

OPONENTSKÝ POSUDOK NA DIZERTAČNÚ PRÁCU ING. MILOŠE MUSILA COMPUTATIONAL DESIGN OF STABLE PROTEINS

V predloženej dizertačnej práci sa autor zaoberá problematikou výpočtového dizajnu stabilných proteínov, t.j. problémom hľadania mutácií v existujúcich proteínových sekvenciách, ktoré by pomohli zvýšiť stabilitu týchto proteínov. Optimalizácia proteínových sekvencií je jednou z kľúčových oblastí biotechnológií, téma práce je preto vysoko aktuálna. Práca sa zaoberá najmä výpočtovými aspektami danej problematiky a jej zameranie tak zodpovedá odboru informatika.

Práca je koncipovaná ako séria článkov, ktorých je uchádzač spoluautorom, doplnená o rozsiahle prehľadové kapitoly, ktoré čitateľovi poskytnú potrebné základy a vsadia príspevky do kontextu súčasných vedeckých poznatkov o danej problematike. Je písaná veľmi dobrou angličtinou.

Prehľadové kapitoly sú písané veľmi zrozumiteľne a podávajú ucelený prehľad o problematike a jej aktuálnom stave. Čo mi v týchto kapitolách chýba je hlbší technický popis vybraných metód, kde by autor preukázal, že detailne rozumie použitým výpočtovým metódam a dokáže toto porozumenie sprostredkovať čitateľom práce.

Vlastné príspevky sú zhrnuté výlučne v štyroch priložených multiautorských publikáciách, v dvoch z nich je Ing. Musil prvým autorom s príspevkom 60%, v ostatných dvoch sú jeho príspevky nižšie a nie je prvým autorom. Vzhľadom ku štruktúre práce je veľmi ťažké odlíšiť, čo sú presne príspevky uchádzača prezentované v dizertačnej práci. Napríklad prvá publikácia (FireProt) je založená na predchádzajúcom softvérovom nástroji s rovnakým menom, pričom nová publikácia sa líši od predchádzajúcej tým, že sa jedná o web server; v predchádzajúcej publikácii však uchádzač spoluautorom nie je. Vo všeobecnosti predložené publikácie spájajú už existujúce softvérové nástroje do pipeline a sú prezentované používateľom formou webového rozhrania. Z práce sa čitateľ nedozvie systematické porovnanie rôznych možných alternatív, spôsoby akým by bolo možné systematicky vyhodnocovať úspešnosť implementovaných metód a ani to, či výsledné nástroje sú priamočiarou automatizáciou postupov, ktoré boli vo výskume už uplatňované, alebo sú inovatívnou kombináciou. Vzhľadom k tomuto je prínos práce možné vyhodnotiť len na základe slušnej citovanosti dvoch zo štyroch uvedených článkov. Napriek týmto výhradám však na základe pomerne rozsiahlej publikačnej činnosti možno konštatovať, že uchádzač dokáže pôsobiť ako plnohodnotný člen väčších kolektívov a dokáže do týchto kolektívov priniesť vlastné myšlienky a vedeckú erudíciu.

Na uchádzača mám nasledovné otázky:

- Môžete v rámci obhajoby v stručnosti zhrnúť váš osobný prínos v rámci prezentovaných publikácií? Môžete charakterizovať a vyzdvihnúť metodologické inovácie, ktoré ste do príslušných publikácií vy osobne priniesli a zhrnúť, v čom sú po technickej stránke odlišné od iných prác v oblasti?
- V práci na viacerých miestach spomínate, že ancestrálne proteíny boli stabilnejšie a tým pádom ancestrálna rekonštrukcia vedie ku zvýšeniu stability proteínov. Prečo by ancestrálne proteíny mali byť stabilnejšie? Nemala by sa v rámci evolúcie pôsobením

pozitívnej selekcie zvyšovať stabilita proteínov?

Aj keď v predloženej práci vidím veľké rezervy v prezentácii vlastného technického prínosu do uvedenej problematiky, uchádzač založil svoju prácu na štyroch hodnotných publikáciách a aj jeho ďalšia publikačná činnosť poukazuje na to, že v rámci väčších riešiteľských kolektívov dokáže autor produkovať hodnotné vedecké výsledky. Preto podľa môjho názoru predložená práca dostatočným spôsobom preukazuje splnenie všeobecných požiadaviek na udelenie akademického titulu.

V Bratislave, 02.11.2021

doc. Mgr. Tomáš Vinař, PhD.