

## РЕЦЕНЗИЯ

на дисертационния труд „Компютърна интерпретация на вибрационни спектри“,  
представен за присъждане на образователната и научна степен „доктор“

Област на висшето образование 4. Природни науки, математика и информатика;  
продесионално направление 4.2. Химически науки (Аналитична химия); докторска  
програма Аналитична химия.

Докторант: Слава Христова Цонева, ПУ „Паисий Хилендарски“, Химически факултет,  
катедра Аналитична химия и компютърна химия

Рецензент: проф. дхн Васил Симеонов, СУ „Св. Кл. Охридски“, Факултет по химия и  
фармация, катедра Аналитична химия

### *Биографични данни за докторанта*

Слава Цонева е родена през 1982 г. Завършва бакалавърска програма на обучение в УНСС – София през 2005 г, а в последствие – бакалавърска и магистърска програма в Химическия факултет на ПУ „Паисий Хилендарски“ през 2013 г със специализации по хроматография и спектрохимичен анализ, съответно, а за периода 2013 – 2016 г е докторант в катедрата по аналитична химия и компютърна химия на същия факултет.

### *Наукометрични показатели на дисертационния труд*

Представеният за рецензиране дисертационен труд е написан на 170 страници, съдържа общо 31 фигури и 21 таблици, като са цитирани 247 литературни източника. Трудът е разделен на традиционните раздели за една дисертация – 3 глави, включващи съответно Литературен обзор, цели и задачи (Глава 1), Спектрални библиотеки, софтуер и алгоритми (Глава 2, която е фактически съответства на разделите за материали и методи в друг тематичен аспект на дисертацията) и Резултати и дискусия (Глава 3). Допълнително има обобщение на резултатите и приноси, използвана литература, списъци на фигури и таблици, наукометрични данни за публикации по труда и конференции.

Докторантката представя 5 публикации, отразяващи участието ѝ в дисертационния труд. Две от тях са публикувани в списание с импакт фактор (0.238 за 2016 г. ) *Bulgarian Chemical Communications*, други 2 – в Научни трудове на Русенския Университет „А. Кънчев“ (Scientific works: University of Ruse “A. Kanchev”) и една – в изданието на Съюза на учените в България Scientific Researches of the Union of Scientists in Bulgaria. Представена е и информация за участие с постери на 5 научни конференции, проведени в България, някои от които са с международно участие. Няма сведения за открити цитати по научните трудове.

Съгласно изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България и Правилника за приложението му в Химическия факултет на Пловдивския университет, магистър Слава Цонева е изпълнила необходимите условия от наукометрични изисквания. В три от публикациите Цонева е на първо място, а в останалите две – на второ от общо три или четири съавтора. Колкото и относителен показател да е мястото в списъка от съавтори (практически всички са равностойни), все пак това е признание от колектива за изпълнение на определена задача с проиритет. Така че може да се приеме, че Слава Цонева е била активен член на авторския колектив със самостоятелно реализирани задачи и съответен принос.

Моята забележка в наукометричния анализ с, че качеството на извършената работа заслужава публикуване в издания с по-значителна тежест в научната колегия, а не само в списания с предимно локално значение. Отличният литературен обзор би следвало да убеди докторантката в правотата на това становище - цитираната литература е от източници с високо научно ниво и интерес за колегията.

#### *Оценка на актуалността и приносите в дисертационния труд*

Общото впечатление от дисертационния труд е много добро, той е оформен грижливо и внимателно, личи доброто познаване на проблемите и на спектроскопията, и на хеометрията.

Безспорна е актуалността на дисертацията, тъй като възможността за компютърна интерпретация както на различни по характера си аналитични данни, така и на специфични аналитични сигнали (особено спектроскопски) е търсена и сериозно изследвана.

Докторант Слава Цонева си е поставила задача да оптимизира методите за търсене в библиотеки от вибрационни спектри с особен акцент върху изследване на зависимостта между структурното и спектралното подобие на вибрационните спектрални сигнали. За реализация на тази цел са разработени и интерпретирани серия от конкретни изследвания по отношение на създаване и допълване на спектрални библиотеки, на дефиниране на условия при търсене на идентификатори в спектрите, изследване на връзките между структура на съединения и спектрален сигнал. След тази серия от изследвания се предлага нова методика за спектрален анализ на смеси от съединения.

В хода на работата по дисертацията са използвани голям обем от данни, включени в различни спектрални библиотеки, поредица от софтуерни продукти за работа с различни масиви от данни и специфични алгоритми за интерпретация на структурно – спектрално подобие в библиотечните колекции. Особено интересни и полезни, според мен, са резултатите от анализ на спектри на смеси, което винаги е било и остава сериозен аналитичен проблем.

В края на значителния по обем дисертационен труд докторантката е представила информация за „Обобщение на резултатите и приноси“. Този подраздел включва общо 13 параграфа, някои от които имат допълнителни подраздели от още 7 параграфа. Трудно е да се прецени кое точно е обобщение, извод и кое – научен принос. Самооценката на дисертанта в този случай е много важна, а не е доведена до край. Не е сериозно да се интерпретират 20 научни приноса, със сигурност е възможно истинско обобщение и представяне на няколко съществени постижения. За рецензента те биха могли да се дефинират така:

- Оптимизиране на алгоритми за търсене в библиотеки за инфрачервени и раманови спектри;
- Оптимизиране на оценката за структурното подобие за двата вида спектри;
- Създаване на нова методика за анализ на бинерни смеси чрез оценка на инфрачервени и раманови спектри.

Така дефинираните приноси имат важно научно и практическо значение в областта на аналитичната и компютърната химия.

### *Забележки и коментари*

Към всяка научна работа могат да се направят забележки, да се коментират резултати и подходи и да се зададат въпроси. Обикновено целта е да се изяснят подробности и да се провери капацитетът на изследователя при вземане на решения. Във всеки случай те допринасят за общото повишение на нивото на образователната и научна процедура.

- Намирам, че дисертационният труд е посветен на интересен аналитичен и изчислителен проблем, тъй като цялата аналитична химия е съсредоточена основно на връзката между компонентите на аналитичната система проба, реагент, сигнал. Към това трябва да се прибави задължително и изследване на връзката структура/свойства. Настоящият дисертационен труд включва в себе си поглед към всички тези елементи на системата.
- Възможно ли е и с каква степен на достоверност да се класифицират по определен спектрален признак (съгласно Вашата методика) неизвестни групи съединения (например алергени/неалергени)? Различните изчислителни и многовариационни статистически методи (например регресионен анализ по метода на частично най-малките квадрати в комбинация с дискриминантен анализ) постигат коректност над 80 % по отношение на класификацията, но нямат възможност да включат структурни особености. В този смисъл Вашият подход би имал предимство.
- Имате ли статистически критерий за оценка на твърдение като ;“по-висока е оценката на структурното подобие при работа със симетричната мярка за оценяване на спектралното подобие“?
- Определяте ли статистическа значимост на корелационен коефициент при изследване на структурно и спектрално подобие при „разширената библиотека“ и ако да, от какво зависи нивото на значимост?

Коментарите и забележките доказват значимостта на извършената работа и неизбежния практически и теоретичен интерес към получените резултати.

### *Заключение*

Оценявам високо представения за рецензиран дисертационен труд на Слава Христова Цонева, който отговаря на критериите на Закона за развитие на академичния състав в Република България и правилника за неговото приложение в Химическия факултет на Пловдивския Университет „Паисий Хилендарски“ по отношение на присъждане на образователната и научна степен „доктор“. Отново апелирам към докторанта да търси по-авторитетна аудитория за научните си публикации. Ще гласувам „за“ присъждане на образователната и научна степен „доктор“ на докторант Слава Христова Цонева.

София, 24.11.2017 г.

Рецензент:

Проф. дхн В. Симеонов