

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0215U002065

Державний реєстраційний номер: 0113U000197

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 22-01-2015

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Проведення QSAR досліджень. Створення системи структурних фільтрів та моделі для позаекспериментального скринінгу мутагенності. Реалізація та впровадження експертної системи.

Початок етапу: 01.2014

Закінчення етапу: 12.2014

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Фізико-хімічний інститут ім. О.В.Богатського НАН України

Код за ЄДРПОУ: 03534535

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 048 766-20-44; факс 048 765-96-02

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 305.8
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Структурні фільтри для відсіву мутагенних (тест Еймсу) органічних сполук

Назва роботи англійською:

Structural filter for screening of mutagenic (Ames test) organic compounds

Реферат українською:

На основі літературних даних сформовано базу сполук з відомими значеннями мутагенності на тест Еймсу. З використанням статистичного методу випадкового лісу побудовані адекватні QSAR моделі для прогнозу вказаних властивостей. На основі отриманих моделей розроблено комп'ютерну програму у вигляді експертної системи для прогнозу мутагенності сполук.

Реферат англійською:

Database of compounds with known values of mutagenicity (Ames test) has been formed. The adequate QSAR models have been constructed for prediction of above mentioned properties using statistic random forest method. The computer program as expert system for prediction of mutagenicity of compounds has been developed on the base of obtained models.

Індекс УДК: 004.4; 004.42, 004.42: 575.224

Коди тематичних рубрик: 50.05

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Кузьмін Віктор Євгенович

Науковий ступінь:

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Комп'ютерне програмне забезпечення "Hierarchical Expert System" у вигляді експертної системи прогнозу мутагенності сполук.

Назва НТП англійською: Computer software "Hierarchical Expert System" as expert system for prediction of mutagenicity of compounds.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Хімічне виробництво

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Експертну систему розроблено у виді комп'ютерної програми "Hierarchical Expert System" для використання на комп'ютерах IBM PC під управлінням операційної системи MS Windows XP/Vista/7/8. Програма дозволяє для органічних сполук проводити прогноз значень мутагенності сполук за тестом Еймсу(з урахуванням областей компетенції моделей).

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначає НАН України

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні інститути хімічного, біологічного та фармацевтичного напрямку

Перспективні ринки: Україна, Росія, США

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обґрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): -

Додаткова інформація: --

IX. Бібліографічний опис

1. Polishchuk, V. Kuz'min, A. Artemenko, E. Muratov. Universal Approach for Structural Interpretation of QSAR/QSPR Models // Mol. Inform.- 2013. - Vol. 32. - P. 843-853. 2. Sushko Iurii, Artemenko Anatoliy, Kuz'min Victor et al., Applicability Domains for Classification Problems: Benchmarking of Distance to Models for Ames

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Артеменко Анатолій Григорович

Варламова Катерина Юріївна,

Дехтяренко Ольга Миколаївна

Кузьмін Віктор Євгенович

Кулінський Максим Олександрович

Михайлова Тетяна Вікторівна

Огніченко Людмила Миколаївна

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Телефон

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

