

СТАНОВИЩЕ

от проф. дхн Васил Симеонов

за дисертационен труд на тема “Хеометричен подход за класифициране на хранителни протеини в категории “алергени” и “неалергени”
на докторант Людмила Христова Нанева

Представеният дисертационен труд е оригинално и интересно изследване за класификация на хранителни протеини в класове “алергени” и “неалергени” при използване на хеометрични подходи. Целта на изследването е да покаже, че при подходящ избор на дескриптори на свойствата на големи групи протеини, предварително изведени в бази от данни като алергени или неалергени, е възможно да се осъществи разделяне и по теоретичен път, основан на хеометрични методи.

Целта на работата е изключително актуална, предвид широкото разпространение в световен мащаб на различни видове хранителни алергии. Възможността за извеждане на “мотив за алергенност”, базиран на специфични характеристики на хранителните белтъци (физикохимични и квантовохимични показатели, хидрофобност, повърхностни свойства и т.н.) е важен етап при предвиждане на възможността за алергенно действие на даден хранителен белтък, от една страна, а, от друга, за изясняване на причините и механизмите за алергенно въздействие.

За осъществяване на целите и задачите на дисертационния труд докторант Людмила Нанева е избрала един от най-ефективните класификационни подходи в хеометрията – регресия по частично най-малките квадрати в комбинация с дискриминантен анализ. Подборът на начален голям брой възможни дескриптори на протеините, осигуряващи разграничаване на алергени от неалергени е съпроводен с подход за редуциране на началния брой променливи (дескриптори) до по-малък оптимален брой характеристики чрез прилагане на анализ на главни компоненти. Реализиран е модел, валидиран по съответните тестове за валидиране, който вече позволява предсказване на позицията на неизвестен хранителен протеин в клас “алергени” или в клас “неалергени”. При това броят на ефективните дескриптори за различните групи изследвани протеини е между 3 и 5. Заслужава да се спомене, че става дума не за отделни характеристики на протеините, а за техни специфични комбинации, използвани от докторанта.

Според мен важен раздел в дисертационния труд, който заслужава по-нататъшно разработване, е опитът за класифициране на протеините с помощта на нов и оригинален вид дескриптори, свързани с хидрофобността на протеиновите повърхности (скали за хидрофобност). При използване на определен брой скали за хидрофобност и редуциране на броя на променливите (аминокиселинни остатъци) чрез анализ на главни компоненти, става възможно разделяне на алергени от неалергени чрез кластерен анализ (йерархичен или нейерархичен кластерен анализ), определян често като неклассификационен подход. Добри резултати са постигнати засега на малка обучителна серия от хранителни протеини, но има всички предпоставки за създаване на експресен и лесен за приложение хеометричен подход за класификация, както и за дефиниране на ефективен мотив за алергенност.

Дисертационният труд е добре оформен и резултатите от него са публикувани в две статии в международни научни списания с импакт фактор. Последният раздел е оформен в трета публикация, изпратена за печат, но това споменавам само като факт, който ме ангажира като научен ръководител на Людмила Нанева. По трудовете има забелязани 5 цитата от чуждестранни автори. От съвместната ни работа с докторант Людмила Нанева мога да споделя, че тя може да работи самостоятелно, да решава научни проблеми и да интерпретира коректно научни резултати. Представила е изследванията си на голям брой научни форуми у нас и в чужбина (общо 8), с удоволствие мога да споделя, че неин постер, представен на конференция в Барселона, спечели първа награда. Участва и в научни колективи за реализиране на национални и международни научни проекти.

Основният принос на дисертационния труд е успешно разработване, прилагане, валидиране и използване на хеометрични подходи за класифициране на хранителни протеини в класове “алергени” и “неалергени”.

Оценявам високо извършеното от докторант Людмила Христова Нанева и ще гласувам “за” присъждане на образователната и научна степен “доктор” в научна област природни науки, математика и информатика, професионално направление химически науки, по научна специалност аналитична химия.

София, 05.01.2019 г.

Проф. дхн Васил Симеонов