

Резюмета

на публикациите на гл. ас. д-р Методи Георгиев Трайков за участие в конкурс за заемане на академичната длъжност „ДОЦЕНТ“ в област на висше образование 4. Природни науки, математика и информатика, професионално направление 4.6. Информатика и компютърни науки, обявен в ДВ брой 84 от 21.10.2022

За участие в конкурса са представени 1 хабилитационен труд и 7 заглавия на научни трудове, които не повтарят представените за заемане на академичната длъжност „Главен Асистент“ и ОНС „доктор“. Справката съдържа резюмета на представените за конкурса научни трудове.

СЪДЪРЖАНИЕ

Група В, Показател 3 (монография) 3

1. Трайков, М. Г. Проблемът за нагъване на протеини – подходи, модели и алгоритми, издателство „Образование и познание“, 2022, ISBN 978-619-7515-28-2, 208 страници 3

Група Г, Показател 7. Научна публикация в издания, които са реферирани и индексирани в световноизвестни бази данни с научна информация (Web of science или Scopus),..... 4

1. T.Z. Todorova, M.G. Traykov, A.V. Tadjer, Zh.A. Velkov, 2013. Structure of flavones and flavonols. part I: role of substituents on the planarity of the system. Computational and Theoretical Chemistry, vol. 1017, pp. 85-90. (Impact Factor: 1.403, Web of science: Q4)..... 4
2. Traykov, M., Mavrevski, R., Angelov, S., Trenchev, I. (2022). Bioinformatics: Model Selection and Scientific Visualization. In: Zlateva, T., Goleva, R. (eds) 18th EAI International Conference on Computer Science and Education in Computer Science, CSECS 222, Virtual, Online, 24 June 2022-27 June 2022. Lecture Notes of the Institute for Computer Sciences, Social-Informatics and Telecommunications Engineering (LNICST), vol 450. Springer, Cham, pp. 92-101. https://doi.org/10.1007/978-3-031-17292-2_8 (Scopus, SJR) 5
3. Yanev N., Traykov M., Milanov P., Yurukov B., 2018. A new classifier for protein fold class recognition. C. R. Acad. Bulg. Sci., vol. 71(7), pp. 885-892. (Impact Factor: 0.27, Scopus: SJR(0.205))..... 5
4. Trenchev I., Traykov, M., Mavrevski, R., Popchev, V., 2018. Investigation of the relationship between the hydrophobicity of an amino acid and codon, which shall encodes. WSEAS Transactions on Systems and Control, vol. 13, pp. 401-408, E-ISSN: 2224-2856. (Scopus: SJR(0.157))..... 6
5. Mavrevski, R., Traykov, M., Trenchev, I., Trencheva, M., 2018. Approaches to modeling of biological experimental data with GraphPad prism software. WSEAS Transactions on Systems and Control, vol. 13, pp. 242-247, E-ISSN: 2224-2856. (Scopus: SJR(0.157)) 6
6. Mavrevski, R., Traykov, M., 2019. Visualization software for Hydrophobic-Polar protein folding model. Scientific Visualization, vol. 11(1), pp. 11-19, (Scopus: SJR(0.268))..... 7
7. Mavrevski, R., Traykov, M., Trenchev, 2019. Finding the shortest path in a graph and its visualization using C# and WPF. International Journal of Electrical and Computer Engineering (IJECE), vol. 10(2), pp. 2054-2059. (Scopus: SJR(0.322)) 8

ГРУПА В, ПОКАЗАТЕЛ 3 (МОНОГРАФИЯ)

- 1. Трайков, М. Г. Проблемът за нагъване на протеини – подходи, модели и алгоритми, издателство „Образование и познание“, 2022, ISBN 978-619-7515-28-2, 208 страници**

Резюме: Монографичният труд на тема „Проблемът за нагъване на протеини – подходи, модели и алгоритми” представя резултатите от едно интердисциплинарно изследване в областта на Биоинформатиката имащо отношение към молекулярната биология, физико-химията, изчислителната химия, важни раздели от физиката, биоинформатиката, биологията и математиката. Фокусът на монографията е върху фундаменталния въпрос за механизма на формиране на третичната структура на протеините, от която структура в най-голяма степен зависят биологичните свойства на тези протеини. С други думи монографията е посветена на темата за предсказване на тримерната структура (третичната структура) на протеините, базирайки се на тяхната първична структура. Този проблем е един от основните изследователски проблеми в структурната биоинформатика. Решението на този проблем е от огромно значение за разгадаване на функциите на даден протеин, които са много по-ясно свързани с третичната структура на протеините отколкото с тяхната първична структура. Всеки напредък в тази област се цени високо от изследователите, защото допринася за по-доброто разбиране на принципите на функциониране на живата материя.

Монографията представя модели, алгоритми, подходи и техники за предсказване на третичната (тримерната) структура на протеини. Разгледани са две гледни точки на проблема – от страна на биолози, които се базират на биологичните характеристики на протеините и от страна на математици и програмисти, които се базират на техники за целочислена оптимизация, както и на алгоритми за решаване на оптимизационни задачи, с цел употреба на съвременен софтуер като CPLEX и GUROBI.

Монографичният труд „Проблемът за нагъване на протеини – подходи, модели и алгоритми” представя едно съдържателно и задълбочено изследване в областта на Биоинформатиката. Той е с комплексен, интердисциплинарен характер и съдържа научни и научно-приложни приноси.

Изчислителните експерименти показват, че идеята за разделяне на проблема на под-проблеми работи добре за дълги протеинови последователности. Сравненията на

получените резултати с резултати, генерирани от известни в литературата алгоритми за решаване на проблема показват, че разработените модели и алгоритми са качествени и надеждни.

ГРУПА Г, ПОКАЗАТЕЛ 7. НАУЧНА ПУБЛИКАЦИЯ В ИЗДАНИЯ, КОИТО СА РЕФЕРИРАНИ И ИНДЕКСИРАНИ В СВЕТОВНОИЗВЕСТНИ БАЗИ ДАННИ С НАУЧНА ИНФОРМАЦИЯ (WEB OF SCIENCE ИЛИ SCOPUS),

- 1. T.Z. Todorova, M.G. Traykov, A.V. Tadjer, Zh.A. Velkov, 2013. Structure of flavones and flavonols. part I: role of substituents on the planarity of the system. Computational and Theoretical Chemistry, vol. 1017, pp. 85-90. (Impact Factor: 1.403, Web of science: Q4)**

Резюме: Статията представлява първа част от обширно изследване на ефектът на -ОН, -NH₂, -NO₂ и други заместители върху планарността (и нивото на делокализация) на серия от флаволи и флавоноли. Тази характеристика е особено важна по отношение на биологичната активност на флавоноидите. Стойностите на двустенните ъгли за това проучване са получени чрез оптимизирана газова фаза и във геометрии на вода при функционална теория за плътността на ниво B3LYP/6-31G(d,p).

През последните години флавоноидите привлякоха голям брой учени, тъй като те са мощни уловители на радикали. Кинетичните анализи на инхибирането на протеин тирозин киназите показват, че флавоноидите са конкурентни инхибитори на нуклеотида аденозин трифосфат. Налични са съществени доказателства, показващи, че неподходящата или засилена експресия на тези ензими може да допринесе за трансформираното на клетките при много човешки злокачествени заболявания. Някои флаволи като примулетин, кризин и лутеолин показват съответно вазорелаксирани, антиоксидантни и химиопрофилактични ефекти. Редица проучвания показват, че флавоноидите проявяват противовъзпалително действие чрез способността си да модулират производството на свободни радикали от фагоцитни левкоцити. Флавоноидите са идентифицирани като добри инхибитори на алдозоредуктазата, ензим от полиолния път, който регулира кръвните нива на глюкоза в тялото и е свързан с множество вредни усложнения.

Различни фактори влияят върху ъгъла между двата пръстена на флавоноидите и по този начин върху степента на делокализация в тях. От една страна, съществува тенденция към стабилизиране на молекулата чрез разширяване на конюгираната система и

прехвърляне на електронна плътност към карбонилната група в позиция 4 в пръстен C. От друга страна, има отблъскване или привличане между заместителите в позиции 3 и 20.

Ако има водород на позиция 3, то той отблъсква водорода на позиция 20 и освобождаващата електрони функционална група (NH₂ или OH) на позиция 40 може да намали този ъгъл. Същите функционални групи при позиция 30 нямат забележим ефект както върху двустенния ъгъл между двата пръстена, така и върху функционалните групи с електрон-оттеглящ ефект.

2. Traykov, M., Mavrevski, R., Angelov, S., Trenchev, I. (2022). **Bioinformatics: Model Selection and Scientific Visualization**. In: Zlateva, T., Goleva, R. (eds) **18th EAI International Conference on Computer Science and Education in Computer Science, CSECS 2022, Virtual, Online, 24 June 2022-27 June 2022. Lecture Notes of the Institute for Computer Sciences, Social-Informatics and Telecommunications Engineering (LNICST), vol 450. Springer, Cham, pp. 92-101. https://doi.org/10.1007/978-3-031-17292-2_8 (Scopus, SJR)**

Резюме: Статията представя обобщение на основни критерии за избор на математически модел в биоинформатиката с цел разработване на надежден подход за предсказване на различни връзки в биоинформатиката. Като допълнение статията описва накратко приложението на компютърното моделиране при анализ на резултати, които са получени чрез математически модели за решаване на проблеми в биоинформатиката, като например проблема за нагъване на протеини, който представлява анализ на биологични структури и може да бъде пример за приложение на критериите за избор на модел за решаване на проблем в областта на биоинформатиката.

3. Yanev N., Traykov M., Milanov P., Yurukov B., 2018. **A new classifier for protein fold class recognition. C. R. Acad. Bulg. Sci., vol. 71(7), pp. 885-892. (Impact Factor: 0.27, Scopus: SJR(0.205))**

Резюме: В това проучване е предложен нов многогрупов класификатор с по-добри правилни положителни резултати за класифициране на нагъвания на протеини. Времевата сложност на класификатора позволява получаване на резултати в достъпно време при огромна размерност (8000) на характеристичното пространство.

Определянето на изпъкналите обвивки, използвани за представянето на диаграмата на Вороной, се получава като евристично решение на проблеми за класификация и разпознаване на модели в изчислителната геометрия. Получените резултати са сравнени с вече публикувани резултати по задача за класифициране на 27-класови протеинови

нагъвани. Резултатите са доста обещаващи както по отношение на коректността на класификациите, така и по отношение на времето за извършване на класифицирането. Времевата сложност на класификатора позволява запълване в достъпно време на празни в характеристичното пространство с огромно размерност (400 и 8000).

- 4. Trenchev I., Traykov, M., Mavrevski, R., Popchev, V., 2018. Investigation of the relationship between the hydrophobicity of an amino acid and codon, which shall encodes. WSEAS Transactions on Systems and Control, vol. 13, pp. 401-408, E-ISSN: 2224-2856. (Scopus: SJR(0.157))**

Резюме: Статията представлява кратък преглед на математическите модели за изследване на генетичния код. Направено е изследване на това как хидрофилността на аминокиселините влияе върху структурата на протеина. Представеният модел в статията позволява да се опишат нуклеотидните последователности при различни нива на еволюция на протеините. Също така е представен математически анализ на конструкцията на протеиновата структура и възможен еволюционен сценарий за даден протеин. Еволюцията на кода се основава на формални схеми, чиято релевантност е проста мутация и кардиналност на множество от синоними, което кодира една аминокиселина.

Понятието за оптималност на съвременния генетичен код може да има различен контекст в биологията, биохимията и молекулярната механика, математиката и биоинформатиката. От гледна точка на еволюционното развитие на даден вид, може да се каже, че оптимален е генетичен код, който не е абсолютно устойчив на мутации. От математическа гледна точка минималният брой мутации, т.е. грешката, означава минимизиране на ефектите от грешките, което е оптимизационен проблем. Критериите за оптималност допълнително усложняват проблема, тъй като са различни (например, дължина на кодоните, броя на нуклеотидите, броя на кодоните в синонимното множество, позицията на мутацията в кодоните и други), а тяхната комбинация е част от моделирането.

- 5. Mavrevski, R., Traykov, M., Trenchev, I., Trencheva, M., 2018. Approaches to modeling of biological experimental data with GraphPad prism software. WSEAS Transactions on Systems and Control, vol. 13, pp. 242-247, E-ISSN: 2224-2856. (Scopus: SJR(0.157))**

Резюме: Основен принос на тази публикация е постъпковото описание на прилагането на нелинеен регресионен анализ за бърз и ефективен анализ на данни в

биологията. Използван е методът на нелинеен регресионен анализ имплементиран в софтуера GraphPad Prism. Също така е направено моделиране на специфични експериментални данни, взети от литературата. Нелинейната регресия е изключително полезен инструмент при анализиране на данни, но изборът на модел е научно решение, основано на биологията, химията или физиологията и т.н., а не само на формата на графиката.

Целта на нелинейния регресионен анализ е да напасне модел към изследваните данни. Нелинейната регресия е една от най-мощните и полезни функции в Prism. Чрез нея всеки модел може да се съпостави с изследваните данни, за да се начертае крива и да се определят най-подходящите стойности за параметрите на модела. Софтуерът Prism може да сравнява модели и да даде отговор на въпроса „Кое уравнение (модел) пасва най-добре на всяко множество от данни?“. Това от своя страна може да бъде от съществено значение за биологичните науки, тъй като обикновено при тях се използват математически модели. За да се разберат сложни биологични системи като клетки, тъкани или други, не е достатъчно да се идентифицират и характеризират само отделни молекули в системата. Също така е необходимо да се получи задълбочено разбиране на взаимодействието между молекулите и различните пътища. Изчислителните модели помагат на учените да анализират системи и да разработват хипотези, които да ръководят проектирането на нови експериментални тестове.

6. Mavrevski, R., Traykov, M., 2019. Visualization software for Hydrophobic-Polar protein folding model. Scientific Visualization, vol. 11(1), pp. 11-19, (Scopus: SJR(0.268))

Резюме: В статията е представен софтуер за визуализация на резултати свързани с проблема за нагъване на протеини, които са получени чрез HP модела в 2D квадратна решетка. Най-простият и използван модел за нагъване на протеини е хидрофобно-полярният (HP) модел. HP моделът, обозначава аминокиселините като хидрофилни (H) или полярни/хидрофилни (P). Нагъването на последователността от аминокиселини на даден протеин може да се представи като само-избягващи се разходки в 2D или 3D решетка, където оптималната конформация има максимален брой контакти между H аминокиселините (H-H контакти), които не са съседни в аминокиселинната последователност.

Входът на програмата е HP последователност и резултати, генерирани чрез модел за нагъване на протеини, който е имплементиран и решен чрез оптимизационен софтуер като

CPLEX или GUROBI. Този софтуер за визуализация е ценен инструмент за изучаване на НР нагъването и може да бъде чудесен педагогически инструмент, който да помогне на студентите да придобият допълнителни умения в областта на биоинформатиката, както и да научат повече за протеините и тяхното нагъване.

7. Mavrevski, R., Traykov, M., Trenchev, 2019. Finding the shortest path in a graph and its visualization using C# and WPF. International Journal of Electrical and Computer Engineering (IJECE), vol. 10(2), pp. 2054-2059. (Scopus: SJR(0.322))

Резюме: В тази статия се изследва известна техника за намиране на най-кратък път (използвайки език за програмиране C# и модерни технологии като WPF), която може да се използва за намиране на нови идеи за решаване на по-сложни проблеми и прецизиране на алгоритми, подходящи за употреба на олимпиади по програмиране. В статията е описан софтуер за решаване на проблема за намиране на най-кратък път. Както е известно този проблем е класически проблем в математиката и компютърните науки с приложения в икономиката (последователно вземане на решения, анализ на социални мрежи и др.).

Статията е чудесен педагогически инструмент и може да помогне на обучаващите се в средните и висшите училища да придобият допълнителни умения по програмиране, както и да научат повече за алгоритмите и тяхното приложение.

Работата е пример за реализиране и прилагане на алгоритъма на Дейкстра за намиране на най-краткия път между два върха в свързан, неориентиран граф, който често може да се срещне като част от задачи за олимпиада по информатика.

28.02.2023 г.
гр. София

Подпис:.....
/ Методи Трайков /