

РЕЦЕНЗИЯ

на конкурса за получаване на научното звание „професор“ по научната специалност 5.10. Химични технологии (Технология на природните и синтетичните горива), обявен в Държавен вестник, бр. 50 от 01.07.2011 г. с единствен кандидат доц. д-р инж. Георги Стефанов Чолаков

РЕЦЕНЗЕНТ: проф. дгн инж. Калинка Иванова Маркова

Доц. д-р инж. Г. Чолаков е роден на 23.04.1947 г. в гр. София. Завършва ХТИ-София през 1972 г. като магистър (дипломиран инженер-химик) със специалност “Технология на нефта и твърдите горива”. От 1973 до 1984 г. е химик по ВУЗ в същата специалност на ХТМУ. През 1982 г. защитава дисертационната си теза и получава научната степен „доктор“ (ктн). Още с постъпването си в катедрата се включва активно в научно-изследователската работа и в учебния процес. През периода 1985-1986 г. Чолаков е н.с. II ст. по ВУЗ в същия университет, през 1987-1989 г. н.с. I ст. по ВУЗ, а от 1990 до 1996 г. е главен асистент. През 1996 г. е избран за доцент.

Доц. Чолаков е автор на 42 научни публикации след хабилитирането му, с които участва в конкурса: 20 в списания с импакт фактор, почти всички международни; 7 в международни и български списания (2 от тях цитирани в списания с импакт фактор); 12 публикувани в пълен текст, с редактор и издател в материали от международни форуми (един доклад, цитиран в списания с импакт фактор); 3-публикувани в пълен текст, с редактор и издател в материали от национални конференции с международно участие. Изключвам от рецензията статия [43], която е публикувана в международно научно-популярно списание.

С малки изключения статиите са на английски език в съавторство. В една от публикациите Чолаков е самостоятелен автор, а в 11 от тях първи. Независимо от съавторството в научните му трудове се откроява личното участие на кандидата от това на другите автори. Публикациите са добре композирани. От тях личи много високата техническа и химическа култура и компетентно използване на широк кръг съвременни изчислителни методи и

техники. Прави впечатление много добрата литературна осведоменост на автора по проблемите, разглеждани в неговите научни трудове.

Научната продукция на доц. д-р инж. Г. Чолаков е в областта на инженеро-технологичните изчисления, които са свързани със създаването на възможности на изчислително проектиране на състава и свойствата на нефтопродукти. Изчислителната рамка свързва в едно цяло: методи за моделиране, симулиране и оптимизация, за програмиране на прибори за онлайн контрол и управление, алгоритми, числени процедури и др., които са вградени в подходяща софтуерна среда. Тя е ориентирана към предлагане и анализ на алтернативни решения за ефективно екологично преработване на изходната суровина в стокови продукти. Следователно, изчисленията за проектиране на процесите са взаимно свързани с изчисленията за проектиране на състава и свойствата на стоковите продукти, а някои елементи от изчислителната рамка намират приложение и извън технологиите, при добива и транспорта на суровините, при контролиране на състоянието на нефтопродуктите по време на експлоатацията им, при въздействието на тези продукти върху околната среда.

В статия [27] е описано най-пълно състоянието на разглежданата тематика от областта на нефтопреработването. Доц. Чолаков сочи в резюмето на основните резултати и научни принципи, че неговата работа по елементите от изчислителната рамка е започнала още преди последната му хабилитация. Той извежда зависимости между състава и свойствата на естерни и сяросъдържащи естерни присадки, формулира необходимостта от три основни типа взаимосвързани зависимости: „химична структура-свойства“, „състав-свойства“ и „свойство-свойство“. Посочва възможностите те да се използват при т.н. „скрийнинг“ и предлага зависимости, чрез които е възможно да се предсказват на базата на експериментални данни за вискозитета и резултати от изпитанието с прости трибометри и др., ефективността на смазочно-охладителните материали при шлифоване.

Основните приноси на кандидата в настоящия конкурс са главно в областта на зависимостите между химичната структура и свойствата на

въглеводородите и на кислородните съединения използвани в нефтопреработването и в по-малка степен в областта на другите основни елементи на изчислителната рамка. Обзорът от публикация [27] идентифицира и проблемите, пред които е изправено внедряването на новите методи и обсъжда възможностите за тяхното решаване.

В публикациите, обект на настоящия конкурс, се постигат следните основни приноси:

1. Синтезирани са варианти на борсъдържащи присадки. Изследвани са взаимодействията им с широко използваните в смазочните материали, цинкови дитиофосфати и трикрезилфосфати [1,21,40,41].

Доказани са концентрационни граници, в които се проявява синергизъм по отношение на смазочните и антиокислителни свойства на смесите. Предложен е механизъм на действието на борните присадки при разлагането на фосфатните. Установява се, че при това се образуват смесени смазочни филми и се инициира антиокислителен ефект при по-ниски температури. Изведени са зависимости „състав-свойство“ формулиране на пакети от тези присадки.

Като резултат от изследванията се намалява участието на нежеланите дитиофосфати в пакетите за моторните масла, тъй като тровят катализаторите за доизгаряне. Редица автори по-късно потвърждават тези резултати. Установеният механизъм на действие би могъл да се използва за извеждане при борните присадки на феноменологични модели на връзките „химична структура-свойства“.

2. За първи път е приложен алгоритъм за извеждане на феноменологични полумпирични зависимости „химична структура-свойство“ за трибологични свойства на присадки с близки структури [2]. Той е илюстриран с практически пример феноменологичен и предсказващ модел, описващ експерименталните данни за товара на заваряване на ЧСМ на органичните сулфиди. Химичната структура на присадките е представена числово чрез разпределението на енергията в структури с минимизирана енергия. Феноменологичният модел, който се основава на трибохимичната кинетика и предсказващия модел, получен чрез

молекулен дизайн с принципни компоненти, позволява товарът на заваряване да се предсказва в рамките на експерименталната грешка. Открити са възможности за използването на такива модели за научни и индустриални цели. Доказва се необходимостта от съставянето на база данни с трибологични свойства на индивидуални присадки, мястото на кинетичните и адсорбционните изследвания и др. Обсъждат се връзките със системното формулиране и дизайн на активни продукти и концепциите за моделиране в рафинериите.

3. Съсредоточено е вниманието върху факта, че количествените зависимости „структура-свойство“ са емпирични. Тяхната приложност се определя от количеството на използваните експериментални данни и вариацията на целевите химически структури. Въз основа на това са анализирани недостатъците, ограниченията и претенциите за универсална приложимост на методите за предсказване на параметри на свойствата чрез т.н. „групови съставляващи“ на молекулната структура. Демонстрирани са предимствата на съвременните методи, при които от огромна база данни с молекулни дескриптори, регресионно се определя комбинация от тях, която представлява най-значимите за дадено свойство общи особености на структурата на изследваните съединения [3, 7]. Публикация [3] предлага нова корелация между молекулната структура на въглеводородите и техните нормални температури на кипене, а [7] предлага нови корелации за оценка на относителна плътност и критични параметри на въглеводороди. В двете статии е предложено като допълнителни „псевдоекспериментални“ данни да се използват предсказани стойности за хомоложни съединения, при които неопределеността е по ниска. При топологичните индекси, изчислявани от матрицата на междуатомните разстояния, за първи път е предложено дължината на връзките да се представя вместо цели числа със стойностите, получени от енергийно минимизирани молекулни модели. Посочено е, че изчисленията по този начин индекси описват по-добре експерименталните данни.

Изследвано е влиянието на натрупването на грешки при изчисляване на нормалните температури на кипене, критичните параметри и плътността на въглеводородите [6]. Сравнено е влиянието на неопределеностите в стойностите на критичните температури и температурите на кипене, които са предсказани с различни методи върху дизайна на дестилационни колони.

4. Предлага се нов подход за създаване на нови методи, при които се използват идентифицирани в изходната база данни по-малки бази от структурно-близки съединения [8, 9, 12, 28, 29, 42]. Той използва изчисляване на вектора на молекулните дескриптори на целево съединение, за което няма данни за свойствата, последвано от регресия на този вектор срещу същите вектори на база данни от съединения с известни стойности на свойствата. Установяват се коефициенти, които се използват за предсказване на всяко свойство на целевото съединение, за което има експериментални данни за близките му по структура молекули. Резултатите показват, че новият метод има редица уникални предимства като: използване на една структурна корелация за предсказване на всички търсени свойства; оценка на грешката на предсказанията при съединения, за които няма измерени данни; възможности за намиране на алтернативни решения за различни проблеми и средства за оценка на тяхната адекватност. Методът може да се използва и за проверка на наличието на структурно подобие между съединенията в базата данни, както и за проверка на други методи.

При експлоатация на този метод за съединения с много висока молекулна маса, особено при хомоложни редове, е установено натрупване на грешките и системно увеличаване на отклоненията. Тези недостатъци се избягват при целево ориентирания QSPR метод, при който QS2PR принципът се използва само за определяне на подобните на целевото съединение молекули, а след това по конвенционалния начин се извеждат QSPRs за всички съединения в базата данни от структурно - свързани съединения, за които няма експериментални данни [11, 13, 14, 29-34].

Новите методи са апробирани чрез предсказване на различни свойства на особено важни въглеводороди и кислородни съединения с комплексна структура за нефтопреработването, както и на свойствата на членове от хомоложните редове [15, 16, 19]. Предложено е модифицирани варианти да се използват за изчисление на температурно-зависими свойства, на коефициенти на бинарно взаимодействие в хомоложни редове и др. [15, 16, 19, 35, 38, 39]. Установено е, че отклоненията на предсказаните от експерименталните резултати са по принцип в рамките на възпроизводимостта им.

Доказва се, че с помощта на TQSPR могат да се идентифицират дескриптори, които са колинеарни с изменението на отделни свойства на хомоложните съединения с увеличаване на молекулната им маса. Това е важно, защото позволява извеждането на линейни корелации, вместо асимптотичните такива. По този начин може да се намали броят на експерименталните данни и да се увеличи надеждността на предсказанието.

5. Установените нови елементи на „изчислителната рамка“ за компютърно проектиране на състава и свойствата на нефтопродуктите са необходими и при математичното описание на изключително сложни явления като фазовите равновесия на системи „вода-масло-нейоногенни ПАВ“ при микроемулсионната интензификация на добива на нефт [5, 22] или на равновесия в съдържащи полимери двуфазни водни системи, прилагани в биотехнологичните производства [10, 18, 36].

Тези нови елементи са от изключителна полза и при решаването на сравнително лесни задачи от гледна точка на моделирането с важно за практиката значение. Разработен е нов метод за установяване съдържанието на детонационни нанодиаменти в неполярни суспензии, чрез които може да се следи за тяхната физическа стабилност [20, 24, 25, 37] и да се подберат стабилизатори и условия за получаване на продукти с висока стабилност.

Предложена е зависимост на оценка на влагосъдържанието на течната (трансформаторно масло) и твърдата изолация на работещи трансформатори [17, 26].

6. Предлагащите елементи на “изчислителната рамка” в областта на нефтопреработването става все по актуално, като се има предвид, че в последно време се влошават качествата на видовете нефт, че е необходимо по-добро и екологично съвместимо превръщане на нефтените фракции и остатъци в ценни продукти [27]. Разгледани са новите методи за проектиране на свойствата на молекули и смеси и техните възможности по отношение на новите предизвикателства. Обсъдени са възможностите за внедряването на новите методи.

Заради значимите му научни постижения, след хабилитирането му Доц. Чолаков е многократно цитиран (общо 140 пъти) от водещи автори в неговата област на познанието. Една част от цитатите (107) са открити в авторитетни международни списания, сборници от международни конференции и др., а друга (33) са в публикувани в чужбина книги, монографии, дисертации (без автореферати) и др.

Доц. Чолаков има дълъг педагогически стаж и богата и разностранна педагогическа дейност. През последните 5 години той чете лекции, на редовни и задочни бакалаври, и на редовни и задочни магистри както следва:

1. В бакалавърската специалност “Природни и алтернативни горива” лекции по „Химия на горенето и екология”, „Технологични изчисления”, „Производство на присадки” (до 2007 г.) и семинарните занятия по Курсов проект .
2. В магистърската специалност “Природни и синтетични горива” лекциите по “Технологични изчисления”, “Структура и функционални свойства на присадките”, “Алтернативни горива”, “Екологични проблеми при преработване и използване на горивата” и семинарните занятия по Курсов проект по технология на горивата.

3. В специалност "Инженерна екология и опазване на околната среда" лекциите по : „Замърсяване и пречистване на въздуха" и „Горивни процеси и екология".

В специалност "Опазване на околната среда и устойчиво развитие" – редовни магистри платено обучение за Европейска магистърска диплома лекции по „Мениджмънт при замърсяване на въздуха".

В специалност „Биогорива"- редовни и задочни магистри - лекциите по „Проектиране на състава на горивата".

Педагогическата дейност на доц.Чолаков е фокусирана преди всичко върху течните горива и екологията. Лекциите му са на високо научно равнище и са издържани в духа на съвременните научно - педагогически стандарти.

Доказателство за това е фактът, че кандидатът е търсен лектор в чужбина. След спечелен конкурс през летния семестър на 2002 г. в Университета „Бен-Гурион" в Негев, Израел той изнася курс лекции на тема „Химия на горенето и замърсяването от превозните средства". На две работни срещи и на научни семинари в университети в Израел, Англия, Гърция и Португалия по програмата „Еразмус" изнася лекции.

Чолаков участва активно в разработването и обновяването на програмите по всички дисциплини и съответните учебни планове. Автор и съавтор е на третомното учебно помагало на английски език, под егидата на ЮНЕСКО. На 7 от главите той е автор и е съавтор на две от тях.

Автор е на електронни записки по курс, четен на английски език в чужбина (Израел), на електронни записки на български език по дисциплините, които чете в момента (4 бр.) и на електронни записки на български език по дисциплините, които сега се четат от нов преподавател (2 бр.). В електронен вид са представени и 8 бр. презентации по покана на семинари, работни срещи и лекции по програма „Еразъм".

През последните пет години доц. Чолаков е ръководител на над 20 дипломни работи. Той е ръководител на един и съръководител на друг

докторант, отчислени с право на защита. Консултант е на един успешно защитил докторант.

Голяма роля във формирането на доц. Чолаков като педагог и учен имат специализациите му в :

- катедра “Инженерна механика” на Бирмингамския университет през 1983 г. по Трибология (Работа по проект GRB 4473.6/ SERC „ Програмиран контрол на шлифовални течности”, финансиран от Британския съвет за инженерни изследвания и наука).

- Индивидуална едномесечна специализация след спечелен конкурс по програма ТЕМПУС: Технически университет Клаустал Целерфелд, Германия; Университет Гент, Белгия; френски институт по петрла, 1993 г., по ефективно и екологично преработване на нефта и нефтопродуктите.

- 45 дневна специализация за преподавател в съвместен европейски проект (JEP) по ТЕМПУС: катедра Химично инженерство, Импириъл Колидж, Лондон, 1995 г. по мениджмънт на замърсяването на въздуха.

След хабилитирането му доц. Чолаков е участвал с доклади и постери в 9 международни форума и 11 национални с международно участие. За същия период той е активен участник в 8 международни и 5 национални проекта, на някои от които е ръководител, а също и в 7 проекта, финансирани от ХТМУ (4 – по граждански договори, 2 от международни образователни програми и 1 за извършване на анализи.) Международните проекти са финансирани от Британския съвет, от Кралското дружество на Великобритания в рамките на схемата за Централна и Източна Европа и бившия Съветски съюз. Участник и ръководител е на международни образователни програми:

- Енциклопедията за поддържащи живота системи на ЮНЕСКО. 1999-2009 г.- участник и редактор. Той е отговорник за българското участие и автор.

- Почетен технически редактор и член на борда на генералните съветници 2002-2009 г. на Енциклопедията.

Чолаков е участник и в проекта ТЕМПУС 07209 “Опазване на околната среда и устойчиво развитие” 1994 – 1997 г.

Поради солидната си научна подготовка и компетентност доц. Чолаков развива богата експертна дейност. Той е член на технически комитет (ТК) 67 по нефт и нефтопродукти към Българския институт по стандартизация (от 1998 г. до този момент); Експерт е в Междуведомствена работна група към Министерството на икономиката за разработване на “Закон за 90 дневните запаси от нефт и нефтопродукти” през 2001г. Почетен технически редактор и член на Борда на генералните съветници на EOLSS.” Чолаков е независим експерт по два договора на Изпълнителната агенция за насърчване на средните и малки предприятия. Рецензент е по документи, изготвени за “ЕСО АД “ и Държавната агенция за държаван резерв и военновременни запаси. Организатор и преподавател е в курсове за повишаване на квалификацията. Рецензент или представящ във ВАК на дисертационни трудове за степента „доктор” и за конкурси за доценти. Благодарение на неговата висока компетентност Чолаков е рецензент на статии в : „Journal of The Balkan Tribological Association”, “Journal of Chemical and Engineering Data”, “Fuel Processing Technology”, “Bulgarian Chemical Communications”, “Journ. Univ. Chem. Met.” и други списания. Той е зам. - председател на организационния комитет за честването на „50 години ХТМУ”. Член е на организационните комитети на националните конференции по химия и съпътстващите ги международни конференции през 2004, 2008 и 2011 г., на международни и национални конференции с международно участие по трибология и съответно по смазочни масла. От 1997 г. до сега е „гост академик” на катедра „Инженерна химия и технология”, Импириъл Колидж, Лондон с право на постоянен достъп до Интернет и др. ,ресурси на катедрата (2008-2012 г.).

Единственият кандидат в конкурса за „професор”, доц. д-р инж. Георги Стефанов Чолаков се представя с една значителна научна продукция и участие в учебния процес, които отговарят на тематиката на обявения конкурс. Той компетентно и творчески използва широк комплекс от химически анализи, изчислителни методи и техники в областта на нефта и

нефтепродуктите, където кандидатът има особено големи научни постижения. Научните резултати на инж. Чолаков имат както оригинални фундаментални приноси, така и приложни приноси, свързани с решаването на важни технологични и екологични проблеми.

Предвид изложеното по-горе смятам, че доц. д-р инж. Георги Стефанов Чолаков напълно отговаря на изискванията за „професор“ по 5.10. Химични технологии (Технология на природните и синтетични горива) и предлагам на почитаемото Жури да му присъди това научно звание.

14.11.2011 г.

София

Рецензент: 

(проф. дгн инж. Калинка Маркова)