



Dr Grzegorz Łazarski

Uniwersytet Jagielloński

Rozmowa z autorem pracy:

„Molecular dynamics simulations of interactions between polymeric nanoparticles and lipid membranes”

Pana praca obejmuje wiele różnych dziedzin naukowych. Co spowodowało że postanowił Pan nadać jej tak interdyscyplinarny charakter?

Jak każdemu dziecku, tak i mnie, często zadawano pytanie: „Kim chcesz zostać w przyszłości?” Wtedy zawsze próbowałem na nie jednoznacznie odpowiedzieć. Prawda jest jednak taka, że ostatecznie nigdy samemu nie doszedłem do jednej, satysfakcjonującej odpowiedzi – nawet teraz. Znajduje to odzwierciedlenie w mojej pracy badawczej, ponieważ umożliwia mi ona połączenie wszystkich dziedzin, które mnie interesują. Mam to szczęście, że moje badania były inspirowane moimi zainteresowaniami, a nie na odwrót. Wobec tego, różnorodność w mojej pracy badawczej, wynika z różnorodności moich zainteresowań. Pod koniec szkoły podstawowej zacząłem się interesować chemią syntetyczną oraz hodowaniem kryształów. Naturalnie, w tym wieku nie byłem w stanie przeprowadzić (bezpiecznie) żadnych większych doświadczeń, ale nadal mnie to fascynowało. W tym samym okresie zacząłem uczyć się programować we własnym zakresie, w celu tworzenia prostych modyfikacji do gier komputerowych. Pociągnęło to za sobą naukę modelowania 3D (co przydaje się w wizualizacjach), naukę ich kolorowania („tekstutowania”, w żargonie) i poznanie programów takich jak GIMP czy Inkscape. Te podwaliny, wraz z decyzją o podjęciu drugiego kierunku studiów na kierunku informatyka, znacznie ułatwiły mi odnalezienie się w dziedzinie prowadzenia symulacji komputerowych.

Co w Pana badaniach stanowiło największe wyzwanie?

Długo myślałem nad odpowiedzią na to pytanie, ale wydaje mi się, że największym problemem było jak skupić się na tym, co istotne w danym momencie. Kiedy czeka się na wyniki symulacji, do głowy przychodzą coraz to nowe, lepsze pomysły. Często przyłapywałem się na myśleniu „ten problem można było rozwiązać w ten sposób”; „tutaj przydałby się nieco większy układ”; „tutaj z kolei kilka mniejszych”... *ad infinitum*. W skrajnych przypadkach bywało, że skupiałem się nad rozwiązaniem całkowicie sztucznych problemów, które przed sobą sam postawiłem. Przygotowanie i rozpoczęcie prowadzenia symulacji to kwestia kilku dni, ale od koncepcji do publikacji zajmuje to więcej czasu. W takiej skali czasowej, koncepcja projektu, dostępna literatura i zrozumienie problemu mogą ulec znacznym zmianom. Dość szybko musiałem nauczyć się przewidywania z góry tego, co byłoby interesujące, jakie dokładnie ustawienia pozwoliłyby na najefektywniejsze wykorzystanie zasobów obliczeniowych.

W jaki sposób dostęp do superkomputerów Cyfronetu ułatwił prowadzenie Pańskich badań?

„Ułatwił” to moim zdaniem źle dobrane słowo. Dostęp do tych zasobów przede wszystkim *umożliwił* mi przeprowadzenie tych badań. Kiedy rozpoczynałem swoją przygodę z symulacjami w roku 2017, próbowałem użyć swojego komputera do przeprowadzenia symulacji. O ile technicznie udałooby się je doprowadzić do końca, to jeżeli dobrze pamiętam, zajęłoby to około 3 miesięcy, 24/7. Na same symulacje. Te same symulacje na klastrze (wtedy był to jeszcze Prometheus) mogły być przeprowadzone i zakończone w 3-4 dni. To jest ponad 22-krotne przyspieszenie obliczeń! Po zaledwie 8 latach,

taką symulację dałoby się z powodzeniem przeprowadzić na dość mocnym komputerze osobistym w podobnym czasie (z wykorzystaniem kart graficznych). Jednakże, postęp technologiczny umożliwia realizację większych ambicji dotyczących tworzenia bardziej skomplikowanych i coraz to większych układów. O ile przygotowanie układów i testowanie parametrów jest teraz możliwe na komputerze osobistym, zasoby Cyfronetu (w szczególności, klastry wyposażone w karty graficzne, takie jak Athena i Helios) są nadal niezmiennie ważne i potrzebne w tej dziedzinie.

Jakie są praktyczne zastosowania Pana badań?

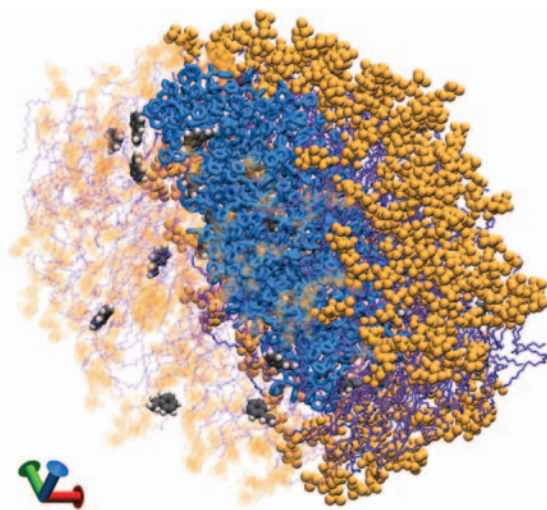
Cieężko mi jednoznacznie odpowiedzieć na to pytanie, gdyż w mojej pracy doktorskiej badania były prowadzone na wielu frontach. Część z nich dotyczyła polimerowych systemów dostarczania leków opartych o konkretny rodzaj tzw. nośników, a konkretnie badania ich zachowania w obecności modelowych błon komórkowych. Nad tym projektem pracował cały zespół – osoby zajmujące się eksperymentami oraz „symulanci”, jak ja. Moje wyniki pozwalały grupie doświadczalnej decydować, w którą stronę iść, jeśli chodzi o zmiany w strukturze tych nośników.

Drugi tor moich badań obejmował nanoplastiki, a w szczególności ich zdolność do uwalniania domieszek w nich zawartych, jak i zanieczyszczeń zaadsorbowanych ze środowiska bezpośrednio do membran komórkowych. W momencie kiedy rozpoczynałem ten projekt, literatury na ten temat było bardzo mało. Na tym etapie, konieczne było lepsze poznanie przypadków, w których te substancje mogą nam szkodzić, jak i przyciągnięcie większej uwagi do problemu jaki one stanowią. Nasza ostatnia praca zawierająca nieco rozszerzone wyniki cieszy się dużą popularnością, wedle danych otrzymanych od czasopisma.

Ostatnia część moich badań opierała się na rozwoju samych technik symulacyjnych. Konkretnie, pracuję nad rozwojem tzw. pola siłowego SPICA, w celu dodania możliwości symulacji układów zawierających cukry i glikozaminoglikany. Bez wchodzenia w szczegóły, ta technika subtelnie różni się od obecnie używanych i potencjalnie może oferować bardziej dokładne wyniki. W pracy doktorskiej podjąłem próby przygotowania zestawu odpowiednich parametrów, ale nie otrzymałem jeszcze wyników o stosownej jakości. Kiedy proces dobiegnie końca, poszerzy to znacznie zakres stosowania pola siłowego SPICA. Ponadto, wraz z samym procesem parametryzacji stworzyłem i poprawiłem wiele narzędzi, które usprawnią pracę z tym polem siłowym.

Jaką wskazówkę mógłby Pan przekazać osobom dopiero rozpoczynającym karierę naukową?

Zdecydowanie najlepszą radą, jaką mogę zaoferować, jest skupienie się głównie na własnym rozwoju osobistym i naukowym, a nie na arbitralnych metrykach. Publikowanie, granty, konferencje, cytowania – te wszystkie aspekty są istotne dla rozwoju kariery naukowej, ale w mojej opinii nie powinny stanowić o całkowitej wartości danego naukowca, w szczególności początkującego. Z dobrej postawy naukowej i sumiennej pracy „cyferki” przyjdą naturalnie. Oczywiście nie należy też zapominać o aplikowaniu o nagrody za swoje osiągnięcia.



Nanoplastik (polistyren, niebieskie linie) w membranie lipidowej (pomarańczowe kulki i fioletowe linie). Zanieczyszczenia (w formie pozostałości z procesu produkcji, tutaj styren; czarne i białe kulki) są uwalniane do wnętrza dwuwarstwy i mogą zmieniać jej właściwości.