

РЕЦЕНЗИЯ

от: проф. д-р Михаил Георгиев Матвеев

Относно: Конкурс за заемане на академична длъжност „Професор“ в област на висше образование „4. Природни науки, математика и информатика“, професионално направление „4.6. Информатика и компютърни науки“, научна специалност „Приложение на принципите и методите на кибернетиката в различни области на науката (in silico) изследване на биоактивни молекули и моделиране на биологични процеси“, за нуждите на секция „QSAR и молекулно моделиране“ към ИБФБМИ – БАН, обявен в Държавен вестник, бр. 64 от 08.08.2017 г.

Кандидат: доц. д-р Таня Колева Пенчева

Представям рецензията като член на научното жури по цитирания по-горе конкурс, назначено със заповед №650 от 06.10.2017 г. на Директора на ИБФБМИ на основание решение на НС на ИБФБМИ (прот. №11 от 06.10.2017 г.) и съгласно чл. 29а от ЗРАСРБ. Оценката ми е изготвена съгласно изискванията на ЗРАСРБ, Правилника за неговото прилагане, вътрешните правила, политики и процедури на ИБФБМИ. За рецензент съм определен на първото заседание на научното жури, проведено на 18.10.2017 г.

I. Основание за оценката и обща характеристика на публикациите и професионалните дейности, подадени за разглеждане по настоящата процедура

Становището ми се основава върху публикациите, с които доц. Т. Пенчева участва в конкурса, резюмето на научните и научно-приложните постижения и резултати, както и върху списъка от над 390 забелязани цитирания на нейни статии без авто-цитирания. Взел съм предвид и фактите, че целокупната ѝ публикационна дейност е оценена с h-index = 9, изчислен от Scopus. Участието ѝ в международни и национални форуми с доклади и презентации е впечатляващо – 88 международни и национални; участва като ръководител и член на изследователски колективи в 6 международни договори: 3 по 7РП на ЕК, 2 по DFG, 1 по COST, част от които с продължителен срок и външно финансиране, има участие

и в 3 договора с финансиране от Фонд „Научни изследвания“ като ръководител и в 9 – като изпълнител.

Научната и научно-приложната дейност на доц. д-р. Таня Колева Пенчева е многократно и високо оценена в предходните години както от Българската академия на науките и Съюза на учените в България, така и от международни научни институции, за което тя е удостоена с научни награди.

С посочената активност доц. д-р. Таня Колева Пенчева не само изпълнява напълно, но и преизпълнява в много отношения изискванията за заемане на академичната длъжност „Професор“ в ИБФБМИ.

II. Област на научни интереси и преценка на приносите

Представените материали за участие в конкурса се отнасят до научни изследвания, свързани с разработването на инженерно-математически методи и информатични подходи и тяхното приложение за изучаване, моделиране и оптимизация на биообекти, в т.ч. биоактивни молекули и биологични процеси.

Постигнатите по-значими научни, научно-приложни и приложни резултати могат да бъдат класифицирани в следните научни направления: I. Компютърно-подпомогнат лекарствен дизайн чрез приложение на подходи на молекулното моделиране; II. Методологични приноси в областта на приложение на изкуствения интелект при параметрична идентификация на биотехнологични процеси; III. Моделиране и оптимизация на биотехнологични процеси

I. Компютърно-подпомогнат лекарствен дизайн чрез приложение на подходи на молекулното моделиране. По-важните научни и научно-приложни приноси в този раздел са представени в научните трудове [I.1, I.2, I.3, I.4, I.5, I.13, I.19, I.22, I.25, I.28, I.29, I.30, I.31] и могат да бъдат формулирани както следва:

I.1. Програмни пакети за оптимизация на биологично активни молекули и техни комплекси 1. Разработена е програмна платформа AMMOS (Automated Molecular Mechanics Optimization tool for in silico Screening) за оптимизация на

структури на малки молекули и на протеин-лигандни комплекси за целите на виртуален скрининг на биологично активни съединения. Съществени части в платформата са:

програмни пакети DG_AMMOS и AMMOS_SmallMol за оптимизация на малки биологично активни молекули;

програмен пакет AMMOS_ProtLig за оптимизация на протеин-лигандни комплекси.

I.2. Изясняване на молекулни механизми на действие и предсказване на физико-химични свойства на биологично активни съединения с използване на структура- и лиганд-базирани методи на лекарствен дизайн. Тук основни постижения са: In silico анализът на протеинлигандните взаимодействия показва наличие на едно или повече специфични взаимодействия при всички (18 на брой) новосинтезирани съединения; изведен е структура-базиран фармакофорен модел на агонисти на човешки естрогенов рецептор (ER α), базиран на комплекси на силни агонисти и валидизиран със симулации на молекулната динамика.

II. Методологични приноси в областта на приложение на изкуствения интелект при параметрична идентификация на биотехнологични процеси. По-важните научни, научно-приложни и приложни приноси в този раздел са представени в научните трудове [I.6, I.8, I.9, I.10, I.11, I.14, I.16, I.17, I.18, I.21, I.23] и могат да бъдат формулирани както следва:

II.1. Процедура за целенасочен параметричен генезис при параметрична идентификация на биотехнологичен процес. В тази област се откроява 1 научен и 1 научно-приложен принос, съответно: разработена е процедура за целенасочен параметричен генезис при параметрична идентификация на биотехнологичен процес и приложението на процедурата за целенасочен параметричен генезис при параметрична идентификация на култивация на дрожди води до значително намаляване на времето за сходимост на приложените генетични алгоритми (ГА).

II.2. Процедура за оценка качеството на представяне на различни видове генетични алгоритми чрез използване на интуиционистки размита логика.

II.3. Подход за интеркритериален анализ. За първи път за целите на параметрична идентификация на култивационни процеси и оценка качеството на изпълнение на ГА е приложен иновативният подход за интеркритериален анализ (ИКА), базиращ се на апаратите на индексирани матрици и интуиционистки размитата логика.

III. Моделиране и оптимизация на биологични процеси.

III.1. Приложение на подхода за моделиране на функционалните състояния за култивации на дрожди и бактерии. Този подход за моделиране на функционалните състояния е аргументирано и успешно приложен за полупериодичен процес на култивация на бактерии. Разпознато е ново функционално състояние, наречено състояние при недостиг на кислород. Подходът за моделиране на функционалните състояния е приложен за реални аеробни периодични и полупериодични култивации на дрожди, както и за полупериодични култивации на бактерии.

III.2. Разработване на генетични алгоритми за параметрична идентификация на култивационни процеси. Разработени са единадесет модификации на стандартните ГА, различаващи се по реда на изпълнение на основните генетични оператори селекция, кръстосване и мутация. Извършена е оптимална настройка на параметрите на едно- и многопопулационни генетични алгоритми след изследване на влиянието на параметрите на ГА (брой индивиди в популацията, брой итерации на изпълнение на алгоритъма, степен на прехвърляне, вероятности на кръстосване, мутация и вмъкване) върху времето за сходимост на алгоритмите и точността на намереното решение.

III. Експертна дейност

Доц. Т. Пенчева има активна експертна дейност. Понастоящем тя е: заместник главен редактор на International Journal Bioautomation . Член на редколегиите на Journal of Bioinformatics, Computational and Systems Biology, International Journal of Research Studies in Computer Science and Engineering, International Journal of Computer and Software Engineering, International Journal of Immunotherapy and Cancer Research, Global Journal of Technology and Optimization, International Journal of Computing and Optimization. . Рецензент на над 100 статии за международни и национални списания. . Член на Организационния и Програмния комитет на международни и национални научни форуми. Рецензент на дисертации за ОНС „доктор” и дипломни работи . Рецензент в конкурси за доцент . Била е член на Общото събрание на БАН (2012-2016).

IV. Оценка на преподавателската дейност на кандидата

Доц. Т. Пенчева има и активна дейност в подготовката на млади специалисти: ръководство на 3 докторанти, от които 2 защитили и 1 в етап на приключване на дисертационния си труд; ръководство на 3 дипломанта към Технически Университет – София; Лекционен курс по дисциплината „Системи с интелигентно поведение“ в магистърска програма на специалност „Компютърни системи и технологии“ към Университет „Проф. д-р Асен Златаров” – от 2014 до момента.

V. Основни критични бележки и препоръки

Нямам основни критични бележки. Като препоръка бих обърнал внимание върху доста широкия спектър от научни интереси на доц. Т. Пенчева, отразени в нейните публикации и бих препоръчал в бъдеще да концентрира изследователската си дейност в по-ограничена по тематика сфера.

VI. Лични впечатления от кандидата

Познавам доц. Таня Пенчева от дълги години съвместна работа. За мен тя е прекрасно подготвен, отговорен и доказал се изследовател в област, в която в страната

специалистите не са много. Умее да поддържа отлични контакти с колегите си и със специалистите от други специалности, с които работи.

VI. Заключение

Гореспоменатите факти доказват, че доц. д-р. Таня Пенчева удовлетворява изискванията на Закона за развитие на академичния състав на Република България, Правилника за неговото прилагане, вътрешните правила на ИБФБМИ за заемане на обявената чрез конкурса академична длъжност „Професор“. Затова убедено препоръчвам на уважаемите членове на научното жури да присъдят на доц. д-р. маг. инж. Таня Пенчева академичната длъжност „Професор“ в област на висше образование „4. Природни науки, математика и информатика“, професионално направление „4.6. Информатика и компютърни науки“, научна специалност „Приложение на принципите и методите на кибернетиката в различни области на науката (in sislico изследване на биоактивни молекули и моделиране на биологични процеси“.

Чрез подписа си декларирам и че не съм свързано лице по смисъла на § 1, т. 5 от Допълнителните разпоредби на ЗРАСРБ с кандидата за заемане на академичната длъжност, както и че нямам частен интерес, който може да повлияе върху безпристрастното и обективно изпълнение на работата ми като член на журито.

София, 22 ноември 2017 г.

Подпис: проф. Михаил Матвеев