

Катедри за рачунарство и информатику

Предмет: Извештај о прегледу мастер рада

Одлуком Катедре и ННВ од 24.04.2015. и 24.02.2017. године именовани смо у комисију за одбрану мастер рада под насловом "Монте Карло методе и примене у биоинформатици" кандидата Марије Ђурић, студента мастер студија на студијском програму *Математика* на Математичком факултету. Тема рада су методе симулације и њихова примена у предвиђању понашања сложених система. Примери таквих сложених система су биолошки макромолекули, нпр. протеини. Методе симулације су у овом раду илустроване на примеру решавања проблема увијања (енгл. *foldng*) протеина.

Рад се састоји од шест поглавља и закључка. Рад почиње Уводом где се уводе принцип и еволуција идеје Монте Карло симулације, савремене примене методе као и садржај и структура овог рада.

Друго поглавље, „Основе Монте Карло методе“, посвећено је представљању најчешћих примена Монте Карло методе као и неких њених основних техника као што су узорковање одбацивањем, узорковање по значајности и Марковљеви ланци.

У трећем и четвртом поглављу изложена је математичка формулација и опис два најважнија Монте Карло алгорита, Метрополис-Хестингов алгорита и Гибсовог узоркивача, као и неке њихове варијације.

Последње поглавље, „Монте Карло метода размене копија – примена на проблем увијања протеина“ садржи објашњење Монте Карло алгорита размене копија (енгл. *replica exchange Monte Carlo*) или паралелног каљења (енгл. *Parallel tempering*), као и начин и резултате примене овог алгорита на проблем увијања протеина. Ради се о предвиђању терцијарне структуре протеина проналажењем оне са најмањом енергијом која представља природно стање протеина. Разумевање механизма увијања протеина представља један од најизазовнијих проблема молекуларне биологије. Метода Монте Карло размене копија користи методу молекулске динамике (MD) за генерисање конформације система. Молекулска динамика је облик рачунарске симулације у којој атоми и молекули могу да интерагују у одређеном временском интервалу поштујући познате законе физике. Описани су и софтверски пакети за симулацију молекулске динамике. Упоредјени су резултати симулације замене копија са резултатима добијеним једном канонском MD симулацијом и указано на предности симулације размене копија у решавању проблема увијања протеина.

У Закључку се сумирају предности, недостаци и перспективе Монте Карло методе.

Следи списак коришћених референци.

Закључак Комисије

Увидом у текст "Монте Карло методе и примене у биоинформатици" мишљења смо да је кандидаткиња, Марија Ђурић, овладала принципима, математичким апаратом и алгоритмима рачунарске симулације – посебно алгоритмима Монте Карло методе, као и природом проблема на чије решавање се ове методе примењују. Избором и применом одговарајуће технике на решавање проблема молекуларне биологије – увијање протеина, кандидаткиња је показала да разуме специфичности и потенцијале варијација ове методе за решавање специфичних проблема као и процедуре за њихову примену. Са задовољством предлажемо Катедри да одобри јавну одбрану овог мастер рада.

У Београду,
26. фебруара 2017.

Комисија

1. _____
/др Гордана Павловић-Лажетић, р.проф./

2. _____
/др Јована Ковачевић, доцент/

3. _____
/др Марко Обрадовић, доцент/