

РЕЦЕНЗИЯ

от проф. дхн **Ирини Дойчинова**,

Фармацевтичен факултет, Медицински университет - София

ОТНОСНО: дисертационния труд на **Гергана Илиева Танчева**, задочен докторант в катедра „Аналитична химия и компютърна химия“ на Химическия факултет при Пловдивския университет „Пайсий Хилендарски“, на тема: „Приложение на методите на химичната информатика при мултикомпонентни субстанции и наноматериали“ за присъждане на образователна и научна степен „доктор“ в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки, докторска програма „Теоретична химия“, научен ръководител: доц. д-р Николай Кочев

Дисертационният труд "Приложение на методите на химичната информатика при мултикомпонентни субстанции и наноматериали" разглежда една изключително актуална и иновативна област, свързана с използването на методи на химичната информатика за обработка, анализ и моделиране на сложни химични обекти. Темата е многопластова, като обхваща мултикомпонентни субстанции, наноматериали и материали с подобрени функционалности (AdMa), което подчертава интердисциплинарния характер на изследването. Включването на FAIR принципите за управление на данни (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) е особено релевантно в контекста на международните усилия за стандартизиране и ефективно управление на научната информация.

Дисертационният труд е написан на 196 страници. Съдържа 7 раздела: литературен обзор, цел и задачи, собствени изследвания, заключения, научни съобщения, ресурси и учебна дейност по дисертацията, библиография и приложения. Онагледен е с 6 таблици и 65 фигури. Библиографията включва 246 заглавия.

Литературният обзор обхваща дефиниции, класификации и регулации, свързани с мултикомпонентните субстанции и наноматериали. Описани са детайлно методите за представяне, съхранение и обработка на химични данни. Направен е изчерпателен преглед на моделирането на количествената връзка структура/активност. Обзорът е добре структуриран и завършва с изводи, които насочват към целта на дисертационния труд.

Целта на дисертационния труд е прилагане на семантичен модел за обработка и съхранение на информация за мултикомпонентни субстанции, наноматериали и нови материали, базиран на FAIR принципите. Дефинирани са 16 задачи за постигането на тази цел, които биха могли да се обединят в 4-5.

В раздела „Собствени изследвания“ Гергана прилага семантичен модел за представяне на химични субстанции и наноматериали, който отговаря на принципите FAIR, CARE и TRUST. Успешното интегриране на този модел в базата данни eNanoMapper демонстрира неговата приложимост и значимост. Считаю, че този модел се явява значителен принос към стандартизацията на химичните данни. Не мога да оценя техническия принос в работата на докторанта, но приложимостта на разработения модел, демонстрирана чрез конкретни примери и съвместни изследвания в международни научни проекти, затвърждава убеждението ми за практическото значение на модела.

Предложена е сериализацията на данни за мултикомпонентни субстанции, която използва формати като JSON, RDF, ISA и NeXus, които улесняват интеграцията и анализите. Разработена е софтуерна библиотека с отворен код Ambit-SLN за обработка на информация за химични субстанции чрез линейна нотация SLN (SYBYL Line Notation), която предоставя богат синтаксис за описание на химични структури, поддържащ макро и Markush атоми, заявки за търсене и комбинаторни библиотеки. Ambit-SLN е интегрирана с популярни формати (SMILES, SMARTS), което я прави гъвкава и подходяща за нуждите на академията, индустрията и регулаторните агенции.

Разработени са електронни бележници, които автоматизират обработката, филтрацията и визуализацията на данни за оценка на риска от наноматериали, използвайки базата eNanoMapper. Първият бележник извлича данни чрез REST API заявки, позволява персонализирана филтрация по субстанции, експериментални протоколи и параметри (напр. концентрация, време на третиране) и визуализира резултатите в интерактивна 3D графика. Вторият бележник оценява пълнотата на данните, сравнявайки терминологията от шаблони и базата, и идентифицира липсващи или сгрешени термини чрез алгоритъм за оценка на подобие по разстояние на Левенщайн. Тези инструменти улесняват структурирането и анализа на данни за нанобезопасност.

Предложена е методология за обработка на данни от високопроизводителен скрининг (HTS) на токсичност на химични вещества и наноматериали, базирана на принципите на New Approach Methodologies (NAM) и 3Rs (Replacement, Reduction and Refinement). HTS използва *in vitro* анализи за оценка на токсичността чрез комбинация от експерименти с различни времеви точки, концентрации и клетъчни линии. Традиционният подход за измерване на GI50 е заменен с Tox5-Score, който интегрира множество параметри в общ токсикологичен приоритетен индекс, визуализиран чрез диаграми тип „пай“.

В кратката дискусията на дисертацията Гергана анализира критично и обобщава различните етапи на научното изследване, очертава важността на прилагането на FAIR принципите за обработка на данни за сложни химични събстанции и наноматериали,

демонстрира предимствата на разработените софтуерни приложения, електронни бележници и добавки, които улесняват обработката, сериализацията и моделирането на токсикологични и други химични данни. Липсват обаче разглеждане на възможните ограничения на предложените подходи и методи и насоки за тяхното преодоляване.

Към дисертацията са дефинирани две групи приноси: научни и научно-приложни. В научните приноси са включени прилагането на семантичен модел *Ambit/eNanoMapper* за FAIR-ификация на данни, създаването на прототип за идентификатор на наноматериали, базиран на SLN нотация, и интегрирането на данни от високопроизводителен скрининг с метаданни, включващи и *Tox5-Score* – индекс за токсикологично приоритизиране. В научно-приложните приноси са включени разработените специализирани софтуерни инструменти за обработка, сериализация и моделиране на токсикологични и химични данни. Приемам напълно така дефинираните приноси.

Трудовете, свързани с дисертационния труд, включват две публикации в списания с IF, от които една в Q1 (25 т.) и една в Q2 (20 т.), и една глава от книга (15 т.). Сумарният брой точки е 60, при необходими 30 т. съгласно Правилника за РАС в ПУ и Допълнителните изисквания към научната и преподавателската дейност на кандидатите за придобиване на научна степен и за заемане на академични длъжности в Химически факултет по професионални направления 4.2. Химически науки и 1.3. Педагогика на обучението по химия (https://procedures.uniplovdiv.bg/docs/additional/hf_r.pdf). Смущава ме фактът, че Гергана не е първи или поне втори автор в тези трудове, което би подчертало нейния личен принос в тяхното разработване. Едната от публикациите има 16 цитата. Резултатите от дисертационния труд са докладвани на 7 международни и 5 национални научни форума. Финансирани са от 5 международни проекта.

Прави впечатление активната учебна дейност на Гергана през годините на докторантурата ѝ. Тя е завършила успешно 6 курса по програмиране в страната и чужбина. Считаю, че тази подготовка и прилагането на новите знания в решаването на конкретни научни задачи изграждат Гергана като добър специалист по биоинформатика.

Давам положителна оценка на дисертационния труд на Гергана Илиева Танчева и като член на научното жури гласувам убедено да ѝ бъде присъдена образователната и научна степен „Доктор“ в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.2. Химически науки, докторска програма по теоретична химия.

29.11.2024 г.

Изготвил рецензията:

София

(проф. Ирини Дойчинова)