrąglenia wg skali Krumbeina na podstawie analizy obrazów dwuwymiarowych rzutów obrazów mikroskopowych i pięć celów cząstkowych, dotyczących różnych aspektów metodycznych. Postawione w ten sposób cele badań świadczą o ambitnym podejściu Doktorantki do rozpatrywanego problemu. Jedyne zastrzeżenie dotyczy sformułowania drugiego celu cząstkowego, którego sens można zrozumieć dopiero czytając dalszą część pracy. Wydaje się wskazanym napisać w treści tego celu zamiast „wybrane parametry”, „wybrany pojedynczy parametr”.

Bardzo ważną częścią pracy jest rozdział Materiał i metody. Do realizacji celów badawczych Doktorantka wybrała obszerny i zróżnicowany materiał badawczy obejmujący cząstki osadów środowiska eolicznego, wybrzeży morskich, fluwioglacjalnego, fluwioperyglacjalnego, oraz fluwialnego obejmujący 42 stanowiska na terenie Polski. Dodatkowo, w celu opracowania procedury wyznaczania kształtu cząstek, wytypowano po 100 wzorcowych cząstek należących do każdej z dziewięciu klas wg skali Krumbeina. Warto w tym miejscu podkreślić współpracę doktorantki z trzema instytucjami, tzn. UMCS w Lublinie, Uniwersytetami Przyrodniczymi we Wrocławiu i Poznaniu. Autorka zastosowała poprawną metodycznie procedurę oczyszczania ziaren kwarcu z węglanów i użyła

do analizy reprezentatywny materiał pozwalający uzyskać po około 1000 obrazów dla cząstek każdej podfrakcji. Doktorantka, zdając sobie sprawę z nowatorskiego charakteru badań, z wyjątkową starannością próbowała analizować wszystkie potencjalne źródła błędu metody. Dokonała badań związanych z oceną usuwania domieszek węglanowych oraz innych substancji, dla których węglany stanowiły lepszycze, pokazując w tabeli 6 (rozdział Wyniki i dyskusja), że usunięcie tych związków, chociaż dyskusyjne z punktu widzenia metodycznego, w niewielkim stopniu wpływa na uzyskane wartości parametrów kształtu. Wynik ten może mieć znaczenie w kontekście przyszłego zastosowania proponowanej metody. Doktorantka dokonała również analizy powtarzalności i odtwarzalności pomiaru analizy kształtu potwierdzając w tabelach 8 i 9 (w rozdziale Wyniki i dyskusja), że precyzja pomiarów kształtu cząstek z wykorzystaniem analizy obrazu jest wystarczająca dla celów badań. Jedyna uwaga do tej części dotyczy nieuzasadnionego moim zdaniem umieszczenia na str. 50-52 informacji o powtarzalności i odtwarzalności wyników w podrozdziale 4.2 (Metoda rejestracji obrazów). Informacje te powinny znajdować się chyba na str. 48.

W rozdziale Materiał i metody autorka dokładnie opisuje metody rejestracji i przetwarzania obrazów mikroskopowych oraz metody klasyfikatorów bayesowskich (wraz z ich analizą czułości) i wykorzystujących równania regresji. W tym miejscu warto zwrócić uwagę na fakt, że Autorka w badaniach posługuje się dwoma rodzajami mikroskopów MSZ 200T oraz Morphologi G3. O ile parametry tego drugiego mikroskopu opisane są w miarę dokładnie o tyle o drugim oprócz nazwy niczego w pracy nie można się dowiedzieć. Nasuwa się pytanie, czy ów mikroskop stereoskopowy nie mógł być wykorzystany do analizy zaokrąglenia metodą Powersa, co stanowiłoby cenną drugą metodę referencyjną. Autorka do klasyfikacji kształtu cząstek wybrała klasyfikator bayesowski słuszenie uzasadniając to uwzględnieniem przez ten klasyfikator niepewności zarówno stochastycznej jak i epistemicznej. Biorąc pod uwagę ogrom pracy wykonanej przez doktorantkę trudno wymagać uwzględnienia innych metod klasyfikacyjnych, chociaż w tym przypadku porównanie metody bayesowskiej np. z klasyfikatorem opartym na drzewach genetycznych lub regresji logistycznej byłoby bardzo interesujące. Autorka stworzyła uproszczoną procedurę klasyfikacyjną wykorzystującą równania regresji. Czy nie bardziej efektywnym byłoby zastosowanie w tym celu metody regresji wielokrotnej uwzględnionej w wielu pakietach statystycznych?

W podsumowaniu rozdziału Materiał i metody warto podkreślić, że tak szerokie potraktowanie badań wymagało niezwykle precyzyjnej organizacji i przyswojenia sobie przez autorkę zaawansowanych metod analizy statystycznej.

Rozdział Wyniki i Dyskusja stanowi najdłuższą część pracy. Na 53 stronach bogato opatrzonej rysunkami i tabelami Autorka zajmuje się analizą kształtu cząstek wzorcowych i analizą kształtu cząstek osadów różnej genezy. Podjęła udaną próbę doboru parametrów, które najbardziej różnicują kształty cząstek wzorcowych w kolejnych klasach zaokrąglenia wg skali Krumbeina. Dokonała analizy statystycznej istotności różnic między średnimi wartościami parametrów kształtu dla grup cząstek należących do poszczególnych klas zaokrąglenia, z czego wynika ważny wniosek, że żaden z analizowanych parametrów kształtu nie daje możliwości bezpośredniego zaklasyfikowania cząstki do określonej klasy według podziału Krumbeina. Wynikiem tych analiz było wyselekcjonowanie sześciu parametrów (3 kolistości i 3 struktury powierzchni) zastosowanych w dalszych analizach.

Ważną częścią rozdziału Wyniki i Dyskusja jest ocena możliwości wykorzystania wartości parametrów kształtu, jako metody wspomagającej identyfikację genezy osadów. Doktorantka w tej części musiała pokonać problem metodyczny związany z niedokładnością standardowej metody przesiewania na mokro, powodującej pojawianie się w obrazie cząstek o rozmiarach różnych od rozmiarów nominalnych. Autorka wnikliwie przeanalizowała przyczyny tego zjawiska i zastosowała w analizie obrazu filtry górno- i dolnoprzepustowe.

Bardzo ciekawą częścią pracy jest porównanie parametrów kształtu cząstek osadów różnej genezy. Autorka podjęła moim zdaniem udaną próbę powiązania uzyskanych wartości 6 parametrów kształtu

cząstek z genezą morfologiczną badanych osadów. Analiza ta poparta jest licznymi odnośnikami literaturowymi, co czyni ją jeszcze bardziej przekonującą, a jej podsumowaniem jest bardzo ciekawy rys. 17, który pozwala wnioskować o dynamice transportu frakcji piaszczystej osadów.

Bardzo obiecujące wyniki uzyskała Autorka stosując sieć bayesowską do klasyfikacji cząstek pod kątem przynależności do poszczególnych klas zaokrąglenia w skali Krumbeina. Trafność klasyfikacji dochodząca do 80% jest bardzo dobrym wynikiem. Autorka przeprowadziła również analizę czułości klasyfikatora, która wykazała, że dla wszystkich klas zaokrąglenia cząstek błędy klasyfikacji dotyczą tylko klas bezpośrednio sąsiadujących z klasą analizowaną. Przedstawiła wykres rozkładów prawdopodobieństwa wyznaczony przez klasyfikator bayesowski dla 10 cząstek wzorcowych oraz analizę wrażliwości i specyficzności klasyfikatora bayesowskiego. Jako weryfikację klasyfikatora Doktorantka porównała wyniki uzyskane klasyczną metodą Krumbeina z wynikami uzyskanymi za pomocą sieci bayesowskiej uzyskując bardzo wysoką zgodność.

W ostatniej części omówienia wyników Doktorantka zajmuje się wykorzystaniem równań regresji jako metody klasyfikacji cząstek frakcji piaszczystej osadów. Opracowana metodyka, którą Autorka określa jako uzupełniającą i uproszczoną w stosunku do metody wykorzystującej sieć bayesowskie daje nadzwyczaj wysoki procent poprawnie sklasyfikowanych przypadków (87,5%), wyższy niż metoda o wiele bardziej wyrafinowana (sieci bayesowskie). Czy autorka potrafiła by wyjaśnić przyczynę takiego wyniku?

Uwagi szczególne do rozdziału Wyniki i dyskusja:

Ze względu na rozmiary Tabeli 4 oraz przedstawienia części danych w notacji wykładniczej utrudnione jest śledzenie trendu zmian poszczególnych parametrów wydłużenia, kolistości, struktury powierzchni i innych komponentów kształtu. Sugeruję aby w przyszłej publikacji dane podzielone na wyżej wymienione grupy przedstawić w postaci wykresów.

Monstrualne rozmiary tabeli 10 przedstawiającej wartości średnie i odchylenia standardowe wybranych parametrów kształtu badanych osadów czynią ją mało czytelną. Autorka powinna zastanowić się nad sposobem syntezy danych z tej tabeli (np. prezentację najistotniejszych jej części w postaci czytelnych wykresów).

Rys. 18 przedstawiający typologię klasyfikatora jest zbyt oczywisty i nie wnosi nic to treści akapitu, do którego się odnosi. Autorka powinna w tekście wyjaśnić, obraz jakiego programu komputerowego widać na tym rysunku i dlaczego wartość początkowa rozkładu prawdopodobieństwa ustalono jako 11.111%.

Na początku podrozdziału 5.2.5 Autorka powinna podać jaką liczbę próbek analizowano w klasyfikacji. Czy jest to liczba 900 cząstek, jak przedstawiono na str. 56?

Autorka na str. 60 przedstawia w jaki sposób tworzono zbiory do uczenia i walidacji modelu. Stosunek 90% do 10% jest w pełni uzasadniony i często stosowany w literaturze. Warto byłoby rozszerzyć liczbę podzbiorów do uczenia jak i walidacji do 10, jak to jest często czynione w przypadku metody korelacji krzyżowej, jednak zastosowana w pracy procedura tworzenia modelu jest do zaakceptowania. Warto jednak zauważyć, że dane do trzech zbiorów uczących jak i weryfikujących pochodziły z tego samego zbioru danych. Dlatego powszechnie przyjętą procedurą po utworzeniu modelu jest jego dodatkowa weryfikacja na zbiorze danych niezależnych od zbioru, który służył do tworzenia modelu. Tego elementu zabrakło niestety w pracy. Częściowo można takie postępowanie wytłumaczyć ograniczoną liczbą danych. Mam nadzieję, że w przyszłości autorka dokona takiej weryfikacji swojego modelu.

Nie jest jasne, czy wyniki w Tabeli 11 dotyczą analizy uczenia czy też walidacji klasyfikatora. A może są to wartości średnie? Wyniki dla tych dwóch etapów analizy powinny być rozdzielone.

Z Tabeli 12 można się tylko domyślać, że chodzi o wartości procentowe. Czy dokonano tutaj zaokrąglenia do części dziesiątych? Szkoda, że Autorka nie przedstawiła liczby cząstek poprawnie i błędnie sklasyfikowanych w każdej z klas. W przedstawionej macierzy konfuzji brakuje również kolumny i wiersza podsumowujących analizę.

Trafność klasyfikacji 83.3% przedstawiona na str. 108 i we wnioskach jest bardzo ważną wielkością. Autorka powinna dokładniej wyjaśnić w jaki sposób na podstawie Rys. 20 oszacowała tę wartość.

Wyraz „ona” w drugim zdaniu na str. 108 powinien być usunięty.

Na str. 108 autorka odwołuje się do tabeli 20, której nie ma w pracy (ostatnia zamieszczona tabela ma nr 19).

Omówienie Wniosków

Wnioski są krótkie, logiczne i rzeczowe, w pełni wynikają z przeprowadzonych badań. Biorąc pod uwagę kolejność celów pracy, wydaje się, że przedstawiona kolejność wniosków jest nieprawidłowa. W tym kontekście wnioski 4 i 5 powinny być podane jako pierwsze. We wniosku 1 zamiast „wartości parametrów kształtu takich jak: ” powinno być „wartości następujących parametrów kształtu:”.

Podsumowanie

Konstrukcja pracy jest typowa dla prac doktorskich. Uwzględnia wszystkie zasadnicze części takie jak: wstęp, cel pracy, przegląd literatury, material i metody, wyniki badań, dyskusja, wnioski, spis literatury, i streszczenie.

Praca napisana jest językiem zrozumiałym, poprawnym stylistycznie i z precyzyjnie użytym specjalistycznym słownictwem. Szata graficzna pracy jest niezwykle staranna. Na podkreślenie zasługuje wysoka estetyka wszystkich elementów pracy.

Reasumując stwierdzam, że przedstawiona do recenzji praca jest bardzo interesująca. W porównaniu z dostępną literaturą światową, stanowi nowatorskie opracowanie metodyczne wynikające z logicznych przesłanek i udokumentowane precyzyjnie dobranymi metodami pomiarowymi i analitycznymi. W tym kontekście można stwierdzić iż, pomimo wcześniejszych prób stosowania metod optycznych w badaniach kształtu cząstek osadów, niniejsza praca ma charakter pionierski i zasługuje na publikację w wydawnictwie zasięgu międzynarodowym.

Wniosek końcowy

Zawarte w ocenie uwagi merytoryczne jak i tekstowe nie obniżają wartości pracy doktorskiej mgr Agaty Sochan, ponieważ łatwo mogą być uwzględnione i skorygowane w ostatecznej wersji do druku, a niektóre są celowo dyskusyjne.

Praca stanowi oryginalne i unikalne w skali światowej badania w zakresie metodyki wyznaczania kształtu cząstek frakcji piaszczystej osadów.

Tak kompleksowe opracowanie jest niespotykane w literaturze, a opracowana metodyka ma niezwykle obiecujące perspektywy zastosowania w wielu gałęziach badań osadów. Warto w tym miejscu zwrócić uwagę na to, iż autorka analizując tak bogaty materiał doświadczalny, wykonała ciężką pracę doświadczalną i analityczną. Tak szeroki materiał porównawczy, zarówno co do reprezentatywności próbek osadów jak i wielu metod analizy obrazów mikroskopowych upewnia o wiarygodności otrzymanych wyników i sformulowanych w pracy wnioskach.

W pracy Doktorantka wykazała wysoką ogólną wiedzę teoretyczną obejmującą zaawansowane metody analizy i przetwarzania obrazów mikroskopowych, analizę statystyczną i metody klasyfikacyjne oparte o sieci bayesowskie czy też analizę fraktalną. Autorka z wyjątkową wnikliwością zdołała zgromadzić i usystematyzować najnowszą literaturę polską i zagraniczną z badanej dziedziny. Odnośniki literaturowe

wykorzystane zostały w pracy nie tylko w rozdziale przeglądu literatury ale również w szerokiej i krytycznej dyskusji własnych wyników.

Należy podkreślić stronę użyteczną pracy, polegającą na przeprowadzeniu analizy i skatalogowaniu kształtów cząstek frakcji piaszczystej osadów różnej genezy. Informacje te są szczególnie cenne dla zrozumienia różnic geomorfologicznych i kształtowania się osadów o różnej genezie.

Praca spełnia wymagania dla prac doktorskich ustawy o tytułach i stopniach naukowych (Dz.U. 2003, Nr 65, poz. 595 z późn. zm.), dlatego stawiam wniosek o dopuszczenie mgr Agaty Sochan do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Z uwagi na poziom prezentowanych w pracy badań, a także rangę i nowatorskość przedstawionych wyników zwracam się również z wnioskiem do Dyrektora Instytutu Agrofizyki PAN o wyróżnienie rozprawy doktorskiej Pani mgr Agaty Sochan.

Dr hab. Piotr Baranowski, prof. nadzw. IA PAN

Piotr Baranowski