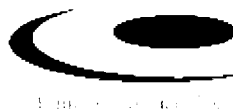




**„КОНКУРС ЗА ФИНАНСИРАНЕ НА НАУЧНИ ИЗСЛЕДВАНИЯ – 2017 г.”**

<b>Наименование на конкурса:</b>
Конкурс за финансиране на научни изследвания – 2017 г.
<b>Основна научна област/тематично направление, в което проектът кандидатства:</b>
Технически науки
<b>Допълнителни научни области/тематични направления при интердисциплинарни проекти:</b>
Биологически науки Химически науки Математически науки и информатика
<b>Заглавие на проекта:</b>
Нов подход, базиран на интеркритериален анализ на данни, за подпомагане на вземане на решения при <i>in silico</i> изследване на комплексни биомолекулни системи
<b>Базова организация:</b>
Институт по биофизика и биомедицинско инженерство – Българска академия на науките (ИБФБМИ – БАН)
<b>Партньорски организации:</b>
не
<b>Ръководител на научния колектив (академична длъжност, научна степен, име):</b>
доц. д-р Таня Колева Пенчева

<b>Сума за изпълнение на проекта:</b>
120 000 лв



**Резюме на проекта:**

Предложеният проект е насочен към разработването на **нов подход** за подпомагане на процеса на **вземане на решения в *in silico* изследванията на комплексни биомолекулни системи**, базиран на **интеркритериалния анализ (ИКА)**. Молекулният, и в частност лекарственият дизайн, е изключително времеемък и скъпоструващ процес, което мотивира интензивното разработване и използване на компютърно подпомогнати (*in silico*) подходи. Тези подходи са подчертано интердисциплинарни и интегрират знания от базови дисциплини като химия, биология, физика, фармакология, токсикология, математическо моделиране и информатика. Ключов елемент в алгоритмите за докинг и виртуален скрининг на биоактивни молекули е **оценъчната функция**, чиято цел е да се изчисли бързо и точно енергията на взаимодействието на комплекса протеин-лиганд. Въпреки големия брой сравнителни проучвания на различни **оценъчни функции**, въпросът кои докинг програми и протоколи дават по-добри резултати, е все още нерешен, а резултатите често са противоречиви. **ИКА**, разработен като нов подход за **вземане на решения при многокритериални задачи**, притежава необходимите предпоставки за подпомагане избора на най-подходящите оценъчни функции, което да насочи избора на най-подходящите кандидати за лекарствени съединения. Предложеният проект има за цел провеждане на теоретични изследвания, комбинирайки основополагащите за ИКА техники от **изкуствения интелект** (интуиционистки размита логика и индексирани матрици) и *in silico* методите за молекулен дизайн.

**Работната хипотеза** на проекта се основава на допускането, че **интеркритериалният анализ може да подпомогне вземането на решения в структура-базирани *in silico* изследвания на комплексни биомолекулни системи, предлагайки нов подход за оценка на резултати от използването на различни оценъчни функции в докинг-протоколи**. Хипотезата ще бъде доказана чрез изпълнението на следните основни цели:

1. Да се изследва приложимостта на ИКА по отношение на оценъчни функции на докинг от различен тип и от различни софтуерни продукти за молекулно моделиране (комерсиални и със свободен достъп) върху извадка от експериментални данни за структури и активности на разнообразни протеин-лигандни комплекси.
2. Да се изследва приложимостта на ИКА по отношение на различни индикатори (енергии на взаимодействие и пози на свързване) за оценка на резултати от докинг и пост-докинг оптимизация на протеин-лигандни комплекси.
3. За реализиране на цели 1 и 2 да се разработи прототип на програмна среда, реализиращ възможностите на ИКА.
4. Въз основа на работни цели 1, 2 и 3, да се оцени потенциалът на ИКА за подпомагане на вземане на решение в *in silico* изследванията на комплексни биомолекулни системи и да се стимулира по-нататъшното му развитие.

Очаква се получените резултати за оценка, сравнение и избор на оценъчни функции в молекулния докинг да подпомогнат **вземането на решения в *in silico* молекулният дизайн** и да бъдат полезни за изследователите при избора на най-добрите съединения за лекарствени кандидати.

**Разпределение на сумата по проекта между базовата организация и партньорите**

**Организация:**

Институт по биофизика и биомедицинско инженерство – Българска академия на науките

Сума: 120 000 лв

**Организация:**

Сума:

**Обща сума за изпълнение на проекта:**

120 000 лв



## Членове на научния колектив

<b>Организации/участници<sup>1</sup></b>	<b>Бележка<sup>2</sup></b>	<b>Подпис<sup>3</sup></b>
<b>Базова организация:</b>		
Институт по биофизика и биомедицинско инженерство – Българска академия на науките		
<b>Ръководител на научния колектив</b>		
доц. д-р Таня Колева Пенчева		
<b>Участници:</b>		
чл.-кор. проф. дбн Илза Константинова Пъжева		
чл.-кор. проф. дтн дмн Красимир Тодоров Атанасов		
доц. д-р Иванка Милошева Цаковска		
доц. д-р Олимпия Николаева Роева		
гл. ас. д-р Вася Красиминова Атанасова	МУ, ПО	
гл. ас. д-р Петър Младенов Василев	МУ, ПО	
ас. д-р Мария Колева Ангелова	ПО	
Петко Стоянов Алов		
Десислава Борисова Жерева	МУ	
ас. д-р Николай Руменов Икономов – Институт по математика и информатика – Българска академия на науките	МУ, ПО	
<b>Международен консултантски съвет</b>		
ст. изследовател д-р Мария Атанасова Митева – Университет 7, Париж, Франция	УЧ	
проф. д-р Микаел Вийзе – Университет Бон, Германия	УЧ	
Проф. дн Януш Кацпржик, Институт по системни изследвания, Полска академия на науките, Варшава, Полша; Академик на Българската и Полската академии на науките	УЧ	
проф. дтн Еулалия Шмидт – Институт по системни изследвания, Полска академия на науките, Варшава, Полша	УЧ	
<b>Партньорска организация:</b>		
<b>Участници:</b>		