

Uzasadnienie - dr hab. Agnieszka Gajewicz-Skrętna

Dr hab. Agnieszka Gajewicz-Skrętna, w roku 2004 z wyróżnieniem (I lokata) ukończyła studia magisterskie na Wydział Chemii Uniwersytetu Gdańskiego (kierunek ochrona środowiska). Po czteroletniej przerwie podjęła studia doktoranckie na Wydziale Chemii Uniwersytetu Gdańskiego, uzyskując stopień doktora nauk chemicznych w roku 2013. Łącznie (w trakcie studiów doktoranckich i po uzyskaniu stopnia doktora) odbyła osiem staży zagranicznych, np. w latach 2014-2015 odbyła dwa krótkoterminowe staże podoktorskie: miesięczny w *Interdisciplinary Center for Nanotoxicity* na Uniwersytecie Stanowym w Jackson (Stany Zjednoczone) oraz w trzytygodniowy staż w ramach imiennego grantu *MODENA Cost Short Term Scientific Mission w Bundesinstitut für Risikobewertung* w Berlinie (Niemcy). Następnie w okresie X.2016 – IX.2017 odbyła roczny staż podoktorski (typu *post-doc*) w *National Institute for Environmental Studies, Research Center for Environmental Risk* w Tsukubie (Japonia). To w tym okresie, w wyniku współpracy z wymienionymi jednostkami badawczymi, wykrystalizowała się obecna tematyka badawcza dr hab. Gajewicz-Skrętnej, która stała się przedmiotem badań Kandydatki i podstawą przygotowanej przez nią rozprawy habilitacyjnej podsumowanej tytułem: "*Nowe podejścia chemoinformatyczne do komputerowej oceny zagrożenia chemicznego stwarzanego przez mało liczne lub silnie zróżnicowane strukturalnie zbiory związków chemicznych*". Uchwałą Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu Gdańskiego z dnia 07 czerwca 2023 roku dr hab. Agnieszka Gajewicz-Skrętna uzyskała stopień naukowy doktora habilitowanego nauk ścisłych i przyrodniczych w dyscyplinie Nauki chemiczne.

Zainteresowania naukowe oraz tematyka badawcza podjęta w rozprawie habilitacyjnej przygotowanej przez dr hab. Gajewicz-Skrętną koncentrują się wokół rozwoju i zastosowania chemoinformatyki, metod sztucznej inteligencji, uczenia maszynowego oraz eksploracyjnej analizy danych w procesie komputerowej oceny bezpieczeństwa chemicznego stwarzanego przez istniejące (eksperymentalnie nieprzebadane) związki chemiczne oraz projektowania bezpiecznych dla zdrowia człowieka i środowiska przyrodniczego związków chemicznych i materiałów nowej generacji o pożądanych z przemysłowego punktu widzenia właściwości fizykochemicznych. Tak więc tematyka uprawiana przez Kandydatkę wpisuje się w priorytetowy nurt badań nad digitalizacją procesu oceny bezpieczeństwa chemicznego oraz projektowania bezpiecznych i zrównoważonych chemikaliów. Badania dr hab. Gajewicz-Skrętnej są w pełni zbieżne z celami i założeniami określonymi w strategii Europejskiego Zielonego Ładu (ang. *European Green Deal*). Metody komputerowe opracowane przez Kandydatkę stanowią bardzo istotne wsparcie tradycyjnych metod eksperymentalnych. Możliwość komputerowej oceny właściwości i aktywności np. nowo projektowanych związków przed ich właściwą syntezą w laboratorium ma przed wszystkim wymiar ekonomiczny i etyczny. Pozwala bowiem w istotnym stopniu ograniczyć czas i koszt badań oraz zredukować liczbę zwierząt laboratoryjnych wykorzystywanych do badań. Kandydatka specjalizuje się w opracowywaniu nowych i udoskonalaniu istniejących metod numerycznych umożliwiających przewidywanie (jakościowe lub ilościowe) aktywności oraz właściwości fizykochemicznych związków chemicznych na podstawie ich struktury chemicznej (ang. *Qualitative/Quantitative Structure-Activity Relationships ([Q]SAR)* oraz *Structure-Property Relationships ([Q]SPR)*).

Szczegółowy opis osiągnięcia naukowego przedłożonego do Nagrody przedstawiony został przez dr hab. Gajewicz-Skrętną w rozdziale „Podsumowanie - elementy nowości naukowej” autoreferatu (str. 32-33). Osiągnięcie naukowe stanowi cykl dziewięciu powiązanych tematycznie artykułów naukowych, opublikowanych w latach 2017-2022, traktujących o rozwoju metod uczenia maszynowego i narzędzi komputerowych wspierających proces oceny zagrożenia chemicznego oraz zrównoważonego projektowania nowych substancji chemicznych w oparciu o mało liczne lub silnie zróżnicowane strukturalnie zbiory związków chemicznych. Prace są efektem realizacji badań przeprowadzonych podczas rocznego stażu podoktorskiego w *National Institute for Environmental Studies* (Japonia) oraz dwóch międzynarodowych projektów badawczych. Każda z

dziwięciu prac wchodzących w skład osiągnięcia naukowego stanowi odpowiedź na najbardziej aktualne – metodyczne i aplikacyjne – wyzwania w zakresie rzetelnego i wiarygodnego wykorzystania metod komputerowych w projektowaniu i ocenie ryzyka chemicznego stwarzanego przez nowo projektowane lub eksperymentalnie nieprzebadane związki chemiczne/materiały. Jest to szczególnie istotne w świetle wysiłków podejmowanych przez środowisko naukowe oraz światowe, europejskie i krajowe organizacje i instytucje badawcze odpowiedzialne za zarządzanie ryzykiem chemicznym a zmierzające do ograniczenia liczby badań eksperymentalnych przeprowadzanych z wykorzystaniem zwierząt laboratoryjnych (w tym zwierząt kręgowych). Na szczególne podkreślenie zasługuje aplikacyjny charakter narzędzi komputerowych opracowanych przez dr hab. Gajewicz-Skrętną. Zaproponowana przez Kandydatkę metoda ważonej lokalnie jądrowej regresji liniowej (metoda KwLPR) wykorzystująca estymatory najbliższego sąsiedztwa do ilościowego przewidywania wybranych właściwości biologicznych dla potrzeb oceny zagrożenia chemicznego oferuje dokładniejsze oszacowania wartości odpowiedzi modelu w porównaniu z klasycznymi (liniowymi i nieliniowymi) metodami regresji. Przeprowadzone badania dowiodły skuteczności algorytmu KwLPR w modelowaniu toksyczności ostrej silnie zróżnicowanego pod względem struktury chemicznej i reprezentatywności zbioru związków organicznych wobec organizmów wodnych, wykorzystywanego przez japońskie Ministerstwo Środowiska w procesie oceny ryzyka chemicznego wymaganego przy rejestracji nowych substancji chemicznych. Aktualnie trwają prace zmierzające do wdrożenia opracowanych przez dr hab. Gajewicz-Skrętną modeli uczenia maszynowego bazujących na algorytmie KwLPR do japońskiego systemu wstępnej komputerowej oceny ryzyka (*KAshinhou Tool for Ecotoxicity*). Kolejnym, ważnym krokiem w kierunku znacznego zminimalizowania liczby zwierząt laboratoryjnych wykorzystywanych w procedurze oceny ryzyka stwarzanego przez substancje chemiczne było zaproponowanie przez dr hab. Gajewicz-Skrętną rozszerzenia paradygmatu ilościowej zależności struktura-aktywność na modele wielogatunkowe w oparciu o metodę analizy korelacji kanonicznej. Paradygmat ilościowego modelowania toksyczności wielogatunkowej umożliwia jednocześnie modelowanie odpowiedzi modelu wobec dwóch lub większej liczby organizmów/gatunków/linii komórkowych, dzięki czemu oferuje szerszy wgląd w mechanizmy molekularne odpowiedzialne za (nie)pożądane efekty działania analizowanych związków chemicznych. Warto w tym miejscu wspomnieć, że w celu ułatwienia użytkownikom (w tym: naukowcom, urzędnikom administracji publicznej odpowiedzialnym za zarządzanie ryzykiem chemicznym czy przedstawicielom przemysłu) korzystania z opracowanych narzędzi komputerowych, dr hab. Gajewicz-Skrętna udostępnia w trybie otwartym (*open source*) skrypty napisane w języku programowania *R* lub *Python*, umożliwiające automatyczne przeprowadzenie analizy w oparciu o wybraną metodę. O jakości naukowej wszystkich dziewięciu prac, które dr hab. Gajewicz-Skrętna przedstawiła jako cykl habilitacyjny świadczy ich wysoki sumaryczny *impact factor* wynoszący $IF_z \text{ roku publikacji} = 69,597$ oraz fakt, że wszystkie artykuły opublikowane zostały w czasopismach z górnego kwartyła (Q1) rankingu czasopism w swojej dziedzinie.

Wysoką wartość rozprawy zgodnie podkreślili wszyscy czterej Recenzenci dorobku naukowego Kandydatki. Prof. dr hab. Jarosław Polański (Uniwersytet Śląski) w swojej recenzji napisał: „*Dorobek naukowy dr Gajewicz-Skrętnej oceniam bardzo wysoko. Taka struktura dorobku imponuje, szczególnie pod względem wagi czasopism, w nanotoksykologii i bardziej ogólnie chemoinformatyce. Tak więc Habilitantka należy do uznanych w literaturze pionierów metody QNAR (quantitative nanostructure–activity relationships) oraz informatyki nanomateriałów, stale dążąc do doskonalenia stosowanej w tym zakresie metodyki*”. Według dra hab. inż. Mariusza Pawła Mitoraja, prof. UJ (Uniwersytet Jagielloński) „*przedłożone osiągnięcie oraz cały dorobek naukowy, dydaktyczny i organizacyjny są wyróżniające*”. Dr hab. Andrzej Eilmes, prof. UJ (Uniwersytet Jagielloński) podkreślił, że „*Zgłoszone prace dotyczą ważnej (zwłaszcza w aspekcie aplikacyjnym) problematyki i prezentują szereg noszących cechy nowości rozwiązań poszerzających zestaw modeli służących do komputerowej predykcji toksyczności. Niewątpliwie więc wnoszą istotny wkład w rozwój metodologii*”. Natomiast prof. dr hab. Grzegorz Zadora (Uniwersytet Śląski) napisał: „*Podsumowując mogę stwierdzić, że przedstawiony w autoreferacie cykl publikacji jest spójny, prace te są bardzo wartościowe i stanowią oryginalne osiągnięcie naukowe*”. Podkreślić również należy, że z uwagi na „*wysoko oceniony wniosek, dorobek naukowy oraz pozytywne wrażenie jakie Habilitantka wywarła podczas rozmowy w trakcie*

posiedzenia Komisji", Komisja habilitacyjna jednogłośnie opowiedziała się za rekomendowaniem Radzie Dyscypliny Nauk Chemicznych UG wyróżnienia rozprawy habilitacyjnej Kandydatki (*Protokół z posiedzenia Komisji habilitacyjnej powołanej w sprawie przeprowadzenia postępowania habilitacyjnego dr Agnieszki Gajewicz-Skrętnej*).

Potwierdzeniem dużego zainteresowania społeczności naukowej pracami badawczymi Kandydatki oraz opracowanymi przez Nią algorytmami, modelami i narzędziami wspierającymi proces komputerowej oceny zagrożenia chemicznego oraz zrównoważonego projektowania nowych substancji chemicznych, jest duża cytowalność artykułów naukowych autorstwa dr hab. Gajewicz-Skrętnej. Kandydatka jest autorką lub współautorką 61 prac naukowych (z czego 9 stanowi rozprawę habilitacyjną). Prace te były publikowane w renomowanych czasopismach międzynarodowych, takich jak: *Nature Nanotechnology*, *Science of The Total Environment*, *Environmental Science: Nano*, *Nanoscale*, etc. Ich sumaryczny współczynnik oddziaływania impact factor wynosi $IF = 333,394$, natomiast liczba cytowań (z wyłączeniem autocytowań) wynosi 2588 i 2343 (odpowiednio według bazy *Scopus* i *Web of Science* na dzień 31 stycznia 2024 r.). Wysoka wartość indeksu Hirscha $h = 29$ i 27 (odpowiednio według *Scopus* i *Web of Science*) dowodzi uznania wśród innych grup naukowych prowadzących badania w podobnej tematyce. Na wyróżniający się dorobek naukowy, w swoich recenzjach uwagę zwrócili także Recenzenci w postępowaniu habilitacyjnym. Według dra hab. inż. Mariusza Mitoraja, prof. UJ „*Są to zdecydowanie wyróżniające parametry naukowometryczne, rzadko spotykane u Habilitantów w Polsce. Jest to dorobek imponujący*”. Podobny wydzwięk mają recenzje przygotowane przez prof. dra hab. Jarosława Polańskiego: „*wybitny charakter jej dorobku naukowego*” oraz prof. dra hab. Grzegorza Zadorę „*To wszystko przekłada się na ponad przeciętny, jak na postępowanie habilitacyjne, indeks Hirscha*”.

O doniosłości i wadze narzędzi komputerowych autorstwa Kandydatki stanowi fakt zapraszania dr hab. Gajewicz-Skrętnej do konsorcjów aplikujących o projekty naukowe, co zaowocowało uzyskaniem dwóch grantów na badania, w tym m.in. ze środków Programu Ramowego UE HORYZONT-2020: „*Advanced High Aspect Ratio and Multicomponent materials: towards comprehensive intelligent testing and safe by design strategies (HARMLESS)*” (NMBP-16-2020, umowa nr. 953183) oraz Norweskiej Rady Badań (*Research Council of Norway*): „*Towards a reliable assessment of nanomaterial health effects using advanced biological models and assays (NanoBioReal)*” (NANO2021, umowa nr. 288768), w których dr hab. Gajewicz-Skrętna pełni(ła) rolę kierownika z ramienia Uniwersytetu Gdańskiego. Zainicjowana w trakcie rocznego stażu podoktorskiego a następnie kontynuowana w rozprawie habilitacyjnej tematyka stała się także podstawą do przygotowania projektu naukowego, który uzyskał finansowanie ze środków Narodowego Centrum Nauki (SONATA nr UMO-2016/23/D/NZ7/03973), a którego dr hab. Gajewicz-Skrętna także była kierownikiem. W ubiegłym roku (2023), Kandydatka do Nagrody w międzynarodowym konsorcjum złożyła kolejną aplikację grantową w odpowiedzi na konkurs na *Doctoral Networks 2023 (HORIZON-MSCA-2023-DN-01-01)* w ramach Działań Marii Skłodowskiej-Curie. Przygotowany wniosek „*IDEAS4NetZero*” jest obecnie w procesie oceny.

Za swoje dotychczasowe osiągnięcia naukowe dr hab. Gajewicz-Skrętna otrzymała liczne krajowe i międzynarodowe wyróżnienia i stypendia naukowe. Kandydatka jest m.in. laureatką prestiżowej nagrody Międzynarodowych Wschodzących Talentów Nauki (edycja 2018) - International Rising Talents - For Women in Science i znalazła się w gronie 15 kobiet z całego Świata, które według Fundacji L'Oréal-UNESCO „rozwijając swój potencjał i kontynuując badania mają szansę zmienić świat”. Dr hab. Gajewicz-Skrętna jest również laureatką Stypendium Ministra Nauki i Szkolnictwa Wyższego dla wybitnych młodych naukowców.

Podsumowując, dr hab. Agnieszka Gajewicz-Skrętna jest nie tylko wybitną naukowczynią, pełną pasji i ciekawości badawczej, ale także serdecznym nauczycielem akademickim i mentorką dla młodego pokolenia adeptów nauki. Tylko obecnie pełni rolę opiekuna sześciu prac magisterskich przygotowywanych przez zagranicznych Studentów, m.in. z Turcji, Azerbejdżanu, Indii czy Egiptu. Ponadto dr hab. Gajewicz-Skrętna pełni rolę opiekuna naukowego dla Dr. Kabiruddina Ikramuddina Khan (Indie) w projekcie POLONEZ BIS2 współfinansowanym przez Komisję Europejską i Narodowe Centrum Nauki w ramach grantu Marie Skłodowska-Curie COFUND. Osiągnięcia naukowe Kandydatki

będące podstawą do nadania stopnia doktora habilitowanego niewątpliwie stanowią istotny wkład do nauki światowej w zakresie szeroko rozumianej wirtualizacji procesu oceny bezpieczeństwa chemicznego oraz projektowania bezpiecznych i zrównoważonych substancji chemicznych i materiałów nowej generacji. Podkreślić również należy, że osiągnięcia naukowe będące podstawą nadania stopnia doktora habilitowanego dr hab. Agnieszce Gajewicz-Skrętnej z naddatkiem spełniają wszystkie kryteria określone w Rozporządzeniu Prezesa Rady Ministrów z dnia 21 maja 2019 r. w sprawie kryteriów i trybu przyznawania nagród Prezesa Rady Ministrów z późniejszymi zmianami. Mając na uwadze wybitny dorobek i osiągnięcia Kandydatki świadczące o Jej pełnej samodzielności i dojrzałości naukowej, a także innowacyjność podjętej tematyki badawczej, aplikacyjność wyników i ich ogromne znaczenie dla dynamicznie rozwijającego się przemysłu chemicznego oraz wdrożenia wiarygodnych metod alternatywnych wobec badań na zwierzętach w procesie oceny bezpieczeństwa chemicznego, w imieniu Rady Dyscypliny Nauki Chemiczne Uniwersytetu Gdańskiego z pełnym przekonaniem rekomenduję kandydaturę dr hab. Agnieszki Gajewicz-Skrętnej do Nagrody Prezesa Rady Ministrów za wysoko ocenione osiągnięcia będące podstawą nadania stopnia doktora habilitowanego.