

Laudatio

on
the Doctor Honoris Causa
academic title awarding
to

Prof. Siewert Jan Marrink



Stimate Domnule
Profesor Siewert Jan Marrink,
Stimați membri ai Senatului
Universității POLITEHNICA din
București,

Distinși Oaspeti,
Doamnelor și Domnilor,

Avem deosebita onoare și placere de a prezenta, la această ceremonie, unele aspecte ale vieții și carierei distinsului profesor Siewert Jan Marrink, de la Universitatea din Groningen, o personalitate inovatoare de excepție din domeniul dinamicii moleculare.

Evenimentul de astăzi este unul foarte special, nu numai pentru că persoana care va primi această distincție este

Most esteemed
Professor Siewert Jan Marrink,
Esteemed members of the
University POLITEHNICA of
Bucharest Senate,

Highly Distinguished Guests,
Ladies and Gentlemen,

We have the honor and the great pleasure to present at this ceremony some aspects of the life and career of the distinguished Professor Siewert Jan Marrink, from the University of Groningen, an exceptional and innovative academic in the field of Molecular Dynamics.

This is a very special moment, not only because the person who will receive this distinction is one of the world's

una dintre cele mai importante personalități din domeniul bioingineriei, dar și pentru că acest titlu este una dintre cele mai prestigioase distincții pe acordate de universități.

Profesorul Siewert Jan Marrink s-a născut în 1966 în Olanda și a absolvit, cu titlul de Master of Science în Biochimie (1989), Facultatea de Matematică și Științe Naturale (în prezent Facultatea de Științe și Inginerie) de la Universitatea din Groningen. A devenit doctor în 1994, la Facultatea de Științe Naturale de la aceeași universitate. Titlul tezei de doctorat a fost „Pătrunderea moleculelor mici prin membranele lipidice. Un studiu de dinamică moleculară” - conducător științific: Herman J.C. Berendsen, D.H.C. al universității noastre.

Prof. Marrink este părintele-fondator al instrumentului de modelare moleculară cu granulație grosieră MARTINI, care a revoluționat domeniile chimiei computaționale, modelarea

leading figures in the field of Bioengineering, but also because this title is one of the most prestigious distinctions awarded by universities.

Professor Siewert Jan Marrink was born in the Netherlands in 1966 and graduated with a Master of Science in biochemistry (1989) from the University of Groningen, Faculty of Mathematics and Natural Sciences (now Faculty of Science and Engineering) and with a PhD in 1994 at the Faculty of Natural Sciences, University of Groningen, the Netherlands.
His thesis title was "Permeation of small molecules across lipid membranes. A molecular dynamic study". PhD supervisor: Herman J.C. Berendsen, D.H.C of our university.

Prof. Marrink is the founding father of the MARTINI coarse-grained molecular modeling tool that revolutionized the fields of computational chemistry, biomolecular modeling, and molecular

biomoleculară și simulările dinamice moleculare ale proceselor biomoleculare, cum ar fi: fuziunea membranelor, oligomerizarea proteinelor membranare și formarea domeniului membranar.

Modelul MARTINI pentru simulări cu granulație grosieră (<http://cgmartini.nl>) este în prezent implementat de către sute de grupuri de cercetare biomoleculară la nivel mondial și în domenii care se extind dincolo de scopul inițial al modelului. De exemplu, este utilizat de fizicieni, pentru predicțiile de testare realizate de modele mai simple sau pentru a studia mecanismele fizice de bază la nivel de detaliu molecular, de chimici, care apreciază faptul că principiul blocului de construcție al modelului MARTINI prezintă abilitatea de a construi sisteme complexe bazate pe entități chimice mici, dar și de către biologi, care, folosind modelul MARTINI, pot să prezică procese

dynamics simulations of biomolecular processes such as membrane fusion, membrane protein oligomerization, and membrane domain formation.

The MARTINI model for coarse-grained simulations (<http://cgmartini.nl>) is now implemented by hundreds of biomolecular research groups worldwide, and in fields extending beyond the initial scope of the model. It is used by physicists (for test predictions made by simpler models, or to study basic physical mechanisms at molecular detail), by chemists (appreciate the building block principle of MARTINI, the ability to build complex systems based on small chemical entities), and biologists (using MARTINI to predict large scale biological processes, or refine and aid interpreting experimental data).

biologice la scară largă sau să ajute la interpretarea datelor experimentale.

În perioada 1995-1996 a fost cercetător la BASF din Ludwigshafen, Germania, iar în 1996 a devenit cercetător postdoctoral la Institutul Max Planck din Tübingen, Germania.

În perioada 1997-1998 a fost cercetător postdoctoral la Departamentul de Matematică Aplicată, Universitatea Națională Australiană, iar în perioada 1998-1999 a fost colaborator postdoctoral la Centrul de Cercetări în Domeniul Petrolului, Universitatea din New South Wales, Australia.

În perioada 1999-2005 a fost cercetător postdoctoral la Facultatea de Matematică și Științe ale Naturii, Universitatea din Groningen, iar în perioada 2006-2011 a fost membru al Comitetului Consultativ al TIC, de la aceeași universitate.

Din 2010 este membru în Consiliul Institutului Zernike pentru Materiale Avansate, Universitatea din Groningen;

From 1995-1996 Professor Marrink was a Contract Researcher, BASF in Ludwigshafen, Germany. In 1996 he was a Postdoctoral Fellow at the Max Planck Institute in Tübingen, Germany.

From 1997 - 1998, he was a Postdoctoral Fellow, Department of Applied Mathematics, Australian National University, Australia.

From 1998-1999 he was a Postdoctoral Fellow, Petroleum Cooperative Research Centre, University of New South Wales, Australia.

From 1999 - 2005 he was a Postdoctoral Fellow, Faculty of Mathematics and Natural Sciences, University of Groningen, the Netherlands. From 2006 - 2011 he was a Member of the ICT Advisory Board, University of Groningen, the Netherlands.

Since 2010, he has been a Board Member of the Zernike Institute for

din anul 2014 este directorul Centrului Berendsen de Proiectare Computațională, Universitatea din Groningen, iar din anul 2015 este președintele Comitetului Educațional de Chimie, Universitatea din Groningen.

Domeniile de interes special ale Profesorului Marrink includ:

- introducerea unor algoritmi noi pentru cuplarea rezoluțiilor multiple, care combină simulările atomice cu cele de granulație grosieră (MARTINI), oferind noi instrumente de dezvoltare pentru cercetătorii din grupurile de modelare dinamică;
- modelarea, pentru prima dată, a interacțiunilor proteine-lipide în membranele celulare, oferind vederi fără precedent asupra proceselor-cheie care apar în membranele mitocondriale și în cele tilacoide;
- popularizarea utilizării modelelor de granulație grosieră pentru specialiștii din biochimie / biofizică;

Advanced Materials, University of Groningen, the Netherlands. Since 2015 he has been the Chairman of the Educational Chemistry Committee, University of Groningen, the Netherlands. Starting in 2014, he became the Director of Berendsen Centre for Computational Design, University of Groningen, the Netherlands.

Professor Marrink's special research interests include:

- Introduction of novel algorithms to couple multiple resolutions combining all-atom and coarse-grained (Martini) simulations, providing new tools to the growing multiscale modeling community.
- Pioneer in modelling of protein-lipid interactions in realistic cell membranes, providing unprecedented views of key processes occurring in mitochondrial and thylakoid membranes.
- First, to popularize the use of coarse-grain models for

- simularea la nivel molecular, pentru prima dată, a proceselor bazate pe lipide, cum ar fi sintetizarea dublu strat, fuziunea membranelor și formarea domeniului, oferind biofizicienilor o perspectivă detaliată asupra acestor procese, care nu pot fi explorate prin nicio tehnică experimentală;
 - înregistrarea unei creșteri de zece ori a nivelului de complexitate a simulărilor, oferind o nouă viziune asupra existenței unor zone speciale în membranele celulare;
 - simularea auto-asamblării pe scară largă a proteinelor membranare și dezvăluirea forțele motrice ale formării mediate de lipide ale complexelor proteice, oferind o înțelegere mecanică esențială a principiilor organizării membranei celulare;
 - introducerea unui model referitor la natura porilor induși membranei de peptidele antimicrobiene.
- biochemical/biophysical community.
- Pioneer in the simulation of basic lipid-driven processes at a molecular level, e.g. bilayer self-assembly, membrane fusion, and domain formation, providing the biophysical community with a detailed view on these processes unattainable by any experimental technique.
 - There has been a 10-fold increase of the bar concerning the complexity level of simulations, providing a new view on the existence of 'rafts' in cellular membranes.
 - Firstly, to simulate large-scale self-assembly of membrane proteins, unravelling the driving forces of lipid-mediated formation of protein complexes, providing key mechanistic insight into lateral organization principles of the cell membrane.
 - The introduction of a model for the nature of membrane pores induced by antimicrobial peptides.

Prof. Marrink a fost deosebit de activ în organizarea unor conferințe internaționale, care au reunit oameni de știință interesați de modelarea pe scară largă (“multiscale”).

- A fost principalul organizator al *Conferinței Faraday*, Groningen, 2009.
- La reuniunea din anul 2012, din Singapore, concentrată pe modelarea “multiscale” a materialelor, Prof. Marrink a propus, a organizat și a condus subsecțiunea „Provocări în modelarea “multiscale” a materialelor biologice și moi”.
- A fost principalul organizator a trei întâlniri CECAM (în 2003, 2006 și 2011), reunind experți în modelarea “multiscale” a materialelor bio și moi.
- De asemenea, a fost principalul organizator al Workshop-ului CECAM, privind integrarea simulărilor cu inteligență artificială, Leiden, 2018.

Interesul pentru munca sa i-a adus un indice Hirsch de 83 pe Web of

Prof. Marrink has also been active in the organization of international conferences to convene international scientists interested in multi-scale modelling.

- He was the main organizer of the Faraday Discussion Conference, Groningen, 2009.
- For the 2012 Multiscale Material Modeling Meeting in Singapore, Professor Marrink proposed, organized, and led the subsection “Challenges in Multiscale Modeling of Biological and Soft Materials”.
- He was the co-organizer of three CECAM meetings in 2003, 2006, and 2011, bringing together experts in multiscale modelling of bio and soft materials.
- He was the main organizer, CECAM Workshop on Integrating Simulations and Machine Learning, Leiden, 2018.

The interest in his work brought him an h index of 83 on Web of Knowledge

Knowledge și un indice Hirsch de 190 pe Google Scholar.

Ca descoperitor și creator de talente, profesorul Siewert Jan Marrink a coordonat, până în prezent, 19 disertații de masterat, 13 teze de doctorat și nouă postdoctoranți din mai multe țări (Finlanda, Rusia, Belgia, Germania, Mexic, Pakistan, Grecia, Olanda, Italia, China, Franța, Elveția, Brazilia, Indonezia, Peru, Marea Britanie, Iran, Republica Cehă etc.), care au beneficiat de avantajul geniului creativ al laureatului nostru de astăzi.

Profesorul Marrink are, de asemenea, o listă impresionantă de publicații, care conține 209 articole publicate în reviste de specialitate, o carte și alte șapte capitulo de carte.

Profesorul Marrink are o reputație excelentă pe plan internațional, aşa cum reiese din citările sale și din grantul ERC Advanced (2015). La nivel național, recunoașterea Profesorului Marrink este ilustrată și de succesul său

and an h index of 190 on Google Scholar.

As discoverer and creator of talents, Professor Dr. Siewert Jan Marrink has coordinated 19 master theses, 13 Ph.D. theses and 9 PostDocs. Students from many countries (Finland, Russia, Belgium, Germany, Mexico, Pakistan, Greece, The Netherlands, Italy, China, France, Switzerland, Brazil, Indonesia, Peru, UK, Iran, Czech Republic etc.) have taken advantage of his creative genius.

Professor Marrink also has an impressive list of publications, with 209 Journal Articles, one book, and 7 additional chapters.

Marrink has an excellent international reputation as is evident from his high citation records (see section VII) and the obtained ERC Advanced grant (2015). Nationally, Marrink's recognition is evident from his exceptional success in obtaining

în obținerea unor finanțări de la Organizația Științifică Olandeză (NWO), inclusiv trei granturi TOP, la care se adaugă faptul că a fost membru al consorțiului "BaSYC", care a primit 18,8 milioane EUR pentru Programul NWO (2017).

A fost profesor invitat la Conferința Societății Olandeze de Modelare în Biofizică (2012), la Conferința anuală olandeză FOM (2010) și la SARA "Super D Day" din Amsterdam (2017).

Profesorul Marrink are un loc binemeritat la nivel național, datorită granturilor de cercetare acordate de către Centrul Computational Olandez SARA, beneficiind de o finanțare de aproximativ 4 milioane de euro în ultimii 10 ani.

A fost membru activ al Comitetului național pentru servicii în domeniul calculatoarelor și a participat la Programul comitetului de organizare a reuniunii olandeze de biofizică. De-a lungul timpului a devenit membru al diferitelor comisii olandeze de evaluare a granturilor NWO. Profesorul

funding from the Netherlands Scientific Organisation (NWO), including three TOP grants, and he was a member/co-applicant of the "BaSYC" consortium which was awarded €18.8M under NWO's Gravitation program (2017).

He has been keynote lecturer at the Netherlands Society on Biophysical Modelling Meeting (2012) and plenary lecturer at the FOM Annual Dutch Meeting (2010) and at the SARA "Super D Day" (Amsterdam, 2017). Marrink's national standing also is evident from the frequent grants from the Dutch computational center SARA (supercomputer time equaling about €4M over past 10 years).

He has also been active as a member of the National Computer Facilities committee and participated in the Program committee of the Dutch Biophysics meeting, and over the years has been a member of various Dutch NWO grant review committees. Marrink further plays a key role as

Marrink are un rol-cheie în calitate de fondator și director al Centrului Berendsen pentru modelare “multiscale”, unind grupurile de modelare din cadrul GBB și al Institutului Zernike.

Profesorul Marrink are o rețea extrem de puternică de colaboratori la nivel național și internațional. Principalii colaboratori naționali din afara Universității din Groningen includ pe Prof. A. Killian (Universitatea din Utrecht), cu preocupări în domeniul organizării membranei și pe Prof. R. Croce (VU Amsterdam) cu cercetări asupra complexelor proteice. Rețeaua sa internațională de colaborare este extinsă și cuprinde grupurile de modelare computațională ale Prof. M. Sansom (Universitatea Oxford), privind nanoporii ADN, ale Prof. D.P. Tieleman (Universitatea din Calgary), privind dezvoltarea metodelor cu granulație grosieră, ale Prof. I. Vattulainen (Universitatea din Tampere), privind interacțiunea lipide-proteine, ale Prof. S. Gnanakaran (Los Alamos Natl. Labs), privind oligozaharidele, ale Prof. M.

founder and Director of the Berendsen Center for Multiscale Modeling, uniting the computational modeling groups within the GBB and Zernike Institute.

Marrink has an exceptionally strong national and international network of collaborators. Key national collaborators outside the RUG include Prof. A. Killian (Utrecht University) on membrane lateral organization, and Prof. R. Croce (VU Amsterdam) on light harvesting protein complexes. His international collaborative network is extensive and includes the renowned computational modeling groups of Prof. M. Sansom (Oxford University) on DNA nanopores, Prof. D.P. Tieleman (University of Calgary) on coarse-grain method development, Prof. I. Vattulainen (Tampere University) on lipid-protein interaction, Prof. S. Gnanakaran (Los Alamos Natl. Labs) on oligosaccharides, Prof. M. Praprotnik (University of Ljubljana) on multiscale

Praprotnik din Ljubljana, privind dezvoltarea metodelor "multiscale", ale Prof. R. Pastor (NIH -SUA) privind dinamica membranelor, ale Prof. M.M. Kozlov (Universitatea din Tel Aviv), privind remodelarea membranelor, ale Prof. J. Katsaras (Laboratorul Național Oak Ridge), privind caracterizarea structurii membranelor, ale Prof. T.P. Sakmar (Universitatea Rockefeller), privind proteinele membranare și ale Prof. S.R. Wassall (Universitatea Purdue), privind lipidele polinesaturate.

Profesorul Marrink a fost premiat cu prestigiosul premiu Thomas Graham Lectureship de la Universitatea din Strathclyde, Anglia. De asemenea, a fost profesor invitat la Universitatea din Cagliari, Italia, în 2017 și la Institutul Kavli, Universitatea din California, Santa Barbara, în 2012. Tot ca urmare a unor invitații, s-a alăturat, recent, atât în comisia editorială consultativă a Jurnalului de Teorie și Calcul Chimic (ACS), cât și în cea a noului jurnal intitulat Teorie și Simulare Avansată (Wiley).

method development, Prof. R. Pastor (NIH) on membrane dynamics, Prof. M.M. Kozlov (Tel Aviv University) on membrane remodeling, Prof. J. Katsaras (Oak Ridge National Laboratory) on membrane structure characterization, Prof. T.P. Sakmar (Rockefeller University) on membrane proteins and signal transduction, and Prof. S.R. Wassall (Purdue University) on polyunsaturated lipids.

Professor Marrink has been awarded the prestigious Thomas Graham Lectureship by the University of Strathclyde, England. He was invited to take up a Visiting Professor position at the University of Cagliari, Italy, in 2017, and was a Visiting Professor at the Kavli Institute, University of California, Santa Barbara, in 2012. Upon invitation, he recently joined the editorial advisory boards of the Journal of Chemical Theory and Computation (ACS), and the new flagship journal Advanced Theory and Simulation (Wiley).

Domnul profesor Marrink este invitat frecvent ca prezentator-cheie la conferințe internaționale, depășind 100 de invitații, până acum. A susținut prelegeri cum ar fi: „Frontiere în simulările macromoleculare” (2008), seminarul Heraeus „Frontiere în simularea biomoleculară” (2012), la Simpozionul Sonderforschungsbereich (2014) și la Workshop-ul internațional privind membranele biologice (2018). A ținut multe prelegeri, fiind invitat de nenumărate ori la *Conferințele Gordon*, precum și la întâlniri organizate de către Societatea de Biofizică și ACS, SUA (cu peste 10.000 de participanți). Domnul Marrink este, de asemenea, un profesor care participă cu regularitate la școlile și workshop-urile de vară (de exemplu, CECAM, EMBO).

Pentru a încuraja și stimula colaborările naționale, Profesorul Marrink a inițiat ideea de a reuni toți oamenii de știință olandezi care lucrează în modelarea moleculară. Aceasta a devenit, o dată pe an, „Ziua MD olandeză”, desfășurată începând din anul 2011. Mai mult decât atât,

Marrink is frequently invited as a speaker at international conferences; with over 100 invitations extended so far. He has given keynote lectures at the Frontiers in Macromolecular Simulations (2008), the Heraeus Seminar "Frontiers in Biomolecular Simulation" (2012), the Sonderforschungsbereich Symposium (2014), at the international workshop on Biological Membranes (2018) and various invited lectures at Gordon Conferences and meetings of the Biophysical Society and ACS, USA (> 10,000 participants). Marrink is also a regular teacher at summer schools and workshops (e.g. CECAM, EMBO).

To encourage and stimulate national collaborations, Prof. Marrink initiated the idea of bringing together all Dutch scientists working on molecular modeling. This has become the annual “Dutch MD Day”, running since 2011. Furthermore, Prof. Marrink has been

Profesorul Marrink a fost principalul organizator al workshop-urilor pentru studenți, în cadrul unor „Școli de vară”, având ca tematică modelarea moleculară grosieră. Acestea s-au desfășurat, o dată la Lausanne (2011, sub auspiciile CECAM) și cel mai recent în Groningen (2015, 2017).

Profesorul Marrink a susținut, de-a lungul anilor, cooperarea între Universitatea din Groningen și Universitatea POLITEHNICA din București. Cu sprijinul său, în anul 2008 a fost semnat un acord Erasmus între cele două universități. Mai mulți studenți au beneficiat de acest program. Pentru trei studenți români au fost oferite poziții de doctorat în grupul de cercetare al prof. Marrink. Cooperarea a continuat, astfel, un program comun de master cu dublă diplomă între cele două universități (care a implicat Facultatea de Inginerie în Limbi Străine). De-a lungul anilor, cooperarea s-a concretizat prin articole publicate, proiecte și cercetări comune realizate de grupul de cercetare al profesorului Marrink, Departamentul

the main organizer of coarse-grain modeling workshops ('summer schools') for students, once in Lausanne (2011, under the auspices of CECAM), and most recently in Groningen (2015, 2017).

Professor Marrink has long supported the cooperation with University Politehnica from Bucharest. Through his help, in 2008, the first Erasmus between the two universities started. Several students were exchanged. For three Romanian students, PhD positions were offered in the research group of Prof. Marrink. The cooperation was increased such that a common double degree master program was made between the two universities (that involved Faculty of Engineering in Foreign Languages), articles, projects and common research were done during the years between the group of prof. Marrink and Department of Engineering in Foreign

de Inginerie în Limbi Străine și
Departamentul de Rezistență
Materialelor din Universitatea
POLITEHNICA din București.

Considerând contribuțiile deosebite
din domeniul dinamicii moleculare,
recunoașterea națională și
internațională, precum și întreaga
activitate profesională, Senatul
Universității POLITEHNICA din
București a hotărât acordarea celui mai
înalt titlu academic, DOCTOR HONORIS
CAUSA, domnului Profesor Siewert Jan
Marrink.

Languages and Department of
Strength of Materials, University
POLITEHNICA of Bucharest.

Considering the outstanding
contributions in the field of molecular
dynamics, national and international
recognition, as well as the entire
professional activity, the Senate of the
University POLITEHNICA of Bucharest
has decided to award the highest
academic degree,
DOCTOR HONORIS CAUSA, to
Professor Siewert Jan Marrink.