

РЕЦЕНЗИЯ

на дисертационния труд “Компютърни методи за интерпретация на ^{13}C ЯМР спектри на природни съединения”, представен за присъждане на образователната и научна степен “Доктор” (професионално направление 4.2. Химически науки; направление Аналитична химия)
от Стефка Руменова Начкова, Химически Факултет, Пловдивски Университет “Паисий Хилендарски”

Рецензент: проф. дхн Васил Симеонов, Факултет по химия и фармация,
Софийски Университет “Св. Кл. Охридски”

Биографични данни за Ст. Начкова:

Стефка Начкова е родена през 1983 г. в Пловдив. През 2011 г. завършва висшето си образование в Химическия факултет на Пловдивския Университет „Паисий Хилендарски“ последователно с бакалавърска степен (2009 г.) и с магистърска степен по химия и специалност спектрохимичен анализ с отличен успех (през 2011 г.). От 2010 г. е на работа в Катедра по аналитична химия и компютърна химия като химик и като асистент За периода 2015 – 2017 г. е докторант в същата катедра.

Наукометрични показатели на Ст. Начкова, свързани с дисертацията:

Общият брой на включените в дисертационния труд публикации е 2 научни статии. Те са публикувани в едно списание с импакт фактор (*Chemistry of Natural Compounds*) и в едно българско списание без импакт фактор (*Scientific works: University of Ruse “Angel Kanchev”*). По този показател (брой публикации и използвани списания) показателите на Стефка Начкова са напълно в съгласие с изискванията на ПУ за прилагане на ЗРАСРБ. Нямам данни за забелязани цитати по публикациите. В представените материали липсват данни за участие в научни конференции с научните изследвания, включени в дисертацията. В публикациите, на които се основава дисертационният труд, Стефка Начкова е първи автор и в двете (с по трима съавтори). Колкото и относителен показател да е разположението на съавторите в един научен труд (практически всички автори са равностойни), все пак по прието негласно споразумение приносът се отчита и

с позицията в списъка от авторите. Приведената наукометрична статистика показва съществения принос на Ст. Начкова в осъществените научни изследвания.

Същност и приноси на дисертационния труд:

Актуалността на предлагания дисертационен труд не подлежи на съмнение, тъй като е свързана с няколко много важни обстоятелства като:

- изясняване на структурата на природни съединения, много от които имат важно практическо приложение; определяне на неизвестно по структура и състав съединение на базата на спектрални (в случая ^{13}C ЯМР спектри) данни чрез сравнение с бази данни на сходни съединения, описани в по-големи или по-малки спектрални библиотеки;
- използване на методите на компютърната химия (химическа информатика и хеометрия) за интерпретиране и класификация на получените аналитични (спектрални) сигнали;
- разглеждането на всяка изследвана система като комплексен обект, а не с метода на “проби” и “грешки”;
- разработване и сравняване на множество софтуерни подходи за интелигентен анализ на комплексни по характера си данни (обекти и променливи).

Стефка Начкова познава отлично възможностите на компютърната химия и хеометрията, на различните методи и алгоритми за програмиране на спектрални данни и благодарение на това си служи с комплексна система от програмни продукти за търсене в спектрални библиотеки. Веднага трябва да се отбележи, че задачата се свежда не само за идентифициране на непознати спектри чрез данни от библиотеки по информационен път, но и за създаване на класификационни алгоритми за работа с ЯМР спектри (чрез линеен дискриминантен анализ, невронни мрежи, чрез метода на най-близкия съсед). При прилагане на оригиналните подходи на докторанта се показва тяхната достъпност, което е от съществено значение за традиционната изследователска работа на химици органици и аналитици, биолози, както и за процесите на обучение на студенти и магистранти.

Дисертационният труд е оформен много грижливо в обем от 164 страници, подробен литературен обзор, включващ 194 източника. В дисертацията са включени 33

таблицы, 31 фигури и 3 приложения. Стилът на изложение на дисертационния труд допринася изключително за доброто възприемане на резултатите от изследванията.

Подробният и много пълен литературен обзор прави отлично впечатление със задълбочеността си и желанието да се обхванат възможно много използвани подходи в традиционно трудния компютърен и хеометричен анализ на ^{13}C ЯМР спектри. Много добре е приложена логичната последователност за решаване на поставените проблеми за структурно идентифициране на непознати структури на природни съединения чрез компютърни методи като последователност от:

- интерпретация на аналитичните сигнали и резултати (спектри),
- хеометрично структурно генериране от всички налични информационни източници (експериментални и теоретични) до възможност за предсказване на спектри на генерираните в предходния етап структури.

Така се постига намирането на желаната връзка между структура и свойства чрез компютърен подход.

Изследванията в дисертационния труд могат най-общо да се класифицират като създаване на оригинални методи за определяне и сравняване на ^{13}C ЯМР спектри на органични природни съединения с цел изучаване на структурата им и оптимизиране на съществуващи подходи за същите цели. Тук съществена роля има и софтуерното осигуряване на познатите подходи, което ги прави достъпни за решаване на конкретни задачи на инструменталната аналитична химия. В дисертацията са описани подробно много примери на приложение на създадените алгоритми за търсене и сравняване в спектрални библиотеки и за идентифициране на непознати съединения на базата на спектрални данни. Лично аз приемам този тип изследване за принос в областта на аналитичната и компютърната химия, тъй като предлага готов използваем програмен продукт (макар и основан на познати принципи) и способ за идентифициране на структури в спектър на непознато съединение.

Описанието на класификационните методи, използвани за целите на дисертационния труд, ме впечатли особено, тъй като това описание е много пълно, добре структурирано и разбираемо. Класификационни задачи в областта на аналитичната химия има достатъчно много, особено когато има нужда от интелигентен анализ на данни, например данни от мониторинг на обекти от околната среда (обект на един друг раздел на хеометрията, известен като екометрия).

Дисертацията изпълнява всички предпоставки да бъде изследване с приносен характер (научен и научно приложен) в областта на химическата информатика,

компютърната химия и аналитичната химия. В дисертационния труд има достатъчно аргументи за обобщение на основните приноси на изследванията, включени в дисертационния труд. Според мен приносите могат да се синтезират най-общо в следното:

1. Създаден е метод за библиотечно търсене на ^{13}C – ЯМР спектри в новосъздадената библиотека РНУСНЕМ спектри със специфициране на възможното за идентификация съединение.
2. Разработване и оптимизиране на функция на надеждност за конкретна спектрална библиотека, както и определяне на нейното информационно съдържание.
3. Предложена е оценка на ефективността на търсене по подобие, което е съществен елемент на изследването.

Според мен обобщението на приносите води до важното заключение, че реалните приноси на дисертацията трябва да бъдат класифицирани както като теоретични, така и като научноприложни с методичен характер. Необходимо е да се отбележи, че всички основни етапи на изследванията и обобщенията са представени в автореферата.

Забележки и коментари

Дисертационният труд съдържа достатъчен брой приносни моменти по отношение на цялостното изследване на Стефка Начкова. Както към всяко друго научно изследване, и тук могат да се направят някои забележки и коментари. В конкретния случай те могат да се обобщят както следва:

1. Много бих искал да разбера личното отношение на докторанта към следното: при разработването на алгоритми за библиотечно търсене на спектрални данни се налага използването на предварителни класификационни и проекционни етапи, имащи за цел откриване на структурни особености не на химичните съединения, включени в изследването, а на техни специфични параметри (дескриптори); изборът на ефективни дескриптори може да стане по формални (теоретично обосновани) подходи, но чрез хеометрични стратегии, например за класифициране на променливи с определена тежест (методи с предварително и без предварително обучение). Какво е Вашето мнение за ефективността на двата подхода и имате ли някакъв критерий за сравнението им?

2. Дали е възможно да постигнете ефективна класификация на непознат ^{13}C – ЯМР спектър към предварително обучена (включена в библиотека) серия от спектри само чрез хеометрична стратегия – например метод на частично най-малките квадрати – дискриминантен анализ или саморганизиращи се карти на Кохонен?

Заключение:

Общото впечатление е, че дисертационният труд е задълбочено теоретично и научно – приложно изследване с интересни научни приноси. За мен лично, като човек, донякъде пристрастен към ролята на хеометрията в модерното познание, работата е завършена и отговаря изцяло на представите ми за дисертация за присъждане на образователната и научна степен “доктор”.

Направените забележки и зададените въпроси имат единствената цел да изяснят някои предпоставки при осъществяване на изследването, както и получените резултати. Те в никакъв случай не намаляват достойнствата на дисертационния труд.

От всичко казано дотук мога да обоснова заключението си да гласувам „за” присъждането на образователната и научна степен „доктор” на Стефка Руменова Начкова.

София, 31.03.2018 г.

Рецензент:

/проф. дхн В. Симеонов/