

РЕЦЕНЗИЯ

по конкурс за "Професор" за нуждите на лаборатория "Инженерно – химична системотехника" към ИИХ-БАН по научната специалност 02.10.09 "Процеси и апарати в химичната и биохимичната технология", обявен в ДВ, брой 87/05.11.2010 г.

с кандидат: доц. д-р инж. Румяна Петрова Статева
Институт по инженерна химия при БАН
Лаборатория "Инженерно-химична системотехника"

Рецензент: Проф. д-р инж. Стоян Колев Стоянов,
Химикотехнологичен и металургичен университет - София,
бул. "Кл. Охридски" 8, София 1756, stoyan1@uctm.edu
избран за рецензент на 18.02.2011 г., Зап. No 70/21.02.2011-ИИХ-БАН

1. Обща част

Конкурсът е обявен от Институт по инженерна химия при БАН (ИИХ-БАН) - София по научната специалност 02.10.09 "Процеси и апарати в химичната и биохимичната технология" за нуждите на Лаборатория "Инженерно-химична системотехника".

За краткост в рецензията си няма да използвам навсякъде научната степен и научното звание на кандидата.

Доц. д-р Румяна Статева е завършила с отличие висше образование през 1974 г., специалност „Основни процеси в химическите производства и химическа кибернетика" в катедра Химическа кибернетика, МХТИ "Д. И. Менделеев", Москва, Русия.

През 1982 г., под ръководството на акад. В.В. Кафаров и проф. д-р В.П. Мешалкин е защитила дисертация за к.т.н. (д-р).

От 1974 г. Румяна Статева работи в ЦЛАТОХТ, БАН, (сега Институт по инженерна химия), последователно като технолог и научен сътрудник. През м. януари 1993 г., след конкурс, се хабилитира като ст.н.с. II ст.

Специализирала е в САЩ (1978 г. и 1982-1983 г.), във Великобритания (1994, 1997 г.) и в Испания (2003 г.).

След хабилитирането си е работила основно в областта на инженерно-химичната термодинамика. Работила е съвместно с много престижни научни центрове във Великобритания Чехия, Унгария, Испания, Португалия, Германия, Израел и Мексико. Ръководила е и е участвала в национални и междуакадемични научни проекти, финансирани от ФНИ; Британския Съвет в България; Кралското Дружество на Великобритания; програмата COST и по споразумения на БАН с Чехия, Унгария и Израел.

В настоящия конкурс за професор Р. Статева участва само с научни активи и с научна продукция от 62 труда, публикувани след хабилитирането и за ст. н. с. II ст. през м. януари 1993 г.

2. Обща характеристика на научната дейност на кандидата

Броят на представените и приети за рецензирани от мен трудове е 62. в Табл. 1 са дадени основните показатели за публикациите.

Таблица 1. Представени научни трудове за “професор”

Общо	Самостоятелни	I-ви автор	II-ри автор	Следв. авт.	Научни статии	Публ. доклади	С Импакт фактор	Публ. у нас	В чужбина	На бълг. език	На чужд език
62	1	5	18	38	46	16	40	2	60	0	62

Всички научни трудове са на английски език, публикувани са основно в чужбина (60), 46 са научни статии, от които 40 с Импакт фактор, Публикуваните доклади са 16.

Кандидатката е разделила трудовете си в групи, които аз ще цитирам по нататък с номерата им в групите. Групите са следните: група 1.1.1 – публикации в списания с Импакт фактор (No. 1-40); група 1.1.2 - публикации в списания без Импакт фактор (No. 41-45); група 1.1.3 – обзорни статии (No. 46); група 1.2.1 - публикувани в пълен текст доклади от международни научни форми (No. 1-16);.

Основните научни, научно-приложни и приложни постижения на кандидатката са в една област – инженерно - химичната термодинамика. В своите научни изследвания, отразени в публикациите, Р. Статева се е стремела да създаде една ефективна термодинамична структура (рамка) за надеждно идентифициране и моделиране на сложното фазово равновесие на многокомпонентни неидеални системи, което протича с (или без) химична реакция, в широк диапазон от температури и налягания (тук са научните и приноси) и приложението на тази структура за моделиране, оптимизиране и проектиране на конкретни процеси и технологии (научно – приложните приноси).

Създадената термодинамичната рамка (ТР), включва модели, алгоритми и числени методи, създадени в подходяща софтуерна среда. Термодинамичната рамка е с три йерархични нива, които си взаимодействат:

(а) Методи за определяне на броя и вида на равновесните фази и за изчисляване на разпределението на компонентите във фазите при зададени стойности на някои от параметрите, основно температура и налягане. В този модул се включват Методите за анализ на термодинамичната устойчивост на многокомпонентни системи. Разглежда се и необходимостта да се декомпозира на няколко равновесни фази, ако е неустойчива. Включват се и методите за идентификация на фазовата конфигурация, т.е. броя и вида на равновесните фази при декомпозиране на неустойчивата, характеризираща се с минималната свободна енергия на Gibbs;

(б) База от термодинамични модели за многокомпонентни неидеални системи в широки диапазони на изменение на температури и налягания.

(в) Методи за изчисляване на термофизичните свойства на чисти съединения в широк диапазон от температури и налягания. В случаите, когато тези свойства не могат да се изчислят са предложени ефективни методи за надеждно предсказване на термофизичните свойства.



След първото си хабилитиране през 1993 г. Р. Статева е работила върху създаване на една цялостна термодинамична структура (рамка) и на стратегия за нейното приложение за моделиране и проектиране, както на традиционни процеси в нефтопреработването и нефтохимията, добива на природен газ, във фармацевтичната, хранително-вкусовата и биохимичната промишлености и др., а така също и на нови процеси, щадящи околната среда, каквито са биотехнологиите, нанотехнологиите, свръхкритичната екстракция, мембранните разделителни процеси, производство на био-горива, и др. По такъв начин кандидатката обвързва научните си изследвания в един цялостен проблем, който е изключително важен за инженерно-химичната термодинамика и за много голям брой процеси и производства с голямо практическо значение, както и за опазването на околната среда. Тази научна дейност е отразена в нейните и публикации.

За еднозначно решаване на идентификационната задача е разработен нов ефективен алгоритъм [1.1.1. - No. 1,2,5,8]. Предложена е оригинална модификация при съставяне на „функцията на тангентите“, първоначално предложена от Baker и Michelsen. Модификацията е валидна за произволен краен брой компоненти. Предложен е алгоритъм за намиране на всички „нули“ на функцията. Предложеният метод с малки модификации, може да се използва за различни фазови равновесни системи. Новата целева функция в „метода на тангентите“, предложена от Статева, претендира за намиране на почти всички „нули“, като се има предвид практически все още не решения проблем за намиране на глобален минимум. Създадената термодинамична рамка е приложена успешно при моделиране на фазовото равновесие на Т-Т-Г системи при възстановяване на масла, преработване и транспортиране на природен газ, процеси при добив на петролни продукти и др. [1.1.1. - No. 1,3].

Предложен е обобщен робастен алгоритъм за моделиране и изчисления на химично и фазово равновесие на широк клас термодинамични модели [1.1.1. - No. 4].

Един от съществените проблеми в общата задача на разработената от Статева термодинамична рамка при идентификацията на фазовата конфигурация е намирането на глобалния минимум на Гибсовата свободна енергия. Необходимо е намиране на глобалния минимум на модифицираната функция на „тангент-план“ критерия. За тази цел на базата на оптимизационния метод на Voender за търсене на глобален екстремум е създаден модифициран стохастичен метод [1.1.1. - No. 14; 1.1.2. - No. 43], използван също в [1.1.1. - No. 5]. Въведени са две промени в алгоритъма, отстранено е най бързото спускане от оригиналния алгоритъм и квази-Нютоновата процедура, които са заменени с методи на случайните направления. Изследването на алгоритъма с литературни примери е дало обещаващи резултати. По същество и методът на Voender, и модифицирания метод са полу-генетични алгоритми. Бих препоръчал на Р. Статева да пробва и да сравни резултатите с някой от съвременните генетични алгоритми, дори и с най-стария – мултикомплекса на M.Vox.

Оценявам като значителен принос направеното за първи път от Р. Статева математическо доказателство, че критерият за термодинамична устойчивост „AREA“ удовлетворява необходимите и достатъчни условия за равновесие на двукомпонентни двуфазни системи [1.1.1. - No. 6]. В труд [1.1.1. - No. 26] е предложена нова обобщена функция на критерия за термодинамична устойчивост „AREA“.



В трудовете на Р. Статова са предложени и изследвани редица нови и ефективни подходи за решаване на изотермичния-изобарен флеш проблем [1.1.1. - No. 1,2,5,8,15,36; 1.1.2. - No. 41]. Анализирани са преимуществата, ефективността, надеждността и по-широката област на приложение на създадените нови методи за решаване на изотермичния флеш проблем, в сравнение със съществуващите [1.1.1. - No. 15].

Предложен е и е проверена ефективността и надеждността на нов подход за оценка на термодинамични модели за описване на *PVT* свойствата на флуидите и системите при високи и екстремни налягания [1.1.1. - No. 13,16], позволяващ провеждането на сравнителен критичен анализ на недостатъците и ограниченията им в сравнение с подхода за моделиране на основата на глобалната фазова диаграма [1.1.1. - No. 13,16]. Надеждността на метода е демонстрирана на примери от практиката (например, при производството на екологично-съвместими компоненти за дизелови горива).

Предложена са оригинални модификации на термодинамични модели като: уравнение на състоянието заедно с модел на груповите съставляващи в релацията, отчитаща силите на отблъскване [1.1.1. - No. 20]; термодинамичния модел A-UNIFAC чрез въвеждане на температурно-зависим член в израза за асоцииращата енергия [1.1.1. - No. 30; 1.2.1. - No. 8]; термодинамичния модел UNIQUAC, позволяваща отчитането на полидисперсността на големи полимерни молекули [1.1.1. - No. 22].

Предложени са нови подходи и са изведени корелации, които надеждно предсказват нормалните температури на кипене, критичните параметри и плътностите на въглеводороди [1.1.1. - No. 7,12]. Показано е преимущество на разработените методи спрямо някои от широко използваните в съвременните симулатори, като е сравнено влиянието на неопределеностите в стойностите на критичните параметри и температурите на кипене на чисти компоненти, предсказани с различните други методи на примера на проектирането на дестилационни колони [1.1.1. - No. 11].

Обоснован е оригинален принцип за създаване на нови методи на база на взаимната корелация на свойствата на различни структури, идентифициращи и използващи бази данни от структурно-близки съединения [1.1.1. -No. 19,23,25,28-29,32,38; 1.2.1. - No. 1,2,3,4,5,6,7,13,14,15]. Методите са приложени за изчисляване на температурно-зависими свойства и свойства, свързани с фазовото равновесие [1.1.1. - No. 23,25,28,29].

Създадена е ефективна, надеждна и робастна ТР, включваща в едно трите основни елемента, за моделиране на фазовото равновесие на неидеални, силно асиметрични многокомпонентни системи, протичащо с (или без) химично равновесие, в широки интервали на температурата и налягането [1.1.1. - No. 1,2,5-8,12-14,16,19-20,22-23,25-30,32,36,38; 1.1.2. - No. 41,43].

Възможностите, положителните страни и областите на приложение на създадената термодинамична рамка са демонстрирани на голям брой примери от практически интерес за различни процеси и технологии в инженерната химия като: нефтопреработването и нефтохимията, и преработката и транспортирането на втечен природен газ [1.1.1. - No. 1,3,36; 1.2.1. - No. 9,11]; За моделиране на комплексното фазово равновесие на силно неидеални асиметрични системи със свръхкритичен флуид в различни области на термодинамичното фазово



пространство [1.1.1. - No. 2,9-10,17,20-21,24,27,33- 35,39-40; 1.1.2. - No. 44]; моделиране и проектиране на екологично чисти екстракционни процеси на ценни природни продукти [1.1.1. - No. 9,10,17,20-21,24,27,30,33-35,39; 1.1.2. - No. 42,44-45; 1.2.1. - No. 8,12]; природни масла [1.1.1. - No. 9,27; 1.1.2. - No. 44], бета-каротен [1.1.1. - No. 10], кварцетин [1.1.1. - No. 17], d-пинитол [1.1.1. - No. 21], галова киселина и естери на галовата киселина [1.1.1. - No. 24], канелена киселина [1.1.1. - No. 34], захари [1.1.1. - No. 33], бета-ситостерол [1.1.1. - No. 39]; ацетамид и акриламид [1.1.1. - No. 35]; интензификация на добива на нефт [1.1.1. - No. 8; 1.1.2. - No. 41]; процеса нанопилтрация с органичен разтворител [1.1.1. - No. 18]; моделиране и проектиране на процеси за биотрансформация и разделяне на ценни органични нискомолекулни киселини [1.1.1. - No. 22,31,37; 1.2.1.-No. 10]. Тези практически примери и изследвания недвусмислено показват научно – приложните приноси важността на разработената от Р. Статева термодинамична рамка.

Цитиранията на научни трудове на кандидата са обобщени в Табл.2. Прави впечатление големият брой – общо 392 цитирания, като всички цитати са в чужбина. Цитатите в монографии, книги, научни статии и публикувани доклади са 327 на 36 научни труда на кандидатката. Отделно, кандидатката е посочила 65 броя цитати на 24 статии в дисертации (PhD - 44 броя и в DSc - 1 брой) и магистърски тезиси (MSc - 20 броя) само в чужбина, в 24 държави. Най-голям брой цитирания в дисертации и тезиси има в САЩ (10), Китай (8), Унгария (6), Бразилия (5) и др.

Таблица 2. Цитирания на научни трудове на кандидата

Общ брой цитати на научни трудове	Цитати в моногр., книги, статии	Цитати в дисертации и маг. тези	Брой цитати у нас	Брой цитати в чужбина	Брой цитирани трудове на кандидата в моногр., книги статии	Брой цит. трудове на кандид. дисерт. и тезиси	Hirsch Index на цитиранията
392	327	65	0	392	36	24	11

Hirsch Index на цитиранията е 11.

3. Оценка на педагогическата дейност на Румяна Статева

Съгласно приложената към документите по конкурса справка в областта на обявения конкурс за професор, доц. д-р Румяна Статева е изнасяла лекции у нас и в чужбина като:

- Преподавателска дейност в Химическия Факултет на СУ св. Климент Охридски (1976-1981 г., 1983-1987 г.); във ВХТИ проф. А. Златаров, гр. Бургас (1986 - 1988 г.).

- Изнасяни лекции по темата на конкурса в Империал Колеж в Лондон (2008 г.); във Висшия инженерен институт в Лисабон, Португалия (2007 г.); в Института по основни химически процеси към Чешката Академия на науките в Прага (2006 г.).

- Курс от 60 часа лекции за магистри и докторанти по "Phase Equilibrium Challenges and Modern Practice" (2001 г.) в катедрата по Химично инженерство в Университета Бен Гурион, Израел

Оценявам високо тази педагогическа дейност на Р. Статева, която е много важна за един кандидат за професор.

4. Сумарна оценка на научните и научно-приложните приноси на Румяна Статева

По моя преценка трудовете на Румяна Статева имат значителен принос, относно предлагане на нови подходи и методи, получаване и доказване на нови факти в нови области с прилагане на известни методи, обогатяване на съществуващи знания и получаване на потвърдителни факти.

Укрупнените основни приноси в трудовете на Р. Статева са следните:

4.1. Научни приноси

(1) Създадена е надеждна и ефективна термодинамична рамка за коректно идентифициране и моделиране на сложното фазово равновесие на многокомпонентни неидеални системи, протичащо с (или без) химична реакция, в широк диапазон от температури и налягания, и приложението ѝ за моделиране, оптимизиране и проектиране на конкретни процеси и технологии.

(2) Създаден е нов ефективен метод за анализ на термодинамичната устойчивост на многокомпонентни системи на базата на оригинална модификация на функцията на „тангент-план“ критерия.

(3) Предложен е нов стохастичен метод за локализиране на всички минимума на модифицираната функция на „тангент-план“ критерия на базата на модификация на глобалния оптимизационен метод на Voender.

(4) Предложено е за първи път математическо доказателство, че критерият за термодинамична устойчивост "AREA" удовлетворява необходимите и достатъчни условия за равновесие на двукомпонентни двуфазни системи.

(5) Разработен е нов ефективен алгоритъм за еднозначно решаване на идентификационната задача.

(6) Предложен е нов алгоритъм за изчисляване на химично равновесие в многокомпонентни системи.

(7) Разработена е оригинална стратегия за решаване на изотермичния-изобарен флеш проблем.

(8) Предложен е ефективен нов подход за оценка на термодинамични модели за описване на PVT свойствата на флуидите и системите при високи и екстремни налягания, позволяващ провеждането на сравнителен критичен анализ на недостатъците и ограниченията им в сравнение с т.н. „подход за моделиране на основата на глобалната фазова диаграма“.

(9) Предложена е оригинална модификация на термодинамичния модел GCA-EoS (уравнение на състоянието и модел на груповите съставляващи) в релацията, отчитаща силите на отблъскване.

(10) Предложена е модификация на термодинамичния модел A-UNIFAC чрез въвеждане на температурно-зависим член в израза за асоцииращата енергия и са показани неговите значителни преимущества по сравнение със съществуващите модели.



(11) Реализирана е модификация на термодинамичния модел UNIQUAC, позволяваща отчитането на полидисперсността на големи полимерни молекули

(12) Предложени са нови подходи (използване на псевдоекспериментални данни за хомоложни редове, нов начин за изчисляване на топологични индекси и др.) и са изведени корелации, които надеждно предсказват нормалните температури на кипене, критичните параметри и плътностите на въглеродороди.

(13) Предложени са оригинални модификации на термодинамични модели, които представляват уравнения на състоянието заедно с модел на груповите съставляващи в релацията, отчитаща силите на отблъскване.

(14) Предложени са нови подходи и са изведени корелации, които надеждно предсказват нормалните температури на кипене, критичните параметри и плътностите на въглеродороди.

(15) Обоснован е оригинален принцип за създаване на нови методи на база на взаимната корелация на свойствата на различни структури, идентифициращи и използващи бази данни от структурно-близки съединения.

(16) Създадена е ефективна и робастна термодинамична рамка, включваща заедно и трите основни елемента, за моделиране на фазовото равновесие на неидеални, силно асиметрични многокомпонентни системи, протичащо с (или без) химично равновесие и в широки интервали на температурата и налягането.

4.2. Научно-приложни приноси

(1) Направен е критичен анализ на недостатъците и ограниченията на методите за предсказване на термофизичните свойства чрез т.н. „групови съставляващи“ на молекулната структура, и са показани предимствата на по-новите методи, при които, от огромна база данни с молекулни дескриптори регресионно се определя комбинация на онези от тях, които дефинират най-значимите за дадено свойство общи молекулни особености

(2) Положителните страни, възможностите и областите на приложение на създадената термодинамична рамка са демонстрирани на голям брой примери от практически интерес за различни процеси и технологии в инженерната химия като: нефтопреработването и нефтохимията, и преработката и транспортирането на втечен природен газ, моделиране на комплексното фазово равновесие на силно неидеални асиметрични системи със свръхкритичен флуид в различни области на термодинамичното фазово пространство, моделиране и проектиране на екологично чисти екстракционни процеси на ценни природни продукти, природни масла, бета-каротен, кварцетин, d-пинитол, галова киселина и естери на галовата киселина, канелена киселина, захари, бета-ситостерол, ацетамид и акриламид, интензификация на добива на нефт, процеса на нанопилтрация с органичен разтворител, моделиране и проектиране на процеси за биотрансформация и разделяне на ценни органични нискомолекулни киселини.

5. Значимост на научно-изследователските и научно-приложните приноси на Румяна Статева

Съгласно приетия правилник на Института по инженерна химия при БАН за рейтинговане на научните работници относно публикации, доклади, участия в



международни и национални конференции и научно-приложна дейност, рейтингът на Р. Статева, изчислен по методика (в сила от 01.01.2005 г.), към 31.01.2011 е **152.1044** точки, което включва: от научна дейност **135.1212**, в това число 108,4287 от публикувани научни статии и 26.7825 от научни доклади от национални и международни научни мероприятия, отпечатани в пълен текст и от научно приложна дейност **16.8932**. За заемане на академичната длъжност "Професор", изискването е кандидатът да има не по малко от 88 точки, като от научна дейност точките да не са по-малко от 50. Тази справка ми е предоставена от кандидата. Вижда се, че Румяна Статева, съществено надвишава исканите показатели за длъжността, за която кандидатства.

Румяна Статева е представила справка за ръководство и за участие в общо 15 научно – изследователски разработки и проекти след 1993 г., от които национални са 6 и международни 9. На 5 от националните и на 6 от международните проекти Р. Статева е бил ръководител. Два от националните проекти още не са приключили.

Три от проектите са финансирани от фонд научни изследвания (ТН 412/94; ТХ 517/95 и Х-1416/04). На 2 от тях Р. Статева е била ръководител. Три от проектите са съвместни разработки на БАН: с Унгарската академия на науките; с Чешката академия на науките и с Бен Гурион Университета в Израел. И на трите проекта Р. Статева е била ръководител, като два от тях продължава да ръководи.

Два проекта, които Статева е ръководила, са финансирани от Британския Съвет – България; шест проекта са финансирани от Кралското дружество на Великобритания, на 4 от тях Статева е била ръководител. Р. Статева е участвала и в един проект по програма COST.

Всички проекти, описание на които е дадено в приложената справка към документите, са по темата на конкурса за професор.

Р.Статева е била член на научния съвет на ИИХ-БАН в периода 1999 - 2010 г. член е на Атестационната Комисия на ИИХ от 2008 г. до сега. Член е на Дружеството на инженер-химиците и на Съюза на химиците в България.

Познавам Румяна Статева, интересувал съм се от научната и дейност през годините, познавам много от нейните чуждестранни партньори и тяхното високо мнение за научните и способности и считам, че тя има много добра репутация в научните среди у нас и в чужбина. Тя е търсен рецензент за анонимна оценка, (над 40 рецензии през последните 5 години) в най-реномираните международни списания, които публикуват статии в инженерно – химичната област, като *Industr. Eng. Chem. Research*, *J. of Chem. Eng. Data*; *Chem. Eng. Communications*; *Fluid Phase Equilibria* и др.

Представената справка за 392 чуждестранни цитирания на 36 нейни научни статии, публикувани след последната и хабилитация през 1993 г. е впечатляваща и показва, че нейните научните резултати са станали широко известни.

6. Критични бележки и препоръки

1. Относително малък е броя на публикациите в научни списания и в други издания в България. Р. Статева има много голям авторитет в научните кръгове по света. Едно доказателство е нейната съвместна работа със световно известни учени и публикуваните статии в най-реномираните списания в чужбина с импакт фактор в



инженерно – химичните области. Впечатляващ е и броят на цитиранията в последните 13 години. Това ми дава основание да препоръчам на кандидатката да популяризира също научните си постижения в някаква форма и у нас.

2. Научната тематика на кандидатката е интересна и препоръчвам да предаде опита и научните си интереси на докторанти.

3. Препоръчвам да оформи резултатите от научните си изследвания в монография.

4. Препоръчвам в оптимизационните процедури в термодинамичната рамка да се изследват и други оптимизационни процедури от генетичен вид с или без паралелно процесирание.

Заклучение

На основата на положителните ми оценки от анализа на научните публикации и научната дейност на кандидатката в конкурса за научната длъжност "Професор", считам, че тя има квалификация, научни публикации и научни разработки, които отговарят на изискванията за тази длъжност съгласно ЗНСНД и Правилника за неговото приложение и убедено считам, че научното жури може да предложи на научния съвет при БАН да даде научната длъжност "Професор" на доц. д-р инж. **Румяна Петрова Статева** по научната специалност **02.10.09 "Процеси и апарати в химичната и биохимичната технология"**,

31 април, 2011 г.
София

Рецензент: 
Проф. д-р инж. С. Стоянов