

Югозападен университет „Неофит Рилски“

РЕЦЕНЗИЯ

на представените трудове за участие в **конкурс за академична длъжност ДОЦЕНТ** в професионалното направление 5.3 Комуникационна и компютърна техника (Компютърно моделиране с приложение в природните науки), обявен от ЮЗУ „Неофит Рилски“ в ДВ., бр № 94/ 29.11.2019г.

Рецензент: **проф. д.н. инж. Галина Петкова Чернева**

Кандидат: **гл.ас. д-р Фатима Исмаил Сапунджи**

I. Кратки биографични данни за кандидата

В настоящия конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент“ в професионалното направление 5.3 Комуникационна и компютърна техника (Компютърно моделиране с приложение в природните науки) участва като единствен кандидат гл.ас. д-р Фатима Исмаил Сапунджи. Тя е завършила висшето си образование през 2010г. като магистър по информатика в ЮЗУ „Неофит Рилски“. В това време се дипломира и като бакалавър по финанси в същия университет. В периода 2009-2010г. завършва и следдипломна квалификация „учител по информатика и информационни технологии“. През 2015г. получава образователна и научна степен „Доктор“ по информатика. През периода 2012-2018г. гл.ас. д-р Сапунджи осъществява множество курсове и практически обучения в областта на програмирането, биоинформатиката и информационните технологии.

В периода 2013-2015г. е хонорован асистент към катедра „Информатика“ в ЮЗУ „Неофит Рилски“, а от 2015г. досега е главен асистент в катедра „Комуникационна и компютърна техника и технологии“ в ЮЗУ.

II. Характеристика на научната и научно-приложната продукция на кандидата

Кандидатката е представила за рецензиране общо 22 научни труда, от които:

- 1 монография на тема „Моделиране на взаимовръзката структура – биологична активност“;

- 1 книга със заглавие „Математическо и компютърно моделиране на лекарствено-рецепторни взаимодействия“, написана на базата на защитения дисертационния труд за ОНС „доктор“;

- 14 научни публикации, отпечатани в списания и сборници, реферирани и индексирани в световно известни бази данни с информация (Scopus, Web of Science);

- 6 броя резюмета на доклади от международни конференции, отпечатани в сборници с научно рецензиране.

Поради това, че не са представени пълните публикации, няма да рецензирам резюметата на докладите.

Книгата, написана на база дисертационния труд „Математически и компютърни модели в лиганд-таргет взаимодействия“, макар и да повтаря в голяма степен резултатите от изследванията в дисертацията, несъмнено представлява ценно помагало за студентите от специалности „Биоинформатика“ и „Компютърни системи и технологии“ на ЮЗУ.

За останалите 15 броя научни труда, може да се направи следната класификация.

Според мястото на публикуване, 3 от рецензираните статии са в списания с импакт фактор (общо $IF=2,565$), а останалите 11 броя имат SJR (общо $SJR=1,864$).

Според броя на авторите, рецензираните трудове се разпределят както следва: монографията и 2 от публикациите са самостоятелни. В останалите трудове кандидатката е първи автор.

Всички публикации, без монографията, са на английски език.

Научноизследователската дейност на гл.ас. д-р Фатима Сапунджи е представена в конкурса чрез участие в общо 4 научноизследователски проекта: 1, финансиран от фонд „Научни изследвания“; 1 международен и 2 към ЮЗУ „Неофит Рилски“. Забелязани са 14 броя цитирания. От тях 8 цитирания са в научни реферирани и индексирани в световно известни бази данни с информация (Scopus, Web of Science) и 6 в нереферирани списания с научно рецензиране.

Изпълнението на основните показатели за области 5. „Технически науки“ са калкулирани в представената по-долу Таблица 1.

Таблица 1

Група показатели	Минимален брой точки	Брой точки на кандидата	Брой точки по основни показатели от група
А	50	50	
Б	-	-	-
В	100	100	В3. Монография – 100
Г	200	293	Г6. Публикувана книга на базата на защитен дисертационен труд за присъждане на образователна и научна степен "доктор" - 30
			Г7. Научни публикации в издания, които са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация - 263
Д	50	92	Д11. Цитирания или рецензии в научни издания, реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация или в монографии и колективни томове - 80
			Д14. Цитирания или рецензии в нереферирани списания с научно рецензиране – 12

Всички научни трудове са използвани единствено за настоящия конкурс и са в областта на конкурса. Те са със значителни теоретични и приложни приноси, като един от тях е отличен с награда за най-добра статия на списание „International Journal of Online and Biomedical Engineering“.

Приемам публикационната дейност на гл.ас. д-р Фатима Сапунджи като напълно достатъчна по обем, на високо научно ниво и популяризирана в достатъчна степен в национален и международен план.

III. Основни приноси в научната и научно-приложна дейност на кандидата

Основните научни и научно-приложни приноси на кандидатката в представените публикации по конкурса, могат да бъдат класифицирани по следните обобщени критерии:

- 1) Създаване на нови методи, конструкции, технологии.
- 2) Доказване с нови средства на съществени нови страни на вече съществуващи научни области, проблеми, теории, хипотези.

Научни приноси

Основните научни приноси се отнасят към „създаване на нови методи и технологии, получаване и доказване на нови факти и приноси за внедряване“.

В резултат на задълбочени изследвания в областта на биоинформатиката, гл.ас. д-р Фатима Сапунджи предлага редица математични и компютърни модели:

- *in silico* модели на канабиноидни и опиоидни съединения (монографичен труд [I]);

- математичен модел, включващ схемата на del Castillo–Katz, който позволява лесно оценяване на потентността на пълните и частични

агонисти при изследване на големи серии вещества за оценка на структура-активност зависимости [II];

- 3D модели на протеини чрез прилагане на подхода хомоложно моделиране и специализирани алгоритми за множествено подравняване на структури [III.4, III.7, III.12, III.13, III.18];

- компютърни модели в среда на Matlab за определяне на връзката между биологичната активност на опиоидни и канабиноидни съединения и тяхната структура чрез полиноми на две променливи от различна степен [III.2, III.3, III.9, III.10, III.15].

Оригинален е предложеният подход за определяне на биологична активност, който може да се прилага при дизайна на нови лиганди към определен тип рецептор [III.2, III.3, III.10, III.13, III.17].

Научно-приложни приноси

Научно-приложните приноси се състоят в използването на предложените подходи и създадените модели за изследване на различни връзки и корелации между разглежданите структури и получените резултати:

- показано е, че посредством Марковски процес с две състояния може да се построи модел на бимолекулно взаимодействие (лиганд-рецептор) като се използва апарата на системите за масово обслужване [II];

- доказана е корелация между докинг резултати с модели на опиоидни и канабиноидни рецептори и параметри на опиоидни и канабиноидни лиганди, установени *in vitro* [III.9, III.14, III.17];

- чрез създадените модели са анализирани връзките между виртуални данни на аналози на опиоидни и канабиноидни лиганди и експериментални данни за същата активност при експерименти върху изолирани тъкани [I];

- представените модели са оценени чрез докинг експерименти с канабиноидни лиганди с известна биологична активност [III.5];

- анализирана е биологичната активност на серия от канабиноидни лиганди, селективни към канабиноидни рецептори тип1 и тип2 (CB1 и CB2) [III.8].

С научно-приложен принос са изследванията и сравнителния анализ на резултатите от 3D моделиране на експериментални данни с делта-опиоидни лиганди и три модела на делта-опиоидния рецептор (ДОР) [III.1, III.3].

Приложни приноси

Приложният характер на приносите се открива във възможностите за използване на получените резултати от моделирането и направените анализи във фармацевтичната промишленост и лекарствения дизайн:

- създадените модели на CB1 и CB2 рецептори и анализът относно афинитета на свързване на лигандите чрез оценъчната функция ChemScore могат да се използват при синтез на лекарства [III.4, III.5, III.12];

- получените докинг резултати могат да ускорят създаването на редица нови лекарствени препарати [III.5, III.9, III.14, III.17].

Полезно за практиката е използването на Matlab и специализирани софтуерни продукти (GOLD, Molegro Molecular Viewer, Molegro Virtual Docker) за симулационни изследвания. В графиките към трудовете се съдържа голямо количество информация.

IV. Значимост на приносите за науката и практиката

Значимостта на приносите на гл.ас. д-р Фатима Сапунджи за науката и практиката е безспорна. Оценката на представените от нея трудове показва, че количествените показатели и минималните изисквания на ЗРАСБ и ЮЗУ „Неофит Рилски” за заемане на академичната длъжност „доцент”, са изпълнени. Научната продукция на д-р Сапунджи е позната у

нас и в чужбина.

V. Оценка на педагогическата дейност на кандидата

Гл.ас. д-р Фатима Сапунджи е провеждала лекции по 5 дисциплини в ЮЗУ: „Технологии в Интернет“, „Приложения за мобилни устройства“, „Разработване на приложения за мобилни операционни системи“, „Структури от данни и алгоритми“, „Оптимизация на дискретни структури“.

Педагогическата квалификация на гл.ас. д-р Фатима Сапунджи се оформя и въз основа на работата ѝ със студентите и успешното ръководство на много дипломанти. Доказателство за това са съвместните публикации на д-р Сапунджи със студенти (12 на брой). Под нейно ръководство са защитили 33-ма дипломанта с теми на дипломните задания в областта на конкурса.

Учебната дейност на гл.ас. д-р Сапунджи включва и разработване на лекционни курсове за електронно обучение по редица дисциплини: “Оптимизационни алгоритми”, „Математическо моделиране на дискретни структури и процеси”, “Технологии в интернет“, „Приложения за мобилни устройства” и др. (<https://dlearning.swu.bg>).

VI. Лични впечатления на рецензента

Като член на катедра „Комуникационна и компютърна техника и технологии” в ЮЗУ имам много добри впечатления от гл.ас. д-р Фатима Сапунджи при съвместната ни работа. Тя е добре подготвен професионалист и се ползва със заслужен авторитет, както сред колегите, така и сред студентите.

VII. Критични бележки и препоръки.

Нямам критични бележки по представените материали за участие в конкурса. Те са достатъчни, за да се направи оценка на научноизследователската и педагогическа дейност на кандидатката.

Препоръките ми към д-р Фатима Сапунджи са:

- да подготви самостоятелен учебник по една от дисциплините, които преподава;

- да насочи усилията си към създаване на школа от докторанти и млади изследователи.

VIII. Заключение

Въз основа на представените научни трудове, съдържащите се в тях приноси, изпълнени и преизпълнени минимални национални изисквания, считам, че са изпълнени изискванията на ЗРАСБ, както и на Правилника към закона и този на ЮЗУ „Неофит Рилски”.

Убедено предлагам на Уважаемото научно жури да присъди академичната длъжност „Доцент” на **гл.ас. д-р Фатима Исмаил Сапунджи** в професионалното направление 5.3 Комуникационна и компютърна техника (Компютърно моделиране с приложение в природните науки).

Дата: 15.03.2020

Рецензент:.....

/проф. д.н. инж. Г. Чернева/

South-West University "Neofit Rilski"

R E V I E W

competition for the academic position "Associate Professor" in the professional field 5.3 Communication and computer technology (Computer modeling by application in the natural sciences), published in the State Gazette, № 94/29.11.2019

Reviewer: Prof. DSc Eng. Galina Petkova Cherneva

Candidate: Chief Assist. Prof. Fatima Ismail Sapundzhi, PhD

I. Biographical data of the candidate

In this competition for the occupation of the academic position "Associate Professor" in the professional field 5.3. Communication and computer technology (Computer modelling with application in the natural sciences), participates as the sole candidate Chief Assist. Prof. Fatima Ismail Sapundzhi, PhD. She graduated in 2010 as a *Master of Informatics* at South-West University "Neofit Rilski" in Blagoevgrad. During this time, she also received a *bachelor's degree in Finance* at the same university. In 2009-2010 she obtained a postgraduate qualification as a *Teacher of Informatics* at the SWU. She received the educational and scientific academy degree *Doctor of Informatics* in 2015. From 2012 to 2018 Dr. Sapundzhi provides many courses and practical training in the fields of programming, bioinformatics and information technology.

In the period 2013-2015, she is appointed as a part-time Assistant Professor at the Department of Informatics at SWU, and since 2015 she was appointed full-time Assistant Professor at the Department of Communication and Computer Engineering and Technologies at the Faculty of Engineering of the South-West University.

II. Characteristics of the applicant's scientific production

For the participation in the competition, Dr. Sapundzhi presented the following scientific publications, published after the acquisition of the academic degree PhD:

- 1 monograph, "Modeling of the structure-biological activity relationship";
- 1 book, based on the PhD thesis, "Mathematical and computer modeling of drug-receptor interactions".
- 14 English-language articles in peer-reviewed and indexed international journals in Scopus and / or Web of Science;
- 6 abstracts of papers presented in English at international conferences.

Because the full publications have not been submitted, I will not review the abstracts of the reports.

The book based on the dissertation "Mathematical and computer modeling in ligand-target interactions", although it largely repeats the results of the dissertation research, undoubtedly represents a valuable teaching tool for the students of the Bioinformatics and Computer Systems and Technologies specialties at SWU.

For the remaining 15 scientific papers, the following classification can be made.

According to the place of publication, 3 of the reviewed articles are in journals with impact factor (total IF = 2.565) and the other 11 publications are SJR rank (total SJR=1,864).

According to the number of authors, the reviewed works are distributed as follows: the applicant is the sole author of the monograph and 2 of the publications. In all other works the candidate is the first author.

All publications except the monograph are written in English.

The research activity of Dr. Sapundzhi is presented in the competition through her participation in a total of 4 research projects: 1 of which is international, 1 is to the National Science Fund at the Ministry of Education and Science, and 2 to the South-West University.

The number of citations to the applicant's publications is 14: 8 of which are in scientific publications, referenced and indexed in the world known databases of scientific information (Scopus, Web of Science), 6 in other non-refereed scientific peer-reviewed journals.

Execution of the main indicators for the scientific field 5. “Technical sciences” are calculated in the presented below Table 1.

Table 1

Group of factors	Minimum score of points	Applicants score of points	Score of points as per major factors from each group
A	50	50	
Б	-	-	-
B	100	100	B3. Monograph – 100
Г	200	293	Г6. A book based on the PhD thesis - 30
			Г7. Scientific publications in editions that are referenced and indexed in world-renowned databases of scientific information -263
Д	50	92	Д11. Citations or reviews in scientific publications, referenced and indexed in world-renowned databases of scientific information or in monographs and collective volumes - 80
			Д14. Citations or reviews in non-refereed peer-reviewed journals- 12

All scientific works have been used only for the current competition and are in its area. The works are with significant theoretical and applied

contributions, as one of them was awarded the best journal article of the International Journal of Online and Biomedical Engineering.

I accept the publication activity of Chief Assist. Prof. Fatima Sapundzhi as fully sufficient in scope, at a high scientific level, and promoted sufficiently nationally and internationally.

III. Major scientific and applied contributions

The main scientific and applied contributions of the candidate in the submitted publications under the competition can be classified according to the following general criteria:

- 1) Creation of new methods, constructions, technologies.
- 2) Proving with new means of significant new aspects of existing scientific fields, problems, theories, hypotheses.

Scientific contributions

The main scientific contributions can be related to "the creation of new methods and technologies, the receiving and proving of new facts and contributions for implementation".

As a result of extensive bioinformatics research, Chief Assist. Prof. Sapundzhi offers a number of mathematical and computer models:

- *in silico* models of cannabinoid and opioid compounds (monograph [I]);
- a mathematical model incorporating the del Castillo-Katz scheme, which makes it easy to evaluate the potency of full and partial agonists when studying large series of substances to evaluate structure-activity relationships [II];
- 3D models of proteins by applying the homology modeling approach and specialized algorithms for multiple alignment of protein structures [III.4, III.7, III.12, III.13, III.18];
- computer models in Matlab for determining the relationship between the biological activity of opioid and cannabinoid compounds and their structure by polynomials of two variables of different degrees [III.2, III.3, III.9, III.10, III.15]

An original approach for the determination of biological activity has been proposed that can be applied in the design of new ligands to a particular type of receptor [III.2, III.3, III.10.10, III.13, III.17].

Scientific and applied contributions

The applied scientific contributions consist in the use of the proposed approaches and the created models for the study of different relationships and correlations between the considered structures and the obtained results:

- it has been shown that a two-state Markov process can build a model of bimolecular interaction (ligand-receptor) using the apparatus of queuing systems [II];

- correlation between docking results with models of opioid and cannabinoid receptors and the parameters of opioid and cannabinoid ligands established *in vitro* has been demonstrated [III.9, III.14, III.17];

- by developed models the relationships between virtual analogues of opioid and cannabinoid ligands and experimental data on the same activity in experiments on isolated tissues have been analysed [I];

- the obtained models were evaluated by docking experiments with cannabinoid ligands with known biological activity [III.5];

- the biological activity of a series of cannabinoid ligands selective for cannabinoid receptors type1 and type2 (CB1 and CB2) has been analyzed [III.8].

With a scientific and applied contributions are the studies and comparative analysis of the results of 3D modeling of experimental data with delta-opioid ligands and three models of delta-opioid receptor (DOR) [III.1, III.3].

Applied contributions

The application of contributions is found in the opportunities to use the results of modeling and analysis in the pharmaceutical industry, and drug design:

- models of cannabinoid receptor type 1 and type 2 have been generated using the homology modeling approach, and their applicability has been tested by docking with cannabinoid ligands with known biological activity.

- the developed models of cannabinoid receptor type 1 and type 2 allow the ligand binding affinity to be optimally determined by the ChemScore function and can be used in drug synthesis [III.4, III.5, III.12];

- the obtained docking results can accelerate the design of new drugs [III.5, III.9, III.14, III.17].

Useful practice is the use of Matlab and specialized software (GOLD, Molegro Molecular Viewer, Molegro Virtual Docker) for simulation studies. The charts of the scientific works contain a lot of information.

IV. Significance of the contributions to the science and practice

The importance of the contributions of Chief Assist. Prof. Fatima Sapundzhi for science and practice is indisputable. The evaluation of the applicant's presented papers shows that the quantitative indicators and the minimum requirements of Law on the Development of the Academic Staff in the Republic of Bulgaria and South-West University "Neofit Rilski" for obtaining the academic position of "Associate Professor" are fulfilled. The applicant's scientific production of Dr. Sapundzhi is well known in Bulgaria and abroad.

V. Assessment of the candidate's pedagogical preparation and activity

Chief Assist. Prof. Fatima Sapundzhi has lectured in 5 disciplines at South-West University "Neofit Rilski": "Internet technology", "Applications for mobile devices", "Development of Applications for Mobile Operating Systems", "Data Structures and Algorithms", "Optimization of Discrete Structures".

The pedagogical qualification of Chief Assist. Prof. Fatima Sapundzhi is formed on the basis of her work with students and the successful supervised of many graduates. Proof for this are Dr. Sapundzhis's collaborative publications with students (12 numbers). She has supervised more than 33 graduates with the topics of the diploma works in the field of competition.

The teaching activity of Chief Assist. Prof. Sapundzhi also includes the development of e-learning lecture courses in a number of disciplines: "Optimization algorithms", "Mathematical modeling of discrete structures and processes", "Internet technology", "Applications for mobile devices" and others (<https://dlearning.swu.bg>).

VI. Personal impressions

As a member of the Department of Communication and Computer Engineering and Technologies at SWU I have very good impressions of Chief Assist. Dr. Fatima Sapundzhi in our collaboration. She is a well-trained professional and has a well-deserved authority both among her colleagues and students.

VII. Critical notes and recommendations

I have no critical comments on the materials presented for participation in the competition. They are sufficient to evaluate the applicant's research and teaching activities. My recommendations to Dr. Fatima Sapundzhi are:

- to prepare an individual textbook in one of the disciplines in which she teaches;
- to focus her efforts to create a school of graduate students and young researchers.

VIII. CONCLUSION

On the basis of the submitted scientific papers, their contributions, the fulfilment and the over fulfilment of the minimum national requirements, in my

opinion the requirements of the Law on the Development of the Academic Staff in the Republic of Bulgaria, as well as the Rules of the Law and that of the SWU “Neofit Rilski” are fulfilled.

I suggest with the utmost conviction of the Honourable Scientific Jury to award the academic position of „Associate Professor” to **Chief Assist. Prof. Fatima Ismail Sapundzhi, PhD** in the professional field 5.3. Communication and computer technology, (Computer modeling by application in the natural sciences).

15.03.2020

Reviewer:.....

/Professor eng. Galina Cherneva, D.Sc./