

## СТАНОВИЩЕ

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 Тодорин, Югозападен университет Благоевград от проф. д-р Аврам Моис Ескенази, ИМИ БАН и Икономически университет Варна

### 0.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.

### 1. Актуалност на изследването

Без да съм специалист по биоинформатика, но като разчитам от една страна на общите ми знания за развитието на тази област, от друга - на включването на тематиката на дисертацията в приоритети на различни мащабни програми и от трета – на аргументите, предоставени ни от автора в първите три глави на дисертацията, стигам до заключението, че **актуалността и важността на дисертационния труд са безспорни.**

### 2. Цели на дисертацията

Двете **цели** на дисертацията (с.6) са **разумни, взаимосвързани** и дават възможност за **постигане на оригинални научни резултати** (което в крайна сметка се оказва факт). Независимо от това че в предходното на целите изречение и след това в задачите се казва, че става дума за **пространствената структура на протеините**, формулировката на целите (заедно с тази на приносите) е най-важната част на дисертацията и в нея не трябваше да стои само „структури“, което е недостатъчно прецизирано.

Постигането на целите е станало чрез решаването на **5 задачи, ясно и точно формулирани.**

### 3. 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. Не виждам изискваната декларация за оригиналност, но предполагам, че е представена отделно. Страниците са по обем доста под стандартните 1800 знака и оформени с необичаен за дисертация шрифт (с разредка и с размер 13). Това поставя обемът на дисертацията (около 70 стандартни страници) под обичайната долна граница за дисертации, свързани с информатиката и нейните приложения. Работата е добре подредена и илюстрирана. Мисля обаче, че някои данни щяха да бъдат по-прегледни, ако бяха поместени в таблици (например списъците на координатите на аминокиселините).

Езикът е професионален. Сблъсках се обаче и с (макар и много малко на брой) твърде несръчни преводи от английски. Един пример е изречението на с.16 „Много малко се знае за self-avoiding walk стриктно погледнато от математическа перспектива, въпреки че физиците са направили много предпоставки, за които се вярва, че са точни и са силно подкрепени с бройни симулации“. Авторът трябваше също да съобрази, че читателите му няма да са само тесни специалисти по биоинформатика и да обясни например „in silico“ (в проекта от 2014 по тази тематика към ФНИ, ръководен от доц. Тренчев, още в самото

начало е казано „Чрез провеждането на **in silico (компютъризирани)** експерименти“...), що е то хидрофобни и полярни аминокиселини, пък дори и ЯМР.

Ползваните източници са добре подбрани, броят им (общо 50, като не разбирам защо 4 от тях са отделени под заглавие „Използвана литература“) е на долната граница за такъв труд, езиковото им разпределение – според очакванията (предимно на английски, но без да са забравени и няколко на български). Има обаче някои дефекти в цитирането – няма позоваване в текста на няколко източника (например [8], [22], [24], [31] и др.). От друга страна двата основни източника на обзорната част -“Computational Methods for Protein Structure Prediction & Modeling V1 - Xu Xu and Liang” (с.25) и „Optimization Approaches to Protein Folding” - Hyun-suk Yoon (с.31) не фигурират сред източниците.

В крайна сметка обаче **изискуемите от чл.27(2) на ППЗРСАРБ структурни и съдържателни атрибути на дисертацията са налице.**

**Уводът (1.)** на дисертацията е кратък, но логично води до ясно формулираните **Цели (2.)**, което вече коментирах по-горе.

**Глава 3** съгласно традицията има обзорно-аналитичен характер и ни убеждава, че **образователната компонента** на претендираната степен е защитена много добре. Заедно с това смислеността на поставената **цел е доказана аргументирано.**

**Глава 4** е посветена на задачите, които носят най-сериозните приноси на работата – **приноси 1, 2 и 3, както и частично 4**, които приемам. В съответствие със задачи 2 и 3 са предложени 4 модела (третият – модификация на втория) и респективно основани на тях оригинални алгоритми и програмни реализации. Показани са подробни данни от проведените експерименти.

**Глава 5** се концентрира **частично върху принос 4**, както и върху останалите 2 - **приноси 5 и 6**. Те са развити убедително. Безспорно е показано, че разработените модели, алгоритми и софтуер генерират 3D структури, близки до реалната. Показана е и ефективността на предложените алгоритми и софтуер. Това е основание да **призная и тези 3 приноса.**

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

В предходната точка идентифицирах приносите, оцених ги като значими и ги приех. Така че мога обосновано да заявя, че **трудът съдържа достатъчно резултати**, които са **оригинални приноси** (чл.6 (3) от ЗРСАРБ), една част от които са научни, а друга - научно-приложни.

#### **5. Публикации по дисертацията**

Тези приноси докторантът е представил пред научната общественост чрез необичайно голям брой публикации за такава дисертация - 12. 5 от тях са самостоятелни, 1 – с един съавтор, останалите с от 3 до 5. Всички са на английски, една е в авторитетно международно списание, останалите – в сборници от предимно международни научни конференции. Наличието на 5 самостоятелни публикации поставя **самостоятелността на приносите извън всякакво съмнение**. Доколкото мога да преценя, съществените резултати на дисертацията са намерили адекватно отражение в тях. Разбира се, дисертантът ще ще да ни улесни, ако беше направил обичайната табличка за съответствие принос-публикация.

#### **6. Автореферат**

**По структура и съдържание оценявам автореферата положително**, като обем считам, че 32 страници са точно „по протокола“. И тук обаче разредката на шрифта, а вече и странните отстъпи по 1 см от двете страни, отгоре и отдолу ме смущават.

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

За мене е напълно ясно, че разнообразните резултати няма как да са получени без коректно работещ софтуер. Но **единственият намек за този софтуер** гласи: „Използва се генераторът на случайни числа на средата за програмиране на C++,“ (с.38, 61 и 93). Отдавна минаха времената, когато в дисертациите се включваха първичните програми. Но малко информация за езика, операционната среда, някои характеристики на програмите и на функционирането им, евентуално особености на реализацията (ако ги има), са според мене задължителни. Затова очаквам на защитата да чуя нещо по въпроса от докторанта в рамките на 1 до 2 минути. Да не забравяме официалната позиция на най-авторитетната професионална европейска организация – Informatics Europe. В техния доклад от март 2018 за **оценяването на научноизследователските резултати по информатика** се казва: „При оценяването, **артефакти като софтуер могат да са така важни, както и публикациите**. Оценяването им трябва да се насърчава и да се приеме като стандартна компонента на оценката.“

## 7. Заключение

Дисертационният труд е оформен добре. Той показва от една страна много добро познаване от докторанта на предметната област, а от друга - съдържа оригинални научни и научно-приложни резултати. Те се дължат както на споменатите познания, доказани от целенасочен обзор, анализ и систематизация на релевантната научна и технологична информация, специално и на присъщо необходимата му извън областта на информатиката. Критичните ми бележки не влияят на крайната оценка. Следователно, оценяваният труд има съдържание и форма, съответстващи на нормативните изисквания за дисертация за получаване на образователната и научна степен "доктор". Смятам, че (при отчитане §40 на Преходните и заключителни разпоредби към Закона за изменение и допълнение на ЗРАСРБ) са удовлетворени изискванията на ЗРАСРБ, на Правилника на МС за приложение на ЗРАСРБ и на Вътрешните правила за развитие на академичния състав в ЮЗУ „Неофит Рилски“. Това ми дава основание да му дам **положителна** оценка и да 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“.

София, 15.08.2019

С уважение:

проф. д-р Аврам Ескенази