

РЕЦЕНЗИЯ

от проф. д-р. Румен Андонов Андонов

Университет Рен 1, гр. Рен, Франция, тел.: +33 2 99 84 71 56, ел. поща: randonov@irisa.fr

Относно: дисертационен труд за получаване на образователната и научна степен „доктор” от Методи Георгиев Трайков на тема: „**Математически модели и алгоритми за предсказване на пространствената структура на протеини**”

*Област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика.
Професионално направление 4.6. Информатика и компютърни науки.
Докторска програма “Информатика”*

Актуалност и цели на изследването. Предложеният за защита дисертационен труд е в областта на биоинформатиката и е посветен на темата предсказване на тримерната структура на протеини с известна първична структура. Тази тема е от огромно значение за разгадаване функцията на даден протеин, която е много по-тясно свързана с тримерната структура отколкото с първична ѝ структура. Като цяло тази задача не е решена и многобройните цитирания от последните десетина години безспорно говорят за динамизма и актуалността на тематиката.

Целите на дисертацията се състоят в разработване на математически модел за предсказване на тримерната структура на протеини който да се базира на техниките на целочислената оптимизация, както и в създаване на алгоритми за решаване на съответните оптимизационни задачи, които да използват съвременен софтуер като CPLEX и GUROBI. Целите и задачите на дисертацията са ясни и добре формулирани.

Анализ на научните и научно-приложните резултати в дисертацията

Структурата на дисертацията отговаря на общоприетите изисквания. Дисертационният труд се състои от въведение, четири глави, изводи, и цитирана литература. Общият му обем е 160 страници, от които 15 страници използвана литература. Включени са 80 фигури и 17 таблици. Цитираната литература обхваща 186 заглавия.

Приносите на дисертационния труд могат да се обобщят както следва:

- Показано е, че проблема за предсказване на тримерната структура на протеини може да се представи като оптимизационна задачата, която цели да максимизира броя на контактите между хидрофобните аминокиселини, който не са съседни в линейната последователност (модел на Lau & Dill, 1989). От своя страна тази задача може да се реши чрез намиране на път, който максимизира контактите между определени върхове в специален “решетъчен” граф. Държа да подчертая, че задачи от този тип са често срещани в областта на биоинформатиката

(например « Contact Map Optimization » за сравняване на протеини или « Scaffolding » за асемблиране на генома). Тъй като обикновено тези задачи са NP-пълни, то всеки успех в тяхното решаване се посреща с голям интерес от специалистите в областта.

- За по горната задача са предложени целочислени математически модели, на базата на които са разработени алгоритми (точен и евристичен) за намиране на оптимална структура върху двумерна и тримерна решетка;
- Предложените модели са програмирани на входния език за търговски софтуер (CPLEX , GUROBI) и са проведени голямо количество числени експерименти които позволяват да се сравнят алгоритмите по бързодействие и стойност на целева функция върху еталонни « benchmarks » задачи;
- Сравненията на тези резултати с резултати, генерирани от известни в литературата алгоритми за решаване на проблема показват, че разработените модели и алгоритми са качествени и надеждни. Нещо повече, те подобряват описаните в литературата резултати получени от евристични алгоритми, като Монте Карло алгоритми и Генетични алгоритми;
- Разработена е софтуер за визуализация на числените резултати;
- Изчислителните експерименти показват, че идеята за разделяне на проблема на под-проблеми работи добре за дълги протеинови последователности.

Редакционни забележки: Добро впечатление прави факта, че всеки раздел завършва с дискусии и заключения, които позволяват да се преосмисли и обобщи прочетения текст. Високо оценявам усилията положени за визуализацията на получените резултати.

Публикации: Получените резултати са публикувани в 2 статии в *Journal of Computational Biology*- списание с добър импакт фактор и с много добра репутация, както и в 8 сборници с резюмета от международни конференции. Всички публикации са на английски език.

Заключение: Поради това предлагам на членовете на научното жури да дадат своя положителен вот за присъждане на образователната и научната степен “доктор” на асистент Методи Георгиев Трайков.

17.07.2017 год.
гр. Рен, Франция

Румен Андонов