

IZVJEŠĆE O OCJENI DOKTORSKOG RADA

OPĆI PODACI DOKTORANDA/DOKTORANDICE:

Ime i prezime doktoranda/doktorandice, titula:	JADRANKO BATISTA, mag. educ. math. et phys.	
Nositelj studija:	Prirodoslovno-matematički fakultet u Splitu	
Naziv studija:	Poslijediplomski sveučilišni studij Biofizika	
Matični broj doktoranda/doktorandice:	5-2008	
Naslov doktorskog rada:	Jezik pisanja rada	hrvatski
	Hrvatski:	Izbor reprezentativnog skupa membranskih proteina poznate strukture: razvoj poboljšanih algoritama uporabom koncepta nasumičnog modela
	Engleski:	Selection of representative set of membrane proteins of known structure: development of improved algorithms using the random model concept
Područje/polje/grana (ako se doktorski studij izvodi u grani):	Područje prirodnih znanosti	

MENTOR(I)

	Titula, ime i prezime:	Ustanova, država:
Prvi mentor:	dr. sc. Bono Lučić	Institut Ruđer Bošković, Hrvatska
Drugi mentor:		
Sjednica Fakultetskog vijeća na kojoj je prihvaćena tema doktorskog rada:	122. sjednica, 7. lipnja 2017.	
Izabrano Povjerenstvo za ocjenu doktorskog rada	Titula, ime i prezime:	Ustanova, država:
	1. prof. dr. sc. Mile Dželalija - predsjednik	Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Splitu, Hrvatska
	2. prof. dr. sc. Paško Županović - član	Prirodoslovno-matematički fakultet, Sveučilište u Splitu, Hrvatska
	3. prof. dr. sc. Sanja Tomić – član	Institut Ruđer Bošković, Hrvatska
	4. dr. sc. Igor Weber – zamjenski član	Institut Ruđer Bošković, Hrvatska
Sjednica Fakultetskog vijeća u okviru koje je imenovano Povjerenstvo za ocjenu doktorskog rada:	122. sjednica, 7. lipnja 2017.	

OCJENA DOKTORSKOG RADA

(ocjena mora sadržavati izvorni znanstveni doprinos i novo otkriće; prikaz sadržaja rada, mišljenje i ocjenu rada s osvrtom na primijenjene metode i znanstveni doprinos)

Doktorska disertacija pristupnika Jadranka Batiste sadrži pet poglavlja: 1. Uvod; 2. Materijali i metode; 3. Rezultati i rasprava; 4. Zaključak i 5. Literatura. Na kraju su navedeni i životopis s popisom radova Jadranka Batiste, sažetak na hrvatskom i engleskom jeziku, te četiri tiskana dodatka i elektronički dodatak. U Disertaciji je na prvim stranicama nalazi sadržaj, popis slika, tablica i kratica, te temeljna dokumentacijska kartica na hrvatskom i engleskom jeziku. Disertacija je pisana na hrvatskom jeziku i sadrži 176 stranica, 49 slika, 33 tablice i 72 reference.

U uvodnom poglavlju obrazlažu se osnovne metoda za predviđanje strukture membranskih proteina i problem zalihosti među primarnim strukturama (aminokiselinskim slijedovima) proteina. Nadalje, ističe se i potkrepljuje problem razmjerno malog broja eksperimentalno određenih (3D, prostornih) struktura membranskih proteina naspram njihove procijenjene zastupljenosti među svim proteinima, kao i u odnosu na broj poznatih struktura topljivih proteina. Opisana je važnost smanjenja zalihosti među proteinima u skupu koji se koristi za razvoj metoda za modeliranje strukture proteina. Objasnjeno je kako je problem izbora reprezentativnoga skupa proteina niske međusobne sličnosti, s obzirom na njegovu važnost, nedovoljno istraživano u literaturi.

Analizom rezultata iz literature uočeno je da postojeći algoritmi za izbora reprezentativnog skupa ne razmatraju složenost (količinu korisne informacije) same strukture proteina. Na temelju navedene tvrdnje, nakon preliminarnih rezultata, definirani su istraživački ciljevi i načini njihovog ostvarenja, te očekivani rezultati.

U drugom poglavlju, u četiri dijela, navedene su i opisane ranije poznate metode (algoritmi) i baze podataka korišteni u Disertaciji. U prvom dijelu opisane su baze podataka koje sadrže podatke o primarnim i prostornim strukturama proteina. U drugom i trećem dijelu opisan je program za izračun sličnosti među proteinima te algoritmi za izbor reprezentativnih skupova iz literature, te osam skupova proteinskih lanaca iz literature odnosno njihovih pod-skupova korištenih u Disertaciji za međusobnu usporedbu algoritama razvijenih u Disertaciji kao i s drugim metodama iz literature.

Treće poglavlje sadrži rezultate i raspravu, i sastoji se od četiri dijela. U prvom dijelu uvedeni su originalni koncepti nasumičnih modela sa svrhom kvantificiranja složenosti sekundarne strukture membranskih proteina. Najprije je definiran nasumični model s dva stanja strukture i izveden je izraz za izračun najvjerojatnije nasumične točnosti uravnoteženog modela kao mjera složenosti strukture proteina. Taj dio rezultata objavljen je s pristupnikom kao prvim autorom.

Potom je uveden originalni koncept binomnog nasumičnog modela i izveden izraz za izračun broja realizacija modelne sekundarne strukture proteina, u kojemu se promatra sekundarna struktura pojedine aminokiseline u proteinskom lancu kao najmanji element strukture (pri čemu svaka aminokiselina može poprimiti jedno od dva stanja strukture). Uočena je sličnost s konceptom entropije iz statističke fizike, te je logaritam broja realizacija modelne strukture proteina analogan entropiji modelne strukture proteina.

Kao treći originalni doprinos izdvaja se segmentni nasumični model za koji je izveden izraz za izračun broja realizacija modelne sekundarne strukture proteina, i također povezan s entropijom. Izveden je originalni izraz za broj realizacija u slučaju kada između lanaca nema razmaka, kao i u slučaju kada između segmenata postoji minimalni razmak od jedne ili više aminokiselina.

Istražena su svojstva ovih novo-uvđenih koncepata, poput nalaženja najvećeg (maksimalnog) broja realizacija za razne kombinacije duljina lanca i duljina i broja transmembranskih segmenata. Ti su rezultati povezani sa strukturom membranskih proteina u kojima segment u nasumičnom modelu odgovara transmembranskom segmentu integralnog membranskog proteina. U analizama rezultata uočena je značajna korelacija broja realizacija modelne strukture proteina s brojem transmembranskih segmenata u membranskim proteinima.

Dobiveni rezultati i stečena saznanja iskorištena su za kvantificiranje složenosti strukture proteina, što je rezultiralo nastankom tri originalna algoritma za izbor reprezentativnog skupa integralnih membranskih proteina niske međusobne sličnosti i identičnosti. Ti su

algoritmi originalni znanstveni doprinos pristupnika. U elektroničkom dodatku dan je programski kod Algoritma 3 i primjeri ulaznih podataka potrebnih za pokretanje algoritma u slučaju kad se analiziraju sličnost i identičnost među proteinskim lancima.

U drugom dijelu ovog poglavlja prikazani su rezultati međusobne usporedbe tri algoritama razvijena u disertaciji, te usporedba s rezultatima algoritmima drugih autora. Usporedba je provedena na više skupova proteinskih lanaca, a pritom se najboljim pokazao Algoritam 3 koji izabire u konačne reprezentativne skupove lance složenije strukture i s više transmembranskih segmenata.

U trećem dijelu rezultata proveden je izbor reprezentativnih skupova integralnih membranskih proteina algoritmima razvijenim u Disertaciji, polazeći od najnovijih baza proteina i proteinskih struktura. Dobiveni skupovi osjetno su veći od postojećih objavljenih u literaturi, a izabrani proteinski lanci složenije su strukture. Općenito, dobiveni skupovi kvalitetniji su i bolji za potrebe razvoja novih metoda za modeliranje i predviđanje strukture membranskih proteina. U elektroničkom dodatku dani su izabrani reprezentativni skupovi, kao i odabrani skupovi drugih autora koji su korišteni u Disertaciji radi provjere kvalitete i usporedbi različitih algoritama.

U četvrtom dijelu trećeg poglavlja provedena je zbirna usporedba rezultata dobivenih različitim algoritmima na više skupova proteinskih lanaca. Također je razmatrana složenost proteinskih struktura, te broj transmembranskih segmenata u izabranim reprezentativnim skupovima integralnih membranskih proteina alfa vrste.

Rasprava je slojevita jer se u rezultatima najprije uvode novi koncepti i objašnjavaju i analiziraju njihova svojstva, opisuje razvoj novih algoritama, provodi usporedba s drugim metodama na više skupova podataka, te izbor novih reprezentativnih skupova. Rasprava je povezana s odjeljkom rezultata i u njoj su obrazloženi rezultati i uspoređeni teorijski koncepti kako međusobno, tako i s rezultatima drugih autora iz literature. Također su naznačeni mogući budući koraci istraživanja na temelju dobivenih rezultata.

U četvrtom je poglavlju zaključak koji jasno i kritički iznosi najvažnije rezultate istraživanja, te naglašava njihovu znanstvenu važnost i mogućnosti primjene.

Literatura je izabrana i pozivana na odgovarajući način, a opsegom i preciznošću daje detaljan pregled tematike doktorskog rada i najvažnijih saznanja i rezultata drugih autora u području. Literatura sadrži i starije radove koji opisuju temelje i osnove modeliranja strukture proteina, s posebnom usredotočenošću na integralne membranske proteine alfa vrste, što omogućava korištenje Disertacije od strane različitih korisnika.



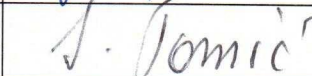
Sažetci doktorskog rada priloženi su na hrvatskom i na engleskom jeziku, jasni su i precizni, te opisuju najvažnije rezultate i zaključke rada.

Originalnost rezultata ogleda se u novim uvedenim konceptima nasumičnih modela, njihovoj interpretaciji preko koncepta broja realizacije modelne strukture u analogiji s konceptom entropije iz statističke fizike. Nadalje, važni originalni doprinos predstavlja novi algoritam za izbor reprezentativnih skupova integralnih membranskih proteina koji u konačni skup izabire lance složenije strukture (s više korisne strukturne informacije). Naposljetku, razvijenim algoritmom izabrani su novi i veći reprezentativni skupovi integralnih membranskih proteina niske međusobne sličnosti.

Jedan dio originalnog znanstvenog doprinosa, temeljen na rezultatima iz doktorskog rada, sadržan je u znanstvenom radu objavljenom u časopisu koji citira Current Contents baza, s pristupnikom kao prvim autorom.

Mišljenja smo da doktorska disertacija Jadranka Batiste predstavlja originalni znanstveni doprinos i zadovoljava sve potrebne uvjete za njeno prihvaćanje. Pristupnik je sustavno obrazložio i potkrijepio poznate znanstvene činjenice pregledom literature, te jasno naznačio svoj originalni znanstveni doprinos ostvaren u Disertaciji. Rezultati istraživanja (tj. razvoj novih teorijskih koncepata i algoritama, izbor reprezentativnih skupova membranskih proteina, kao i usporedbe s drugim metodama) jasno su opisani, prikazujući detalje potrebnim za razumijevanje, ponavljanje i njihovu primjenu. Opis rezultata i rasprava prate postavljene ciljeve, korištene metode i skupove podataka. Rezultati su popraćeni dodatcima i elektroničkim dodatkom koji sadrži: skupove korištene za usporedbu s drugim metodama, skupove podataka izdvojene radom na disertaciji, i podatke s programskim kodom Algoritma 3 razvijenim u Disertaciji, s kojim su dobiveni najbolji rezultati. Na kraju su izneseni jasni zaključci koji sažimaju važnost, kvalitetu i originalnost dobivenih rezultata.

Slijedom navedenog predlažemo da se doktorski rad Jadranka Batiste prihvati, i da se pristupniku dopusti obrana doktorskog rada.

	Titula, ime i prezime, ustanova, država:	Potpis:
Izabrano povjerenstvo za ocjenu doktorskog rada	1. (predsjednik Povjerenstva) prof. dr. sc. Mile Dželalija - predsjednik	
	2. prof. dr. sc. Paško Županović - član	
	3. prof. dr. sc. Sanja Tomić – član	
	4. dr. sc. Igor Weber – zamjenski član	

Napomena (po potrebi):

U Splitu, 17. 11. 2017.



SVEUČILIŠTE U SPLITU
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET
Ruđera Boškovića 33, 21000 Split

IBAN: HR 17 23300031100068831
SWIFT(BIC): SOGE HR22
MATIČNI BROJ: 3199622
OIB: 20858497843

Klasa:643-02/17-13/0001
Ur.broj:2181-204-01-05-17-0009
Split, 20. prosinca 2017. god.

Na temelju odredaba Zakona o znanstvenoj djelatnosti i visokom obrazovanju, Statuta Prirodoslovno – matematičkog fakulteta u Splitu, te prijedloga Povjerenstva za ocjenu i obranu doktorskog rada u sastavu: prof.dr.sc. Mile Dželalija, prof.dr.sc. Paško Županović i prof.dr.sc. Sanja Tomić, Fakultetsko vijeće Prirodoslovno-matematičkog fakulteta na 134. sjednici održanoj dana 20. prosinca 2017. godine, jednoglasno je donijelo

ODLUKU

Prihvaća se Izvješće Povjerenstva za ocjenu i obranu doktorskog rada kojim se prihvaća doktorski rad Jadranka Batiste, pod naslovom „Izbor reprezentativnog skupa membranskih proteina poznate strukture: razvoj poboljšanih algoritama uporabom koncepta nasumičnog modela“ (Selection of representative set membrane proteins of known structure: development of improved algorithms using the random model concept)..

Dekanica

prof. dr. sc. Jasna Puizina

