



Резюме на проект по Фонд „Наука“ № 25001 – Конкурсна сесия 2025:

„Прогностично *in silico* моделиране за оценка активността на природни молекули, с принос към общественото здраве“

Ръководител: Доц. Силвия Георгиева Михайлова, дх

Съвременните *in silico* методи представляват ефективен инструмент за прогнозиране фармакологичната активност на нови молекули, като същевременно значително намаляват времето и разходите за разработване на лекарства. Тези подходи са особено значими при изследване на природни продукти, които са ценен източник на биоактивни вещества с доказани антимикробни, противовъзпалителни, невропротективни и др. свойства. Въпреки високия си потенциал, химичното разнообразие и сложният състав на продуктите от природен произход изискват нови аналитични стратегии за системна оценка, приоритизация и интегриране в процеса на лекарствен дизайн.

Настоящият проект е насочен към разработване и валидиране на интегриран *in silico* подход, базиран на съвременни методи на машинно обучение (machine learning, ML) и дълбоко обучение (deep learning, DL), за прогнозиране активността на молекули с природен произход.

Основните задачи включват: систематичен преглед и изграждане на база данни от структурни и фармакологични характеристики на природни съединения; разработване и валидиране на ML/DL модели за прогнозиране на активност; оценка на приложимостта на моделите към социално значими заболявания, свързани с хронични възпалителни и невродегенеративни процеси, както и към проблеми на общественото здраве.

Очакваните резултати са свързани с изграждане на база данни с ключови структурни и фармакологични характеристики на молекули с природен произход, създаване на софтуерен инструмент за прогнозиране на тяхната активност, идентифициране на потенциални кандидати за превенция на социално значими заболявания – мултирезистентни бактериални инфекции, хронични възпалителни състояния и невродегенеративни процеси, както и разработване на методология за интегриране на природни източници и изкуствен интелект в лекарствения дизайн.

Проектът ще има научен принос чрез разработване и валидиране на нови прогностични модели и алгоритми, както и приложен ефект чрез ускоряване на процеса по откриване на нови биоактивни съединения. В дългосрочна

перспектива резултатите ще подпомогнат разработването на по-безопасни и ефективни терапии, като по този начин ще окажат пряко въздействие върху подобряването на общественото здраве.

Очаквани резултати:

1. Научни резултати

- ✓ Изградена и структурирана база данни за природни молекули с антимикробна, противовъзпалителна и невропротективна активност;
- ✓ Разработени и валидирани ML и DL модели за предсказване на фармакологичната активност и фармакокинетичния профил на природни вещества;
- ✓ Идентифициране на нови потенциални молекулни кандидати за включване в терапия на мултирезистентни инфекции, хронични възпалителни и невродегенеративни заболявания.

2. Приложни резултати

- ✓ Разработени препоръки за приоритетни молекули, подходящи за последващи експериментални и клинични изследвания;
- ✓ Създадено методологично ръководство за използване на AI-базираните *in silico* технологии в лекарствения дизайн от природни източници;
- ✓ Подготовка на научни публикации въз основа на получените резултати.

3. Образователни резултати

Обучение и развитие на студенти, докторанти и млади изследователи в интердисциплинарната област на биоинформатика. Дейностите по проекта ще предоставят възможност на изследователите за обогатяване на техните знания и придобиване на опит, които ще подпомогнат разработването на обучителни модули и семинари по прилагане на AI в лекарствения дизайн за студенти от специалност „Помощник-фармацевт“.