

Prof. dr hab. inż. Marta Szachniuk

Poznań, 6.05.2026

Instytut Informatyki

Politechnika Poznańska

mszachniuk@cs.put.poznan.pl

Recenzja Rozprawy Doktorskiej

Tytuł: Metody wieloskalowego modelowania oddziaływań białko-białko i białko-peptyd

Autor: mgr Mateusz Zalewski

Promotorzy: prof. dr hab. Sebastian Kmiecik, prof. dr hab. Dima Kozakov

Tematyka badawcza

Recenzowana rozprawa doktorska mgr. Mateusza Zalewskiego podejmuje aktualną i kluczową z punktu widzenia współczesnej biologii strukturalnej, biofizyki oraz projektowania leków problematykę modelowania oddziaływań międzybiałkowych i białko-peptyd. Jak słusznie zauważa Autor rozprawy, biologia molekularna znajduje się obecnie u progu rewolucji napędzanej przez algorytmy sztucznej inteligencji, jednak wiarygodne przewidywanie dynamiki kompleksów, wpływu warunków środowiskowych (takich jak pH) czy specyficznych ograniczeń topologicznych (np. cyklizacja peptydów) wciąż stanowi ogromne wyzwanie obliczeniowe. Badania Kandydata skupiają się na rozwoju i wdrożeniu zaawansowanych metod obliczeniowych, które dążą do realistycznego odwzorowania złożoności analizowanych układów biologicznych poprzez uwzględnienie elastyczności strukturalnej, integrację modeli językowych białek oraz symulacje dynamiki molekularnej. Tematyka ta doskonale wpisuje się w nurt nowoczesnej bioinformatyki strukturalnej oraz biofizyki obliczeniowej, łącząc klasyczne podejścia fizykochemiczne z najnowszymi osiągnięciami w dziedzinie głębokiego uczenia.

Układ rozprawy doktorskiej (w tym informacje o jej poszczególnych częściach składowych)

Praca została przygotowana w formie tematycznego cyklu dziewięciu artykułów naukowych [A1]–[A9], opublikowanych w latach 2021–2025 w recenzowanych czasopismach o zasięgu międzynarodowym: *International Journal of Molecular Sciences* (1 publikacja), *Journal*

of Chemical Theory and Computation (2 publikacje), *Molecules* (1 publikacja), *Nucleic Acids Research* (2 publikacje), *Protein Science* (2 publikacje), *EMBO Reports* (1 publikacja). Jest to imponujący dorobek publikacyjny, świadczący o wyjątkowej pracowitości Kandydata. Na szczególne uznanie zasługuje również bardzo wysoki poziom opracowania graficznego rozprawy. Ilustracje zawarte w artykułach stanowiących podstawę dysertacji, jak również dodatkowe rysunki towarzyszące komentarzowi Autora, są wykonane niezwykle starannie i estetycznie, a przy tym w sposób czytelny wspierają prezentację omawianych zagadnień. Struktura dysertacji jest przejrzysta i charakteryzuje się logicznym, spójnym układem treści. Składa się z trzech głównych części. W pierwszej, stanowiącej wprowadzenie do tematyki badań, Autor definiuje cel i zakres pracy (rozdział 1), omawia techniki eksperymentalne, klasyczne metody dokowania oraz rewolucję wywołaną przez modele AI, takie jak AlphaFold (rozdział 2). W części drugiej, która obejmuje rozdziały 3–6, Autor prezentuje artykuły naukowe tworzące cykl, podzielone na cztery bloki tematyczne. Każdy blok rozpoczyna się od krótkiego wprowadzenia nakreślającego tło badawcze i unikalny wkład danej publikacji. Rozdział 3 skupia się na rozwoju nowych metod dokowania białek i peptydów (publikacje [A1]–[A4]); rozdział 4 dotyczy modelowania elastyczności struktur białkowych z wykorzystaniem narzędzia CABS-flex (publikacje [A5]–[A6]); rozdział 5 prezentuje badania nad agregacją białek zależną od pH w ramach projektu Aggrescan4D (publikacje [A7]–[A8]); rozdział 6 poświęcony jest zastosowaniom dynamiki molekularnej w biologii strukturalnej, w szczególności analizie wpływu fosforylacji na białka szypuły rybosomalnej (publikacja [A9]). Trzecia część zawiera syntetyczne zestawienie najważniejszych osiągnięć naukowych, wnioski końcowe oraz bibliografię. W układzie pracy uwzględniono również elementy formalne, takie jak spis treści oraz wykaz używanych skrótów. Integralną część rozprawy stanowią pełne teksty artykułów naukowych stanowiących podstawę pracy doktorskiej. Teksty artykułów zostały załączone w rozdziałach 3–6.

Układ pracy mgr. Mateusza Zalewskiego jest prawidłowy i w odpowiada standardom przyjętym dla rozpraw doktorskich opartych na zbiorze publikacji. Całość materiału, łącząca zaawansowane algorytmy bioinformatyczne z interpretacją procesów biologicznych, jest spójna merytorycznie i poprawnie udokumentowana. Warto jednak zauważyć, że w wielu współczesnych rozprawach doktorskich coraz częściej uwzględnia się dodatkowe osiągnięcia Doktoranta, takie jak aktywność dydaktyczna, udział w projektach i grantach badawczych, staże i wizyty naukowe w ośrodkach zagranicznych, otrzymane nagrody oraz prezentacje

wyników badań na konferencjach krajowych i międzynarodowych. Tego typu informacje pozwalają pełniej ocenić dorobek naukowy oraz aktywność badacza w środowisku akademickim. W recenzowanej rozprawie tego rodzaju dane nie zostały przedstawione. Wydaje się, że ich uzupełnienie byłoby wartościowe, gdyż pozwoliłoby lepiej osadzić przedstawione badania w szerszym kontekście aktywności naukowej Kandydata oraz podkreślić jego zaangażowanie w działalność badawczą i dydaktyczną. W dysertacji przydałaby się także dodatkowa sekcja z listą algorytmów/narzędzi opracowanych przez Autora w ramach pracy doktorskiej. Nowe metody stanowią wartościowy element doktoratu i warto byłoby to uwypuklić, podając w jednym miejscu ich nazwy wraz z linkami do narzędzi, w których zostały zaimplementowane, lub do repozytoriów, w których je umieszczono.

Zastosowane piśmiennictwo

Zastosowane piśmiennictwo nie budzi zastrzeżeń – jest adekwatne do zakresu tematycznego rozprawy i ściśle związane z prezentowaną w niej problematyką badawczą. Bibliografia zawiera 145 pozycji literatury i stanowi solidną podstawę teoretyczną dla przeprowadzonych badań. Autor odwołuje się do prac, które obejmują istotne pozycje literaturowe z dziedziny biologii strukturalnej, bioinformatyki oraz modelowania molekularnego opublikowane w prestiżowych czasopismach naukowych, takich jak *Nature*, *Science*, *Cell* czy *Nucleic Acids Research*, co świadczy o bardzo dobrym rozeznaniu w światowej literaturze przedmiotu. Piśmiennictwo jest aktualne – Autor cytuje m.in. najnowsze doniesienia z lat 2024 i 2025, w tym prace dotyczące modeli głębokiego uczenia AlphaFold 3 oraz ESMFold, co pozwala na rzetelne osadzenie uzyskanych wyników w kontekście obecnego, dynamicznie zmieniającego się stanu wiedzy.

W spisie literatury znalazłam nieliczne drobne usterki i niespójności, na przykład niekonsekwencję w stosowaniu skrótów nazw czasopism (por. pełną nazwę *Drug Discovery Today* w pozycjach 1 i 3 oraz zapis skrócony *Drug Discov Today* w pozycji 2), brak jednolitości w liczbie wymienianych współautorów, czy brak nazwy źródła/preprintu (poz. 32). Zauważalna jest niekonsekwencja w zapisie skróconych nazw czasopism – w części pozycji stosowane są skróty z kropkami, natomiast w innych bez kropek, co wskazuje na brak pełnej standaryzacji formatowania bibliografii.

Cel pracy oraz zastosowane metody badawcze

Jak podaje Autor rozprawy, głównym celem jego badań było opracowanie i wdrożenie zaawansowanych metod modelowania oddziaływań molekularnych, które w sposób realistyczny odzwierciedlają złożoność układów biologicznych. Mateusz Zalewski postawił sobie za zadanie stworzenie zestawu narzędzi pozwalających zarówno opisywać rzeczywistość molekularną, jak i aktywnie ją projektować oraz interpretować, z uwzględnieniem elastyczności struktur, ograniczeń topologicznych oraz wpływu środowiska. Realizując tak sformułowany cel, Autor oparł swój warsztat badawczy na podejściu wieloskalowym, umiejętnie łącząc metody o różnym stopniu rozdzielczości i złożoności obliczeniowej, m.in. modelowanie gruboziarniste, symulacje Monte Carlo, dynamikę molekularną i techniki głębokiego uczenia. Zaawansowane metody badawcze zostały poddane rzetelnej walidacji na powszechnie stosowanych zbiorach testowych, takich jak ZDOCK (dla dokowania białko-białko), ADCP (dla peptydów cyklicznych) oraz zestawy oparte na klasyfikacji ECOD.

Uważam, że metody badawcze zastosowane przez mgr. Mateusza Zalewskiego są właściwe do rozwiązywania problemów naukowych postawionych w rozprawie. Ich dobór świadczy o dobrej znajomości nowoczesnych i efektywnych metod oraz technologii stosowanych w naukach o życiu i naukach obliczeniowych. Autor wykazał się biegłością w łączeniu klasycznych algorytmów próbkowania z najnowszymi osiągnięciami z obszaru sztucznej inteligencji, co potwierdza jego kompetencje w dziedzinie biologii i biofizyki obliczeniowej. Na uznanie zasługuje sprawne wykorzystanie różnorodnego oprogramowania rozwijanego przez inne zespoły badawcze (m.in. Rosetta, Modeller, PD2) oraz zdolność do implementacji własnych rozwiązań algorytmicznych. W mojej ocenie Kandydat w pełni zrealizował cele badawcze postawione w dysertacji.

Wyniki badań oraz ich praktyczne zastosowanie

Wyniki będące podstawą rozprawy doktorskiej zostały przedstawione w dziewięciu publikacjach wieloautorskich [A1]–[A9]. Mgr Mateusz Zalewski jest pierwszym autorem pięciu z tych prac, w pozostałych występuje na trzeciej lub ósmej pozycji. Wszystkie publikacje ukazały się w latach 2021–2025.

Publikacja [A1], zamieszczona w *International Journal of Molecular Sciences* (IF₂₀₂₁=6,2; 140 pkt; kwartyl Q1/Q2; 9 cytowań według Web of Science) przedstawia metodę dokowania

białko-białko, która dzięki wykorzystaniu gruboziarnistego modelu CABS i dynamiki REMC pozwala na jednoczesne symulowanie orientacji cząsteczek oraz dużych zmian konformacyjnych ich szkieletu w jednym kroku obliczeniowym. Badania przeprowadzone na zbiorze 62 kompleksów wykazały, że podejście to pozwala uzyskać modele o akceptowalnej dokładności przy stosunkowo niskim nakładzie zasobów obliczeniowych, szczególnie w przypadkach o niskiej i średniej elastyczności. Autorzy pokazali, że modelowanie swobodnego dokowania z uwzględnieniem elastyczności szkieletu jest wykonalne i poprawia próbkowanie przestrzeni konformacyjnej w porównaniu do tradycyjnych metod traktujących białka jako obiekty sztywne.

W pracy [A2], opublikowanej w *Journal of Chemical Theory and Computation* (IF₂₀₂₅=6,4; 140 pkt; kwartył Q1/Q2; brak cytowań w Web of Science), zaprezentowano adaptację metody CABS-dock do elastycznego dokowania peptydów cyklicznych, wprowadzając specjalne więzy odległościowe pozwalające na zachowanie zamkniętej topologii cząsteczki podczas symulacji. Publikacja rozszerza wyniki opisane w [A1] poprzez przeniesienie sprawdzonej tam metodologii wieloskalowego modelowania (model CABS i dynamika REMC) z dużych kompleksów białko-białko na specyficzną grupę ligandów, jakimi są peptydy cykliczne. Badania na 38 kompleksach wykazały, że zastosowane podejście umożliwia skuteczne dokowanie globalne bez uprzedniej wiedzy o miejscu wiązania oraz oferuje szersze próbkowanie różnorodnych stanów konformacyjnych w porównaniu do deterministycznych metod opartych na sztucznej inteligencji. W kontekście pracy [A2] chciałabym zapytać czy protokół dokowania globalnego z metody CABS mógłby zostać zintegrowany z modelami predykcyjnymi opartymi na głębokim uczeniu tak, aby nie tylko dostarczać alternatywnych konformacji, ale również weryfikować lub korygować błędy predykcyjne tych modeli w obszarach o wysokiej elastyczności?

Artykuł [A3] opublikowany w czasopiśmie *Molecules* (IF₂₀₂₁=4,9; 140 pkt; kwartył Q2; 11 cytowań według Web of Science) przedstawia protokół wykorzystujący krótkie symulacje MD w środowisku wodnym jako dodatkowy etap oceny i selekcji modeli kompleksów białko-peptyd uzyskanych z dokowania gruboziarnistego. Autorzy wykazali, że estymacja energii oddziaływań w polach siłowych AMBER i CHARMM pozwala skuteczniej identyfikować modele o wysokiej dokładności niż standardowa funkcja oceny oparta na klastrowaniu struktur. Dowiedli także, że precyzja rankingu energetycznego jest silnie uzależniona od jakości rekonstrukcji pełnoatomowej struktur receptora, co wskazuje na kluczowe

znaczenie dokładnego odwzorowania łańcuchów bocznych dla wiarygodności oceny. Biorąc pod uwagę wysoką złożoność obliczeniową dynamiki molekularnej, chciałabym zapytać jakie są największe systemy białkowo-peptydowe, które udało się z sukcesem poddać opisanej w [A3] procedurze w ramach przeprowadzonych eksperymentów walidacyjnych?

Publikacja [A4] ukazała się w *Journal of Chemical Theory and Computation* (IF₂₀₂₅=6,4; 140 pkt; kwartył Q1/Q2; 13 cytowań w Web of Science) i opisuje zastosowanie modelu językowego ESMFold do dokowania peptydów do białek w autorskim protokole opartym na elastycznych linkerach oraz strategii losowego maskowania reszt sekwencji wejściowej. Wyniki badań wykazały, że zastosowanie optymalnych parametrów maskowania pozwala na uzyskanie akceptowalnych modeli dla ok. 21–28% testowanych kompleksów, co jest skutecznością zbliżoną do tradycyjnych metod dokowania. Autorzy wykazali, że kluczową zaletą ESMFold jest wyjątkowa efektywność oraz brak konieczności generowania wielosekwencyjnych uliniowań, dzięki czemu model ten jest użyteczny w wysokoprzepustowym projektowaniu peptydów.

Artykuł [A5], zamieszczony w *Protein Science* (IF₂₀₂₄=5,2; 100 pkt; kwartył Q1; 12 cytowań według Web of Science), zawiera przegląd zastosowań metody CABS-flex w badaniu wpływu elastyczności strukturalnej na funkcje biologiczne białek i ich kompleksów. Przedstawiono w nim możliwości narzędzia w obszarach takich jak identyfikacja miejsc allosterycznych, analiza wpływu mutacji na dynamikę oraz predykcja regionów podatnych na agregację we współpracy z algorytmem Aggrescan3D. Publikacja prezentuje CABS-flex jako wydajną metodę wieloskalową, która dostarcza dynamicznych zespołów konformacyjnych będących uzupełnieniem dla statycznych predykcji opartych na sztucznej inteligencji.

W pracy [A6] opublikowanej w *Nucleic Acids Research* (IF₂₀₂₄=13,1; 200 pkt; kwartył Q1; 20 cytowań w Web of Science) autorzy przedstawiają wersję 3.0 aplikacji sieciowej CABS-flex, która wprowadza zaawansowane tryby modelowania elastyczności białek, w tym podejście wykorzystujące wskaźniki pLDDT do precyzyjnego modulowania siły więzów strukturalnych. Narzędzie integruje również protokół do predykcji struktury i dynamiki peptydów liniowych oraz cyklicznych, oferując wysoką jakość modeli pełnoatomowych dzięki wdrożeniu metody rekonstrukcji *cg2all* opartej na głębokim uczeniu.

Publikacje [A7] (*Nucleic Acids Research* – IF₂₀₂₄=13,1; 200 pkt; kwartył Q1; 18 cytowań w Web of Science) oraz [A8] (*Protein Science* – IF₂₀₂₄=5,2; 100 pkt; kwartył Q1; 11 cytowań wg Web of Science) prezentują narzędzie Aggrescan4D służące do badania skłonności agregacyjnych

białek z uwzględnieniem wpływu pH otoczenia oraz dynamiki konformacyjnej struktur. Artykuł [A7] skupia się na opisie aplikacji sieciowej oraz wprowadzonej w narzędziu strategii konsensusowej wyboru metryk dopasowanej do charakteru strukturalnego badanego białka. Z kolei praca [A8] stanowi kompleksowe kompendium wiedzy o metodzie, prezentując jej pełną architekturę oraz walidację na układach terapeutycznych, która potwierdza skuteczność algorytmu w projektowaniu mutacji poprawiających rozpuszczalność przeciwciał. W nawiązaniu do wyboru metryk jestem ciekawa czy na podstawie przeprowadzonych już eksperymentów walidacyjnych Autor dostrzega możliwość lub potrzebę przypisania jeszcze bardziej specyficznych wariantów metryk lub ich wag do konkretnych podtypów struktur?

Artykuł [A9], który ukazał się w *EMBO Reports* ($IF_{2025}=6,2$; 140 pkt; kwartył Q1; 5 cytowań w Web of Science) jest wynikiem współpracy kilku laboratoriów zajmujących się badaniem rybosomów. Jego autorzy wykazują, że białka szypuły rybosomalnej (P-stalk) występują w komórkach niemal wyłącznie w postaci ufosforylowanej, co zapewnia optymalną szybkość i dokładność procesu translacji. Dzięki symulacjom dynamiki molekularnej wykazano, że fosforylacja indukuje przejście strukturalne domeny C-końcowej do stabilnej konformacji typu U-bent, stabilizowanej przez sieć wewnątrz-molekularnych mostków solnych. Taka zmiana przestrzenna optymalizuje oddziaływania rybosomu z czynnikami pomocniczymi, takimi jak GTPazy translacyjne oraz kinaza Gcn2, co umożliwia sprawną adaptację komórki do warunków stresowych.

Uważam, iż wyniki badawcze uzyskane przez Autora w rozprawie doktorskiej zasługują na pozytywną ocenę. Dużym atutem rozprawy jest fakt, że mgr. Zalewski jest wiodącym autorem większości publikacji w cyklu, a wszystkie prezentowane artykuły ukazały się w czasopismach z I lub II kwartyła. Sumaryczny współczynnik wpływu opublikowanych prac wynosi 66,7 (wg roku publikacji), a sumaryczna punktacja ministerialna to 1300 pkt. Zgodnie z informacjami podawanymi przez Web of Science (na dzień 5.05.2026), mgr Mateusz Zalewski posiada H-indeks = 7, a jego publikacje mają łącznie 91 cytowań obcych, Google Scholar podaje H-indeks = 8 oraz liczbę cytowań równą 156. Biorąc pod uwagę fakt, że wszystkie prace, których współautorem jest Doktorant ukazały się w latach 2021–2025, uważam, że są to bardzo dobre wskaźniki i świadczą o tym, że publikacje adresują aktualne problemy badawcze, trafiają do właściwego grona odbiorców i mają wpływ na badania innych zespołów zajmujących się podobną tematyką.

Nieprawidłowości i braki w ocenianej rozprawie doktorskiej

Rozprawa została napisana poprawnym, przejrzystym i zrozumiałym językiem, co bardzo ułatwia jej lekturę oraz ocenę przedstawionych wyników. Jak każda obszerna praca o charakterze naukowym, zawiera ona pewne drobne usterki i nieścisłości redakcyjne, które jednak nie wpływają na ogólną wysoką jakość merytoryczną rozprawy ani nie umniejszają jej wartości naukowej. O niektórych brakach i usterkach wspomniałam w poprzednich sekcjach recenzji, kilka pozostałych przedstawiam poniżej.

Cytowania literaturowe w rozprawie zostały przedstawione w formie odnośników w indeksie górnym. Nie pełnią one jednak funkcji aktywnych linków prowadzących do źródeł bibliograficznych, co prawdopodobnie było zamierzeniem Autora – po ich kliknięciu wyświetla się komunikat związany z integracją narzędzia Zotero z Google Docs, który nie zawiera treści merytorycznej ani nie kieruje do właściwych publikacji. Dodatkowo zauważalna jest niekonsekwencja w umieszczaniu odnośników cytowań na końcu zdań – w niektórych przypadkach znajdują się one przed kropką kończącą zdanie, a w innych po kropce.

W rozprawie sporadycznie pojawiają się przypadki pozostawiania krótkich spójników i przyimków na końcu wiersza. Jest to drobna kwestia edytorska, jednak jej korekta przyczyniłaby się do poprawy estetyki i staranności składu tekstu.

W pracy sporadycznie pojawiają się anglicyzmy lub kalki językowe, mimo że istnieją ich utrwalone odpowiedniki w języku polskim. Przykładowo, używane jest sformułowanie „cele PPI” (str. 12), które stanowi bezpośrednie tłumaczenie angielskiego PPI targets, a w języku polskim wymaga doprecyzowania – np. jako „cele molekularne związane z oddziaływaniami białko-białko” lub „oddziaływania białko-białko jako cele terapeutyczne”). Podobnie termin „coarse-graining” na str. 19 jest użyty bez polskiego odpowiednika, podczas gdy w literaturze funkcjonuje określenie „uziarnianie”; w innym miejscu Autor pisze o „podejściach *coarse-grained*” (str. 22) zamiast o podejściach gruboziarnistych. W tekście zdarzają się również nieliczne błędy językowe, np. „CABS-dock umożliwia również stosowanie więzów odległości (*distance restraints*) - dodatkowych ograniczeń geometrycznych nakładanych na wybrane pary atomów lub reszt aminokwasowych.” zamiast poprawnej formy „... reszty aminokwasowe” (str. 22).

W pracach będących kompilacją publikacji wieloautorskich dobrą praktyką jest dołączanie oświadczeń współautorów, precyzujących oraz potwierdzających indywidualny wkład Doktoranta oraz pozostałych współautorów w poszczególne artykuły. W recenzowanej

dysertacji takich oświadczeń nie zamieszczono, choć Autor przedstawił własny opis swojego wkładu w poszczególne publikacje. Część artykułów zawiera sekcję „Author contribution”, mającą bardzo skrótowy charakter, jednak nie wszystkie publikacje (w szczególności [A2], [A4] i [A7]) zawierają tego typu informacje. W mojej opinii utrudnia to nieco jednoznaczną ocenę rzeczywistego zakresu udziału Doktoranta w poszczególnych pracach, zwłaszcza w przypadku publikacji wieloautorskich, w których nie pełni on roli pierwszego autora (np. praca [A7]). Uważam, że wskazane byłoby uzupełnienie rozprawy o oświadczenia współautorów potwierdzające przedstawiony przez Doktoranta zakres jego wkładu.

Inne pytania i komentarze

Na str. 18 Autor pisze o NMR i cryo-EM. Chciałabym zapytać, jakie są największe struktury białek określone z wykorzystaniem NMR. Drugie pytanie dotyczy cryo-EM: czy rzeczywiście rozdzielczość struktur białkowych uzyskiwanych tą metodą zrównała się już z rozdzielczością struktur otrzymywanych metodą krystalografii rentgenowskiej?

W podsumowaniu rozprawy Autor podaje imponującą statystykę narzędzia Aggrescan4D, wskazując, że serwer w ciągu pierwszego roku od uruchomienia wykonał ponad 12 tysięcy predykcji. Jest to bez wątpienia dowód na duże zapotrzebowanie społeczności naukowej na tego typu rozwiązania. Biorąc jednak pod uwagę, że publiczny interfejs narzędzia nie udostępnia licznika odwiedzin ani statystyk zadań (w każdym razie nie znalazłam takowych), chciałabym zapytać w jaki sposób zbierane i weryfikowane są te dane oraz jak liczbowo statystyka ta prezentuje się obecnie?

W dysertacji wskazano dwóch promotorów. Zwraca jednak uwagę fakt, że drugi promotor (prof. D. Kozakov) nie jest współautorem żadnej z publikacji stanowiących podstawę rozprawy doktorskiej, a w pracy nie zamieszczono podziękowań wskazujących na jego udział w realizacji badań. Jaką rolę pełnił drugi promotor skoro nie uczestniczył w badaniach prowadzonych w ramach doktoratu?

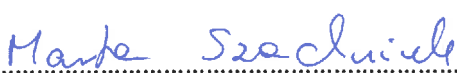
Wnioski końcowe

Autor recenzowanej pracy wykazał się biegłością w prowadzeniu zaawansowanych badań na styku bioinformatyki i biofizyki oraz umiejętnością wnikliwej analizy danych i poprawnego wnioskowania. Zapoznał się z aktualnym stanem wiedzy w zakresie biologii strukturalnej i modelowania oddziaływań molekularnych, co potwierdza m.in. obecność w bibliografii najnowszych doniesień z lat 2024–2025. Mgr Mateusz Zalewski posiada ugruntowaną wiedzę

w obszarze bioinformatyki strukturalnej, biofizyki obliczeniowej oraz sztucznej inteligencji, łącząc klasyczne algorytmy próbkowania konformacyjnego z metodami uczenia głębokiego. Wykazał się zdolnością do prowadzenia badań naukowych, pracy w zespołach interdyscyplinarnych oraz praktycznego wykorzystania wyników badań, czego efektem jest opracowanie i udostępnienie narzędzi wspierających projektowanie leków oraz analizę stabilności białek terapeutycznych.

Dysertację mgr. Mateusza Zalewskiego pt. „Metody wieloskalowego modelowania oddziaływań białko-białko i białko-peptyd” oceniam pozytywnie i stwierdzam, że spełnia ona wymagania stawiane rozprawom doktorskim określone w Ustawie z dnia 20.07.2018 r. – Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (tekst jednolity: Dz. U. z 2024 r. poz. 1571 z późn. zm.) oraz stanowi oryginalne rozwiązanie przez autora zagadnienia naukowego. Rozprawa doktorska prezentuje ogólną wiedzę teoretyczną Kandydata w dyscyplinie nauki fizyczne oraz umiejętność samodzielnego prowadzenia pracy naukowej. Wnoszę o dopuszczenie mgr. Mateusza Zalewskiego do kolejnego etapu postępowania kwalifikacyjnego w celu nadania stopnia naukowego doktora w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie: nauki fizyczne.

Ze względu na wyjątkowo dużą liczbę artykułów pierwszoautorskich Kandydata opublikowanych w wysokopunktowanych czasopismach składam również wniosek o wyróżnienie niniejszej rozprawy doktorskiej.



prof. dr hab. inż. Marta Szachniuk