

Dr. hab. inż. Aleksander Herman  
Katedra Chemii Nieorganicznej  
Wydział Chemiczny Politechniki Gdańskiej  
Ul. Gabriela Narutowicza 11/12  
80-233 Gdańsk

Gdańsk, 20.11.2017

**Recenzja rozprawy doktorskiej mgr Tomasza Makarewicza pod tytułem:  
“Tworzenie i zastosowanie oprogramowania z graficznym interfejsem  
użytkownika do przeprowadzania, interpretacji i wizualizacji symulacji  
dynamiki molekularnej”.**

Promotorem przedłożonej do recenzji rozprawy doktorskiej jest dr hab. Rajmund Kaźmierkiewicz, prof. UG z Pracowni Symulacji Układów Bio-molekularnych UG-GUMed.

Rozprawa doktorska o powyższym tytule mogła by być z powodzeniem bronią na wydziale informatyki. W prawdzie na wydziale ETI PG posiadającym kierunek kształcenia w inżynierii bio-medycznej wystąpił by prawdopodobnie problem braku tytułu zawodowego inżyniera u mgr Tomasza Makarewicza ale na wydziale MFI UG już nie. Tym niemniej rozprawa została złożona na Międzyuczelnianym Wydziale Biotechnologii UG i GUMed w celu nadania mgr Makarewiczowi stopnia naukowego doktora nauk biologicznych w dyscyplinie biochemia. Zatem stosownie do Ustawy z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach i tytule naukowym oraz Rozporządzenia Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego z dnia 30 września 2016 roku, moja recenzja powinna zawierać ocenę, czy rozprawa doktorska odpowiada warunkom ustawy oraz czy dorobek naukowy kandydata uzasadnia nadanie stopnia doktora nauk biologicznych.

Przedłożona do recenzji rozprawa doktorska posiada układ nieklasyczny w postaci dziesięciostronicowego przewodnika po dwu tradycyjnych publikacjach (T. Makarewicz, R. Kaźmierkiewicz, J. Chem. Inf. Model., 2013, 53(5), 1229, IF = 3.760 i T. Makarewicz, R. Kaźmierkiewicz, J. Mol. Model., 2016, 22: 109, IF = 1.425) oraz po trzech publikacjach na stronach internetowych (GitHub, <https://github.com/tomaszmakarewicz/Dynamics/>, repozytorium dystrybucji Linuksa Gentoo i Ubuntu) . Powyższy przewodnik napisany jest bardzo starannie w dwu językach polskim i angielskim. Prawdopodobnie jego wersja polskojęzyczna powstała poprzez przetłumaczenie z wersji angielskiej, gdyż podpis pod schematem nr 1 w wersji polskiej powstał poprzez mechaniczne tłumaczenie typu słowo za słowo zwrotu „The communication flow between PyMOL and GROMACS through plugin” w opisie po angielsku na „Przepływ komunikacji pomiędzy PyMOLEM a GROMACSEM z wykorzystaniem wtyczki” w polskim odpowiedniku. Ale chciałbym w tym miejscu zaznaczyć, że poza powyższym zabawnym potknięciem językowym oba opisy są bardzo staranne i prawidłowo napisane. Zawierają one jasno określony cel pracy który pozwalają sobie zacytować w tym miejscu w całości:

„Celem niniejszej rozprawy jest zaproponowanie nowego programu działającego jako wtyczka do PyMOLa i umożliwiającego przeprowadzenie symulacji dynamiki molekularnej w prosty sposób za pośrednictwem interfejsu graficznego oraz wizualizację rezultatów w popularnym i łatwym w obsłudze PyMOLu. Napisany przeze mnie program nazwałem Dynamics PyMOL Plugin.”

oraz szczegółowy opis możliwości i działania programu. Zanim przejdę do dalszej oceny rozprawy chciałbym się skupić na zdefiniowaniu problemu naukowego którego rozwiązaniem zajmował się doktorant. Przed przystąpieniem do realizacji swojej rozprawy mgr Tomasz Makarewicz najprawdopodobniej zdał sobie sprawę z istnienia co najmniej kilku „wąskich gardeł” w badaniach nad dynamiką molekularną cząsteczek biologicznych. Tymi widocznymi ograniczeniami w badaniach są na pewno:

1. Zbyt małe zainteresowanie ze strony komercyjnych producentów oprogramowania jego modyfikacją pod wpływem nowych pomysłów powstających głównie na uniwersytetach.
2. Ciągły niedobór środków finansowych przeznaczonych na zakup nowych licencji komercyjnego oprogramowania na wyższych uczelniach a nawet w bogatych placówkach naukowych.
3. Szybki postęp w opracowywaniu nowych metod analizy wyników dynamiki skomplikowanych układów o dużym znaczeniu poznawczym w biologii.
4. W miarę postępów w technologii ekranów dotykowych, stale zanikająca wśród studentów i młodych biologów umiejętność posługiwania się klawiaturą komputerową i programami uruchamianymi z linii komend systemu UNIX i podobnych.
5. Utrudnienia w przygotowywaniu danych spowodowane brakiem interfejsów graficznych na superkomputerach w czołowych ośrodkach obliczeniowych gdzie prowadzi się wielkoskalowe symulacje dynamiki molekularnej.

Zaproponowanie częściowego lub całkowitego rozwiązania wyżej wymienionych problemów za pomocą projektu „Dynamics PyMOL Plugin”, jest przedmiotem recenzowanej rozprawy doktorskiej magistra Tadeusza Makarewicza. Program Dynamics PyMOL Plugin został napisany przez doktoranta w języku programowania Python 2, tak aby był on całkowicie kompatybilny z bieżącą wersją programu PyMOL, służącego jako popularne narzędzie do wizualizacji molekuł. Tak samo jak PyMOL korzysta z biblioteki procedur graficznych Tk do wyświetlania grafiki, dzięki czemu poprawna instalacja PyMOL-a umożliwia skorzystanie z napisanego przez doktoranta programu. Podstawowa zasada działania programu Dynamics PyMOL Plugin polega na tym, że pozwala on wybrać załadowaną do PyMOL-a bio-molekułę a następnie w specjalnym oknie graficznym ustawić opcje symulacji dynamiki molekularnej dla programu GROMACS, przeprowadzić symulację i wyświetlić oraz analizować jej rezultaty w PyMOL-u. Programy PyMOL i GROMACS są standardowo dostępne w wielu popularnych dystrybucjach Linuksa co pozwala na bez kosztowe uruchomienie oprogramowania na komputerach pracujących pod systemem operacyjnym Linux lub UNIX.

Napisany przez Mgr Makarewicza program - Dynamics PyMOL Plugin – jest udostępniany i rozwijany na zasadach wolnego oprogramowania w ramach licencji GPL-3. Dzięki temu program jest stale rozwijany i testowany nie tylko przez autora ale również przez wiele stosujących go na co dzień ośrodków w Europie i na świecie. W ciągu sześciu lat projekt - Dynamics PyMOL Plugin – znacznie się rozwinął w różnych kierunkach, liczy obecnie około 3000 linii kodu i posiada implementacje działające pod kontrolą systemów Windows oraz macOS. Projekt przyjmuje zgłoszenia błędów, życzeń oraz nowych propozycji fragmentów kodu w sformalizowanym systemie śledzenia problemów. Autor projektu ma całkiem konkretne plany dalszego rozwoju projektu, ale zdaje też sobie sprawę, że jego „dziecko” jest już „dorosłe” i będzie się rozwijać w takich kierunkach jakich życzą sobie użytkownicy programu na całym świecie!

## Wnioski:

Artykuł 13 ustawy o stopniach naukowych i tytule naukowym z dnia 14 marca 2003 roku definiuje rozprawę doktorską następująco:

„Rozprawa doktorska, przygotowana pod opieką promotora albo pod opieką promotora i promotora pomocniczego, powinna stanowić oryginalne rozwiązanie problemu naukowego lub oryginalne rozwiązanie problemu w oparciu o opracowanie projektowe, konstrukcyjne, technologiczne, lub oryginalne dokonanie artystyczne, oraz wykazywać ogólną wiedzę teoretyczną kandydata w danej dyscyplinie naukowej lub artystycznej oraz umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej lub artystycznej.”

Stosownie do Rozporządzenia Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego, recenzja powinna zatem zawierać ocenę, czy rozprawa doktorska odpowiada warunkom ustawy oraz czy dorobek naukowy kandydata uzasadnia nadanie stopnia naukowego doktora nauk biologicznych w dyscyplinie biochemia?

1. Zdaniem recenzenta posiadanie stopnia magistra biologii oraz wykazana przez doktoranta umiejętność dostrzegania krytycznych problemów w badaniach dynamiki cząsteczek biologicznych dowodzi opanowania ogólnej wiedzy teoretycznej w biochemii jako dyscyplinie nauk biologicznych.
2. Zdaniem recenzenta przedłożona do oceny rozprawa doktorska stanowi oryginalne rozwiązanie projektowe (częściowe lub całkowite) dla co najmniej pięciu problemów wymienionych na stronie drugiej recenzji.
3. Zdaniem recenzenta dołączone do obu klasycznych publikacji oświadczenia dotyczące wkładu autorów w ich powstanie dowodzą, że autor rozprawy posiada umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej.

Podsumowując powyższe fakty stwierdzam, że przedłożona do oceny rozprawa doktorska spełnia z nadmiarem wszystkie wymagania formalne oraz zwyczajowe i rekomenduję nadanie stopnia doktora nauk biologicznych w dyscyplinie biochemia Panu magistrowi Tomaszowi Makarewiczowi.

Aleksander Herman



Ponadto, biorąc pod uwagę znaczący wkład projektu „Dynamics PyMOL Plugin” w rozslawianie obu macierzystych uniwersytetów w świecie, oraz jak sądzę spełnianie wszystkich czterech warunków formalnych dotyczących wyróżniania prac doktorskich przez Radę Wydziału Biotechnologii UG i GUMed, stawiam wniosek o wyróżnienie tej rozprawy.

Aleksander Herman

