

## **РЕЦЕНЗИЯ**

за дисертация за присъждане на образователната и научна степен „доктор“ на тема „In silico предсказване на триизмерната структура на протеините чрез евристични алгоритми“

с автор ас. Иван Благоев Годорин, Югозападен университет Благоевград  
от проф. д-р Румен Андонов, Университет Рен 1, Рен , Франция,  
тел : +33 2 99 84 71 56, [randonov@irisa.fr](mailto:randonov@irisa.fr)

### **Обща информация**

Основание за написване на това становище е зап. № 1346/23.07.2019 на Ректора на ЮЗУ Благоевград, както и решението на Научното жури от неговото първо заседание.

Дисертационният труд е в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.6 Информатика и компютърни науки, докторска програма „Информатика“. Докторантът е на самостоятелна подготовка с научен ръководител доц. д-р Иван Тренчев.

### **Актуалност на изследването**

Настоящият труд е в областта на структурната биоинформатика, която е посветена на анализа на триизмерната структура на протеините. Счита се, че основната задача в тази област е разгадаването на функцията на протеините. От друга страна, добре известно е, че тази функция е тясно свързана не толкова с първичната им (линейна) структура, колкото с тяхната 3-мерна структура (форма, огъване, конформация, и др.). Това естествено води до задачата за предсказване на 3-мерната форма на протеините на базата на тяхната линейна структура. Въпреки огромните усилия на изследователите от тази изключително активна област на

биоинформатиката, гореспоменатата задача продължава да бъде днес нерешена и само една незначителна част от протеиновите последователности са с известна 3-мерна структура. Тъй като тази задача е в центъра на приложения труд, считам че **неговата актуалност е безспорна.**

### **Цели на дисертацията**

Двете основни цели на дисертацията (формулирани на стр. 6) са научно смислени, тясно свързани и насочени към i) **ускоряване скоростта на компютърното предсказване** на тримерната форма на протеините на базата на съвременни алгоритми; ii) **подобряване на качеството** на получените резултати чрез по-правдоподобни модели на представяне. Постигането на тези цели става чрез решаването на 5 задачи, които са ясно и точно формулирани.

### **Анализ на оформлението и на съдържанието на дисертацията**

Представеният труд съдържа 137 страници, разпределени по обичайния начин в Съдържание, Увод, 4 глави (2-5), Заключение, Приноси, Литература, Приложения. Списък на публикациите по дисертацията има само в автореферата. Спазени са изискуемите от чл.27(2) на ППЗРСАРБ структурни и съдържателни атрибути на дисертацията.

Като цяло, работата е добре организирана и илюстрирана. Считам обаче, че описанието на подхода и моделите трябва да е отделено от данните. Това не е спазено в този труд и четенето на основния текст е затруднено от даването на огромно количество цифри ( координати на аминокиселини или на

контакти). Съответните страници (става въпрос за десетки страници) трябва да минат в анекса.

Обзорната глава 3 ни убеждава за образователната компонента на автора. Констатирам обаче проблеми в цитирането – от една страна някои от източниците не са споменати в текста, от друга, някои основни модели споменати в обзора (например модела на Ken Dill стр. 9) не са дадени в списъка на цитираната литература. Нещо повече, следните три публикации

- [Algorithm for protein folding problem in 3D lattice HP model](#), M Traykov, N Yanev, R Mavrevski, B Yurukov- International Journal of Biology and Biomedicine, 2018
- [A new heuristic algorithm for protein folding in the HP model](#), M Traykov, S Angelov, N Yanev - Journal of Computational Biology, 2016
- [Protein folding prediction in a cubic lattice in hydrophobic-polar model](#), N Yanev, M Traykov, P Milanov, B Yurukov - Journal of Computational Biology, 2017

са очевидно в тематиката на дисертацията. Страниците 10-17 от обзора са посветени на подхода използван в тези статии. Никоя от тях обаче не е спомената в дисертацията (въпреки че те датират от последните три години). Странното за мене в този пропуск е факта че авторите на тези статии са от същия научен екип както и Иван Годорин. Тяхното цитиране и обясняване на приликите/разликите в подходите би допринесло за повдигане на имиджа на екипа.

Основните приноси са описани в глава 4. Авторът описва 4 модела с различни целеви функции и допустими множества от решетъчен и извънрешетъчен тип. За всеки от моделите е разработен съответен оптимизационен алгоритъм който е валидиран числено. Според думите на автора последният алгоритъм подобрява предишните по качество на получените резултати и скорост на изчисленията. Въпреки че са дадени

елементи на сравнения, не можах да намеря една обобщаваща таблица която да подкрепи наблюденията на автора.

### **Идентифициране и оценяване на научните и научно-приложните приноси в дисертационния труд**

Получените резултати са без съмнение оригинални и научно-приложни. Те демонстрират очевидния прогрес и разширяване знанията и изчислителните възможности в структурната биоинформатика. Авторът показва задълбочени познания на тримерната структура на протеините, което му позволява да предложи адекватни модели за нейното предсказване. Високо оценявам усилията за създаване на съответен софтуер, който позволява да се получат интересни изчислителни резултати.

### **Публикации по дисертацията**

Докторантът е изключително активен относно представяне на резултатите пред научното общество; той анонсира 12 публикации, 5 от които самостоятелни. Този факт поставя **самостоятелността на приносите** извън всякакво съмнение.

### **6. Автореферат**

Оценявам автореферата положително по структура и съдържание.

### **7. Критични бележки и препоръки (освен вече направените по-горе)**

Не успях да намеря в приложения труд никаква дискусия относно избора на протеините върху които се провеждат изчисленията (benchmark). Не

виждам никакви сравнения с други аналогични софтуера – а ако няма такива (което би било доста странно за това активни общество) то би било полезно да се дискусира/интерпретира един такъв факт.

### **Заклучение**

Считам че приложеният труд отговаря на нормативните изисквания за дисертация за получаване на образователната и научна степен "доктор".

Критичните ми бележки не омаловажават представените резултати и оценката ми като цяло е **положителна**. Поради това, препоръчам на почитаемото научно жури да присъди на ас. Иван Благоев Тодорин образователната и научна степен „доктор“ в професионално направление 4.6 Информатика и компютърни науки, докторска програма „Информатика“.

Рен, 05.09.2019

проф. д-р Р. Андонов