

СТАНОВИЩЕ

от д-р Марин Иларионов Рогожеров, доцент в ИОХЦФ-БАН

на дисертационен труд за присъждане на научната степен „доктор на науките“
в област на висше образование: 4. „Природни науки, математика и информатика“
професионално направление: 4.2. „Химически науки (Аналитична химия)“

Автор: доц. д-р Пламен Николов Пенчев - Пловдивски Университет „ Паисий Хилендарски“

Тема: *Компютърна интерпретация на молекулни спектри с цел разкриване на структурата на органични съединения*

Авторът е предоставил комплект от материали на хартиен и електронен носител, както и необходимите документи в съответствие с чл.45 (4) от Правилника за развитие на академичния състав на ПУ.

Дисертантът е включил общо 24 публикации в дисертационния труд, от които 12 са публикувани в списания с импакт фактор. Забелязани са общо 103 цитата на приложените статии. Представените наукометрични данни са напълно в съответствие с изискванията на ХФ на ПУ за подобен дисертационен труд.

От биографичните данни, а също и от самата дисертация, е видно, че дисертантът е специализирал при редица известни учени като Курт Вармуца, Мортън Мънк и Клаус-Питър Шулц, както и че е работил съвместно с проф. Георги Андреев. Контактът с тези изследователи е повлиял благоприятно върху разработването на разглеждания дисертационен труд.

Темата на дисертацията касае разкриването на структурата на органични съединения с помощта на компютърна интерпретация на молекулни спектри. Решаването на такъв проблем, сега и в миналото, с помощта на естествения интелект е била винаги основна и актуална тематика за химика, тъй като молекулната структура има каузална връзка със свойствата на изследваните съединения. С развитието на компютърната техника обаче стана възможно бързо да се обработват и надеждно да се съхраняват данни, получени от съвременните спектрални методи. Този факт представлява реална предпоставка за създаването на големи библиотеки от спектрални данни и същевременно е сериозно предизвикателство за получаването на надеждна информация за изследвана неизвестна молекулярна структура с помощта на компютърни алгоритми. Разработването на подходящ евристичен софтуер за такива цели намира широко приложение при бързата идентификация и анализа на различни органични съединения във фармацевтичната, химическата, козметичната индустрии, както и в екологията, изкуството, криминалистиката и превенцията от терористични атаки.

Основните задачи, формулирани от автора в увода на дисертацията, са напълно релевантни, а именно:

1. *Интерпретация на измерените (УВ, ИЧ, Раман, Мас и ЯМР) спектри на неизвестното съединение.*
2. *Структурна генерация с използване на резултатите от етап 1 и друга химична информация.*
3. *Предсказване на спектрите на структурите, генерирани в етап 2 и тяхната подредба по надеждност, изчислена с помощта на тези спектри.*

Направеният изчерпателен литературен обзор в началото на дисертацията свидетелства за доброто познаване на проблема и на неговото състояние. Показани са трудностите при т.н. автоматична интерпретация на Мас-, ИЧ и Раман както и на едномерни 1Н- и 13С ЯМР спектри. Разгледани са интересни подходи за определянето на молекулната формула само с ИЧ, 1Н- и 13С-ЯМР спектри с помощта на различни компютърни системи, както и за подобряване методите за библиотечно търсене и оценка на ефективността на тези методи. Дискутирани са

трудностите при осъществяването на многокомпонентен анализ, при прилагането на методи за спектрално разделяне, както и при използването на изкуствени невронни мрежи и др. методи.

За целите на дисертацията е разработена комплексна система от програмни продукти, включваща методи за търсене в спектрални библиотеки, регресионен анализ на спектри, определяне на максимална обща структура и класификация на молекулни спектри с помощта на различни класификационни алгоритми: линеен дискриминантен анализ, изкуствени невронни мрежи и методите на максимална обща подструктура и на най-близките съседи. Всички тези подходи, критично оценени от автора, използвани и доразвити от него, са напълно удачни, но както той е забелязал, не могат да бъдат конкурентни на естествения интелект. Те могат в значителна степен да го улеснят и подпомогнат в търсенето на правилната химическа структура.

Дисертацията има класическа структура, като съдържа следните части: „Увод“, „Литературен обзор“, „Спектроскопски измервания и софтуер“, „Резултати и обсъждане“, „Обобщения на резултатите и приноси“ и „Литература“.

Литературният обзор (глава първа) е обширен и добре насочва читателя към целите и задачите на дисертацията, но считам, че в начало му (стр.7 и 8) е дадено контекстуално нецелесъобразно определение на Вибрационната спектроскопия¹. Глава втора „Спектроскопски измервания и софтуер“ третира обработката на значителни масиви от спектрални данни във връзка със създадените ИЧ, Раман, ATR, УВ-Вид и 13С-ЯМР спектрални библиотеки, което може да се оцени като създаване, обогатяване и разширяване на библиотеките с нови спектрални бази данни.

Програмираните седем метода за търсене в ИЧ спектрални библиотеки, от които три са за търсене по ивици (пикове) и четири - за търсене по спектрална крива, както и предложеният метод за търсене по скаларно произведение на пикови таблици, представляват известна новост. Изследваният стандартен метод за анализ на смеси чрез изваждане на ИЧ спектри с предложените четири евристики за подобряване на идентификацията на компонентите на смеси може да е ефективен само ако процедурата на изваждане се извършва винаги надеждно при наличието на коректна базова линия на изследваните спектри. Дисертантът е разработил два метода - на най-близките съседи и на използване на концепцията за максимална обща подструктура (МОП), като в първия известна новост представлява използването на вероятности при оценката на надеждността на набора от подструктури. Приложението на МОП е оптимизирано по няколко параметъра и е предложен нов ранг за сортиране на подструктурите при търсене на спектъра на органично съединение в библиотека от ИЧ спектри. Предложен е и метод за кодиране на ароматност и тавтомерност на връзките, както и схема за отнасяне на сигналите в получените подструктури при интерпретационно търсене в 13С-ЯМР библиотеки от напълно отнесени спектри. Изследвана е връзката между спектралното и структурното подобие за ИЧ и Раман спектри посредством създадена съвместна база от данни от едни и същи съединения.

В повечето статии, посветени на коментирания по-горе методи, и публикувани в международни списания с импакт фактор, както и в български списания, дисертантът е първи автор, а в останалите е втори автор и много рядко - трети или четвърти. Повечето от резултатите в дисертацията са постерно представени на 14 конференции, което, в съгласие с приложената декларация от проф. Г. Андреев, свидетелства, че идеите в този труд са личен принос на дисертанта.

¹ Подходящото определение според мен е: *Вибрационната спектроскопия е бърз и надежден метод, който дава информация за наличието на определени функционални групи, изграждащи изследваното съединение.*

В желанието си да отрази и дискутира по-сериозна част от резултатите в дисертационния труд, авторът е представил автореферат с кратък увод, като отсъства специалната част, в която обикновено се излагат основните принципи на използваните методи. Тази част нетрадиционно присъства в раздела „*Резултати и обсъждане*“. Вероятно авторът е счел, че читателят по този начин ще може по-лесно да анализира получените резултати.

Моята препоръка към дисертанта в теоретично отношение е да усъвършенства методите за квантифициране (т.е. тотално разделяне на спектралните ивици) за в бъдеще, тъй като търсенето по пикови таблици може да се окаже по-ефективно и по-бързо от сравняването на отделните спектрални криви.

Следващата ми препоръка в приложен аспект е да се разширят и използват вече създадените спектрални библиотеки за идентификация и анализ на български природни продукти.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дисертационният труд съдържа научно-приложни резултати, които представляват оригинален принос в науката и отговарят на всички изисквания 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 напълно съответстват на специфичните изисквания на Факултета по Химия, приети във връзка с Правилника на ПУ за приложение на ЗРАСРБ.

Дисертационният труд показва, че дисертантът доц. д-р Пламен Николов Пенчев притежава задълбочени теоретични знания и професионални умения по научната специалност „Аналитична химия и компютърна химия“ и демонстрира качества и умения за провеждане на изследвания с получаване на оригинални научни приноси.

Въпреки наличието на известни слабости в дисертационния труд и автореферата, коментирани по-горе, убедено давам своята положителна оценка на проведеното изследване, постигнатите резултати и приносите, и предлагам на почитаемото научно жури да присъди научната степен „доктор на науките“ на доц. д-р Пламен Пенчев в област на висше образование: 4. „Природни науки, математика и информатика“; професионално направление: 4.2. „Химически науки (Аналитична химия)“ .

София 14.08.2016 г.

Изготвил становището:.....

/доц. д-р. Марин Рогожеров/