

СТАНОВИЩЕ

от доц. д-р Николай Тодоров Кочев

на дисертационен труд за присъждане на образователната и научна степен 'доктор'

в област на висше образование *4. Природни науки, математика и информатика*

професионално направление *4.2. Химически науки*

докторска програма *Аналитична химия*

Автор: Слава Христова Цонева

Тема: Компютърна интерпретация на вибрационни спектри

Научен ръководител: Проф. д.х.н. Пламен Николов Пенчев

Общо представяне на процедурата и докторанта

Представеният от Слава Христова Цонева комплект материали е в съответствие с Чл.36 (1) от Правилника за развитие на академичния състав на ПУ и включва всичките необходими документи.

Актуалност на тематиката

Задачата за ефективно извличане на информация от молекулните спектри е от важно значение за аналитичната химия. През последните няколко десетилетия усилено се търсят нови хемометрични подходи за усъвършенстване на компютърно базираното интерпретиране на вибрационни спектри. В този контекст тематиката на дисертацията е актуална. Отразени са както класическите хемометрични подходи, така и съвременното развитие на информационните системи за решаване на проблеми чрез търсене в бази данни и последващ компютърно базиран анализ (data mining). Представени са изследвания касаещи различни видове търсене в спектрални библиотеки, като са оптимизирани параметрите на алгоритмите за търсене и интерпретация на спектралната информация. Изследвано е влиянието на спектроструктурните корелации, възможностите за комбинирано използване на различни видове спектри и разработването на методология за разкриване на компонентите на смеси въз основа на библиотечно спектрално търсене.

Познаване на проблема

Докторант Слава Цонева показва задълбочено познаване на състоянието на проблематиката на дисертационния труд. В литературния обзор подробно са разгледани и дискутирани подходите за интерпретация на вибрационни спектри чрез библиотечно търсене, експертни системи и хемометрични подходи. Докторантката е анализирала много изчерпателното

компютърно базираните системи за интерпретация на спектри, техните основни характеристики и принципите на работа. Докторант Слава Цонева е направила адекватна оценката на състоянието на проблемите за интерпретация на спектри чрез библиотечно търсене, въз основа на които са дефинирани главната цел и практическите задачи на дисертацията.

Методика на изследването

Методиката на изследванията е основана на широка гама активности: заснемане на спектри, компютърна обработка на спектри и структури, създаване на нови спектрални библиотеки, работа със специализирани софтуерни програми за библиотечно търсене, статистически анализ на структурна и спектрална информация, линейна регресия и хемометрични методи за класификация и моделиране. Докторант Цонева демонстрира ефективно използване и интегриране на тези софтуерни инструменти в методологията на дисертацията, която включва анализ на силните и слабите страни на съществуващите методи за библиотечно търсене и набелязване на набор от пратически задачи с цел подобряване на подходите за спектрална интерпретация, откриване на нови оптимални параметри на алгоритмите, изследване на характера библиотечните спектро-структурни корелации и влиянието им върху методите за интерпретация на спектри.

Характеристика и оценка на дисертационния труд и приносите

Докторант Цонева е извършила огромна по мащаб и разнообразие на дейностите научно-изследователска работа. Осъществена е подробна и изчерпателна литературна справка, която поставя правилния контекст за собствените изследвания, описанието на резултатите и дискусиата в следващите глави на дисертацията.

Направено е добро разграничаване на резултатите от други научни колективи и собствените приноси, като е посочена ясно степента на надграждане на изследванията от други колективи. Спазени са добрите практики за тестване и статистическо валидиране (в това число и включване на независим външен оператор за тестване на софтуера).

Тематиката на дисертацията изисква задълбочени мултидисциплинарни познания, които докторант Слава Цонева несъмнено е демонстрирала.

Оформлението на дисертацията като цяло се характеризира с голям обем, много фигури и таблици, които подпомагат възприемането на съдържанието на дисертацията. Наблюдават се доста технически грешки в текста на дисертацията. Авторефератът отразява в съкратен вид най-важните аспекти на дисертацията и основните резултати.

Дисертационният труд има следните **научни и научно-приложни приноси**:

- Създадени са нови библиотеки на ATR и Раман спектри, както и комбинирани спектрални библиотеки;

- Намерени са оптималните параметри на алгоритмите за библиотечно търсене;
- Изследвана е зависимостта между структурно и спектрално подобие за ИЧ спектри при различните методи на библиотечно търсене, влиянието върху спектралната интерпретация и оптималните параметри за най-добри резултати при библиотечно търсене;
- Създадена е нова методика за анализ на ИЧ и Раман спектри на бинерни смеси въз основа на многопроменлива линейна регресия и алгоритъм за изваждане с три вида коефициенти;

Забележки по съдържанието и оформлението на дисертацията:

- Дисертационния труд е с по-голям обем от необходимото, което се обуславя от наличието на повторения в текста, обширно описание на някои общоизвестни детайли касаещи методи и факти в дисертацията. В литературната справка е обърнато повече внимание отколкото е необходимо на експертни системи и невронни мрежи (последните не са предмет на собствените изследвания на докторанта).

- В част 7.3. не е описано как точно се получават стойностите на А, В, С за конструиране на мерките за подобие АВС и ВАС; вместо това са посочени литературни източници за повече детайли. Считаю, че тези детайли е по-подходящо да са вътре в текста, тъй-като мерките за подобие АВС и ВАС са съществени за голяма част от изследванията в дисертацията;

- На някои места в текста, терминът “експертна система (ЕС)” се използва в по-широк смисъл отколкото трябва (например за софтуерите COSMOSS и SPECINFO). По-подходящи алтернативи за някои от представените софтуери биха били термини като “интерпретационна система”, “софтуер за интерпретация на спектри” и др;

- Наблюдават се редица неточни преводи на термини и изрази от английски език;

- Терминът “фингърпринт” се използва в два контекста: за структура и за спектър, което на места води до двусмислие;

- В уравнение 32 (за вариацията на концентрациите) е употребена матрица К, чието значение не е описано в текста на дисертацията. В добавка обозначението К се използва малко по-горе в текста за описание на броя на пробите.

Въпроси към докторанта:

- За дефинирането на фингърпринти за структурно подобие сте работили с 500 подструктури на проф. Вармуца? Защо сте избрали точно подструктурите на проф. Вармуца? С какво се характеризират те?

- Имате ли обяснение защо при резултатите представени в таблица 6 (тестове с Раман спектри) практически няма разлика между различните алгоритми за търсене. На какво се дължи голямата разлика в резултатите за структура 31?

- Има ли особености или промяна в начина, по който се дефинират метриците за спектрално търсене при “разширена/комбинирана” ИЧ-Раман библиотека? Необходими ли са специални математически обработки на спектрите преди комбинирането им?

- При решаване на преопределената система чрез уравнение 31, имали ли случаи на линейна зависимост на колоните и невъзможност за изчисляване на обобщената обратна матрица на $S_{N,K}$?

Преценка на публикациите и личния принос на докторанта

Научните съобщения, свързани с дисертацията, включват 5 публикации, две от които в списанието Bulgarian Chemical Communications с импакт фактор 0.23. Досега не са забелязани цитати на публикациите. Личният принос на докторантката в изготвянето на резултатите и публикуването на всяко от научните съобщения е съществен.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дисертационният труд *съдържа научни и научно-приложни резултати, които представляват оригинален принос в науката* и отговарят на изискванията на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), Правилника за прилагане на ЗРАСРБ и съответния Правилник на ПУ „Паисий Хилендарски“. Представените материали и дисертационни резултати **съответстват** на специфичните изисквания на Химическия факултет за присъждане на образователната и научна степен 'доктор', приети във връзка с Правилника на ПУ за приложение на ЗРАСРБ.

Дисертационният труд показва, че докторант Слава Цонева **притежава** задълбочени теоретични знания и професионални умения по научна специалност Аналитична химия, като **демонстрира** качества и потенциал за самостоятелно провеждане на научно изследване.

Поради гореизложеното, убедено давам своята *положителна оценка* за проведеното изследване, представено в дисертационния труд, автореферата, постигнатите резултати и публикации, и *предлагам на почитаемото научно жури да присъди образователната и научна степен ‘доктор’* на Слава Христова Цонева в област на висше образование: *4. Природни науки, математика и информатика*, професионално направление *4.2. Химически науки* докторска програма *Аналитична химия*.

12.12.2017 г.

Изготвил становището:

доц. д-р Николай Кочев