

Prof. dr hab. inż. Marek Kurzyński
Politechnika Wroclawska
Wydział Informatyki i Telekomunikacji
Katedra Systemów i Sieci Komputerowych



Wrocław, 7.02.2022 r.

OCENA

osiągnięcia naukowego oraz istotnej aktywności naukowej Pana dr. inż. Tomasza Żoka w związku z prowadzonym postępowaniem w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego.

Tytuł osiągnięcia naukowego: *Metody obliczeniowe do analizy niekanonicznych struktur kwasów nukleinowych.*

I. Podstawa recenzji

Przedmiotem oceny jest osiągnięcie naukowe oraz aktywność naukowa dr. Tomasza Żoka w związku z postępowaniem habilitacyjnym w dziedzinie nauk inżynieryjno-technicznych i dyscyplinie informatyka techniczna i telekomunikacja, wszczętym decyzją Rady Doskonałości Naukowej z dnia 29 listopada 2021 roku, w związku z uchwałą Rady Dyscypliny Informatyka Techniczna i Telekomunikacja w Politechnice Poznańskiej z dnia 14 grudnia 2021 r.

Podstawą opracowania opinii jest pismo Pana Dziekana Wydziału Informatyki i Telekomunikacji Pol. Poznańskiej informujące o powołaniu mnie w skład komisji w postępowaniu habilitacyjnym dr. T. Żoka i powierzeniu funkcji recenzenta.

Opinia została opracowana na podstawie otrzymanej dokumentacji zawierającej wniosek Habilitanta, kopię dyplomu uzyskania stopnia doktora n.t., autoreferat, informację o aktywności naukowej i współpracy z otoczeniem społeczno-gospodarczym oraz odbitki publikacji składających się na osiągnięcie naukowe wraz ze stosownymi oświadczeniami współautorów. Dodatkowo, na wniosek recenzenta, dr T. Żok uzupełnił dokumentację o informację o własnym merytorycznym wkładzie w cykl publikacji stanowiący osiągnięcie habilitacyjne.

Ocena osiągnięcia naukowego oraz istotnej aktywności naukowej została sporządzona zgodnie z Art. 219 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. – *Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* (tekst jednolity Dz. U. z 2020 r., poz. 85) zwanej dalej Ustawą oraz według szczegółowych kryteriów i zaleceń opublikowanych na stronie internetowej RDN.

II. Dane ogólne o Kandydacie

Pan dr Tomasz Żok ukończył z wyróżnieniem studia II stopnia na kierunku informatyka na Wydziale Informatyki Pol. Poznańskiej w 2011 r. W tym samym roku został zatrudniony jako analityk, a później jako starszy analityk systemów komputerowych w Poznańskim

Centrum Superkomputerowo-Sieciowym. W 2018 r. uzyskał stopień doktora nauk technicznych w dyscyplinie informatyka na podstawie rozprawy pt. *Algorithmic Aspects of RNA Structure Similarity Analysis* na Wydziale Informatyki Pol. Poznańskiej. Praca została wyróżniona i dodatkowo uhonorowana Nagrodą Miasta Poznania. Od 2018 roku do chwili obecnej jest zatrudniony na stanowisku adiunkta w Instytucie Informatyki Pol. Poznańskiej.

III. Charakterystyka oraz ocena osiągnięcia naukowego

Jako osiągnięcie naukowe dr Tomasz Żok przedstawił cykl 7 publikacji zatytułowany *Metody obliczeniowe do analizy niekanonicznych struktur kwasów nukleinowych*. Wśród publikacji 1 praca jest samodzielną, a w pozostałych liczba współautorów wynosi odpowiednio trzech, pięciu (2 prace), sześciu, siedmiu i dziesięciu. „Wieloautorstwo” prac nie dziwi, gdyż mamy do czynienia z problematyką interdyscyplinarną, która oprócz (bio)informatyków, do których zalicza się Habilitant, angażuje między innymi specjalistów z zakresu biologii molekularnej i komórkowej. Podkreślić należy, że w trzech pracach współautorskich dr Żok jest wymieniony na pierwszym miejscu, co oznacza, że jest tzw. autorem wiodącym, czyli wnoszącym kluczowy wkład i pełniącym rolę inspirującą w powstaniu publikacji. We wszystkich pozostałych pracach Habilitant na liście autorów jest usytuowany na pozycji wyższej, niż wynikałoby to ze zwyczajowej kolejności alfabetycznej, co także świadczy o znaczącym udziale w ich powstaniu. Przedstawione okoliczności znalazły formalne potwierdzenie w oświadczeniach współautorów oraz samego Habilitanta, które dość precyzyjnie określają udział poszczególnych autorów. Indywidualny wkład dr. Żoka w każdą z współautorskich publikacji cyklu został przedstawiony poniżej przy omawianiu i charakterystyce ich zawartości merytorycznej.

Na przedstawiony cykl składają się następujące prace:

1. BioCommons: a robust Java library for RNA structural bioinformatics. T. Żok. Bioinformatics. 2021.

Wskaźniki publikacji: IF 2020: 6,937, punkty MNiSW / MEiN 2019+: 200

Struktury biomolekularne posiadają różne reprezentacje i występują w różnych formatach, co często powoduje ich niekompatybilność z wymogami programów do analizy danych, a tym samym znacząco utrudnia tworzenie narzędzi bioinformatycznych ukierunkowanych na strukturę. Autor opracował bibliotekę BioCommons, która łączy funkcje i struktury danych przydatne dla bioinformatyków. Składa się z ośmiu pakietów głównych i czterech pomocniczych zawierających łącznie prawie 400 klas i ponad 3000 metod. Biblioteka posiada parser danych PDB i mmCIF. Wykrywa aliasy nazw atomów, uwzględnia brakujące residua w analizie i zbiera dane z nagłówka. Parser wykorzystuje również rozmyty detektor typu residuum na podstawie zawartości ciężkich atomów. Biblioteka zawiera konwerter pomiędzy formatami plików PDB i mmCIF. Ze względu na limity PDB, tj. pięć cyfr dla liczby atomów i cztery cyfry dla liczby pozostałości, BioCommons stosuje inteligentne rozwiązywanie konfliktów. Biblioteka implementuje heurystykę First-Fit, co znaczy, że nawet jeśli struktura mmCIF musi zostać podzielona na kilka struktur PDB, biblioteka zapewnia, że wszystkie stykające się łańcuchy są przechowywane razem. Zestaw funkcji do analizy danych 3D obejmuje funkcje związane

z reprezentacją trygonometryczną w przestrzeni kąta skręcania – BioCommons obsługuje wszystkie kąty skrętu białek i kwasów nukleinowych. BioCommons może mapować szczegóły konstrukcyjne na poziomie 2D i 3D. Przykładowo, można przeanalizować współrzędne 3D, aby znaleźć interesujący element konstrukcyjny w reprezentacji 2D, a następnie wrócić do jego modelu 3D. BioCommons umożliwia również dokładną analizę struktury drugorzędowej kwasów nukleinowych, głównie poprzez implementację geometrycznej metody wyodrębniania kanonicznych par zasad. Dzięki notacji kropkowo-nawiasowej BioCommons może kodować pseudowęzły dowolnej kolejności.

BioCommons był rozwijany przez Habilitanta od wielu lat. Jego komponenty powstały podczas pracy autora nad projektami z pakietu RNApolis, a funkcjonalność biblioteki miała praktyczne zastosowanie do analizy kątów torsyjnych, mapowania danych 3D i 2D, obsługi pseudowęzłów, przebudowy bazy jąder i wielu innych problemów bioinformatyki strukturalnej. Kod źródłowy biblioteki jest swobodnie dostępny, a skompilowane wersje są wdrażane w Maven Central Repository.

2. RNATHOR – fast, accurate normalization, visualization and statistical analysis of RNA probing data resolved by capillary electrophoresis. J. Gumna, **T. Żok**, K. Figurski, K. Pachulska-Wieczorek, M. Szachniuk. PLoS One. 2020. 15(10):e0239287.

Wskaźniki publikacji: IF 2020: 3,240, punkty MNIŚW / MEiN 2019+: 100

Wkład dr. Żoka: udział w projektowaniu systemu RNATHOR na podstawie specyfikacji wymagań, zarządzanie prototypem narzędzia RNATHOR i rozwinięcie go do wersji końcowej (m.in. poprawienie stabilności i zaimplementowanie brakujących funkcji). wprowadzenie istotnych zmian zasugerowanych przez recenzentów a nieobecnych w początkowym projekcie (obsługa formatu QuShape, możliwość przewidywania struktury 2D RNA, dedykowana wizualizacja struktury 2D RNA z zaznaczeniem poziomu reaktywności), aktywny udział w testowaniu aplikacji na każdym etapie powstawania projektu.

W badaniach nad strukturą RNA ważną poznawczą rolę odgrywa eksperyment zwany próbkowaniem chemicznym, w którym wykorzystuje się związki wchodzące w reakcję z nukleotydami w sposób zależny od lokalnej struktury RNA. Aby otrzymać wiarygodne wyniki, należy ściśle przestrzegać określonego protokołu takiego eksperymentu definiującego sekwencję przetwarzania. Pomaga w tym aplikacja webowa RNATHOR, współpracowana przez Habilitanta i będąca przedmiotem pracy, która w sposób wygodny dla użytkownika integruje wszystkie etapy takiego przetwarzania. Wpierw uzyskane dane podlegają walidacji weryfikującej ich spójność. Następnie usuwa się dane niepewne – do wyboru jest metoda ręczna lub automatyczna bazująca na heurystyce wynikającej z wiedzy i doświadczenia zespołu eksperymentatorów. Dalej, następuje eliminacja danych odstających z wykorzystaniem analizy statystycznej i na koniec wyznacza się tzw. znormalizowaną reaktywność, pozwalającą na przewidywanie struktury drugorzędowej RNA. Wygodna graficzna prezentacja wyników ułatwia korzystanie z aplikacji RNATHOR, która dodatkowo umożliwia analizę statystyczną w eksperymentalnych badaniach porównawczych.

3. 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. 30(2):315–324

Wskaźniki publikacji: IF 2020: 1,417, punkty MNiSW / MEiN 2019+: 100

Wkład dr. Żoka: Zainicjowanie projektu poprzez sformułowanie problemu badawczego w dziedzinie teorii grafów, zaproponowanie rozwiązania heurystycznego opartego o model problemu kolorowania grafu, udział i koordynowanie prac implementacyjnych oraz badań testowych, udział w bieżących dyskusjach na każdym etapie projektu dotyczących algorytmów MIS i MILP, przygotowanie zbioru danych do wykonania eksperymentów obliczeniowych, udział w tworzeniu manuskryptu i ilustracji.

Pseudowęzeł to specyficzny motyw struktury RNA, który ma duży wpływ na ogólny kształt i stabilność cząsteczki. Występuje, gdy nukleotydy dwóch rozłącznych jednoniciowych fragmentów tego samego łańcucha, oddzielonych fragmentem helikalnym, oddziałują ze sobą i tworzą pary zasad. Pseudowęzły charakteryzują się dużym zróżnicowaniem topologicznym, a ich systematyczny opis wciąż stanowi wyzwanie. W poprzednich pracach współautorstwa Habilitanta wprowadzono porządek pseudowęzłów, którego miarą jest nowy współczynnik reprezentujący złożoność topologiczną pseudowęzłowej struktury RNA. Jednoznaczna identyfikacja pseudowęzłów i określenie ich kolejności w strukturze RNA nie jest łatwym zagadnieniem, dlatego od momentu wprowadzenia pojęcia porządku pseudowęzła autorzy pracowali nad jego rozwiązaniem proponując metody wyznaczania rzędu pseudowęzła zgodnie z mechanizmami kontrolującymi proces biologiczny prowadzący do ich powstania w cząsteczce. W pracy przedstawiono nowy model problemu przypisywania kolejności pseudowęzłów oparty na kolorowaniu grafów. Zaproponowano wyspecjalizowaną heurystykę działającą na opracowanym modelu oraz alternatywny algorytm bazujący na programowaniu całkowitoliczbowym. Skuteczność obu podejść jest podobna i porównywalna z najlepszymi dotychczas stosowanymi algorytmami, co wykazują wyniki eksperymentalnych badań porównawczych oceniających analizowane algorytmy pod względem jakości klasyfikacji na reprezentatywnym zestawie danych pochodzących z nierzędantnego repozytorium struktur 3D RNA.

4. Topology-based classification of tetrads and quadruplex structures. M. Popena, J. Miskiewicz, J. Sarzynska, **T. Zok**, M. Szachniuk. *Bioinformatics*. 2020. 36(4):1129–1134

Wskaźniki publikacji: IF 2020: 6,937, punkty MNiSW / MEiN 2019+: 200

Wkład dr. Żoka: udział w dyskusjach na temat wizualizacji kwadrupleksów, które przyczyniły się do podjęcia badań przedstawionych w pracy, zaimplementowanie sposobu klasyfikacji kwadrupleksów unimolekularnych ustalonego w wyniku dyskusji, wykonanie eksperymentów obliczeniowych na wszystkich znanych strukturach DNA, RNA i ich hybrydach, przygotowanie zbiorczego opracowania wyników i dokonanie obliczeń statystycznych, udział w pisaniu manuskryptu i przygotowaniu ilustracji.

Kwadrupleksy, czyli niekanoniczne czteroniciowe struktury, są w kręgu zainteresowania badaczy z różnych bio-dyscyplin. Ze względu na specyficzną budowę te trzeciorzędowe motywy biorą udział w różnych procesach biologicznych. Stanowią

również obiecujące cele terapeutyczne w wielu strategiach opracowywania leków, w tym w leczeniu chorób przeciwnowotworowych i neurologicznych. Wyjątkowość i różnorodność ich form sprawia, że kwadrupleksy wykazują ogromny potencjał w nowych zastosowaniach biologicznych. Istniejące podejścia do analizy kwadrupleksów opierają się na cechach sekwencji lub struktury 3D i dotyczą wyłącznie motywów kanonicznych.

W pracy autorzy przeanalizowali tetradę i kwadrupleksy zawarte w cząsteczkach kwasów nukleinowych zdeponowanych w Protein Data Bank. Skupiając się na topologii ich struktury drugorzędowej, dostosowali jej diagram graficzny i zaproponowali nowe reprezentacje nawiasów i łuków. Zdefiniowana została nowatorska klasyfikacja tych motywów, która może obsługiwać zarówno przypadki kanoniczne, jak i niekanoniczne, zwana ONZ od kształtów, jakie powstają przez prześledzenie interakcji w tetradzie. Klasyfikacja ONZ dla tetrad i dla kwadrupleksów to nowatorska metoda opisu tych złożonych struktur czteroniciowych. Jako jedyna uwzględnia informacje o interakcjach niekanonicznych pomiędzy nukleotydami tworzącymi tetradę. Dzięki temu ONZ pozwala pogrupować kwadrupleksy wg podobieństwa w topologii struktury drugorzędowej. W oparciu o tę nową taksonomię wdrożono metodę, która automatycznie rozpoznaje typy tetrad i kwadrupleksów występujących jako struktury jednocząsteczkowe. Na koniec przeprowadzona została analiza statystyczna tych motywów znalezionych w eksperymentalnie określonych strukturach kwasów nukleinowych w odniesieniu do nowej klasyfikacji.

5. EITetrado: a tool for identification and classification of tetrads and quadruplexes. T. Żok, M. Popenda, M. Szachniuk. BMC Bioinformatics. 2020. 21(1):40

Wskaźniki publikacji: IF 2020: 3,169, punkty MNiSW / MEiN 2019+: 100

Wkład dr. Żoka: przygotowanie narzędzia obliczeniowego EITetrado, zaprojektowanie i zaimplementowanie algorytmu umożliwiającego rozszerzenie klasyfikacji kwadrupleksów uni- na bi- i tetramolekularne, wykonanie eksperymentów obliczeniowych na pełnym zbiorze wszystkich rozwiązanych struktur kwasów nukleinowych, udział w pisaniu publikacji, w szczególności przygotowanie tabel, pseudokodów algorytmów i ilustracji.

Na bazie wprowadzonej klasyfikacji ONZ dla tetrad i kwadrupleksów, w pracy autorzy przedstawiają nową metodę zapisu i wizualizacji struktur, która została zaimplementowana w pakiecie EITetrado. Wiodącą rolę w opracowanej metodzie odgrywają 4 oryginalne algorytmy:

Algorytm 1 – w pierwszym na podstawie współrzędnych 3D wyznacza pary niekanoniczne oraz oddziaływania między nukleotydami, a następnie tworzy skierowany graf z etykietowanymi łukami, w którym zbiór wierzchołków stanowi nukleotydy analizowanej struktury.

Algorytm 2 – odnajduje tetradę jako cykle proste o długości równej 4. Dodatkowo, analizując etykiety łuków, algorytm 2 weryfikuje poprawność wyznaczonych tetrad.

Algorytm 3 – wyznacza graf zwany grafem tetrad. Jego wierzchołkami są tetrady, a krawędzie posiadają przypisane wagi stanowiące maksymalną liczbę nukleotydów (od 0 do 4) w potencjalnej parze tetrad oddziaływujących warstwowo.

Algorytm 4 – stanowi ostatni etap działania EITetrado, a jego celem jest łączenie par tetrad w kwadrupeksy oraz ich klasyfikacja.

Dodatkowo EITetrado wyznacza wartości parametrów liczbowych: 1) Planarity deviation – miara odstępstwa tetrady od płaszczyzny, 2) Rise – odległość pomiędzy parą kolejnych tetrad, 3) Twist – kąt skrętu pomiędzy parą kolejnych tetrad. EITetrado zostało zaimplementowane jako ogólnodostępna aplikacja (<https://github.com/tzok/eltetrado>).

6. 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. 48(2):576–588

Wskaźniki publikacji: IF 2020: 16,971, punkty MNiSW / MEiN 2019+: 200

Wkład dr. Żoka: udział w dyskusjach, które zapoczątkowały prace nad projektem, udział i koordynacja prac integracyjnych metod obliczeniowych do analizy i porównywania struktur RNA w przestrzeni trygonometrycznej, opracowanie obrazu Dockerowego zawierającego wszystkie narzędzia i dane wchodzące w skład RNA-Puzzles Toolkit, aktywny udział w tworzeniu manuskryptu oraz w wewnętrznym recenzowaniu całej pracy.

Publikacja wiąże się z zaangażowaniem Habilitanta we współpracę w ramach RNA-Puzzles. Jest to międzynarodowa inicjatywa skupiająca naukowców zajmujących się problematyką modelowania, porównywania i analizy struktur 3D RNA. Głównym celem RNA-Puzzles jest organizacja i koordynacja konkursów w przewidywaniu struktury przestrzennej RNA. Konkurs RNA-Puzzles wykazał m.in., że rozwój i walidacja metod obliczeniowych predykcji struktury RNA silnie zależy od porównawczych zestawów danych i algorytmów porównywania. Brak dostępnego systematycznego zestawu wzorców do przewidywania struktury 3D RNA utrudniał standaryzację testów porównawczych w modelowaniu struktury RNA. Nie powstał również zunifikowany zestaw narzędzi, który pozwalałby na dogłębną i kompletną analizę struktury RNA, a jednocześnie był łatwy w użyciu. W pracy Autorzy przedstawiają zestaw narzędzi RNA-Puzzle (zasób obliczeniowy), które obejmują surowe i standaryzowane zbiory danych generowane przez różne metody predykcji struktury 3D RNA, narzędzia do normalizacji i wizualizacji oraz narzędzia metryczne do porównywania struktur 3D (RNAQUA, MCQ4Structures). Przedstawiono tu w szczególności zastosowania miar trygonometrycznych do analizy podobieństwa struktur 3D. Opracowane oprogramowanie pozwala na wyznaczanie różnic kątowych dla pojedynczych nukleotydów z każdego modelu, a zebrane dane można agregować do postaci rankingu modeli oraz wizualizować przy pomocy diagramów strukturalnych lub map ciepła. Taka wizualizacja pokazuje kontekst, w jakim znajdują się różnice strukturalne i pozwala wyciągnąć wnioski na temat ewentualnych problemów obliczeniowych modelowania struktury RNA. Miar trygonometrycznych można używać również bez znajomości struktury referencyjnej. W pracy pokazano, jak wyznaczoną macierz odległości między poszczególnymi modelami można wykorzystać do grupowania i skalowania wielowymiarowego, aby pokazać wzajemne relacje między różnymi metodami przewidywania struktury 3D RNA.

7. RNAPdbec 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. 46(W1):W30–W35

Wskaźniki publikacji: IF 2018: 11,147, MNiSW / MEiN 2019+: 200, MNiSW 2018: 40

Wkład dr. Żoka: zainicjowanie projektu rozwinięcia systemu RNAPdbec do wersji 2.0, zaprojektowanie nowych funkcji aplikacji, wiodący udział w zaimplementowaniu funkcji i wykonanie ich integracji, zaprojektowanie algorytmu podziału struktury RNA na elementy z uwzględnieniem informacji o pseudowęzłach, opracowanie nowej możliwości wizualizacji struktur w RNAPdbec, udział w pisaniu publikacji i tworzeniu rysunków.

W dziedzinie biologii strukturalnej RNA i bioinformatyki dostęp do prawidłowo adnotowanej struktury RNA ma kluczowe znaczenie, zwłaszcza w przewidywaniu struktur drugorzędowych i 3D. Serwer internetowy RNAPdbec, wprowadzony w 2014 roku, miał na celu przede wszystkim rozwiązanie problemu ekstrakcji struktury drugorzędowej RNA z plików PDB. Jego nowa wersja, RNAPdbec 2.0, będąca przedmiotem pracy, jest wysoce zaawansowanym wielofunkcyjnym narzędziem do adnotacji struktury RNA, ujawniającym związek między drugorzędową strukturą RNA a strukturą 3D podaną w formacie PDB lub PDBx/mmCIF. Zaktualizowana wersja zawiera nowe algorytmy rozpoznawania i klasyfikacji wysoko uporządkowanych pseudowęzłów w dużych strukturach RNA. Umożliwia analizę wpływu izolowanych par zasad na strukturę RNA. Może wizualizować drugorzędowe struktury RNA – w tym kwadrupeksy – z przedstawieniem interakcji niekanonicznych. Opisuje również motywy ułatwiające identyfikację pni, pętli i jednoniciowych fragmentów w wejściowej strukturze RNA. RNAPdbec 2.0 jest zaimplementowany jako publicznie dostępny serwer sieciowy z intuicyjnym interfejsem i można do niego swobodnie uzyskać dostęp pod adresem <http://rnadbec.cs.put.poznan.pl/>

W podsumowaniu powyższych charakterystyk zawartości poszczególnych publikacji można stwierdzić, iż publikacje te niewątpliwie stanowią cykl powiązany tematycznie. Spoiwem, które je łączy jest, z jednej strony metodologia wykorzystywana do budowy komputerowych narzędzi obliczeniowych, obejmująca metody klasyfikacji, techniki wizualizacji graficznej, analizy statystyczne, zagadnienia optymalizacyjne, czy metody grafowe, a z drugiej strony obszar aplikacyjny ukierunkowany na analizę struktur niekanonicznych kwasów nukleinowych. Trzy prace cyklu (1, 3, 7) dotyczą pseudowęzłów w strukturach RNA, trzy kolejne prace (4, 5, 7) związane są z analizą kwadrupeksów DNA i RNA, dwie prace (1, 6) obejmują metody do analizy struktur w przestrzeni kątów torsyjnych, jedna praca (2) przedstawia techniki przetwarzania danych z eksperymentu próbkowania. Każda z publikacji cyklu wnosi określony wkład w rozwój metodologii komputerowej analizy struktur kwasów nukleinowych, zaś cały cykl stanowi znaczny wkład w rozwój dyscypliny informatyka techniczna i telekomunikacja w zakresie metod i narzędzi do specjalizowanych obliczeń komputerowych, ulokowanych w obszarze bioinformatyki. Przedłożony zestaw publikacji stanowi zatem osiągnięcie naukowe w rozumieniu art. 219 ust. 2b Ustawy.

IV. Aktywność naukowa

Autorstwo lub współautorstwo publikacji naukowych

Dorobek publikacyjny dr. T. Żoka (bez uwzględnienia cyklu 7 publikacji stanowiących zgłoszone osiągnięcie naukowe) obejmuje łącznie 31 prac, w tym 2 rozdziały w monografiach międzynarodowych, 19 artykułów w czasopismach naukowych i 10 prac opublikowanych w materiałach konferencyjnych. Na szczególne podkreślenie zasługuje fakt, iż 18 artykułów zostało opublikowanych w czasopismach z listy JCR. Są to w większości periodyki o uznanej renomie, legitymizujące się znakomitym IF (np. Nucleic Acid Research (IF – 16,971) (2 prace), RNA (4,942) (3 prace), Bioinformatics (5,610) (2 prace), J. of Grid Computing (3,288), Nuclear Fusion (3,062).

Pod względem ilościowym dorobek publikacyjny Habilitanta nie jest może imponujący, ale musimy go odnieść do niedługiego okresu pracy zawodowej w charakterze pracownika naukowego (9 lat). W tym czasie Kandydat publikował średnio prawie 4 prace rocznie, co – biorąc dodatkowo pod uwagę inne sfery aktywności zawodowej – stanowi bardzo dobry rezultat.

Z tej charakterystyki publikacyjnej wyłania się Kandydat, który nie jest typem naukowca zasypującego czytelników dużą liczbą publikacji o zróżnicowanej wartości, ale upowszechnianie wyników pracy badawczej odbywa się tu miarowo, z dużą dbałością o poziom naukowy publikacji.

Osiągnięcia projektowe, konstrukcyjne i technologiczne

Dr T. Żok deklaruje uzyskanie – jako autor lub współautor – bogatego zestawu praktycznych wyników projektowych i/lub technologicznych w formie różnorodnych rozwiązań informatycznych. Są to:

1. Serwery do badań struktur 2D i 3D RNA (ekstrakcja, modelowanie, wykrywanie przebiegów i przepłotów, prognozowanie, rekonstrukcja i remodelowanie, ocena jakości modeli, normalizacja danych eksperymentalnych);
2. Program do klasyfikacji kwadrupleksów DNA i RNA i biblioteka do analizy struktur 2D i 3D;
3. Bazy danych i wyszukiwarka struktur 3D oraz fragmentów RNA.

Wszystkie narzędzia są typu *open source* i doczekały się licznych odwiedzin – w niektórych przypadkach liczonych w milionach odsłon.

Wystąpienia na krajowych lub międzynarodowych konferencjach naukowych

Dr T. Żok jest bardzo aktywny pod względem prezentacji wyników prac badawczych na konferencjach naukowych. Odnotować tu można czynny udział Kandydata w 59 konferencjach, z których tylko 2 – sądząc po języku prezentacji – miały zasięg krajowy. Miejsca prezentacji są zróżnicowane, ale w większości są to cykliczne konferencje specjalistyczne (np. RNA Puzzles Meeting, Int. Meeting on Quadruplex Nucleic Acids), konferencje organizowane przez towarzystwa naukowe (np. RNA Society Meeting, Symp. of the Polish Bioinformatics Society), czy konferencje o szerszej tematyce obejmującej prace Habilitanta (np. IEEE Int. Conf. on Big Data, European Conf. on Operational Research, Int. Conf. on Operational Research in Computational Biology, Bioinformatics and Medicine, Int.

Systems Biomedicine Symp., Operation Research and Machine Learning, Int. Conf. BIOTECHNO).

Udział w komitetach organizacyjnych i naukowych konferencji krajowych lub międzynarodowych

Habilitant był członkiem komitetu organizacyjnego i naukowego konferencji dla doktorantów bioinformatyki organizowanej przez PTB (2020), członkiem komitetu organizacyjnego sympozjum PTB (2017) i EURO Conf. on Operational Research in Bioinformatics and Medicine (2014) oraz organizatorem i przewodniczącym sesji na European Conf. on Operational Research (Dublin 2019) i ICOLE – Perspectives of Bioinformatics (Austria 2018).

Uczestnictwo w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych

Dr Tomasz Żok był aktywnym uczestnikiem w realizacji 9 projektów:

1. Integrating and managing services for the European Open Science Cloud – projekt europejski Horizon 2020, 2018 – 2020, rola Habilitanta: wykonawca;
2. INDIGO-DataCloud. Integrating Distributed data Infrastructures for Global ExpLOitation – projekt europejski Horizon 2020, 2015 – 2017, rola Habilitanta: wykonawca;
3. EUROfusion. Implementation of activities described in the Roadmap to Fusion during Horizon 2020 through a Joint programme of the members of the EUROfusion consortium – projekt europejski Horizon 2020, 2014 – 2020, rola Habilitanta: wykonawca;
4. EGI-InSPIRE. European Grid Initiative: Integrated Sustainable Pan-European Infrastructure for Researchers in Europe – projekt europejski INFRA, 2010 – 2014, rola Habilitanta: wykonawca;
5. Eksploracja cech i modelowanie struktury kwadrupleksów – projekt krajowy NCN OPUS, 2020 – 2023, rola Habilitanta: kierownik;
6. RNAPolis – metody i algorytmy do modelowania i analizy struktur RNA – projekt krajowy NCN OPUS, 2017 – 2020, rola Habilitanta: kierownik;
7. Rozwój bioinformatycznych modeli do analizy struktur 3D RNA w przestrzeni kątowej – projekt krajowy NCN PRELUDIUM, 2017 – 2018, rola Habilitanta: wykonawca;
8. Automatyczne, wysokoprzepustowe modelowanie struktur przestrzennych RNA – projekt krajowy NCN MAESTRO, 2013 – 2016, rola Habilitanta: kierownik;
9. Informatyczne modele i metody w biologii komórkowej – projekt krajowy NCN OPUS, 2013 – 2015, rola Habilitanta: wykonawca.

Członkostwo w międzynarodowych lub krajowych organizacjach i towarzystwach naukowych

Habilitant deklaruje członkostwo w następujących organizacjach i towarzystwach naukowych: (1) G4 Society (od 2020 r.), (2) European Chapter of Combinatorial Optimization (od 2018 r.), (3) RNA Society (od 2016 r.), (4) EURO Working Group on Operations Research in Computational Biology, Bioinformatics and Medicine (od 2012 r.), (5) Polskie Towarzystwo Bioinformatyczne (od 2011 r.).

Odbyte staże w instytucjach naukowych

Kandydat odbył 4 krótkoterminowe wizyty we współpracujących zagranicznych ośrodkach naukowych (Barcelona Supercomputing Center (4 dni w 2019 r.), Innsbruck (4 dni w 2018 r.), Saxony Institute for Computational Intelligence and Machine Learning, Niemcy (4

dni w2018 r.), Centro de Ciencias, Benasque, Hiszpania (13 dni w 2018 r.) w celu wymiany informacji, wspólnych dyskusji oraz działań nad prowadzonymi/planowanymi projektami.

Członkostwo w komitetach redakcyjnych i radach naukowych czasopism

Brak

Recenzowane prace naukowe

Dr T. Żok był recenzentem ponad 20 artykułów skierowanych do druku w czasopismach z IF (Computational and Structural Biotechnology Journal, Bioinformatics, Int. Journal of Molecular Sciences, Viruses, Genes, Applied Sciences, Journal of King Saud University – Computer and Information Sciences, Non-Coding RNA, Bioengineering).

Udział w zespołach badawczych realizujące projekty nie uzyskane w drodze konkursów

Udział Habilitanta w tej kategorii projektów był związany z realizacją 3 grantów wewnątrzuczelnianych w charakterze kierownika (2 projekty) lub wykonawcy w latach 2014 – 2020.

Uczestnictwo w programach europejskich lub innych programach międzynarodowych

Brak

Uczestnictwo w zespołach oceniających w konkursach naukowych lub dydaktycznych

Habilitant brał udział w zespołach oceniających prace licencjackie/inżynierskie i magisterskie z bioinformatyki w ramach konkursów organizowanych przez Polskie Towarzystwo Bioinformatyczne w 2018, 2019 i 2020 r.

Biorąc pod uwagę powyższe charakterystyki, można stwierdzić, iż aktywność naukowa Habilitanta zasługuje na pozytywną ocenę. Do mocnych stron tej aktywności należą niewątpliwie duża liczba publikacji w czasopismach z listy JCR z dobrymi i bardzo dobrymi wskaźnikami IF, duża aktywność w zakresie prezentacji konferencyjnych (podkreślić tu należy wysoką rangę wielu konferencji) oraz liczny udział w realizacji międzynarodowych i krajowych projektów badawczych pozyskanych w drodze konkursów. W trzech projektach dr Żok pełnił funkcję kierownika, co dodatkowo oznacza konieczność wcześniejszego zaangażowania się w pozyskiwanie środków finansowych i skuteczność takiego działania. Na oddzielny komentarz zasługuje organizowanie sesji naukowych na konferencjach międzynarodowych oraz recenzowanie prac do renomowanych czasopism, co – zdaniem recenzenta – świadczy o rozpoznawalności w środowisku naukowym, w którym Kandydat jest uznanym specjalistą w swojej dyscyplinie, mimo niezbyt jeszcze długiej kariery naukowej.

Zasygnalizowany wcześniej dominujący udział prac wieloautorskich w dorobku dr. Żoka nie należy traktować jako cechy obniżającej jego rangę. We współczesnych badaniach prowadzonych w obrębie nauk technicznych, a zwłaszcza dyscyplin łączących w sobie różne obszary i wątki badawcze (a do takich należy bioinformatyka) dominuje praca zespołowa o różnych kompetencjach członków zespołu. Nie ma tu już praktycznie miejsca na aktywność samotnych badaczy. Tak też jest w przypadku Habilitanta. Ważne, iż dla prac wieloautorskich, każdorazowo indywidualny wkład autora został dobrze określony.

W podsumowaniu tego fragmentu opinii stwierdzam, iż Habilitant spełnia wymogi w zakresie wykazywanej aktywności naukowej określone w ust. 3 art. 219 Ustawy.

V. Współpraca z otoczeniem społecznym lub gospodarczym

Dorobek technologiczny

Dorobek technologiczny Kandydata został przedstawiony w punkcie *Osiągnięcia projektowe, konstrukcyjne i technologiczne* niniejszej opinii.

Współpraca z sektorem gospodarczym

Habilitant deklaruje, iż międzynarodowe projekty wymienione w punkcie *Uczestnictwo w pracach zespołów badawczych realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych* niniejszej opinii były realizowane w ramach konsorcjów z udziałem partnerów z sektora gospodarczego. Nie podano jednak nazw przedsiębiorstw współpracujących.

Uzyskane prawa własności przemysłowej

Brak

Wykonane ekspertyzy na zamówienie instytucji publicznych lub przedsiębiorców

Brak

Udział w zespołach eksperckich lub konkursowych

Brak

Choć w zakresie ocenianej aktywności, dr T. Żok nie posiada poważniejszych osiągnięć, to jako istotny przyczynek w zakresie współpracy Habilitanta z otoczeniem społecznym należy uznać opracowanie bogatego zestawu narzędzi informatycznych (bazy danych, serwery, oprogramowanie użytkowe) i udostępnienie ich wszystkim zainteresowanym na zasadzie *open sources*. Niektóre z tych narzędzi, przedstawionych w punkcie opinii *Osiągnięcia projektowe, konstrukcyjne i technologiczne*, spotkały się z b. dużym zainteresowaniem, o czym świadczą liczby odwiedzin wahające się od kilkuset do nawet paru milionów.

VI. Wskaźniki naukometryczne

Dr T. Żok posiada następujące liczbowe wskaźniki dorobku naukowego:
Sumaryczny IF – 121,297 (w tym dla cyklu publikacji składających się na osiągnięcie naukowe – 49,818);
Liczba cytowań: według WoS – 495 (bez autocytowań – 415), według WoS – 522 (bez autocytowań – 436), według Google Scholar – 743;
Indeks Hirscha: według WoS – 10, według Scopus – 11, według Google Scholar – 13;
Liczba punktów MNiSzW/MEiN: – 3330 (w tym cykl habilitacyjny – 1100).

Przedstawione wskaźniki należy uznać za ponadprzeciętne, co w szczególności dotyczy sumarycznego IF oraz punktów ministerialnych. Jeśli odnieść wskaźnik IF do całkowitej

liczby publikacji indeksowanych w bazie JCR (25 prac), to uzyskamy średni IF równy 4,582. Świadczy to jednoznacznie o bardzo wysokiej randze naukowej publikacji Kandydata.

Z kolei duża liczba cytowań oraz dobry indeks Hirscha, mimo iż wiele prac jest bardzo świeżych i nie zdążyło jeszcze zapracować na swoją rozpoznawalność, wskazują na duże zainteresowanie publikacjami Habilitanta. Nie są to z całą pewnością prace przyczynkarskie, ale mają – w opinii środowiska naukowego – dużą wagę dla rozwoju uprawianej tematyki.

VII. Osiągnięcia dydaktyczne, organizacyjne oraz popularyzujące naukę

W tej kategorii osiągnięć Habilitanta można wymienić:

1. Przygotowanie i prowadzenie wykładów oraz form towarzyszących na kierunkach Bioinformatyka, Informatyka, Artificial intelligence, Automatyka i robotyka w Pol. Poznańskiej, z następujących przedmiotów: Bioinformatyka strukturalna, Metody statystyczne w bioinformatyce strukturalnej, Wizualizacja strukturalna, Computer architecture with low-level programming, Aplikacje w chmurze, Wprowadzenie do informatyki, Algorytmy i struktury danych;
2. Prowadzenie i recenzowanie licencjackich i magisterskich prac dyplomowych na kierunku Bioinformatyka;
3. Prace organizacyjne na rzecz dydaktyki i popularyzacji nauki (opiekun praktyk zawodowych dla uczniów szkół średnich, opiekun praktyk studenckich, opiekun koła naukowego, opiekun grupy studentów w konkursie Code4Life Hackathon, organizator kursu dla biologów i biochemików *Bioinformatyka strukturalna*).

Przedstawiona aktywność dr. Żoka w omawianym zakresie jest przeciętna i typowa dla pracownika naukowo-dydaktycznego uczelni wyższej.

VIII. Inne osiągnięcia

Wśród innych osiągnięć mających wpływ na ocenę aktywności zawodowej, Habilitant wymienia uzyskane nagrody i wyróżnienia:

1. Stypendia naukowe (Ministra MEN w 2021 r. i Miasta Poznania w 2016 r.);
2. Nagroda JM Rektora Pol. Poznańskiej (zespołowa II stopnia w 2019 r.);
3. Nagrody naukowe Instytutu Chemii Bioorganicznej PAN w 2019 i 2020 r.;
4. Nagroda za prezentację konferencyjną (RNA Society Meeting w 2021 r.) oraz odznaczenie Arctic Code Vault Contributor za projekty typu *open source* w 2020 r.

IX. Podsumowanie i wniosek końcowy

Biorąc pod uwagę pozytywną ocenę osiągnięcia naukowego Pana dr T. Żoka, jakim jest powiązany tematycznie cykl 7 publikacji zatytułowany *Metody obliczeniowe do analizy niekanonicznych struktur kwasów nukleinowych* oraz pozytywną ocenę aktywności naukowej objawiającej się licznymi publikacjami z wysokimi wskaźnikami IF, dużą liczbą prezentacji konferencyjnych i znaczącym udziałem w realizacji krajowych i międzynarodowych projektów badawczych, prowadzącej do uznania i autorytetu w środowisku naukowym i dodatkowo wzmocnionej pracą twórczą na rzecz tego środowiska stwierdzam, że w myśl ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. – *Prawo o szkolnictwie wyższym i*

nauce (Dz. U. z 2020 r., poz. 85), dr inż. T. Żok spełnia wymagania stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego.

W związku z powyższym popieram wniosek o nadanie Panu dr. inż. Tomaszowi Żokowi stopnia doktora habilitowanego nauk inżynieryjno-technicznych w dyscyplinie informatyka techniczna i telekomunikacja.

M. Kucyński