

СТАНОВИЩЕ

върху дисертационен труд на тема

In silico предсказване на триизмерната структура на протеините
чрез евристични алгоритми

на

Иван Благоев Тодорин

за присъждане на образователна и научна степен „доктор”
в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика,
професионално направление 4.6. Информатика и компютърни науки,
докторска програма „Информатика”

от

проф. д-р Нели Стоянова Димитрова
Институт по математика и информатика при БАН

член на научно жури

съгласно Заповед № 1346/23.07.2019 г. на Ректора на Югозападен Университет
„Неофит Рилски” – Благоевград проф. д-р Борислав Юруков

Общо описание на дисертационния труд

Представеният дисертационен труд е с общ обем от 137 страници, от които 130 страници са основен текст и 7 страници са отделени за приложения. Дисертацията се състои от увод, четири глави (точки), заключение, приноси, списък с използвани литературни източници и приложения. Списъкът с литературни източници съдържа 50 заглавия.

Дисертационният труд е посветен на съвременна и актуална тематика в областта на структурната биоинформатика – една от ключовите области в изчислителната (компютърната) биология.

Уводът (точка 1) на дисертацията предлага мотивация за важността на разработваната тематика и умело насочва към специфичните *цели и задачи* (формулирани в *точка 2*) на по-нататъшните изследвания. *Точка 3* предлага подробен обзор на известните от литературата модели, алгоритми, подходи и техники, свързани с предсказване на дву- и три-измерната структура на протеините.

Основните авторски резултати в дисертацията се съдържат в точки 4, 5 и 6, които ще бъдат коментирани по-долу.

Анализ на научните и научноприложните постижения в дисертационния труд

В *точка 4* са представени 4 модела за предсказване на триизмерната структура на белтъците

- с целочислени координати, с променливо ограничение за разпростиране в пространството;
- с дробни координати, с променливо разпростиране и трикомпонентна оценъчна функция;
- модификация на предходния модел с разполагане на аминокиселините чрез два псевдослучайни ъгъла;

- с начално намиране на псевдослучайни структури и последващо целенасочено нагъване.

За всеки един от четирите модела са дадени

- подробно описан алгоритъм,
- указания за работа с разработения авторски софтуер в среда на C++

и е направен анализ на получените данни в резултат от проведените компютърни експерименти.

Точка 5 предлага сравнителен анализ на областта на приложимост на модела и съответния алгоритъм, които са показали най-добри резултати при изследването на един и същ протеин в сравнение с изследването на други протеини.

Точка 6 (Заключение) дава цялостна оценка за резултатите от проведените компютърни експерименти с разработените авторски алгоритми.

Познаване на състоянието на проблема

Дисертационният труд е от интердисциплинарна област, свързана с прилагане на съвременни подходи за изучаване на биологични обекти. Цитираните в дисертацията литературни източници, на които е базиран подробният обзор в точка 3 показват, че дисертантът е добре запознат с последните постижения в изследваната област в световен мащаб. От представените в дисертацията приноси се вижда, че той умело използва тези знания за количествено и качествено изследване на триизмерни белтъчни структури като ги допълва и разширява с нови съществени резултати. Заслужава да бъдат отбелязани и отличните умения на автора за програмиране в среда на C++, както и уменията му да интерпретира и оценява получените експериментални данни в термините на изследваните биологични обекти.

Оценка на приносите

Формулираните от дисертанта приноси в *точка 7* на дисертацията и в автореферата правилно и точно отразяват постигнатите резултати.

Преценка на публикациите

Дисертантът е представил в автореферата списък с 12 авторски заглавия по темата на дисертацията, сред които:

- статия № 10 (в сборник с трудове на международна конференция AMCSE 2017, излязла от печат през 2018 г.) е индексирана в Web of Science
- статия № 12 (в сп. WSEAS TRANSACTIONS on BIOLOGY and BIOMEDICINE, 2018) е индексирана в SCOPUS с импакт ранг (SJR).

Оценка на автореферата

Авторефератът на дисертацията е с обем от 33 страници. В него е обоснована актуалността на разглежданата тема, формулирани са целите и са поставени задачите за изследване. Представени са основните и най-важни резултати, получени в дисертацията, както и приносите и публикацииите на автора, участието му с доклади в международни и национални конференции у нас и в чужбина, имащи отношение към разработваната тематика. Считаю, че авторефератът отразява пълно и точно резултатите в дисертацията, както и мястото и връзката им с резултатите на други автори.

Критични бележки

Представените в автореферата 12 на брой авторски публикации не са описани съгласно общоприетите изисквания – липсват том / брой на съответното списание или сборник с доклади на конференции, страници, точна година на публикуване. Две от работите (с номера 4 и 5 от списъка) са резюмета (абстракти) на доклади (до 1 страница) на международни конференции. Работите с номера от 1 до 3, от 6 до 9 и 11 не са публично достъпни и не става ясно дали представляват резюмета на доклади, дали са само заглавия на представени доклади или има и публикация в пълен текст.

Заклучение

Представеният дисертационен труд отговаря на изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България, на Правилника за неговото прилагане и на Вътрешните правила за развитие на академичния състав на Югозападен Университет „Неофит Рилски” – Благоевград. В съответствие с всичко казано по-горе *давам положителна оценка* на дисертационния труд и препоръчвам на научното жури

да присъди на Иван Благоев Тодорин

образователната и научна степен "доктор"

в област на висше образование 4 Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.6 Информатика и компютърни науки, докторска програма „Информатика”.

26 август 2019 г.
София

.....
/подпис/