

## СТ А Н О В И Щ Е

от чл.-кор. Светозар Димитров Маргенов,  
професор в ИИКТ – БАН,  
на материали, представени за участие в конкурс  
за заемане на академичната длъжност “доцент” към ИИКТ – БАН  
в професионално направление 4.5 Математика, научна специалност  
„Математическо моделиране и приложение на математиката (приложения в  
изчислителната физика и биология)“

В съответствие със заповед № 21/15.03.2022 г. на директора на ИИКТ – БАН съм утвърден за член на научното жури по конкурс за доцент, обявен в Държавен вестник (бр. 21 от 15.03.2022 г.) за нуждите на секция „Научни пресмятания с Лаборатория по 3D дигитализация и микроструктурен анализ“. Документи за участие в конкурса е подала д-р Елена Боянова Лилкова, гл. асистент в ИИКТ – БАН.

### 1. Кратки биографични данни

Гл. асистент д-р Елена Боянова Лилкова се дипломира през 2009 г. във Физическия факултет на СУ “Св. Климент Охридски” с квалификация магистър по медицинска физика. През периода 2011 г. – 2015 г. е докторант в същия университет, където защитава дисертация за образователната и научна степен „доктор“ на тема „Изследване на човешки интерферон гама чрез молекулно-динамични симулации“.

От март 2015 г. е на работа в ИИКТ, като последователно заема длъжностите програмист и асистент. През декември 2017 г. е избрана за гл. асистент, на която длъжност работи и до момента в секция „Научни пресмятания с Лаборатория по 3D дигитализация и микроструктурен анализ“.

### 2. Общо описание на представените материали

Представените от гл. асистент Елена Лилкова материали са изготвени в съответствие със ЗРАС, ППЗРАС, както и със специфичните изисквания в правилниците на БАН и на ИИКТ – БАН. Те включват: автобиография по европейски образец; копие на диплома за образователната и научна степен “доктор”; удостоверение за стаж; списък на научни публикации; списък на научните публикации за участие в конкурса; списък на цитирания; резюмета на научните публикации за участие в конкурса - на български и английски; копия на научните публикации за участие в конкурса; справка за изпълнение на

минималните изисквания на ИИКТ; справка за изпълнение на минималните изисквания за регистриране в НАЦИД; справка за оригиналните научни и научно-приложни приноси; декларация, че няма доказано по законоустановения ред плагиатство в научните трудове. Представени са също така електронни носители с информация, съгласно изискването на ИИКТ.

За участие в конкурса гл. асистент Елена Лилкова е представила 21 научни публикации, обхващащи периода 2010 г. – 2021 г. (в.т.ч. 12 публикувани през последните 5 години). От тях 14 са индексирани в Scopus и/или WoS. Всички публикации са на английски език. В специализирани научни списания с импакт фактор (IF) са публикувани 4 статии, 2 от които са в квартал Q1 (International Journal of Molecular Sciences). От останалите статии 13 са в издания с SJR. От представените по конкурса публикации 5 са с 4 съавтора, 3 - с 5, 6 - с 6 и 7 - с повече от 6 съавтора.

Справката за изпълнение на минималните национални изисквания и изискванията на ИИКТ – БАН за академична длъжност „доцент“ съдържа в отделни таблици Данни по групите показатели В, Г, Д и Е. Точките по всеки от показателите удовлетворяват изискванията, като по показатели Д и Е съществено ги надвишават.

### **3. Обща характеристика на дейността на кандидата**

Гл. асистент Елена Лилкова е изграден учен в областта на математическото моделиране и приложението на математиката в изчислителната физика и биология. В основата на методологията на изследване в представените работи са математическото моделиране и компютърните (в т.ч. суперкомпютърните) симулации. Важно място в този тип изследвания имат специализираните подходи за валидация и софтуерни средства за визуализация на получените резултати.

В документите на гл. асистент Лилкова е документирано участие в 10 национални научни проекта, от които 9 по договори с Фонд „Научни изследвания“. Ръководила е два проекта по Програмата за подпомагане на младите учени.

През последните години е била член на организационни или програмни комитети на следните международни научни форуми: Large Scale Scientific Computations (LSSC'17, LSSC'19, LSSC'21); Numerical Methods for Scientific Computing and Advanced Applications (NMSCAA'18); Annual Meeting of Bulgarian Section of SIAM (BGSIAM'18, BGSIAM'19, BGSIAM'20, BGSIAM'21).

Гл. асистент Елена Лилкова е съредактор на 4 тома в поредици с SJR на Springer със статии по доклади от конференциите BGSIAM'18 - BGSIAM'21.

#### **4. Научни и научно-приложни приноси**

Представените научни и научно-приложни приноси на гл. асистент Елена Лилкова са в съответствие с научната специалност „Математическо моделиране и приложение на математиката (приложения в изчислителната физика и биология)“.

Молекулната динамика е един от най-ефективните подходи за моделиране на многочастични атомни и молекулни системи. Процесите се описват от силно нелинейно уравнение на Шрьодингер, за численото решаване на което се прилагат най-съвременни числени методи, алгоритми и софтуерни средства. Това е основен апарат, използван от кандидата. Резултатите на гл. асистент Лилкова включват също така специализирани числени методи за: пресмятане на свободна енергия; ускорено обхождане на фазовото пространство; нагъване на протеини, предсказване на свързването на протеини към лиганди или други протеини и макромолекули.

Резултатите на гл. асистент Лилкова имат комплексен интердисциплинарен характер. Важно е да отбележим, че анализът на структурата и динамиката на протеините е сложен процес с редица открити проблеми. В основата на представените резултати е синергията на взаимно допълващи се подходи в които се комбинира числено решаване на детерминистични нестационарни частни диференциални уравнения и топологични техники.

Приемам предложената от кандидата класификация на основните резултати, представени в следните три групи:

- I. Молекулно моделиране на човешки интерферон гама;
- II. Моделиране на антимикробни пептиди;
- III. Научен софтуер.

##### **I. Молекулно моделиране на човешки интерферон гама**

Известно е, че човешкият интерферон гама е много важна сигнална молекула (цитокин), която играе ключова роля в произвеждането и модулирането на имунен отговор на организма. Това е основна причина за изследване на неговите структура, динамика и взаимодействия с други биологични молекули. Отбелязана е възможността представени в този раздел резултати да бъдат използвани от учени от Института по структурна биология в Гренобъл, Франция, за разработване на потенциални биологични препарати за инхибиране на ендогенен интерферон гама. Тази група резултати са публикувани в работи [B1, B2, B3, B4, Г1, Г4, Г9, Г10, Г11].

Обяснена е ролята на моделирането на структурата в търсене на отговори на въпроси, свързани с въздействието на последните аминокиселини

разположени в С края върху биологичната активност. Като важно постижение ще отбележа получения за първи път цялостен модел на структурата на човешки интерферон гама. Тази структура е използвана в следващи работи. В тази група резултати са включени също така изследвания на: мутантни форми на човешки интерферон гама; влияние на гликозилирането върху стабилността и структурата; взаимодействие с гликозаминогликани.

## **II. Моделиране на антимикробни пептиди**

Компютърните симулации (научните пресмятания) се утвърждават като трети самостоятелен дял на науката, допълващи традиционните теоретични и експериментални изследвания. В частност, *in silico* експериментите съществено съкращават времето във всички видове биомолекулни изследвания и по-специално в процеса на разработване на лекарствени средства. Отбелязана е възможността представени в този раздел резултати да бъдат използвани от учени от Института по молекулярна биология на БАН. Към тази група се отнасят статии [Г5 – Г8, Г12].

Така например, в статия [Г5] е анализирана структурата на антимикробния пептид магаинин 2 (MG2), както и тази на негов аналог с две точкови мутации MG2m. Резултатите показват, че двата пептида имат съществено различни профили на свободната енергия. Профилът на MG2 е плитък и богат на локални минимума, докато този на аналога MG2m е доста по-равен, като има само два добре изразени минимума. В работа [Г8] е изследвана вторичната структура на пептиди, изолирани от антимикробната слуз на градински охлюви. Получената информация за вторичната структура на изолираните нови богати на глицин пептиди дава възможност за още по-задълбочен анализ на функциите и взаимодействията им. В тази група резултати са включени и изследвания на поведение и самоорганизация в разтвор и взаимодействие с мембрани.

## **III. Научен софтуер**

Численото и компютърно моделиране на биологични обекти формира клас от задачи с голяма изчислителна сложност (Large Scale Problems). Тяхното решаване изисква разработване, оптимизация, поддръжка и развитие на специализиран високопроизводителен софтуер за научни пресмятания (HPC). Представените резултати в това направление имат съществена роля за определяне на комплексните приноси на гл. асистент Елена Лилкова в рамките на настоящата процедура. Те могат да бъдат определени като научно-приложни. Публикувани са в работи [Г3, Г13 – Г17].

В статии [Г3, Г13] е анализирана паралелната производителност (паралелна скалируемост) на специализираните софтуерните пакети GEANT4, GROMACS и NAMD. Изследванията имат експериментален характер, като за целта са проведени числени експерименти върху най-съвременни суперкомпютърни

архитектури. Така например суперкомпютър Авитохол има хибридна архитектура Intel Xeon с ко-процесори Intel Xeon Phi. Показано е, че най-висока производителност се постига при адаптивна стъпка по времето. Важен въпрос е постигането на синергия (баланс) между производителност и устойчивост.

В статии [Г14 – Г16] са представени резултати от разработени специализирани подходи и софтуерни средства за молекулно моделиране на биологични системи. Целта е подобряване на изчислителната ефективност при отчитане на нелокални електромагнитни взаимодействия с помощта на външна библиотека за паралелни изчисления. Бих отбелязал също така подобряването на сходимостта на итерационния метод на базата на комбинирано използване на метода на спрегнатия градиент (CG) и стабилизиращия двоен спрегнат градиент (BiCGSTAB).

В заключение ще отбележа, че представените научни и научно-приложни приноси са резултат от комплексни компетентности в няколко научни области, които включват изчислителна математика, физика и биология, както и паралелно програмиране и суперкомпютърни приложения.

#### **5. Отражение на научните публикации на кандидата**

В представения от кандидата списък са включени 26 независими цитирания. Всички те са в издания, които са индексирани във Web of Science и/или Scopus. В съответствие със Scopus, *h*-индексът на гл. асистент Лилкова е равен на 3. В рамките на настоящата процедура, цитиранията са представени в таблицата с данни по група показатели Д. При изискване 70 т., оценката на представените цитирания е 156 т. Всички включени в таблицата цитирания са в работи на чуждестранни автори, в това число публикувани в редица най-авторитетни специализирани международни списания и поредици.

#### **6. Оценка на личния принос на кандидата**

Приемам като обща оценка, че в съвместните работи гл. асистент Елена Лилкова има равнопоставена роля.

#### **7. Критични бележки**

Нямам критични бележки по същество относно представените от гл. асистент Елена Лилкова материали по конкурса. Те удовлетворяват напълно изискванията на ЗРАС, ППЗРАС, правилника на БАН и специфичните изисквания на ИИКТ - БАН.

В списъка на научните публикации са включени 5 на брой PRACE Whitepapers. В таблицата с данни по група показатели Г те са отразени коректно с по 0 точки. Прегледът на представените в тях резултати ми дава основание да

считам, че би било добре те (или поне част от тях) да бъдат публикувани в издания с по-добра видимост от изследователите работещи в тази интересна област на суперкомпютърните приложения.

## 8. Лични впечатления

Познавам Елена Лилкова от 2008 г., като член на научния колектив на проект Център за върхови постижения „Суперкомпютърни приложения“, финансиран от НФ „Научни изследвания“, на който бях координатор. Тя се включи много активно и успешно в работата по РП10: Суперкомпютърни симулации на биологични молекули и системи. Успешната съвместна работа беше в основата на преминаването ѝ през 2015 г. на работа в секция „Научни пресмятания“ на ИИКТ – БАН.

Високо оценявам научното и професионално ниво на кандидата, които определят гл. асистент Елена Лилкова като квалифициран, коректен и отговорен учен и колега с доказани възможности за работа в екип. Активната позиция по въпроси свързани със съвместната работа, както и отзивчивостта и готовността да помогне са важна част от качествата, които колегите в секцията високо ценят.

## 9. Заключение

След запознаване с материалите по конкурса, комплексната оценка на представените в тях качества на кандидата, в това число на научните и научно-приложните приноси, **убедено препоръчвам гл. асистент Елена Боянова Лилкова да бъде избрана на академичната длъжност “доцент” в ИИКТ – БАН в професионално направление 4.5 Математика, научна специалност „Математическо моделиране и приложение на математиката (приложения в изчислителната физика и биология).“**

11.07.2022 г.

София

На основание

ЗЗЛД