Облікова картка ДіР

Image not found or type unknow

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0211U004197

Державний реєстраційний номер: 0111U002028

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 26-01-2012

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Поліпшення методу випадкового лісу. Формування баз даних .Генерація початкових навчальних наборів

Початок етапу: 01.2011

Закінчення етапу: 12.2011

Вид звітного документа: Проміжний 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)

Напрям фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541050

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 249.815

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Експертна система для позаекспериментального скринінгу розчинності у воді та ліпофільності біологічно активних сполук

Назва роботи англійською:

Expert system for virtual screening of aqueous solubility and lipophilicity of biologically active substances

Реферат українською:

Метод дерев класифікації, що дозволяє будувати нелінійні класифікаційні та регресійні моделі, вдосконалено за рахунок реалізації методу оцінки вкладів дескрипторів в досліджувану властивість. Сформовано презентабельні бази даних (понад 10 тисяч) органічних сполук різних класів з відомими значеннями розчинності у воді і ліпофільності.

Реферат англійською:

Classification trees method which allows building non-linear classification and regression models improved through the implementation of the method of estimation of the contributions of descriptors in the investigated property. Establishing a representative database (more than 10 thousand) of organic compounds of different classes with known values of water solubility and lipophilicity.

Індекс УДК: 547, 547.1:541.6

Коди тематичних рубрик: 31.21

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: База даних органічних сполук різних класів з відомими значеннями розчинності у воді і ліпофільності.

Назва НТП англійською: Database of organic compounds of different classes with known values of water solubility and lipophilicity.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування: Хімічне виробництво

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Сформовані бази даних органічних сполук різних класів з відомими значеннями розчинності у воді (Sw) (більше 3 тис. сполук) і ліпофільності сполук (логарифма коефіцієнта розподілу в системі октанол-вода, logKow, більше 10 тис. сполук).

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: Визначає НАН України

Закінчення етапу:

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

Перспективні ринки: Україна

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.: 0

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану: Ні

Техніко-економічне обгрунтування: Ні

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.: 0

Очікуваний термін окупності (років): -

Додаткова інформація: --

IX. Бібліографічний опис

Kuz'min V. E., Polishchuk P. G., Artemenko A. G.; Andronati S. A. Interpretation of QSAR models based on Random Forest method // Molecular Informatics.-2011.-Vol.30.-P.593-603.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Артеменко Анатолій Григорович

Варламова Катерина Юріївна

Кузьмін Віктор Євгенович

Ляховський Анатолій Вікторович

Михайлова Тетяна Вікторовна

Муратов Євген Наілевич

Огніченко Людмила Миколаївна

Поліщук Павло Генадійович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

