



UNIwersYTET GDAŃSKI



WYDZIAŁ CHEMII
Zakład Modelowania Molekularnego



Tel. +48 58 523 5124, fax +48 58 523 5012, email: adam@sun1.chem.univ.gda.pl

Gdańsk, dnia 22.05.2016 r

prof. dr hab. Józef Adam Liwo
Wydział Chemii Uniwersytetu Gdańskiego
ul. Wita Stwosza 63
80-308 Gdańsk

Ocena osiągnięć naukowo-badawczych oraz dorobku dra Mieczysława Torchali, w związku z toczącym się postępowaniem habilitacyjnym

Pan dr Mieczysław Torchala ukończył studia magisterskie na Wydziale Chemii Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, na kierunku chemii uzyskał tytuł zawodowy magistra chemii w roku 2006; na zakończenie studiów został nagrodzony dyplomem za dobre wyniki w nauce i działalność społeczną na rzecz środowiska akademickiego. Równolegle, na tym samym uniwersytecie, studiował fizykę i ukończył studia, uzyskując tytuł magistra fizyki w roku 2007; na zakończenie studiów został uhonorowany nagrodą absolutorijną. W tym samym roku rozpoczął studia doktoranckie na Wydziale Fizyki UAM studia doktoranckie pod kierunkiem prof. Michała Kurzyńskiego. Rozprawę doktorską pt. "Symulacje numeryczne wpływu dynamiki białka na pewne biomolekularne procesy przeniesienia elektronu" obronił w roku 18 czerwca 2010 roku, uzyskując stopień naukowy doktora nauk fizycznych w zakresie biofizyki. W czasie studiów doktoranckich odbył staże naukowe na uniwersytecie w Erlangen i Uniwersytecie Gdańskim oraz pracował jako młodszy asystent i deweloper oprogramowania w Bioinfobank w Poznaniu. Po doktoracie odbył staż podoktorski w Instytucie Francis Cricka w Wielkiej Brytanii a obecnie jest zatrudniony w Tessela Ltd. również w Wielkiej Brytanii jako programista-analityk. Kontynuując swoją edukację, w roku 2014 odbył wiele kursów na temat programowania a w roku 2013 uzyskał CIMA Certificate in Business Accounting.

Pan dr Mieczysław Torchala opublikował łącznie 18 publikacji, z czego 11 po uzyskaniu stopnia doktora nauk fizycznych. 13 publikacji (10 po doktoracie) stanowią artykuły w czasopismach z listy filadelfijskiej, jedna jest rozdziałem w monografii a pozostałe są artykułami w innych czasopismach. Z prac tych 6 artykułów oraz 1 rozdział w monografii tworzą osiągnięcie naukowe stanowiące, podstawę wniosku o nadanie stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych. Oprócz tego opublikował w wydawnictwach krajowych 3 artykuły popularnonaukowe. Pan dr Mieczysław Torchala wygłosił również 11 wystąpień ustnych, w tym 1 wykład na zaproszenie i przedstawił 9 prezentacji posterowych

na konferencjach międzynarodowych. Ponadto wygłosił 3 wykłady popularnonaukowe. Sumaryczny współczynnik wpływu (IF) publikacji p. dra Torchały wynosi 39,914 (31.347 po doktoracie). Liczba cytowań bez autocytowań wynosiła 98 na dzień składania wniosku a obecnie wynosi 104 na (dzień 22.05.2016) według Web of Science Core Collection. Indeks Hirscha dra Torchali wynosi 5. Pan dr Torchała jest pierwszym autorem większości swoich publikacji. Podsumowując, według przytoczonych danych scjentometrycznych jego dorobek naukowy zdecydowanie upoważnia go do ubiegania się o stopień doktora habilitowanego.

Osiągnięcie naukowe p. dra Torchały będące podstawą postępowania habilitacyjnego jest zatytułowane „**Struktura i dynamika kompleksów białko-białko**” Jak wspomniałem, zostało ono opublikowane w postaci cyklu 6 artykułów w czasopismach naukowych z listy filadelfijskiej (pozycje H1-H4 oraz H6 i H7) i jednego rozdziału w monografii (pozycja H5). Pan dr Torchała jest pierwszym autorem 5 z tych pozycji (prace H1-H3, H5 i H7). We wszystkich pracach, w których jest pierwszym autorem habilitant ocenia swój udział jako 55-90% w pozostałych jako co najmniej 30-45%. Te oceny współbrzmia z oświadczeniami współautorów, które są przedstawione bardzo klarownie w formie tabelk z zaznaczeniem rodzaju udziału poszczególnych autorów. W oświadczeniach tych bardzo często zaznaczono, że habilitant był pomysłodawcą projektu będącego przedmiotem danej publikacji oraz kierował pracami związanymi z jego wykonaniem. Można zatem jednoznacznie stwierdzić, że wiodący wkład Kandydata do większości prac składających się na osiągnięcie naukowe oraz jego samodzielność jako naukowca w pełni kwalifikują go do otrzymania stopnia doktora habilitowanego. Wszystkie publikacje składające się na osiągnięcie naukowe zostały opublikowane w recenzowanych międzynarodowych czasopismach naukowych oraz recenzowanych monografiach a przez to poddane już bardzo ostrym ocenom anonimowych specjalistów w dziedzinie. Ponadto, w toku realizacji prac nad osiągnięciem naukowym habilitant utworzył dwa serwery: SwarmDock do przewidywania kompleksów białko-białko oraz RaTrav do obliczania średnich czasów przejścia i obsadzeń przy pomocy algorytmów Hilla i Monote Carlo.

Tematyką osiągnięcia naukowego jest opracowanie i testowanie metod teoretycznych do badania kompleksów białko-białko. Należy podkreślić, że tematyka ta różni się znacząco od tej dotyczącej rozprawy doktorskiej habilitanta co wskazuje na jego wszechstronność i zdolność do podejmowania nowych wyzwań. Autor przeprowadził te badania w czasie gdy pracował w Cancer Research w Wielkiej Brytanii. Punktem wyjścia był opracowany tamże algorytm SwarmDock. Autor opracował na tej podstawie ogólnodostępny serwer. To zadanie nie było łatwe, gdyż automatyzacja obliczeń wymaga przewidzenia wszelkich możliwych sytuacji i przeprowadzania odpowiednich testów. Serwer jest oparty na mieszanej optymalizacji metodą "roju cząstek" (Particle Swarm Optimization) oraz przeszukiwania lokalnego. Może również pracować w trybie z więzami, gdzie użytkownik wskazuje reszty, które mają ze sobą oddziaływać. Serwer wraz z testami został opisany w pracy [H2] oraz w rozdziale w książce [H5]; w tym ostatnim znajduje się również podręcznik użytkownika serwera.

Kolejnym krokiem było opracowanie metody oceny rozwiązań. Autor opracował w tym celu metodę opartą na konstrukcji sieci połączeń między stanami zadokowania białek. Zakładając, że przejścia między stanami są opisane modelem Markowa opracował metodę odrzucania stanów, które nie tworzą "leja energetycznego", co znacznie poprawiło zdolność metody do przewidywania struktur kompleksów z białkami. Ta część badań jest opisana w pracach [H3] i [H7]. Ponadto w pracy [H6] habilitant przedstawił testy wydajności 115 funkcji oceniających na zbiorze modeli obejmujących 118 kompleksów.

Opracowana metodologia została przetestowana w eksperymencie CAPRI przewidywania struktur kompleksów białko-białko, umiejscawiając się w 9 najlepszych grupach na 29 uczestniczących. SwarmDock był również jedynym serwerem, który uzyskał poprawną strukturę kompleksu T59. Należy również podkreślić, że na dzień składania wniosku serwer został już użyty przez ponad 350 użytkowników, którzy wysłali do niego ponad 2000 zadań.

Na podstawie konstrukcji sieci połączeń między stanami Autor opracował metodę pozwalającą obliczyć średnie czasy pierwszego przejścia (ang. *mean first passage time*, MFPT) między różnymi stanami zadokowania. Metodę przetestował najpierw na sieciach modelowych (praca [H1]) a następnie na kompleksie białka wiążącego witaminę D z aktywą (praca [H7]). Metoda została udostępniona w postaci opracowanego przez habilitanta serwera RaTray. Ostatnim elementem osiągnięcia naukowego jest opracowanie metody określania jak mutacje wpływają na szybkość dysocjacji kompleksów białko-białko, na podstawie danych mutacji do alaniny. Jest to bardzo cenna metoda ponieważ większość danych doświadczalnych dotyczy mutacji do alaniny.


Podsumowując, osiągnięcie naukowe habilitanta jest bardzo istotnym wkładem do rozwiązania problemu teoretycznego przewidywania struktury i energetyki kompleksów białko-białko. Opracowana metodologia jest ważna zagadnieniach związanych z projektowaniem leków. Osiągnięcie naukowe spełnia pod każdym względem: merytorycznym (w tym nowości naukowej), liczbowym i wykazania samodzielności Kandydata wymogi Ustawy o Stopniach Naukowych i Tytule Naukowym.

Pan dr Mieczysław Torchała uczestniczył jako wykonawca w siedmiu projektach naukowych. Brak jest informacji wprost o kierowaniu przezeń projektami; za taki projekt można prawdopodobnie uznać ten, który wykonywał w ramach otrzymanego przezeń stypendium z programu FOCUS Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej. Biorąc pod uwagę wszechstronną aktywność naukową habilitanta oraz jego pomysłowość i pracowitość nie mam wątpliwości, że jako samodzielny pracownik naukowy poradzi sobie w doskonałym stylu również z tym aspektem działalności. Ponadto p. dr Torchała nawiązał efektywną współpracę z wieloma naukowcami: dr Ianem Moalem z EMBL (Wielka Brytania), dr Markiem Lesinkiem z IRI CNRS (Francja) oraz prof. dr hab. Januszem Rakiem z Wydziału Chemii Uniwersytetu Gdańskiego. Nawiązał również współpracę z firmą DNAStar Inc., Madison, USA w zakresie komercjalizacji serwera SwarmDock.

Pan dr Mieczysław Torchała posiada również doświadczenie dydaktyczne, zarówno jeżeli chodzi o prowadzenie jak i o organizację zajęć. W czasie studiów doktoranckich, w latach 2006-2010 prowadził na Uniwersytecie im. Adama Mickiewicza w zajęcia z chemii teoretycznej, informatyki oraz technologii informacyjnej.

Za swoje osiągnięcia w pracy naukowej p. dr Mieczysław Torchała uzyskał w roku 2009 stypendium FOCUS Fundacji na Rzecz Nauki Polskiej, w roku 2008 otrzymał nagrodę za najlepszą prezentację posterową na konferencji Modeling and Design of Molecular Materials a ponadto w roku 2009 uzyskał pierwsze miejsce i nagrodę pieniężną w konkursie „Nauka Lubi Biznes. Trening Liderów Przedsiębiorczości”.

Podsumowując stwierdzam, że dorobek p. dra Mieczysława Torchali, w tym osiągnięcie naukowe stanowiące podstawę wniosku o przeprowadzenie postępowania habilitacyjnego, spełnia pod każdym względem wymagania określone w znowelizowanej Ustawie o Stopniach Naukowych i Tytule Naukowym z dnia 14 marca 2003 r ze zmianami z dnia 11 marca 2011 roku. Pozostałe aspekty działalności Kandydata jednoznacznie wykazują, że jest on niezwykle rzetelnym, pracowitym i samodzielnym młodym naukowcem o ogromnej wiedzy merytorycznej, który chętnie podejmuje trudne problemy badawcze. Dlatego z pełnym przekonaniem wnoszę o dopuszczenie p. dra Mieczysława Torchali do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

KIEROWNIK
Pracowni Modelowania Molekularnego

prof. dr hab. Józef Adam Liwo

prof. dr hab. Józef Adam Liwo