

Bírálat

Palotás Árpád Bence „Karbon alapú nanostruktúrák morfológiai jellemzése képelemzés segítségével” című akadémiai doktori értekezéséről

Palotás Árpád Bence doktori értekezésében a karbon alapú nanostruktúrák (elsődlegesen karbon-bázisú koromrészecskék) morfológiai jellemzésével foglalkozik, különös tekintettel az elektronmikroszkópos felvételek digitális képelemzési technikák alkalmazásával történő vizsgálatára.

A témaválasztás napjainkban több szempontból is aktuálisnak tekinthető. A tüzeléstechnikai folyamatok energetikai illetve költsége szerinti optimalizálásához közismerten fontos gazdasági érdekek fűződnek. Mindazonáltal a témaválasztás kapcsán előtérbe kerül a környezetvédelemmel szemben támasztott igények és elvárások fokozott érvényesítése, nevezetesen azok törekvések, amelyek a környezetre és az egészségre egyaránt káros szennyezők kibocsátásának mérséklésére irányulnak.

A dolgozatban megfogalmazott célkitűzéseket tekintve elmondható, hogy az égési folyamatok során keletkező korom morfológiai jellemzése, a koromszerkezet kvantitatív kritériumon alapuló minősítése a megkülönböztetett jelentőségű aktuális problémák közé sorolható.

A 96 oldal terjedelmű, 131 tételes irodalomjegyzéket tartalmazó dolgozat 8 fejezetre tagozódik. Az első és második fejezet a bevezetést és célkitűzéseket foglalja magába, a 3. fejezet a kutatás előzményeit, a témakörben elért fontosabb eredményeket összegezi. A 4. fejezetben a digitális képfeldolgozásban a szűréshez, simításhoz, élkiemeléshez használatos fontosabb lokális operátorokat és algoritmusokat ismerteti a szerző, ezek többségét vizsgálatában is felhasználta. Az 5-7. fejezetek tartalmazzák a saját kutatások metodikáját, az elért eredményeket és ezek diszkusszióját. Az utolsó, azaz a 8. fejezet foglalja magában a téziseket reprezentáló következtetéseket.

Az értekezés stílusa, világos és közérthető, a dolgozat formailag is gondosan kivitelezett. A diagramok, illusztrációk grafikus megjelenítése elegáns. A dolgozat felépítése, tagolása logikus. Esztétikai szempontból is figyelemre méltó a zömmel színes mikroszkópos felvételeket reprezentáló gazdag ábraanyag.

Képelemzési szempontból a digitalizált elektronmikroszkópos felvételeken látható karbon-lemezek morfológiája erősen emlékeztet az ujjlenyomatokról készült non-figuratív képekre. Napjainkban az ujjlenyomatok felismerésére már rendelkezésre állnak professzionális szoftverek, ezekkel az egyes ujjlenyomatok

azonosítása nagy találati valószínűséggel megoldható. A karbon alapú nanostruktúrák morfológiai jellemzése azonban több vonatkozásban is bonyolultabb feladatnak tűnik.

- i) A korom részecskéket tartalmazó releváns minták előállítása önmagában véve is különösképpen nehéz feladat, amely speciális szakértelmet igényel.
- ii) A mikroszkópos felvételeken a karbonstruktúrák részben átfedésben (átlapolásban) vannak, ami meglehetősen zavaró tényező, ezen kívül a kép tartalmazhat olyan tartományokat is, melyek eleve nem értékelhetők, ezért ezeket előzetesen detektálni, illetve eliminálni kell. Külön gondot jelent, hogy a képelemzési vizsgálatokhoz olykor egyetlen elektronmikroszkópos kép áll rendelkezésre, tehát erősen korlátozott a minták száma.
- iii) Egy további probléma – és ezzel az ujjlenyomatok felismerésekor szerencsés módon nem kell számolni -, abból adódik, hogy a karbonlemezek morfológiai jellemzéséhez olyan strukturális paraméterek definiálása illetve meghatározása a kívánatos, amelyek lehetőség szerint fizikailag is értelmezhetők, azaz egyfajta szemléletes tartalommal bírnak. Ilyen fizikai tartalmú paraméter a rácssík-távolság, ennek becslése a dolgozatban központi szerepet játszik.

A megcélzott vizsgálatok kapcsán érdemes megemlíteni egy érdekes analógiát. A rácssík-távolság meghatározásához hasonló problémák merültek fel mintegy két évtizeddel ezelőtt, a perlites szerkezetű acélokban a lamella-távolság meghatározásával összefüggésben. Bár ez alapvetően egy sztereológiai feladat, mindazonáltal a képelemzési módszerek alkalmazása itt is meghatározó jelentőségű.

A dolgozat egészét, a következtetéseket illetve a téziseket érintő véleményemet és kritikai szándékú észrevételeimet az alábbiakban részletezem:

Az 5. fejezet a korom-morfológiai vizsgálatok problematikájával foglalkozik, kitérve ennek előzményeire, a korábban szerzett saját megfigyelésekre, tapasztalatokra, különös tekintettel a lamináris lángból vett korom mintákra. A hőmérséklet hatásának jelentőségét a koromképződés kapcsán több ízben is hangsúlyozza a szerző, de erre vonatkozóan konkrét adatokat nem közöl. Felvetődik a kérdés: milyen szerepet játszik a hőmérséklet a korom képződés folyamatában a három különböző méretű és fajtájú láng vizsgálatokor?

Meglepőnek tűnik, hogy a korom-mintákra meghatározott átlagos rácssík-távolságok között (lásd. 2. táblázat adatait) szignifikánsnak nevezhető különbség nem tapasztalható.

A 6. fejezet a módszer továbbfejlesztési lehetőségeit taglalja. A szerző egy új módszert ismertet, amely elsődlegesen amorf mikroszerkezetű, egymástól csak kismértékben különböző koromminták vizsgálatára, illetve jellemzésére hivatott. A bemutatott szekvenciális algoritmus 10 „műveleti lépést” tartalmaz, ezek között központi szerepet játszik a digitalizált kép bináris változatának előállítása. Többtónusú képből bináris kép származtatása szükségképpen információvesztéssel jár, ebben a műveletben a „küszöb-választás” (threshold selection) megbízhatósága a kritikus tényező. Kétségtelen előnyt jelent, hogy egy bináris kép egyszerűbb morfológiai szerkezeténél fogva vizuálisan is interpretálható, a képen különféle geometriai alakzatok detektálhatók. (Úgy vélem, hogy nem szerencsés a 6.1.1 alfejezet címében az algoritmus megnevezésében a „szkeletonizációs” jelző, ugyanis a hagyományos képelemzési terminológia szerint szkeletonizáción kimondottan vonalszerű alakzatok generálását szokás érteni.

A dolgozat 43 oldalán a 10. és 11. ábra diagramjai a maximális Feret-átmérő valamint a „körszerűség” néven ismert paraméterek eloszlását ábrázolják kétféle tüzelőanyag elégetése során származtatott mintákra vonatkozóan. Mindkét paramétert gyakran alkalmazzák mikroszkópos felvételek kvantitatív metallográfiai jellemzésekor. Ezek meghatározása illetve használata olyan esetekben szokásos, ha a képen található részecskék nem „vonszerűek”, hanem véges területtel rendelkező foltoszerű alakzatok. Visszatérve a 10. és 11. ábrákra, kérdésem: milyen következtetéseket lehet levonni a feltüntetett diagramokból?

A 12. ábra egy koromrészecske HRTEM felvételét mutatja, és erre vonatkozóan utalás van arra, hogy ennek digitalizált kép mátrixa 2048x2048 pixel méretű. Kérdésem ez esetben a következő: mekkora a szűrkeségi fokozatok (diszkrét tónusok) maximális száma a digitalizált képen? A 47. oldalon található 14. ábra információ-tartalmának értelmezése számomra problematikus. Mit is tekinthetünk az ábrán legalább 50%-os megbízhatóságú területeknek? A 15. ábra elegáns, kár, hogy a rácstávolságok eloszlására nézve számszerű információt nem tartalmaz.

A 7. fejezet a Gábor szűrők alkalmazásával foglalkozik. Ez a fejezet az értekezés kiemelten fontos része, és figyelemre méltó eredményeket tartalmaz. Az itt ismertetett módszer a HRTEM képek elemzése tekintetében egy eredendően új koncepcióra alapozott. Az eljárás egyik legfontosabb pozitívuma, hogy alkalmazásához nem szükséges a kép bináris változatának előállítása, amely számottevő információ veszteséggel járó művelet. Az 7.1. alfejezetben a szerző világosan ismerteti a módszer kifejlesztését motiváló célkitűzéseket, vázolja az algoritmus implementálásával járó előnyöket. Ennek taglalása

kapcsán némely számomra meglehetősen „misztikusnak tűnő” okfejtés található a dolgozatban.

A 7.2 alfejezetben (50. oldalon), a következők olvashatók: „..az itt bemutatandó új megközelítés a mikroszkópos felvételeket úgy értelmezi, mint a mintáknak a folytonos (legalábbis a kép szintjén) kivetülését az elektromágneses térbe és megkísérli a vetületekké alakult minták elemzését. Ez a kép-modell kvantumfizikai szempontból is jobban megfelel a valóságnak.” Kívánatos lenne a fentebbi megállapítás értelmezését jobban megvilágítani.

A módszer előnyei között említendő:

i) A képfeldolgozás során az eredeti digitalizált képet közvetlenül lehet elemezni, (többek között, amint arra már említés történt, szükségtelen a kép bináris változatának előállítás).

ii) A kifejlesztett algoritmussal egyetlen mikroszkópos képen három független szerkezeti paraméter határozható meg egyidejűleg, ezek közül a legfontosabb a rácssík-távolság, amely konkrét fizikai tartalommal rendelkezik.

A módszer alkalmazásának van néhány számítástechnikai jellegű hátránya. Az algoritmus teljes futásideje (a processzási idő) meglehetősen nagy, ami döntően annak tulajdonítható, hogy a vizsgálat során nagyszámú, tervszerű stratégiai sorrend szerint paraméterezett szűrőt (szűrőkészletet) kell használni ahhoz, hogy megbízható és reprodukálható eredményekhez lehessen jutni.

A szűrők paraméterezése négy független mennyiség célszerű megválasztásán alapul. A 61. oldalon e négy független paraméter: n_0 , n_λ , p_0 és p_λ . Ezek közül az utóbbi kettő értelmezése nem világos, van-e ezeknek valamilyen közérthető definíciója?

A 67-68. oldalakon található a becsült rác-síktávolság eloszlás meghatározásával kapcsolatos vizsgálati eredmények bemutatása, diszkussziója. A 3. táblázatban saját mérési eredményeit (átlagértékeket) ismerteti a szerző, ezeket két külföldi kutató eredményeivel hasonlítja össze. Az rácssík-távolságok átlagértékei között szignifikáns eltérés nem tapasztalható.

Például bifluorenyl esetében az átlagos rácssík-távolság átlagára saját méréssel 0,3355 nm, a két külföldi cikkben közöltek szerint pedig 0,3374 illetve 0,3430 nm adódott. Az eltérések nagyságát minősítő relatív hiba mértéke egyik esetben:

$$Hr(\%) = 100 * |0,3355 - 0,3374| / 0,3355 = 0,57\% \quad \text{míg a másik esetben}$$

$$Hr(\%) = 100 * |0,3355 - 0,3430| / 0,3355 = 2,24\%.$$

A 27. ábra diagramjai 5 különböző vegyületre vonatkozóan illusztrálják a rácssík-távolság eloszlására jellemző hisztogramokat. Ezeken ugyan megfigyelhető

kisebb csúcsok előfordulása, de véleményem szerint ez a szokásos mérési bizonytalanság, egyfajta zaj jelenlétével magyarázható, és e jelenségből nem lehet az eloszlások multimoduláris jellegére következtetni. A fenti megfontolásokról következően, nem tűnik bizonyítottnak azon állítás (lásd. 70. oldalon), hogy az előállított karbonszerkezet függ az alapanyag kémiai összetételétől.

Általános következtetés, hogy a Gábor szűrők alkalmazásával kapott eredmények (mind a mesterségesen generált képek mind az amorf korom vizsgálata tekintetében) hitelesebbnek ítéltetők, mint a „standard” módszerek alkalmazásával nyert korábbi eredmények. Ezt a megfigyelést látszik alátámasztani a 29. ábra diagram sorozata.

Tézisekről

A jelölt eredményeit 5 téziscsoport tartalmazza. Természetesen (némileg szubjektív módon) vitatható, hogy a tézisek között, jelentőségüket tekintve milyen hierarchia, fontossági sorrend határozható meg.

Az *1. téziscsoportot*, amely a szegmentáción alapuló – az amorfnak tekintett korom nanoszintű morfológiai elemzésére kidolgozott algoritmust taglalja –, új tudományos eredményként elfogadom.

A *2. téziscsoportban* a szerző a mikroszkópos képek morfológiai vizsgálatára hivatott, a Gábor-szűrők felhasználásán alapuló módszert, illetve algoritmust ismerteti. A téziscsoportot, amely újszerűségét és elméleti megalapozottságát tekintve egyaránt fontos felismeréseket tartalmaz, új tudományos eredményként ismerem el.

Új tudományos eredményként elfogadom a *3. téziscsoportban* foglaltakat. E téziscsoport megállapításai meggyőzően alátámasztják a Gábor-szűrőkre alapozott algoritmus gyakorlati célú felhasználhatóságát mind a mesterségesen generált mikroszkópos képek mind az amorf korom vizsgálata tekintetében.

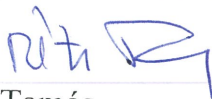
A *4. téziscsoportban* foglalt következtetés, amely szerint az előállított karbonszerkezet függ az alapanyag kémiai összetételétől, nem tűnik kellően bizonyítottnak. Ezért új tudományos eredményként nem ismerem el.

A HRTEM felvételek elemzésére alapozott *5. téziscsoport* a koromszerkezet módosulására (fejlődésére), nevezetesen a rácssíktávolság változására vonatkozó felismeréseket tartalmazza. Ezeket új tudományos eredményként ismerem el.

Összefoglalás:

Palotás Árpád Bence értekezésének középpontjában a karbon-bázisú nanostruktúrák (elsődlegesen karbon-bázisú koromrészecskék) morfológiai jellemzése áll, különös tekintettel az elektronmikroszkópos felvételek digitális képelemzési technikák alkalmazásán alapuló vizsgálatára. A témaválasztás aktualitását alátámasztja, hogy a végzett kutató munka eredményei egyaránt hozzájárulnak a tüzeléstechnikai folyamatok energetikai optimalizálásához és a környezetvédelmi elvárások fokozott érvényesítéséhez. Sikeres védés esetén javaslom az akadémiai doktori cím megítélését.

Budapest. 2017. 5. 20.



Réti Tamás
műszaki tud. doktora