

Román Tayler Ferré

DOCTOR HONORIS CAUSA UNIVERSITATIS SILESIENSIS



UNIWERSYTET ŚLĄSKI
WYDAWNICTWO

Román Tauler Ferré

Doctor honoris causa
Universitatis Silesiensis

Román Tauler Ferré

Doctor honoris causa
Universitatis Silesiensis

Q.F.F.



F.Q.S.

Summis Auspiciis Serenissimae Rei Publicae Polonorum
nos

Richardus Koziółek

artium humaniorum professor
Universitatis Silesiae
h.t. Rector Magnificus
et

Danuta Stróż

scientiarum technicarum profestrix
Facultatis Scientiarum Exactarum et Technicarum
h.t. Decana Spectabilis
et

Michael Daszykowski

scientiarum chemicarum professor
hac in occasione promotor rite constitutus
in
virum doctissimum ac clarissimum

Romanum Tauler Ferré

qui naturae explorator toto orbe terrarum recognitus
summa auctoritate chimicometricarum rationum ac viarum pollet
quibus chimicae structurae compositae cognoscit ac fingi possint
multasque chimicometricas rationes ac vias ad scientias chemicas, omicas, oecologicas
necnon ad examina toxicologica applicandas invenit
homo studiis indefessim deditus, frequenter praemiis ornatus
praeceptor optima indole praeditus, periodicorum scientificorum maximi ponderis editor ac moderator est

e Facultatis Scientiarum Exactarum et Technicarum sententia
a Senatu Universitatis Silesiae probata

DOCTORIS HONORIS CAUSA

nomen et dignitatem, iura et privilegia contulimus
atque in eius rei fidem hoc diploma
Universitatis nostrae sigillo maiore munitum
sancendum curavimus

Dabamus Catoviciae, die duodetricesima mensis Aprilis anno bis millesimo vicesimo secundo

Danuta Stróż
Facultatis Scientiarum Exactarum
et Technicarum
h.t. Decana Spectabilis

Richardus Koziółek
h.t. Rector Magnificus

Michael Daszykowski
Promotor rite constitutus





Román Tauler Ferré
Fot. Clara Ametller

Wstęp

Jego Magnificencja Rektor Uniwersytetu Śląskiego
Prof. dr hab. **RYSZARD KOZIOŁEK**
Uniwersytet Śląski w Katowicach

Exordio

Rector de la Universidad de Silesia
Profesor **RYSZARD KOZIOŁEK**
Universidad de Silesia de Katowice

Introduction

His Magnificence the Rector of the University of Silesia
Professor **RYSZARD KOZIOŁEK**
University of Silesia in Katowice

Starożytni twierdzili, że gdy nastaje czas wojny, należy odłożyć pióra (a także pędzle, instrumenty muzyczne i wszystkie inne przedmioty, których nie można użyć w obronie kraju). *Inter arma silent musae* – głosi znane łacińskie przysłowie. W czasie wojny muzy milczą. A skoro milczą muzy, to powinna również zamilknąć nauka i wszystkie uroczystości z nią związane. Wojna tocząca się w sąsiedniej Ukrainie zmusza nas do tego, by w dniu tak wielkiej uroczystości, jaką jest uhonorowanie Profesora Romána Taulera Ferré doktoratem *honoris causa* Uniwersytetu Śląskiego, zastanowić się, jaka powinna być rola nauki w sytuacji konfliktu zbrojnego, którego jesteśmy świadkami, i w jaki sposób, prowadząc swoje badania naukowe, a także – starając się stawiać za wzór czyjeś badania i doceniać je naszym własnym wysiłkiem – możemy na nowo pomyśleć o postępie naukowym, szczególnie w naukach eksperymentalnych i – związanej z nimi – humanistyce. Czy ceną tej wojny – oprócz ludzkiego życia – powinno być także życie tego, co ludzie wytwarzają, czym się dzielą i co w sobie podziwiają, czy też raczej wojna zmusza nas, byśmy jeszcze bardziej docenili naukę, nie odkładając piór, pędzli i instrumentów na bok?

Okazją do docenienia nauki w jej najwartościowszym wymiarze staje się dzisiejsza uroczystość. Profesor Román Tauler Ferré jest twórcą metody MCR (Multivariate Curve Resolution, dekonwolucji wielowymiarowych profili), a w szczególności algorytmu MCR-ALS. Bada wielostrukturowe, niezwykle złożone zbiory danych, wymagające nie tylko przyjęcia zupełnie nowych narzędzi szacowania, lecz także nowych kategorii niejednoznaczności. Udaje mu się zatem uczynić to, co niejasne, wielkie i niepoliczalne, czymś zgoła jasnym, prawie jednoznacznym. Metody Profesora Romána Taulera Ferré służą do spektroanalitycznych i elektroanalitycznych badań (bio)cząsteczek w roztworze, a także do badania złożonych mieszanin chemicznych sposobami chromatograficznymi z łącznikami i obrazowaniem hiperspektralnym. Chemometria pod wpływem Profesora Ferré stała się nie tylko teorią niezwykle trudną naukowo, ale przede wszystkim udało się ją przełożyć na język praktyki i dydaktyki, a tym samym umieścić w programach nauczania uniwersytetów na całym świecie.

Chemia Profesora Romána Taulera Ferré łączy się przede wszystkim z pokojowym wymiarem nauki, nauki pozostającej w służbie przyrody i człowieka. Metody chemometryczne Profesor Ferré stosuje do rozwiązywania problemów środowiskowych związanych ze zmianami globalnymi; korzysta z monitoringu środowiska, modelowania i podziału źródeł zanieczyszczeń w wodach powierzchniowych i powietrzu, a ostatnio przeprowadza też ocenę wpływu i ryzyka zagrożeń środowiskowych na profile genomowe, metabonomiczne, lipidomiczne i proteomiczne organizmów biologicznych. Na szczególne uznanie zasługują jego badania wód Oceanu Arktycznego i ocena ich zanieczyszczeń. Chemometria

i mapowanie geograficzne okazują się więc nie tylko narzędziami wysoce teoretycznymi, lecz także – niezwykle pożytecznymi, a stosowane w służbie ludzkości mogą być wzorem angażowania nauki w sytuacji zagrożenia świata kryzysem klimatycznym i nieodwracalną antropopresją.

Chemometria, tak odległa od narracyjnej i nastawionej na komunikację humanistyki, chce nas nauczyć czegoś więcej niż tylko analizy danych, laboratoryjnego skupienia i ćwiczenia się w języku abstrakcji. Chce uczyć myślenia o sytuacjach niejednoznacznych i trudnych – wszak to właśnie pod wpływem doświadczeń wojny włoski chemik i pisarz, Primo Levi, zaproponował oryginalny „układ okresowy” – cykl dwudziestu jeden opowiadań odpowiadających nazwom pierwiastków: argonu, wodoru, cynku, żelaza, potasu, niklu, ołowiu, rtęci, fosforu, złota, ceru, chromu, siarki, tytanu, arsenu, azotu, cyny, uranu, srebra, wanadu i węgla. W każdym z nich Levi, więzień obozu w Auschwitz w czasie drugiej wojny światowej, próbował konfrontować chemię ze sprawami ogólniejszymi, by nie rzec – fundamentalnymi dla tamtych czasów – jak cena ludzkiego życia, faszyzm, bycie Żydem czy uchodźcą. Jego „układ okresowy pierwiastków” stał się „poezją, najwyższą i najwznioślejszą”¹, w której dało się odnaleźć nie tylko rymy, ale przede wszystkim pomost między „światem na papierze a światem rzeczy”². Podczas zajęć laboratoryjnych na pierwszym roku studiów, prowadzonych przez profesora uchodzącego wśród studentów

1 P. Levi, *Żelazo*, w: tegoż, *Układ okresowy*, przeł. Z. Koprowska, Wydawnictwo Literackie, Kraków, 2011, s. 65.

2 Tamże.

za „człowieka dzikiego i myśliwego”³, Levi otrzymał zadanie przygotowania siarczanu cynku. Zdawałoby się, że o cynku niewiele można napisać mądrego – szary kolor, nietoksyczność i niewchodzenie w widowiskowe reakcje czynią go metalem nudnym. Jednak „ten jakże łagodny i delikatny cynk, tak uległy w stosunku do kwasów, że te połykają go za jednym kęsem, zachowuje się w sposób zgoła odmienny, kiedy jest w stanie bardzo czystym – wtedy zacięcie stawia opór atakom”⁴. Levi wyciąga z tego dwa wnioski – o pochwalę czystości, która jak kolczuga broni przed złem, i pochwalę nieczystości, która „toruje drogę zmianom, a więc życiu”⁵. Filozofia zmienności, wyprowadzona z zadania laboratoryjnego, filozofia, na której bazują także wszystkie doskonalsze metody, w tym także MCR Profesora Romána Taulera Ferré, podpowiada Levi, jest zarazem filozofią życia. „Żeby koło mogło się kręcić, żeby życie mogło żyć, potrzebne są nieczystości: także w ziemi, jak wiadomo, jeśli ma być żyzna. Potrzebne są niezgoda, odmienność, ziarenko soli i gorzkości”⁶. Chemia rozumie zatem doskonale to, czego nie chcą zaakceptować prowadzący ludobójcze wojny politycy – że każda czystość w społeczeństwie prowadzi do przemocy, ponieważ żeby zaprowadzić w nim oczyszczający porządek, trzeba użyć obłudnej, ale śmiertelnej siły. „Nie istnieje nieskazitelna cnota”. „Żeby życie mogło żyć, potrzebne są nieczystości”⁷.

3 P. Levi, *Cynk, w: tegoż, Układ okresowy...*, s. 47.

4 Tamże, s. 53.

5 Tamże.

6 Tamże.

7 Tamże.

Chemia uczy nie tylko poezji pierwiastków czy finezji myślenia metodami matematycznymi, uczy także, że szlachetność zdobywa się „przez stulecia prób i błędów” i pokonywanie materii. Droga, jaką podąża nasz czcigodny Gość, to właśnie droga uczonego; droga wojownika, którym w istocie jest chemik, zmuszony w poszukiwaniu najtrudniejszych rozwiązań naukowych porzucić teorię i niczym myśliwy samotnie spróbować własnych sił.

Pod wpływem zajęć w laboratorium chemicznym, w którym uczył się Primo Levi, prawie połowa studentów zmieniła zawód. „Kto jest coś warty, zwycięża, kto ma słabe oczy, ramiona lub węch, wraca i zmienia fach”⁸. Ta okrutna, niemal darwinowska nauka – o tym, kim dzisiaj powinien być uczonec, by umiał przetrwać nie tylko codzienne zmory, ale i aktualny czas wojny – czyni z niego wojownika. Profesor Román Tauler Ferré dzięki swojej niezłomnej postawie naukowej, odkryciom dla dobra ludzkości, ale przede wszystkim przyrody, pracowitości i skromności staje się dziś dla wspólnoty akademickiej wzorem działań na ten trudny czas. Nasza uroczystość dowodzi, że nauka nie milknie, gdy toczą się wojny. Powinna przemawiać jeszcze głośniejszym i wyraźniejszym głosem, by nigdy nie było wątpliwości, że mówi wyłącznie w imieniu życia. Żeby można było żyć. Jak pisał teoretyk wojny Carl von Clausewitz, „przemoc uzbraja się w wynalazki sztuki i nauki”⁹. Podczas dzisiejszej uroczystości, składając podziękowania Profesorowi Románowi Taulerowi Ferré za współpracę,

8 Tamże, s. 49.

9 C. von Clausewitz, *O wojnie. Podręcznik stratega*, Wydawnictwo Mireki, [b.m.w.], [b.d.w.], s. 15.

przyjaźń i niesione przez jego pracę dobro, chcemy mocno podkreślać ten pokojowy, witalistyczny i silny wymiar nauki, w którym wzór chemiczny rozumiemy jako wzór szlachetnego bojowania o wolność myśli i prawo do wolnego życia. Zapisane jest w nim także prawo do błędu i pomyłki. We wspomnianym opowiadaniu *Cynk* bohater, Primo Levi, *porte parole* autora, ostatecznie psuje reakcję, dodając do roztworu siarczanu miedzi kroplę kwasu siarkowego. „Mój siarczan cynku skończył marnie, ulegając stężeniu i przemieniając się w biały proszek, który wydzielił cały lub prawie cały kwas siarkowy pod postacią duszących oparów”¹⁰. Poznaje jednak w tym samym czasie koleżankę ze studiów, która podczas zajęć w laboratorium czyta wielkie dzieło pacyfistyczne – *Czarodziejską górę* Tomasza Manna. Chemia odśłania tu swoją wielką moc jednoczącą. Pozwala nam wygrać „bitwę przeciw ciemności, pustce i nieprzyjaznym czasom, które nadciągały”¹¹.

10 P. Levi, *Cynk*, w: tegoż, *Układ okresowy...*, s. 57.

11 Tamże.

Los antiguos romanos consideraban que cuando llegaba la guerra había que dejar de lado plumas (al igual que pinceles, instrumentos musicales y todos aquellos objetos que no podían usarse para defender el país). *Inter arma silent musae* –glosa un famoso proverbio latino. Cuando suenan los cañones las musas callan. Y como las musas callan, la ciencia y toda celebración vinculada a ellas deberían callar también.

La guerra en la vecina Ucrania nos fuerza a que –el día de la magna ceremonia de concesión de un doctorado Honoris Causa al Excmo. Profesor Román Tauler Ferré por la Universidad de Silesia, –nos preguntemos por el papel de la ciencia ante el conflicto armado del que somos testigos. Asimismo, en nuestras investigaciones –sin olvidar de buscar inspiración también en la investigación ajena y apreciarla con nuestro propio esfuerzo– tenemos que reflexionar en cómo repensar el progreso científico especialmente en las ciencias experimentales y en las humanidades, que están relacionadas con ellas. Acaso ¿el precio de esta guerra deben ser –además de las vidas humanas– también todo lo que los humanos crean, lo que comparten y lo que admiran? O bien, al contrario, ¿la guerra nos impulsa a apreciar aún más la ciencia y no dejar plumas, pinceles e instrumentos de lado?

La celebración de hoy es una ocasión para apreciar la ciencia en su dimensión más valiosa. El Profesor Roman Tauler Ferré es el autor del método MCR (Multivariate Curve Resolution o resolución multivariante de curvas) y, especialmente, del algoritmo MCR-ALS. Se especializa en investigar conjuntos de datos multiestructurales de alto grado de complejidad que no solo requieren nuevos métodos de estimación sino también nuevas categorías de ambigüedad y ha conseguido volver claro y casi obvio lo que parecía lo oscuro, grande e inconmensurable. Los métodos del Profesor Román Tauler Ferré sirven para los estudios espectroanalíticos y electroanalíticos de (bio)moléculas en disolución, así como para el estudio de mezclas químicas complejas con la aplicación de métodos cromatográficos con conectores e imágenes hiperespectrales. Bajo la influencia del Profesor Ferré, la quimiometría se ha convertido en un desafío científico, pero también ha sido posible traducirla al lenguaje de la práctica y de la didáctica, e incluirla, de este modo, en los planes de estudio de las universidades del mundo entero.

La química del Profesor Román Tauler Ferré se asocia, ante todo, con la dimensión pacífica de la ciencia, una ciencia al servicio de la naturaleza y del hombre. Los métodos quimiométricos le sirven al Profesor Tauler Ferré para resolver problemas ambientales relacionados con los cambios globales. El Profesor utiliza el monitoreo ambiental, la modelización y la distribución de las fuentes de contaminación en la atmósfera y en las aguas superficiales. Recientemente, el estudioso también lleva a cabo una estimación de impacto y riesgo de los peligros ambientales en los perfiles genómicos, metabonómicos, lipidómicos y proteómicos de los organismos biológicos. Especial reconocimiento merecen sus investigaciones de las

aguas del océano Ártico y la evaluación de sus contaminantes, En definitiva, la quimiometría y el mapeo geográfico resultan ser herramientas no solo altamente teóricas sino también extremadamente útiles, y, aplicadas al servicio de la humanidad, ejemplifican cuánto la ciencia está involucrada en asuntos relacionados con la lucha contra la crisis climática y una antropopresión irreversible.

La quimiometría, tan alejada de las humanidades, orientadas a la narrativa y a la comunicación, quiere enseñarnos algo más que un mero análisis de datos, la concentración en el laboratorio y el ejercicio en el lenguaje de la abstracción. Quiere enseñar a pensar en situaciones ambiguas y difíciles. Gracias a la influencia de sus vivencias de la guerra que el químico y escritor italiano Primo Levi propuso su excepcional “El sistema periódico”. El libro está compuesto por 21 capítulos dedicados, cada uno de ellos, a un elemento químico: argón, hidrógeno, zinc, hierro, potasio, níquel, plomo, mercurio, fósforo, oro, cerio, cromo, azufre, titanio, arsénico, nitrógeno, estaño, uranio, plata, vanadio y carbono. En cada uno de ellos, Levi, prisionero de Auschwitz durante la Segunda Guerra Mundial, intentaba confrontar la química con cuestiones más generales, por no decir fundamentales para aquellos tiempos, como el precio de la vida humana, el fascismo, ser judío o ser refugiado. Su “El sistema periódico” se convirtió en una poesía más elevada y más solemne, en la que era posible encontrar no sólo rimas, sino, ante todo, un puente entre „el mundo de los papeles y el mundo de las cosas”¹. Durante las clases de laboratorio

1 P. Levi, *Żelazo*, en: P. Levi, *Układ okresowy*, traducción al polaco Z. Koprowska, Wydawnictwo Literackie, Kraków, 2011, p. 65. (Todas las citas en la versión espa-

de primer curso dirigidas por un Profesor que era considerado por los estudiantes “un salvaje [y] un cazador”², a Levi se le encomendó la tarea de preparar el sulfato de zinc. Parecería que „no es un elemento que le diga mucho a la imaginación, es gris y sus sales son incoloras, no es tóxico, no da reacciones cromáticas llamativas: en una palabra, es un metal aburrido. [Sin embargo] el zinc, tan tierno y delicado, tan dócil ante los demás ácidos que se funden en uno, se comporta en cambio de modo bastante diferente cuando aparece en estado puro: entonces se resiste obstinadamente al ataque”³. Del experimento, Levi saca dos conclusiones „filosóficas contradictorias entre sí: el elogio de la pureza, que protege del mal como una coraza y el elogio de la impureza que abre la puerta a las transformaciones, o sea a la vida”⁴. Levi sugiere que la filosofía de la variabilidad, derivada de un ejercicio en el laboratorio, la filosofía en la que se basan todos los métodos más perfectos, –incluida la MCR del Profesor Román Tauler Ferré,– es también una filosofía de vida. “Para que la rueda dé vueltas, para que la vida sea vivida, hacen falta las impurezas, y las impurezas de las impurezas; y pasa igual con el terreno, como es bien sabido, si se quiere que sea fértil. Hace falta la disensión, la diversidad, el grano de sal y de mostaza”⁵. Así pues, la química entiende perfectamente lo que los políticos que libran guerras genocidas no quieren aceptar: que

ñola del texto provienen de la traducción de „El sistema periódico” al español de Carmen Martín Gaité).

2 P. Levi, *Cynk*, en: P. Levi, *Układ okresowy*, p. 47.

3 *Ibidem*.

4 *Ibidem*.

5 *Ibidem*.

toda la pureza en la sociedad conduce a la violencia, porque para instaurar un orden purificador es necesario utilizar una fuerza hipócrita pero letal. “[N]i siquiera existe la virtud inmaculada”. “Para que la vida sea vivida, hacen falta las impurezas”⁶.

La química enseña no solo la poesía de los elementos o la fineza del pensamiento a través de métodos matemáticos; enseña también „que la nobleza del Hombre, [se adquiere] tras cien siglos de tentativas y errores”, y la superación de la materia. El camino seguido por nuestro venerable invitado es precisamente el camino del científico; el camino de luchador, que en realidad es químico, forzado a abandonar la teoría en busca de soluciones científicas más difíciles y solo probar suerte como cazador.

La atmósfera de las clases en el laboratorio químico donde estudió Primo Levi provocó que casi la mitad de los alumnos cambiasen de profesión. “El que vale gana; quien tiene débiles la vista, los brazos o la respiración da media vuelta y cambia de oficio.”⁷. Esta ciencia cruel, casi darwiniana, sobre lo que un erudito debe ser hoy en día para poder sobrevivir, no solo a las pesadillas diarias, sino también a los tiempos de guerra actuales, lo convierte en un luchador. El Profesor Román Tauler Ferré, gracias a su inquebrantable actitud científica, a sus descubrimientos en beneficio de la humanidad y, sobre todo de la naturaleza, a su diligencia y modestia es, hoy día y en estos tiempos difíciles, un modelo para la comunidad académica. Nuestra ceremonia demuestra que la ciencia no calla cuando suenan los cañones. Al contrario, debe hablar aún más alto

6 *Ibídem.*

7 *Ibídem.*

y aún más claro, para que nunca quede duda alguna de que habla tan solo en nombre de la vida. Para que la vida pueda ser vivida. Como escribía el teórico de la guerra Carl von Clausewitz: “la fuerza [...] recurre a las creaciones del arte y de la ciencia”⁸.

Durante el acto de hoy, agradeciendo al Profesor Román Tauler Ferré su cooperación, su amistad y el bien que aporta con su trabajo, queremos enfatizar esta dimensión pacífica, vital y fuerte de la ciencia, en la que entendemos la fórmula química como un modelo de la lucha noble por la libertad del pensamiento y del derecho a vivir libremente. También está inscrito en ella, el derecho al error y a la equivocación. En el ya mencionado capítulo *Zinc*, el protagonista, Primo Levi, el portavoz del autor, acaba estropeando la reacción al añadir una gota de ácido sulfúrico a la solución de sulfato de cobre: “mi sulfato de zinc acabó concentrándose de mala manera, y se redujo a un polvillo blanco que exhaló todo o casi todo su ácido sulfúrico en nubes sofocantes”⁹. Sin embargo, al mismo tiempo conoce a una colega de la universidad que, durante las clases en el laboratorio, está leyendo una gran obra pacifista: *La montaña mágica*, de Thomas Mann. La química revela aquí su gran poder unificador. Nos permite vencer „una batalla, [...] contra la oscuridad, el vacío y los años hostiles que se nos venían encima”¹⁰.

8 C. von Clausewitz, *O wojnie. Podręcznik stratega*, Wydawnictwo Mireki, p. 15. (cita en español: *De la guerra*; Karl Von Clausewitz; traducción y prólogo, Francisco Moglia, 2003: 4).

9 P. Levi, *Cynk*, en: P. Levi, *Układ okresowy*, la cita de la versión española.

10 *Ibidem*.

The ancients believed that when the time of war came, pens and brushes, musical instruments, and other objects that could not be used to defend the country should be put down. *Inter arma silent musae*, so goes a well-known Latin proverb. In times of war, the muses fall silent. And since the muses are silent, science should also keep quiet along with all the celebrations associated with it. The war in neighbouring Ukraine forces us to reconsider the role of science in the situation of armed conflict that we are witnessing on the day of such a grand celebration as awarding Professor Román Tauler Ferré the Honorary Doctorate Degree of the University of Silesia and how, in carrying out our research and in seeking to model and appreciate someone else's research through our efforts, we can rethink scientific progress, especially in experimental sciences and related humanities.

Should the price of this war, apart from human life, also be the life of what people produce, what they share and what they admire in each other, or should war force us to appreciate science even more without putting pens, brushes and instruments aside?

Today's celebration becomes an opportunity to appreciate science in its most valuable dimension. Professor Román Tauler Ferré is the creator

of the MCR (Multivariate Curve Resolution) method and, in particular, the MCR-ALS algorithm.

He studies multi-structured, highly complex data sets, requiring the adoption of utterly new estimation tools and new categories of ambiguity. He thus manages to make the obscure, the great, and the incalculable into something relatively straightforward, almost unambiguous. Professor Román Tauler Ferré's methods are used for spectroanalytical and electroanalytical testing of (bio)particles in the solution and testing complex chemical mixtures by chromatographic methods with connectors and hyperspectral imaging. Chemometrics under the influence of Professor Ferré has become not only a complicated scientific theory but, most of all, it has been translated into the language of practice and education and thus put into university curricula all over the world.

The chemistry of Professor Román Tauler Ferré is primarily linked to the peaceful dimension of science, a science at the service of nature and man. Professor Ferré uses the chemometric methods to solve environmental problems related to global changes; he uses environmental monitoring, modelling, and distribution of sources of surface water and air pollution, and recently carries out the impact and risk assessment of environmental hazards on genomic, metabonomic, lipidomic and proteomic profiles of biological organisms.

His research into Arctic waters and the assessment of their pollution deserve special recognition. Chemometrics and geographical mapping are therefore not only highly theoretical but also handy tools and can be used in the service of humankind as a model for engaging science in the situation of the global threat of climate crisis and irreversible anthropopressure.

Chemometrics, so far away from narrative and communication-oriented humanities, wants to teach us more than just data analysis, laboratory-like focus and exercise in abstraction language. It wants to teach us to think about ambiguous and difficult situations. After all, it was under the influence of war experiences that the Italian chemist and writer Primo Levi proposed an original “periodic system,” a collection of twenty-one short stories corresponding to the names of elements: argon, hydrogen, zinc, iron, potassium, nickel, lead, mercury, phosphorus, gold, cerium, chromium, sulphur, titanium, arsenic, nitrogen, tin, uranium, silver, vanadium and carbon. In each of them, Levi, a prisoner of the Auschwitz camp during World War II, tried to confront chemistry with more general matters, not to say fundamental for those times, like the price of human life, fascism, being Jewish or a refugee. His “periodic table” became “poetry, loftier and more solemn than all the poetry we had,”¹ in which it was possible to find not only rhymes but, above all, a bridge between “the world of words and the world of things.”² During a laboratory class in the first year of study, taught by a professor who was regarded among the students as “a savage, a hunter,”³ Levi received the task of preparing zinc sulfate. It would seem that there is little to write about zinc that is wise: its grey colour, non-toxicity and the fact that it does not react strikingly make it boring metal. However,

- 1 Primo Levi, *Iron*, in *The Periodic Table*, trans. R. Rosenthal (New York: Schocken Books, 1995), 41–42.
- 2 Levi, *Iron*, 42.
- 3 Primo Levi, *Zinc*, in *The Periodic Table*, 31.

“the so tender and delicate zinc, so yielding to acid which gulps it down in a single mouthful, behaves, however, in a very different fashion when it is very pure: then it obstinately resists the attack.”⁴

Levi draws two conclusions from this: “the praise of purity, which protects from evil like a coat of mail; the praise of impurity, which gives rise to changes, in other words, to life.”⁵ The philosophy of variability, derived from the laboratory task on which all the better methods are based, the MCR method of Professor Román Tauler Ferré included, as Levi suggests, is also the philosophy of life. “In order for the wheel to turn, for life to be lived, impurities are needed, and the impurities of impurities in the soil, too, as is known, if it is to be fertile. Dissension, diversity, the grain of salt and mustard are needed.”⁶ Therefore, chemistry perfectly understands what politicians who lead genocide wars do not want to accept: that every purity in society leads to violence. It is necessary to use hypocritical yet deadly force to achieve a cleansing order. “Immaculate virtue does not exist.” “For life to be lived, impurities are needed.”⁷

Chemistry teaches not only poetry of elements or finesse of thought by mathematical methods, but it also teaches that nobility is gained through “centuries of trial-and-error” and overcoming matter. The path of our honourable guest is the way of a scholar, the way of a warrior, whom a chemist is, somebody forced to abandon theory in search of the most complex scientific solutions and to try one’s hand like a hunter.

4 Levi, *Zinc*, 33.

5 Levi, *Zinc*, 34.

6 Levi, *Zinc*, 34.

7 Levi, *Zinc*, 34.

Under the influence of the chemistry lab where Primo Levi studied, nearly half of the students changed their profession. “He who is worthy wins; he who has weak eyes, arms, or instincts turns back and changes his trade.”⁸ This cruel, almost Darwinian science, on who a scientist should be today so that he or she can survive both regular nightmares and the current time of war, makes him or her a warrior. Professor Román Tauler Ferré, thanks to his unwavering scientific attitude, his discoveries for the benefit of mankind, but above all of nature, his diligence and modesty, is today becoming a role model for the academic community in these difficult times. Our celebration proves that science will not be silent when wars occur. It should speak even louder and more clearly so that it is never doubted that it speaks only on behalf of life, so that it is possible to live. As the war theorist Carl von Clausewitz wrote, “Force [...] equips itself with the inventions of art and science.”⁹ During today’s celebration, by thanking Professor Román Tauler Ferré for his cooperation, friendship, and the good that his work brings, we want to strongly emphasise this peaceful, vitalistic, and strong dimension of science, in which we understand the chemical formula as a model of a noble fight for freedom of thought and the right to free life. It also includes the right to error and to make a mistake. In the aforementioned short story, *Zinc*, the protagonist, Primo Levi, the author’s *porte-parole*, ultimately spoils the reaction by adding a drop of sulfuric acid to the copper sulfate

8 Levi, *Zinc*, 31.

9 Carl von Clausewitz, *On War*, trans. M. Howard and P. Paret (New York: Oxford University Press, 2007), 13.

solution. “So my zinc sulfate ended up badly by concentrating, turned into nothing more than a bit of white powder which in suffocating clouds exhaled all or almost all of its sulfuric acid.”¹⁰ At the same time, however, he meets a fellow student who reads an excellent pacifist work in the lab, Thomas Mann’s *The Magic Mountain*. Chemistry reveals its great unifying power here. It allows us to win “a battle against the darkness, the emptiness, and the hostile years that lay ahead.”¹¹

¹⁰ Levi, *Zinc*, 36.

¹¹ Levi, *Zinc*.

Laudacja

Prof. dr hab. **MICHAŁ DASZYKOWSKI**
Uniwersytet Śląski w Katowicach

Laudatio

Profesor **MICHAŁ DASZYKOWSKI**
Universidad de Silesia de Katowice

Laudation

Professor **MICHAŁ DASZYKOWSKI**
University of Silesia in Katowice

Laudacja z okazji nadania
Panu Profesorowi Románowi Taulerowi Ferré
godności doktora *honoris causa*
Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach

Pomimo gwałtownie zmieniającego się na naszych oczach świata jest nam dzisiaj dane uczestniczyć w uroczystej ceremonii promocji Pana Profesora Romána Taulera Ferré, któremu stosowną uchwałą prześwietny Senat Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach nadał akademicki tytuł doktora *honoris causa*. Ten honorowy tytuł przyznają uniwersytety osobom szczególnie zasłużonym dla nauki czy kultury. To wyjątkowy moment w życiu doktora honorowego i jego rodziny, gdy członkowie akademickiego uniwersum poznają jego sylwetkę naukową i osiągnięcia. Każda tego typu uroczystość jest absolutnie niepowtarzalna. To doznanie zawdzięczamy nie tylko oprawie samej uroczystości, ale przede wszystkim wyczuwalnej interakcji doktora honorowego ze Wspólnotą uczelni i tworzącej się na naszych oczach trwałej więzi. Jako naukowcy z pilną uwagą i zainteresowaniem analizujemy, rozważamy i przyglądamy się kolejnym etapom jego kariery naukowej – klatka po klatce. Szukamy w tym zapisie życia, w tym naukowego, a także gotowych i już przecież sprawdzonych wzorów postaw oraz działań, które powinniśmy naśladować czy choćby w części zaadaptować. W trakcie tego unikalnego seansu uczymy się, czym jest doskonałość naukowa, redefiniujemy to pojęcie i odkrywamy

jego poszczególne często wysublimowane składowe. Projektujemy i budujemy nowych siebie. My, ludzie nauki, jesteśmy przecież trybikami skomplikowanej naukowej maszyny, która napędza postęp i ułatwia zrozumienie otaczającego nas świata. Teraz na chwilę zatrzymajmy się i skoncentrujmy się na naszym doktorze honorowym, Profesorze Taulerze, i Jego bliskim otoczeniu naukowym. Ceremonia nadania akademickiego tytułu doktora honorowego to jedyna w swoim rodzaju lekcja, z której obiecuję, że każdy z nas coś dla siebie zabierze. Czas, aby ją rozpocząć.

Synteza i analiza to dwa przeciwstawne pojęcia, które leżą u podstaw każdej cywilizacji dążącej do poznania i zrozumienia otaczającego ją świata. Już od najwcześniejszych początków alchemii, dzisiaj nazywanej przez nas chemią, jej adepci byli nade wszystko zainteresowani syntezą, czyli procesami tworzenia materii (różnie wówczas rozumianej) na drodze łączenia prostych składników. Stąd właśnie pochodzi nazwa dyscypliny – chemia, ponieważ w czasach starożytnych, antycznych i średnio-wiecznych tak ją przede wszystkim rozumiano, to jest jako łączenie i stapianie materii. Z biegiem lat chemicy postawili sobie za cel nie tylko nabycie umiejętności tworzenia nowych substancji, lecz także z coraz większą determinacją podejmowali próby poznania składu nieznanych jak dotąd substancji czy mieszanin. W pojmowaniu chemika, analiza jest zatem procesem przeciwnym do procesu syntezy. Polega na zidentyfikowaniu poszczególnych składników złożonych mieszanin oraz na określeniu ich wzajemnych proporcji. W tym miejscu warto zaznaczyć, że te dwa cele są domeną nowoczesnej chemii analitycznej, w której specjalizuje się Pan Profesor Tauler. Ukończył on studia chemiczne w 1977 roku na Uniwersytecie w Barcelonie, w Hiszpanii. W 1984 roku na tym samym

uniwersytecie uzyskał stopień doktora w specjalności chemia analityczna. Od początku swojej kariery naukowej bada złożone układy, to znaczy takie, w których obserwujemy jednocześnie wiele stanów równowagi, oraz dokonuje ich chemicznej specjacji. Innymi słowy, tego typu układy tworzą wieloskładnikowe mieszaniny związków chemicznych, które powstają lub znikają z określoną dynamiką. Uchwycenie zachodzących w czasie zmian i jednoznaczna identyfikacja obecnych w układzie związków chemicznych to bardzo ambitne zadanie, nawet gdy badamy relatywnie proste systemy modelowe, o których dość dużo wiemy. W tego typu badaniach wyraźnie dostrzegamy zachodzące jednocześnie procesy tworzenia i rozpadu poszczególnych związków chemicznych, które wraz z postępem zachodzących w układzie reakcji stopniowo słabną, by w końcu osiągnąć stany równowagi. Pewnie w głowach bardziej dociekliwych już zrodziło się takie oto pytanie – a jeśli chcemy badać procesy niekoniecznie w pełni reżyserowane – czyli zaplanowane, to znaczy takie, które zachodzą w otaczającym nas środowisku czy w żywych organizmach? Przecież nie sposób zrozumieć funkcjonowania badanego układu, jeśli w pełni nie poznamy natury zachodzących w nim procesów. Musimy zatem skutecznie wyodrębnić poszczególne składniki chemiczne i ustalić kolejne etapy, przez które układ przechodzi.

Od lat osiemdziesiątych ubiegłego wieku obserwujemy szybki rozwój technik instrumentalnych, a także komputerów. Tym samym analiza składu chemicznego staje się precyzyjniejsza i szybsza. Niemniej jednak rosnące możliwości pomiarowe paradoksalnie powodują, że ważna chemicznie informacja nie jest bezpośrednio dostępna, a jej skuteczne ujawnienie wymaga użycia odpowiedniego postępowania i adekwatnych do

problemu podejść. W tym okresie zrodziła się chemometria jako odpowiedź na realne wyzwania napotykanne na etapie planowania eksperymentu, jego optymalizacji, a także modelowania wielowymiarowych i wielomodalnych danych analitycznych. Z perspektywy czasu można powiedzieć, że chemometria promuje zrównoważone (racjonalne) podejście do prowadzenia eksperymentów i aktywnie wspomaga interpretację uzyskanych dzięki nim wyników. Trójka jej charyzmatycznych architektów, prof. Desire Luc Massart, prof. Svante Wold i prof. Bruce Kowalski, szybko i trwale zaraziła tym przesłaniem sporą grupę naśladowców, w tym naszego doktora honorowego, którzy z pełnym zaangażowaniem modyfikowali istniejący stan wiedzy czy wypełniali brakujące pola chemometrii. Jego zainteresowanie chemometrią niewątpliwie musiało zrodzić się już na etapie doktoratu. Wynikało ono przede wszystkim z fascynacji układami o wielu stanach równowagi, które wymagały obliczenia ich termodynamicznych parametrów i dokonania chemicznej specjacji. Zaraz po uzyskaniu stopnia doktora wyjechał wraz z żoną do Austrii na roczny staż podoktorski, co zapewne wcale nie było łatwą decyzją. Tam, wraz z prof. Rode, chemikiem teoretykiem rozwijał swój warsztat naukowy. Powrócił do Barcelony, a w 1987 roku uzyskał stałe zatrudnienie na Uniwersytecie w Barcelonie, gdzie prowadził swoje badania do czasu przejścia do instytutu naukowego IADEA-CISIC w 2004 roku. Z czasem jego uwagę coraz bardziej przyciągała tworząca się na jego oczach nowa gałąź chemii analitycznej – chemometria. Upatrując w niej wielką szansę i duże możliwości, wraz z żoną i dwójką dzieci wyjechał do Seattle na roczny staż naukowy w grupie badawczej prof. Kowalskiego, która w tamtych czasach, obok ośrodków w Brukseli i Uppsali, była jednym z trzech rozpoznawalnych centrów doskonałości

i rozwoju chemometrii. Właśnie tam, nabrała kształtu powszechnie dziś znana metoda MCR-ALS (z ang. Multivariate Curve Resolution Alternating Least Squares), którą stosujemy do poznawania i specjacji chemicznej złożonych układów, a także do analizy danych o strukturze wieloblokowej czy wielomodalnej.

Aby lepiej zrozumieć, jak faktycznie ona działa, powróćmy na chwilę do wcześniej omawianych przeze mnie głównych pojęć – syntezy i analizy. Można powiedzieć, że metoda ta pozwala stworzyć unikalny, poklatkowy film przemian chemicznych, który swobodnie możemy przewijać i oglądać w zwolnionym tempie. Skomplikowany pod względem składu problem chemiczny, niczym gruby warkocz, jest stopniowo rozplatany, aby ostatecznie „ujawnić” wyjściowe składniki chemiczne układu. To, co dzieje się w trakcie kolejnych iteracji metody MCR-ALS, jest faktycznie stopniowym rozplataniem, czyli procesem analizy. Z kolei zaplatanie w czasie chemicznego „warkocza”, który na podstawie parametrów zbudowanego modelu możemy ponownie formować, to z kolei proces syntezy. I właśnie tak tworzy się kompletny model badanego układu, przy okazji dając podstawy do wdrożenia bardzo użytecznej zasady. Gdy problem jest bardziej złożony i od razu nie widać możliwości jego rozwiązania, można podzielić go na kilka mniejszych. Zważywszy użyteczność metody MCR-ALS, zakres jej zastosowań jest niezwykle szeroki. Jeden z podstawowych artykułów, w którym została przedstawiona idea MCR-ALS, według danych Google Scholar uzyskał ponad 1330 cytowań. Zainteresowanie tą metodą, jak i jej modyfikacjami, wcale nie słabnie z biegiem lat. Profesor Tauler jest jednym z najbardziej rozpoznawalnych chemometryków na świecie, co przekłada się na bardzo wysoki indeks Hirscha, który

wedle Google Scholar wynosi 79 przy łącznej liczbie cytowań wynoszącej 26 403. To oczywiście wymierny wynik jego wieloletniej pracy naukowej. Niemniej jednak, najciekawsze w moim odczuciu są obrona strategii postępowania i droga, która ten wynik zapewniła. A zatem, co takiego zwiększa prawdopodobieństwo naukowego spełnienia w największym stopniu? Te istotne komponenty są widoczne w życiorysie naszego doktora habilitowanego. Wystarczy uważnie przeczytać dołączone recenzje, za które dziękuję Pani Profesor Walczak, Panu Profesorowi Olivieriemu i Panu Profesorowi Kvalheimowi.

Z jednej strony istotnym elementem jest mobilność, która, jak można by sądzić, stanowi stały punkt jego życia zawodowego. Pomimo skorzystania z dwóch długoterminowych zagranicznych staży naukowych Profesor Román Tauler Ferré bardzo często spędza czas w różnych grupach badawczych, wymienia doświadczenia, przekazuje wiedzę i szuka nowych wyzwań, nawet w ekstremalnych rejonach Morza Arktycznego. Różne, a zarazem bliskie spotkania z ludźmi nauki, często wyjątkowymi, tworzą silne naukowe więzi i utrwalają jego pozycję. Katalizują kolejne pomysły i dają szansę na realizację wspólnych zamierzeń czy projektów, w tym projektów finansowanych ze środków UE. Głównym motorem zarówno jego mobilności, jak i podejmowanych decyzji jest niewątpliwie ponadprzeciętna wola wyjścia z własnej strefy komfortu. Ten specyficzny rodzaj głodu nowych doznań jest jego dużym atutem i pozwala mu bardzo aktywnie powiększać swoje naukowe portfolio. Z drugiej strony Profesor Tauler jest mocno skoncentrowany na rozwijaniu i popularyzacji metody MCR-ALS. Konsekwentnie dodaje kolejne elementy jej funkcjonalności i stale ją usprawnia. Tej wieloletniej naukowej

fascynacji i skupienia można mu pozazdrościć. Bez względu na to, gdzie jest, zawsze widzę go uśmiechniętego i w towarzystwie bliskich mu współpracowników, Anny, Sylvii, Joaquima, Carme i Stefana, doktorantów i innych naukowców, którzy chętnie spędzają z nim czas, na przykład podczas odbywania własnego stażu naukowego czy w trakcie konferencji. Jego najbliższe otoczenie jest w dużym stopniu międzynarodowe i mocno zróżnicowane kulturowo. Taki styl uprawiania nauki pozwolił mu na kierowanie najbardziej prestiżowym grantem – ERC Advanced Grant, sfinansowanym przez UE w ramach siódmego programu ramowego. Zbudował on interdyscyplinarny zespół zdeterminowanych naukowców, których zadaniem była ocena globalnych efektów zachodzących zmian systemów środowiskowych oraz biologicznych przy użyciu metod chemometrycznych i technik instrumentalnych stosowanych w badaniach omicznych. Co istotne, w różnych momentach trwania pięcioletniego projektu brało w nim udział 24 doświadczonych naukowców, siedem naukowców o statusie „postdoc” oraz ośmiu doktorantów. Powstało 87 publikacji (w tym 11 rozdziałów zamieszczonych w monografiach), ogłoszono ponad sto prezentacji na międzynarodowych konferencjach i obroniło się ośmiu doktorantów. Czy taki wynik można osiągnąć bez dobrego pomysłu na badania, umiejętnej integracji zespołu i znakomitej koordynacji prac? Należy powiedzieć, że podejmowane przez niego próby integracji nie są doraźne i często wykraczają poza obszar interesów jego grupy badawczej. Profesor Tauler aktywnie integruje środowisko chemometryczne, pełniąc funkcję redaktora naczelnego czasopisma „Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems”, które wydaje Elsevier, redaktora dwóch wydań czterotomowej encyklopedii *Comprehensive Chemometrics*, jak i organiza-

tora wielu konferencji oraz warsztatów. W jego przypadku spełnienie zawodowe jest dodatkowo wzmacniane przez wsparcie ze strony żony, trójki dzieci i najbliższej rodziny. Ta bezcenna umiejętność osiągania balansu pomiędzy życiem rodzinnym a zawodowym w mojej ocenie jest kluczowa i ważna dla każdego naukowca bez względu na wiek.

Profesora Taulera poznałem 22 lata temu w Antwerpii, gdy po raz pierwszy brałem udział w międzynarodowej konferencji Chemometrics in Analytical Chemistry. Wtedy o metodzie MCR-ALS mówiło się przede wszystkim w kontekście potrzeby skutecznej kontroli i analizy procesów technologicznych. Obecnie istnieje wiele nowych wyzwań w obszarze nowoczesnych badań środowiskowych i omicznych czy obrazowania hiperspektralnego, które wymagają poznania wyjściowych i pośrednich komponentów opisujących badany układ czy obraz. Naukowa postawa Profesora, sposób prowadzenia badań są dla wielu inspirujące. Nadanie mu tytułu doktora honorowego przez Senat Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach jest wyrazem uznania jego znacznego wkładu w rozwój chemometrii, a także zauważeniem roli chemometrii, jaką odegrała ona nie tylko w rozwoju chemii analitycznej, lecz także innych dyscyplin, również w procesie transformacji cywilizacyjnej i technologicznej.

My obecni na sali inicjatorzy tego przedsięwzięcia, Profesor Beata Walczak, Profesor Ivana Stanimirova i ja, serdecznie gratulujemy Panu Profesorowi Taulerowi. Dziękujemy zarazem wszystkim tym, którzy od nas odeszli, a przyczynili się do propagowania idei chemometrii, nadania jej dzisiejszego kształtu i formuły.

Laudatio con motivo de la Ceremonia de la Investidura
del Profesor Román Tauler Ferré
como Doctor Honoris Causa
por la Universidad de Silesia de Katowice

A pesar de que el mundo está cambiando violentamente ante nuestros ojos, hoy tenemos el placer de participar en una solemne ceremonia en honor del Profesor Román Tauler Ferré quien ha sido investido doctor honoris causa por el excelentísimo Senado de la Universidad de Silesia de Katowice. Las universidades conceden este título honorífico a personas que han destacado en el ámbito de sus investigaciones científicas o artísticas y son, por tanto, una autoridad en ese campo. En este excepcional momento en la vida de cada doctor honorífico y de su familia cuando los miembros de la comunidad universitaria tienen oportunidad de conocer su perfil académico y sus méritos. Cada ceremonia de este tipo es absolutamente única. Esta experiencia se debe no solo al ceremonioso ritual de investidura, sino también a la interacción del doctor honorífico con la comunidad universitaria y a un fuerte vínculo que se está estableciendo ante nuestros ojos. Como científicos, analizamos, consideramos y observamos con atención e interés las etapas de su carrera –cuadro por cuadro. Buscamos en este registro de la vida –la científica incluida– los patrones listos y ya probados de actitudes que deberíamos imitar o adaptar, por lo menos parcialmente. Durante esta sesión única aprendemos qué

es la perfección científica, redefinimos este concepto y descubrimos sus componentes a menudo sublimes. Diseñamos y construimos un nuevo yo. Nosotros, la gente de ciencia, somos, pues, los engranajes de una máquina científica compleja que impulsa el progreso y facilita la comprensión del mundo que nos rodea.

Detengámonos ahora, por un momento, y concentremos nuestra atención en el doctor honorífico, el Profesor Tauler, y su entorno científico cercano. La ceremonia de la Investidura como Doctor Honoris Causa es una lección única de la que –prometo– cada uno de nosotros sacará algo para sí. Ya es hora de dar comienzo a la misma.

La síntesis y el análisis son dos conceptos opuestos que subyacen en cualquier civilización que busque conocer y comprender el mundo que la rodea. Desde los inicios más remotos de la alquimia, que hoy llamamos química, sus seguidores se interesaban ante todo por la síntesis, es decir, por los procesos de crear la materia (entonces entendida de varias maneras) mediante la combinación de ingredientes simples. De ahí proviene el nombre de Química como disciplina, porque en la Antigüedad y la Edad Media, se la entendía, ante todo así, es decir, como mezcla y fundición de la materia. Con el tiempo, los químicos iban aspirando no solo a adquirir capacidades de crear nuevas sustancias, sino también, con una determinación creciente, intentaban averiguar la composición de sustancias o mezclas hasta entonces desconocidas. Desde el punto de vista de un químico, el análisis es, por tanto, un proceso opuesto al de la síntesis. Consiste en identificar componentes individuales de mezclas complejas y determinar sus proporciones. En este momento, merece la pena subrayar que estos dos objetivos mencionados son el ámbito de la química

analítica moderna en la que el Profesor Tauler es especialista. Se graduó en Química en 1977 en la Universidad de Barcelona, España. En 1984, obtuvo el doctorado en Química Analítica, en la misma universidad. Desde el comienzo de su carrera científica ha estudiado los sistemas complejos, es decir, aquellos en los que observamos múltiples estados de equilibrio simultáneos, y ha realizado la especiación química de ellos. En otras palabras, los sistemas de este tipo forman mezclas multicomponentes de compuestos químicos que surgen o desaparecen con dinámicas determinadas. Captar los cambios que suceden a lo largo del tiempo e identificar inequívocamente los compuestos químicos de un sistema es una tarea muy ambiciosa, aun cuando estudiamos sistemas modelo relativamente simples, de los que sabemos bastante. En las investigaciones de este tipo, observamos con claridad los procesos simultáneos de formación y desintegración de compuestos químicos individuales, que se debilitan gradualmente a medida que avanzan las reacciones en el sistema, y finalmente alcanzan estados de equilibrio. Probablemente, en la mente de las personas más inquisitivas ya ha surgido la siguiente pregunta: ¿y si quisiéramos estudiar procesos que no necesariamente están totalmente dirigidos, o sea, planificados; es decir, aquellos que suceden en nuestro entorno o en los organismos vivos? En realidad, no es posible comprender el funcionamiento de un sistema estudiado, sin haber llegado a comprender completamente la naturaleza de los procesos que suceden en él. Por este motivo, es necesario separar los componentes químicos individuales y determinar las etapas sucesivas por las que el sistema pasa.

A partir de los años ochenta del siglo pasado, observamos un desarrollo rápido de las técnicas instrumentales y de los ordenadores. Gracias

a ello, el análisis de la composición química se hace cada vez más preciso y más rápido. Sin embargo, las posibilidades de medición crecientes ocasionan, paradójicamente, que la información relevante desde una perspectiva química no resulta directamente accesible, ya que el acceso efectivo a ella requiere el uso de procedimientos y enfoques adecuados al problema. Como respuesta a los desafíos reales encontrados en la etapa de planificación del experimento, su optimización, así como la modelización de datos analíticos multivariados y multimodales nació, en aquel tiempo, la quimiometría. En retrospectiva, se puede decir que la quimiometría promueve un enfoque equilibrado (racional) en la realización de experimentos y apoya activamente la interpretación de los resultados obtenidos gracias a ellos. Sus tres carismáticos arquitectos, el Prof. Desire Luc Massart, el Prof. Svante Wold y el Prof. Bruce Kowalski, contagiaron la idea a un grupo de científicos, a nuestro doctor honorífico incluido, quienes con un compromiso total han modificado el estado de conocimiento existente o completado los campos de la quimiometría que faltan. El interés por la quimiometría del Profesor Tauler tenía que haber surgido, sin lugar a dudas, ya en la etapa de su doctorado. Partió, ante todo, de la fascinación por los sistemas con múltiples estados de equilibrio, que requerían un cálculo de sus parámetros termodinámicos y la realización de una especiación química. Inmediatamente después de la obtención del doctorado, el estudioso se fue, con su esposa, a Austria para investigar en el marco de una beca posdoctoral, lo cual probablemente no resultó una decisión fácil. Allí, junto con el Prof. Rode, un químico teórico, estuvo desarrollando su taller científico. Regresó a Barcelona y en 1987 obtuvo un puesto permanente en la Universidad de Barcelona,

donde realizó su investigación hasta que se trasladó al instituto de investigación IADEA-CSIC en 2004. Con el transcurso del tiempo, una nueva rama de la química analítica que estaba surgiendo ante sus ojos –la quimiometría– iba atrayendo su atención, cada vez más. Viéndola como una gran oportunidad, el estudioso se desplazó –junto con su esposa y sus dos hijos– a Seattle para disfrutar de una beca de investigación de un año con el grupo de investigación del Prof. Kowalski. Este centro, junto a los de Bruselas y de Uppsala era, por aquel entonces, uno de los tres más sobre perfección y de desarrollo de la quimiometría. Fue allí donde surgió el comúnmente conocido método MCR-ALS (en inglés Multivariate Curve Resolution Alternating Least Squares), el cual nos sirve para estudiar y realizar la especiación química de sistemas complejos, y para analizar datos de estructuras multibloque o multimodal.

Para comprender mejor cómo el método funciona, volvamos por un momento a los conceptos principales ya abordados anteriormente: síntesis y análisis. Se puede decir que el método permite crear una película de un lapso de tiempo de transformaciones químicas, la cual podemos desplazar libremente y ver en cámara lenta. Un problema químico complejo, como una trenza gruesa, se destrenza gradualmente para finalmente originar los elementos que constituyen el sistema. Lo que sucede durante las iteraciones sucesivas del método MCR-ALS es, de hecho, un proceso de destrenzar gradualmente de la „trenza” química, es decir, un proceso de análisis. El trenzar en el tiempo una “trenza” química –la cual puede volver a formarse a base de los parámetros del modelo construido– es, a su vez, el proceso de síntesis. Es así como se crea un modelo completo del sistema probado, fundamentando, a la vez, la implementación de un

principio muy útil. Cuando un problema es más complejo y no se puede resolver de inmediato, es posible dividirlo en unos más simples. Dada la utilidad del método MCR-ALS, la gama de sus aplicaciones es sumamente amplia. Según los datos de Google Scholar, uno de los artículos fundamentales en los que se presentaba la idea de MCR-ALS, ya ha sido referenciado más de 1.330 veces. El interés por este método y por sus modificaciones no ha disminuido a lo largo del tiempo. El Profesor Tauler es uno de los quimiometristas más reconocidos del mundo, lo que se traduce en un índice de Hirsch muy alto, pues según Google Scholar, ocupa el puesto 79 con un número total de citas de 26 403. Este es un claro ejemplo de sus continuas investigaciones científicas. Sin embargo, lo más interesante, en mi opinión, es la estrategia elegida y el camino que le ha llevado a este resultado. Entonces, ¿qué es lo que más contribuye a incrementar el grado de satisfacción científica? Estos importantes componentes se pueden ver en la biografía de nuestro doctor honorífico. Basta con leer detenidamente las reseñas adjuntas, por las cuales agradezco en este momento al Profesor Walczak, al Profesor Olivieri y al Profesor Kvalheim.

Por un lado, el elemento esencial y, podría decirse, constante de la vida laboral del Profesor Tauler, es la movilidad. Además de realizar dos estancias largas de investigación, el científico colabora, muy a menudo, con varios grupos de investigación, intercambia experiencias, transfiere conocimientos y busca nuevos desafíos, incluso en las regiones extremas del mar Ártico. Estos encuentros diferentes y, a la vez, cercanos con gente de ciencia, que, a menudo, son personas excepcionales, crean fuertes lazos científicos y fortalecen su posición. Catalizan nuevas ideas y brindan las oportunidades de realizar planes o proyectos comunes, incluidos

los financiados con fondos de la UE. La principal impulsora de su movilidad y de las decisiones que toma es, sin duda alguna, una voluntad extraordinaria de salir de su propia zona de confort. Este tipo específico de deseo de nuevas sensaciones es su gran activo y le permite ampliar considerablemente su cartera científica. Por otro lado, el Profesor Tauler está fuertemente inclinado por desarrollar y popularizar el método MCR-ALS. Les agrega constantemente nuevos elementos a sus funcionalidades y la mejora constantemente. Podríamos sentir envidia de esta fascinación y concentración científica perennes. No importa donde esté, siempre lo veo sonriente y en gran compañía. A su alrededor hay colaboradores cercanos, como Anna, Sylvia, Joaquim, Carme y Stefan, como los doctorandos y otros científicos a los que les gusta pasar tiempo con él, por ejemplo, durante sus propias estancias de investigación o en congresos. Su entorno inmediato es en gran parte internacional y diversificado culturalmente. Este estilo científico de ser le permitió liderar la beca más prestigiosa: *ERC Advanced Grant*, financiada por la UE bajo el Séptimo Programa Marco. El estudioso creó un equipo interdisciplinar de científicos comprometidos, cuya tarea era evaluar los efectos globales de los cambios que suceden en los sistemas ambientales y biológicos mediante métodos quimiométricos y técnicas instrumentales utilizadas en la investigación ómica. Hay que subrayar que, en dicho proyecto de cinco años, participaron –en varios momentos– veinticuatro expertos, siete investigadores postdoctorales y ocho estudiantes de doctorado. Se editaron ochenta y siete publicaciones (incluidos once capítulos en monografías), se realizaron más de cien presentaciones en congresos internacionales y se defendieron ocho tesis de doctorado. Acaso ¿sería posible

lograr este resultado sin tener una buena idea de investigación, sin una buena integración del equipo y una excelente coordinación del trabajo? Cabe añadir que sus intentos de integración son bien pensados y muchas veces van más allá de los intereses de su grupo de investigación. El Profesor Tauler integra activamente la comunidad quimiométrica como editor en jefe de la revista *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, publicada por Elsevier, editor de dos números de la enciclopedia *Comprehensive Chemometrics*, que consta de cuatro volúmenes, y organizador de numerosos congresos y talleres. En su caso, la satisfacción profesional se ve fortalecida, adicionalmente, por el apoyo de su esposa, sus tres hijos y la familia cercana. En mi opinión, esta capacidad invaluable para lograr un equilibrio entre la vida familiar y profesional es crucial e importante para todo científico, independientemente de su edad.

Tuve el honor de conocer al Profesor Tauler hace 22 años en Amberes, cuando, por primera vez, participé en el congreso internacional de *Chemometrics in Analytical Chemistry*. En aquel entonces, hablando del método MCR-ALS, se acentuaba, ante todo, la necesidad de control y análisis efectivos de los procesos tecnológicos. Actualmente, en el campo de la investigación ambiental y ómica modernas o de la imagen hiperespectral, existen numerosos desafíos nuevos que requieren la comprensión de los componentes iniciales e intermedios que describen el sistema o la imagen estudiados. La actitud científica y la forma en que el Profesor Tauler realiza la investigación son fuente de inspiración para muchos. La Investidura como Doctor Honoris Causa al Dr Román Tauler Ferré por parte del Senado de la Universidad de Silesia de Katowice es una expresión de reconocimiento a su importante contribución al desarrollo de la quimiometría,

así como el reconocimiento del papel de la quimiometría, que esta disciplina ha desempeñado no solo en el desarrollo de la química analítica, sino también en otras disciplinas, y en el proceso de transformación de la civilización y la tecnología.

Los iniciadores de este proyecto aquí presentes: la Profa. Beata Walczak, la Profa. titular de la US Ivana Stanimirova, y yo mismo, le reiteramos al Profesor Tauler nuestras más sinceras felicitaciones. Asimismo, queremos dar las gracias muy sinceras a todos aquellos que ya no están con nosotros, pero contribuyeron a la divulgación de la idea de quimiometría, a darle su forma y fórmula actuales.

Laudation on the Occasion
of Awarding the Honorary Doctorate Degree
of the University of Silesia in Katowice
to Professor Román Tauler Ferré

Although the world changes rapidly right before our eyes, we are now allowed to participate in the special promotion ceremony of Professor Román Tauler Ferré. He was awarded the academic honorary doctorate degree by a proper resolution of the excellent Senate of the University of Silesia in Katowice. Universities award this honourable title to people of science or culture who are particularly estimable. It is a unique moment in the life of an honorary doctor and his or her family when academic university members learn about their scientific background and achievements. Every celebration of this kind is unique. This experience is due not only to the ceremony's setting but also to the honorary doctor's discernible interaction with the university community and thus established a permanent relationship. As scientists, we examine, consider, and look at the subsequent stages of their scientific career frame by frame. We look at such life records, including scientific ones, searching for ready and established patterns of attitudes and behaviour that we should imitate or even partially adapt. During this unique séance, we learn what scientific excellence is, redefine this concept and discover its various, often sophisticated elements. We design and build a new self. We, people of science, are aware

of a complex scientific machine that drives progress and facilitates an understanding of the world around us. Now, let us stop for a moment and concentrate on our Honorary Doctor, Professor Tauler, and his immediate scientific environment. The ceremony of awarding an academic degree to an honorary doctor is one of a kind lesson from which I promise that everyone will take something for themselves. It is time to start it.

Synthesis and analysis are two opposing concepts at the heart of every civilisation seeking to know and understand the world around it. From the earliest beginnings of alchemy, which today we call chemistry, its adherents were interested primarily in synthesis, that is, processes of creating matter, which was variously understood at the time, on the path of combining elementary ingredients. Hence comes the name of the discipline – chemistry – because in archaic, ancient, and medieval times, this is how it was primarily understood, that is, as the merging and blending of matter. Over the years, chemists have set themselves the goal of acquiring the ability to create new substances and increased determination to learn about the composition of hitherto unknown substances or mixtures. Therefore, in the chemist’s understanding, analysis is a process that is opposite to the synthesis process. It involves identifying individual components of complex mixtures and determining their respective proportions. It is worth noting that these two objectives are within the domain of modern analytical chemistry, in which Professor Tauler specialises. He graduated with a degree in chemistry from the University of Barcelona in Spain in 1977. In 1984, he received a PhD degree in analytical chemistry at the same university. Since the beginning of his scientific career, he has studied complex systems, that is, those in which

many states of equilibrium can be observed at the same time, and has determined their chemical speciation. In other words, such systems form multi-component mixtures of chemicals that appear or disappear with particular dynamics. The capture of changes and the unambiguous identification of chemicals present in the system is a very ambitious task, even when we study relatively simple model systems, which are pretty familiar to us. In this type of research, we see the simultaneous processes of the chemical compounding and breakdown of individual chemicals, which, as the reactions in the system progress, are gradually weakening to achieve equilibrium states finally. Perhaps this question has already arisen in the more inquisitive minds: what if we want to study processes not necessarily entirely directed, that is, planned, such as those that occur in the surrounding environment or living organisms? After all, it is impossible to understand the functioning of the system under examination if we do not fully understand the nature of its processes. So we need to effectively isolate the individual chemical components and determine the successive stages that the system is going through.

Since the 1980s, we have seen the rapid development of instrumental techniques and computers. Thus, the analysis of chemical composition becomes more precise and faster. However, increasing measuring capabilities paradoxically result in chemically important information not being directly available, and its effective discovery requires appropriate conduct and approaches to the problem. During this period, chemometrics was created to respond to the real challenges encountered at the planning stage of the experiment, its optimisation, and modelling multi-dimensional and multi-modal analytical data. In retrospect, it can

be said that chemometrics has promoted a balanced, rational approach to conducting experiments and actively supported the interpretation of their results. The three of its charismatic architects, Professor Desire Luc Massart, Professor Svante Wold, and Professor Bruce Kowalski, quickly and permanently infected with this message a large group of followers, including our honorary doctor, who were fully committed to modifying the existing state of knowledge or filling the missing fields of chemometrics. Undoubtedly, his interest in chemometrics must have been born at the stage of writing his PhD thesis. It was primarily due to fascination with systems of many equilibrium states, which required calculating their thermodynamic parameters and determining their chemical speciation. As soon as he received his doctoral degree, he went to Austria with his wife for a one-year post-doctoral internship, which probably was not an easy decision.

Along with Professor Rode, a theoretical chemist, he was developing his scientific workshop there. He returned to Barcelona, and in 1987 he obtained permanent employment at the University of Barcelona, where he conducted his research until he moved to ID \bar{E} A-CSIC in 2004. Over time, his attention became increasingly drawn to a branch of analytical chemistry emerging right before his eyes, that is, chemometrics. Seeing this as a great chance and opportunity, he went with his wife and two children to Seattle for a one-year scholarship in Professor Kowalski's research group, which at that time, together with centres in Brussels and Uppsala, was one of three recognisable centres of excellence and development of chemometrics. It was there that the now well-known MCR-ALS method (Multi-Variate Curve Resolution Alternative Least Squares) took

hape. Now it is used for understanding and chemical speciation of complex systems and analysis of multi-block or multi-modal data sets.

Let us return to the main concepts I discussed earlier, that is, synthesis and analysis, to understand better how it works. It allows you to create a unique time-lapse movie of chemical transformation, which you can freely rewind and watch in slow motion. The chemical problem, which is as complex as a thick braid, is gradually untangled to finally “reveal” the initial chemical components of the system. What happens during the subsequent iterations of the MCR-ALS method is a gradual untangling, that is, the process of analysis.

Making a chemical “braid” over time, which we can re-form based on the parameters of the model built, is, in turn, a process of synthesis. And that is how a complete model of the system under study is created, providing the basis for implementing a highly beneficial principle.

When the problem is more complex, and you do not immediately see the possibilities of solving it, you can divide it into a few smaller ones. Given the utility of the MCR-ALS method, its range of applications is extensive. According to Google Scholar data, one of the primary articles in which the MCR-ALS idea was presented received more than 1,330 citations. Interest in the method, as well as its modifications, has not faded over the years. Professor Tauler is one of the most recognisable chemometricians in the world, which translates into a very high Hirsch index, which, according to Google Scholar, is 79 with a total number of citations of 26,403. This, of course, is a measurable result of many years of his scientific work. Nevertheless, in my opinion, the most interesting thing is the chosen strategy of proceeding and the path that

has lead to this outcome. So, what increases the likelihood of scientific fulfilment the most?

These essential components are visible in our Honorary Doctor's life story. Just read carefully the accompanying reviews, for which I thank Professor Walczak, Professor Olivieri, and Professor Kvalheim.

On the one hand, the essential element is mobility, which can be said to be a permanent feature of his professional life. Despite already having benefited from two long-term study visits abroad, Professor Román Tauler Ferré often spends time in various research groups on exchanging experiences, transferring knowledge, and looking for new challenges, even in extreme regions of the Arctic Sea. These different yet close encounters with people of science, often exceptional ones, create strong scientific ties and consolidate his position. They catalyse further ideas and offer a chance to implement joint intentions or projects, including those co-financed by EU funds. The main driver of his mobility and decisions is undoubtedly an extraordinary willingness to step out of his comfort zone. Such a specific hunger for new experiences is his great asset and allows him to expand his scientific portfolio in an active way. On the other hand, Professor Tauler is heavily focused on developing and popularising the MCR-ALS method. He consistently adds new elements to its functionality and continuously improves it.

This long-standing scientific fascination and focus can be envied. No matter where the Professor is, I always see him smiling and with a lot of company. There are close colleagues around him, Anna, Sylvia, Joaquim, Carme and Stefan, his PhD students, or other scientists who are willing to spend time with him, for example, during their scientific internship or

at the conference. His immediate environment is international and culturally diverse. Such a scientific style allowed him to manage the most prestigious grant project, that is, ERC Advanced Grant, funded by the EU under the Seventh Framework Programme. He built an interdisciplinary team of determined scientists to assess the global effects of environmental and biological systems changes, employing chemometric methods and instrumental techniques used in omics research. Notably, 24 experienced scientists, seven post-doc scientists, and eight PhD students participated at various points in the five-year project. Eighty-seven publications, including 11 chapters in monographs, were published, more than a hundred presentations were delivered at international conferences, and eight PhD students defended their dissertation theses. Can such a result be achieved without a good idea for research, skilful team cooperation, and excellent coordination of work? It should be said that his integration attempts are not ad hoc and often go beyond the interests of his research group. Professor Tauler actively integrates the chemometric community as editor-in-chief of *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, published by Elsevier, editor of two editions of the four-volume *Comprehensive Chemometrics* encyclopaedia, organiser of many conferences and workshops. In his case, professional fulfilment is further strengthened by the support of his wife, three children, and close family. In my opinion, his priceless ability to achieve a balance between professional and family life is crucial for every scientist, regardless of age.

I met Professor Tauler twenty-two years ago in Antwerp when I first attended the International Conference on Chemometrics in Analytical Chemistry. At the time, the MCR-ALS method was primarily discussed,

emphasising the need for effective control and analysis of technological processes. There are many new challenges in contemporary environmental and omics research or hyperspectral imaging, which require understanding the initial and intermediate components describing the system or image under study. His scientific attitude and his way of conducting research are inspiring for many. Awarding him with the Honorary Doctorate Degree by the Senate of the University of Silesia in Katowice is an acknowledgement of Professor Tauler's significant contribution to the development of chemometrics, as well as recognition of the role of chemometrics itself, which it played not only in the development of analytical chemistry but also other disciplines, and the process of civilisational and technological transformation.

We, the project's initiators present in this hall, Professor Beata Walczak, Professor Ivana Stanimirova, and I warmly congratulate Professor Tauler. At the same time, we thank all those who left us who had contributed to promoting the idea of chemometrics, giving it today's shape and formula.

Opinie Recenzentów

Reviewers' Opinions

Recenzja

Prof. dr hab. **BEATA WALCZAK**
Uniwersytet Śląski w Katowicach
Wydział Nauk Ścisłych i Technicznych
Instytut Chemii

Review

Professor **BEATA WALCZAK**
University of Silesia in Katowice
Faculty of Science and Technology
Institute of Chemistry

Opinia na temat osiągnięć naukowych
Profesora Romána Taulera Ferré,
Kandydata do godności doktora *honoris causa*
Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach

Katowice, 12 stycznia 2022 roku

Kiedy zostałam poproszona o przygotowanie opinii o osiągnięciach naukowych Profesora Romána Taulera Ferré z Barcelony jako Kandydata do godności doktora *honoris causa* Uniwersytetu Śląskiego, przyjąłam to zadanie jako wielki honor i jednocześnie ogromną przyjemność. Powodem tego jest fakt, że znam Profesora Taulera od kilku dziesięcioleci, a nasze naukowe ścieżki biegły przez te wszystkie lata równoległe i blisko siebie, co dawało mi szczególną okazję do śledzenia Jego znakomitej kariery akademickiej. Nasze wspólne zainteresowania naukowe koncentrują się na chemometrii, a w szczególności na rozwoju i wdrażaniu metod chemometrycznych. Oboje możemy się uważać za przedstawicieli drugiego pokolenia chemometryków zaangażowanych w realizowanie celów, jakie przed międzynarodową wspólnotą chemometryczną postawili ojcowie założyciele tej nauki, Kowalski, Wold i Massart.

W roku 1977 Profesor Tauler ukończył studia chemiczne na Uniwersytecie Barcelońskim, a siedem lat później na tym samym uniwersytecie ukończył i obronił doktorat w dziedzinie chemii analitycznej. Następnie

wspinał się po kolejnych stopniach kariery akademickiej od adiunkta poprzez profesora uczelni do profesora zwyczajnego w 2003 roku. Dzięki dwu grantom, hiszpańskiemu i austriackiemu, dwukrotnie przebywał na Uniwersytecie w Innsbrucku, najpierw w 1985 roku na stypendium podoktorskim, a następnie w 1987 roku jako badacz wizytujący. W latach 1991–1992 przebywał jako profesor wizytujący na amerykańskim Uniwersytecie w Seattle. Obecnie Profesor Tauler jest zatrudniony w Instytucie Oceny Stanu Środowiska oraz Badań nad Wodą (IDAEA) w Barcelonie.

Główne osiągnięcia naukowe Profesora Taulera to opracowanie i upowszechnianie metody MCR (Multivariate Curve Resolution, dekonwolucji wielowymiarowych profili), a w szczególności algorytmu MCR-ALS. Kluczowym wkładem w tę dziedzinę o charakterze teoretycznym było wprowadzenie w latach dziewięćdziesiątych ubiegłego wieku analizy MCR zbiorów złożonych z wielu wielowymiarowych podzbiorów danych analitycznych, co spowodowało popularyzację tej metody w wyniku znacznego rozszerzenia jej spektrum zastosowań, jako że do tej pory MCR znajdowała zastosowanie jedynie do pojedynczych zbiorów danych. Inne ważne aspekty badań naukowych związanych z metodą MCR to wprowadzenie nowych restrykcji związanych ze stosowanym procesem modelowania, na przykład zasady twardego modelowania celem dopasowania modelu, ograniczenia korelacji dla celów kalibracji, a także ograniczeń odnoszących się do modeli wielowymiarowych (trój- lub wieloliniowość, interakcje czynników w modelu Tuckera), stosowanych w ramach dwuliniowego MCR. Wartością dodaną wynikającą z tych restrykcji była elastyczność, która pomogła stworzyć hybrydowe podejścia do modelowania, lepsze i bardziej uniwersalne od tych metod, z których się one wywodzą. Jeszcze

innym, teoretycznym wkładem Profesora Taulera jest badanie efektu niejednoznaczności rozwiązań dla zbiorów danych analizowanych metodą MCR oraz ocena jakości ostatecznie uzyskanych profili. W tym celu stworzone zostały takie wersje algorytmu MCR, które uwzględniają zakłócenia, aby móc odpowiednio analizować zbiory danych, w których na obserwacje nie wpływa szum biały. Ponadto Profesor Tauler rozwiązał trudny problem, polegający na ocenie współczynnika niejednoznaczności i sformułował takie propozycje, które pozwoliły oszacowywać zakres oraz lokalizację niejednoznaczności w systemach z nieograniczoną liczbą składowych.

Badania nad praktycznymi zastosowaniami MCR rozpoczęły się od miękkiego modelowania złożonych procesów biologicznych związanych z DNA lub ze strukturą białek, gdzie klasyczne zasady nie były już użyteczne. To podejście znalazło zastosowanie również do złożonych pomiarów analitycznych (takich jak chromatografia dwu- i wielowymiarowa czy też analiza hiperspektralna), ale większość badań Kandydata była poświęcona układom środowiskowym. Po pierwsze, badał On modelowanie macierzy i zestawów danych złożonych z wielu podzestawów danych środowiskowych, dla których wprowadzenie modeli wielomodalnych i podejść ważonych okazało się niezwykle pomocne. Po drugie, aktualny przełom w dziedzinie środowiskowych nauk biologicznych, czyli w obszarze, w którym Profesor Tauler był pionierem, był możliwy dzięki Jego znajomości problemów środowiskowych oraz umiejętności radzenia sobie z wielkimi ilościami zróżnicowanych danych, charakterystycznych dla współczesnej omiki. Na te badania został Mu przyznany, skądinąd wielce zasłużony, grant ERC Advanced, w którego ramach powstał teoretyczny zbiór opracowań poświęconych kompresji danych zintegrowanej

z chemiczną interpretacją tychże danych, a łączący MCR z wieloma innymi narzędziami statystycznymi.

Dorobek publikacyjny Kandydata robi wielkie wrażenie. Według Web of Science (dane z sierpnia 2021), opublikował On 445 oryginalnych artykułów, co przełożyło się na 18 401 cytowań oraz indeks Hirscha (h-index) równy 63. Baza Scopus podaje 441 artykułów i h-index 66, a baza Google Scholar podaje 5587 cytowań i h-index 78.

Oprócz licznych publikacji naukowych, Kandydat posiada na swoim koncie również znakomite osiągnięcia redaktorskie. Na szczycie tej listy znajdują się dwa wydania *Comprehensive Chemometrics. Chemical and Biochemical Data Analysis*, wielce znaczącej pracy źródłowej, opublikowanej przez wydawnictwo Elsevier (współredaktorzy: S. Brown i B. Walczak). W tomie tym znalazły się cztery rozdziały, których współautorem jest Profesor Tauler.

Kandydat jest również redaktorem naczelnym wydawanego przez Elsevier czasopisma „Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems” (CHEMOLAB) oraz redaktorem czasopisma „Environmental Toxicology and Chemistry”, wydawanego przez Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC).

W 2018 roku Profesor Tauler współredagował tom 82, w serii kompendiów „Comprehensive Analytical Chemistry”, zatytułowany *Data Analysis for Omic Sciences: Methods and Applications* i opublikowany przez wydawnictwa Wilson & Wilson oraz Elsevier, który zawiera ponadto trzy rozdziały Jego autorstwa. Jest On również autorem dwóch rozdziałów w monografiach *Data Fusion Methodology and Applications* oraz *Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*, a także

hasła w *Encyclopedia of Analytical Science* (te trzy książki opublikowało wydawnictwo Elsevier).

Profesor Tauler uczestniczył również w siedmiu projektach badawczych finansowanych przez Unię Europejską (w dwóch jako koordynator, a w dwóch innych jako indywidualny wykonawca), w 37 projektach badawczych finansowanych przez rząd Hiszpanii (często w charakterze kierownika) i w 12 projektach badawczych, finansowanych przez rząd Katalonii. Wniósł On również znaczący wkład w naukę poprzez 14 kontraktów, jakie zawarł z hiszpańskim sektorem przemysłowym.

W ciągu swojej wielce dynamicznej i naznaczonej licznymi sukcesami kariery naukowej Profesor Tauler został też laureatem licznych nagród. Wśród najważniejszych należy wymienić: Award for Achievements in Chemometrics (przyznaną Mu przez Eastern Analytical Symposium, EAS-2009), Kowalski Prize (przyznaną przez „Journal of Chemometrics” w 2009 roku), nagrodę Przewodniczącego Catalan Chemistry Society (2008–2013), Advanced Grant Award na lata 2013–2018 (przyznaną przez European Research Council, ERC) oraz Professorship Visiting Award na lata 2020–2022 (stanowisko profesora wizytującego w ramach Radboud Excellence Initiative Uniwersytetu Radboud w Nijmegen, w Holandii). Oprócz bardzo szeroko zakrojonych badań naukowych, Profesor Tauler zawsze bardzo aktywnie uczestniczył w dziedzinie edukacji i w tym zakresie posiada także posiada bardzo bogate doświadczenie oraz liczne sukcesy. Jako adiunkt i profesor uczelni na Wydziale Chemii Analitycznej Uniwersytetu Barcelońskiego (1978–2002) prowadził liczne zajęcia na studiach licencjackich, magisterskich i doktoranckich z chemii ogólnej, chemii analitycznej, analizy instrumentalnej, zaawansowanej chemii

analytycznej i chemometrii. Od 2003 roku Profesor Tauler jest zatrudniony na stanowisku badawczym jako profesor zwyczajny w Hiszpańskiej Narodowej Radzie Naukowej (CSIC) oraz nadal prowadzi regularnie zajęcia z chemometrii dla magistrantów i doktorantów Uniwersytetu Barcelońskiego, jak również okazjonalne kursy chemometrii na innych uniwersytetach, w instytucjach publicznych i prywatnych, a także na sympozjach i spotkaniach naukowych. Wśród największych osiągnięć dydaktycznych Kandydata do godności doktora *honoris causa* Uniwersytetu Śląskiego należy wymienić 26 zakończonych doktoratów oraz trzy doktoraty w przygotowaniu, których Profesor Tauler jest promotorem lub współpromotorem. Na osobną i szczególną uwagę zasługuje zaangażowanie Kandydata w dydaktykę w Instytucie Chemii Uniwersytetu Śląskiego. W maju 2010 roku przeprowadził On sześćdziesięciogodzinny cykl wykładów „Selected Topics of Chemometrics and Its Applications” dla studentów i pracowników naszego Instytutu.

Uwzględniając wyżej wymienione fakty, uważam, że Profesor Román Tauler Ferré znakomicie spełnia wszelkie wymagania zezwalające na przyznania Mu doktoratu *honoris causa* Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach, i dlatego z pełnym przekonaniem wyrażam swoje poparcie dla dopuszczenia Go do dalszych etapów procedury.

Beata Walczak

Opinion on Scientific Achievements
of Professor Román Tauler Ferré,
a Candidate to the Award of Doctor *honoris causa*
of the University of Silesia, Katowice, Poland

Katowice, January 12, 2022

When I was commissioned to prepare an opinion on scientific achievements of Professor Román Tauler Ferré from Barcelona, Spain, as a Candidate for the award of Doctor *honoris causa* of the University of Silesia in Katowice, I considered it as real privilege and great pleasure. The reason is that I have known Professor Román Tauler Ferré for several decades now and our scientific paths have run for all these years in the parallel, which gave me a unique opportunity to closely follow the development of his brilliant academic career. Scientific interests of both of us are placed in chemometrics and, more precisely, in development and applications of chemometric methods, and we can justifiably regard ourselves as second generation chemometricians involved in targeting the goals pointed out to the international chemometric community by the founding fathers of this research area in the persons of Kowalski, Wold and Massart.

In 1977, Professor Tauler graduated in chemistry from the University of Barcelona and, seven years later, at the same university, he completed and defended his PhD thesis in analytical chemistry. In due course, he has

climbed up all consecutive steps of the academic ladder leading from the postdoc position via assistant professor and associate professor to full professor in 2003. As a recipient of one Spanish and one Austrian research grant, he has stayed at the University of Innsbruck twice, first as a postdoc (in 1985) and then as a visiting research fellow (in 1987). For the period of 1991–1992, he stayed as a visiting professor at the University of Seattle, USA. Current research post of Professor Tauler is located at the Institute of Environmental Assessment and Water Research (IDAEA) in Barcelona.

The main research activity of Professor Tauler consisted in development and dissemination of the Multivariate Curve Resolution (MCR) methods and, particularly, of the MCR-ALS algorithm. Crucial theoretical progress in this field was introduction in the 1990s of the multiset analysis, which implied popularization of this method since it allowed to overcome many limitations related to application of MCR to the single data sets. Other relevant aspects of the research around MCR were introduction of new constraints linked to the modeling tasks, for example, the hard-modeling constraint for model fitting, the correlation constraint for calibration purposes, or the constraints associated with implementation of the multi-way models (trilinearity or multilinearity, Tucker factor interaction, etc.) in the bilinear MCR framework. An added value in all these constraints was flexibility that helped coming up with hybrid modeling approaches which went beyond limitations of the parent modeling tasks. Still different theoretical contributions of Professor Tauler were linked to studying the effect of uncertainty of the data sets analyzed within the framework of the MCR modelling, and to quality assessment of the final MCR solutions obtained. To this effect, the noise-weighted

versions of the MCR algorithm were devised to adequately deal with data sets where observations were not affected by white noise. Besides, a complex task was also performed of assessing ambiguity and relevant proposals were formulated on how to estimate an extent and location of ambiguity in the systems with an unlimited number of components.

Exploration of the MCR applications started with soft-modeling of complex biological processes linked to DNA or to protein structures, where classical first principles were no longer usable. This approach has also been applied to complex analytical measurements (such as hyphenated and multidimensional chromatography, or hyperspectral analysis), but much of the Candidate's research was devoted to the environmental systems. Firstly, it was devoted to modeling of environmental data tables and multisets, where introduction of multi-way models and weighed approaches was of invaluable help. Secondly, recent breakthrough arrived in the field of the environmental omics, an area in which Professor Tauler was pioneering and which was possible owing to his familiarity with environmental problems and to his ability to deal with huge and diverse data inherent of the omics studies. He has rightfully deserved an ERC advanced grant for this particular research and, under this umbrella, a theoretical corpus of meaningful information compression and interpretation has been developed, combining MCR and many other statistical tools.

The research output of the Candidate is very impressive. According to the Web of Science (as for August, 2021), it includes 445 original research papers, which translates into 18,401 citations and the h-index 63. After Scopus, these parameters are, respectively, 441 original research

papers and the h-index 66. The Google Scholar browser reports on 5,587 citations and the h-index 78.

Apart from an abundant research output in form of the original research papers, the Candidate has outstanding editorial achievements and on top of this list we find two editions of *Comprehensive Chemometrics. Chemical and Biochemical Data Analysis* as a major reference work co-edited (together with S. Brown and B. Walczak) for Elsevier. To this reference work, Professor Tauler contributed with four chapters of his own co-authorship.

He also is editor-in-chief for the Elsevier journal *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* (CHEMOLAB) and editor for the journal *Environmental Toxicology and Chemistry*, published by The Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC).

In 2018, Professor Tauler co-edited volume 82 for the handbook series “Comprehensive Analytical Chemistry,” entitled *Data Analysis for Omic Sciences: Methods and Applications* and published by Wilson & Wilson and Elsevier. Moreover, he contributed to this volume with three chapters of his own authorship. With additional two chapters, he contributed, respectively, to the books entitled *Data Fusion Methodology and Applications* and *Reference Module in Chemistry, Molecular Sciences and Chemical Engineering*, and with one entry to *Encyclopedia of Analytical Science* (all three books published by Elsevier).

Besides, Professor Tauler has contributed to seven research projects funded by the European Union (twice as project coordinator and twice as individual contractor), to 37 research projects funded by Spanish Government (many times in capacity of principal investigator), and to

12 research projects funded by the Government of Catalonia. One more area of the Candidate's scientific contribution was through 14 contracts from the Spanish industrial sector.

Among the foremost distinctions gained by Professor Tauler for his very dynamic and very successful research activity, one has to mention the Award for Achievements in Chemometrics (granted by Eastern Analytical Symposium, EAS-2009), the Kowalski Prize (granted by *Journal of Chemometrics* in 2009), prizes from the President of the Catalan Chemistry Society (granted in the years 2008–2013), the Advanced Grant Award valid for the years 2013–2018 (delivered by the European Research Council, ERC), and the Professorship Visiting Award for the years 2020–2022 (the Radboud Excellence Initiative of the Radboud University, Nijmegen, The Netherlands). Apart from a very broad spectrum of scientific activities, Professor Tauler has always been a dedicated and successful educator, with an impressive record of teaching experience and pedagogical achievement. In his capacity of assistant and associate professor at the Department of Analytical Chemistry of the University of Barcelona (1978–2002), he was carrying out numerous undergraduate, graduate and postgraduate courses in general chemistry, analytical chemistry, instrumental analysis, advanced analytical chemistry, and chemometrics. From 2003, in his capacity of full research professor at the Spanish National Research Council (CSIC), Professor Tauler was carrying out regular master and PhD courses in chemometrics at the University of Barcelona, and occasional academic courses in chemometrics at different universities, in public and private institutions, and also at scientific meetings and symposia. Among the most noteworthy educational achievements of

the Candidate to the award of the Doctor *honoris causa* of the University of Silesia in Katowice, we have to mention 26 finalized PhD theses and three PhD theses in preparation under his supervision and co-supervision. An involvement of Professor Tauler in the teaching process at the Institute of Chemistry, University of Silesia, deserves a separate and very special acknowledgement. In May 2010, he delivered a sixty-hour lecture cycle entitled “Selected Topics of Chemometrics and Its Applications,” addressed to the students and academic staff of our Institute.

On the basis of all the aforementioned facts, I would like to conclude that in my view, Professor Román Tauler Ferré meets all requirements for the award of Doctor *honoris causa* of the University of Silesia in Katowice and I give my wholehearted support to all further stages of the award procedure.

Beata Walczak

Recenzja

Profesor OLAV M. KVALHEIM
Uniwersytet w Bergen
Instytut Chemii

Review

Professor OLAV M. KVALHEIM
University of Bergen
Department of Chemistry

Ocena dorobku Romána Taulera Ferré
w związku z Jego nominacją
do tytułu doktora *honoris causa*
Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach

Bergen, 21 grudnia 2021 roku

W

ykształcenie i zatrudnienie na stanowiskach badawczych

Román Tauler Ferré (urodzony w 1955 roku) ukończył studia chemiczne w 1977 roku i otrzymał doktorat z chemii analitycznej w 1984 roku na Uniwersytecie Barcelońskim. Był adiunktem (1978–1987) i profesorem uczelni na Uniwersytecie Barcelońskim, a potem objął obecnie piastowane stanowisko profesora w Instytucie Oceny Stanu Środowiska oraz Badań nad Wodą (IDAEA) w Barcelonie. W 1985 roku Tauler spędził rok na stypendium podoktorskim na Uniwersytecie w Innsbrucku, w Austrii, gdzie powrócił w roku 1987 na staż badawczy. W latach 1991–1992 był profesorem wizytującym na Uniwersytecie w Seattle, w USA.

Praca w charakterze redaktora

Profesor Tauler od wielu lat jest redaktorem naczelnym „Journal of Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems” (Elsevier). Był również

redaktorem ważnego dzieła źródłowego *Comprehensive Chemometrics, Chemical and Biochemical Data Analysis* (Elsevier) oraz współredaktorem *Data Analysis for Omic Sciences: Methods and Applications* (Wilson & Wilson, Elsevier, tom 82, 2018, „Comprehensive Analytical Chemistry”). Ponadto Profesor Tauler jest redaktorem czasopisma „Environmental Toxicology and Chemistry” wydawanego przez Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC).

Nagrody i wyróżnienia

Achievements in Chemometrics (Eastern Analytical Symposium, 2009), Kowalski Prize od „Journal of Chemometrics” (Wiley, 2009), EU-ERC Advanced Grant award nr 320337, 2013–2018; profesor wizytujący Radboud Excellence Initiative (Radboud University Nijmegen, Holandia, 2020).

Opis badań naukowych

Román Tauler opisuje swoje główne zainteresowania badawcze jako „roz-
wój metod chemometrycznych dla celów analizy MCR zbiorów złożonych
z wielu wielowymiarowych podzbiorów danych analitycznych oraz ich
zastosowanie w chemii analitycznej i bioanalitycznej (separacja chro-
matograficzna, pomiary spektroskopowe, obrazowanie hiperspektralne),
w chemii roztworów (kinetyka i równowagi), w chemii środowiskowej,
a ostatnio również w środowiskowych naukach biologicznych i w bada-
niach toksykologicznych”.

Profesor Tauler opisuje swoje najważniejsze osiągnięcie naukowe jako „opracowanie metody wielowymiarowej dekonwolucji krzywych (MCR), która obecnie znalazła szerokie zastosowanie w chemometrii i w chemii analitycznej. Ta metoda pozwala na rozwiązanie ogólnego problemu analizy mieszanin, to znaczy, na bezpośrednie rozdzielanie złożonych mieszanin wieloskładnikowych z wykorzystaniem minimalnej liczby założeń. Rozwiązuje ona fundamentalny problem analityczny dotyczący braku selektywności pomiarów chemicznych i pozwala na separację czystych składników od ich zmieszanych i nakładających się sygnałów. Rozwiązuje ona ogólny problem analizy mieszanin w chemii analitycznej, separacji i identyfikacji źródeł zanieczyszczeń w badaniach środowiskowych oraz rozdzielania, identyfikacji i określania ilości składowych w próbkach biologicznych. Stosowanie metod MCR w analizie danych środowiskowych (narażenie na działanie czynników) i biologicznych (efekty) jest naturalną ewolucją i rozwinięciem moich wcześniejszych badań w kierunku trudniejszych problemów związanych z analizą ogromnych ilości danych (Big Data)”.

Publikacje i cytowania

Science Citations Index (SCI) podaje, że Profesor Tauler opublikował ponad 400 artykułów, które zostały zacytowane 18–19 tysięcy razy. Jego h-index wynosi 63 i wiele Jego artykułów ma bardzo dużo cytowań.

Według SCI, dziesięć najczęściej cytowanych artykułów to:

1. *Multivariate Curve Resolution applied to second order data*, R. Tauler. „Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems”, 30 (1995), 133–146. 1032 cytowania.

2. *A graphical user-friendly interface for MCR-ALS: A new tool for Multivariate Curve Resolution in MATLAB*, J. Jaumot, R. Gargallo & A. de Juan & R. Tauler. „Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems”, 76 (2005), 101–110. 839 cytowań.

3. *Selectivity, local rank, 3-way data analysis and ambiguity in Multivariate Curve Resolution*, R. Tauler, A. Smilde & B.R. Kowalski. „Journal of Chemometrics”, 9 (1995), 31–58. 815 cytowań.

4. *Multivariate Curve Resolution (MCR) from 2000: Progress in concepts and applications*, A. de Juan & R. Tauler. „Critical Reviews in Analytical Chemistry”, 36 (2006), 163–176. 490 cytowań.

5. *MCR-ALS GUI 2.0: New features and applications*, J. Jaumot, A. de Juan & R. Tauler. „Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems”, 140 (2015), 1–12. 440 cytowań.

6. *Chemometrics applied to unravel multicomponent processes and mixtures. Revisiting latest trends in multivariate resolution*, A. de Juan & R. Tauler. „Analytica Chimica Acta”, 500 (2003), 195–210. 439 cytowań.

7. *Multivariate Curve resolution applied to spectral data from multiple runs of an industrial process*, R. Tauler, B.R. Kowalski & S. Fleming. „Analytical Chemistry”, 65 (1993), 2040–2047. 406 cytowań.

8. *Multivariate Curve Resolution (MCR). Solving the mixture analysis problem*, A. de Juan, J. Jaumot & R. Tauler. „Analytical Methods”, 6 (14), (2014), 4964–4976. 303 cytowania.

9. *Combining hard- and soft-modelling to solve kinetic problems*, A. de Juan, M. Maeder, M. Martinez & R. Tauler. „Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems”, 54 (2), (2000), 123–141. 259 cytowań.

10. *Calculation of maximum and minimum band boundaries of feasible solutions for species profiles obtained by Multivariate Curve Resolution*, R. Tauler. „Journal of Chemometrics: A Journal of the Chemometrics Society”, 15 (8), (2001), 627–646. 250 cytowań.

Ocena

Kariera naukowa Profesora Taulera jest długa i produktywna. Jego osiągnięcia naukowe są imponujące, zarówno pod względem liczby publikacji, jak i ich wpływu. Głównym tematem Jego badań jest rozwój i stosowanie metod MCR. Wszystkie dziesięć najczęściej cytowanych prac skupia się na tym temacie i pokazuje Jego czołową pozycję w tej dziedzinie. Kandydat odnosił również liczne sukcesy w pozyskiwaniu grantów, otrzymał między innymi bardzo prestiżowy grant ERC Advanced od UE.

Román Tauler wypromował 26 doktorów. W latach 2008–2013 przewodniczył Catalan Chemistry Society.

Profesor Román Tauler jest znakomitym badaczem i dydaktykiem, zdecydowanie zasługuje na tytuł doktora *honoris causa* Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach.

Z poważaniem
Olav M. Kvalheim

Evaluation of Román Tauler Ferré
upon His Nomination
for the Title of Doctor *honoris causa*
of the University of Silesia in Katowice

Bergen, December 21, 2021

E ducation and Research Positions

Román Tauler Ferré (b. 1955) graduated in chemistry in 1977 and took a PhD in analytical chemistry in 1984 at the University of Barcelona. He was assistant professor (1978–1987) and associate professor (1987–2003) at the University of Barcelona before he entered his present position as professor at the Institute of Environmental Assessment and Water Research, IDAEA, Barcelona. Tauler spent one year as a postdoc at the University of Innsbruck, Austria, in 1985, and returned to the same place in 1987 as a visiting scientist. During 1991–1992, he was a visiting professor at the University of Seattle, USA.

Editorial Work

Professor Tauler has for many years been editor-in-chief of *Journal of Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* (Elsevier). He is also

editor-in-chief of the major reference work *Comprehensive Chemometrics. Chemical and Biochemical Data Analysis* (Elsevier), and co-editor of *Data Analysis for Omic Sciences: Methods and Applications* (Wilson & Wilson, Elsevier, vol. 82, 2018, “Comprehensive Analytical Chemistry”). Furthermore, Tauler is editor of the journal *Environmental Toxicology and Chemistry* from The Society of Environmental Toxicology and Chemistry (SETAC).

Awards

Achievements in Chemometrics (Eastern Analytical Symposium, 2009), Kowalski Prize from the *Journal of Chemometrics* (Wiley, 2009), recipient of the EU-ERC Advanced Grant award Nr. 320337, 2013–2018; Radboud Excellence Initiative Professorship Visiting Award (Radboud University Nijmegen, The Netherlands, 2020).

Description of Research Field

Román Tauler has described his main research interest as “the development of chemometric methods for multiway and multiset data analysis and in their applications to different fields in analytical chemistry and bioanalytical chemistry (chromatographic separations, spectroscopic measurements, hyperspectral imaging), in solution chemistry (kinetics and equilibria), in environmental chemistry, and more recently in omics sciences and toxicological studies.”

Professor Tauler describes his most important scientific contribution as “the development of the Multivariate Curve Resolution method,

which is now widely used and referenced in the chemometrics and analytical chemistry fields. This method allows solving the general mixture analysis problem, that is, the direct resolution of complex mixtures of multicomponent systems using a minimum number of assumptions. It solves the fundamental analytical problem of the lack of selectivity of chemical measurements and it allows the separation of the pure component contributions from their mixed and overlapped signals. It solves the mixture analysis general problem, in analytical chemistry, in separation and identification of contamination sources in environmental studies, and in the resolution, identification and quantitation of the constituents of biological samples. The application of the MCR methods in the analysis of environmental (exposure) and omics (effects) types of data is the natural evolution and extension of my previous research activity towards more difficult problems in the analysis of massive data (Big Data).”

Publications and Citations

Science Citations Index (SCI) shows that Professor Tauler has published more than 400 papers which have been cited 18–19 thousand times. He has the h-index of 63 and many highly cited papers.

The ten most cited in SCI are:

1. Multivariate Curve Resolution applied to second order data, R. Tauler. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 30 (1995), 133–146. 1032 citations.

2. A graphical user-friendly interface for MCR-ALS: A new tool for multivariate Curve Resolution in MATLAB, J. Jaumot, R. Gargallo, A. de Juan & R. Tauler. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 76 (2005), 101-110. 839 citations.
3. Selectivity, local rank, 3-way data analysis and ambiguity in Multivariate Curve Resolution, R. Tauler, A. Smilde & B.R. Kowalski. *Journal of Chemometrics*, 9 (1995), 31-58. 815 citations.
4. Multivariate Curve Resolution (MCR) from 2000: Progress in concepts and applications, A. de Juan & R. Tauler. *Critical Reviews in Analytical Chemistry*, 36 (2006), 163-176. 490 citations.
5. MCR-ALS GUI 2.0: New features and applications, J. Jaumot, A. de Juan & R. Tauler. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 140 (2015), 1-12. 440 citations.
6. Chemometrics applied to unravel multicomponent processes and mixtures. *Revisiting latest trends in multivariate resolution*, A. de Juan & R. Tauler. *Analytica Chimica Acta*, 500 (2003), 195-210. 439 citations.
7. Multivariate Curve Resolution applied to spectral data from multiple runs of an industrial process, R. Tauler, B.R. Kowalski & S. Fleming. *Analytical Chemistry*, 65 (1993), 2040-2047. 406 citations.
8. Multivariate Curve Resolution (MCR). Solving the mixture analysis problem, A. de Juan, J. Jaumot & R. Tauler. *Analytical Methods*, 6 (14), (2014), 4964-4976. 303 citations.
9. Combining hard- and soft-modelling to solve kinetic problems, A. de Juan, M. Maeder, M. Martinez & R. Tauler. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 54 (2), (2000), 123-141. 259 citations.

10. Calculation of maximum and minimum band boundaries of feasible solutions for species profiles obtained by Multivariate Curve Resolution, R. Tauler. *Journal of Chemometrics: A Journal of the Chemometrics Society*, 15 (8), (2001), 627–646. 250 citations.

Assessment

Professor Tauler has a long and productive research career. His scientific merits are impressive; both in terms of number of publications and their impact. His central research theme has been to develop and apply methods for Multivariate Curve Resolution. His ten most cited publications are all on this topic and prove his excellent standing in this area. Tauler has also been successful in obtaining research grants, including, the highly prestigious ERC Advanced Grant from the EU.

Román Tauler has educated 26 PhD students. He was President of the Catalan Chemistry Society during 2008–2013.

Professor Román Tauler is an outstanding researcher and educator and exceptionally well qualified for the title of an honorary doctor of the University of Silesia in Katowice.

Sincerely,
Olav M. Kvalheim

Recenzja

Profesor **ALEJANDRO C. OLIVIERI**
Narodowy Uniwersytet Rosario
Wydział Nauk Biochemicznych i Farmaceutycznych
Instytut Chemii

Review

Professor **ALEJANDRO C. OLIVIERI**
National University of Rosario
Faculty of Biochemical and Pharmaceutical Sciences
Institute of Chemistry

Rosario, 14 października 2021 roku

Prof. Ryszard Koziółek
Rektor Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach
Bankowa 12, 40-007 Katowice
Polska

Szanowny Panie Profesorze,

w odpowiedzi na Pana uprzejmą prośbę z 30 września 2021 roku przesyłam ocenę osiągnięć naukowych Profesora Romána Taulera Ferré i popieram jego nominację do tytułu doktora *honoris causa*.

Załączam pełny tekst mojej oceny. Mam nadzieję, że będzie ona przydatna do podjęcia decyzji. Jestem wdzięczny Panu oraz Senatowi Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach za okazję do wyrażenia mojej opinii na temat tak znakomitego naukowca.

Z poważaniem
dr Alejandro C. Olivieri
profesor Narodowego Uniwersytetu w Rosario
członek Narodowej Rady Badań Naukowych
Argentyna

Ocena Profesora Romána Taulera Ferré
w związku z przyznaniem doktoratu *honoris causa*
przez Uniwersytet Śląski w Katowicach

Román Tauler Ferré urodził się 20 lipca 1955 roku. Od roku 2003 jest zatrudniony na stanowisku badawczym jako profesor zwyczajny w Instytucie Oceny Stanu Środowiska oraz Badań nad Wodą (IDAEA) wchodzącym w skład Hiszpańskiej Narodowej Rady Naukowej (CSIC). Od ukończenia studiów chemicznych na Uniwersytecie Barcelońskim w 1977 roku, nieprzerwanie rozwijała się jego kariera naukowa obejmująca doktorat oraz zagraniczne stypendia i pobyty w charakterze profesora wizytującego.

Jego obecne badania najlepiej opisuje słowo „chemometria” – dyscyplina integrująca wiedzę z dziedzin chemii, statystyki, matematyki i informatyki. W szczególności Jego zainteresowania obejmują opracowanie analiz MCR zbiorów złożonych z wielu wielowymiarowych podzbiorów danych analitycznych, które znajdują szerokie zastosowanie w różnych dyscyplinach, takich jak środowiskowe nauki biologiczne, chemia środowiskowa, chemia analityczna i bioanalityczna, równowagi roztworów, kinetyka itp.

Jednym z Jego największych naukowych osiągnięć jest opracowanie modelu chemometrycznego zwanego „wielowymiarową dekonwolucją

krzywych”, znanego przede wszystkim pod swoim akronimem MCR i stosowanego powszechnie w wielu różnych dziedzinach chemii. W skrócie, metoda MCR pozwala na rozwiązanie problemu chemicznego znanego jako „ogólny problem analizy mieszanin”, który polega na rozdzielaniu złożonych mieszanin wieloskładnikowych z wykorzystaniem minimalnej liczby założeń, nawet w przypadku braku selektywności pomiarów chemicznych, i pozwala na separację czystych składników od ich zmieszanych sygnałów.

Profesor Tauler był kierownikiem różnych narodowych i międzynarodowych projektów badawczych dotyczących rozwoju i stosowania metod analizy danych środowiskowych, biologicznych oraz badania narażenia na czynniki szkodliwe i jego efektów. Był promotorem 26 prac doktorskich, jak również popularyzował i redagował czasopisma chemometryczne i ważne prace źródłowe z tej dziedziny. Jest redaktorem naczelnym prestiżowego czasopisma „Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems” wydawnictwa Elsevier.

Jak podaje baza danych Scopus, dorobek naukowy Profesora obejmuje 437 publikacji, które cytowano około 20 tysięcy razy, oraz h-index 66. Jego najczęściej cytowane artykuły są poświęcone prezentacji i zastosowaniom metody MCR w różnych dziedzinach i są cenioną literaturą dla naukowców zainteresowanych tą metodą i jej zaletami.

Profesor Tauler był odpowiedzialny za liczne projekty naukowe, również finansowane przez Unię Europejską, brał udział w ogromnej liczbie sympozjów naukowych i międzynarodowych konferencji.

Oprócz innych nagród w 2009 roku otrzymał Award for Achievements in Chemometrics przyznaną przez Eastern Analytical Symposium

oraz Kowalski Prize przyznanej przez czasopismo „Journal of Chemometrics” (Wiley).

Obok wyjątkowego dorobku naukowego, Profesor Tauler posiada również charyzmatyczną osobowość i umiejętność dobitnego przekazywania swoich idei. Należy również podkreślić jeszcze jedną ważną Jego cechę: Jego wspaniałomyślność, którą okazuje za każdym razem, gdy potrzebna jest naukowa porada. Ta wielka gotowość do dzielenia się wiedzą skutkuje również aktywnym uczestnictwem w wielu międzynarodowych kursach, podczas których Profesor Tauler nauczał chemików wysoce użytecznych narzędzi matematycznych.

Na podstawie powyższych rozważań, zdecydowanie rekomenduję przyznanie Profesorowi Románowi Taulerowi Ferré doktoratu *honoris causa*.

Alejandro C. Olivieri

Rosario, October 14, 2021

Prof. Ryszard Koziółek
Rector of the University of Silesia in Katowice
Bankowa 12, 40-007 Katowice
Poland

Dear Profesor Koziółek,

In response to your kind letter of September 30, 2021, I am reporting an assessment on the scientific achievements of Professor Román Tauler Ferré to support his nomination for the title of Doctor *honoris causa*.

Please find below the full text of the assessment. I trust it will be useful for your considerations.

I am grateful to you and the Senate of the University of Silesia in Katowice for giving me the opportunity to provide my opinion on such a distinguished scientist.

Yours sincerely,

Dr. Alejandro C. Olivieri

Professor, National University of Rosario
Research Fellow, National Research Council
Argentina

Assessment of Professor Román Tauler Ferré
for an Honorary Degree
granted by University of Silesia in Katowice

Román Tauler Ferré was born on July 20, 1955. Since 2003, he is Research Full Professor at the Institute of Environmental Assessment and Water Research of the Spanish National Research Council. Since his graduation in chemistry from the University of Barcelona in 1977, he has displayed a continuous career which includes the PhD and international postdoctoral and visiting professor positions.

His current research lines are best described by the word “chemometrics” – a discipline integrating knowledge of chemistry, statistics, mathematics and computer science. Specifically, his interests include the development of the so-called multiway and multiset models for data analysis, which find a wide range of applications in various disciplines, such as the omic sciences, environmental chemistry, analytical and bioanalytical chemistry, solution equilibria and kinetics, etc.

One of his most important scientific achievements is the development of the chemometric model named Multivariate Curve Resolution, best known by its acronym MCR, which is widely employed in many different chemistry fields. Briefly, the MCR method allows one to solve a chemical problem universally known as “the general mixture analysis problem,”

which involves the resolution of complex mixtures of multicomponent systems using a minimum number of assumptions, even under lack of selectivity in the chemical measurements, allowing for the separation of pure component contributions from their mixed signals.

Professor Tauler has led different national and international research projects in the development and application of methods for the analysis of data from environmental and omics origins, and in the investigation of the exposure and effects of environmental stressors. He supervised 26 PhD theses and promoted and edited chemometrics journals and major reference works in this field. He is the editor-in-chief of the prestigious journal *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* from Elsevier.

His impressive scientific record includes, according to the data base Scopus, 437 publications with ca. 20,000 citations and the h-index of 66. His most cited papers were devoted to presenting and applying the MCR method in various application fields, and constitute the literature of choice for scientists interested in the method and its power.

He was responsible for numerous scientific projects, including funding from the European Union, and participated in a large number of scientific meetings and international conferences.

Among other prizes, he received the Award for Achievements in Chemometrics from the Eastern Analytical Symposium in 2009, and the Kowalski Prize from the *Journal of Chemometrics* (Wiley) in 2009.

Beyond his outstanding scientific record, Professor Tauler is distinguished by his charismatic personality and the emphasis he always puts when delivering his ideas. It is also worth emphasizing another salient aspect: his generosity, displayed any time scientific advice is required,

and reinforced by his active participation in many international courses where he contributed by teaching highly useful mathematical tools for chemists.

Based on the above considerations, I highly recommend Professor Román Tauler Ferré for the award of the title of Doctor *honoris causa*.

Alejandro C. Olivieri

Przemowa Laureata
Laureate address

Jego Magnificencjo,
Znakomite Władze Uniwersytetu, Szanowni Profesorowie,
Drodzy Recenzenci, Pani Profesor Walczak, Panie Profesorze Olivieri,
Panie Profesorze Kvalheim,
Szanowni Państwo,
Bliscy i Przyjaciele,

chciałbym zacząć od podziękowania Jego Magnificencji Rektorowi oraz Radzie Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach za uhonorowanie mnie tytułem doktora *honoris causa*. Moje przemówienie będzie krótkie. Zaprezentuję jedynie przegląd swojej kariery naukowej od czasu uzyskania doktoratu w 1984 roku.

Moja ewolucja jako badacza przede wszystkim koncentruje się na wysiłkach skierowanych na rozwój i wdrażanie nowych metod chemo-metrycznych, które znajdują zastosowanie w chemii analitycznej, chemii roztworów, chemii środowiskowej i ostatnio również w środowiskowych naukach biologicznych. Przez ponad trzydzieści lat pracowałem nad zintegrowaniem tych dyscyplin naukowych, starałem się zbudować między

nimi mosty. Pokróćce przedstawię najważniejsze etapy swojej kariery naukowej.

Doktorat, 1977–1984

Badania naukowe rozpocząłem w 1977 roku wraz z podjęciem studiów magisterskich, a następnie doktoranckich na Wydziale Chemii Analitycznej Uniwersytetu Barcelońskiego (UB). Moim promotorem był Profesor Enric Casassas, wybitny kataloński naukowiec zajmujący się chemią fizyczną i analityczną, Przewodniczący Instytutu Studiów Katalońskich, Narodowej Akademii Nauk Katalonii oraz zaangażowany działacz na rzecz języka i kultury katalońskiej. W doktoracie badałem tworzenie zmieszanych ligandowych kompleksowych związków metali w roztworach za pomocą elektroanalitycznych metod potencjometrycznych. Specjalizowałem się w eksperymentalnym i numerycznym obliczaniu parametrów termodynamicznych i w chemicznej specjacji układów, w których występuje wiele stanów równowagi, łącznie z jednoczesnym tworzeniem binarnych i zmieszanych ligandowych kompleksowych związków metali w roztworach.

Stypendium podoktorskie w Innsbrucku, Austria, 1984–1985

Po ukończeniu doktoratu, w 1984 roku uzyskałem stypendium podoktorskie w Institut für Anorganische und Analytische Chemie Uniwersytetu w Innsbrucku, w Austrii. Moim mentorem był tam Profesor Bernhard

Rode, chemik teoretyczny z szerokim zakresem naukowych zainteresowań, który chciał badać innowacyjne zastosowania ESR, NMR i innych rodzajów spektroskopii dla celów identyfikacji parametrów strukturalnych i termodynamicznych kompleksowych związków metali w roztworach oraz skorelować je z wynikami obliczeń numerycznych uzyskanymi podczas badania tych samych układów w ramach chemii kwantowej. Wraz z Clarą, moją żoną, która jest również tutaj obecna, bardzo miło wspominamy nasz pobyt w Innsbrucku pośród Alp Tyrolskich. Oprócz pracy naukowej, poświęciliśmy czas na wędrowki górskie oraz narciarstwo zjazdowe i biegowe, a także nawiązaliśmy wiele serdecznych przyjaźni z poznanymi tam osobami.

Uniwersytet Barceloński, 1985–1992

Po powrocie na Uniwersytet Barceloński objąłem w 1987 roku bezterminowo stanowisko profesora uczelni na Wydziale Chemii Analitycznej Uniwersytetu Barcelońskiego. Od tego momentu aż do roku 1992 moje badania stopniowo ewoluowały od metod eksperymentalnych i obliczeniowych w chemii analitycznej (równowagi chemiczne i kinetyka) w kierunku chemometrii, która wówczas dynamicznie się rozwijała w związku z szerokim zastosowaniem komputerów w laboratoriach chemicznych. Moje badania bazowały na wcześniejszych pracach z Innsbrucka i skupiały się na rozwoju alternatywnych metod analizy czynnikowej na potrzeby badania wielu stanów równowagi w wieloskładnikowych układach analitycznych i bioanalitycznych.

Badacz wizytujący w Center for Process Analytical Chemistry,
Seattle, USA, 1992

W 1992 roku kolejny raz otrzymałem roczny urlop naukowy, który spędziłem w Center for Process Analytical Chemistry Uniwersytetu Waszyngtońskiego w Seattle. Byłem tam badaczem wizytującym i członkiem grupy badawczej kierowanej przez Profesora Bruce'a Kowalskiego, będącego wówczas sławnym pionierem i popularyzatorem chemometrii. W ramach tej grupy nawiązałem bardzo dobre relacje naukowe i osobiste z wieloma specjalistami, wśród nich byli między innymi dr Age Smilde, dr Barry Wise, dr Yondong Wang, dr Karl Booksh. Stali się oni później bardzo wpływowymi naukowcami w rozwijającej się dziedzinie chemometrii. Gdy wraz z żoną przenieśliśmy się do Seattle, mieliśmy już dwoje dzieci, Mateu i Helenę. Bardzo nam się tam podobało, zachwycali nas wspaniałe krajobrazy Puget Sound, Mount Rainier w Górach Kaskadowych czy też półwyspu Olympic. Była to dla nas świetna okazja do biwakowania i górskich wędrówek po Północno-Zachodnim Wybrzeżu Stanów Zjednoczonych. Moje zaangażowanie w prace chemometrycznej grupy Kowalskiego przekonało mnie do kontynuowania badań w tym obszarze oraz umożliwiło mi dalszą współpracę międzynarodową oraz uznanie w świecie nauki. To właśnie wtedy na podstawie mojej wcześniejszej wiedzy z zakresu chemii analitycznej i chemii roztworów, a także z powodu pilnej potrzeby rozwijania odpowiednich metod analizy danych w tych dziedzinach, opracowałem metodę MCR-ALS, która stopniowo zyskała popularność jako jedna z uznanych metod chemometrycznych pozwalająca na bezpośrednie rozdzielanie złożonych mieszanin

wieloskładnikowych z wykorzystaniem minimalnej liczby założeń. To właśnie podczas pobytu w Seattle opisałem możliwość stosowania metody MCR-ALS do analizy danych o strukturze wieloblokowej czy wielomodalnej, wprowadzającej nowe restrikcje pozwalające na wieloliniowe modelowanie danych chemicznych.

Jeśli chodzi o MCR-ALS, termin łączy w sobie dwa koncepty. Z jednej strony, równoległe z wielowymiarowymi metodami kalibracji wprowadzonymi w chemii analitycznej w opozycji do wówczas w użyciu tradycyjnych jednowymiarowych metod kalibracji, Bruce Kowalski zasugerował mi termin Multivariate Curve Resolution (wielowymiarowa dekonwolucja krzywych), w skrócie MCR, zamiast dotychczas stosowanego terminu automodelująca dekonwolucja krzywych. Z drugiej strony po powrocie do Barcelony dodaliśmy termin Alternating Least Squares (algorytm naprzemiennych najmniejszych kwadratów), który był używany przez różne środowiska zajmujące się obliczeniami, między innymi przez grupę Profesora Massarta z Université Libre de Bruxelles, z którą również miałem bardzo dobre relacje i współpracowałem w ramach różnych projektów europejskich i programów wymiany doktorantów. W końcu metoda ta została nazwana Multivariate Curve Resolution Alternating Least Squares, w skrócie MCR-ALS.

Uniwersytet Barceloński, 1993–2003

W ciągu następnej dekady (1993–2003) prowadziłem intensywną działalność badawczą na Uniwersytecie Barcelońskim, rozszerzając zastosowania opracowanej metody na nowe typy zagadnień chemicznych, takie jak

analiza spektralna i elektroanalityczne badanie (bio)molekuł w roztworach oraz analiza złożonych mieszanin chemicznych metodami chromatografii dwuwymiarowej czy też analizy hiperspektralnej. W 1994 roku Instytut Studiów Katalońskich przyznał mi nagrodę Martí Franqués właśnie za prace nad rozwojem chemometrycznych metod MCR. Wówczas, wspólnie z Profesorem Casassasem oraz innymi kolegami i koleżankami, przede wszystkim z dr Anną de Juan, tworzyliśmy również chemometryczną grupę badawczą i udało się nam wprowadzić chemometrię do programów studiów licencjackich, magisterskich i doktoranckich na naszym uniwersytecie i umocnić jej pozycję. Wspólnie z innymi badaczami i badaczkami oraz grupami badawczymi na uniwersytetach hiszpańskich i zagranicznych pracowaliśmy na rzecz propagowania chemometrii w Hiszpanii, w Europie oraz na całym świecie. Mając na uwadze ten cel, uczestniczyliśmy w kilku finansowanych przez UE i obejmujących współpracę międzynarodową projektach związanych ze standaryzacją i wdrażaniem metod chemometrycznych (w programie SMT: Standardy, Materiały i Testowanie). Był to dla mnie również okres intensywnego życia rodzinnego. Urodziła się nasza kolejna córka, Gemma, zajmowaliśmy się trójką starszych dzieci, które dorastały, a my się starzeliśmy.

IDAEA-CSIC, od 2004

Nowy okres zaawansowanej już kariery naukowej rozpoczął się w 2003 roku wraz z objęciem przeze mnie stanowiska badawczego jako profesor tytularny w CSIC (CSIC to Narodowa Hiszpańska Rada Naukowa, największa instytucja badawcza w Hiszpanii), gdzie jestem zatrudniony

w Instytucie Oceny Stanu Środowiska oraz Badań nad Wodą, IDAEA, znajdującym się również w Barcelonie. W tym nowym miejscu pracy nawiązałem interdyscyplinarne relacje z badaczami aktywnymi w dziedzinie nauk o środowisku. Wśród nich są dr Damià Barceló, dr Silvia Lacorte, dr Joan Grimalt, dr Antoni Ginebreda, dr Carlos Barata, dr Benjami Piña oraz inni, z którymi współpracowałem w ramach tej instytucji naukowej. Od tego czasu moje badania skupiają się na zastosowaniu metod chemometrycznych do problemów związanych ze środowiskiem i z globalnymi zmianami, takich jak monitorowanie stanu środowiska, modelowanie i rozdzielanie źródeł zanieczyszczeń w powietrzu i wodach powierzchniowych, a ostatnio, jak już wspominałem, na ocenie efektów oraz ryzyka zagrożeń środowiskowych wpływających na genomowe, metabolomiczne, lipidomiczne i proteomiczne profile organizmów biologicznych. Jedną z bardzo ekscytujących inicjatyw związanych z moimi badaniami w tym obszarze była możliwość uczestniczenia w projektach badawczych dotyczących środowiska oraz globalnych zmian. W jednym z nich brałem udział w 2007 roku. Pobrane z Oceanu Arktycznego próbki wody i lodu analizowaliśmy pod kątem obecności organicznych polutantów, które zostały uwolnione do środowiska na średnich szerokościach geograficznych, a następnie dotarły na bieguny poprzez cyrkulację atmosferyczną. Zebrane tam dane wykorzystałem do chemometrycznego i geograficznego modelowania parametrów wody oceanicznej i zmian zaobserwowanych w ramach tego projektu.

Moje badania i osiągnięcia w dziedzinie chemometrii zostały docenione na arenie międzynarodowej i uhonorowane, między innymi, Kowalski's Prize od czasopisma „Journal of Chemometrics” wydawnictwa Wiley

oraz Award for Achievements in Chemometrics przyznaną przez Eastern Analytical Symposium w 2009 roku w USA. Uczestniczyłem również w kilku krajowych oraz unijnych programach oraz kontraktach związanych przede wszystkim z badaniami środowiska. W 2013 roku otrzymałem prestiżowy grant ERC Advanced na wdrażanie chemometrycznych metod w środowiskowych naukach biologicznych. Podczas pięcioletniej realizacji tego grantu udało się nam skonsolidować grupę badawczą Chemometrics for Environmental Omics w Instytucie IDAEA-CSIC.

W tych latach poświęcałem również dużo czasu na promocję i redagowanie międzynarodowych czasopism chemometrycznych, przede wszystkim od 2008 roku jako redaktor naczelny „Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems” (wydawnictwa Elsevier) oraz jako współredaktor jednej z najważniejszych publikacji z tej dziedziny zatytułowanej *Comprehensive Chemometrics. Chemical and Biochemical Data Analysis* (również wydawnictwa Elsevier), którego pierwsze wydanie ukazało się w 2009 roku, a drugie w 2020 roku. Chciałbym również wspomnieć o swoim zaangażowaniu w Catalan Chemistry Society, któremu przewodniczyłem w latach 2008–2013, oraz o swoim aktualnym pobycie w charakterze profesora wizytującego na Uniwersytecie Radboud w Nijmegen, w Holandii, w ramach Excellence Initiative Professorship Visiting Award.

Słowo końcowe

Nie chciałem kończyć tej mowy bez wyrażenia wdzięczności wszystkim osobom, które ze mną blisko współpracowały, a szczególnie moim dwudziestu siedmiu doktorantom, których nazwisk nie mogę tu wymienić

ze względu na charakter przemówienia. Na podziękowania zasługują również moi współpracownicy, dr Anna de Juan z Uniwersytetu Barcelońskiego, dr Silvia Lacorte, dr Joaquim Jaumot, dr Carme Bedia i dr Stefan Platikanov z grupy badawczej w Instytucie IDAEA-CSIC oraz wielu innych współpracowników i badaczy wizytujących z zagranicy. Chciałbym szczególnie serdecznie podziękować mojej rodzinie i przyjaciołom za wsparcie oraz cierpliwość okazane mi przez te wszystkie lata mojej intensywnej pracy.

Na koniec chciałbym również wyrazić moją wielką wdzięczność dla koleżanek i kolegi z Uniwersytetu Śląskiego w Katowicach, Profesorów Beaty Walczak, Michała Daszykowskiego oraz Ivany Stanimirovej, którzy pomyśleli o mnie jako o kandydacie do tego zaszczytnego tytułu i wystąpili z wnioskiem o jego przyznanie przez Uniwersytet Śląski w Katowicach. To moja druga wizyta na Uniwersytecie Śląskim. W maju 2010 roku prowadziłem w Katowicach kurs chemometrii i, podobnie jak dzisiaj w Państwa towarzystwie, czułem się tutaj świetnie. Obecna wizyta zbiega się ze schyłkiem, jak chcemy wierzyć, pandemii COVID-19, mamy więc to szczęście, że możemy ponownie podjąć zwykłe, codzienne aktywności. Niestety w tym samym czasie trwa niepojęta wojna w sąsiedniej Ukrainie, wojna która budzi tak wielkie przerażenie i wywołuje ból w całym narodzie, w rodzinach, również w Polkach i Polakach, dotkniętych toczącym się tak blisko konfliktem i jego konsekwencjami.

Dziękuję bardzo za uwagę.

Romà Tauler Ferré

Rector Magnificus,
Distinguished University Authorities, Esteemed Professors,
Dear Reviewers, Professor Beata Walczak, Professor Alejandro Olivieri,
Professor Olav Kvalheim,
Ladies and Gentlemen,
Family and Friends,

First of all, I would like to thank the Rector and the Governing Board of the University of Silesia in Katowice for giving me this high distinction of Doctor *honoris causa*. My speech will be short. I will only give a review of my research career since I finished my PhD in 1984.

This research evolution principally concerns my efforts for the development and application of new chemometric methods and their application in analytical chemistry, solution chemistry, environmental chemistry and, more recently, in the environmental omics field. During these more than thirty years of work, I have tried to integrate and establish bridges between these different scientific disciplines. I will explain briefly the most relevant features of this research career.

PhD period, 1977–1984

My research activity began in 1977 when I started my master and then pursued my PhD studies at the Department of Analytical Chemistry of the University of Barcelona (UB), under the supervision of Professor Enric Casassas, who was an eminent scientist in physical and analytical chemistry in Catalonia, and also the President of the Institute of Catalan Studies, the National Academy of Sciences in Catalonia, and also a strong promoter of the Catalan language and culture. In my PhD thesis, I studied the formation of mixed ligand metal complexes in solution using potentiometric electroanalytical methods. I specialized in the experimental and numerical computation of thermodynamic parameters and in the chemical speciation of multiequilibria systems, including the simultaneous formation of binary and mixed-ligand metal complexes in solution.

Postdoctoral research stay in Innsbruck, Austria, 1984–1985

Upon the completion my PhD in 1984, I was awarded with a postdoctoral stay at the Institute für Anorganische und Analytische Chemie of the University of Innsbruck, in Austria, with Professor Dr. Bernhard Rode, a theoretical chemist who had a broad scientific perspective and wanted to explore innovative uses of ESR, NMR and other spectroscopies, for the determination of structural and thermodynamic parameters of metal complexes in solution, and correlate them with quantum chemistry computational numerical results obtained in the study of the same systems. Together with my wife, Clara, who is also present here today, we were

enjoying very much our stay in the city of Innsbruck in the middle of the Tyrolean Alps, where – apart from my research work – we were delighting in *wandern, skiing and langlaufen*, and the good friendship of the people we meet there.

University of Barcelona, 1985–1992

After my return to the University of Barcelona, I got a permanent position as Associate Professor in the Department of Analytical Chemistry of the University of Barcelona in 1987. From this point until 1992, my research work evolved gradually from experimental and computational methods in solution chemistry (chemical equilibria and kinetics) to chemometrics, which was then an emerging field because of the widespread use of computers in the chemistry laboratories. My research was focused on the development of alternative factor analysis methods to investigate multiequilibria in multicomponent analytical and bioanalytical systems, using different spectroscopic methods, following my previous work in Innsbruck.

Visiting Scientist at the Center for Process Analytical Chemistry, Seattle, USA, 1992

In 1992, I was again awarded with a one-year sabbatical leave to the Center for Process Analytical Chemistry in the University of Washington, in Seattle, as a visiting scientist in the chemometrics research group led by Professor Dr. Bruce Kowalski, who was at that time a well-known pioneer

and a promoter of chemometrics. In his research group, I established very good scientific and personal relationships with several researchers in the field, like Dr. Age Smilde, Dr. Barry Wise, Dr. Yondong Wang, Dr. Karl Booksh and others, who were afterwards very influential in the development of the chemometrics field. When my wife and I moved to Seattle, we already had two children, Mateu and Helena, and we were enjoying very much our stay in Seattle in the magnificent scenario of the Puget Sound, Mount Rainier in the North Cascades and Olympic Peninsula, hiking and camping around the Northwest of the USA. My stay in the Chemometrics Kowalski's group convinced me to continue working in this field and facilitated my international cooperation and recognition. It was then, on the basis of my previous expertise and knowledge on solution and analytical chemistry, and as a consequence of the urgent need for the development of appropriate data analysis methods in these fields, that I was developing the Multivariate Curve Resolution Alternating Least Squares (MCR-ALS) method, which has evolved as one of the preferred methods in chemometrics for the direct investigation and resolution of complex multicomponent mixture systems using a minimum number of assumptions. It was during my research stay in Seattle that I extended the possibility to perform multiset and multiway data analysis with the MCR-ALS method, introducing the implementation of new constraints which allowed the multilinear modelling of chemical data.

In relation to MCR-ALS, this term merged two concepts. On the one hand, in parallel to the multivariate calibration methods already introduced in analytical chemistry in contraposition to the traditional univariate calibration methods used at that time, Bruce Kowalski suggested

that I choose the term of Multivariate Curve Resolution, or shortly MCR, instead of using self-modelling curve resolution, as it was referred until then. On the other hand, when I was back in Barcelona, we added Alternating Least Squares, which was a term being used in different computational environments, including Professor Massart's group at the Free University of Brussels, with whom I also had very good relations and cooperated in the frame of different European projects and PhD students exchange programs. This was finally named Multivariate Curve Resolution Alternating Least Squares, or shorter, MCR-ALS method.

University of Barcelona, 1993–2003

In the following approximately ten years (1993–2003) of intense activity in the University of Barcelona, I was extending the use of this method to analyze other type of chemical problems, including the spectroanalytical and electroanalytical study of (bio)molecules in solution, and the analysis of complex chemical mixtures by hyphenated chromatographic methods and by hyperspectral imaging. In 1994, I was awarded with the Martí Franqués prize from the Institute of Catalan Studies, precisely for my work developing Multivariate Curve Resolution chemometric methods. Also, during these years at the University, together with Professor Casassas and other colleagues, especially with Dr. Anna de Juan, we were forming the research group of Chemometrics, and we achieved the introduction and consolidation of the chemometrics field in the undergraduate, graduate and PhD curricula of this University. And, together with other colleagues and research groups from other Universities in Spain and other

countries, we were working for the promotion and spread of chemometrics in Spain, in Europe and across the world. In this direction, we participated in several EU funded international cooperation projects related with the standardization and application of chemometric methods (in the Standards, Materials and Testing, SMT program). These were years of a very intense family life, with our newest daughter, Gemma, taking care of the three children we already had, who were growing up, and we were also getting older.

IDAEA-CSIC, from 2004

A new period of my senior scientific career started in 2003, as a full CSIC Research Professor (CSIC is the Spanish National Research Council, the largest research institution in Spain), working at the Institute for Environmental Assessment and Water Research, IDAEA, also in Barcelona. In this new working environment, I established interdisciplinary relationships with scientists working in the environmental field, among others Dr. Damià Barceló, Dr. Silvia Lacorte, Dr. Joan Grimalt, Dr. Antoni Ginebreda, Dr. Carlos Barata, Dr. Benjami Piña, and others, with whom I cooperated in the frame of this scientific institution. Since then, I have been focusing my research activity on the application of chemometric methods to environmental and global change type of problems, such as environmental monitoring, modelling and apportionment of pollution sources in surface waters and air, and more recently, as said before, on the evaluation of the effects and risks of environmental hazards on the genomic, metabonomic, lipidomic and proteomic profiles of biological organisms.

One of the very exciting initiatives associated with my work in this research environment was the possibility to participate in environmental and global change research projects, such as collecting water and ice samples from the Arctic Ocean in 2007, subsequently analyzing them for the presence of organic pollutants which were released at intermediate latitudes and arrived to the poles through atmospheric circulation, and collecting data that I used to perform chemometrics and geographical (mapping) modelling of the ocean water parameters and changes observed during these campaigns.

My research activities and achievements in the chemometrics field were also internationally recognized with, for instance, the Kowalski's Prize from the *Wiley Journal of Chemometrics*, or with the Award for Achievements in Chemometrics from the Eastern Analytical Symposium in the USA in 2009. I have been participating in several national and EU research projects and contracts, especially related to the environmental sector. And in 2013, I was awarded with the prestigious Advanced Research Grant of the European Research Council to apply chemometrics for the environmental omics field for the period of five years, which allowed the consolidation of the Chemometrics for Environmental Omics research group in the IDAEA-CSIC Institute.

During these years, I also devoted a significant part of my working time to the promotion and edition of international journals of chemometrics, especially as editor-in-chief of the *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* (Elsevier journal), since 2008, and also as a coeditor of the major reference work: *Comprehensive Chemometrics. Chemical and Biochemical Data Analysis* (Elsevier), whose first edition was released in

2009 and second edition in 2020. I would also like to mention my involvement with the Catalan Chemistry Society, of which I was the President in the years 2008–2013, and my present work in the Radboud University of Nijmegen, The Netherlands, through its Excellence Initiative Professorship Visiting Award.

Final words

I do not want to finish my speech without addressing my gratitude to all the people who have been working with me closely, especially to the 27 PhD students I supervised, whose names I cannot list here for the sake of brevity of this speech, and also to my coworkers, Dr. Anna de Juan from the University of Barcelona, Dr. Silvia Lacorte, Dr. Joaquim Jaumot, Dr. Carme Bedia and Dr. Stefan Platikanov from my research group in the IDAEA-CSIC Institute, many other research collaborators and visiting researchers from different countries. In particular, my sincere gratitude goes to all my family and friends for their encouragement and patience during all those years of intense activity.

And finally, also, I want to express my profound appreciation to my colleagues from University of Silesia in Katowice, Professors Beata Walczak, Michał Daszykowski, and Ivana Stanimirova, specifically for thinking of me as a candidate for this honorable title and for proposing me for this high distinction conferred by this University. This is my second time here, in May 2010, I was teaching a chemometrics course and as it is happening today, I appreciate very much my visit here, with you, in Katowice. This is coinciding with what seems to be the end of the covid pandemic,

which fortunately allows us to reinitiate our regular, present-day activities. However, unfortunately, it is also coinciding with this incomprehensible war in the neighboring Ukraine, which is causing so much horror and pain to the people, families and to you also here in Poland, because of its proximity and consequences.

Thank you very much for your attention.

Romà Tauler Ferré

Curriculum vitae

Profesora

Romána Taulera Ferré

Curriculum vitae

of Professor

Román Tauler Ferré

Profesor Román Tauler uzyskał doktorat z chemii analitycznej na Uniwersytecie Barcelońskim w 1984 roku. Był profesorem uczelni na Uniwersytecie Barcelońskim do 2003 roku, a następnie został zatrudniony na stanowisku badawczym jako profesor CSIC w Instytucie Oceny Stanu Środowiska oraz Badań nad Wodą (IDAEA, Barcelona). Swoje pierwsze stypendium po doktoracie odbył na Uniwersytecie w Innsbrucku (Austria) w 1985 roku, a w 1992 roku był badaczem wizytującym w Center for Process Analytical Chemistry Uniwersytetu Waszyngtońskiego w Seattle (USA). Jest redaktorem naczelnym czasopisma „Journal of Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems” oraz głównym współredaktorem ważnej pracy źródłowej *Comprehensive Chemometrics. Chemical and Biochemical Data Analysis* (Elsevier, wydania 1 i 2). Za swoje osiągnięcia w dziedzinie chemometrii został wielokrotnie nagrodzony (między innymi w 2009 roku otrzymał Award for Achievements in Chemometrics od Eastern Analytical Symposium oraz, w tym samym roku, Kowalski Prize od czasopisma „Journal of Chemometrics” wydawanego przez Wiley). Profesor Tauler był ponadto przewodniczącym Catalan Chemistry Society oraz otrzymał finansowany przez UE grant ERC

Advanced nr. 320337, 2013–2018, przeznaczony na wdrażanie narzędzi chemometrycznych w środowiskowych naukach biologicznych. Román Tauler opublikował ponad 440 artykułów naukowych, które były cytowane ponad 26 tysięcy razy. Google Scholar podaje (dane z lutego 2022 roku), że Jego indeks Hirscha (h-index) wynosi 79 (47 od 2017 roku). Profesor Tauler opublikował również 60 rozdziałów w monografiach naukowych i zajmuje 43 miejsce na liście 102 767 naukowców aktywnych w dziedzinie chemii analitycznej w rankingu World's Top 2% Scientists Uniwersytetu Stanforda (2021). W rankingu obejmującym wszystkie dyscypliny naukowe zajmuje On miejsce 9158. Wypromował 23 doktorów, cztery kolejne doktoraty są w przygotowaniu. Jego zainteresowania naukowe koncentrują się na chemometrii, a przede wszystkim na rozwoju metod MCR (wielowymiarowej dekonwolucji krzywych) i ich zastosowaniach praktycznych w środowiskowych naukach biologicznych, naukach o środowisku, chemii analitycznej i bioanalitycznej oraz chemii roztworów. Obecnie (2021–2022) Szacowny Kandydat jest profesorem wizytującym na Uniwersytecie Radboud w Nijmegen (Holandia) w ramach Radboud Excellence Initiative.

Professor Román Tauler obtained his PhD in analytical chemistry from the University of Barcelona in 1984. He was Associate Professor of the University of Barcelona until 2003 and since that year, he has been CSIC Research Professor at the Institute of Environmental Assessment and Water Studies (IDAEA, Barcelona). He did his first postdoc at the University of Innsbruck (Austria) in 1985 and later he was visiting researcher at the Center for Process Analytical Chemistry of the University of Washington in Seattle (USA) in 1992. He is the chief editor of *Journal of Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* and chief coeditor of the major reference work entitled *Comprehensive Chemometrics. Chemical and Biochemical Data Analysis* (Elsevier, 1st and 2nd editions). He has been awarded for his achievements in chemometrics and received numerous prizes (e.g., Award for Achievements in Chemometrics granted by Eastern Analytical Symposium, 2009; Kowalski Prize from the *Journal of Chemometrics*, Wiley, 2009). Professor Tauler has been the President of the Catalan Chemistry Society and received the Eu-ERC Advanced Grant award Nr. 320337, 2013–2018, to implement chemometric tools for the omics environmental field. Román Tauler has published more than 440 research

publications with more than 26,000 citations and, according to Google Scholar (February 2022), he has an h-index 79 (h-index 47 since 2017). Professor Tauler has also published 60 book chapters and is number 43 of the 102,767 researchers in the subdiscipline of analytical chemistry in the World's Top 2% Scientists list of Stanford University (2021), and 9,158 in the general ranking of all scientific fields worldwide. He has supervised 23 PhD theses and four more are in preparation. His research interests are in chemometrics, especially in the development of Multivariate Curve Resolution (MCR) methods and in their application to omic sciences, environmental sciences, analytical and bioanalytical chemistry and Solution Chemistry. At present, our esteemed Candidate is the recipient of the Radboud Excellence Initiative Professorship Award at the Radboud University of Nijmegen (The Netherlands), 2021–2022.

Spis treści Índice Contents

<i>Ryszard Koziółek</i>	9	Wstęp
	15	Exordio
	21	Introduction
<i>Michał Daszykowski</i>	29	Laudacja
	37	Laudatio
	46	Laudation
Opinie Recenzentów • Reviewers' Opinions		
<i>Beata Walczak</i>	59	Recenzja
	65	Review
<i>Olav M. Kvalheim</i>	73	Recenzja
	78	Review
<i>Alejandro C. Olivieri</i>	85	Recenzja
	89	Review
<i>Román Tauler Ferré</i>	95	Przemowa Laureata
	104	Laureate address
<hr/>	115	<i>Curriculum vitae</i> Profesora Romána Taulera Ferré
	117	<i>Curriculum vitae</i> of Professor Román Tauler Ferré

Redakcja tekstów w języku polskim i angielskim
Gabriela Marszołek

Projekt okładki
Łukasz Kliś

Korekta
Adriana Szaforz

Redakcja techniczna i łamanie
Anna U. Piłśniak

Redaktor inicjujący
Michał Kompała

Copyright © 2022 by Wydawnictwo Uniwersytetu Śląskiego
Wszelkie prawa zastrzeżone

ISBN 978-83-226-4232-0 (wersja drukowana)

ISBN 978-83-226-4233-7 (wersja elektroniczna)

Román Tauler Ferré : Doctor honoris causa Universitatis Silesiensis.
Wydanie I - Katowice : Wydawnictwo Uniwersytetu Śląskiego, 2022

Wydawca
Wydawnictwo Uniwersytetu Śląskiego
ul. Bankowa 12 B, 40-007 Katowice
e-mail: wydawnictwo@us.edu.pl

www.wydawnictwo.us.edu.pl

Wydanie I. Ark. druk. 7,75. Ark. wyd. 4,5. Papier środka Munken Pure 120 g vol. 1,13,
papier okładki Munken Pure 300 g
Druk i oprawa Volumina.pl Daniel Krzanowski, ul. Księcia Witolda 7-9, 71-063 Szczecin

