

РЕЦЕНЗИЯ

от **акад. Иван П. Попчев** – БАН

на дисертационен труд за придобиване на образователната и научна степен

„доктор“

по професионално направление 4.6 „Информатика и компютърни науки“

докторска програма „Информатика“

на тема „Монте Карло подход за оптимизация на биметални наноструктури“

от **Росен Михов Михов**

Със заповед № 303/28.11.2025 г. на Директора на ИИКТ–БАН чл. кор. С. Маргенов на основание чл. 4, ал. 2 от Закона за развитие на академичния състав в Република България и с решение на Научния съвет на ИИКТ (протокол № 9/26.11.2025 г.) във връзка с процедурата за придобиване на образователната и научна степен „доктор“ по професионално направление 4.6 „Информатика и компютърни науки“, докторска програма „Информатика“ от Росен Михов Михов с дисертация на тема „Монте Карло подход за оптимизация на биметални наноструктури“ съм определен за член на Научно жури.

При оценка на дисертационния труд, определящи са условията на Закона за развитие на академичния състав в Република България (ЗРАСРБ), ППЗРАСРБ (Постановление № 26 от 13 февруари 2019 г.) и Правилника за специфичните условия в ИИКТ–БАН за прилагане на закона и поради това ще бъдат точно предадени:

1. Съгласно чл. 27 (1) от ППЗРАСРБ „дисертационният труд трябва да съдържа научни или научноприложни резултати, които представляват оригинален принос в науката. Дисертационният труд трябва да показва, че кандидатът притежава задълбочени теоретични знания по съответната специалност и способности за самостоятелни научни изследвания“.
2. Според чл. 27 (2) от ППЗРАСРБ „дисертационният труд трябва да бъде представен във вид и обем, съответстващи на специфичните изисквания на първичното звено. Дисертационният труд трябва да съдържа: заглавна страница; съдържание; увод; изложение; заключение – резюме на получените резултати с декларация за оригиналност; библиография“.

Научен ръководител на дисертацията е **проф. д-р Леонид Кирилов**.

На стр. 25 е формулирана целта на дисертационния труд „Да се разработи Монте Карло подход със симулирано закаляване (SA), използващ потенциала на силно свързване (TB), за оптимизация на различни видове биметални наноструктури, включително наночастици, наножици и нанofilми“.

Дефинирани са **следните шест задачи**:

1. Да се предложи метод за оптимизация на биметални наноструктури, включително наночастици, наножици и нанofilми.
2. Да се изследва ефективността на предложения метод.
3. Да се предложи подходящ начин за определяне и регулиране на параметрите на метода.
4. Да се определи кои от следните фактори влияят най-съществено върху оптималния избор на начална температура на симулирано закаляване: химичният елемент, размерът на наночастицата, видът на решетката, големината на решетката.
5. Да се предложи софтуерна архитектура и да се разработи софтуерна система, реализираща новия метод, която да позволява високо ниво на оптимизиране ефикасността на изчисленията, гъвкавост за вариране на алгоритмите и техните параметри и добра съвместимост с външни приложения за анализ и визуализация на резултатите.
6. Да се направи изследване, прилагашо предложения метод за конкретен клас златно-сребърни наноклетки с 3000 атома, които представляват интерес за много приложения, за да се установи как разликите в съотношението Au:Ag и симетрията на кристалната решетка влияят върху атомното подреждане и процесите на повърхностна сегрегация.

Дисертационният труд е в обем от 124 страници, 34 фигури, 7 таблици, 149 литературни източника и включва:

- Благодарности (5);
- Увод (6–8);
- Списък на използваните съкращения и означения (9–10);
- Анализ на методите за моделиране и числова оптимизация на атомните конфигурации на метални и биметални наноструктури (**глава 1**, 11–26);

- Двуетапен Монте Карло подход за оптимизация на биметални наноструктури (глава 2, 27–40);
- Числово тестване на двуетапния метод за оптимизация на биметални наноструктури (глава 3, 41–50);
- Влияние на началната температура върху ширококорешетъчния алгоритъм за симулирано закаляване (глава 4, 51–66);
- Приложение на метода при оптимизацията на златно-сребърни наноклетки (глава 5, 67–85);
- Софтуерна архитектура и система за реализирането на двуетапния метод за оптимизация на биметални наноструктури (глава 6, 86–101);
- Заключение – резюме на получените резултати (102–104);
- Приноси (105–106);
- Списък на публикациите по дисертационния труд (107);
- Списък на забелязани цитирания на публикациите (108–109);
- Участие в научноизследователски проекти (110);
- Декларация за оригиналност на резултатите (111);
- Библиография (112–124).

Представени са 4 публикации по дисертацията.

Анализът на тези публикации показва следното:

- 3 публикации са в **Scopus с SJR Q4** (№№ 2, 3 и 4);
- 1 публикация е в **IEEE Xplore** (№ 1);
- всички публикации са в **съавторство** на английски език.

Забелязани са **7 цитирания** както следва:

- 3 цитирания на публикация № 1;
- 4 цитирания на публикация № 3.

Участие в два национални научноизследователски проекта.

В дисертацията (стр. 105–106) са дадени „Приноси“ обобщени в **6 основни резултата**, за които няма съгласно чл. 27 (1) от ППЗРАСРБ оценка, че „представяват оригинален принос в науката“.

Накратко получените резултати в дисертацията могат да се систематизират както следва:

1. Решетъчен Монте Карло метод в пет стъпки за оптимизация на биметални наноструктури с първи етап симулирано закаляване върху широка решетка и втори етап симулирана дифузия.
2. Двуетапният метод е адаптиран за работа с наноклетки и са изследвани атомното подреждане и процесите на повърхностна сегрегация в златно-сребърни наноклетки от 3000 атома.
3. Двуетапният метод е реализиран в софтуерна система с архитектура от три компонента: изчислително ядро, шаблон за главен план на експеримента, спомагателни функционалности за анализ на резултатите, тестване и визуализация. Системата работи с Linux и Windows и използва XYZ формат за входни и изходни данни.

Изпълнени са минималните изисквания на ППЗРАСРБ и Правилника за специфичните условия в ИИКТ–БАН.

Критични бележки

1. В „приноси“ (стр. 105–106) не са определени научни или научноприложни резултати са съгласно чл. 27 (1) от ППЗРАСРБ.
2. На стр. 25 е записана задача „да се изследва ефективността на предложения метод“, но няма информация за такова изследване и за използваните критерии за изследване на ефективността.
3. Би било целесъобразно към „бъдещо развитие на изследването“ (стр. 104) да се включи и „в бъдеще би могло да се интегрира кинетичен Монте Карло върху решетката или MD семплиране с машинно-обучени потенциали“ (стр. 84).

Въпроси по дисертацията

1. За кои точно основни резултати може да се докаже, че **представяват оригинален принос в науката**? Кои са **критериите** за оригинален принос в науката?
2. По кой метод е оптимизирано изчислителното ядро за бързодействие на изчисленията (стр. 101)?
3. В бъдещо развитие не се определя как двуетапният метод ще „възпроизвежда важни аспекти на техните конфигурации“ (стр. 104)?

4. Дисертацията като част от по-широко изследване от мултидисциплинарен колектив може ли да отговори на въпроса за крайната цел на това изследване във времето?

Обобщен „**наукометричен образ**“ на докторанта Росен Михов може да се построи по данни от световните научни бази:

- Scopus: 13 авторски документа, 26 цитата, h-index 3;
- Web of Science: 3 публикации, 1 цитат;
- MathSciNet: 2 публикации;
- zbMATH Open: 2 публикации, 1 цитат;
- IEEE Xplore: 1 публикации;
- Scholar.google: 14 публикации;
- Researchgate: 14 публикации.

Обобщения „наукометричен образ“ заслужава да бъде обект на внимателен и критичен **самоанализ**, да формира бъдещите изследвания и да представи достатъчно основания за самостоятелна публикационна активност в издания с IF/SJR.

Авторефератите са на български и английски език съответно 47 и 44 страници и представят дисертационния труд.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Дисертационният труд отговаря на условията на ЗРАСРБ, ППЗРАСРБ и Правилника за специфичните условия в ИИКТ–БАН.

Давам **положително заключение** за придобиване на образователната и научна степен „доктор“ на Росен Михов Михов.

Предлагам на Научното жури единодушно да гласуват на Росен Михов Михов образователната и научна степен „доктор“ по 4.6. Информатика и компютърни науки, докторска програма „Информатика“.

8.XII.2025 г.

София

На основание
ЗЗЛД