

Prof. dr hab. Jarosław Polański
Centrum Projektowania i Syntezy Leków i Materiałów
Instytut Chemii Uniwersytetu Śląskiego
ul. Szkolna 9, 40-006 Katowice

Katowice, 03.04.2023

Recenzja dorobku Pani dr Agnieszki Gajewicz-Skrętniej w związku z toczącym się postępowaniem habilitacyjnym w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie NAUKI CHEMICZNE

Dr Agnieszka Gajewicz-Skrętna ukończyła studia na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego w 2004 roku. Jej rozwój naukowy związany jest z tymże Wydziałem, gdzie uzyskała doktorat w roku 2013. Tematem jej pracy było *Opracowanie metod in silico służących przewidywaniu cytotoksycznego wpływu nanocząstek tlenków nieorganicznych na komórki bakterii E.coli oraz ludzkie keratynocyty (HaCaT)*. Promotorem pracy doktorskiej był prof. dr hab. Tomasz Puzyn. Ten wczesny rozdział jej pracy naukowej, tematyka prac badawczych Promotora i jego zespołu naukowego oraz kontakty naukowe z wieloma renomowanymi zespołami naukowymi ukształtował zainteresowania Habilitantki. Obszarem jej badań stała się szeroko pojęta chemoinformatyka. Zawodowo Pani Dr Agnieszka Gajewicz-Skrętna

Ocena osiągnięcia naukowego

Przedstawiony do oceny wybrany dorobek składający się na rozprawę habilitacyjną stanowi 9 prac, formalnie podsumowanych tytułem: *Nowe podejścia chemoinformatyczne do komputerowej oceny zagrożenia chemicznego stwarzanego przez mało liczne lub silnie zróżnicowane strukturalnie zbiory związków chemicznych*. Wszystkie przedstawione prace są opublikowane w prestiżowych czasopismach międzynarodowych o wysokiej renomie: *Environmental Science: Nano* (3 prace), *Nanoscale* (1 praca), *Nanotoxicology* (1 praca), *Ecotoxicology and Environmental Safety* (1 praca), *Journal of Cheminformatics* (1 praca), *Chemosphere* (1 praca) oraz *Science of The Total Environment* (1 praca). Wszystkie prace mieszczą się w aktualnej problematyce chemoinformatyki, a zbiór ten imponuje znaczeniem wymienionych czasopism w eko- i nanotoksykologii. Większość prac jest wieloautorskich (poza monoautorskimi H2, H3, H4). We wszystkie pracach Habilitantka jest pierwszą autorką. Ponadto w ośmiu pracach jest autorem korespondencyjnym. Deklarowany udział Habilitantki w pracach wieloautorskich jest znaczący. W odrębnym dokumencie (Zał. 9) załączone zostały listy współautorów potwierdzające ten fakt.

Cel pracy Habilitantka określa szeroko. Jako wspólny mianownik badań omawianych w serii prac habilitacyjnych deklaruje *opracowanie kompleksowego zestawu narzędzi komputerowych wspierających proces oceny zagrożenia chemicznego oraz zrównoważonego projektowania nowych substancji chemicznych w oparciu o mało liczne lub silnie zróżnicowane strukturalnie zbiory związków chemicznych*. W szczególności zajmuje się adaptacją metod interpolacji liniowej do modelowania ilościowej zależności struktura-aktywność (H1-H2), wykorzystaniem metod estymatora najbliższego sąsiedztwa (H3, H8), nowymi metodami w międzygatunkowej ekstrapolacji toksyczności (H7), rozszerzeniem zależności struktura-aktywność przez międzygatunkową ekstrapolację toksyczności (H9), wykorzystaniem metod klasyfikacyjnych do wstępnych badań przesiewowych (H5, H6) oraz metodą oceny wiarygodności wyników prognozowania (H4).

Prace Habilitantki zaliczyłbym do kierunku, który określa się ostatnio jako *data science*. Jako szczególnie ważne oceniam ich znaczenie dla uczenia maszynowego. Sztuczna inteligencja i uczenie maszynowe (SI) to wyzwania dla współczesnego projektowania i modelowania molekularnego, które powinno być

automatyczne i autonomiczne. O ile człowiek dobrze czuje się wśród liniowych zależności opisanych niewielką liczbą danych, maszyna jest niezastąpiona przy analizie wielkich danych (*big data*). Równocześnie aparat informatyczny współczesnych metod analizy danych jest wystarczająco efektywny by podołać nawet największym wyzwaniom. Przykładem spektakularnych sukcesów w wielu nowych metodach i technologiach (np. rozpoznawanie twarzy) są algorytmy głębokiego uczenia (deep learning). Sztuczna inteligencja coraz bardziej ingerować zaczyna w nasze codzienne życie. Fascynują nas chociażby chatboty (ChatGPT). Problemem stają się nie algorytmy, lecz jakość danych, którymi dysponujemy. Dane możemy projektować lub poprawiać ręcznie (*data curation, feature engineering*) lub programować algorytmy tak, by działały w pełni autonomicznie (*feature learning*). Gdzieś między tymi problemami mieszczą się prace Habilitantki, pokazując, jak stosować algorytmy wspomagające autonomiczność. Co robić, kiedy dostępne dane są mało liczne, ich reprezentatywność pozostawia wiele do życzenia, a eksperyment nie oferuje nam nic lepszego. Cóż eksperyment *in vivo*, czy *in vitro* w laboratorium to wciąż najkosztowniejszy element nauki. Wiadomo, że badania QSAR dobrze się sprawdzają kiedy dane są homogeniczne, a nawet pochodzą z jednego laboratorium. Co jeżeli jest inaczej? Pamiętajmy o podstawowej wskazówce z początków chemometrii. Nawet *educational guess* jest lepszy niż jego brak. Autorka analizuje problem międzygatunkowej ekstrapolacji toksyczności. Pokazuje jak generalnie można weryfikować lub podnosić wiarygodność prognozowania modeli *in silico*. O aktualności prac świadczy liczba cytowań. Na przykład monoautorska praca H3 (2017 rok) opisująca nowe metody uczenia maszynowego oparte na podobieństwie strukturalnym dla przewidywania właściwości biologicznych dla potrzeb komputerowej oceny zagrożenia chemicznego ma już 53 cytowania (Google Scholar).

Aktywność naukowa oraz wkład w rozwój dyscypliny

Poza serią 9 prac habilitacyjnych pani dr Gajewicz-Skrętna wymienia w swoim dorobku 7 publikacji (przed uzyskaniem stopnia doktora), 47 publikacji (po uzyskaniu stopnia doktora), 2 rozdziały w monografiach (przed uzyskaniem stopnia doktora) oraz 2 rozdziały w monografiach (po uzyskaniu stopnia doktora). Habilitantka jest także współredaktorem monografii: *Computational nanotoxicology* (Pan Stanford Publishing 2020). Prace Habilitantki stanowią ważny wkład w rozwój współczesnych metod chemoinformatyki, w szczególności nanotoksykologii oraz kierunku określanego jako *data science*. To w tym zakresie lokują się podstawowe problemy współczesnej chemoinformatyki Dorobek naukowy dr Gajewicz-Skrętnej oceniam bardzo wysoko. Dowodzi on aktywności Autorki oraz jej ugruntowanej pozycji w społeczności naukowej. Sumaryczny współczynnik oddziaływania czasopism, w których były publikowane jej prace (impact factor) wynosi ok. **304**. O jakości dorobku świadczy duża liczba cytowań badań Kandydatki. Prace cytowane były **2218** razy (2029 bez autocytowań; wg Web of Science) lub **2415** razy (Scopus), a indeks H-index = **24** (Web of Science) lub **25** (Scopus). Sumaryczna liczba punktów ministerialnych za publikacje wynosi **6380**. Warto podkreślić, że dorobek Habilitantki w znacznym stopniu powstał już po doktoracie. Przy czym w większości są to publikacje w najbardziej renomowanych czasopismach, w tym także *Nature Nanotechnology*. Taka struktura dorobku imponuje, szczególnie pod względem wagi czasopism, w nanotoksykologii i bardziej ogólnie chemoinformatyce. Aby zdać sobie sprawę jak bardzo znaczący jest to dorobek warto przytoczyć tutaj dwie znaczące publikacje z ostatnich lat. Muratov et al. (Chem. Soc. Rev., 2020, 49, 3525-3564) pisze, oceniając znacznie pracy (Gajewicz-Skrętna [H3]): *Another challenge of QNAR modeling, similar to materials informatics is the relatively small size of the datasets currently available in the public domain. This leads to lower prediction accuracy and smaller applicability domains for QNAR models compared to those of QSAR models trained on large organic molecule data sets. To mitigate this limitation, read-across techniques are increasingly used to estimate the properties of nanomaterials* [H3]. Z kolei Winkler (Small, 2020, 16, 2001883) cytuje tę samą pracę [H3], pisząc: *Gajewicz also sought to overcome the paucity of data roadblock to ML modeling of adverse effects of nanomaterials. She employed read-across methods in models to backfill data voids. Similarity of a target nanomaterial to a reference material in N-dimensional chemical property space can be used to predict the activity of target nanomaterial based on the activity of its nearest neighbors*. Tak więc Habilitantka należy do uznanych w literaturze pionierów metody QNAR

(quantitative nanostructure–activity relationships) oraz informatyki nanomateriałów, stale dążąc do doskonalenia stosowanej w tym zakresie metodyki. Jej wysiłki w tym kierunku są zauważane i doceniane w literaturze.

Habilitantka prezentowała swoje badania na licznych konferencjach: 25 - przed doktoratem, 89 - po doktoracie.

Jest członkiem komitetów organizacyjnych i naukowych konferencji krajowych lub międzynarodowych *MOL2NET International Conference Series on Multidisciplinary Sciences* oraz *Nanotechnologia wobec oczekiwań XXI w.*

Bierze czynny udział w pracach zespołów badawczych formalnie realizujących projekty finansowane w drodze konkursów krajowych lub zagranicznych (5 projektów przed uzyskaniem doktoratu, 6 po doktoracie), w tym w czterech projektach po uzyskaniu doktoratu pełni rolę kierownika projektu, także w projekcie EU Horizon 2020. Uczestniczy w wielu współpracach międzynarodowych, od USA po Słowenię. Ich liczba jest tak duża, że nie sposób ich w tym miejscu wymienić.

Jest członkiem Klubu Młodych Naukowców Gdańskiego Towarzystwa Naukowego, Society for Risk Analysis oraz QSAR Chemoinformatics Modeling Society.

Mocną stroną dorobku Habilitantki są staże odbywane regularnie w zagranicznych jednostkach naukowych. Ich Wykaz obejmuje w sumie siedem pozycji, w tym roczny staż w National Institute for Environmental Studies, Research Center for Environmental Risk, Tsukuba, Japonia

Pani dr Gajewicz-Skrętna pełniła funkcję redaktora od Associate Editor do Review Editor czterech różnych czasopism. Była też recenzentem wielu artykułów nadsyłanych do różnych czasopism naukowych oraz wniosku grantowego Specialist Committee of the South Africa's National Research Foundation.

Poza aktywnością w sferze nauki Habilitantka współpracuje także z otoczeniem przemysłowym. Jest zatrudniona w niepełnym wymiarze czasu w Chemicznym Centrum Technologii i Rozwoju Grupy Azoty S.A, gdzie prowadzi prace w zakresie analizy danych i uczenia maszynowego. Kontynuuje także współpracę międzynarodowe zapoczątkowane swoimi stażami naukowymi, rozwijając także nowe kontakty.

Działalność dydaktyczna i organizacyjna

Dr Gajewicz Skrętna posiada także niezbędny w postępowaniu habilitacyjnym dorobek w zakresie działalności dydaktycznej. Jako adiunkt w Pracowni Chemoinformatyki Środowiska w Katedrze Chemii i Radiochemii Środowiska prowadzi zajęcia dydaktyczne, w tym wykłady, laboratoria. Ich dokładny wykaz przedstawia w autoreferacie. Jest także promotorem 17 prac dyplomowych oraz promotorem pomocniczym jednej pracy doktorskiej. Angażuje się w działania organizacyjne. Między innymi uczestniczy w pracach zespołu programowego dla nowo tworzonej, angielskojęzycznej specjalności studiów II stopnia na kierunku Chemia - „Digital chemistry”. Popularyzuje naukę, publikując „Mysz komputerowa zamiast laboratoryjnej”, „Niebezpieczne związki okiem chemika”, „Ocena ryzyka chemicznego na miarę XXI wieku” oraz wygłaszając referaty, np. „Szlanką jest w połowie pusta czy pełna? O bezpieczeństwie chemicznym okiem chemoinformatyka” w ramach otwartych spotkań organizowanych przez Akademia 30+ (luty 2019). Współtworzy Fundację Wspierania Nanonauk i Nanotechnologii NANONET.

Nagrody i wyróżnienia

Za swoją dotychczasową działalność naukową Habilitantka otrzymała liczne wyróżnienia i stypendia naukowe m.in.: Nagrodę Naukową POLITYKI w kategorii nauki ścisłe (2019), Nagrodę dla wschodzących talentów nauki - *International Rising Talents Awards L'Oréal-UNESCO For Women in Science* (2018). Jest laureatką stypendium habilitacyjnego L'Oréal-UNESCO Dla Kobiet i Nauki (2017) oraz stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla Wybitnych Młodych Naukowców (2014). Otrzymała także nagrodę za najlepszą prezentację plakatową przedstawioną podczas międzynarodowej konferencji *8th International Nanotoxicology Congress (NanoTox2016)*, Boston, Stany Zjednoczone (2016), stypendium dla młodych doktorów w ramach projektu „Program rozwoju Uniwersytetu Gdańskiego w obszarach Europa 2020” (2014) oraz Wyróżnienie Polskiego Towarzystwa Chemicznego, Oddział Gdańsk za najlepszą pracę doktorską obronioną w 2013 roku.

Podsumowanie

Na koniec warto podkreślić bardzo staranny sposób przygotowania materiałów habilitacyjnych. Ich szata graficzna, przejrzysta grafika i jasny styl prezentacji pozwalają jeszcze lepiej wyeksponować atuty Habilitantki oraz wybitny charakter jej dorobku naukowego.

Podsumowując, na podstawie przedłożonego mi materiału stwierdzam, że dorobek naukowo-badawczy Kandydatki oraz jej aktywność w zakresie współpracy badawczej w pełni spełnia wymogi USTAWY Prawo o Szkolnictwie Wyższym i Nauce; Dz. U. 2018, poz. 1668 z dnia 20 lipca 2018 r.