

Program rozwoju ICM UW

Bogdan Lesyng

Uwagi wstępne: Poniższy program jest wynikiem moich doświadczeń w realizacji interdyscyplinarnych badań i kształcenia, obejmujących fizykę, nauki obliczeniowe i informatykę oraz biologię. W ciągu ostatniego roku zostałem zaproszony do komitetu sterującego projektu European Science Foundation, *"Molecular Simulations in Biosystems and Material Science"* (SimBioMa). Program jest dostępny na mojej stronie (<http://www.icm.edu.pl~lesyng/simbioma.pdf>) i z bardzo dużym prawdopodobieństwem uzyska on finansowanie do końca tego roku. Z kolei zaproszenie mnie do uczestnictwa w konferencji „*Converging Sciences*”, Dec. 16-17, 2004, Trento, w workshopie KOWI & EC „*Realising the Full Potential of EU 25*”, July 11, 2005 Brussels oraz w panelu recenzentów projektów FP6-Priority 3, „*Nanotechnology and Nanosciences, Knowledge-based Multifunctional Materials*”, Nov. 9-15, 2005, Brussels, dało mi praktyczną wiedzę o preferowanych przez EC strategicznych kierunkach i mechanizmach ich finansowania. Powinno mi to ułatwić zdobywanie środków finansowych dla rozwoju ICM.

Moje dyskusje o wizji ICM. W okresie, po głosowaniu indykacyjnym, rozmawiałem z władzami dziekańskimi wszystkich wydziałów nauk matematyczno-przyrodniczych i ekonomicznych UW, nowymi władzami rektorskimi PW, jak również z dyrektorami niektórych instytutów, w tym Instytutu Informatyki MIM UW, prof. Krzysztofem Diksem, Instytutu Fizyki Teoretycznej WF UW, prof. Markiem Napiórkowskim, IBB PAN, prof. Włodzimierzem Ostoją-Zagórskim oraz Centrum Fizyki Teoretycznej, prof. Markiem Kusiem. Jestem przekonany, że ICM UW pod moim kierunkiem będzie funkcjonował w przyjaznym środowisku akademickim, co pozwoli na jego pełniejszy rozwój. Utwierdziłem się w przekonaniu, że zgodnie ze swoim statutem **ICM powinien zachować charakter interdyscyplinarnej jednostki naukowej i edukacyjnej UW, realizując naturalnie na możliwie najwyższym poziomie wszystkie swoje serwisy KDM i BWN na rzecz całego środowiska akademickiego.**

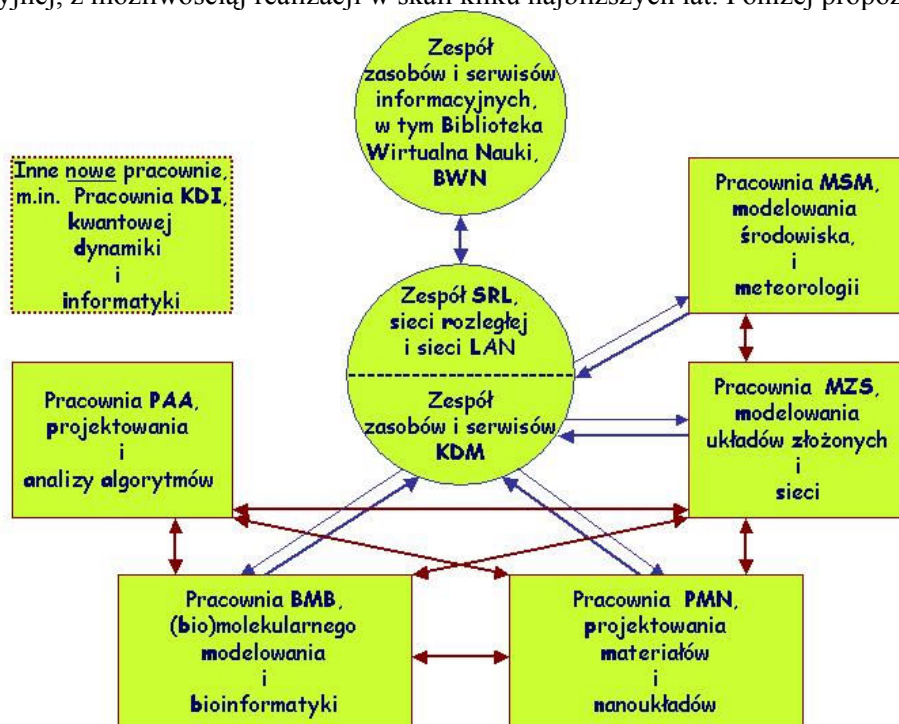
Wspieranie rozwoju ICM. Jest bardzo ważne aby ICM był wspólnym dziełem pracowników i współpracowników, przyjaznym miejscem pracy dającym wszystkim, w tym młodym pracownikom naukowym, możliwości dalszego rozwoju. Będę zatem wspierał wszelkie inicjatywy pracowników i współpracowników ICM UW uzyskiwania środków na badania naukowe oraz inicjował takie, które leżą w obszarze moich naukowych kompetencji. W szczególności, wykorzystywał będę możliwości jakie dają dwa centra doskonałości, których działalność obecnie koordynuję, są to:

- European CoE for Multiscale Biomolecular Modelling, Bioinformatics and Applications “MAMBA”, <http://www.icm.edu.pl/mamba/>, kończący swoją działalność w tym roku, oraz
- Krajowe CD Zastosowań Biomolekularnego Modelowania i Bioinformatyki “BioExploratorium”. BioExploratorium grupuje bardzo dobre zespoły badawcze profesorów: J. Antosiewicza, P. Bały, K. Blinowskiej, M. Gellera, A. Jerzmanowskiego, A. L. Kawczyńskiego, P. Stępnia i E. Bartnik, J. Tiuryna, P. Zielenkiewicza i mój.

W ramach BioExploratorium przygotowaliśmy aplikację o grant inwestycyjny z funduszy strukturalnych na 2 mln. zł. Fundusze zostały już przyznane. Grant zawiera m.in. system wirtualnej rzeczywistości do projektowania molekularnego, bioinformatyczne serwery obliczeniowo-bazodanowe oraz serwer zdalnego nauczania. System wirtualnej rzeczywistości będzie zlokalizowany w ICM i wykorzystywany byłby m.in. przez zespoły badawcze pracowni Biomolekularnego Modelowania i Bioinformatyki (**BMB**) jak również Projektowania Materiałów i Nanoukładów (**PMN**) oraz Modelowania Układów Złożonych i Sieci (**MZS**) (patrz proponowany schemat funkcjonalny ICM). W tym samym trybie wspólnie z IBB PAN oraz Wydziałem Biologii UW złożyliśmy następny grant inwestycyjny na kwotę ok. 3 mln zł obejmujący m.in. nowoczesny system mikromacierzowy do badania ekspresji genów. Badania te będą należeć do strategicznych kierunków ICM. O podobnej ważności i praktycznym znaczeniu będzie projektowanie leków (patrz m.in. <http://www.icm.edu.pl/ipk2005/>). Złożyłem aplikację o grant zamawianego projektu „*Inhibitory kinaz białkowych jako potencjalne leki przeciwnowotworowe i przeciwwirusowe*”, również na kwotę ok. 3 mln. zł. Projekt realizowany byłby we współpracy z kilkoma zespołami badawczymi kampusu Ochota, m.in. z IBB PAN. Wykonawcami tego projektu zgodzili się być prof. Grzegorz Gryniewicz, jeden z najwyższej

cytowanych chemików w Polsce, oraz o profesorowie o światowej renomie z USA: Alexander Włodawer i Waldemar Priebe z instytutów rakowych we Frederick i w Houston.

Struktura ICM. Efektywnie funkcjonujący ICM wymaga przejrzystej struktury organizacyjnej, z możliwością realizacji w skali kilku najbliższych lat. Poniżej propozycja.



W pracowniach realizuje się prace badawcze oraz wdrożeniowe lub optymalizacyjne oprogramowania na rzecz **KDM**, jak również programy edukacyjne i szkoleniowe dla użytkowników. Zespoły serwisów KDM i BVN są minimalne pod względem osobowym – odpowiedzialne głównie za operacyjne funkcjonowanie serwisów. Strzałki brązowe oznaczają współpracę merytoryczną. Strzałki niebieskie pogrubione - współpracę o charakterze wdrożeniowym, strzałki niebieskie cienkie - „feed back” ze strony serwisów. Pracownia **MZS** obejmuje te obszary, które nie są reprezentowane w pracowniach **BMB** i **PMN**. W szczególności dotyczy to projektowania i analizy złożonych modeli w naukach interdyscyplinarnych na pograniczu ekonomii, fizyki i informatyki, jak również opisu procesów zachodzących w złożonych sieciach, m.in. zjawisk krytycznych. Pracownie byłyby zobowiązane do: regularnych seminariów naukowych, stałej oferty dydaktycznej, wspólnego seminarium doktoranckiego (najlepiej organizowanego przez „Graduate College” <http://www.icm.edu.pl/gc/page/>). Niestety, zwyczaj cotygodniowych seminariów w ICM stopniowo zanikł, co jest fatalne dla rozwoju personelu i naukowej atmosfery.

Komisja konkursowa naboru kandydatów do Graduate College powinna składać się z członków Rady Naukowej ICM UW - przedstawicieli wydziałów nauk matematyczno-przyrodniczych i ekonomicznych oraz ICM. Komisja konstituuje się i wybiera przewodniczącego ze swojego grona.

Nowi współpracownicy. Przedstawiony schemat przekracza możliwości badawcze i edukacyjne obecnej kadry naukowej ICM, nawet jeżeli uwzględni się zatrudnienie młodych pracowników w ramach ostatniego konkursu. Dlatego ścisła współpraca z pracownikami o wysokim autorytecie naukowym z innych ośrodków naukowych jest kluczowa dla dalszego rozwoju ICM. Profesorowie, którzy wyrazili intencję współpracy w budowaniu silnego naukowo i dydaktycznie ICM otrzymaliby przestrzeń do realizacji uzgodnionych prac. Finansowanie realizowane byłoby w podobny sposób jak ma to miejsce w przypadku dr hab. **P. Bały** <http://www.mat.uni.torun.pl/~bala/> oraz dr hab. **W. Wiślickiego**, <http://www.icm.edu.pl/~wislicki/>, tzn. głównie z funduszy grantowych. Finansowanie byłoby częściowo realizowane również z „overheadów” pochodzących z serwisów i/lub projektów o charakterze usługowym oraz badawczo-wdrożeniowym ICM. Profesorowie o których mowa to::

- Prof. dr hab. **Janusz Holyst** (<http://www.if.pw.edu.pl/~jholyst/>), PW. Rozwijający m.in. modele na pograniczu ekonomii, nauk społecznych oraz fizyki i informatyki. Realizator programów europejskich: *Critical Events in Evolving Networks* i *Measuring and Modelling Complex Networks Across Domains* i *Stochastic Dynamics*.
 - Dr hab. **Ryszard Kutner**, prof. UW (<http://www.fuw.edu.pl/~erka/>), specjalizujący się w metodach symulacji układów złożonych, w tym modeli ekonomicznych i socjologicznych, współorganizator pierwszego ogólnopolskiego sympozjum w dziedzinie ekono- i socjofizyki (<http://www.science24.com/event/fens2004/>).
 - Prof. dr hab. **Wojciech Rytter** (<http://www.mimuw.edu.pl/~rytter/>). Specjalista w dziedzinach: konstrukcji i analizy efektywnych, równoległych algorytmów, teorii automatów, teorii grafów, algorytmice wysoko skompresowanych zbiorów oraz „string’ów”. Prof. Rytter odpowiedzialny byłby za stworzenie pracowni **PAA**, wykorzystując m.in. młodą kadrę o wykształceniu informatycznym, pozostającą w chwili obecnej bez właściwej opieki naukowej.
 - Prof. dr hab. **Marek Cieplak** (<http://info.ifpan.edu.pl/>). Współorganizator z prof. **Piotrem Zielenkiewiczem** i ze mną nowego seminarium „*Fizyka biologiczna i bioinformatyka*”. Wszechstronny badacz o głębokim rozumieniu fizyki kwantowej, fizyki statystycznej, zaangażowany w badania układów biomolekularnych. Współpraca rozwinięłaby się pełniej m.in. w obszarze analizy wyników eksperymentalnych z mikromacierzy.
 - Prof. dr hab. **Andrzej Koliński** (<http://biocomp.chem.uw.edu.pl/people/kolinski/>). Jeden z czołowych specjalistów w projektowaniu „komputerowych automatów” związających białka. Współpraca polegałaby m.in. na wspólnym stworzeniu bazy zwiniętych, również o 4-to rzędowej strukturze i wirtualnie zmiareczkowanych białek (warunki zbliżone do fizjologicznych). Baza będzie zawierać także dane o mezoskopowych, molekularnych polach !
- Możliwość utworzenia nowej pracowni **KDI** wynika z rozmowy z prof. dr hab. Markiem Kusiem, dyrektorem CFT. CFT specjalizuje się m.in. w tematyce przetwarzania informacji (<http://lfppi.cft.edu.pl/>), w tym rozwija metody „quantum computing’u”. Wykorzystanie naszych umiejętności w symulacjach kwantowej i kwantowo-klasycznej dynamiki w rzeczywistym środowisku molekularnym, pozwoliłyby z punktu widzenia CFT na rozszerzenie zakresu prowadzonych tam badań, natomiast z punktu widzenia ICM na stworzenie nowego, strategicznego kierunku badawczego i aplikacyjnego.

Edukacja. Biorąc pod uwagę szczególne kwalifikacje pracowników ICM obecnych i przyszłych, oraz dążąc do stabilizacji finansowej chciałbym doprowadzić do zorganizowania ze współpracującymi wydziałami w skali jednego roku przynajmniej jednego interdyscyplinarnego makrokierunku (o roboczej nazwie „bioinformatyka”) i/lub studiów podyplomowych. Makrokierunki oraz studia międzykierunkowe przewiduje nowa ustawa „Prawo o szkolnictwie wyższym” (<http://ks.sejm.gov.pl/proc4/ustawy/2720u.htm>). Niezależnie, we współpracy z COME (<http://www.come.uw.edu.pl/>), przewiduję również rozwinięcie metod kształcenia „na odległość” Za proces dydaktyczny odpowiedzialny byłby prof. Ryszard Kutner.

Młodym, przedsiębiorczym pracownikom naukowym, niezależnie od ich statusu ich zatrudnienia, zaproponuję włączenie im się do w/w nowych kierunków badawczych, wdrożeniowych i edukacyjnych.

Nowe inicjatywy. W odpowiedzi na inicjatywę MNiI dotyczącą Krajowego Programu Ramowego przygotowałem propozycję programu: „*Zintegrowane serwisy wieloskalowego modelowania i bioinformatyki w badaniach złożonych układów i procesów biomolekularnych*”. Bazuje on na strategii SimBioMa i uwzględnia specyfikę naszych badań. Program szacowany jest na kwotę około 25 mln. zł. na okres 3 lat. Wykorzystam możliwość przedyskutowania tego programu z kierownikami i członkami innych centrów doskonałości podczas dwudniowego sprawozdawczego workshopu organizowanego przez EC w Instytucie BD PAN w dniach 9-11 listopada.

Uważam również, że ICM w skali kilku najbliższych lat będzie potrzebował nowej siedziby. Popieram zatem plany budowy kompleksu naukowo-technologicznego na naszym Kampusie, gdzie ICM mógłby mieć swoją nową siedzibę. Nie miałem jednak możliwości zapoznania się z aktualnym wnioskiem inwestycyjnym, nie mogę więc szczegółowo ustosunkować się do tej inicjatywy. Omówienia wymaga również strategia rozwijania inwestycji KDM, nie mieszcząca się już w ramach tego zarysu programowego. Przedstawię ją zatem na posiedzeniu Rady.