

Protokół z posiedzenia komisji ds. postępowania habilitacyjnego doktora Dominika Gronta.

W dniu 20 września 2016 roku odbyło się posiedzenie ds. postępowania habilitacyjnego doktora Dominika Gronta, który przedstawił osiągnięcie habilitacyjne w postaci cyklu publikacji naukowych, zatytułowanego „Opracowanie nowych algorytmów modelowania białek i ich implementacja w pakiecie BioShell”. W posiedzeniu wzięli udział członkowie komisji powołani przez Radę Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego oraz przez Centralną Komisję ds. Stopni i Tytułów Naukowych, w składzie:

Prof. dr hab. inż. Grzegorz Bujacz – przewodniczący Komisji Habilitacyjnej
Prof. dr hab. inż. Piotr Paneth – recenzent
Prof. dr hab. Wiesław Nowak – recenzent
Dr hab. Joanna Trylska, prof. UW – recenzent
Prof. dr hab. Aleksandra Misicka-Kęsik – członek Komisji
Dr hab. Robert Wieczorek, prof. UW – członek Komisji
Prof. dr hab. Robert Moszyński – sekretarz Komisji

Pani Prof. dr hab. Aleksandra Misicka-Kęsik wzięła udział w posiedzeniu w formie konferencji telefonicznej.

Komisja zapoznała się z oceną jednotematycznego cyklu publikacji oraz ogólnym dorobkiem naukowym dra Dominika Gronta, przygotowaną przez trzech recenzentów: prof. dr hab. inż. Piotra Paneth z Politechniki Łódzkiej, prof. dr hab. Wiesława Nowaka z Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu i dr hab. Joannę Trylską, prof. UW z Centrum Nowych Technologii Uniwersytetu Warszawskiego oraz opinii prof. dr hab. Aleksandry Misickiej-Kęsik z Wydziału Chemii UW i opinii dr hab. Roberta Wieczorka, prof. UW. Wszystkie recenzje były pozytywne i zakończone konkluzją, że zarówno jednotematyczny cykl publikacji, jak i dorobek naukowy, organizacyjny oraz dydaktyczny Kandydata spełniają ustawowe i zwyczajowe wymagania stawiane kandydatom do stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie chemii.

Przewodniczący komisji, prof. dr hab. inż. Grzegorz Bujacz, zainicjował dyskusję na temat osiągnięcia habilitacyjnego przedstawionego przez doktora Dominika Gronta i poprosił członków komisji, w pierwszym rzędzie recenzentów, o scharakteryzowanie osiągnięcia i uzasadnienie uchwały o nadanie stopnia doktora habilitowanego nauk chemicznych dr Dominikowi Grontowi.

Jako pierwszy zabrał głos prof. dr hab. Wiesław Nowak. Stwierdził, że postęp w szeroko rozumianej biochemii białek zależy przede wszystkim od rozwoju i dostępności sprawnych metod badawczych, w tym algorytmów i kodów komputerowych. Cykl publikacji doktora Dominika Gronta należy do tego nurtu badań naukowych. Podkreślił, że podejmowane prace są ważne i potrzebne, dotyczą jak najbardziej aktualnych zagadnień

i problemów. Dr Dominik Gront stworzył szereg użytecznych narzędzi do badania struktury białek i przyczynił się do poznania i zaprojektowania nowych układów enzymatycznych. Chociaż główne wysiłki kandydata są „interdyscyplinarne” i polegały na rozwijaniu algorytmów i programowaniu komputerów, prof. Nowak podkreślił, że nie ma wątpliwości, że uzyskane rezultaty wnoszą wkład do szeroko rozumianej chemii teoretycznej, chemii białek, bioinformatyki i kwalifikują się do ubiegania się o stopień naukowy dr hab. w dyscyplinie chemia. Kandydat ma również bardzo dobre doświadczenie w pracy w międzynarodowym środowisku naukowym.

W dalszej części swojej wypowiedzi prof. Wiesław Nowak zauważył, że liczba cytowań publikacji „habilitacyjnych” nie jest wysoka, ale po części wynika to z faktu, iż niektóre prace ukazały się niedawno, zaś inne dotyczą stosunkowo specjalistycznych zagadnień, jednak te publikacje dra Gronta zostały niewątpliwie już dostrzeżone w środowisku międzynarodowym.

Ważnym dla analizy osiągnięcia habilitacyjnego był fakt stwierdzenia, czy praca dr Dominika Gronta nie sprowadzała się przypadkiem do prostego programowania pomysłów bardziej dojrzałych członków zespołów naukowych. Zarówno charakter publikacji jak i analiza oświadczeń współautorów pokazują, że tak nie było – w mojej ocenie dr D. Gront wniósł twórczy wkład w powstanie algorytmów, metod, samo prowadzenie obliczeń i analizy wyników, a oprócz tego napisał szereg ważnych programów komputerowych.

Reasumując prof. Wiesław Nowak stwierdził, że przedstawione mu do oceny współautorskie publikacje (H1-H12) dra Dominika Gronta są na dobrym poziomie naukowym, każda wnosi większy lub mniejszy wkład w arsenał programów i metod badań komputerowych białek. Główny wkład habilitanta polegał na twórczym implementowaniu różnych pomysłów związanych z modelowaniem białek metodami gruboziarnistymi i techniką Monte Carlo. Prace te zostały zauważone w społeczności specjalistów

Habilitant wykazywał bardzo dobrą aktywność w dziedzinie realizacji i kierowania projektami naukowymi. Osiągnięcia dydaktyczne dr Dominika Gronta są bardzo dobre.

W konkluzji swojego wystąpienia prof. dr hab. Wiesław Nowak stwierdził, że przedstawione do oceny osiągnięcie habilitacyjne stanowi istotny wkład do chemii. Można zastanawiać się, czy zawiera ono dostatecznie dużo nowych wyników stricte chemicznych i czy nie jest to dorobek zbyt „algorytmiczny”. W ocenie prof. Nowaka tak obszerny dorobek w dziedzinie tworzenia narzędzi krytycznie ważnych w modelowaniu chemicznym w pełni zasługuje na to by być podstawą nadania stopnia dr habilitowanego. Dorobek naukowy Pana dr. Dominika Gronta jest więcej niż dobry. Osiągnięcia dydaktyczne są bardzo dobre, a dorobek organizacyjny, zwłaszcza w dziedzinie kierowania projektami naukowymi, też w pełni odpowiada wymaganiom na tym etapie rozwoju. Prof. dr hab. Wiesław Nowak złożył też wniosek o dopuszczenie dr. Dominika Gronta do dalszych etapów postępowania habilitacyjnego.

Prof. dr hab. inż. Piotr Paneth podzielił opinię swojego przedmówcy, Pana prof. dra hab. Wiesława Nowaka, na temat ciekawej i nowoczesnej

tematyki badawczej, ważnej w świecie nauki. Profesor Paneth zwrócił uwagę, że dr Dominik Gront wniósł twórczy wkład zarówno w powstawanie algorytmów jak i metod, prowadził sam obliczenia, analizował wyniki oraz napisał ważne programy komputerowe. Podkreślił również, że program komputerowy napisany przez Habilitanta wykorzystywany jest w kilkunastu laboratoriach na świecie i stosowany był przez zespoły uczestniczące w kolejnych konkursach CASP, co świadczy o akceptacji i zaufaniu środowiska bioinformatycznego. Jest to dowód na to, że środowisko naukowe docenia narzędzia stworzone przez Habilitanta. Prof. Paneth zdecydowanie jest za uznaniem przedstawionego dorobku jako duży wkład do chemii obliczeniowej i w zupełności wystarczający do uzyskania stopnia doktora habilitowanego. Pomimo to, że dr Dominik Gront nie ma własnej monoautorskiej publikacji to jest jednoznacznie wskazywany na lidera publikacji, które zostały przedstawione do habilitacji. Jego rola przewodnia jest duża co wskazuje na dużą samodzielności naukową niż dopiero jej zdobywanie. Biorąc pod uwagę analizę osiągnięcia naukowego, całość dorobku i sylwetkę naukową Habilitanta, jak również dane scjentometryczne (łączny współczynnik oddziaływania artykułów naukowych bliski 100, znaczącą liczbę cytowań 450 oraz współczynnik Hirsha równy 13) prof. dr hab. inż. Piotr Paneth uważa dorobek Habilitanta za spełniający wymogi zwyczajowe i formalne znowelizowanej 18 marca 2011 r. (Dz. U. nr 84.poz.455) Ustawy z dnia 14 marca 2003 roku o stopniach naukowych i tytule naukowym oraz o stopniach i tytule w zakresie sztuki (Dz.U. nr 65, poz. 595) i z pełnym przekonaniem rekomenduje pozostałym członkom Komisji Habilitacyjnej poparcie wniosku, zaś Radzie Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego nadanie stopnia doktora habilitowanego dr. Dominikowi Grontowi.

Dr hab. Joanna Trylska prof. UW w pełni zgodziła się z wypowiedziami swoich przedmówców. Dodała, że osiągnięcie naukowe dra Gronta to nowe podejścia obliczeniowe z dziedziny modelowania, bioinformatyki oraz analizy symulacji i struktury białek, które zostały przełożone na pakiet oprogramowania BioShell. Pakiet wspomaga modelowanie dynamiki molekularnej białek w modelach gruboziarnistych, a także rozwiązywanie problemów bioinformatycznych. Różne moduły tego pakietu były przedmiotem publikacji. Aż w jedenastu pracach, z 12-tu wybranych do osiągnięcia naukowego, dr Dominik Gront jest autorem korespondującym, co świadczy o tym, że miał istotny wkład merytoryczny. Dodatkowo, z oświadczeń współautorów oraz opisu udziału własnego można wnioskować o dominującej roli Habilitanta w badaniach i tworzeniu tych prac. Po doktoracie Dr Gront odbył wiele staży badawczych, w tym aż dwa staże podoktorskie w USA w bardzo dobrych laboratoriach. Taka duża aktywność wyjazdowa zasługuje na uznanie.

Jako ostatni głos zabrał dr hab. Robert Wieczorek, prof. UW. Podkreślił, że osiągnięcie naukowe habilitanta nie mieści się w ramach standardowego osiągnięcia naukowego, którym zwykle jest cykl prac mających wspólny mianownik tematyczny lub metodologiczny. W ocenie prof. Wieczorka Habilitant przekracza tą definicję poprzez jej rozszerzenie:

z jednej strony mocno stąpa na dobrze znanym gruncie twardego raportu naukowego (cykl 12 prac o łącznym współczynniku wpływu 45,9) z drugiej strony tworzy i implementuje algorytm, który jako taki stał się w ostatnich latach niemal równoprawnym metodom eksperymentalnym narzędziem badawczym. Autor bardzo dobrze wpisuje się tym w warszawską szkołę metodologiczną znaną np. ze stworzenia doskonałej metody SAPT.

W dalszej części swojej wypowiedzi prof. Wieczorek stwierdził, że w działalności dydaktycznej osiągnięcia Habilitanta są imponujące. Najlepiej przemawiają same liczby: dziewięciu wypromowanych dyplomantów, dziesięć prowadzonych modułów przedmiotów (prawie każdy po dwie formy kształcenia tj. wykład oraz laboratorium) prowadzonych zarówno po polsku jak i w języku angielskim. Prof. Wieczorek zwrócił również uwagę, że jako prodziekan ds. nauczania Wydziału Chemii Uniwersytetu Wrocławskiego nie spotkał się jeszcze z tak wszechstronnym nauczycielem akademickim.

Pani prof. dr hab. Aleksandra Misicka-Kęsik oddała swój głos podczas telefonicznej konferencji z przewodniczącym Komisji Habilitacyjnej – Profesorem Grzegorzem Bujaczem. Prof. Misicka-Kęsik podtrzymała swoją wcześniejszą opinię zawartą w piśmie i oddała swój głos na „tak” za nadaniem stopnia doktora habilitowanego dr. Dominikowi Grontowi.

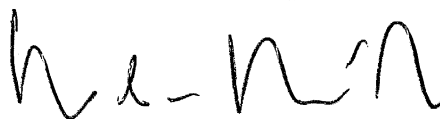
Prof. dr hab. inż. Grzegorz Bujacz powiedział, że w ostatnim dwudziestoleciu notujemy bardzo dynamiczny rozwój metod eksperymentalnych służących to określenia struktur makromolekuł, poczynając od krystalografii białek poprzez NMR, a skończywszy na niskotemperaturowej mikroskopii elektronowej. Metody te przyczyniły się do wzrostu wiedzy o strukturach białek, kwasów nukleinowych i ich kompleksów oraz ich roli w procesach życiowych. Wiedza ta sprawiła, że środowisko naukowe stara się podejmować coraz to trudniejsze wyzwania badawcze: struktury białek błonowych, białka słabo ustrukturyzowane, olbrzymie wielobiałkowe kompleksy. W przypadkach, gdy metody eksperymentalne zawodzą ze względów metodologicznych, ekonomicznych, czy czasowych znaczenia napierają metody obliczeniowe. Zgromadzona dotychczas wiedza eksperymentalna stanowi świetną podstawę i układ odniesienia. By jednak efektywnie korzystać z metod obliczeniowych potrzebny jest rozwój metodyki oparty na znajomości zagadnienia. Dr Dominik Gront pokazuje bardzo dobre przygotowanie merytoryczne ze strony chemii i biochemii. W opinii przewodniczącego ma to istotne znaczenie. O ile zrozumienie zjawiska jest podstawą do rozwiązania problemu, podczas gdy tworzenie oprogramowania jest narzędziem, to po stronie twórcy oprogramowania leży odpowiedzialność za unikanie błędów merytorycznych i niedopuszczenie do popełniania błędów grubych przez niedoświadczonego użytkownika. U kandydata widać, że nie tylko sam odebrał odpowiednie wykształcenie, ale również przekazuje swoim studentom właściwe wzorce. Prof. Bujacz zwrócił również uwagę na fakt, że dr Dominik Gront poszerzał swą wiedzę odbywając staże w bardzo dobrych ośrodkach naukowych, a po powrocie nadal zajmuje się bardzo trudną i ambitną tematyką.

Przewodniczący komisji, prof. dr hab. inż. Grzegorz Bujacz, po podsumowaniu dyskusji zarządził głosowanie w trybie jawnym nad wnioskiem o nadanie dr. Dominikowi Grontowi stopnia naukowego doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych, dyscyplina chemia.

Komisja w głosowaniu przeprowadzonym w trybie jawnym (7 głosów ważnych, 7 głosów „tak”, 0 głosów „nie”, 0 głosów wstrzymujących) podjęła uchwałę o następującej treści:

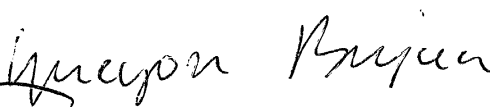
„Komisja Habilitacyjna, powołana przez Centralną Komisję do Spraw Stopni i Tytułów 9 czerwca 2016 r. w celu przeprowadzenia postępowania habilitacyjnego dr Dominika Gronta, po zapoznaniu się z jednotematycznym cyklem publikacji i ogólnym dorobkiem Kandydata oraz recenzjami, rekomenduje Radzie Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego nadanie dr. Dominikowi Grontowi stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk chemicznych, dyscyplinie chemia”

Sekretarz komisji



Prof. dr hab. Robert Moszyński

Przewodniczący komisji

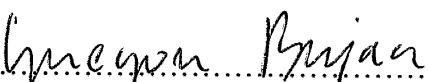


Prof. dr hab. inż. Grzegorz Bujacz

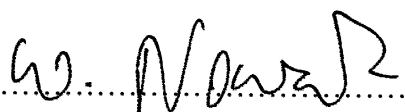
Wynik jawnego/~~tajnego~~ głosowania członków Komisji Habilitacyjnej


Uprawnionych do głosowania	7 osób
Obecnych na posiedzeniu	7 osób
Za wnioskiem	7 osób
Przeciw	0 osób
Wstrzymujących się	0 osób

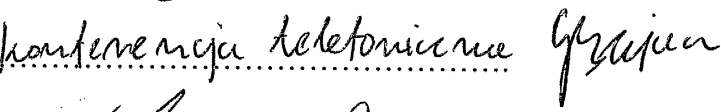
Podpisy członków komisji:

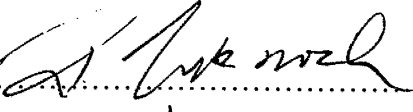
1/ prof. dr hab. inż. Grzegorz Bujacz 

2/ prof. dr hab. inż. Piotr Paneth

3/ prof. dr hab. Wiesław Nowak..... 

4/ dr hab. Joanna Trylska, prof. UW 

5/ prof. dr hab. Aleksandra Misicka-Kęsik 

6/ dr hab. Robert Wieczorek, prof. UW 

7/ prof. dr hab. Robert Moszyński – sekretarz komisji 