

## СТАНОВИЩЕ

по конкурс за заемане на академичната длъжност „доцент“ в професионално направление 4.5. Математика, спец. „Математическо моделиране и приложение на математиката (приложения в изчислителната физика и биология)“, обявен в ДВ бр. 21 от 15.03.2022 г., за нуждите на секция „Научни пресмятания с Лаборатория по 3D дигитализация и микроструктурен анализ“

Рецензент: проф. д.н. Иван Димов – Институт по Информационни и комуникационни технологии, Българска академия на науките

### 1. Представени материали

Предоставени са ми следните материали:

1. Автобиография по европейски образец с четири приложения;
2. Копие от диплома за образователната и научна степен „доктор“;
3. Удостоверение за стаж по специалността;
4. Списък на научните публикации за участие в конкурса, които не повтарят представените за придобиване на образователната и научна степен „доктор“
5. Списък на цитирания;
6. Резюмета на научните публикации за участие в конкурса - на български и английски;
7. Копия на научните публикации за участие в конкурса;
8. Справка за изпълнение на минималните изисквания на ИИКТ;
9. Справка за изпълнение на минималните изисквания за регистриране в НАЦИД;
10. Справка за оригиналните научни и научно-приложни приноси;
11. Декларация, че няма доказано по законоустановения ред плагиатство в научните трудове;
12. 8 бр. електронни носители с информация, съгласно изискването на ИИКТ.

Единственият кандидат в конкурса е д-р Елена Боянова Лилкова

### 2. Общо описание на представените материали

Представените за рецензиране публикации са в областта на математическото и физично моделиране на биологични макромолекули и комплекси. За участие в конкурса за академичната длъжност „доцент“ е приложен списък от 21 научни публикации, като от тях 19 вече са публикувани, а 2 са приети за печат. 16 от вече публикуваните научни статии са видими в SCOPUS/Web of Science, от тях 4 имат импакт фактор (две са в квартал Q1 и по една в квартали Q2 и Q3), останалите имат SJR. Двете приети за печат публикации ще бъдат публикувани в поредица, която също има SJR. 5 от представените за разглеждане в конкурса публикации не са в журнали с SJR или импакт фактор, но са преминали през

сериозен процес на рецензиране от водещи европейски специалисти в областта на високопроизводителните софтуер и пресмятания в рамките на международната асоциация PRACE (Partnership for Advanced Computing in Europe).

Кандидатът по конкурса е представила със научни резултати в над 40 научни доклада, на международни и национални конгреси, конференции, работни съвещания и семинари. Участвала е в 16 научни проекта (4 с европейско и 12 с национално финансиране, като от тях 11 финансирани от ФНИ и един от МОН) и съм била основен изпълнител, респ. ръководител на 2 проекта, финансирани по Програма за подпомагане на кариерното развитие на младите учени в БАН.

Научните и научно-приложните приноси в публикациите, представени за участие в настоящия конкурс, могат да се разделят в следните три категории:

1. Молекулно моделиране на човешки интерферон гама
  - 1.1. Моделиране на структурата на hIFN $\gamma$
  - 1.2. Мутантни форми
  - 1.3. Гликозилиране
  - 1.4. Взаимодействие с гликозаминогликани
2. Моделиране на антимикробни пептиди (АМП)
  - 2.1. Структура
  - 2.2. Поведение и самоорганизация в разтвор
  - 2.3. Взаимодействие с мембрани
3. Научен софтуер
  - 3.1. Анализ и тестване на специализирани приложения и пакети за високопроизводителни пресмятания;
  - 3.2. Разработване на инструменти и методи за молекулно моделиране на биологични системи.

Изследванията, методите и проблемите в отделните категории в голяма степен са свързани, припокриват се и често се допълват и са тясно свързани по отношение на дългосрочните цели и перспективи.

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

#### ***3.1. Научна и научно приложна дейност***

Научната дейност на д-р Елена Лилкова е несъмнено в областта на математическо моделиране и приложение на математиката (приложения в изчислителната физика и биология)

#### ***3.2. Научни, научно приложни приноси***

Основните приноси на кандидата са в областта на изчислителната математика и математическото моделиране с приложения в изчислителната физика и биология.

Искам да отдели следните постижения, в които, според мен, кандидатката има сериозни научни и научно-приложни приноси:

- Конструиран е 3D модел на цялостната молекула на цитокина с добавени липсващите аминокиселинни остатъци от С-краищата. Пресметнати са енергиите на разтворимост на различни представителни конформации на молекулата на цитокина по метода на пертурбация на свободната енергия. Получените от д-р Лилкова резултати определят компактната конформация, при която С-краищата са прибрани до глобулата на цитокина, като енергетично най-изгодна. Доколкото ми е известно, това е първият цялостен модел на структурата на човешки интерферон гама.
- Изследвана стабилността на структурата на избрани мутанти на hIFN $\gamma$  със замени в позиции 86-88 (публикация Г.2). Анализът на стабилността на структурата на глобулата се основава на метода за многостъпково пространствено-времево консенсусно клъстериране. Във всяка молекула са идентифицирани пет домейна, които имат конкретни функции в молекулата и е анализирано влиянието на мутациите върху състава и конформацията на тези домейни.
- Използвана е метадинамика, за да бъде оценена вероятността новоизолираните в публикация Г.8 пептиди да се внедрят и да преминат през асиметрична моделна бактериална мембрана (виж, публикация Г.12). Въз основа на анализ на повърхнината на свободната енергия на преминаване през липидния двуслой е установено, че само за три от 10-те изследвани пептида преминаването през мембраната от външния към вътрешния слой е енергетично изгоден процес. Наред с това, почти всички пептиди имат добре дефинирани дълбоки минимума в хидрофобния слой на мембраната, което е индикация, че те вероятно могат да се внедрят в нея, без да се транслокират.
- Разработено е приложение на Поасон солвър в пакета DL\_POLY\_4 (публикация Г.15) като алтернатива на метода със суми на Евалд. Методът разчита на комбинация от методите на двойно спрегнат градиент и спрегнат градиент за осигуряване на независимост от началните условия, както и стабилност на итеративното решение. Разработването на солвър на уравнението на Поасон за масивни паралелни изчисления на хибридни системи като суперкомпютъра Авитохол е представено в публикация Г.17. Алгоритъмът се базира на схема за дискретизация с 27-точков шаблон и използва стабилизирани двойно спрегнат градиент.

### 3. Отражение на научните публикации на кандидата в литературата (известни цитирания)

Д-р Елена Лилкова е документирала общо 36 цитирания, като почти всички са в специализирани издания с SJR или IF ранг.

Представените данни показват, че резултатите на кандидата за доцент се използват от специалистите, работещи в тази важна област. Елена Лилкова е

авторитетен изследовател в общността на специалистите, занимаващи се с биологични макромолекули и комплекси и желан партньор за научни сътрудничества.

#### 4. Оценка на личния принос на кандидата

Личният принос на кандидатката е безспорен. Всичките 21 публикации, представени за конкурса са в съавторство, но в тази област е естествено да се работи в колективи. Във всички публикации нейното участие е равностойно с останалите съавтори.

#### 5. Критични бележки

Нямам критични бележки по отношение на резултатите, съдържащи се в публикациите и по отношение на оформянето на материалите за конкурса. На база впечатленията, които имам от различни конференции и семинари от Елена Лилкова искам да отбележа, че тя винаги много сериозно и професионално се е отнасяла към коментари и забележки и ги е отстранявала.

#### 5. Заключение:

Имайки предвид гореизложеното, и факта, че кандидатката удовлетворява всички необходими изисквания на ЗРАСРБ, ППЗРАСРБ, ПБАН, Правилника за специфичните условия за придобиване на научни степени и за заемане на академични длъжности в ИИКТ-БАН, д-р Елена Боянова Лилкова да бъде избрана на академична длъжност „Доцент“ по професионално направление 4.5. „Математика“, спец. „Математическо моделиране и приложение на математиката (приложения в изчислителната физика и биология“ за нуждите на секция „Научни пресмятания с Лаборатория по 3D дигитализация и микроструктурен анализ“.

Поради това моето заключение за заемане на обявената по конкурса академична длъжност "Доцент" от д-р Елена Боянова Лилкова е ПОЛОЖИТЕЛНО.

06.07.2022 г.

Член на жури

На основание

ЗЗЛД