Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0211U001098

Державний реєстраційний номер: 0109U001092

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 18-01-2011

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 4

Назва етапу: Аналіз і узагальнення результатів дослідження зв'язку між структурою та токсичністю вивчених сполук. Створення експертної системи.

Початок етапу: 07.2010

Закінчення етапу: 12.2010

Вид звітного 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: Міністерство освіти і науки 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.): 115.703

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Експертна система для позаекспериментального скринінгу токсичності нітроароматичних сполук.

Назва роботи англійською:

Expert system for unexperimental screening of toxicity of nitroaromatic compounds

Реферат українською:

На основі літературних даних сформована база нитроарометчних сполук с відомими значеннями токсичності по відношенню до біолюмінесцентних бактерій Vibrio Fischery та інфузорій Tetrahymena Pyriformis. З використанням статистичного методу випадкового лісу побудовані адекватні QSAR моделі для прогнозу токсичності вказаних властивостей. На основі отриманих моделей розроблено комп'ютерну програму у вигляді експертної системи для прогнозу токсичності сполук.

Реферат англійською:

Database of nitroaromatics toxicity on bioluminescent bacteria Vibrio Fischery and ciliates Tetrahymena Pyriformis has been formed. The adequate QSAR models have been constructed for prediction of acute toxicity on above mentioned properties using statistic random forest method. The computer program as expert system for prediction of compounds toxicity has been developed on the base of obtained models

Індекс УДК: 678.01;544.23.02/.03;544.25.02/.03, 547.1:541.6

Коди тематичних рубрик: 31.25.15

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'ютерна програма "Hierarchical Expert System" у вигляді експертної системи прогнозу токсичності сполук на мікроорганізмах Vibrio Fichery та Tetrahymena Pyriformis.

Назва НТП англійською: Computer software "Hierarchical Expert System" as expert system for prediction of compounds toxicity on microorganisms Vibrio Fichery and Tetrahymena Pyriformis.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати:

Галузь застосування:

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. Програма дозволяє для органічних сполук проводити прогноз значень токсичності (з урахуванням областей компетенції моделей), на мікроорганізмах Vibrio Fichery та Tetrahymena Pyriformis.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 2010 рік

Закінчення етапу:

Споживачі продукції: Науково-дослідні інститути хімічного, біологічного та фармацевтичного напрямку та служби і установи, що займаються аналізом екологічної безпеки сполук

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

P.G. Polishchuk, E.N. Muratov, A.G. Artemenko, O.G. Kolumbin, N.N. Muratov, V.E. Kuz'min. Application of Random Forest Approach to QSAR Prediction of Aquatic Toxicity // Chem. Inf. Model.- 2009.- Vol. 49. - P. 2481-2488.

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Андронаті Сергій Андрійович

Перелік осіб-виконавців

Артеменко А.Г.

Дехтяренко О.М.

Кузьмін В.Є.

Ляховський А.В.

Михайлова Т.В.

Муратов Є.Н.

Огніченко Людмила Миколаївна
(к. х. н.)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Телефон

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

