



dr hab. inż. Katarzyna Bizon, prof. PK
Katedra Inżynierii Chemicznej i Procesowej
katarzyna.bizon@pk.edu.pl, tel.: 12 628 2057

Kraków, 25 listopad 2024 r.

Recenzja rozprawy doktorskiej
Pana mgr inż. Dawida Szpadzika
pt. „Badanie możliwości wykorzystania narzędzi statystycznych w analizach jakościowych
w obszarach produkcyjnych”
wykonanej pod kierunkiem Pani prof. dr hab. inż. Wioletty Raróg-Pileckiej

Podstawa opracowania recenzji

Podstawę formalną sporządzenia recenzji rozprawy doktorskiej autorstwa Pana mgr inż. Dawida Szpadzika stanowi pismo Przewodniczącego Rady Naukowej Dyscypliny *Inżynieria Chemiczna* Politechniki Warszawskiej Pana prof. dr hab. inż. Tomasza Sosnowskiego z dnia 23 września 2024 r. (nadane dnia 2.10.2024 r.) oraz uchwała Rady Naukowej Dyscypliny *Inżynieria Chemiczna* RNDICh.9.28.2024 z dnia 17 września 2024 r.

Przedstawiona do recenzji rozprawa doktorska została zrealizowana na Wydziale Chemicznym Politechniki Warszawskiej pod kierunkiem Pani prof. dr hab. inż. Wioletty Raróg-Pileckiej. Nadanie stopnia doktora przewiduje się w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie *Inżynieria Chemiczna*.

Cel i zakres oraz ogólna ocena merytoryczna rozprawy

Duże nakłady finansowe oraz potrzeba zatrudnienia wysoce wykwalifikowanego personelu do realizacji (w sposób tradycyjny) procesów kontroli jakości w przemyśle chemicznym, jak również powszechne dążenie do automatyzacji i cyfryzacji przemysłu sprawiają, iż zaawansowane narzędzia statystyczne i uczenie maszynowe znajdują obecnie coraz szersze zastosowanie w kontroli jakości. Wzrost zainteresowania uczeniem maszynowym w procesach kontroli jakości wynika również z faktu, iż algorytmy numeryczne zazwyczaj charakteryzują się większą powtarzalnością i precyzują wyników, co więcej potrafią dokonywać oceny znacznie szybciej niż ludzie. Warto dodać, że w procesach produkcji



seryjnej w przemyśle chemicznej, jak również w wielu innych gałęziach przemysłu, sama kontrola jakości ma na celu nie tylko minimalizację ryzyka i uzyskanie produktu o ściśle zdefiniowanych właściwościach, ale jest również bezpośrednio związana z koncepcją *zero-waste* (zero-odpadów). Umożliwia ona bowiem zoptymalizowanie gospodarowania odpadami, jak również niewykorzystanymi w procesie produkcyjnym półproduktami. Zastosowania uczenia maszynowego w systemach kontroli jakości pozwala ponadto na dodatkowe ograniczenie odpadów i niejednokrotnie eliminuje konieczność używania szkodliwych substancji chemicznych w metodach analitycznych stosowanych w procesach kontrolnych. To w efekcie przekłada się również na ograniczenie ekspozycji specjalistów na substancje szkodliwe.

Mimo wielu zalet zaawansowanych narzędzi statystycznych i uczenia maszynowego w zastosowaniu do kontroli jakości, jedną z przeszkód, która ciągle utrudnia powszechną implementację tego typu rozwiązań, jest konieczność posiadania odpowiednich zasobów sprzętowych i specjalistycznego oprogramowania. Sporym ograniczeniem może być również konieczność dostępu do dużego zasobu danych historycznych dotyczących analizowanego procesu, które są niezbędne do opracowanie odpowiedniego algorytmu klasyfikującego kontrolowane próbki.

W związku z powyższym, Pan mgr inż. Dawid Szpadzik jako główny cel rozprawy doktorskiej postawił opracowanie narzędzia opartego na podstawowym oprogramowaniu biurowym służącego do oceny jakości próbek półproduktu analizowanych w ramach kontroli jakościowej przeprowadzanej w procesie wytwarzania płynnych artykułów chemii gospodarczej w zakładzie Reckitt Benckiser Production. Środowiskiem programistycznym wybranym do zrealizowania celu pracy i udowodnienia postawionej tezy była aplikacja Access wchodząca w skład pakietu Microsoft Office, zaś zaimplementowany algorytm klasyfikacyjny oparty został na naiwnym klasyfikatorze Bayesa. Aby osiągnąć główny cel pracy Doktorant zrealizował szereg prac, które podzielił na trzy etapy, a mianowicie: (i) opracowanie koncepcji algorytmu klasyfikacji binarnej; (ii) stworzenie algorytmu wraz z interfejsem użytkownika oraz (iii) zdefiniowanie optymalnych parametrów algorytmu i określenie czy spełnione zostały założone kryteria sukcesu.

Przedstawiona do recenzji i wydana drukiem rozprawa liczy 145 stron i posiada standardowy układ. Na zasadniczą część pracy składa się: syntetyczny wstęp (rozdział 3) do zagadnienia będącego przedmiotem badań Doktoranta, który zakończony jest definicją celu i sformułowaniem tezy pracy; przegląd literatury (rozdział 4); część eksperymentalna zawierająca opis opracowanej aplikacji o nazwie „Statystyczny Chemik” (rozdział 5) i opis wyników badań, czyli testowania aplikacji (rozdział 6), które zamyka dyskusja wyników (rozdział 7) oraz finalne wnioski (rozdział 8). Uzupełnienie rozprawy stanowią polsko- i angielskojęzyczne streszczenia, opis układu pracy oraz wykaz stosowanych oznaczeń; bibliografia, na którą składa się aż 218 pozycji literaturowych oraz wykaz rysunków, tabel i zestawienie testów omawianych w rozprawie.



W obszernym rozdziale poświęconym przeglądowi literatury, Doktorant zdefiniował koncepcję uczenia maszynowego, nakreślił jego rys historyczny oraz przedstawił zastosowania w inżynierii chemicznej. Znaczną część tego rozdziału zajmuje opis podstaw teoretycznych metod klasyfikacji binarnej oraz oceny dokładności działania klasyfikatorów binarnych. Część literaturową zamyka podrozdział koncentrujący się na zagadnieniu zarządzania jakością w zakładach produkcyjnych. W mojej opinii słabym punktem części dotyczącej klasyfikacji binarnej jest zbyt teoretyczny charakter oraz brak odniesienia do aktualnych i praktycznych zastosowań omawianych algorytmów w procesach kontroli jakości. W podsumowaniu części literaturowej (podrozdział 4.7) Doktorant precyzuje nakreślony wcześniej w sposób bardzo ogólny (podrozdział 3.1) problem badawczy i cel pracy.

Zasadnicza eksperymentalna część rozprawy (rozdziały 5-7) składa się z bardzo szczegółowego omówienia koncepcji algorytmu i opracowanej aplikacji komputerowej, jak również opisu jej podstawowych funkcji oraz ilustracji i dyskusji wyników badań. Punktem wyjścia do opracowania narzędzia była analiza procesu produkcji płynnych środków czystości realizowanego w zakładzie Reckitt Benckiser. Biorąc pod uwagę dostępne dane historyczne oraz minimalizację ryzyka dla zakładu, jako przedmiot badań został wybrany punkt kontroli półproduktu zawracanego do produkcji. W oparciu o dostępny rodzaj danych/parametrów i ich zakresy została opracowana aplikacja z przejrzystym interfejsem graficznym, której funkcjonalność została szczegółowo opisana w pracy. Opracowane narzędzie statystyczne zostało następnie szczegółowo przetestowane, tj. przetestowany został wpływ parametrów algorytmu (zarówno tych niezwiązanych jak i związanych z właściwościami badanej próbki zawracanego półproduktu) na poprawność jego działania, którą oceniano za pomocą takich wskaźników jak m.in. współczynnik korelacji Matthews'a (*ang. Matthews correlation coefficient* – MCC), dokładność (*ang. accuracy* – ACC), liczba klasyfikacji prawdziwie pozytywnych (*ang. true positive* – TP) czy liczba klasyfikacji fałszywie negatywnych (*ang. false positive* – FP). Uzupelnienie testów, w których zmieniany były tylko jeden parametr stanowi jednoczesna modyfikacja wszystkich parametrów. Takie podejście umożliwiło znaczną redukcję uzyskiwanych wartości FPR, czyli częstości fałszywych alarmów (*ang. false positive rate*). W ostatnim etapie badań przeanalizowano również możliwość wyeliminowania procedur laboratoryjnych wskazanych jako kosztochłonne i energochłonne, tj. oznaczanie stężeń metodami miareczkowania czy też wyznaczanie suchej pozostałości z procesu kontroli jakości.

Zakres zrealizowanych przez Doktoranta prac o charakterze koncepcyjnym, deweloperskim, obliczeniowym i analitycznym jest obszerny. Głównym wynikiem przeprowadzonych prac jest narzędzie statystyczne, dla którego zgodność z decyzją ludzką wynosi do 99,85%, przy najmniejszej uzyskanej dokładności dla wszystkich przeprowadzonych testów wynoszącej aż 97,85%. Wartość ta przekracza nałożony przez zakład produkcyjny minimalny poziom 95%. Bardzo interesującym wnioskiem płynącym z ostatniej części badań jest fakt, że pominięcie w algorytmie klasyfikacji wyników z krytycznych analiz fizykochemicznych nie pogorszyło jakości klasyfikacji. To w efekcie umożliwia ograniczenie zużycia odczynników i zwiększa bezpieczeństwo personelu laboratoryjnego.



Stwierdzam zatem, że postawiony w rozprawie cel został w pełni osiągnięty i przedstawioną do recenzji rozprawę oceniam pozytywnie. Głównym osiągnięciem Pana mgr inż. Dawida Szpadzika, jak również naukowym elementem nowości rozprawy jest opracowanie przy użyciu standardowego oprogramowania biurowego narzędzia pracującego na komputerze osobistym opartego na teorii Bayesa i umożliwiającego ocenę jakości próbek półproduktu w kontroli jakościowej prowadzonej w przemyśle chemicznym. Bez wątplenia bardzo wartościowym aspektem zrealizowanych prac jest ich użytkowy charakter oraz zastosowanie aktualnych rozwiązań wpisujących się w koncepcję *Przemysłu 4.0*. Poza automatyzacją procesu kontroli jakości, Doktorant wykazał, że narzędzie to może również przyczynić się do zmniejszenia ekspozycji personelu laboratoryjnego na szkodliwe rakotwórcze substancje oraz do ograniczenia odpadów i zużycia odczynników chemicznych. A zatem badania te wpisują się nie tylko we współczesne trendy badawcze dyscypliny *Inżynieria Chemiczna*, ale są odpowiedzią na Cele Zrównoważonego Rozwoju (*ang. Sustainable Development Goals – SDGs*). Przedstawiony w rozprawie materiał potwierdza również kompetencje badawcze Doktoranta zarówno w zakresie prac o charakterze teoretycznym (prace modelowe) i jak i rozwojowym (ściśła współpraca z przemysłem).

Uwagi merytoryczne i dyskusyjne

Niezależnie od ogólnie pozytywnej oceny rozprawy, szereg aspektów wymaga wyjaśnienia/doprecyzowania. Najważniejsze uwagi o charakterze merytorycznym i dyskusyjnym, do których Doktorant winien się odnieść w trakcie publicznej rozprawy doktorskiej, są następujące:

1. Przedstawiony w podrozdziale 4.3 opis metod klasyfikacji binarnej i zastosowana w nim nomenklatura jest bardzo nieprecyzyjna. W sekcji poświęconej regresji logistycznej (str. 30, równ. (1)) dla zmiennej x Doktorant stosuje zamiennie termin „*zmienna niezależna*” i „*parametr*”. Podobna nieścisłość pojawia się również w opisie algorytmu typu k -najbliższych sąsiadów (str. 31). W opisie równania (4) mowa jest o n zmiennych niezależnych, nie jest jednak doprecyzowane, że $x = [x_{1i}, x_{2i}, \dots, x_{ni}]_i$, gdzie $i = A, B_z$. Ponadto, w celu zapewnienia precyzyjności zapisu należałoby w tym miejscu zastosować pojęcie zmiennej wektorowej \mathbf{x} w miejsce zmiennej x . Dalej, w opisie zamieszczonym pod Rys. 4.3 bardziej poprawne byłoby stwierdzenie, że „*Obserwacje przedstawione na Rysunku 4.3 posiadają dwie współrzędne*”. To samo dotyczy komentarza do Rys. 4.4 na str. 32 o brzmieniu „*Każdy punkt posiada dwie zmienne niezależne*”.
2. Na str. 84 w opisie wyników uzyskanych dla punktu odniesienia oznaczonego identyfikatorem T221 Autor wnioskuje, że „*Liczba próbek zaklasyfikowanych błędnie do zawrócenia ($FP = 26$) wskazuje na dużą asymetrię pomiędzy liczebnością tych klas*”. Czy dla analizowanego tutaj przypadku jest możliwe wskazanie dokładnej liczności poszczególnych klas?
3. Autor w treści rozprawy wielokrotnie używa terminu „*optymalizacja*”. Np. na str. 86 zamieszczone jest sformułowanie: „*Już przy wartości 22 przekroczona została granica (...), która pozwalała przerwać optymalizację*”. Brak jest jednak w rozprawie formalnej definicji problemu



optymalizacyjnego. Proszę o jego doprecyzowanie oraz wyjaśnienia na czym polegało wspomniane „przerwanie optymalizacji” oraz czy zapewniało one osiągnięcie optimum globalnego (Tab. 6.13). Proszę również o wyjaśnienie, co jest rozumiane jako „maksimum lokalne” w stwierdzeniu na str. 106: „Wartości nastaw (...) pochodzą z wariantów, które osiągnęły maksimum lokalne”.

4. Analiza wpływu minimalnej liczby próbek z klasy na wyniki klasyfikacji budzi pewne wątpliwości. Zgodnie z Tabelą 5.4 na str. 81 wartość minimalnej liczby próbek z etykietami „zawróć” i „ściek” nie została zdefiniowana, tj. możliwe jest przyjęcie wartości zerowej. Jednocześnie na str. 87 Doktorant pisze, iż „Podczas pracy algorytmu dla pobranych pozycji z bazy produkcyjnej, istnieje niskie prawdopodobieństwo, że choć jedna z nich będzie miała przypisaną klasę negatywną (Ściek)”. Proszę o doprecyzowanie, czy oznacza to, iż dane historyczne zawierają niewystarczającą ilość informacji nt. próbek, które nie przeszły pomyślnie kontroli jakości, w efekcie dla niektórych przypadków takie dane nie są dostępne (tj. wszystkie próbki danego półproduktu przeszły pozytywnie kontrolę jakości wykonaną przez człowieka). Czy w takiej sytuacji algorytm będzie w ogóle w stanie zidentyfikować próbki prawdziwie negatywne?
5. Analiza wyników przedstawionych w podrozdziałach 6.2-6.3 wskazuje na znacznie gorsze wyniki uzyskane dla wskaźnika FPR niż dla TPR. Z czego wynikają stosunkowo duże wartości współczynnika ocen fałszywie pozytywnych oraz czy i jak można je wyeliminować w przypadku zmiany tylko jednego parametru?

Pozostałe uwagi

Pod względem językowym, redakcyjnym i graficznym rozprawa została przygotowana starannie i zasadniczo nie ma w niej istotnych błędów. Niemniej poniżej pozwolę sobie przytoczyć niektóre nieścisłości i uchybienia natury redakcyjnej:

1. Na str. 29 w podrozdziale 4.3 pojawia się niezbyt precyzyjne stwierdzenie, iż „uczenie maszynowe to przeliczenia matematyczne”, które w mojej opinii nadmiernie upraszcza koncepcję i złożoność uczenia maszynowego.
2. Stwierdzenie na str. 35 o brzemieniu: „...możliwe jest przyjęcie, że prawdopodobieństwo całego wektora X ” stanowi skrót językowy i jest również nieprecyzyjne.
3. W podrozdziale 4.4 Doktorant niepotrzebnie wprowadził osobne podrozdziały dla poszczególnych pojęć, część z nich ma długość kilku linijek.
4. W pracy występują błędy literowe, leksykalne oraz gramatyczne, np. str. 28 „wykfalifikownych”; str. 35 „Z wykorzystanie danych”; str. 36 „w świecie naturalnym”; str. 39 „prawdopodobieństwo warunkowego całego wektora”; str. 59 „wodę i inne”; str. 59 „wyposażony mieszađło umieszczone” i „pompa pobierała płynu”; str. 62 „opakowań konsumencki”; str. 68 „Zaprogramowany go”; str. 75 błąd w graficznym interfejsie na Rys. 5.8 „Makasymalna”; str. 77 „należ”; str. 82 „poziomów dyskretny”; str. 107 „Wartości aktywnych parametrów wskazano na te”.



Wymienione powyżej niewielkie uchybienia i nieścisłości nie rzutują na wartość merytoryczną rozprawy i zostały wskazane z obowiązku recenzenta. Jednocześnie proszę, aby Doktorant nie odnosił się do nich podczas publicznej obrony rozprawy.

Wniosek końcowy

Reasumując stwierdzam, iż przedłożona do recenzji rozprawa doktorska Pana mgra inż. Dawida Szpadzika pt. „*Badanie możliwości wykorzystania narzędzi statystycznych w analizach jakościowych w obszarach produkcyjnych*” stanowi oryginalne rozwiązanie problemu naukowego wpisującego się w zakres dyscypliny *Inżynieria Chemiczna*. Materiał przedstawiony w rozprawie potwierdza także, że Doktorant nabył zarówno umiejętności badawcze jak i wiedzę teoretyczną w zakresie tej dyscypliny.

W związku z powyższym stwierdzam, że rozprawa Pana mgra inż. Dawida Szpadzika spełnia wymogi formalne stawiane rozprawom doktorskim określone w art. 187 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* (Dz. U. 2018 poz. 1668 z późn. zm.) i wnoszę do Rady Dyscypliny Naukowej *Inżynieria Chemiczna* Politechniki Warszawskiej o dopuszczenie Doktoranta do dalszych etapów przewodu doktorskiego.

Katarzyna Jola