



ЮГОЗАПАДЕН УНИВЕРСИТЕТ „НЕОФИТ РИЛСКИ“
Природо-математическия факултет
Катедра „Информатика“

Резюме на публикациите

на

гл. ас. д-р **И в а н Т р е н ч е в**

за участие в конкурс за “доцент”

по научната специалност „Информатика”,

в професионално направление

4.6 Информатика и компютърни науки

Обявен в ДВ бр. 55 / 19 юли 2011 г.

Б Л А Г О Е В Г Р А Д

2 0 1 1 г.

СПИСЪК С ПУБЛИКАЦИИ НА АВТОРА

- 1. Milanov P., Pencheva N., Trenchev I., Milanov A. Molecular design of selective enkephalin analogues by neural network modeling // Доклади на БАН, Т. 57, №4, 2004, с. 27- 30**

Изследванията по изкуствените невронни връзки са свързани с това, че способа на обработването на информацията от човешкия мозък коренно се отличава от методите, които се използват от цифровите компютри. Мозъкът представлява много сложен не линеен успореден компютър (система за обработка на информация). Той е способен да организира свои структури компоненти наречени неврони, така че те биха могли да изпълняват конкретни задачи (разпознаване на образи, обработване на сигналите на органите за чувство, моторни функции), много пъти по-бързо и от най-бързите съвременни компютри. Обектите на невронни мрежи за моделиране в това проучване са ендогенни пептиди и техни аналози с морфин-подобни имоти (enkephalins). Представени са формули за изчисляване на фармакологичните агонизъм на тези пептиди. В настоящото изследване е показан дизайнът и архитектура на многослойна невронна мрежа за моделиране на последователност – активност, последователност-селективност и последователност - ефикасност на отношения (QSAR) на енкефалиновите аналози. Различният вид на трансфериращи функции на невроните са определени в различните слоеве на мрежата. Показано е, че архитектура на по-сложна невронна мрежата позволяват да се предскаже ефикасност, ефективност и селективност на енкефалините.

- 2. Тренчев И. Математически модели за изследване оптималността на генетичния код: Автореферат. София, 2006, с. 28**

Предмет на моделиране в настоящата работа са някои аспекти на молекулно - биологичния механизъм за съхранение и предаване на информация в живите организми. Понятието оптималност на съвременен генетичен код може да има различен контекст в биологията, биохимията и молекулната механика на нуклеиновите кеселини, математиката и биоинформатиката. Както стана ясно, от гледна точка

на еволюционното развитие на видовете, оптимален е кодът, който не е абсолютно резистентен към мутации. От математическа гледна точка, минимален брой мутации, т.е грешки, означава минимизация на ефекта от грешки, което е оптимизационен проблем. Критериите за оптималност също усложняват проблема, защото са различни: дължина на кодона, броят на буквите (нуклеотидите); броят на кодоните в синонимното множество, позицията на мутацията в кодона и други.

Нашите резултати показаха, че всички аминокиселини са представени с оптимални множества от кодони относно съпротивлението им или резистентността им към мутации. В този смисъл съвременния генетичен код е измежду най-добрите кодове, запазващи генетичната информация и респективно структурата на белтъците.

3. Hristov V., Trenchev I., Maslarska G. Efficient sharing of the capacity for different types traffic in multicervice networks // Национална конференция с международно участие: Електроника 2008, София, 29-30 май 2008, с. 94-99

В тази статия е изследвано предаването различните видове трафик в рамките на една мрежа. За целта е направен анализ на предаване на данни в многослойна мрежа като предавания на глас и видео в реално време (електронна поща, трансфер на файлове и др.) или еластични трафик. Трафикът в реално време е чувствителен към закъснение от край до край, трептене, и степента на загуба. От друга страна, еластичният трафик не е толкова чувствителен към ограничения на времето, но обикновено е много чувствителен към загуба на данни. Настоящата статия има за цел най-ефективно определи и изследва на капацитета за различните типове трафик в многослойни мрежи, базирани на аналитично моделиране на загубите и закъсненията.

4. Milanov P., Pencheva, N., **Trenchev, I.**, Grancharska K. The slope as a Parameter in fitting of concentration-response relations // Fourth International Bulgarian-Greek conference: Computer science'2008, Kavala, Greece, 18-19 September, 2008, p. 90-97

В настоящата разработка е направено изследванек, което цели да се изясни ролята на наклона̀т като параметър при фитване на криви, съответстващи на концентрацията на активно вещество при количествената фармакология. Бяха тествани четири енкефелинови аналози за тяхната ефективност чрез електрически предизвикани контракции в някои изолирани тъкани, съдържащи специфични рецептори за енкефалина. Експериментално полученият инхибиторен ефект е представен във формата на криви и двете компютърно симулирани точки с данни, които са апроксимирани с две: дву- параметрична хиперболична функция (ТРН; $E = a_0 [A] / ([A_{50}] + [A])$) и три параметрична хиперболична функция (ТНРН; $E = a_0[A]^p / ([A_{50}]^p + [A]^p)$); A - агонист опиоид; $[A]$ – концентрация на агониста; E - измереният инхибиторния ефект; a_0 , и са асимптоти (E_m^A - максимум отговор от A , $[A_{50}]$ е локален параметър (концентрация на агонист, който произвежда $0.5E_m^A$ и p наклона на кривата. Параметрите IC_{50} - концентрация на агонист, който произвежда $0.5 E_m^T$ (потенциалния максимум отговор на тъканта) и A_{50} , също са изчислени. Полученият резултат предполага, че: (i) Приближаването с ТРН и ТНРН е подходящо, когато стойността на наклона принадлежи на интервала (0.70, 1.30). Трябва да се приложат допълнителни процедури, когато разликите между теоретичните и експериментални E_m са значителни (ii) Когато стойността на наклона принадлежи на интервала (0.00, 0.60) използването на ТНРН е по добро, отколкото с ТРН, (iii) Когато стойността на наклона е по- малка 0.30 за частични агонисти с E_m^A по- ниско от 0.30 и ниска e_{rel} . Функциите за фитване при тези случаи трябва

да са *ТНРН* или права линия, което зависи от разположението на експерименталните точки с данни.

- 5.** Stoilov A., Pencheva N., Trenchev I., Grancharska K. **Stimulus-response relations of deep tissue pain obtained with computer-controlled pressure algometry** // International Scientific Conference – SWU, FMNS: 2009, Blagoevgrad, 3-7.06.2009, p. 92 – 97

Целта на това проучване е да се тества и опише новия дизайн на компютъризиран алгометър за налягане. В проучването са тествани здрави мъже. Експерименталната установка се състои от маншет турникет, с компютърно управление, въздушен компресор и електронни визуална аналогова скала. Стойностите за праг на болка (*PT*) и толерантност за праг на болка (*PTT*) са: 206 - 10 кРа и съответно 243,7 - 13 кРа. Увеличение ($p < 0.05$) на прага болката е проведено след промените на компресията. Стойностите без биофидбек са сходни по отношение *PTT*, а стойностите за *PT* и без промени. Оптимално приближение на експерименталните данни е получено с експоненциалния растеж функция ($Y = y_0 + A e^{x/m}$). Направените проучвания позволяват да се направят следните изводи: (I), може да се анализира болката с компютъризиран алгометър за налягане (II) експерименталните данни, получени от тестване на доброволци, могат да се апроксимират с експоненциална функция.

- 6.** Kasabov Bl., Trenchev I., Iliev G., Stoilov A., Boshnakov F. **Prediction secondary structure of RNA** // International Scientific Conference – SWU, FMNS: 2009, Blagoevgrad, 3-7.06.2009, p. 116 – 121

В тази статия описваме структурата на РНК и алгоритми за предсказване на вторичната и структура. Представени са различни софтуери за генериране на

вторична и третична структура на РНК. Описан е биоинформатичния софтуер на Matlab за анализ на генетична информация.

- 7.** Slavkov Sv., Gashteovski K., **Trenchev I.**, Stoilov A., Borisova N. **Description of the biological databases // International Scientific Conference – SWU, FMNS: 2009, Blagoevgrad, 3-7.06.2009, p. 122 – 127**

Химиоинформатиката се отнася до системи и научни методи, използвани за съхранение, извличане и анализ на огромно количество молекулни данни, които са генерирани в модерните опити за откриване на лекарства. Като цяло, тези данни попадат в една от следните четири категории: структурни, числени, текстови, и графични. Молекулната структура се отнася до 1-, 2-, или 3-измерни представяния на молекулите. В статията са представени основните типове биологични бази от данни. Описани са основните им характеристики и примери за тяхното прилагане.

- 8.** Galabova, S., Trencheva, T., **Trenchev, I.** **Description of the digital formats of electronic documents used in digital library // International Scientific Conference – SWU, FMNS: 2009, Blagoevgrad, 3-7.06.2009, p. 221 – 228**

В настоящото изследване са описани основните характеристики на електронните библиотеки. Представени са основните файлови формати използвани в ел. библиотеки, както и техни характеристики. Направена е съпоставка за техни прилики и разлики.

- 9. Galabova, S., Trencheva, T., Trenchev, I. Standardized structure of electronic records for information exchange / International Scientific Conference – SWU, FMNS: 2009, Blagoevgrad, 3-7 June, 2009, p. 229 – 232**

В статията е представена структурата на електронно записи, чиято форма е стандартизиран в ISO 2709:2008. Този международен стандарт описва една обща структура, рамка, предназначена специално за комуникация между системи за обработка на данни. Този стандарт не се използва като формат за обработка на данни в рамките на системите. Основни понятия са дефинирани, както следва: знак, поле за данни, директория, директория карта, поле, сепаратор поле и др. Описана е общата структура на записа. Целта на това изследване е да се разберат предимствата и структурата на стандартизирания формат за обмен на информация в ISO 2709:2008.

- 10. Trenchev I., Milanov P., Velkov Zh., Pencheva N., Tadjer A. Stability of oligonucleotides as a criterion for resistance of the genetic code // Scientific Research Journal of South-West University, June 2009, 2(1), p. 11-19**

За да анализираме стабилността на ДНК молекулата, са сравнени потенциалните енергии на нуклеотидните последователности, които кодират един и същ късоверижен белтък, но са генерирани от съвременен генетичен код (СГК) и „оптимален” теоретичен генетичен код (ТГК), получен при решаването на някоя от екстремалните задачи от изследване на свойствата на СГК. За моделиране на ДНК фрагменти използвахме метода на молекулната механика, като оптимизацията на енергията на моделните олигонуклеотиди се извършва във вакуум. Този подход е единствено възможен за молекули с такъв размер (съдържащи около 1000 атома). Изчисляването на оптимална структура на моделните олигонуклеотиди с

помощта на по-точни квантовохимични методи или пресмятане на енергията във водна среда изисква огромни изчислителни ресурси. При изчисления чрез ММ могат да бъдат сравнявани потенциалните енергии само на молекули с еднакъв атомен (нуклеозиден) състав.

Изследвахме късоверижан белтък, защото нуклеотидните последователности, които го кодират, са също къси и можем да изчислим тяхната потенциална енергия.

Причината, поради която се спряхме върху белтъка ([Met⁵]) енкефалин е, че: (а) те са късоверижан, т.е. изграден е от само от 5 АК, и (б) може да се открие в различни видове, принадлежащи към гръбначните животни. [Met⁵] енкефалин с аминокиселини секвенции Н-Тур – Gly – Gly – Phe – Met-ОН и Н-Тур, е ендогенен пептид с морфино-подобно действие. Той произлиза от молекула предшественик, наречен прекурсор, който се кодират от различни гени в ДНК. От прекурсора проенкефалин се фрагментират 6 копия на [Met⁵] енкефалин и 1 копие на [Leu⁵] енкефалин, и други аналози с по-слабо действие. Продинорфинът е източник на динорфин А, динорфин В, и др., и съдържа 5 копия на [Leu⁵] енкефалин.

За да изследваме устойчивостта на ДНК молекулата, респективно предаването на наследствената информация в първия биологичен канал, ние следвахме следния алгоритъм: (а) генерирахме всички възможни комбинации на [Met⁵] енкефалин, съгласно СГК и избран от нас ТГК; (б) определихме кои от комбинациите реално съществуват в природата чрез търсене в БД с нуклеотидни и аминокиселини секвенции за енкефалини, чрез техните прекурсорни молекули; (в) формулирахме комбинации, които имат един и същ брой нуклеотиди и еднакъв атомен състав; (г) изследвахме молекулно-механичните параметри на секвенциите с един и същи брой нуклеотиди чрез софтуерно моделиране на ДНК; и (д) анализирахме връзката между реалните и някои теоретични варианти на нуклеотидни секвенции на [Met⁵] енк и молекулно механични параметри на тези ДНК сегменти, като критерии за конформационна устойчивост на молекулата и респективно като условие за оптималност на ГК.

За да бъдат сравнени коректно потенциалните енергии на олигонуклеотидите, получени чрез молекулна механика, молекулно механичните параметри на ДНК фрагментите на различни комбинации, е

необходимо да се групират така, че да имат равен брой бази и следователно еднакъв атомен състав.

Настоящото изследване позволява да се опишат интересни тенденции за еволюцията на биологични видове и по-точно на гръбначните в рамките на СГК. Тези тенденции отразяват спецификата на СГК и най-общо са:

I. При низшите гръбначни животни броят на комбинациите в ДНК, които кодират една белтъчна молекула, е значително по-голям, а броят на копията е малък. Конформационната стабилност на тези молекули е значително по-малка от тази при висшите организми, което предполага по-голяма склонност към мутации и по-голям еволюционен потенциал. При много биологични проучвания, които изследват пътищата на еволюцията, се търсят връзки между видовете, които са причина за регресивно развитие и склонност към изменчивост. Ние считаме, че създадените от нас модели и алгоритми за изследване на съвременен генетичен код и търсене в бази от данни, могат в голяма степен да подпомогнат такъв род изследвания и да обогатят теориите за произхода и изменчивостта на видовете.

II. При висшите гръбначни животни и човека броят на комбинациите в ДНК, които кодират една белтъчна молекула, е редуциран, но е увеличен броят на копията. Тези комбинации са близки до оптималните, имат по-голяма резистентност към мутации и по-малък еволюционен потенциал.

Микрооганзимите, растенията и животните, които са възникнали вероятно в много отдалечени във времето периоди от възникването на живота на земята, са подвластни на един и същ код – СГК. Неговите свойства характеризират нуклеиновите киселини като универсални материални преносители на информацията в биологията, като обединяват всички живи организми.

11. Trenchev I., Borisova N. Bioinformatical research of the protein structure with Matlab// International Congress on Mathematics: MICOM 2009, Ohrid, Macedonia, September 16th-20th, 2009, p. 103

Проблемът на предсказване на пространствената структура на протеините в зависимост от последователността на аминокиселини на протеина е един от най-трудните проблеми в съвременната биохимия. Математически това е NP-трудна оптимизационна задача. Друга основна задача в областта на структурната молекулярна биология е сравнението на протеиновите структури. Структурната прилика често отразява обща функция или произход на протеините.

В тази статия ние се представят биоинформатични изследвания със софтуерна програма - Matlab:

- търсене в областта на биологическите бази данни;*
- генериране на 3D структурата на някои протеини;*
- сравнение на протеиновите структури.*

12. Тренчева, Т., Тренчев, И. Приложимост на новите информационни системи в библиотечния мениджмънт // Научна конференция с международно участие, II : „Библиотечният мениджмънт – научни и практически аспекти“ Варна, ДИПКУ, 26-27 ноември 2009 г. с. 195-212

Дигиталните библиотеки, разработени през последното десетилетие, подпомагат работата на потребители и библиотечният персонал. В тази статия са посочени критериите на потребителите и библиотекарите за подпомагане на библиотечния мениджмънт.

В статията са разгледани мултимедийните дигитални библиотеки, и по-конкретно тяхната същност, основните елементи, принципи и особености при изграждането им. Обърнато е внимание на качеството на обслужване, ефективност на работата на системата, както и възможностите на потребителите за online работа през Интернет. Разкриват се и проблемите в сегашния дизайн на цифровата библиотека и нейното развитие. Разгледани са конкретни примери за дигитални библиотеки, като: NewGenLib, OpenBiblio, Eprint, и предложения за подобряване на дигиталния библиотечен дизайн.

- 13. Trenchev I., Kirilov L., Geographic information systems and virtual reality // Scientific Research - Electronic Issue, South-west University, Blagoevgrad, Bulgaria, Volume 8, 2010, Available on:<<http://press.swu.bg/volume-collection/volume-8/geographic-information-systems-and-virtual-reality.aspx>>**

В тази статия представяме развитието на триизмерните на географски информационни системи (GISs) и демонстрираме как можем да използваме виртуална реалност в географска информационна система. Показваме използването на серия от техники за подпомагане на избора на място от мрежа на ГИС и установяване на местоположението в географска система. Описано е как се генерират виртуални карти и възможността как компютърен модел може да се използва, за да се покажат възможни водосборни области, проблемите с околната среда и потенциалните въздействия върху нея.

- 14. Тренчева, Т., Тренчев И. Приложение на 3-D моделите в електронното обучение // Пролетен семинар на УНИБИТ 2011: Приложение на новите информационни технологии в образователния процес, Костенец, 24-25 март 2011 (под печат)**

Виртуална реалност представлява генериран с компютърни и математически средства примерен модел на дигитално пространство, което поражда усещане за присъствието на човек в него. Тя дава възможност за взаимодействие с обекти, промяна и моделиране на формата на обектите на тяхната форма и операции в това пространство. Холограма представлява, предаване или генериране на примерен модел с компютърни и изчислителна техника. Разработването на този тип изображения доведе до създаване на нов тип възприятия и увеличаване на усещането за близост от приемащата страна. В тази разработка ще

направим кратък обзор на новите технологии и приложението им в електронно обучение. Ще бъдат показани илюстрации на приложението на тези технологии в съвременното обучение. Ще бъдат описани накратко предимствата на този тип технологии като картинно (многомерно) представяне на субекти, което замества описанието с много думи, взаимодействие на различни обектите в 3D пространството, премахване на ограниченията между учител и обучаем и други.

15. Yanev N., Milanov P., Trenchev I., Mirchev I. Integer programming approaches to HP folding // [poster] Eight European Workshop in Drug Design, Certosa di Pontignano, Siena – Italy, May 22nd-29th , 2011

Протеините са биологични макромолекули от последователност от аминокиселини. Свойствата на протеините зависят от 3D структурата на протеините. Един от най-разпространените методи за предсказване на пространствената структура на белтъците е HP модела. Той е базиран на свойството хидрофилност на аминокиселините т.е. хидрофобните аминокиселини се позиционират вътре в ядрото на молекулата.

В това изследване е представен нов целочислен модел, за който LP релаксацията осигурява горна граница на максималния брой контакти и позволява решаването на проблема с традиционни инструменти като CPLEX. Предложеният модел е лесно приспособим за различни пространства: двоична или кубична решетка. За проверка на модела избрахме два реални протеина от биологични бази от данни. Превърнахме първичната им структура в HP последователност и изчислихме оптималната им 3D структура и я сравнихме с реалната.

От направеното сравнение за orexin peptide и за hypotensive peptide може да се направим следните изводи:

- Предсказването на 3D структурата на протеин с HP folding е реална и може да се използва в практиката;*
- Този начин на моделиране трябва да се комбинира с модели базиращи се на молекулната механика за по голяма точност.*

- 16.** Trencheva, T., **Trenchev, I.**, Milanov, P., Mirchev, I., **Bioinformatics and intellectual property // International Scientific Conference – SWU, FMNS: 2011, Blagoevgrad, 8-11.06.2011, p. 132-137**

Целта на тази разработка е да покаже същността на биоинформатиката и връзката и с интелектуалната собственост. Биоинформатиката е представена в три категории: първо биологични последователности като ДНК, РНК или протеини, представени като последователност от аминокиселини; второ всички биологични бази от данни, в които тези последователности са представени; трето софтуера и хардуера за анализ и обработка на информацията от базите данни. В настоящата статия е анализирано как тези три категории са свързани с закона за патентите и регистрацията на полезните модели, закона за авторското право и сродните му права и къде такава защита може да бъде намерена.

- 17.** Stoev R., Gashteovski K., Todorin I., **Trenchev, I.**, Borisova N., Traykov M. **Bioinformatics research of 3D structure of the proteins //International Scientific Conference – SWU, FMNS: 2011, Blagoevgrad, 8-11.06.2011, p. 138-143**

Настоящата статия е студентска разработка за изследване на 3D структурата на протеините. Използваните алгоритми в настоящото изследване са базирани на HP фолдинг. Написан е софтуер за генериране входни файлове към оптимизационните пакети CPLEX и Matlab. За реализиране на софтуера за използвани компютърните езици C++ и Java. Демонстриран е софтуер за автоматично изчертаване на 3D графиката в Matlab от изходните файлове на CPLEX.

- 18.** Gashteovski K., **Trenchev, I.**, Borisova N., Todorin I., Iliev G. **Neural networks – basic principles for construction, their application in**

drug design and genetic algorithms// International Scientific Conference – SWU, FMNS: 2011, Blagoevgrad, 8-11.06.2011, p. 182-187

Направен е обзор за използването на невронни мрежи в лекарствено рецепторния дизайн. Описвани са алгоритми за трениране на невронни мрежи и описването на веществата с молекулни дескриптори.

За обучението на невронна мрежа е писан софтуер на Java.

19. Yanev N., Milanov P., Trenchev I. A new integer programming model for NP problem // International conference on Mathematical Methods and Models in Biosciences and School for Young Scientists: Biomath 2011, Sofia, June, 2011, p. 72

Представени са нови резултати върху нагъването на протеини базирани на NP фолдинг. Показани бяха резултати за подобряване на изчислителната сложност на разработеният от нас математически модел.

Показани бяха нови числени резултати пресметнати с сървъра на Югозападен университет „Неофит Рилски“.

20. Тренчев, И., Т. Тренчева. Приложение на софтуерни пакети със свободен лиценз в образователния процес // Научно-практически форум „Иновации в образованието и познавателното развитие“, 29-31.08.2011, Бургас, сп. Образование и технологии, бр. 2, 2011, с. 77- 80

Целта на настоящия разработка е да се направи кратък обзор на софтуерни пакети със свободен лиценз, които могат да бъдат прилагани в обучението както на средношколци, така и на студенти. За постигане на така поставената цел е направен паралел между комерсиални пакети и софтуерни пакети на свободен достъп за графичен дизайн, като всеки един

от пакетите е характеризирани накратко, посочени са техните предимства и недостатъци и е направен анализ на техните възможности.

Накратко са представени договорите за свободен достъп и закрила на интелектуалната собственост, техните особености и приложение при софтуерните пакети.