

## ОТЧЕТ

### На първия етап на

### Проект „Биоинформатични изследвания върху свойствата и биологичната активност на протеини и лекарствено-рецепторни взаимодействия”

### Финансиран по договор ДВУ 01/0197 с НФНИ на Р. България

Настоящият отчет обхваща цялостната дейност по изпълнение на първия етап на проекта за периода 1 Януари 2009 – 30 Юни 2010. Тя е отразена в приложенията и може условно да се раздели на следните направления:

- Научноизследователска;
- Образователна;
- Участие в научни експерименти;
- Мрежа от международни връзки със сродни организации и проекти;
- Информационно обезпечаване на проекта и поддържане на интернет страницата му;
- Компютърна инфраструктура и работни места.

#### ***I. Научноизследователска работа***

На учредителната среща, колективът, съгласно работната програма, е разделен на следните изследователски групи:

- Първа група: „Дизайн, синтез и биологична активност на вещества, застъпени в тематиките на изследователски групи в университета; биологичен background за биоинформатични изследвания” ръководител доц. д-р Невена Пенчева;
- Втора група: „Биоинформатични изследвания върху структурата и активността на протеините” – с ръководител Проф. д-р Никола Иванов Янев;

- Трета група: „Моделиране на лекарствено-рецепторни взаимодействия”- с ръководител Доц. д-р Петър Борисов Миланов;
- Четвърта група: „Разработване и внедряване на биоинформационен софтуер за нуждите на проекта”- с ръководители ст.н.с. II д-р Емил Бурназки, гл.ас. д-р Иван Тренчев;

Работата на всяка изследователска група е представена с материали, подготвени от членовете на колектива, и статии, излезли от печат, или подготвени за представяне в подходящи престижни списания.

Тематиката на изследванията на първа работна група беше синтезиране и тестване за противовирусна активност са аналози на естери на ацикловира (HSV-1, HSV-2) с аминокиселини съдържащи (Gly) oxazole и (Gly) thiazolyl-thiazole пръстен. Новосинтезираните съединения са тествани за ефекти върху репликацията на Herpes simplex virus type 1 (HSV-1) and type 2 (HSV-2) in vitro. Резултатите показват, че новосинтезираните аналози имат редуцирана противовирусна активност в сравнение с тези, при които са субституирани естествени аминокиселини.

Направени са изследвания върху съединения с трипаноцидална (антипаразитна) активност. Изготвен е подробен доклад /Principles of pharmacodynamics as background for bioinformatic studies of trypanocidal drug discovery Nevena Pencheva & Peter Milanov в приложението/ за необходимостта от създаване на подобни съединения като лекарства на широко разпространени паразитни болести. Предложени са мотивирани аргументи за дизайн на съединения аналози на глутатионил-спермидина на базата на следните съображения:

- да притежават по-силна връзка на свързване между лиганда и таргета, чрез добавяне на субституенти с електрон-отнемащи ефекти в полиаминната част;
- да нямат антиоксидантна активност, чрез блокиране или преместване на сулфхидрилната група;
- да бъдат аналози на глутатионил-спермидина.

Защитено е становището, че съединенията трябва да бъдат миметици на глутатионил-спермидина но да съдържат глутатионилов остатък, amidна връзка и спермидин. Направени са предложения за промените в тези три компонента, като:

- заместване на аминокиселини от лиганда с други природни или неприродни аминокиселини с псевдопептидна връзка;
- субституиране на аминогрупи на спермидина с други групи;
- субституиране в полиаминната верига с групи с електрон-освобождаващ ефект и др.

Тези данни и анализите евентуални инхибитори на ензима, са представен в Приложението (Tatiana Dzambova, Tamara Paipanova. Design of inhibitors of trypanothione synthetase-amidase), а теоретични дескриптори на антиоксидантна активност са представени в Приложение (Zhivko Velkov. Quantum-chemical Approach to the Modeling of Antioxidant Activity. Theoretical descriptors of antioxidants. SRJSWU vol.2 (1), 41-45)

Направени са изследвания на биологичения background за биоинформатични проучвания върху ензима трипанотион-синтетаза. След предварителни активности свързани с умения на колектива за работа със софтуери, бази от данни и други сайтове за биологични данни, беше формулирана една конкретна биоинформатична задача към част от колектива: да се съберат данни и да се направят пробации за оценка на нови органични вещества като ефективни инхибитори на ензима трипанотион-синтетаза-амидаза и респективно антипаразитни лекарства.

Разработен е метод за оценка на болкови прагове и болков толеранс механична стимулация с турникет и непрекъснатата регистрация с електронна визуално-аналогова скала. Биоинформатичните аспекти на тази разработка са представени в приложението (Anton Stoilov, Nevena Pencheva, Kristina Grancharska. Continuous automated cuff pressure algometry – bioinformatic pain assessment of skeletal muscles (Abstract from 15<sup>th</sup> Annual Congress of European Colleague of Sport Science, Antalya, 23-26 June, 2010) и приложение (Anton Stoilov, Nevena Pencheva, Kristina Grancharska. Continuous automated cuff pressure algometry – bioinformatic pain assessment of skeletal muscles; Presentation).

*Участие в мероприятия:*

- *10<sup>th</sup> Drug Design and Development Seminar in Conjunction with the 2<sup>nd</sup> Management Committee Meeting COST Action CM0801 “New Drug for Neglected Diseases”, Rauischholzhausen Castle, March 19<sup>th</sup> – 21<sup>st</sup>, 2009, Justus-Liebig-Universitat, Giessen, Germany;*

Доклад на тема: In vitro potency, affinity and agonist efficacy as pharmacological considerations for drug-candidates, Nevena Pencheva & Peter Milanov,

- *European college of sport science 15th Annual Congress of the ECSS, ANTALYA, 23-26 June 2010;*

Доклади на тема;

“Continuous automated cuff pressure algometry – bioinformatic pain assessment of skeletal muscles Stoilov” A., Pencheva N. , Grancharska K.

“Cannabinoid and opioid anti-nociceptive modulation of mechanical and thermal stimuli after limited motor activity”, PENCHEVA, N., GRANCHARSKA, K., BOCHEVA, A., DZHAMBAZOVA, E.

- *3<sup>rd</sup> Management Committee Meeting COST Action CM0801 “New Drug for Neglected Diseases Siena, Italy, May 28th – 30<sup>th</sup>;*

На срещата беше представен следния доклад:

Nevena Pencheva Peter Milanov “Principles of pharmacodynamics and possibilities for applications in trypanocidal drug discovery”.

- *Workshop “Bioinformatical studies on the structure and activity of proteins and drug - receptor interactions” на MASSEE International Congress on Mathematics MICOM 2009 16 – 20 September, 2009 Ohrid, Republic of Macedonia.* Изнесени бяха следните доклади:

Pencheva N., Milanov P. Bocheva: „Ligands for cannabinoid receptors as a background for bioinformatic studies”

Представени или излезли статии за печат:

- *Zhivko Velkov. Quantum-chemical Approach to the Modeling of Antioxidant Activity. Theoretical descriptors of antioxidants. SRJSWU vol.2 (1), 41-45;*

- *Ivanka Stankova,, Stoyan Schikov, Kalian Kostova and Angel Galabov New analogues of acyclovir – Synthesis and activity, 2010, Verlag der eitschrift fur natureforschung, Tubingen, 0939-5075/2010/0100.*

Основната работа по втора работна група беше свързана с изследвания за предсказване на триизмерната структура на протеините и изследвания върху активния център за рецептор-лиганд взаимодействия.

Протеиновите структури могат да бъдат изследвани чрез експериментални методи, като например, ядрено магнитен резонанс, спектроскопия и др. Въпреки последните постижения в тези области, те са все още скъпоструващи и бавни и тези технологии не могат да се справят с големия брой белтъци, генерирани в последното десетилетие. Ето защо, в молекулярната биология, все повече се използват изчислителни модели за определяне на 3D структурата на протеините.

Разработен беше математически модел за предсказване на 3D структурата на протеините, като се използва свойството хидрофобност на аминокиселините. Хидрофобните аминокиселини се бележат с H, а хидрофилните с P. Използваме свойството, че хидрофобните аминокиселини имат близки координати. Нашата цел е да разположим всички аминокиселини в кубична решетка, като желаем да имаме повече контакти H-H, т.е. повече хидрофобни киселини в съседни върхове на кубичната решетка. Пълно описание на модела е представен в приложението:

*HP Folding in Lattice: Report for the DVU project 01-197p N. Malod-Dognin, N. Yanev, I. Trenchev, and I. Todorin*

Написан е компютърен софтуер, който, въз основа на разработения математически модел, генерира изходен файл, чрез който могат да се направят изчисления, използвайки софтуера CPLEX на фирмата ILOG. Изчисленията ще бъдат извършени в Университета в Рен при посещението на доц. Миланов през периода Юни-Юли 2010г.

Членове на работната група са взели участие в следните международни прояви:

- *8<sup>th</sup> Cologne Twelve workshop Graphs combinatorial optimization, CTWO9, Ecole Polytechnique and CNAM, June 2-4, 2009 France,*

Темата на доклада е:

G. Collet, R. Andonov, N.Yanev, J.F. Gibat. Protein threading.

- *Experimental algorithms, 9<sup>th</sup> International Symposium, SEA 2010, Ischia Island, Naples, Italy, May 20-22, 2010.*

Темата на доклада е:

N. Malod-Dognin and R. Andonov and N. Yanev. “Maximum Cliques in Protein Structure Comparison”.

- *MASSEE International Congress on Mathematics MICOM 2009 16 – 20 September, 2009 Ohrid, Republic of Macedonia.*

Бяха изнесени следните доклади:

N. Malod-Dognin and R. Andonov and N. Yanev “Maximum Clique Approach to Protein Structure Similarity”;

- *Workshop “Bioinformatical studies on the structure and activity of proteins and drug - receptor interactions” на MASSEE International Congress on Mathematics MICOM 2009 16 – 20 September, 2009 Ohrid, Republic of Macedonia.* Изнесени бяха следните доклади:

Nicola Yanev: „Protein structure comparison: maximal clique and similarity measures”;

Получените резултати са публикувани в следните статии:

*Rumen Andonov Noel Malod-Dognin I Nicola Yanev Maximum Contact Map Overlap Revisited, Journal of Computational Biology, 2009, 1-64 (accepted)/*

*N. Malod-Dognin, R. Andonov, and N. Yanev, Maximum Cliques in Protein Structure. Experimental algorithms, 9<sup>th</sup> International Symposium, SEA 2010, Ischia Island, Naples, Italy, May 20-22, 2010 Proceeding, Springer-Verlag heideiberg, pp. 106-117.*

Изследванията на трета работна група са в направление на разработване на теоретичен хиперболичен модел на частичния антагонизъм. Получените резултати

позволяват експлицитно да се пресмятат афинитетът, относителната ефективност и рецепторният резерв.

Изследвахме критериите за надеждност при съхранението на биологичната информация в ДНК молекулата, като резултатите се основават на изследвания на късоверижни белтъци от типа на енкефалините. Математически генерирани и ендеогенни олионуклеотиди в различни биологични видове, са оценени чрез изчисления на тяхната потенциална енергия, както и чрез други изчислени параметри.

Изчисляването на оптимална структура на моделните олионуклеотиди с помощта на по-точни квантовохимични методи или пресмятане на енергията във водна среда изисква огромни изчислителни ресурси. При изчисления чрез молекулна механика могат да бъдат сравнявани потенциалните енергии само на молекули с еднакъв атомен (нуклеотиден) състав. Данните позволяват да се анализира резистентността на съвременния генетичен код към мутации в сравнение с теоретични кодове.

Участие в международни прояви:

- *10<sup>th</sup> Drug Design and Development Seminar in Conjunction with the 2<sup>nd</sup> Management Committee Meeting COST Action CM0801 “New Drug for Neglected Diseases”, Rauischholzhausen Castle, March 19<sup>th</sup> – 21<sup>st</sup>, 2009, Justus-Liebig-Universitat, Giessen, Germany;*

Доклад на тема: In vitro potency, affinity and agonist efficacy as pharmacological considerations for drug-candidates, Nevena Pencheva & Peter Milanov,

- *3<sup>rd</sup> Management Committee Meeting COST Action CM0801 “New Drug for Neglected Diseases Siena, Italy, May 28<sup>th</sup> – 30<sup>th</sup>;*

Peter Milanov “*Computational description of molecular structures and molecular similarity*”.

- *Workshop “Bioinformatical studies on the structure and activity of proteins and drug - receptor interactions” на MASSEE International Congress on Mathematics MICOM 2009 16 – 20 September, 2009 Ohrid, Republic of Macedonia.* Изнесени бяха следните доклади:

Peter Milanov, Ivan Mirchev: „Optimal fitting of the experimental data and computing of the parameters characterizing pharmacological agonism”.

Подгонени статии и книги, представени или излезли за печат: :

Ivan Trenchev, Petar Milanov, Zhivko Velkov, Nevena Pencheva & Alia Tadjer Scientific Stability of oligonucleotides as a criterion for resistance of the genetic code Research Journal of South-West University, June 2009; 2(1): 11-19

:

Peter Milanov, Nevena Pencheva and Andrian Milanov. Theoretical hyperbolic model of partial agonism: explicit formulas for affinity, efficacy and amplifier of partial agonists and their pharmacological explanation, Journal of Theoretical Biology (за печат)

Подготвени книги за предпечат

- Невронни мрежи,

Иван Тренчев, Петър Миланов, Невена Пенчева, Иван Мирчев.

- Теория на алгоритмите и оптимизация,

Петър Миланов Никола Янев, Иван Мирчев, Иван Тренчев.

- Обзор на биоинформатични изследвания: методология, начини и принципи,

Иван Годорин, Петър Миланов, Иван Тренчев, Невена Пенчева, Борислав Юруков, Иван Мирчев.

/предпечатните материали могат да се видят на сайта на проекта

<http://bioinfo.swu.bg/>

Работата на четвърта основна група беше в няколко насоки, които са описани накратко.

Лекарството обикновено е органична молекула, която активира или инхибира действието на биомолекулата (ензим), което води до появата на терапевтичен ефект у пациента. В най-основен смисъл, лекарственият дизайн включва дизайн на малки молекули, които съответстват по форма и химическа реактивоспособност с биомолекулата, избрана за цел на атаката, с която те взаимодействат и се свързват. Лекарственият дизайн често, но не задължително, разчита на възможностите на молекулното моделиране. Този тип моделиране често се нарича *computer-aided drug design*.

Има доста различаващи се изчислителни методи използвани в молекулното моделиране. Във всички случаи компютърното време и други ресурси (като RAM и дисково пространство) нарастват бързо с увеличаване размера на системата, която се изучава. Тази система може да бъде отделна молекула, група от молекули или кристал.



Методите на изчислителната химия обхващат както методи, характеризиращи се с висока точност, така и приближени методи.

При моделирането на ензим-субстратното (ензим-инхибиторното) взаимодействие могат да бъдат използвани както тези два метода, така и чисто емпирични методи (молекулно механични методи), които в много случаи дават задоволителни резултати

Docking е метод от молекулната механика за моделиране, който предсказва предпочетената ориентация на субстрата или инхибитора спрямо ензима при формирането на ензим – субстратния (инхибиторния) комплекс. Това може да е полезно за предсказване на здравината на свързване в комплекса и афинитета между двете молекули. Следователно методът docking е неотменим етап в дизайна на лекарствени средства.

Ние инсталирахме програмата Autodock и направихме компютърни симулации, които са описани в приложението:

#### MOLECULAR DOCKING AND VIRTUAL SCREENING WITH AUTODOCK VINA

Обсъдени бяха възможностите за работа с биологични бази от данни. Те са големи библиотеки, които съдържат информация от различни научни области, като например: протеомика, геномика, молекулна биология и др. Информацията, включена в биологични бази от данни, съдържат генетичната локализация (и в клетъчни и хромозомни структури), функция на гена, структура, клинични ефекти на мутации, както и сходствата на биологични секвенции и структури.

Търсени бяха 3D структури и fast формат на биологични вещества, който представляват интерес за проекта като ацикловир, трипанотионсинтетаза, глутатион и др.

Написан е софтуер за генериране на всички възможни ДНК фрагменти с помощта на съвременния генетичен код, кодиращ протеина метаенкефалин. Извършвано е търсене на ДНК фрагменти в биологични бази от данни, кои от тях са налични в природата и кои не.

Създадена е web страница на проекта на <http://bioinfo.swu.bg/indexbg.html>. Публикувана е важна информация свързана с проекта като тематика, цели и задачи, участници, презентации, готови статии, новини и др. В сайта има специална секция само за членове на проекта. /направен е подробен доклад в приложението „Изследване върху метаенкефалин”/

В нея е създаден специална секция за обмяна на мнения, документи, файлове. Системата може да се използва от всички участници. Всеки от тях има потребителско име и парола.

Създадена е библиотечна система за публикуване на статии и книги, свързани с тематиката на проекта. Използвана е библиотечната система OpenBiblio. В нея са публикувани статии от научни библиотеки като <http://www.sciencedirect.com/>, <http://www.proquest.co.uk/en-UK/>. Адреса на библиотеката е <http://bioinfo.swu.bg/lib/home/index.php>.

Тествани са различни софтуерни продукти за docking на молекули или системи за описание на органични молекули с молекулни дескриптори.

Подробен доклад е публикуван в приложението /Описание на web сайт на Проект „Биоинформатични изследвания върху структурата и активността на протеини и лекарствено-рецепторни взаимодействия”/

Участие в международни прояви:

- Workshop “Bioinformatical studies on the structure and activity of proteins and drug - receptor interactions” на MASSEE International Congress on Mathematics MICOM 2009 16 – 20 September, 2009 Ohrid, Republic of Macedonia. Изнесени бяха следните доклади:

Peter Kenderov: „Content management system for processing of the scientific projects”

Ivan Trenchev: „Electronic library and CMS for management of the project (DVU 01/197)”

Margarita Todorova: „Binary matrices and recognition: application in the input of the artificial neural networks”

Elena Karashtranova: „A model for implementation of the dependence between random events in knowledge bases”;

- Third International Scientific Conference , South-West University, Faculty of Mathematics & Natural Science - FMNS2009.

Представени бяха следните доклади:

Blagovest Kasabov, Ivan Trenchev, Grigor Iliev, Anton Stoilov, Faik Boshnakov.  
Prediction secondary structure of RNA;

Svetoslav Slavkov, Kiril Gashteovski, Ivan Trenchev, Anton Stoilov, Nadezhda Borisova Description of the biological databases.

Т. Тренчева И. Тренчев. Приложимост на новите информационни системи в библиотечния мениджмънт, Втора научна конференция с международно участие, 26-27 ноември 2009 г., ДИПКУ, гр. Варна.

Публикувани статии:

- Blagovest Kasabov, Ivan Trenchev, Grigor Iliev, Anton Stoilov, Faik Boshnakov. Prediction secondary structure of RNA, Proceedings of the Third International, Scientific Conference – FMNS 2009, 3 – 7 June 2009, Faculty of Mathematics and Natural Science
- Svetoslav Slavkov, Kiril Gashteovski, Ivan Trenchev, Anton Stoilov, Nadezhda Borisova Description of the biological databases, Proceedings of the Third International, Scientific Conference – FMNS 2009, 3 – 7 June 2009, Faculty of Mathematics and Natural Science
- Т. Тренчева И. Тренчев. Приложимост на новите информационни системи в библиотечния мениджмънт, Втора научна конференция с международно участие, 26-27 ноември 2009 г., ДИПКУ, гр. Варна.

## ***II. Образователна дейност***

На постдокторска позиция в Югозападен университет „Неофит Рилски” от Университета в Рен, Франция за периода 15.03 до 15.06.2010 бе Ноел Малод-Догнин. Той се занимаваше с писане на софтуер свързан с тематика на проекта, разработване на математически модели и работа с млади учени от проекта.

На двумесечна специализация в института по ядрени изследвания в град Дубна беше д-р Антон Стоилов. Той посещаваше курсове за паралелни алгоритми и изграждане на клъстерни системи. Специализацията му беше насочена върху операционната система Scientific Linux и инсталиране на приложения за паралелна

обработка на информацията. С негова помощ и с останалите членове на екипа от четвърта работна група ще се разработват приложения за комбинаторна оптимизация и тренирането на мрежи на Хопфиелд (невронни мрежи с обратна връзка)

На учебен стаж за два месеца в университета в Рен беше студентът Благвест Касабов, активен участник в работата по проекта, който заедно с проф. Румен Андонов създаде програми за намиране на максимална клика в граф. Подробен доклад е приложен в приложението.

За работа по проекта са привлечени трима студенти магистри химици и трима студенти бакалаври, които извършваха проучвания в биологични бази от данни и участваха в синтезирането на аналози на ацикловир и тестването им за биологична активност. Имената на студентите та са:

- Радослав Чайров – магистър химик;
- Мария Вакарелска – магистър химик;
- Кирил Чучков – магистър химик;
- *Ванчо Андонов с фак ном. 0825057;*
- *Николай Георгиев с фак ном. 0825033;*
- *Методи Трайков с фак. ном. 0825043.*

На самостоятелна подготовка за написване на докторантури са зачислени двама участници в проекта:

- ас. Надежда Борисова;
- ас. Иван Тодорин.

Работните заглавия на докторантурите им са:

- Използването на невронни мрежи за предсказване на биологичната активност на органични молекули.
- Математически модели за предсказване на 3D структурата на протеини.

### ***III. Научен семинар***

Всеки четвъртък от 04.03.2010 се провежда научен семинар по Биоинформатика, свързан с тематиката на проекта “*Биоинформатични изследвания върху структурата и активността на протеини и лекарствено- рецепторни взаимодействия*”.

Бяха изнесени следните доклади:

- NOËL MALOD-DOGNIN, PhD, IVAN TRENCHEV, PhD “Methods for the Prediction of Protein-Ligand Binding Sites for Structure-Based Drug Design”;
- Assoc. Prof. Ivanka Stankova. “New analogues of antiviral drugs –synthesis and biological activity”
- Assoc. Prof. Peter Milanov, PhD “Optimization problems of ligand - receptor interactions”;
- Assoc. Prof. Nevena Pencheva, PhD “Biological background for bioinformatic studies on the enzyme trypanothione synthase”;
- Assoc. Prof. Peter Milanov, Acad. Peter Kenderov “Ion channel kinetics: a fraktal time sequence of conformational states”;
- Noël Malod-Dognin, Phd Ivan Todorin, MC. “Checking the quality of protein folding in lattice”;
- Blagovest Kasabov student ” Comparing search algorithms of maximum clique”

Презентации са на сайта на проекта.

<http://bioinfo.swu.bg/presentations.html>

#### ***IV. Участие в международни мероприятия***

*Участие в международния конгрес -MASSEE International Congress on Mathematics MICOM 2009 16 – 20 September, 2009 Ohrid, Republic of Macedonia.*

*Workshop: “Bioinformatical studies on the structure and activity of proteins and drug - receptor interactions” - MASSEE International Congress on Mathematics MICOM 2009 16 – 20 September, 2009 Ohrid, Republic of Macedonia*

*European college of sport science 15th Annual Congress of the ECSS, ANTALYA, 23-26 June 2010;*

*10<sup>th</sup> Drug Design and Development Seminar in Conjunction with the 2<sup>nd</sup> Management Committee Meeting COST Action CM0801 “New Drug for Neglected Diseases”, Rauischholzhausen Castle, March 19<sup>th</sup> – 21<sup>st</sup>, 2009, Justus-Liebig-Universitat, Giessen, Germany;*

*3<sup>rd</sup> Management Committee Meeting COST Action CM0801 “New Drug for Neglected Diseases Siena, Italy, May 28<sup>th</sup> – 30<sup>th</sup>*

8<sup>th</sup> Cologne Twelve workshop Graphs combinatorial optimization, CTWO9, Ecole Polytechnique and CNAM, June 2-4, 2009 France

Experimental algorithms, 9<sup>th</sup> International Symposium, SEA 2010, Ischia Island, Naples, Italy, May 20-22, 2010

*Third International Scientific Conference , South-West University, Faculty of Mathematics & Natural Science – FMNS 2009.*

#### ***V. Мрежа от връзки с организации и проекти***

Членовете на колектива поддържат тесни връзки с:

- Университет в Кьолн, Германия, център по биоинформатика; проф. Фейгл.
- Университет във Виена, Австрия, център по биоинформатика;
- Университета в Дрезден, Германия, катедра по приложна математика, проф. Тихачке;
- Център по ядрени изследвания, Дубна, Русия,
- Технически Университет Виена, Австрия, център по изследване на операциите, проф. В. Вельов
- Tom Solmajer. National institute of Chemistry, Ljubljana, Slovenia
- Maurizio Botta Department of Pharmaceutical and Chemical Technology, Faculty of Pharmacy, University of Siena
- Institute, The Croatian Biophysical Society, Zagreb, Croatia, prof. Rudjer Boskovic
- Institut de Recherche en Informatique et Systemes Aleatoires (IRISA), Rennes, France  
Rumen Andonov,

COST Action CM-0801 “New drugs for neglected diseases” Участници доц. Петър Миланов, доц. Невена Пенчева.

Благодарение на тесните и приятелски връзки на доц. Петър Миланов и проф. Никола Янев с университета в Рен, Франция бе подаден проект по ПРОГРАМА РИЛА 2011 „Комбинаторни алгоритми за моделиране, предсказване и валидиране на протеинови структури” между Institut de Recherche en Informatique et Systemes Aleatoires (IRISA), France и Югозападен университет “Неофит Рилски”.

COST (European Cooperation in Science and Technology), Domains and Actions for Information and Communication Technologies (ICT), ICT Domain Committee Members for Bulgaria 2010-1013, prof. Peter Milanov.

## ***VI. Информационно обезпечение***

### *- Научно-информационно обслужване*

За нуждите на проекта се използват специализирани софтуери като Matlab, Cplex, Autodosk, Hyperchem и др. За членовете на колектива е изградена удобна мениджмънт система, с помощта на която могат да обменят материали, новини, файлове и всичко необходимо. Информацията в системата е криптирана и всеки потребител има ID и парола.

Изгражда се биологична система с помощта, на която в интернет ще се публикуват резултатите от проекта като изчислена 3D структура на протеините, изследвана биологична активност и др.

### *- Библиографска система;*

Изградена е електронна библиотека. Тя позволява описанието и съхранение на данни не само на традиционните видове материали, статии и книги, но също и цифрови материали като изображения, аудио, видео, уеб страници и пълният текст. Такова съдържание може да не е задължително да бъде "собственост" на библиотеката. То може да е навсякъде, но достъпно в интернет.

Направено е търсене по автор, по година, по ISSN и др. Интерфейсът на електронната библиотека е олекотен и лесен за достъп. Всеки потребител може да поставя, но също и да прочита, материалите от библиотеката.

- *Биологична база от данни*

За изграждане на тази система е използвана BASE – (BioArray Software Environment). Този софтуер е разработен на GNU/Linux операционна система с програмния език PHP, данните се съхраняват в релационна база данни (MySQL) и на Apache Webserver. Където е необходимо, потребителския интерфейс наема Java и JavaScript в допълнение към обикновения HTML, и C++ е използван за по-интензивни изчислителни задачи на сървъра.

Системата е интегрирана за био-материални информации, сурови изображения и извлечени данни, и предоставя Plug-in архитектура за трансформация на данни, разглеждане на данни и анализ на модули. Освен това, за лаборатории, които произвеждат вътрешни масиви (in-house arrays) или за групи, които искат да следят репортер-информация, системата има продукция на масив LIMS (Laboratory Information Management Systems) и поддържа функции, които могат да бъдат интегрирани с анализа на данни.

Повече информация е представена в приложението.

## ***VII. Работна и компютърна инфраструктура***

Изградена е семинарна зала, в която ще се провеждат семинарите и работните срещи по биоинформатика. В нея са изградени 12 компютърни места. Осигурен е WiFi достъп до всяко работно място. Снимки са поставени на web страницата на проекта.

Закупен е сървър: IBM Standard Rack Cabinet 42U; DPI Universal Rack Power Distribution Unit (PDU); IBM x3650 M2 2 x Quad-Core Intel Xeon Processor E5520 4C 2.26GHz with EM64T/1066MHz, 8MB L3 Cache, 4096MB ECC PC3- 10600 DDR3 (2x2GB), 2x146GB 10K SAS Hot Swap, Integrated RAID MR10i 0,1,10,5,50,6,60, 2x675W Redundant Power Supply, DVD. Изградено е сървърно помещение с климатик и с необходимото оборудване според международните стандарти.