



Prof. dr hab. Dorota Kwiatkowska
Instytut Biologii, Biotechnologii i Ochrony Środowiska
Wydział Nauk Przyrodniczych, Uniwersytet Śląski w Katowicach
ul. Jagiellońska 28, 40-032 Katowice

Katowice, 11.09.2024

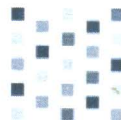
**RECENZJA ROZPRAWY DOKTORSKIEJ MGR. ANDRZEJA KOKOSZY
ZATYTUŁOWANEJ „MULTISCALE MODELLING OF BIOLOGICAL SYSTEMS: A
COMPUTATIONAL APPROACH TO STUDYING NATURAL PHENOMENA FROM
CELLULAR TO ECOLOGICAL LEVELS”**

Współczesne badania z dziedziny nauk ścisłych i przyrodniczych bardzo często mają charakter interdyscyplinarny, łącząc nauki biologiczne i informatykę, a nieodzownym ich elementem są symulacje komputerowe. W przypadku badania zjawisk przyrodniczych zarówno modelowanie, jak i badania empiryczne muszą być często prowadzone na wielu poziomach organizacji świata żywego, co stanowi wyzwanie i dla informatyka, i dla biologa. Takie wyzwanie podjął z powodzeniem Pan Mgr Andrzej Kokosza, opracowując prezentowane w ocenianej rozprawie wieloskalowe modelowanie matematyczne.

Ocena merytoryczna i metodologiczna rozprawy

Przedstawiona do oceny rozprawa doktorska Pana Mgr. Andrzeja Kokoszy mieści się w dziedzinie nauk ścisłych i przyrodniczych, w zakresie dyscypliny informatyka. Praca została wykonana na Wydziale Matematyki i Informatyki Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu, pod kierunkiem promotora Pana Dr. hab. Krzysztofa Dyczkowskiego, prof. UAM, oraz Pana Dr. Wojciecha Pałubickiego w roli promotora pomocniczego.

Rozprawa została napisana w języku angielskim. Składa się na nią pięć części. Pierwsza z nich to krótkie wprowadzenie (*Introduction*) do problemów badawczych prezentowanych w kolejnych rozdziałach. Po wprowadzeniu następują trzy rozdziały, w których omówiono kolejne modele opracowane przez Doktoranta. Dwa z modeli zostały wykorzystane w publikacjach naukowych, które ukazały się w 2023 roku w prestiżowych czasopismach naukowych: *Proceedings of the National Academy of Sciences* (modelowanie omówione w drugim rozdziale wyników) oraz *ACM Transactions on Graphics* (modelowanie omówione w trzecim rozdziale wyników), specjalnym woluminie poświęconym konferencji SIGGRAPH 2024, w trakcie której Mgr Kokosza prezentował wyniki badań. Pierwszy rozdział dotyczący wyników, zatytułowany *Vascular Strands Formation in the Arabidopsis Shoot Apex*, poświęcony jest modelowaniu tworzenia systemu naczyniowego, czyli procesu zachodzącego na poziomie komórki i tkanki. W kolejnym rozdziale, zatytułowanym *Long Distance Signalling Model of Auxin in Trees*, Doktorant omawia modelowanie komunikacji długodystansowej zachodzącej na poziomie organu i całego organizmu. Ostatni rozdział prezentujący oryginalne badania to rozdział *Scintilla: Simulating Combustible Vegetation for Wildfires*. Mgr Kokosza omawia w nim modelowanie na poziomie ekosystemu, czyli modelowanie pożaru





ekosystemu leśnego. W ostatnim, krótkim rozdziale rozprawy (*Conclusion*) Mgr Kokosza podsumowuje zaprezentowane wyniki badań. Rozprawę kończy wspólny dla wszystkich rozdziałów spis literatury.

W krótkim **wprowadzeniu** do rozprawy Doktorant wskazuje na potrzebę łączenia empirycznych badań biologicznych i wieloskalowego modelowania matematycznego w celu lepszego zrozumienia procesów i zjawisk biologicznych. Następnie formułuje cel pracy, jakim jest ewaluacja i rozwój metod matematycznych i obliczeniowych wykorzystywanych w badaniu zjawisk przyrodniczych, oraz ogólne hipotezy, do których odnoszą się prezentowane badania: (i) modele obliczeniowe pozwalają na symulacje złożonych systemów biologicznych; (ii) by odnieść się do unikalnych wyzwań stawianych przez różne zjawiska biologiczne konieczne jest różne podejście do modelowania; (iii) modelowanie może być wykorzystywane do oceny hipotetycznych mechanizmów biologicznych i identyfikacji obszarów wymagających bardziej wyczerpujących badań. Hipotezy te są w mojej opinii zbyt ogólne, wręcz ogólnikowe, i właściwie biorąc pod uwagę znane już z literatury modele, nie wymagają kolejnej weryfikacji. Jak rozumiem, Mgr Kokosza starał się wprowadzić w ten sposób element spajający prezentowane badania, nie było to jednak według mnie konieczne. Szczegółowe wprowadzenie, cele badań oraz omówienie literatury, które typowo zamieszcza się we wstępie rozprawy doktorskiej, zostały zamieszczone w kolejnych rozdziałach poświęconych modelowaniu. Taką konstrukcję uzasadnia znaczna odrębność modelowanych zjawisk i metod modelowania. Wprowadzenie kończy krótkie omówienie zawartości poszczególnych rozdziałów prezentujących badania Doktoranta.

Pierwszy i jednocześnie najdłuższy z rozdziałów, w których omówiono oryginalne badania Doktoranta, dotyczy modelowania powstawania pierwotnego systemu waskularnego pędu. System ten budują wiązki waskularne przebiegające od organów, takich jak liście, kwiaty, pędy boczne, do łodygi a następnie dalej do połączenia z systemem waskularnym korzeni. Wzór rozmieszczenia liści i kwiatów, nazywany filotaksją, jest niezwykle regularny, z czym związana jest także regularność wzoru tworzonego przez wiązki waskularne. Ponieważ za pośrednictwem systemu waskularnego transportowane są na duże odległości składniki pokarmowe, mineralne, woda, ale również regulatory wzrostu (hormony roślinne), stanowi on kluczowy układ funkcjonalny organizmu roślinnego. Mimo to mechanizm odpowiedzialny za tworzenie wzoru rozmieszczenia wiązek waskularnych nie został jeszcze do końca wyjaśniony. Mgr Kokosza stworzył model pozwalający na weryfikację dwóch kluczowych hipotez dotyczących tego mechanizmu, które funkcjonują w literaturze. Według pierwszej z nich tworzeniem systemu waskularnego kierują sygnały pochodzące z zawiązków liści powstających na powierzchni merystemu apikalnego pędu, które nowo powstające wiązki mają połączyć z systemem waskularnym łodygi. Według drugiej hipotezy tworzenie systemu waskularnego jest procesem „samo-organizowania”, w którym uczestniczą sygnały wewnętrzne i który nie wymaga sygnałów pochodzących z zawiązków liści. Model stworzony przez Mgr. Kokoszę pozwolił na wykazanie słuszności drugiej hipotezy. W modelu, zgodnie z danymi empirycznymi, wiązki waskularne powstają jako przedłużenia i/lub rozgałęzienia wiązek istniejących, których kierunek wyznaczony jest ruchem „czynnika” będącego pod wpływem otoczenia. Doktorant założył istnienie oddziaływań typu „odpychania” i „przyciągania” pomiędzy istniejącymi i nowotworzonymi





wiązkami. Oddziaływania te wystarczają do wygenerowania występującego w naturze charakterystycznego regularnego i dość złożonego układu wiązek waskularnych zgodnego ze wzorem filotaksji, bez konieczności istnienia sygnałów pochodzących z zawiązków liści. Stanem początkowym w modelu jest rzeczywisty układ wiązek waskularnych w wierzchołkowej części pędu. Układ wiązek reprezentowany jest przez graf łączący punkty w przestrzeni. Taka reprezentacja układu waskularnego i mechanizmu regulacji tworzenia wiązek pozwala w przyszłości z jednej strony na testowanie roli dowolnych czynników, a co za tym idzie różnych hipotez mechanizmu tworzenia systemu waskularnego, a z drugiej badanie tworzenia innych wzorów tkankowych w organach oraz tworzenia architektury ciała roślin (np. system korzeniowy) i niektórych zwierząt (np. koralowce). W rozprawie omówiono szczegółowo optymalizację parametrów modelu oraz walidację wyników modelowania, porównując je z rzeczywistymi układami wiązek waskularnych. Warte podkreślenia są wyzwania, przed jaki stanął w trakcie modelowania Mgr Kokosza. Po pierwsze, system waskularny powstaje w merystemie apikalnym, czyli w rosnącej części pędu, co Doktorant uwzględnił wprowadzając ciągle odsuwanie się zawiązków liści i wiązek od środka powierzchni merystemu apikalnego. Po drugie, system waskularny powstaje w przestrzeni a nie na płaszczyźnie. Doktorant przyjął, że wiązki przebiegają na powierzchni stożka, co jest dobrym przybliżeniem rzeczywistego układu. Po trzecie, rekonstrukcja rzeczywistego układu wiązek waskularnych w wierzchołkowej części pędu, czyli stanu początkowego modelu, nie jest zadaniem banalnym dla biologa. Dlatego Mgr Kokosza stworzył interaktywne narzędzie do rekonstrukcji 3D układu wiązek, w którym graf reprezentujący układ przestrzenny wiązek jest budowany na podstawie wskazywanego przez użytkownika położenia wiązek na serii przekrojów optycznych uzyskiwanych w mikroskopie konfokalnym.

W drugim rozdziale poświęconym oryginalnym badaniom Doktoranta omówiono model długodystansowego transportu regulatora wzrostu (auksyny) w łodygach drzew. Transport auksyny na małe lub duże odległości w tkankach i organach roślinnych to kluczowy proces w komunikacji pomiędzy odpowiednio komórkami lub tkankami/organami roślin, a podstawową formą przekazywanej informacji jest lokalne stężenie auksyny i szybkość jej przepływu. Dlatego tak ważne jest wyjaśnienie, w jaki sposób powstaje czasoprzestrzenny wzór stężenia auksyny. Model stworzony przez Mgr. Kokoszę powstał jako dopełnienie badań eksperymentalnych, które wykazały różnice w lokalnych gradientach stężenia auksyny pomiędzy młodymi osobnikami brzozy typu dzikiego oraz mutanta, w którym obniżony jest poziom innego regulatora wzrostu (strigolaktonu). Rośliny te różnią się pokrojem – typ dziki od początku przypomina drzewo a mutant ma pokrój silnie rozgałęzionego, zwartego krzewu. Model pozwolił na weryfikację hipotezy, według której różnice w gradientach auksyny wytłumaczyć można samymi różnicami w architekturze pędu przy założeniu, że transport auksyny w obu typach roślin jest taki sam. Doktorant stworzył do tego celu model hybrydowy, w którym wykorzystał graf złożony z podstawowych jednostek (są to metamery w sensie biologicznym, w skład których wchodzi międzywęźle, węzeł, liść i pąk boczny) do reprezentacji architektury drzewa oraz równania różniczkowe opisujące w sposób analityczny syntezę, transport i rozkład auksyny, przypisane każdemu elementowi grafu. Takie połączenie dwóch podejść do modelowania pozwoliło odtworzyć w oparciu o realistyczną architekturę osobników typu dzikiego i mutanta





lokalne gradienty stężenia auksyny, zbliżone do danych eksperymentalnych. Dodatkową walidację modelu stanowi symulacja eksperymentu dekapitacji, czyli usuwania pąków będących źródłem auksyny. Podsumowując wyniki Doktorant wskazuje na potencjalne ścieżki rozwoju modelu, w którym można by uwzględnić wzrost i rozwój architektury drzewa.

Trzeci rozdział opisujący oryginalne badania poświęcony jest symulacji pożaru lasu. Mgr Kokosza przedstawia imponujący swoją złożonością, realizmem i kompleksowym podejściem model rozprzestrzeniania się pożarów w różnych ekosystemach i typach siedlisk. Celem modelowania było stworzenie symulacji rozprzestrzeniania się pożaru, która obejmowałaby dynamikę wzajemnych oddziaływań pomiędzy roślinnością, siedliskiem i atmosferą, które zachodzą w trakcie pożaru. Model uwzględnia w szczególności ukształtowanie powierzchni i architekturę porastającej ją roślinności, pokłady szczątków organicznych pokrywające podłoże, właściwości gleby, czasoprzestrzenne zróżnicowanie wilgotności palnego materiału, chemiczne i fizyczne zależności opisujące proces spalania, przenoszenia ciepła oraz ruchy powietrza. Takie kompleksowe i przez to unikalne podejście pozwoliło na symulacje pożarów różnego typu, jak pożary podłoża, roślinności nieдрzewiastej, koron drzew. Stworzenie tak kompleksowego i wielopoziomowego modelu wymagało podejścia hybrydowego, w którym Mgr Kokosza połączył: model roślinności reprezentowanej przez grafy w 3D; model 2D warstw pokrywających podłoże, reprezentujących rośliny zielne i szczątki organiczne; model 3D atmosfery. We wszystkich elementach uwzględnił z dużym realizmem zróżnicowaną wilgotność (np. przypisując wyższe jej wartości modułom drzew o lepszym „wigorze”). Ponadto model obejmuje także rozprzestrzenianie ognia poprzez iskry, w zależności od ruchu powietrza i warunków siedliskowych. Symulacje walidowano porównując wyniki z wynikami empirycznymi oraz obliczeniami wykonanymi na podstawie modeli opisujących wybrane aspekty rozprzestrzeniania pożaru. Doktorant zwraca także uwagę na ograniczenia modelu: (i) nie są możliwe symulacje pożaru dużej powierzchni lasu; (ii) model gleby mógłby być bardziej złożony. Nie zmienia to faktu, że zaprezentowany model może mieć szerokie zastosowanie zarówno w naukach podstawowych (ekologia lasu, klimatologia), jak i stosowanych (np. leśnictwo). Może mieć również duże znaczenie użytkowe dla służb monitorujących pożary lasów i z nimi walczących. Z obowiązku recenzenta muszę zwrócić uwagę na jedną nieścisłość. Mianowicie hipotezy sformułowane na początku omawiania modelu nie są weryfikowane i stanowią raczej założenia modelu.

W ostatnim, krótkim rozdziale rozprawy, zatytułowanym **wnioski** Mgr Kokosza odnosi się do trzech hipotez sformułowanych we wprowadzeniu do rozprawy, wskazując, że zostały one potwierdzone przez zaprezentowane w rozprawie badania.

Za szczególnie ważne i cenne wyniki prezentowane w rozprawie Mgr. Kokoszy uważam:

- Stworzenie złożonego i realistycznego matematycznego modelu rozwoju systemu waskularnego pędu, który umożliwił weryfikację hipotez wyjaśniających rolę zawiązków liści w rozwoju systemu
- Stworzenie podstawowego modelu matematycznego wpływu architektury drzewa na komunikację długodystansową, który może być rozwijany do modelowania komunikacji w innych systemach biologicznych





- Połączenie biologicznych aspektów ekosystemu i fizycznych aspektów procesu spalania w matematycznym modelowaniu pożarów w szerokim zakresie różnorodności ekosystemów i warunków siedliskowych
- Opracowanie interaktywnego narzędzia komputerowego do rekonstrukcji pierwotnego systemu waskularnego pędu na podstawie serii przekrojów optycznych

Proszę, by w trakcie publicznej obrony Doktorant odpowiedział na następujące pytania:

1. W odniesieniu do modelu powstawania pierwotnego systemu waskularnego: czym można tłumaczyć bardzo małe w porównaniu z danymi empirycznymi zróżnicowanie kąta dywergencji wyznaczonego na podstawie rozmieszczenia wiązek waskularnych w modelu?
2. W jaki sposób w modelu komunikacji długodystansowej można by uwzględnić pierwotny i wtórny wzrost drzewa?
3. Czy model pożarów uwzględnia symulacje spontanicznego pojawiania się pierwotnego źródła pożaru?
4. Czy wykorzystując model pożarów można by oszacować zmiany temperatury we wskazanych przez użytkownika punktach zlokalizowanych w koronie drzewa lub na powierzchni gleby? Takie informacje byłyby cenne np. w przypadku badania gatunków drzew iglastych, których szyszki otwierają się tylko po pożarze.

Jako recenzent muszę zwrócić uwagę na niedociągnięcia, które mają w większości charakter redakcyjny. W rozdziałach 2-4, w których opisano wyniki badań, wyodrębniono podrozdział „wstęp” (*Introduction*) oraz króciutki podrozdział „powiązane prace” (*Related works*) lub „powiązane prace i podejście do modelowania” (*Related work and modelling approach*), co wydaje się sztuczne (powiązane prace są częściowo omówione we wstępie, przez co podrozdział im poświęcony jest bardzo krótki). W rozdziałach drugim i w mniejszym stopniu trzecim jest dużo błędów redakcyjnych i stylistycznych, związanych często z powtórzeniami fragmentów tekstu lub brakiem pojedynczych wyrazów, czasem nawet fragmentów zdań. Część z rycin (np. ryc. 2.1-3, 3.1) nie została zacytowana w tekście. W tekście pojawiają się odwołania do pozycji literatury, których brakuje w bibliografii (np. w ostatnim akapicie na str. 27). Część podpisów pod tabelami, rycinami (np. tab. 2.3, ryc. 2.12) nie pasuje do ich zawartości. Błędy te nie wpływają na ocenę merytoryczną rozprawy, utrudniają jednak czytanie i stwarzają wrażenie, że rozprawa przygotowywana była w pośpiechu.

Podsumowanie i wnioski końcowe

Podsumowując, chciałabym zwrócić uwagę na wyjątkową kompleksowość i realizm zaprezentowanych symulacji komputerowych oraz duże znaczenie opracowanych przez Mgr. Kokoszę modeli dla weryfikacji hipotez wyjaśniających mechanizmy procesów biologicznych. Należy podkreślić także potencjalnie szerokie zastosowanie prezentowanych modeli jako dopełnienie badań podstawowych z zakresu nauk biologicznych oraz jako narzędzie użytkowe. Dlatego w mojej





opinii wieloskalowe modelowanie matematyczne przedstawione w rozprawie doktorskiej uzasadnia nadanie Mgr. Andrzejowi Kokoszy stopnia naukowego doktora w dyscyplinie informatyka.

W związku z powyższym stwierdzam, że przedstawiona do oceny rozprawa spełnia wszystkie warunki stawiane pracom doktorskim zgodnie z *art. 187 ustawy z dnia 20 lipca 2018 r. Prawo o szkolnictwie wyższym i nauce* (Dz.U. z 2022r. poz. 574 z późn. zm.) i zwracam się do Rady Naukowej Dyscyplin Matematyka i Informatyka Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu o jej przyjęcie i dopuszczenie Pana Mgr. Andrzeja Kokoszy do dalszych etapów postępowania doktorskiego. Biorąc pod uwagę wysoki poziom i nowatorski charakter prezentowanych badań, zwracam się także z wnioskiem o wyróżnienie rozprawy Pana Mgr. Andrzeja Kokoszy.

