

РЕЦЕНЗИЯ

на дисертационния труд “Компютърна интерпретация на молекулни спектри с цел разкриване на структурата на органични съединения”, представен за присъждане на научната степен “**Доктор на науките**” (професионално направление 4.2. Химически науки; направление Аналитична химия)
от доц. д-р Пламен Николов Пенчев

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

Биографични данни за доц. П. Пенчев:

Г-н Пламен Николов Пенчев е роден през 1962 г. През 1980 г. завършва Националната природоматематическа гимназия „Акад. Л. Чакалов” в София, паралелка по химия. За периода 1982 – 1989 г. следва последователно във ВХТИ (сега ХТМУ) – София и Пловдивски Университет „Паисий Хилендарски”, като завършва висшето си образование като магистър по химия и учител по химия и химични технологии. От юни 1989 г. до днес работи в ПУ „Паисий Хилендарски”, заемайки последователно академичните длъжности химик, асистент, старши асистент, главен асистент и доцент. Получава образователна и научна степен „доктор” през 1998 г. За периода от 1989 г. насам д-р Пенчев се е утвърдил като активен преподавател и изследовател, уважаван специалист у нас и в чужбина в областта на компютърната химия и химическата информатика. Убедително доказателство за това са наукометричните показатели, както по отношение на цялостната му научна дейност, така и тези, които са свързани с представения дисертационен труд. Доц. Пенчев е била стипендиант и гостуващ изследовател в Германия и Австрия, а за периода 2001 – 2006 г. работи като изследовател в Щатския Университет на Аризона, САЩ.

Наукометрични показатели на д-р П. Пенчев, свързани с дисертацията:

Общият брой на включените в дисертационния труд публикации е 24 научни статии. От тях 12 са в реномирани международни научни списания с импакт фактор (*Spectroscopy Letters, Analytica Chimica Acta, Journal of Chemical Information and*

Modeling, Computers and Chemistry и др.), като към този брой доц. Пенчев прибавя още 3 публикации в български списания без импакт фактор, но с международно цитиране. Такова приравняване е формално и не е възприето изцяло, но аз приемам тази претенция, макар че показателите на доц. Пенчев са напълно в съгласие с изискванията на ПУ и без тези 3 публикации. В специализирани научни списания и български научни списания без импакт фактор са представени още 9 научни публикации. Трудовете са цитирани 103 пъти, което също е важен показател за високо научно ниво. В представените материали липсват данни за участие в научни конференции с научните изследвания, включени в дисертацията. В представените 24 публикации, на които се основава дисертационният труд, доц. Пламен Пенчев не представя самостоятелна работа, но 12 пъти е първи автор, 9 пъти – втори автор и 3 пъти –трети автор. 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 донякъде и с позицията в списъка от авторите. Приведената наукометрична статистика убедително показва приноса на д-р Пенчев в осъществените научни изследвания. В този смисъл е интересно да се спомене, че в трудовете си доц. Пенчев има предимно от един до двама съавтори, така че може да се твърди, че той има основен и много съществен принос в реализацията на извършените изследвания. Много убедително доказателство за качеството на публикуваните материали по дисертационния труд са споменатите вече над 100 цитата по тях, като всички те са от чужди автори, като са цитирани практически над 60 % от научните публикации, включени в дисертационния труд. Просто изчисление показва един висок коефициент на цитируемост (над 4). Така дисертационният труд не само покрива, но и значително надхвърля препоръчителните изисквания за наукометрични показатели на за присъждане на научната степен „доктор на науките”, съгласно критериите на Пловдивския Университет.

Същност и приноси на дисертационния труд:

Актуалността на предлагания дисертационен труд е несъмнена и тя почива на няколко съществени предпоставки, които се оказват движещите механизми на модерното познание:

1. Темата на дисертацията е свързана с разкриване на структурата на органични съединения, което представлява важен елемент в търсенето на взаимни връзки между химическа структура и свойства на химични съединения;
2. Решаването на комплексния проблем със структурата на органични съединения, който изисква по принцип използването и коректното интерпретиране на аналитичните сигнали от различни инструментални методи (например мас-спектрометрия, инфрачервена спектроскопия, Раманова спектроскопия, ядреномагнитен резонанс, редица методи на електронна и атомна микроскопия и т.н.), е постигнато чрез методите на компютърната химия и интелигентен анализ на спектроскопски данни чрез създаване на оригинални програмни продукти и методи за класификация, които са обект на химическата информатика и хемометрията;
3. Подходът при изследванията в дисертационния труд почива на вече станалата класическа предпоставка на модерната хемометрия, че всяка система трябва да се разглежда и интерпретира в своята цялост, т.е. като многопараметричен обект, чието познаване изисква не изследване чрез “проби и грешки”, а многовариационни математически методи.

Д-р Пенчев познава отлично възможностите на компютърната химия и хемометрията, на различните методи и алгоритми за програмиране на спектрални данни и благодарение на това разработва 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 молекулни спектри (чрез линеен дискриминантен анализ, невронни мрежи, чрез метода на най-близкия съсед). Така се стига до два много важни резултата: създаване на нови спектрални библиотеки и попълване на вече познати колекции от спектри, както и на предлагане на оригинални програмни продукти за идентификация на молекулни спектри. Важно предимство на създадените продукти е тяхната достъпност, което е от съществено значение за традиционната изследователска работа на химици органици и аналитици, както и за процесите на обучение на студенти, магистранти и докторанти.

Дисертационният труд е оформен изключително грижливо и впечатлява с обема си (313 страници) и особено с подробния литературен обзор, включващ 815 научни статии, 60 монографии и книги, 19 програмни продукта, ръководства и отправки към Интернет страници. В дисертацията са включени 68 таблици, 53 фигури и 45 уравнения.

Стилът на изложение на дисертационния труд допринася изключително за ефектното възприемане на резултатите от изследванията.

Прави впечатление обширният литературен обзор (над 80 страници), включващ над 1000 източника и покриващ авторитетно хеометричните подходи и алгоритми за идентифициране и сравняване на спектри на органични съединения, като за много уместно намирам разглеждането на проблемите за разкриване на структурата на органичните 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. Това е ръководното начало и на литературния обзор, и на изследванията на доц. Пенчев.

Изследванията в дисертационния труд могат удобно да се класифицират като създаване на оригинални методи за определяне и сравняване на спектри на органични съединения с цел изучаване на структурата им и оптимизиране на съществуващи подходи за същите цели. Тук съществена роля има и софтуерното осигуряване на познати 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 при 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 непознат спектър.

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. Доц. Пенчев не е представил в отделен

писмен документ самооценка на приносите си. Но 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. Създаване на спектрални библиотеки за инфрачервени, Раманови и ултравиолетови спектри, което е важен елемент в работата по интерпретация на спектри, по идентификация на неизвестни съединения и път за предсказване на структури и свойства. Тук могат да се отнесат и оригиналните методи за търсене в библиотеки от инфрачервени спектри.
2. Осигуряване на възможност за анализ на смеси от вещества, анализирани с инфрачервена спектроскопия чрез хеометричен анализ, което според мен е съществен елемент в приложението на т. нар. многовариационно калибриране за аналитични цели (например във фармацевтичния анализ).
3. Създаден е метод за библиотечно търсене на C^{13} – ЯМР спектри с кодиране по ароматност и тавтомерност на връзките, т.е. специфициране на възможното за идентификация съединение.

Според мен обобщението на приносите води до важното заключение, че реалните приноси на дисертацията трябва да бъдат класифицирани като теоретични 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

Няма съмнение, че в дисертационния труд са постигнати значителен брой приноси моменти по отношение на цялостното изследване на доц. Пенчев. 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. 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). Така могат да се открият различни групи на подобие на дескриптори, чието интерпретиране помага за извеждане на най-важните за алгоритъма параметри. Могат да се използват хеометрични

- методи като нейерархичен кластерен анализ (използващ k-NN подход), факторен анализ, проекционно преследване, дискриминантен анализ. Има ли смисъл от подобни подходи във Вашите изследвания настоящия дисертационен труд и то по отношение на подбор и ранжиране на възможни спектрални дескриптори?
2. Получаваните структурни представи за определен клас съединения при идентификация на спектър на непозната структура имат ли необходимост от някакъв вид специфично валидиране или могат да се предлагат в няколко възможни варианта с изчислена степен на достоверност?

Заклучение:

Общото впечатление е, че дисертационният труд е пълно и задълбочено теоретично и научно – приложно изследване със сериозни научни приноси. За мен лично, като човек, донякъде пристрастен към ролята на компютърната химия и хеометрията в модерното познание, работата е напълно завършена и отговаря изцяло на представите ми за дисертация за присъждане на научната степен “доктор на науките”.

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, който е оценен по достойнство и от международната колегия чрез значителния брой цитати. Освен това с цялостната си дейност на изследовател и преподавател доц. д-р Пламен Пенчев се е доказал отдавна като изграден и авторитетен учен.

От всичко казано дотук си мога да обоснова убеденото си заключение да гласувам „за” присъждането на научната степен „доктор на науките” на доц. д-р Пламен Николов Пенчев.

София, 31.07.2016 г.

Рецензент:

/проф. дхн В. Симеонов/