



dr hab. inż. Piotr A. Kowalski, prof. AGH
Katedra Informatyki Stosowanej i Fizyki Komputerowej,
Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej,
Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie,
al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków
email: pkowal@agh.edu.pl

oraz



Centrum Informatycznych Metod Analizy Danych
Instytut Badań Systemowych
Polskiej Akademii Nauk

Kraków, 20.09.2024

RECENZJA

rozprawy doktorskiej Pana mgra Andrzeja Kokoszy pt. „Wieloskalowe modelowanie systemów biologicznych: obliczeniowe podejście do badania zjawisk naturalnych od´ poziomu komórki po ekosystemy”
”Multiscale Modelling of Biological Systems: A Computational Approach to Studying Natural Phenomena from Cellular to Ecological Levels”

1. Uwagi ogólne

Prawną podstawą przygotowania recenzji rozprawy doktorskiej Pana mgr. Andrzeja Kokoszy jest Umowa z Uniwersytetem im. Adama Mickiewicza w Poznaniu – Wydziałem Matematyki i Informatyki reprezentowaną przez Dziekana Pana Profesora UAM dr. hab. Krzyszofa Dyczkowiskiego, którą otrzymałem 5 sierpnia 2024 r.

Recenzja została przygotowana na podstawie rozprawy doktorskiej. Przedmiotowa praca została zrealizowana pod kierunkiem Pana prof. UAM dr. hab. Krzyszofa Dyczkowiskiego, z udziałem promotora pomocniczego – Pana dra Wojciecha Pałubickiego - na Wydziale Matematyki i Informatyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu. Recenzowana rozprawa doktorska przedstawiona została w postaci woluminu wydanego przez Doktoranta. Rozprawa doktorska jest rozpatrywana w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie informatyka.

Recenzowana praca doktorska skupia się na zastosowaniu modelowania matematycznego i symulacji komputerowych do badania zjawisk naturalnych o dużej złożoności, takich jak wzrost roślin oraz pożary lasów. Celem pracy jest wykazanie, że modele obliczeniowe mogą nie tylko dokładnie odwzorowywać, ale również przewidywać zachowanie złożonych systemów biologicznych na różnych skalach. Badania te

podkreślają znaczenie interdyscyplinarnego podejścia, które łączy biologię z informatyką, w celu rozwijania nowych strategii obliczeniowych.

Autor przedstawia trzy różne modele, każdy z nich odnoszący się do innego rodzaju zjawisk biologicznych. Pierwszy model, dyskretny, dotyczy formowania wzorców naczyniowych w *Arabidopsis thaliana*, a jego skuteczność została potwierdzona na podstawie danych empirycznych. Drugi model opisuje procesy sygnalizacji w drzewach, koncentrując się na długodystansowym przesyłaniu sygnałów. Trzeci z modeli, hybrydowy, służy do symulacji pożarów lasów, pozwalając na dokładniejsze zrozumienie ich dynamiki.

Wyniki badań dowodzą, że zastosowanie różnych podejść modelowania jest konieczne do uchwycenia różnorodności zjawisk biologicznych. Praca pokazuje również, że modele matematyczne mogą służyć do walidacji istniejących teorii biologicznych, a w niektórych przypadkach do ich kwestionowania. Autor zwraca uwagę, że rozwijanie modeli obliczeniowych umożliwia identyfikację obszarów badawczych, które wymagają dalszych analiz. Praca kończy się wnioskiem, że interdyscyplinarne podejście do modelowania złożonych systemów biologicznych ma kluczowe znaczenie dla poszerzania wiedzy w naukach przyrodniczych.

Na samym końcu rozprawy występuje spis pozycji bibliograficznych, które zostały użyte w recenzowanym dziele. Całość pracy obejmuje 91 stron, a sama dysertacja jest napisana w języku angielskim.

2. Ogólna charakterystyka rozprawy oraz aspektu badawczego

Rozprawa doktorska Pana mgr. Andrzeja Kokoszy opiera się na dysertacji, w której określono cel pracy w postaci trzech hipotez badawczych a to:

1. Modele obliczeniowe mogą symulować złożone systemy biologiczne.
2. Różne podejścia do modelowania są konieczne, aby sprostać unikalnym wyzwaniom stawianym przez różne zjawiska biologiczne.
3. Modelowanie może być użyte do oceny hipotetycznych mechanizmów biologicznych oraz odkrywania obszarów, w których potrzebne są bardziej szczegółowe badania.

Dysertacja doktorska skupia się na szczegółowym badaniu zjawisk biologicznych za pomocą modeli obliczeniowych opartych na różnych formalizmach matematycznych. Każdy rozdział pracy poświęcony jest innemu naturalnemu zjawisku, które zostało

odwzorowane przy użyciu odpowiednich podejść matematycznych. Modele te bazują na danych empirycznych i były rozwijane we współpracy z ekspertami z danej dziedziny. Badane zjawiska obejmują szeroki zakres skal przestrzennych i czasowych, od wzrostu komórek do dynamiki całych ekosystemów, z uwzględnieniem zjawisk trwających od kilku minut do kilku miesięcy. W związku z tym, praca wykorzystuje różnorodne podejścia do modelowania, w tym modele dyskretne oparte na agentach, modele ciągłe oparte na równaniach różniczkowych cząstkowych, a także podejścia hybrydowe, które łączą geometrię dyskretną z ciągłymi modelami sygnalizacji dynamicznej.

W drugim rozdziale opisano dyskretny model formowania wzorców naczyniowych w stożku wzrostu *Arabidopsis thaliana*. Celem tego pomysłu jest badanie wzorców powstających w wyniku ekspresji hormonu auksyny, które prowadzą do tworzenia się załączków naczyń. Zastosowano podejście oparte na agentach, które symuluje pojawienie się tych struktur, co pozwoliło na odtworzenie formowania się wzorców i wykazanie, że zmiana tempa powiększenia stożka wzrostu może wpływać na zmiany w układzie filotaksji.

Rozdział trzeci poświęcony jest modelowi długodystansowej sygnalizacji w dużych roślinach. Model ten łączy dyskretny opis geometrii drzewa z ciągłym podejściem do sygnalizacji, badając, czy zróżnicowanie architektury drzew wpływa na gradient auksyny wzdłuż pnia. Autor proponuje uproszczony model transportu auksyny, przedstawiony jako graf skierowany, w którym transport auksyny kontrolowany jest przez równania różniczkowe opisujące tempo transportu oraz produkcji hormonu.

Czwarty rozdział koncentruje się na zjawisku pożarów lasów w skali środowiskowej. Symulowanie procesów spalania wymaga wydajnej symulacji, dlatego autor wprowadza podejście hybrydowe, które opisuje transfer ciepła oraz spalanie roślinności, atmosfery i różnych warstw gleby. Na podstawie wcześniejszych badań, model ten został rozbudowany o uwzględnienie wilgotności drzew oraz paliwa nagromadzonego w warstwie runa, co umożliwiło bardziej złożone odwzorowanie zachowania pożarów.

W pracy można wyróżnić wykonanie następujących globalnych zadań, często o charakterze nowatorskim.

Ponadto wartym podkreślenia jest bardzo bogaty jak na ten etap kariery dorobek publikacyjny Pana mgr. Andrzeja Kokoszy, który obejmuje artykuły w czasopismach naukowych:

1. Kokosza, Andrzej, Wrede, Helge, Esparza, Daniel, Makowski, Milosz, Liu, Daoming, Michels, Dominik, Pirk, Sören, Pałubicki, Wojtek. (2024). Scintilla: Simulating Combustible Vegetation for Wildfires. *ACM Transactions on Graphics*. 43. 10.1145/3658192, **140 pkt. MEiN, IF(2023): 7.8;**
2. Pałubicki, W., Kokosza, A., and Burian, A. (2019). Formal description of plant morphogenesis. *Journal of Experimental Botany*, 70(14):3601–3613, **140 pkt. MEiN, IF(2023): 5.6;**
3. Su, C., Kokosza, A., Xie, X., Pencík, A., Zhang, Y., Raunonen, P., Shi, X., Muranen, S., Topcu, M. K., Immanen, J., Hagqvist, R., Safronov, O., Alonso-Serra, J., Eswaran, G., Venegas, M. P., Ljung, K., Ward, S., Mähönen, A. P., Himanen, K., Salojärvi, J., Fernie, A. R., Novák, O., Leyser, O., Pałubicki, W., Helariutta, Y., and Nieminen, K. (2023). Tree architecture: A strigolactone-deficient mutant reveals a connection between branching order and auxin gradient along the tree stem. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 120(48) (Plant Biology), **70 pkt. MEiN, IF(2023): 4.3,**

które zostały opublikowane w szerokiej międzynarodowej kooperacji.

Dodatkowym elementem świadczącym o dojrzałości Doktoranta jest prowadzenie badań w ramach grantu naukowego SONATA BIS6 otrzymanego z Narodowego Centrum Nauki (NCN).

3. Ocena rozprawy

a. Uwagi krytyczno-polemiczne:

W niniejszej części pokrótce przedstawione zostaną główne mankamenty dysertacji. Ze względu na istotność tejże części recenzji niniejsze uwagi zostaną przedstawione w punktach, do których łatwiej będzie się odnieść Doktorantowi.

1. W rozdziale 9 zdefiniowany jest zakres r stożka. Jednak wymagało by to doprecyzowania w jaki sposób ta wielkość jest umiejscowiona w tej bryle, gdyż posiada ona: tworzącą, promień podstawy oraz wysokość.
2. Na końcu strony 9, Doktorant pisze „Nasze testy wykazały, że pojedynczy krok zajmował średnio 0,05 sekundy bez zaimplementowanego algorytmu zalewania i wzrósł do 0,6 sekundy, gdy włączono algorytm zalewania, co nadal było akceptowalną wartością.”, przy czym nie definiuje jakie jest kryterium akceptacji wyniku.
3. Na stronie 13, podane są parametry używanego generatora liczb pseudolosowych o rozkładzie normalnym, jednak Doktorant nie tłumaczy skąd przyjął takie ich wartości.

4. Z opisu własności funkcji kosztu przedstawionej na stronie 18 wynika, że można było zastosować do zadania optymalizacji jakąś procedurę metaheurystyczną np. algorytm ewolucyjny, PSO czy inny inspirowany naturą. Czy były podjęte takie próby?
5. W ramach badań opisanych w rozdziale 2 Doktorant proponuje różne algorytmy w tym warianty, lecz brakuje jednoznacznego podsumowania opartego na jednolitych wynikach numerycznych pokazujące wady i zalety każdej z propozycji, uwzględniając też jakość i czas otrzymanego rozwiązania.
6. Na stronie 37 stwierdzono „We define metamer length for WT equal to 6 and for a mutant to 4.” lecz nie uzasadniono skąd wynikają tak założone wartości.
7. W punkcie 3.4, równanie bez numeru (uwaga techniczna b.6) opisane jest w następujący sposób: “... d_A in the above equation is a parameter representing auxin decay while parameter P_A indicates the synthesis of new auxin. Auxin synthesis P_A is set to 0 for all segments. It is equal to the parameter p for bud vertices and for leaf vertices, it is equal to rp .” Jednak niejasne co jest równie 0 a co p ?
8. W rozdziale 4, Doktorant powołuje się na model Hadrich’a jednak brakuje mi konkretnej analizy porównawczej w szczególności wyników choćby dla pewnych założonych scenariuszy względem proponowanego modelu.
9. W rozdziale 4, zaproponowano bardzo wieloaspektowy model, który uwzględnia wiele ciekawych i ważnych niuansów. Jednak patrząc sumarycznie taki globalny model pożaru posiada wiele parametrów, które w części są już podane w postaci konkretnych wartości. W takim przypadku nasuwa się pytanie czy wartości wspomnianych parametrów zostały zaczerpnięte z literatury, oszacowane numerycznie czy może „wyprowadzone” z użyciem matematycznych zależności?
10. Przystawione modele algorytmiczne bardzo mocno są osadzone w specyfice natury opisywanych i modelowanych zjawisk. Czy była rozważana możliwość zastosowania ich (nawet w postaci uproszczonej) do innych zjawisk pochodzących z natury lub zagadnień technicznych, medycznych, ekonomicznych itp.?

b. Uwagi szczegółowe i techniczne

W ramach tego punktu, muszę podkreślić bardzo przemyślany układ pracy lecz mało staranne przygotowanie całego woluminu z pracą doktorską. W szczególności z racji na obowiązki recenzenta wypunktuję ważniejsze mankamenty dysertacji:

1. Na stronie 9, występują powtórzenia stwierdzenia określającego m_x „... m_x is marker of voxel x , m_x is marker value in this voxel”.

2. Ponownie na stronie 9, dwa ostatnie akapity podpunktu Direction calculation, stanowią swoją kopie.
3. Strona 242, brakuje słowa Figure w następującym fragmencie tekstu „... to pattern *M* (2.8(c)).” oraz niepotrzebny jest 2-gi nawias zamykający. Podobnie na stronie 293.
4. W tabeli 2.3 brakuje wyników w ostatniej kolumnie oraz jej opis jest identyczny jak w tabeli 2.2.
5. Doktorant w dysertacji używa różnych odniesień do rysunków (raz jest to (fig. 2.12a) a innym razem Figure 2.8(e,f)) oraz stylu cytowania ((Smith et al. 2006b) oraz [22]).
6. Oba wzory na stronie 39 nie posiadają swojego numeru.
7. Na stronie 40 Doktorant powołuje się na parametr pb, którego opisu nie znalazłem w pracy. Podobnie na stronie 45, skrót CG nie ma rozwinięcia.
8. Ostatnie zdanie części 3.5 nie posiada zakończenia.

Oczywiście można tu wskazać jeszcze kilka uwag związanych z pojedynczymi niedociągnięciami stylistycznymi czy dość skąpym opisem pewnych części pracy. Doktorant również nie ustrzegł się nielicznych mankamentów natury technicznej takich jak błędy interpunkcyjne czy też pomyłki w oznaczeniach (o których nadmieniano wcześniej), itp. jednak w dużej mierze nie rzutują one na relatywnie wysoką ocenę pracy.

c. Ocena ogólna

Doktorant bardzo dobrze rozumie pojęcie oraz zakres procedur analizy obrazów zarówno w ujęciu ogólnym, jak i w kontekście. W szczególności potrafi: opisać ich cechy i własności, syntetyzować algorytmy pozwalające na głęboką analizę własności, przedstawić wyniki analizy, oraz wybrać i omówić możliwe do zastosowania procedury. Sposób sformułowania problemu badawczego, przedstawiony w poszczególnych częściach, świadczą o dojrzałości naukowej Autora. Analizowany w pracy problem jest bardzo dokładnie sprecyzowany. Ponadto bardzo imponującym jest fakt, iż w trakcie pracy nad doktoratem zostało opublikowane wiele dobrych prac naukowych w tym wszystkie są publikacjami realizowanymi w kooperacji międzynarodowej Kandydata.

Warto również dodać, że – realizując pracę – Pan mgr Andrzej Kokosza wykazał się solidnym warsztatem informatycznym polegającym na samodzielnym zaprogramowaniu głównych algorytmów. Takie umiejętności są niezmiernie istotne, gdyż potwierdzają, że jest On niezależnym naukowcem. Ponadto uważam, że wykonane przez Niego eksperymenty, których liczba jest znaczna, świadczą, że Kandydat ma szczególne predyspozycje do pracy badawczej. Potrafi dobrać odpowiednie wskaźniki oceny jakości

modeli, zilustrować wyniki na rysunkach, przedstawić ważne rezultaty w tabelach i wyciągnąć istotne wnioski. Dodany do pracy opis matematyczny powoduje, że recenzowana przeze mnie rozprawa doktorska jest kompletna i w pełni wartościowa.

4. Podsumowanie

Recenzowana praca doktorska jest przykładem oryginalnego rozwiązania ciekawych zagadnień praktycznych. Do ich rozwiązania Autor rozprawy wykorzystał we właściwy sposób zaawansowane narzędzia technik informacyjnych jakimi niewątpliwie są algorytmy modelowania matematycznego. Świadczy to, o Jego dużej kompetencji w praktycznym posługiwaniu się narzędziami współczesnej matematyki i informatyki. Uzyskane w pracy wyniki uważam za niewątpliwie oryginalną (nowatorską) propozycję rozwiązania trudnych zagadnień, które zostały zweryfikowane na drodze rzetelnie przeprowadzanych analiz walidacyjnych. Można zatem uznać, że recenzowana rozprawa doktorska ma charakter oryginalnej pracy projektowo-naukowej, o której mówi bieżąca Ustawa z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce (Dz. U.2023 r. poz. 742 z późn. zmianami).

Konkludując uważam, że rozprawa doktorska mgr. Andrzeja Kokoszy zdecydowanie spełnia wymagania stawiane w odpowiednich przepisach rozprawom doktorskim i wobec tego stawiam wniosek o jej dopuszczenie do dalszych, przewidzianych Ustawą, etapów postępowania o nadanie stopnia doktora.

Ponadto, biorąc pod uwagę aktualność tematyki badawczej, jej interdyscyplinarny zakres, bogaty zasób publikacji dotyczących badań ujętych w rozprawie oraz ich istotny wkład w istniejący stan wiedzy i znaczącą – często samodzielną i międzynarodową aktywność naukową Kandydata, wnioskuję o wyróżnienie recenzowanej rozprawy doktorskiej.



dr hab. inż. Piotr A. Kowalski, prof. AGH

