

БЪЛГАРСКА АКАДЕМИЯ НА НАУКИТЕ

Институт по Математика и Информатика

Ул. "Акад. Г. Бончев", бл. 8, 1113 София

Проф. д-мн Петър Ст. Кендеров

Тел. 02 873-2670, 02 979-2881, ел. поща: kenderovp@cc.bas.bg

СТ А Н О В И Щ Е

За представените от Фатима Исмаил Сапунджи материали за получаване на образователната и научна степен „Доктор” в област на висше образование

4. Природни науки, математика и информатика.

Професионално направление:

4.6. Информатика и компютърни науки.

Със заповед № 2260/03.09.20015 г. на ректора на ЮЗУ „Неофит Рилски”, Благоевград, бях назначен за член на Научно жури по провеждане на защита на дисертационния труд на докторант Фатима Исмаил Сапунджи. Предоставените ми по тази защита материали съдържат:

а) Дисертационен труд, озаглавен

„Математически и компютърни модели в лиганд-таргет взаимодействия”;

б) Автореферат към дисертационния труд;

в) Стандартна автобиография.

Научни ръководители на докторантката са: **проф. д-р Петър Миланов и проф. д-р Невена Пенчева**

1. Биографични данни

Предоставената автобиография на докторантката е кратка, но впечатляваща. В периода 2005 – 2008 г. Фатима Сапунджи (по-нататък „докторантката”) е редовен студент в ЮЗУ „Неофит Рилски” и в резултат на следването си получава диплома за бакалавър по информатика. Сред изучаваните предмети се виждат: Обектно-ориентирано програмиране; Компютърни мрежи и комуникации; Операционни системи; Разпознаване на образи; Изкуствен интелект; Програмиране с C++, C#, Perl, Object Pascal и Delphi; Програмиране в Интернет; Web дизайн; Софтуерни технологии; Интернет технологии; Базии от данни и др.

От 2006 г. изучава паралелно и финанси в същия университет и през 2010 получава диплома за бакалавър по финанси. Сред изучаваните предмети правят впечатление: Микро и Макроикономика; Маркетинг; Финансово и Търговско право; Данъчен контрол; Финансов анализ; Финансов мениджмънт; Публични и Общински финанси; Международни финанси; Инвестиции и инвестиционна политика; Цени и ценова политика; Фондови борси; Счетоводство на фирмата; Банково и Бюджетно счетоводство; Банково дело и др.

В периода 2009 – 2010 получава диплома за магистър по информатика, като сред изучаваните предмети виждаме: Програмиране с XML; Проектиране на информационни системи от тип клиент-сървър; Математическо моделиране на дискретни структури и процеси; Невронни мрежи.

В същия период (2009 – 2010) прави и след-дипломна квалификация "Учител по Информатика и Информационни технологии".

Такъв стремеж към „получаване на дипломи” често издава повърхностност и ориентация към получаване на документи за знания, а не за истинско усвояване на знания. В случая подобна оценка би била твърде прибързана. След запознаване с дисертацията се убедих, че става дума наистина за човек с разностранни интереси, който е готов да инвестира значителни по обем усилия за преодоляване на истинските препятствия, които съпровождат съдържателните научни изследвания.

Периодът на докторантурата е от 2012 до 2015 година. Образователната компонента в подготовката за получаване на образователната и научна степен „Доктор” е много добре застъпена и реализирана. Тя е издържала с отлична оценка изпити по следните дисциплини, които имат пряко отношение към разработваната дисертация:

1. Теория на графите и приложението им;
2. Теория на оптимизацията и оптимизационни алгоритми;
3. Основи на Биоинформатиката;
4. Научни изследвания и непараметрична статистика.
5. Подготовка и управление на проекти.
6. Английски език.
7. Биохимия на белтъци. Опиоидни пептиди.
8. Приложни програмни продукти за компютърно моделиране.

В момента Фатима Сапунджи е асистент в катедра „Комуникационна и компютърна техника и технологии“ и, освен за тази катедра, води занятия и за катедра „Информатика”. Сред преподаваните от нея дисциплини виждаме: „Информатика”, „Информационни технологии”, „Графи” „Бази от данни”, „Математически модели в икономиката” и други. Докторантката е участвала и в специализации в чужбина: едномесечна специализация във Франция в Университета в Рен 1 в Център по биоинформатични изследвания, както и в интензивен курс за провеждане на докинг експерименти в Университета в Сиена, Италия. Провела е и едномесечна специализация в ИМИ-БАН, по време на която беше докладван (на семинара по „Изследване на операциите” и в мое присъствие) разработения в дисертацията математически модел.

2. Общо описание на представените материали по защитата

Дисертационният труд се състои от Увод (наречен в дисертационния труд „Въведение”, заемащ 4 страници), три глави (заемащи 160 страници), изводи (две страници) и обширна библиография по тематиката – общо 339 източника, чието описание заема 20 страници. В раздел VI на дисертационния труд (от страница 198 до страница 211) са дадени приложения, които хвърлят допълнителна светлина върху постиженията и методите на изследване, използвани в дисертацията. Включени са 54 фигури (част от които цветни) и 35 таблици. Дисертацията е оформена много добре. И от техническа гледна точка, и като стил на изложение и като формулиране на проблемите и резултатите дисертационният труд заслужава висока оценка. Единствената ми критична бележка е, че би било по-добре на мястото на обширната библиография да стои списък с „Цитирана литература”, който би бил по-кратък. Например, в Автореферата този списък съдържа само 47 заглавия.

Първата глава на дисертационния труд съдържа целите и задачите, които са насочени към математическо и компютърно моделиране на лиганд-рецепторни взаимодействия. Тук се въвежда терминологията и се описват биологичните, фармакологичните и математическите аспекти на тези взаимодействия.

Втората глава е посветена на методите за постигане на поставените цели. Вижда се, че докторантката познава и използва широк набор от специализирани софтуерни продукти за компютърно моделиране на лиганд-рецепторните взаимодействия.

Третата глава съдържа получените резултати и представя същината на изследванията.

Авторефератът също е изготвен с грижа за читателя и много точно представя задачите, използваните методи и получените резултати.

3. Отражение на научните публикации на кандидата в литературата

На запитване “F Sapundzhi” Google Scholar връща 8 библиографски единици с материали на английски език, където се споменава докторантката. Става дума за нейни публикационни изяви от 2012 г. (два броя) и от 2014 - 2015 г. (6 броя). Няма сведения за цитати, но е и рано да се очакват, след като става дума предимно за публикации от последните две години.

Резултатите от дисертацията са публикувани предимно на английски език: 3 статии в научни списания, 4 в сборници с доклади от международни конференции, и 5 в сборници с резюмета от международни конференции. Докторантката е автор и/или съавтор на повече от 10 доклада, представени на национални и международни конференции.

4. Обща характеристика на приносите

Приносите са описани много точно в дисертационния труд и в автореферата. Тук ще се спра само на част от тях, които обаче дават достатъчно основание за заключителната част на настоящето Становище.

(1) Изграден е вариант на модел на Теоретичния Хиперболичен Модел за частичен агонизъм и са изведени експлицитни формули за афинитета и ефикасността на основата на механизма на Кастило-Катц за лиганд-рецепторното взаимодействие. Построен е Марковски процес, за моделиране на лиганд-рецепторни взаимодействия.

(2) Построен е хомоложен модел на делта-опиоиден рецептор, като неговата приложимост е апробирана посредством молекулен докинг с делта-опиоидни енкефалинови аналози. Разработеният модел позволява оптимално да се определи афинитета на свързване чрез така наречената ASP скоринг функция. Представени са доказателства, че стойностите на скоринг функцията ASP позволяват да се определи потентността и ефикасността на агонисти.

(3) С компютърно моделиране и молекулен докинг на мю- и делта-опиоидни рецептори с мю- и делта- опиоидни лиганди са потвърдени техни свойства, получени по експериментален път (*in vitro*). Представени са доказателства, за наличие на корелация между докинг резултати с делта- и мю-опиоидни рецептори и параметри на селективните лиганди. Създадените в компютърна среда модели на делта- и мю-опиоидни рецептори могат да се прилагат за идентифициране и оценка на активност и селективност на мю- и делта-опиоидни лиганди.

(4) Показано е как резултатите от докинга, от създадените модели и от експерименталните данни позволяват да се изразят параметрите на биологичната активност като функции на тоталната енергия на комплексите и скоринг функциите от докинга.

5. Заключение

Считам, че дисертационния труд на тема: „**Математически и компютърни модели в лиганд-таргет взаимодействия**” напълно удовлетворява изискванията за придобиване на образователна и научна степен „Доктор”, предвидени в ЗРАСРБ, неговия правилник, както и във вътрешните правила за развитие на академичния състав в ЮЗУ „Неофит Рилски”. Поради това предлагам да се присъди на Фатима Исмаил Сапунджи образователната и научната степен „Доктор” по научната специалност „Информатика”.

01.10.2015 год.

Член на научното жури:

/акад. д-р м.н. Петър Кендеров/

