



Ocena dorobku naukowo-dydaktycznego oraz popularyzatorskiego i organizacyjnego w związku z postępowaniem habilitacyjnym

dr. inż. Tomasza Żoka

Na przedłożoną do oceny dokumentację do postępowania habilitacyjnego składają się:

- Kopia dyplomu doktorskiego.
- Autoreferat.
- Wykaz osiągnięć naukowych.
- Oświadczenia współautorskie.
- Kopie publikacji składających się na osiągnięcie naukowe.

Charakterystyka dorobku naukowego Habilitanta

Habilitant po uzyskaniu stopnia doktora opublikował łącznie 14 oryginalnych artykułów naukowych, w czasopiśmie z listy JCR. Spośród tych 14 publikacji siedem (publikacje oznaczone w autoreferacie jako od A1 do A7) zostało przez niego zaliczonych do osiągnięcia habilitacyjnego zatytułowanego „Metody obliczeniowe do analizy niekanonicznych struktur kwasów nukleinowych”. Łączny współczynnik wpływu (impakt faktor, IF), w momencie składania wniosku habilitacyjnego, publikacji Habilitanta wynosił, według bazy Web of Science, 121,297, z tego współczynnik wpływu cyklu prac habilitacyjnych to 49,818. Liczba wszystkich cytowań w bazie WoS wynosi 495 (bez autocytowań 415). Jego indeks Hirscha, według bazy Web of Science wynosi 10.

Tematyka badań naukowych Habilitanta mieści się w dyscyplinie naukowej informatyka, głównie w jej składowej, bioinformatyce, w specjalności bioinformatyka strukturalna. Głównym kierunkiem prac przedłożonych jako osiągnięcie habilitacyjne, jest zastosowanie metod bioinformatycznych do badania struktur niekanonicznych DNA i RNA. Przez niekanoniczne struktury DNA i RNA Habilitant rozumie przede wszystkim kwadrupleksy – struktury/polimery zbudowane z

ułożonych równolegle lub przeciw-równolegle czterech nici RNA lub DNA, a także tetrazy – ich części składowe złożone z utrzymywanych w swoim sąsiedztwie wiązaniami czwórek nukleotydów. Drugi typ struktur zaliczanych przez Habilitanta do niekanonicznych to pseudowęzły w RNA (struktury w zwykle długich polimerach RNA, które związane są z powstawaniem wiązań/oddziaływań pomiędzy odległymi od siebie rybonukleotydami, niemogące być bezpośrednio reprezentowane w klasycznej notacji nawiasowo - kropkowej). Sześć spośród siedmiu prac Habilitanta zaliczonych do osiągnięcia Habilitacyjnego ma w swoim obszarze badawczym te dwa typy struktur biocząsteczek. W tematyce prac A1-A7 występują także inne nurty, analiza struktury RNA z wykorzystaniem danych wysokoprzepustowego, chemicznego próbkowania oraz techniki analiz struktury RNA z wykorzystaniem różnych konwencji katów torsyjnych.

Publikacje A1-A7 wchodzące w skład osiągnięcia habilitacyjnego należy uznać z spójne tematycznie a obszar badań habilitanta za bardzo żywy naukowo, ważny dla rozwoju bioinformatyki, bioinformatyki strukturalnej, biologii molekularnej i wielu zastosowań w medycynie czy biotechnologii. Habilitant w swoich pracach wiąże bardzo współczesne metody obliczeniowe z technikami informatycznymi oraz z danymi z eksperymentów biologii molekularnej.

Bardziej szczegółową ocenę dorobku Habilitanta można przeprowadzić przez omówienie zawartości poszczególnych artykułów wchodzących w skład osiągnięcia habilitacyjnego, a także przez omówienie pozostałych publikacji Habilitanta po doktoracie, niezaliczonych do osiągnięcia habilitacyjnego.

Praca A1, BioCommons: a robust Java library for RNA structural bioinformatics, T. Zok, Bioinformatics, 2021, jest krótką notatką ("Applications Note") w bardzo renomowanym czasopiśmie naukowym Bioinformatics. Mimo bardzo zwięzłej formy, przedstawia złożony system bioinformatyczny, który autor rozwijał przez wiele lat. Publikacja ta jest także uzupełniona znacznie dłuższym suplementem, gdzie metody i wyniki są omówione szerzej. BioCommons jest aplikacją w środowisku Java gromadzącą w sobie wiele narzędzi analizy struktur RNA. Biblioteka implementuje wszystkie stosowane obecnie konwencje kodowania i zapisu danych dotyczących struktur kwasów RNA, PDB, mmCIF, koduje i odczytuje nazewnictwo atomów, reszt, a także rozpoznaje formaty rekordów i nagłówek baz PDB i mmCIF. Dla konwersji formatów danych oraz dla wyszukiwania danych implementuje zaawansowane algorytmy optymalizacji kombinatorycznej. Narzędzie BioCommons umożliwia również dokładną analizę struktury drugorzędowej kwasów RNA przez zastosowanie metody geometrycznej wyodrębniania kanonicznych par zasad. Możliwe jest kodowanie i wyszukiwanie pseudowęzłów w strukturze drugorzędowej RNA, z wykorzystaniem metody programowania dynamicznego lub z wykorzystaniem heurystyk. System analiz oferowany przez narzędzie BioCommons jest bardzo elastyczny i wszechstronny.

W pracy A2, RNATHOR – fast, accurate normalization, visualization and statistical analysis of RNA probing data resolved by capillary electrophoresis. J. Gumna, T. Zok, K. Figurski, K. Pachulska-Wieczorek, M. Szachniuk. PLoS One, 2020, autorzy przedstawiają algorytmikę oraz narzędzie do analizy/wykorzystania danych wysokoprzepustowego, chemicznego próbkowania struktury RNA dla poprawy jakości przewidywania drugo i trzeciorzędowych struktur polimerów RNA. Uzyskane wyniki mają szczególne znaczenie dla długich łańcuchów RNA, dla których obecne/wcześniejsze metody przewidywania struktur nie dają jeszcze zadowalających wyników. Istnieje szereg technik eksperymentalnych chemicznego i enzymatycznego sondowania struktury RNA (SHAPE, DMS, CE,

NGS) oraz kompatybilne metody obliczeniowe. Metodyka automatyzacji obliczeń oraz opracowane narzędzie sieciowe RNAuthor jest cennym i interesującym uzupełnieniem istniejących algorytmów i narzędzi. Wykorzystuje i normalizuje dane o reaktywności łańcucha RNA, posiada funkcjonalność wizualizacji, analiz statystycznych oraz porównywania danych.

W pracy A3, *New models and algorithms for RNA pseudoknot order assignment*, T. Zok, J. Badura, S. Swat, K. Figurski, M. Popena, M. Antczak, *International Journal of Applied Mathematics and Computer Science*, 2020, autorzy wprowadzają formalizm grafowy do problem oznaczanego skrótem POA (problem przypisania rzędu pseudowęzłów, pseudoknot order assignemnt problem). Problem POA został wprowadzony przez tych samych autorów we wcześniejszej publikacji. Parametr (charakterystyka topologiczna), zdefiniowany jako rząd pseudowęzłów może być użyteczny przy analizie i ocenie struktury długich/złożonych łańcuchów RNA. Przy użyciu wprowadzonego modelu grafowego, problem POA formułują następnie jako problem programowania całkowitoliczbowego. Wprowadza/proponuje się także heurystykę do rozwiązania tego samego problemu, aby uniknąć bariery złożoności obliczeniowej. Wydajność obu podejść jest porównywana z wynikami współczesnych algorytmów które do tej pory były użyteczne w rozwiązaniu omawianego problemu. Dokonuje się podsumowania wyników eksperymentów obliczeniowych, które oceniają różne metody obliczeniowe pod kątem jakości klasyfikacji na reprezentatywnym zbiorze danych pochodzących z repozytorium struktur 3D RNA. Wykazuje się skuteczność i efektywność opracowanego podejścia.

W pracy A4, *Topology-based classification of tetrads and quadruplex structures*, M. Popena, J. Miskiewicz, J. Sarzynska, T. Zok, M. Szachniuk, *Bioinformatics*, 2020, autorzy zaproponowali nowy, konsekwentny system klasyfikacji i oznaczania struktur tetrad oraz kwadrupleksów w kwasach nukleinowych. W opublikowanych badaniach przeanalizowali tetrad i kwadrupleksy zawarte w cząsteczkach kwasów nukleinowych zdeponowanych w bazie danych struktur białkowych PDB. Zaproponowali użycie topologii ich struktury drugorzędowej dla zdefiniowania jej diagramu graficznego oraz opracowali nowe reprezentacje w postaci kropkowo nawiasowej. Zdefiniowana, oryginalna klasyfikacja analizowanych motywów biocząsteczkowych ma zastosowanie zarówno dla struktur kanonicznych jak i niekanonicznych. Dla klasyfikacji tetrad autorzy wprowadzili nazwę/skrót „ONZ” kierując się podobieństwem do kształtów liter przekrojów poprzecznych struktur. W oparciu o nową klasyfikację motywów opracowali w konsekwencji metodę, która automatycznie rozpoznaje rodzaje tetrad i kwadrupleksów występujących jako struktury jednocząsteczkowe. Na koniec przeprowadzili analizę statystyczną nowo zdefiniowanych motywów w danych eksperymentalnych.

W pracy A5, *EITetrado: a tool for identification and classification of tetrads and quadruplexes*, T. Zok, M. Popena, M. Szachniuk, *BMC Bioinformatics*, 2020, autorzy przedstawili system oprogramowania, EITetrado, opracowany na podstawie poprzedniego artykułu A4, służące do identyfikacji kwadrupleksów oraz tetrad w strukturach kwasów nukleinowych i do klasyfikacji tych struktur zgodnie z wprowadzonymi w pracy A4 konwencjami. Kategoryzacja, zgodnie z A4, opiera się na topologii struktury drugorzędowej kwadrupleksów i ich tetrad składowych. Wspiera analizę motywów kanonicznych i niekanonicznych. Oprócz wyznaczenia odpowiedniej klasy, oprogramowanie EITetrado potrafi zapisać strukturę drugorzędową motywów w standardzie nawiasowo – kropkowym oraz narysować graficzne reprezentacje struktury drugorzędowej, które odzwierciedlają specyfikę topologii struktury kwadrupleksu.

W pracy A6 RNA-Puzzles toolkit: a computational resource of RNA 3D structure benchmark datasets, structure manipulation and evaluation tools, M. Magnus, M. Antczak, T. Zok, J. Wiedemann, P. Lukasiak, Y. Cao, J.M. Bujnicki, E. Westhof, M. Szachniuk, Z. Miao, Nucleic Acids Research, 2020, autorzy nawiązują do ogólnościowego, znanego konkursu naukowego RNA-Puzzles do porównywania wyników przewidywania struktury trzeciorzędowej RNA przez różne algorytmy. Opracowali algorytmikę oraz oprogramowanie, które pozwala na analizę, interpretację oraz wizualizację wyników działania poszczególnych algorytmów, wyliczanie macierzy odległości pomiędzy modelami, przedstawianie rankingów modeli. Dla wizualizacji używa się różnych narzędzi takich jak diagramy strukturalne oraz mapy ciepła.

W pracy A7, RNApdbee 2.0: multifunctional tool for RNA structure annotation. T. Zok, M. Antczak, M. Zurkowski, M. Popena, J. Blazewicz, R.W. Adamiak, M. Szachniuk. Nucleic Acids Research, 2018, autorzy opisują wersję 2.0 serwera sieciowego RNApdbee opracowanego przez tych samych autorów w 2014 roku. Oryginalna wersja serwera RNApdbee pozwalała na wyznaczenie struktury drugorzędowej biomolekuł RNA na podstawie plików współrzędnych atomowych z bazy PDB. Nowa wersja 2.0 zawiera nowe algorytmy rozpoznawania i klasyfikacji złożonych pseudowęzłów w dużych strukturach RNA. Zawiera także nowe narzędzia wizualizacji, w tym rzutowanie struktury drugorzędowej RNA na strukturę przestrzenną. Pozwala także na lepszą identyfikację i anotację motywów, pni, pętli, wybrzuszeń i innych, w porównaniu do poprzedniej wersji. Obie wersje serwisów www, RNApdbee i RNApdbee 2.0, cieszą się dużym zainteresowaniem badaczy, każda z publikacji była cytowana ponad 50 razy.

Należy także stwierdzić, że poważny jest pozostały dorobek naukowy Habilitanta, niezaliczony do osiągnięcia habilitacyjnego. Warto zauważyć, że obejmuje różne nurty. Pierwszy z nich, bioinformatyczny, jest zbieżny tematycznie z tematyką osiągnięcia habilitacyjnego, dotyczy modelowania polimerów RNA i DNA. W nurcie tym znajdują się prace w bardzo wysoko notowanych czasopismach naukowych Bioinformatics oraz RNA. Bardzo interesujące są jednak także inne nurty, reprezentowane przez publikacje w takich czasopismach jak Plasma Physics and Controlled Fusion (2021), Foundations of Computing and Decision Sciences (2020), Journal of Grid Computing (2018). Są to bardzo dobre czasopisma naukowe o międzynarodowej renomie.

Ocena dorobku naukowego Habilitanta

Praca A1 Habilitanta jest pracą samodzielną. Pozostałe prace osiągnięcia habilitacyjnego, A2-A7 są wieloautorskie. W pracach A3 oraz A5 Habilitant jest pierwszym autorem. Udział Habilitanta w badaniach naukowych związanych z pracami A1-A7 dokumentują oświadczenia współautorskie, a także dodatkowe wyjaśnienia złożone już w trakcie procesu recenzyjnego. Prace Habilitanta A1-A7 zebrane jako osiągnięcie naukowe, mimo pewnych niedostatków w precyzyjnym określeniu wkładu Habilitanta, bez wątpliwości dokumentują dojrzałość jego warsztatu naukowego w informatyce technicznej, bioinformatyce, a także wiedzę w biologii molekularnej i biochemii. Pewne wątpliwości może też budzić dość duże przekrywanie się publikacji A7 z tematyką doktoratu Habilitanta. Jednak nawet ignorując tę publikację, należy ilościowo docenić pozostałe prace A1-A6 oraz pozytywnie ocenić ich poziom naukowy.

Oceniając oryginalność osiągnięć naukowych Habilitanta należy wziąć pod uwagę, że omawiane powyżej artykuły naukowe ukazały się w prestiżowych i znanych czasopismach naukowych. Dokumentują wyniki naukowe obejmujące aspekty interdyscyplinarne, różnorodne zagadnienia obliczeniowe i modelowanie matematyczne, szereg platform eksperymentalnych i pomiarowych, a także odpowiedni warsztat technik informatycznych. Zawierają wiele oryginalnych koncepcji i podejść metodologicznych, które w znaczący sposób przyczyniają się do rozwijania bioinformatycznych aspektów badań naukowych związanych z modelowaniem struktur biomolekuł. Były także wielokrotnie cytowane.

Bardzo warta podkreślenia jest także różnorodność tematyki badań naukowych uprawianych przez Habilitanta reprezentowana przez publikacje w zakresie technik informatycznych w obliczeniach wielkoskalowych, zastosowanie metod modelowania i metod informatycznych w fizyce. Prace te dokumentują także potencjał Habilitanta nie tylko do prowadzenia szerokich i interdyscyplinarnych badań, lecz także do współpracy naukowej w różnorodnych, międzynarodowych zespołach badawczych.

Bardzo solidna i w mojej opinii przekraczająca zwyczajowe wymagania dla stopnia doktora habilitowanego jest także charakterystyka bibliometryczna jego dorobku publikacyjnego.

Dorobek dydaktyczny, organizacyjny i popularyzatorski

Dokumentacja postępowania habilitacyjnego świadczy także o posiadaniu przez Habilitanta znaczącego dorobku dydaktycznego, organizacyjnego i popularyzatorskiego.

Wielokrotnie był promotorem prac magisterskich i licencjackich. Przygotowywał i prowadził zajęcia dydaktyczne z różnych przedmiotów w formie wykładów na Politechnice Poznańskiej.

Współpracował z wieloma instytucjami naukowymi w kraju i za granicą. Odbывał staże i wizyty naukowe. Brał udział w projektach naukowych w kraju i za granicą.

Otrzymywał liczne nagrody i wyróżnienia.

Podsumowanie i konkluzja oceny

Z całości dokumentacji wynika, że Habilitant jest autorem dzieła naukowego w postaci cyklu publikacji załączonych do dokumentacji, ponadto posiada dodatkowy bardzo szeroki dorobek naukowy, które dokumentują dojrzałość i różnorodność jego warsztatu naukowego. Posiada bardzo wartościowe i różnorodne osiągnięcia naukowe, które są znane i doceniane w międzynarodowym środowisku naukowym. Jego dorobek publikacyjny charakteryzuje się bardzo wysokimi wskaźnikami bibliometrycznymi. Posiada także dorobek dydaktyczny, który dokumentuje jego kompetencje akademickie, a także bardzo bogaty dorobek organizacyjny i popularyzatorski.

Stwierdzam, że dorobek naukowy, dydaktyczny, organizacyjny i popularyzatorski dr. Tomasza Żoka spełnia wymogi stawiane przy nadawaniu stopnia doktora habilitowanego i odnosząc się do Ustawy o Stopniach Naukowych i Tytułach Naukowych stawiam wniosek o dopuszczenie do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

