

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

Kraków, 10 grudnia 2024 roku

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Akademia Górniczo-Hutnicza
al. Mickiewicza 30, 30-059 Kraków

oraz

Instytut Badań Systemowych
Polska Akademia Nauk
ul. Newelska 6, 01-447 Warszawa

RECENZJA

dotycząca wniosku w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauk fizycznych dr. inż. Jakubowi Mateuszowi Rydzewskiemu.

Podstawą przygotowania niniejszej recenzji jest pismo nr 32/112N/2024 Przewodniczącego Rady Dyscypliny Nauki Fizyczne na Uniwersytecie Mikołaja Kopernika w Toruniu Pana dr. hab. Piotra Masłowskiego, prof. UMK z dnia 21 października 2024 roku (dokumentacja w sprawie przekazana została w dniu 22 października 2024 r.) w sprawie powierzenia mojej osobie uchwałą Rady Naukowej dyscypliny nauk fizycznych roli recenzenta w postępowaniu w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego dr. inż. Jakubowi Mateuszowi Rydzewskiemu. Postępowanie w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego zostało wszczęte w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauk fizycznych.

Pan dr inż. Jakub Rydzewski złożył wniosek wraz z kompletną dokumentacją zawierającą wszelkie wymagane dokumenty w celu wszczęcia postępowania habilitacyjnego. Habilitant jako osiągnięcie naukowe przedstawił cykl 7 powiązanych tematycznie artykułów naukowych zatytułowany „*Uczenie zmiennych zbiorowych z symulacji atomistycznych*”.

Habilitant uzyskał stopień doktora nauk fizycznych w zakresie biofizyki 27-go czerwca 2018 roku na podstawie uchwały Rady Instytutu Fizyki Uniwersytetu Mikołaja Kopernika w Toruniu. Stopień ten został nadany w oparciu o przedstawioną rozprawę doktorską zatytułowaną „*Rare-Event Sampling of Ligand Transport in Proteins*” na podstawie przepisów obowiązujących w polskim systemie prawa.

Ocena osiągnięcia naukowego

Pan doktor inżynier Jakub Rydzewski w ramach osiągnięcia naukowego, które jest podstawą oceny dorobku habilitacyjnego, przedstawił cykl 7 publikacji pod wspólnym tytułem „*Uczenie zmiennych zbiorowych z symulacji atomistycznych*” a to:

- H1. Rydzewski, J., Chen, M. & Valsson, O. Manifold Learning in Atomistic Simulations: A Conceptual Review. *Mach. Learn.: Sci. Technol.* 4, 031001 (2023).
- H2. Rydzewski, J. & Valsson, O. Multiscale Reweighted Stochastic Embedding: Deep Learning of Collective Variables for Enhanced Sampling. *J. Phys. Chem. A* 125, 6286–6302 (2021).
- H3. Rydzewski, J., Chen, M., Ghosh, T. K. & Valsson, O. Reweighted Manifold Learning of Collective Variables from Enhanced Sampling Simulations. *J. Chem. Theory Comput.* 18, 7179–7192 (2022).
- H4. Rydzewski, J. Selecting High-Dimensional Representations of Physical Systems by Reweighted Diffusion Maps. *J. Phys. Chem. Lett.* 14, 2778–2783 (2023).
- H5. Rydzewski, J. Spectral Map: Embedding Slow Kinetics in Collective Variables. *J. Phys. Chem. Lett.* 14, 5216–5220 (2023).
- H6. Rydzewski, J. & Gökdemir, T. Learning Markovian Dynamics with Spectral Maps. *J. Chem. Phys.* 160 (2024).
- H7. Plumed Consortium, Promoting Transparency and Reproducibility in Enhanced Molecular Simulations. *Nat. Methods* 16, 670–673 (2019).

Tak stworzona rozprawa habilitacyjna jest wynikiem badań które były realizowane w przynajmniej dwóch obszarach naukowych. Pierwszy z nich dotyczy fizyki statystycznej a druga to zaawansowana eksploracyjna analiza danych osadzona w domenie uczenia maszynowego.

W publikacji H1 dr inż. Jakub Rydzewski zajmuje się analizą dużych, wysokowymiarowych zbiorów danych, koncentrując się na ich redukcji do niskowymiarowych struktur w kontekście symulacji atomistycznych. W tej pracy omówił nienadzorowane metody uczenia maszynowego, które pozwalają na odkrycie różnorodności opartej na prawdopodobieństwach przejścia Markowa między próbkami. Metody te umożliwiają uzyskanie skondensowanego opisu procesów fizycznych, co jest szczególnie istotne w przypadku układów o długiej skali czasowej i skomplikowanej dynamice. Przegląd obejmuje zarówno teoretyczne podstawy omawianych metod, jak i ich potencjalne ograniczenia, oferując narzędzia do analizy złożonych danych symulacyjnych. W pracy H2 Habilitant zaproponował metodę MRSE (multiscale reweighted stochastic embedding), która umożliwia automatyczną konstrukcję zmiennych zbiorowych w celu poprawy symulacji z wzmocnionym próbkowaniem. Metoda ta łączy głębokie sieci neuronowe z techniką stochastycznego osadzania sąsiadów, uwzględniając m.in. procedurę ważenia danych i reprezentację wieloskalową za pomocą modelu mieszanek Gaussowskich. Dzięki MRSE możliwe jest dokładne opisanie stanów metastabilnych oraz ich energii swobodnej, co zostało zweryfikowane na modelowych układach, takich jak potencjał Mullera-Browna oraz dipeptydy i tetrapeptydy alaniny.

2

Praca H3 koncentruje się na rozwiązywaniu problemu obciążonych danych generowanych przez symulacje wzmocnionego próbkowania. Habilitant opracował metodę reweighted manifold learning, która pozwala na konstrukcję niskowymiarowych zmiennych zbiorowych poprzez eliminację wpływu obciążenia rozkładów prawdopodobieństwa. Kluczowym elementem metody jest zastosowanie anizotropowych map dyfuzji oraz opis przejść Markowa między próbkami. W rezultacie technika ta umożliwia odwzorowanie danych ze wzmocnionego próbkowania na równowagową geometrię, co znacząco usprawnia analizę stanów metastabilnych.

W publikacji H4 dr inż. Rydzewski zajął się problemem wyboru odpowiedniej reprezentacji wysokowymiarowych danych przed ich redukcją wymiarowości. Wykorzystał metodę ważonej mapy dyfuzji, analizując spektralne właściwości macierzy przejścia Markowa skonstruowanych na podstawie danych ze standardowych i wzmocnionych symulacji atomistycznych. Praca pokazuje, że odpowiednio dobrane reprezentacje umożliwiają efektywniejsze wydobycie informacji o układach, co zostało zademonstrowane na przykładach o złożonej, wysokowymiarowej dynamice.

Habilitant -w publikacji H5 - wprowadził metodę mapy spektralnej, która pozwala na identyfikację powolnych zmiennych zbiorowych w układach o złożonej kinetyce. Metoda ta opiera się na maksymalizacji przerwy spektralnej pomiędzy wolnymi i szybkimi wartościami własnymi macierzy przejścia, co umożliwia skuteczną separację stanów metastabilnych. Rozwiązanie zostało przetestowane na przykładach zwijania białek, gdzie pokazano, że mapa spektralna potrafi uchwycić istotne skale czasowe i dynamikę rzadkich przejść.

W pracy H6 Habilitant kontynuował rozwój mapy spektralnej, wprowadzając algorytm adaptacyjny do szacowania prawdopodobieństw przejścia. Rozwiązanie to umożliwia analizę heterogenicznych i wieloskalowych krajobrazów energii swobodnej w układach molekularnych, minimalizując efekty niemarkowskie. Praca dowodzi, że mapa spektralna potrafi wyznaczać zmienne zbiorowe związane z dominującymi skalami czasowymi relaksacji, co ma kluczowe znaczenie w analizie długoczasowych stanów metastabilnych.

Dr inż. Jakub Rydzewski, jako członek konsorcjum PLUMED, współtworzył pracę H7 opublikowaną w czasopiśmie Nature Methods (Impact Factor: 48), która skupia się na promowaniu przejrzystości i odtwarzalności w symulacjach molekularnych z wzmocnionym próbkowaniem. Publikacja ta ma fundamentalne znaczenie dla społeczności naukowej, ponieważ odpowiada na jedno z najważniejszych wyzwań współczesnych obliczeń naukowych: zapewnienie pełnej weryfikowalności wyników i ułatwienie ponownego wykorzystania danych. Konsorcjum PLUMED stworzyło zestaw narzędzi open-source, które umożliwiają automatyczną weryfikację danych wejściowych, transparentność protokołów symulacyjnych oraz swobodny dostęp do wyników za pośrednictwem otwartych repozytoriów danych.

Rola dr. Rydzewskiego była znacząca na kilku etapach projektu. Wspierał konceptualizację pracy, aktywnie uczestnicząc w dyskusjach i spotkaniach konsorcjum. W zakresie zarządzania danymi implementował testy regresji, które weryfikują wyniki

uzyskiwane przy użyciu modułu maze, służącego do ulepszonego próbkowania ścieżek dysocjacji ligandów. Dodatkowo opracował szczegółową dokumentację dla tego modułu, dostępną publicznie na stronie projektu. Na etapie metodologicznym wspierał omówienia zasad odtwarzalności symulacji, wnosząc własne sugestie dotyczące optymalizacji protokołów.

Opublikowanie pracy w tak prestiżowym czasopiśmie, jak Nature Methods, oraz jej imponująca liczba cytowań (543 w WoS, 489 w GS) świadczą o wyjątkowym wpływie projektu na dziedzinę nauk obliczeniowych i dynamiki molekularnej.

Na podstawie powyższej krótkiej charakterystyki można stwierdzić iż, dorobek habilitacyjny dr. inż. Jakuba Rydzewskiego wyróżnia się nowatorskim podejściem do zaawansowanych metod obliczeniowych, w szczególności w zakresie chemii fizycznej i fizyki molekularnej. Jego prace koncentrują się na rozwijaniu technik uczenia maszynowego i redukcji wymiarowości, umożliwiając efektywną analizę złożonych układów dynamicznych oraz identyfikację kluczowych zmiennych opisujących ich zachowanie. Dzięki interdyscyplinarnemu podejściu i umiejętności łączenia teorii z praktyką, jego badania przyczyniają się do lepszego zrozumienia skomplikowanych procesów molekularnych i promowania odtwarzalności wyników naukowych. Jego osiągnięcia cieszą się szerokim uznaniem w środowisku międzynarodowym, co potwierdzają liczne cytowania oraz wysoki wpływ jego pracy na rozwój nauki.

Ocena pozostałej istotnej aktywności naukowej, w tym w zakresie współpracy międzynarodowej.

Dorobek naukowy dr. inż. Jakuba Rydzewskiego cechuje się wyjątkową aktywnością badawczą, znaczącymi osiągnięciami oraz szeroko zakrojoną współpracą międzynarodową. Po uzyskaniu stopnia doktora opublikował sześć wysoko punktowanych artykułów w prestiżowych czasopismach naukowych, które zyskały uznanie w środowisku naukowym i przyczyniły się do rozwoju zaawansowanych metod obliczeniowych w symulacjach molekularnych. Jego dorobek obejmuje także dziewięć wystąpień na konferencjach międzynarodowych oraz jedno wystąpienie plakatowe, świadczące o aktywnej prezentacji wyników badań na forum światowym.

Dr Rydzewski jest autorem zaproszonych seminariów w czołowych ośrodkach naukowych, takich jak The National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST) w Japonii, Instytut Nauk Obliczeniowych w Tsukubie oraz Uniwersytet w Amsterdamie, co dowodzi jego uznania jako specjalisty w dziedzinie modelowania molekularnego i metod uczenia maszynowego. Pełnił funkcję kierownika kilku kluczowych projektów badawczych, w tym finansowanych przez Narodowe Centrum Nauki (Sonata, Etiuda, Preludium) oraz Narodową Agencję Wymiany Akademickiej. Jako współwykonawca brał udział w prestiżowych projektach międzynarodowych, takich jak grant NIH (USA), Horizon 2020 oraz projekty europejskie i krajowe, realizowane we współpracy z Uniwersytetami w Kansas, Antwerpii i Toruniu. Jego zaangażowanie badawcze pozwoliło na opracowanie nowych narzędzi obliczeniowych oraz metod analizy procesów fizykochemicznych na poziomie atomowym.

R

Znaczącym osiągnięciem dr. Rydzewskiego jest współpraca z Konsorcjum PLUMED, które odgrywa kluczową rolę w promowaniu transparentności i odtwarzalności badań naukowych w obszarze symulacji molekularnych. Dzięki jego wkładowi powstały narzędzia i protokoły umożliwiające weryfikację wyników oraz szerokie udostępnianie danych naukowych.

Dr Rydzewski odbył liczne staże naukowe w wiodących instytutach badawczych na świecie, m.in. w National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (Japonia), Max Planck Institute for Biophysical Chemistry (Niemcy) oraz ETH Zurich (Szwajcaria). Krótkoterminowe wizyty badawcze w Japonii, Niemczech i Polsce dodatkowo poszerzyły jego kompetencje oraz umożliwiły wymianę wiedzy z międzynarodowymi ekspertami. Dzięki tej aktywności dr Rydzewski nie tylko rozwija zaawansowane metody badawcze, ale także skutecznie buduje międzynarodową sieć współpracy naukowej, wzmacniając swoją pozycję jako cenionego badacza o globalnym zasięgu.

Ocena w zakresie dorobku dydaktycznego

Dorobek dydaktyczny dr. inż. Jakuba Rydzewskiego wyróżnia się wszechstronnym zaangażowaniem w działalność edukacyjną i wspieranie młodych naukowców, zarówno na poziomie krajowym, jak i międzynarodowym. Jego aktywność obejmuje udział w zespołach oceniających wnioski o finansowanie badań, nagrody naukowe oraz rekrutację do szkół doktorskich, co podkreśla jego wkład w rozwój środowiska akademickiego. Szczególnie cenne jest zaangażowanie w ocenę wniosków o finansowanie publikacji dla młodych naukowców oraz konkursy naukowe, takie jak najlepsza praca licencjacka z bioinformatyki.

Na poziomie międzynarodowym dr Rydzewski aktywnie uczestniczy w europejskich programach dydaktycznych, prowadząc zajęcia w ramach prestiżowych inicjatyw, takich jak SPINAKEr czy Horizon 2020 (DIOSI). Jego działalność dydaktyczna koncentruje się na otwartej nauce i nowych technologiach, co w istotny sposób wspiera rozwój młodych badaczy oraz podnosi jakość kształcenia akademickiego. Współpraca z zagranicznymi ośrodkami, w tym Uniwersytetem w Taorminie, pokazuje jego zdolność do budowania międzynarodowych partnerstw edukacyjnych i realizacji projektów o znaczącym wpływie. Jego dorobek dydaktyczny świadczy o umiejętności skutecznego łączenia badań naukowych z działalnością edukacyjną oraz promowaniu najwyższych standardów nauczania na poziomie globalnym.

Ocena w zakresie dorobku popularyzatorskiego i organizacyjnego

Dr inż. Jakub Rydzewski wykazuje znaczący dorobek w zakresie działalności popularyzatorskiej i organizacyjnej, łącząc aktywność naukową z szerokim promowaniem nauki oraz otwartej współpracy międzynarodowej. Jego działania popularyzatorskie obejmują wykłady inauguracyjne, artykuły popularnonaukowe, notatki promujące inicjatywy naukowe oraz aktywną rolę w programach międzynarodowych, takich jak SPINAKEr czy DIOSI. Szczególny nacisk kładzie na promowanie idei otwartej nauki, co realizuje poprzez finansowanie publikacji w

otwartym dostępie dla młodych badaczy oraz organizację praktycznych szkoleń dla początkujących naukowców.

W zakresie działalności organizacyjnej dr Rydzewski od lat odgrywa kluczową rolę w organizacji konferencji naukowych, takich jak *Bioinformatyka w Toruniu*, wspierając rozwój środowiska bioinformatycznego w Polsce. Jego zaangażowanie obejmuje również recenzowanie prac licencjackich w ramach konkursów naukowych oraz pełnienie funkcji recenzenta międzynarodowych konferencji z obszaru uczenia maszynowego, optymalizacji i analizy danych.

Dodatkowo, dorobek dr. Rydzewskiego w zakresie recenzowania publikacji naukowych jest niezwykle imponujący – współpracuje z czołowymi czasopismami międzynarodowymi, takimi jak *Journal of Physical Chemistry Letters*, *Biophysical Journal*, *PLOS Computational Biology* czy *Journal of Chemical Physics*, co świadczy o jego uznaniu i renomie w środowisku naukowym. Jego wszechstronna działalność organizacyjna i popularyzatorska przyczynia się do promowania nauki, otwartej współpracy oraz integracji środowiska akademickiego na poziomie krajowym i międzynarodowym.

Konkluzje i wniosek końcowy

Dorobek habilitacyjny dr. inż. Jakuba Rydzewskiego stanowi imponujący i spójny zbiór osiągnięć naukowych o fundamentalnym znaczeniu dla rozwoju metod obliczeniowych i ich zastosowań w chemii fizycznej oraz fizyce molekularnej. Jego badania koncentrują się na zaawansowanych technikach uczenia maszynowego, redukcji wymiarowości oraz analizie dynamiki molekularnej, co wpisuje się w aktualne trendy naukowe i odpowiada na kluczowe wyzwania współczesnych badań nad układami złożonymi.

Przedstawione publikacje (H1-H6) demonstrują dogłębną znajomość metod nienadzorowanego uczenia maszynowego i ich aplikacji w kontekście wysokowymiarowych danych symulacyjnych. Dr Rydzewski wykazał się nie tylko umiejętnością proponowania nowatorskich algorytmów, takich jak MRSE czy mapa spektralna, ale także ich skutecznym wdrożeniem w badaniach nad powolnymi zmiennymi zbiorowymi, umożliwiając tym samym lepsze próbkowanie krajobrazów energii swobodnej oraz charakteryzację stanów metastabilnych w układach dynamicznych. W publikacjach widać niezwykłą precyzję i dążenie do uzyskania rozwiązań zarówno teoretycznie uzasadnionych, jak i praktycznie użytecznych. Jego prace z powodzeniem łączą wiedzę z zakresu fizyki, chemii i informatyki, co świadczy o interdyscyplinarnym charakterze jego badań.

Najwyższy poziom jego dorobku naukowego potwierdza publikacja H7 w prestiżowym czasopiśmie *Nature Methods* (IF: 48), w której jako członek konsorcjum PLUMED aktywnie promował przejrzystość i odtwarzalność w symulacjach molekularnych. Jego wkład w implementację testów regresji oraz tworzenie dokumentacji modułu maze do wzmocnionego próbkowania pokazuje, że jego działalność naukowa nie ogranicza się jedynie do teorii, ale przyczynia się także do budowania praktycznych narzędzi, które są szeroko wykorzystywane w środowisku naukowym.

Podsumowując, dorobek habilitacyjny dr. inż. Jakuba Rydzewskiego wyróżnia się znaczną nowatorskością, szerokim oddziaływaniem oraz bezspornie wysoką wartością

K

merytoryczną. Jego osiągnięcia naukowe wniosły istotny wkład w rozwój metodologii dynamiki molekularnej i uczenia maszynowego, a także przyczyniły się do ustanowienia nowych standardów transparentności badań. Wysoce cytowane publikacje oraz udział w konsorcjum o globalnym znaczeniu podkreślają jego pozycję jako jednego z czołowych badaczy w swojej dziedzinie.

Zatem można śmiało stwierdzić że osiągnięcie naukowe dr. inż. Jakuba Rydzewskiego stanowią wkład w rozwój dyscypliny nauk fizycznych w stopniu ponad standardowym. Przedstawiony wniosek o przeprowadzenie postępowania w sprawie nadania stopnia doktora habilitowanego **spełnia wszystkie przesłanki i wymagania sformułowane w obowiązującej Ustawie**, wobec osób ubiegających się o nadanie stopnia doktora habilitowanego. Moja **opinia jest nadwyraz pozytywna, zatem wnioskuję do Rady Dyscypliny Nauki Fizyczne na Uniwersytecie Mikołaja Kopernika w Toruniu o dalsze procedowanie i nadanie** dr. inż. Jakubowi Rydzewskiemu stopnia doktora habilitowanego w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w dyscyplinie nauk fizycznych.

Piotr Kowalski