

ИНСТИТУТ ЗА ИНФОРМАЦИОНЕ
ТЕХНОЛОГИЈЕ

Број ДИ-4

Дана 03.10. 2019 год.

КРАГУЈЕВАЦ

Програм научноистраживачког рада

Института за информационе технологије Крагујевац

На Институту за информационе технологије у Крагујевцу се обавља научно-истраживачки рад у циљу развоја науке, усавршавања научног подмлатка, као и увођења студената у научно-истраживачки рад. Институт за информационе технологије обједињује више научних поља, и то кроз примену информационих технологија у природно-математичким, техничко-технолошким, медицинским, биотехничким и друштвеним наукама, чиме се успоставља ближа сарадња између истраживачких група са различитим фокусима истраживања, чиме ће се омогућити значајно повећање обима и квалитета научноистраживачког рада из више различитих области и унапредити могућности за мултидисциплинарна истраживања. С обзиром на трендове у савременој науци, уз све већи утицај рачунарских наука и информационо-комуникационих технологија, мисија Института биће управо ово повезивање. Мултидисциплинарност истраживања биће једна од смерница развоја, како би Институт био у могућности да прати развој савремене науке.

План научно-истраживачког рада Института за информационе технологије у Крагујевцу је припремљен у складу са постојећим стањем научно-истраживачког рада на Институту, Статутом Института, Стратегијом научно-технолошког развоја Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије, Законом о научно-истраживачкој делатности и Законом о иновационој делатности. Научно-истраживачки рад Института је оријентисан на фундаментална и примењена истраживања кроз програм основних истраживања и основних усмерених истраживања, програм истраживања у области технолошког развоја и програм трансфера знања и технологија и подстицања примене резултата научно-истраживачког рада.

Програм научно-истраживачког рада се одвија у два научна поља, природно-математичком и техничко-технолошком, у оквиру пројекта који реализују тимови истраживача и стручних сарадника. Истраживачке тимове чине истраживачи Института, студенти докторских академских студија, као и истраживачи запослени у другим научно-истраживачким институцијама. Планирано је да се истраживачке активности и у наредном периоду усмере на реализацију технолошких, иновационих и пројекта основних истраживања које финансира Министарство просвете, науке и технолошког развоја као и остала ресорна Министарства Републике Србије, пројекта билатералне сарадње, пројекта са привредом и пројекта које финансирају међународне институције.

Сектор за природно-математичке науке

У овом Сектору је запошљено 26 истраживача који се баве истраживањима у области природно-математичких наука:

1. Др Зоран Марковић, научни саветник, хемијске науке
2. Др Биљана Шмит, виши научни сарадник, хемијске науке
3. Др Ивана Радојевић, виши научни сарадник, биолошке науке

4. Др Дејан Миленковић, научни сарадник, хемијске науке
5. Др Дарко Ашанин, научни сарадник, хемијске науке
6. Др Душица Симијоновић, научни сарадник, хемијске науке
7. Др Емина Mrкалић, научни сарадник, хемијске науке
8. Др Снежана Јовановић-Стевић, научни сарадник, хемијске науке
9. Др Ненад Јанковић, научни сарадник, хемијске науке
10. Др Ана Рилак-Симовић, научни сарадник, хемијске науке
11. Др Марина Костић, научни сарадник, хемијске науке
12. Др Јована Мушкиња, научни сарадник, хемијске науке
13. Др Јелена Катанић, научни сарадник, хемијске науке
14. Др Биљана Миленковић, научни сарадник, физичке науке
15. Др Јелена Стјајић, научни сарадник, физичке науке
16. Др Татјана Миладиновић, научни сарадник, физичке науке
17. Др Санја Матић, научни сарадник, биолошке науке
18. Др Марко Живановић, научни сарадник, биолошке науке
19. Др Јасмина Обрадовић, научни сарадник, биолошке науке
20. Др Александра Милошковић, научни сарадник, биолошке науке
21. Др Данијела Цветковић, научни сарадник, биолошке науке
22. Др Јована Секулић, научни сарадник, биолошке науке
23. Др Едина Авдовић, истраживач сарадник, хемијске науке
24. Др Нада Савић, истраживач сарадник, хемијске науке
25. Др Данијела Цветковић, истраживач сарадник, хемијске науке
26. Др Драгана Шеклић, стручни сарадник, биолошке науке

Сви истраживачи из овог Сектора се налазе на листи ментора Природно-математичког факултета у Крагујевцу, а четворо од њих учествује или је учествовало у извођењу наставе на мастер и/или докторским академским студијама (др Ивана Радојевић, др Душица Симијоновић и др Марина Костић на Природно-математичком факултету у Крагујевцу, а др Зоран Марковић на Државном универзитету у Новом Пазару). Поред тога три истраживача су били или су ментори студентима на последипломским студијама (др Зоран Марковић, др Ненад Јанковић и др Биљана Шмит), док је девет истраживача учествовало у комисијама за одбрану теза и четрнаест у комисијама за одбрану мастер радова (докази дати у прилогу).

Научно-истраживачки рад у Сектору за природно-математичке науке се одвија у четири одсека: одсек за хемију, одсек за биологију, одсек за физику и одсек за рачунарске и математичке науке.

Одсек за хемију. У оквиру овог одсека постоји пет истраживачких група које су тренутно укључене у различите пројекте.

У лабораторији за неорганску хемију у наредном периоду истраживања ће бити усмерена ка синтези и карактеризацији нових мононуклеарних и хомо- и хетеродинуклеарних рутенијум(II/III), платина(II), паладијум(II), сребро(I), злато(III), иридијум(III), осмијум(III), родијум(III), цинк(II) и бакар(II) комплекса који у свом саставу садрже различите хелатне лиганде. Даље, планирана је и синтеза комплекса гадолинијума(III), који се у медицини користе као контрастна средства. Синтетисани комплекси биће окарактерисани применом елементалне микроанализе, масене спектрометрије,

спектроскопских (NMR, IR, UV-Vis) метода и рендгенске структурне анализе. Применом UV-Vis спектрофотометрије и NMR спектроскопије испитиваће се и стабилност синтетисаних комплекса у раствору. Проучаваће се и кинетика и механизам супституционих реакција синтетисаних комплекса са биолошки значајним молекулима. Антимикробна активност лиганада и комплекса биће испитивана на различитим сојевима бактерија и гљива. У циљу што комплетнијег одређивања терапеутског потенцијала ових једињења, испитиваће се њихова антиплиферативна активност према нормалној ћелијској линији фибробласта плућа и према различитим ћелијским линијама тумора, као и ембриотоксичност на моделу зебрица. Испитиваће се механизам деловања синтетисаних једињења, као и њихова интеракција са биолошки важним молекулима, ДНК и неким протеинима, применом UV-Vis спектрофотометрије, флуоресцентне спектроскопије, цикличне волтаметрије и молекулског моделирања.

На овим истраживањима биће ангажована 4 научна сарадника, 3 истраживача сарадника и 5 студената докторских студија (2 истраживача сарадника и 3 истраживача приправника) ангажованих на пројектима Министарства науке, просвете и технолошког развоја Републике Србије.

У лабораторији за органску хемију истраживања ће бити усмерена ка синтезама различитих серија физиолошки активних једињења која у својој структури садрже хетероциклични прстен (оксазоли, тиазоли, пиразоли, диазепами, органоселенова једињења, хиноксалинони, бензоксазинони, пиролини, хинолини, пиразолопиразолони, тиоуреиди, хидантонини, кумарини, флуорохинолони, и тд.) и њиховој даљој дериватизацији. Најактивнија једињења биће одабрана за подробнија испитивања њиховог биолошког потенцијала, са посебним освртом на инхибицију изабраних ензима. Такође, на основу добијених резултата, биће извршена даља модификација добијених једињења, као и синтеза нових деривата са унапређеним биолошким потенцијалом. Имајући у виду јако изражен пролиферативни потенцијал ових класа једињења, наставиће се испитивање њихове антитуморске активности према различитим ћелијским линијама канцера. Такође је у плану испитивање антиоксидативне и антигенотоксичне активности одобраних производа, познајући биолошки потенцијал сличних деривата. Обзиром да ће се у самим производима извршити структурне промене у различитим деловима молекула, у плану је и Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR) - студија за неке од добијених производа, како би се испитало који део молекула је одговоран за активности и на који начин би се постојећа структура вероватно требала модификовати како би се дошло до побољшања њиховог биолошког потенцијала. Погодна једињења ће бити подвргнута испитивању електрохемијских особина, као и њиховог капацитета за катализу других органских реакција. Даље, радиће се на развијању компјутерског модела који ће помоћи у избору катализатора за жељену реакцију. Са циљем да се испита како координација за неке јоне прелазних метала утиче на биолошку активност ових молекула биће синтетисани и неки комплекси са јонима прелазних метала. За молекуле који буду показали добра фармакаолошка својства, да би се јасније утврдио механизам деловања нових потенцијалних лекова биће урађена експериментално-теоријска испитивања механизма реакција новосинтетисаних једињења са природним макромолекулима, као што су ДНК или албумин из серума. Проучавањем механизма деловања ових једињења, било експериментално или помоћу компјутерских симулација (молекулског докинга и молекулске динамике), може се доћи до потпуно нових сазињања о структури једињења која ће показати бољу активност и мању токсичност у односу на клинички коришћене агенсе.

Такође, наставиће се са испитивањем антиоксидативне и антиинфламаторне активности добијених једињења. Значајан допринос експерименталним методама (UV-Vis, Раманова и EPR спектроскопија) дају компјутерске методе молекулског моделовања. У ту сврху првенствено ће се користити Density Functional Theory (DFT). Поред тога, DFT методе ће се користити и за испитивање кинетике и механизма реакција, термодинамичких својстава нових фармаколошки активних супстанци. Ове компјутерске методе користиће се и приликом одређивања структуре једињења, нарочито у случају када је немогуће добити погодан монокристал за рентгенску кристалографију.

Такође, планиран је рад и на испитивању инхибиторског капацитета различитих антиоксиданата и њихове интеракције са протеинима. Испитивање протеин-лиганд интеракције, где ће се као лиганд користити антиоксидант, радиће се симулацијама молекулског докинга и молекулске динамике. У наредном периоду наставиће се са испитивањима на нивоу структура – антирадикалска активност одабраних природних једињења према биолошки важним реактивним кисеоничним врстама (хидрокси, перокси, супероксид анјон, аксорбил и хлоровани метилперокси), реактивним азотовим врстама (азот-моноксид), као и према модел радикалима (DPPH, ABTS, FRAP, H₂O₂ и FIC). Испитиваће се и менанизми антиоксидативног дејства слободних радикала (HAT, RAF, SPLET и SET-PT), у различитим растворачима, и то на основу термодинамичких и кинетичких параметара. На тај начин одредиће се доминантан реакциони пут за поједине радикалске врсте. Больје познавање механизам антиоксидативног деловања појединих антиоксиданата, има за циљ, предвиђање молекулске структуре која ће бити најбољи „чистач“ слободних радикала. Поред тога, радиће се на испитивањима инхибиторне активности одабраних молекула применом различитих компјутерских метода: молекулског докинга, молекулске динамике, као и испитивањем квантитативног односа структуре и активности одабраних једињења QSAR.

На овим истраживањима биће ангажован 1 научни саветник, 1 виши научни сарадник, 5 научних сарадника и 6 студената докторских студија (2 истраживача сарадника и 4 истраживача приправника) ангажованих на пројектима Министарства науке, просвете и технолошког развоја Републике Србије.

У лабораторији за биохемију и хемију природних производа планирано је да се настави са проучавањем антиоксидативног капацитета, као и механизма антиоксидативног деловања, како природних тако и синтетичких једињења. Планира се изоловање секундарних метаболита биљака и структурна модификација природних производа добијених из биљног материјала као и испитивање њихових биолошких активности, антигенотоксичности и цитотоксичности. Даља истраживања биће усмерена ка прецизном дефинисању механизама биолошког деловања биљних екстраката, изоловању најактивнијих компоненти и одређивању најефикаснијих облика примене истих. Биће коришћени савремени модели *in vitro* дигестије, као и предикција обима активности *in silico* методама.

Поред тога радиће се на биосинтези наночестица сребра и других метала и испитивању њихових биолошких активности.

Радиће се и на дизајну и синтези нових селективних антагониста ER β и ER γ као медијатора канцерогених оболења применом *in silico* метода, односно испитивање антагонистичког и антиканцерогеног потенцијала новосинтетисаних деривата, њихов потенцијал да индукују апоптозу или некрозу и последични утицај на сигналну трансдукцију на нивоу различитих изоформи естроген рецептора, на нивоу ћелијских линија и експерименталних животиња.

Фармаколошки активним антагонистима биће креиран токсиколошки профил на нивоу серума, унутрашњих органа и генома у *in vitro* и *in vivo* условима, односно хормонски статус *in vivo*.

На овим истраживањима биће ангажован 1 научни сарадник и 3 студента докторских студија (2 истраживача сарадника и 1 истраживач приправник) ангажованих на пројектима Министарства науке, просвете и технолошког развоја Републике Србије.

У лабораторији за аналитичку хемију радиће се анализа одабраних врста дивљег воћа, које је углавном запостављено у људској исхрани, компјутерском оптимизацијом услова њихове екстракције у циљу проналажења услова који дају највиши садржај полифенолних једињења, одређивање њиховог антиоксидативног капацитета и симулирање услова *in vitro* дигестије у циљу предвиђања биодоступности ових једињења у организму. Компјутерска оптимизација услова екстракције ће бити усавршена применом софтвера који се заснива на неуронским мрежама. Спектар биолошких активности које ће бити праћене за ове екстракте ће бити знатно проширен.

Део истраживања биће и практична примена допираних и недопираних фосфат-волфрамових бронзи за одређивање концентрације аналита као и њихове каталитичке и антирадикалске активности.

На овим истраживањима биће ангажована 2 студента докторских студија (1 истраживач сарадник и 1 истраживач приправник) ангажованих на пројектима Министарства науке, просвете и технолошког развоја Републике Србије.

У лабораторији за физичку хемију у области теоријске и квантне хемије радиће се на примени постојећих и развоју нових метода и софтвера за опис електронске структуре молекула, опис реактивности и других физичко-хемијских особина једињења. Највећи део истраживања чиниће испитивања квалитативног и квантитативног описа ароматичности органских и неорганских молекулских система за које се користи читав изаз разлиčитих приступа из области хемоинформатике и хемометрије. Део истраживања је применљивост модела који се добијају методама хемијске теорије графова, као и истраживања из области теорије валентне везе. Циљ истраживања је и теоријско испитивање електронских особина различитих група молекула (органски, неоргански, биомолекули). У овим истраживањима примењују су већ постојеће методе квантне хемије (молекулско орбиталне методе, методе валентне везе, методе функционала густине, методе молекулске динамике), али се и развијају нове методе (на пример, комбинација метода валентне везе са Квантном Монте Карлом методом). У области математичке хемије фокус истраживања је на проучавању молекулских тополошких дескриптора, посебно дескриптора заснованих на сопственим вредностима графа. Проналажење и проучавање међусобне повезаности ових тополошких инваријанти и њихове могуће примене у хемији, превасходно у конструисању математичких модела за предвиђање особина и/или активности једињења. Даља истраживања ће бити фокусирана на објашњење уочених зависности тополошких дескриптора и физичко-хемијских особина једињења. На основу проучавања молекулских дескриптора, односно на основу познавања њихових предности и недостатака, постоји могућност увођења нових тополошких инваријанти које би требале да превазиђу недостатке постојећих.

На овим истраживањима биће ангажована 3 студента докторских студија (1 истраживач сарадник и 2 истраживача приправника) ангажованих на пројектима Министарства науке, просвете и технолошког развоја Републике Србије.

Одсек за биологију. У оквиру овог одсека постоји пет истраживачких група које су тренутно укључене у различите пројекте.

У лабораторији за микробиологију истраживања ће у наредном времену бити усмерена на наставак досадашњих започетих истраживања из области микробиологија (екологија микроорганизама и микробиологија вода и земљишта) као и примена информационих технологија и метода *data mining*-а у истим, при чему се истраживања повезују са заштитом животне средине и водним ресурсима (хидроинформатика) и имају интердисциплинарни карактер.

Планирано је да се настави испитивање биолошког потенцијала (са акцентом на антимикробни и антибиофилм потенцијал) неиспитаних ендемичних биљака са територије Србије, као и новосинтетисаних хемијских једињења. Код једињења која показују значајан потенцијал одређиваће се механизам деловања.

Наставиће се испитивање у области везаној за биоремедијацију отпадних вода. Испитивање се аутохтони микроорганизми из различитих отпадних вода, као и њихови биофилмови у примени у третману отпадних вода. Извршиће се додатна карактеризација микроорганизама и њихов потенцијал за уклањање различитих полутаната, као и њихова отпорност на различите антибиотике. Планирано је стварање колекције изолованих, идентификованих и испитаних микроорганизама.

На овим истраживањима биће ангажован 1 виши научни сарадник и 2 студента докторских студија (2 истраживача сарадника) ангажованих на пројектима Министарства науке, просвете и технолошког развоја Републике Србије.

Лабораторија за екологију вода, биогеографију и заштиту животне средине у наредном периоду планира наставак започетих истраживања, теренски и лабораторијски рад са циљем утврђивања садржаја потенцијално токсичних елемената у ткивима риба. Анализе би у наредном периоду обухватале и садржај антибиотика, цитостатика, пестицида, хербицида, микро и нано честица у ткивима риба. У оквиру плана за формирање Лабораторије за тестове токсичности предстоји специјализована обука у Мађарској где постоји једна од најбољих лабораторија за ову врсту испитивања. Планирана су испитивања различитих токсиканата (потенцијално токсични елементи, пестициди, хербициди, антибиотици, цитостатици, микро и нано честице) на модел организму *Branhydanio rerio*, као и потенцијалних слатководних врста попут бабушке *Carassius gibelio*, клена *Squalius cephalus*, и шарана *Cyprinus carpio*. Група ће се бавити наставком истраживања у области хемијске екологије биљака, алелопатије и инвазивности биљних врста. Нова истраживања у области молекуларне екологије инвазивних биљних врста, као и примењене еколошке студије у циљу обнављања нарушених екосистема - јаловишта, пепелишта, депонија и пожаришта. Студије примене географских информационих система (ГИС) у екологији, проучавању вегетације и земљишта, као и заштити природе и животне средине. Поред наведеног, планирано је осмишљавање новог софтверског програма за испитивање геометријске морфометрије, који ће бити применљив у биолошким истраживањима везаним за мониторинг морфо-анатомских параметара.

На овим истраживањима биће ангажована 2 научна сарадника и 7 студената докторских студија (5 истраживача сарадника и 2 истраживача приправника) ангажованих на пројектима Министарства науке, просвете и технолошког развоја Републике Србије.

У оквиру *лабораторије за ћелијску и молекуларну биологију* планиран је наставак истраживања на пољу персонализоване терапије, као и на проналажењу нових модалитета лечења онколошких пацијената. У развијеним светским економијама клиничка пракса и истраживања у природним наукама су нераскидиво повезани са финансијама и привредом, а оваква истраживања представљају добар пример тога, јер поред здравственог имају и очигледан економски значај, у смислу уштеде непотребне, па чак и штетне примене одређених видова терапије код конкретних пацијената и боље расподеле расположивих средстава тамо где су она потребна. Посебно ће фокус бити усмерен на предвиђање исхода лечења пацијената са карциномом дојке, развијање интелигентног модела за предикцију метастаза на основу клиничких и специфичних параметара добијених у лабораторији, проналажење везе између појединих параметара, објективизацију одлуке третмана. Такође, група ће се бавити: Изолацијом геномске ДНК и PCR амплификацијом циљних секвенци кључних за процесе канцерогенезе и прогресије тумора, секвенцирањем ових региона и одређивањем варијација, мутација, SNP-ова на тумор супресоре; Испитивањем молекуларних механизама епигенетских модификација и праћењем ДНК-метилтрансфераза; Тестирањем природних и новосинтетисаних хемијских биоактивних супстанци на ћелијским линијама и ткивима карцинома у циљу проналаска потенцијалних лекова или котретмана у терапији. Такође, у плану је рад на биопсијом прикупљеном материјалу пацијената оболелих од карцинома плућа у различитим хистолошким облицима и клиничким стадијумима, изолација ДНК из ткива карцинома плућа и PCR амплификација секвенци од интереса, анализа ћелија различитог порекла помоћу методе проточне цитометрије, молекуларна, имунолошка и биохемијска испитивања ћелија периферне крви код здравих и пацијената оболелих од карцинома.

На овим истраживањима биће ангажована 2 научна сарадника, 1 стручни сарадник и 5 студената докторских студија (1 стручни сарадник, 1 истраживач сарадник и 3 истраживача приправника) ангажованих на пројектима Министарства науке, просвете и технолошког развоја Републике Србије.

У оквиру *лабораторије за физиологију* планирано је даље испитивање трансмембрanskог рецептора епидермалног фактора раста чијом активацијом се покреће низ каскадних сигналних путева чији је крајњи циљ код оболелих ћелија - канцерогенеза. Трансмембрanski рецептор епидермалног фактора раста је кључни молекул у преносу сигнала како у здравој, тако и у оболелој ћелији, јер се његовом активацијом покреће низ каскадних сигналних путева чији је крајњи циљ код оболелих ћелија-канцерогенеза. Одређивање односа између соматских мутација гена и полиморфизма *EGFR* гена, одређивање интеракција са различитим нисходним сигналним молекулима, као и епигенетски механизми одређених гена. На овим истраживањима биће ангажован 1 научни сарадник.

У *лабораторији за еволуциону биологију и генетику* планирана су следећа истраживања: Одређивање генотоксичне активности биљних екстракта или хемијских једињења која су присутна у њима има за циљ утврђивање потенцијалне активности које се претпостављају

на основу њиховог хемијског састава и хемијске структуре. Након испитивања потенцијала биљних екстраката или њихових секундарних метаболита у условима који симулирају физиолошке услове (*in vitro*), одабраће се они који испољавају најбоље биолошке активности и испитати у *in vivo* условима коришћењем лабораторијских животиња и добити резултати који би најприближније говорили о физиолошком значају саме биљне дроге. Испитивање *in vitro* антигенотоксичне активности биљних екстраката и чистих компоненти има за циљ детекцију степена заштите ДНК након оштећења индукованог хидрокси и перокси радикалима. Применом ДНК изоловане из експерименталних модела организама применом Биоробота и китова за аутоматску ДНК пурификацију као и ДНК маркера детектоваће се степен ДНК оштећења и степен протекције ДНК индукованог од стране екстраката, хемијских једињења присутних у њима и наночестица. На основу добијених резултата могуће је проценити генотоксични и антигенотоксични потенцијал испитиваних агенаса природног порекла што ће даље усмерити ток истраживања ка антигенотоксичној активности и у *in vivo* условима применом *in vivo* тестова (тест за детекцију полно везаних рецесивно леталних мутација код еукариотског модела организма *Drosophila melanogaster*, Комет тест код *D. melanogaster* и пацова соја Wistar и Микронуклеус тест за *in vivo* детекцију оштећења у коштаној сржи). Све већи број наноматеријала се производи и користи у комерцијалне сврхе (у медицини, фармацији, технологији, електроници и телекомуникацијама) али и поред интереса за потенцијалне добробити расте и забринутост о потенцијалној штетности њиховог утицаја на околину и људе. Наночестице због својих површинских могућности и малих димензија имају способност продирања кроз биолошке баријере, афинитет према металима па самим тим могу на себе везати медицинске лекове ради циљаног места деловања у организму. Иста та својства могу их чинити и токсичним за живи бића. Из наведених разлога у наредном периоду се планира и испитивање утицаја индустријски важних наночестица као што су наночестице метала (нпр. Fe) и оксида (нпр. TiO₂ и CeO₂) на степен ДНК оштећења применом тестова за детекцију генетичких промена код организама различитог организационог нивоа у *in vitro* и *in vivo* условима. Планира се и испитивање антиинфламаторне активности биљних екстраката, чистих једињења и наночестица у *in vivo* условима код карагенан индукованог едема шапе експерименталних животиња (албино пацови соја Wistar) одређивањем процента инхибиције развитка или способност смањења едема задње шапе у одређеном временском интервалу.

На овим истраживањима биће ангажован 1 научни сарадник и 3 студента докторских студија (2 истраживача сарадника и 1 истраживач приправник) ангажованих на пројектима Министарства науке, просвете и технолошког развоја Републике Србије.

Одсек за рачунарске и математичке науке. У области математике радиће се на дефинисању Бишоповог репера за псеудо нул криве и парцијално нул криве у простор-времену Минковског, као и инволуте реда к псеудо нул кривих у просторима Минковског. Део истраживања ће бити и решавање екстремалних проблема на графовима, тј. налажење графова на којима тополошки индекси и функције постижу екстремну вредност, као и одређивање тих вредности, решавање проблема спектралне теорије графова и примена спектралних инваријанти графова у хемији. У области рачунарских наука у наредном периоду планиран је развој метода и софтвера за процену утицаја генетских мутација на болести мишића, са посебном применом на срчани мишић. Биоинформатичком анализом је могуће утврдити утицај појединачних генетских мутација на структуру и карактеристике протеинских ланаца који су градивни елементи мишићних влакана. Свака промена у

карактеристикама протеина се директно рефлектује на њихову интеракцију са осталим протеинима, што доводи до промена у биомеханичким карактеристикама мишићних влакана. Развојем одговарајућих нумеричких микромодела је могуће изучавати овакве поремећаје. Њиховом имплементацијом у вишесkalне моделе се могу изучавати ефекти поремећаја на микро-нивоу на дисфункције мишићних органа на макронивоу. Варијацијом параметара микро- и макро- модела би се могли истраживати ефекти примене поједињих медикамената, без потребе за *in vivo* експериментима. Такође, радиће се и на развоју нумеричких метода и софтвера за симулацију биомеханичког понашања мишића на више скала, на развоју нумеричких метода и софтвера за моделирање мишића на молекуларном нивоу, као и на развоју метода и софтвера за одређивање ажурног стања хидролошких модела (асимилација података).

Одсек за физику. У оквиру овог одсека постоји једна истраживачка група која је тренутно укључена на исти пројекат.

У лабораторији за атомску и радијациону физику у наредном периоду планира се теоријско и експериментално истраживање депозије потомака радона и дистрибуције трагова алфа-честица на зидовима и дну дифузионих комора, као и поређење са софтверским добијеним резултатима. У плану је поређење различитих метода мерења јачине ексхалације радона из узорака. Такође, планира се испитивање присуства природних и вештачких радионуклида, тешких метала и органских загађивача у земљишту дуж реке Лепенице, у непосредној близини индустријске зоне и погона фабрике аутомобила и оружја, које су биле мета бомбардовања 1999. године. Мерења концентрација радионуклида ће се вршити и на узорцима земљишта прикупљеног у неким од најпопуларнијих бања централне Србије, као и у виноградима где ће се испитивати трансфер у различите делове биљака. Осим тога, планира се и гамаспектрометријска анализа узорака мањовина које се могу користити као биоиндикатори и указивати на степен загађености животне средине. Анализа спектара гамаспектрометријских мерења врши се користећи софтверски пакет Maestro, а обрада резултата мерења користећи SPSS i Sigma Plot. План је да се истраживање прошири на област физике радијационе терапије повезујући досадашња теоријска истраживања са експерименталним резултатима. У радиотерапији и дијагностичкој радиологији се за одређивање радијационе дозе користе јонизационе коморе. Идеја је да се на основу информација о зрачењу које доводи до јонизације у сензитивном волумену коморе и измереној количини наелектрисања на електрометру процени шта се дешава у комори, до којих механизама јонизације долази, који од механизама је доминантан, када ће принос позитивних јона и ниско енергетских електрона бити већи. У сензитивном волумену коморе је ваздух, за који се зна да је смеша гасова од којих су неки у врло променљивом саставу, зато ће бити анализирано да ли повећањем концентрације неког од ових елемената долази до повећања приноса јона или електрона. За унос података, обраду и приказ резултата, биће коришћен софтверски пакет Wolfram Mathematica 12. Овај софтверски пакет омогућава статистичку анализу, одређивање вероватноћа, нумеричка израчунавања, приказ добијених резултата на графицима као и тренутно креирање врхунске интерактивне визуелизације. Да би се остварили неки од постављених циљева биће развијени теоријски модели на основу којих ће бити написани компјутерски програми који ће вршити симулације методом Монте Карло. За анализу добијених, како теоријских тако и експерименталних, резултата биће развијен одговарајући експертни систем. На истраживањима су ангажована 3 научна сарадника.

Сектор за техничко-технолошке науке

У овом Сектору је запошљено 11 истраживача који се баве истраживањима у области техничко-технолошких наука:

1. Др Горица Цвијановић, научни саветник, биотехничке науке
2. Др Саша Ђуковић, научни сарадник, машинско и рачунарско инжењерство
3. Др Игор Савељић, научни сарадник, машинско и рачунарско инжењерство
4. Др Снежана Вуловић, научни сарадник, машинско и рачунарско инжењерство
5. Др Арсо Вукићевић, научни сарадник, машинско инжењерство
6. Др Дубравка Живковић, научни сарадник, машинско инжењерство
7. Др Милица Николић, научни сарадник, машинско и рачунарско инжењерство
8. Др Марко Топаловић, научни сарадник, машинско и рачунарско инжењерство
9. Др Драган Цветковић, научни сарадник, машинско инжењерство
10. Др Александар Николић, виши стручни сарадник, машинско инжењерство
11. Др Александар Дишић, виши стручни сарадник, машинско инжењерство

Од истраживача из овог Сектора, др Саша Ђуковић је као гостујући професор учествовао у извођењу наставе на мастер академским студијама на универзитету Politecnico di Bari, у Барију, Италија. Др Горица Цвијановић је била ментор и члан комисија за оцену и одбрану на последипломским студијама, док су др Дубравка Живковић и др Снежана Вуловић учествовале у комисијама за одбрану докторских теза (докази дати у прилогу).

Научно-истраживачки рад у Сектору за техничко-технолошке науке се одвија у три одсека: одсек за биоинжењеринг, одсек за информационе технологије и одсек за инжењерство.

Одсек за биоинжењеринг. У оквиру одсека за биоинжењеринг радиће се на наставку започетих истраживања у области рачунске динамике флуида и нумеричких симулација. Један део истраживања у овој области ће бити усмерен на симулације кардиоваскуларних система, где ће акценат бити на проучавању струјања крви кроз крвне судове и проблема који се јављају као последица струјања крви. Циљеви истраживања у области рачунске динамике флуида обухватају одређивање узрока који доводе до процеса атеросклерозе у коронарним и каротидним артеријама, начина како се она даље развија применом нумеричких симулација као и предвиђање појаве уздужног раслојавања аорте, познате под називом аортна дисекција. Као полазна тачка биће коришћени реални DICOM снимци добијени из најпознатијих светских болница. Применом савремених софтверских решења биће могуће њихово реконструисање и такви 3Д модели представљаће улаз за даље тродимензионално решавање проблема струјања крви. Такође, применом савремених софтверских решења, као и софтвера који ће бити упоредо развијени за обраду биомедицинских слика, добијаће се реални 3Д модели на којима ће се вршити анализа појаве ове болести. У оквиру симулација кардиоваскуларног система наставиће се са истраживањима предвиђања раста плака. Планирани су наставци истраживања у области симулација респираторног система и симулација рада уређаја који се користе за инхалацију у циљу побољшања њихове ефикасности. Поред наведеног, истраживања ће обухватити и симулације биомеханике скелетног система и имплантата. Такође, планирано је

истраживање које се заснива на развоју модела ћелијских линија које се користе приликом израде органа на чиповима, при чему ће фокус бити на плућима и јетри. Тренутно развијени модели ће бити усложњени како би могли да буду искоришћени за симулирање сложенијих процеса који се одвијају унутар органа. По завршеној валидацији модела биће направљена апликација која ће обухватати развијене моделе. У плану је и наставак развоја софтвера и уређаја са применом у медицини. Поред претходно наведених, планиран је и наставак рада на информационом систему за праћење деформитета ScolioMedIS, као и алата за процену 3Д модела кичменог стуба на основу 3Д дигитализоване површи леђа, ScolioSIM, чиме је створена основа за редукцију излагања пацијената штетном зрачењу у току адолосценције. Даља истраживања односиће се на поређење резултата добијених оптичким путем и применом јонизујућих метода (3Д оптичка дијагностика и рендгенски снимци) и верификацију ScolioSIM модула за симулацију "patient-specific" модела деформитета. Након тестирања апликације у клиничким условима, планирано је унапређење корисничког интерфејса и интеграција модула за визуелизацију и мониторинг деформитета путем веб-базиране апликације. Прикупљањем довољног броја пацијената и архивирањем података о њиховој постури и прогресу деформитета биће омогућен развој нове 3Д класификације сколиозе јер досадашње 2Д шеме карактерише велика интер и интраопсерваторска варијабилност и непогодне су за примену у свакодневној клиничкој пракси.

У плану је и наставак експерименталних истраживања. Наставиће се са развојем технологије за производњу стента. У ову сврху испитиваће се различити материјали као што је нитинол, њихова физичка и електрохемијска обрада. Особине продукованог стента морају задовољити најстроже прописе заштите пацијената у дугом временском оквиру. Термичка и површинска обрада нитинола од изузетне је важности, пре свега због припреме материјала за производњу стента који ће смањити нежељене реакције у организму на минимум. Поред развоја стента, наставиће се и развојем скафолда за вештачке крвне судове употребом методе електроспининга, биореактора и дизајном нових носача ткива. Употребом електроспининг методологије и специфичних (био)полимера могу се производити нановлакна потребна за производњу специјалних скафолда. Овако произведени скафолди служе као носачи на којима се у специјалним условима одгајају матичне ћелије које се трансформишу у ћелије крвног суда у биореактору. У плану је и наставак истражавања примене електрохемије и биосензорике у креирању уређаја за рану детекцију канцера са циљем развоја дијагностичког апартата који омогућава прецизну и јефтину детекцију микроРНК из крвног серума или ткива без претходне PCR амплификације. Поред развоја уређаја за рану детекцију канцера, наставиће се са испитивањима потенцијалних препарата за третирање канцера који се тренутно обављају у ћелијској соби Центра за биоинжењеринг на Факултету инжењерских наука.

На овим истраживањима биће ангажовано 5 научних сарадника, 1 виши стручни сарадник и више студената докторских студија ангажованих на пројектима Министарства науке, просвете и технолошког развоја Републике Србије.

Одсек за информационе технологије. У наредном периоду планиран је наставак развоја нумеричких солвера различите намене. Планира се наставак развоја специјализованих софтвера за анализу сигурности брана у којима ће се користити спрега софтвера за анализу провођења топлоте, струјања кроз порозне средине и напонско-деформационе анализе. У оквиру развоја софтвера за анализу сигурности брана планиране су следеће активности: развој контактних алгоритама за решавање проблема преноса топлоте и филтрационих

процеса између бране и стенске масе, реинжењеринг и развој софтвера за анализу провођења топлоте – дogradija zraчењa na 3D тетраедарским елементима за случај стационарног и нестационарног провођења топлоте као и могућност итеративног решавања проблема нелинеарног провођења топлоте (стационарни и нестационарни проблеми) где материјалне константе зависе од температуре и постоји зрачење као гранични услов. Други тип солвера који ће се даље развијати су спретнути FEM-SPH солвери који су најпрактичније решење за анализу флуид-структурне интеракције при чему се флуид моделира са SPH честицама док се солиди моделирају коначним елементима. Примарни фокус даљег истраживања у области развоја FEM-SPH солвера биће развој и уградња извора и понора SPH честица. Тиме ће бити омогућена анализа проблема са променљивом запремином флуида. Секундарни правац истраживања биће развој и уградња контактног алгоритма са преносом топлоте у нумеричке солвере који се тренутно развијају. Циљ датог истраживања је анализа флуид-структурне интеракције са преносом топлоте уређаја компликоване геометрије као што су на пример измењивачи топлоте. Новим алгоритмом биће омогућено да се метални делови моделирају коначним елементима, а флуид SPH честицама, чиме ће се заобићи потреба за веома ситном мрежом чвррова, уколико се флуид моделира са коначним елементима. Поред горе наведених правца истраживања, део фокуса биће усмерен и на развој и уградњу материјалних модела за грануларне материјале (првенствено асфалт) као и виско-пластичне и хипер-еластичне материјале. Такође, наставиће се са истраживањима која су везана за развој турбулентног модела к-епсилон. Развој овог модела за прорачун струјања флуида заснива се на методи коначних елемената већ додати у програм PAK-F и планира се даљи развој овог модела. Овај модел налази примену за прорачун струјања у проточним каналима турбомашине као и за анализу медицинских феномена.

На овим истраживањима биће ангажована 2 научна сарадника и 1 виши стручни сарадник.

Одсек за инжењерство. У оквиру овог одсека постоје 3 истраживачке групе које су тренутно укључене у различите пројекте.

У лабораторији за енергетику и процесну технику истраживања ће бити усмерена на енергетску ефикасност у индустрији и зградама као и на иновативне механизме финансирања пројекта енергетске ефикасности. Истраживања у области енергетске ефикасности у индустрији биће усмерена на енергетску политику, примену мера енергетске ефикасности и система управљања енергијом. Истраживања у области енергетске ефикасности у зградама биће усмерена на област реновирања и енергетске санације и адаптације постојећих стамбених, комерцијалних и јавних објеката. Поред наведеног, планиран је наставак започетих истраживања из области енерго и еко менаџмента; пројектовања уређаја и постројења из процесне технике, индустријске хидраулике и пнеуматике, термотехнике и енергетике, хидрауличких и хидромеханичких преносника снаге; као и развоја софтвера за прорачуне у области процесне технике, индустријске хидраулике и пнеуматике, термотехнике и енергетике, хидрауличких и хидромеханичких преносника снаге. На овим истраживањима биће ангажована 2 научна сарадника.

У лабораторији за испитивање материјала у наредном периоду планиран је развој методологије за експериментално испитивање материјала при различитим брзинама

деформације уз примену нових (контактних и безконтактних) решења одређивања стварне криве течења основног материјала и узорака са завареним спојем испитивањем на затезање. Методологија би обухватила испитивање на собним и повишеним температурама са мерењем променљивог попречног пресека епрувete дуж целе мерне дужине и на месту локализације деформације до настанка лома. У плану је и модификација уређаја за испитивање материјала при великом брзинама деформације на собним и повишеним температурама. Модификација се односи на дизајнирање компактне носеће конструкције затезне варијанте Хопкинсоновог штапа, што омогућава даља истраживања у делу утицаја носећих елемената на простирање таласа унутар штапова и епрувeta. Такође, модификација би омогућила и истраживање утицаја механичког интерфејса испитиваног узорка са различитим облицима адаптера за њихову везу са штаповима. У оквиру истраживања радиће се и на одређивању параметара Johnson-Cook – овог материјалног модела на основу експерименталних резултата испитивања материјала. Истраживање би обухватило упоредну анализу са другим материјалним моделима (Zerilli-Armstrong) који узимају у обзир променљиву брзину деформације и температуре, са критеријумом ерозије елемената. Такође, истраживање би обухватило и анализу новог модификованог облика једначине течења и оштећења. Верификација резултата је планирана у лабораторијским и полигонским условима. Сви усвојени резултати испитивања би били верификовани, прво у лабораторијском окружењу уз употребу нумеричких прорачуна и симулација процеса испитивања, а затим на конкретним примерима из праксе наменске индустрије на опитним полигонима. Поред наведеног, наставиће се за започетим истраживањем употребљивости нумеричких модела човека HYBRID III Dummy за потребе противминске заштите возила са аспекта утицаја ударног таласа експлозије на спретну модель возила и човека. На овим истраживањима биће ангажован 1 научни сарадник.

У лабораторији за индустриски инжењеринг истраживања ће бити усмерена ка управљању квалитетом и моделирању пословних процеса кроз аутоматску идентификацију и прикупљање података. Такође, развијаће се интеграциони системи и методе за планирање ресурса у предузећу, управљање ланцима снабдевања и управљању односима са купцима. Поред тога, истраживања ће обухватити и безбедност и ергономију, управљање индустриским процесима као и индустриску аутоматизацију. На овим истраживањима биће ангажован 1 научни сарадник.

Поред истраживања у наведеним областима на Институту ће се одвијати интегрална и интердисциплинарна истраживања у којима ће поред истраживача са Института учествовати и истраживачи са Факултета, Универзитета, али и других научно-истраживачких институција у земљи и иностранству са којима се може постићи компатибилност научних дисциплина.

Како ће у наведеним истраживањима учествовати велики број младих истраживача - студената докторских студија планира се да се они запосле након акредитације Института.

Поред људских ресурса, један од предуслова за успешан и квалитетан научно-истраживачки рад је простор и савремена научно-истраживачка опрема. Како је Институт у оснивању, још увек не поседује сопствени простор ни крупну опрему. За потребе Института је предвиђено 800 квадратних метара у зградама Центара изврсности Универзитета у Крагујевцу које се зидају у сарадњи са Министарством просвете, науке и технолошког развоја и локалне самоуправе. Предвиђено је да зграде буду завршене крајем идуће године.

До тада ће истраживачи, на основу склопљених уговора о пословно-техничкој сарадњи са Природно-математичким факултетом и Факултетом инжињерских наука Универзитета у Крагујевцу, користити простор и опрему у лабораторијама у којима су и до сада радили. Истраживачи поседују рачунаре, софтвере, ситну лабораторијску опрему, хемикалије и потрошни материјал који су до сада набавили преко пројеката на којима су ангажовани. С тим у вези, Институт ће у наредном периоду вршити набавку опреме уз подршку Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије, сопствених средстава и средстава пројекта:

У циљу даљег унапређења научно-истраживачког рада руководство Института ће у складу са својим ресурсима подржавати учешће свих запослених у програмима међународне сарадње кроз конкурсације на пројекте регионалног, европског и светског карактера у којима је могуће учешће наше земље на основу споразума о различитим видовима сарадње: билатерални пројекти, мултилатерални пројекти, IPA пројекти, COST, HORIZON 2020, Erasmus+ и пројекти других доступних програма. У прилогу је дат списак истраживача и пројеката који су у току и на којима ће се одвијати започета истраживања.

Информациони систем Института за информационе технологије је интегрисан у универзитетски информациони систем Универзитета у Крагујевцу. Планира се даље унапређење веб сајта Института: <http://www.iit.kg.ac.rs>.

Издавање научних публикација обухвата издавање: монографија, часописа и зборника са научно-стручних скупова. У оквиру издавачке делатности на Институту ће се издавати монографије у којима су приказани резултати истраживања на појединим пројектима и докторским дисертацијама. Институт ће обезбеђивати потребну подршку запосленим истраживачима при конкурсацији за суфинансирање издавања монографија у ресорном министарству. Планирано је да се у периоду акредитације публикују 3 монографије истраживача са Института информационих технологија у Крагујевцу. Поред тога објавиће се и зборници са научно-стручних скупова који буду одржани под покровитељством Института.

Научно-стручни скупови представљају значајан облик научно-истраживачког рада на којима научни кадар саопштава своје најновије научне резултате. Институт ће организовати научне скупове и радионице како би истраживачи своје научне резултате учинили доступним. Поред тога ће обезбеђивати потребну подршку запосленим истраживачима при конкурсацији за суфинансирање учешћа истраживача на међународним научним скуповима у ресорном министарству. Институт ће се преко својих истраживача укључити у међународна или домаћа научно-стручна удружења или њихове огранке са циљем окупљања научника и истраживача исте или близке оријентације, организације научних предавања, семинара, научних скупова и сл.

Институт је повезан са информационим сервисом Универзитетске библиотеке Универзитета у Крагујевцу и сви запослени истраживачи и студенти могу да користе ресурсе обе библиотеке. Библиотечко-информациони систем Универзитетске библиотеке заснива се на Кооперативном онлайн библиографском систему и сервисима Виртуелне библиотеке Србије (ВБС). Пројекат ВБС подразумева изградњу система узајамне каталогизације са централним електронским каталогом и мрежом библиотека коју чине све библиотеке у Србији. У овом тренутку, у систем узајамне каталогизације укључено је 64 установа, са стотинак библиотека, а српски узајамни каталог COBISS.SR садржи 1.700.000 библиографских записа. То је основа за изградњу целовитог библиотечко-информационог система, којим ће се објединити информације о библиотечким фондовима у Србији са

информацијама и електронским документима из база података на било ком од сервера у систему. Читаоци могу преко Интернета да претражују публикације са било које тачке приступа (било из библиотеке; било од куће) и добиће информације о траженој публикацији, без обзира у којој се библиотеци она налази. Конзорцијум библиотека Србије за обједињену набавку (КоБСОН) је облик организовања библиотека Србије. Основни циљеви овог удружилаца су: набавка страних научних информација, прелазак са папирних издања на електронска, и унапређење приступа електронским информацијама. Целокупан систем претплате финансира се искључиво преко Министарства просвете, науке и технолошког развоја Републике Србије.

Након акредитације Институт за информационе технологије у Крагујевцу ће се укланити у Заједницу института Србије. Заједница у свом чланству има 66 акредитованих научних и истраживачко-развојних института удруженih, у складу са Законом, ради остваривања заједничких интереса и научноистраживачке сарадње, усклађивања набавке и коришћења научноистраживачке опреме и лабораторијског простора, набавке и коришћења научних публикација, међусобног повезивања и сарадње са одговарајућим облицима удружилаца у области високог образовања, развијања међународне сарадње, неговања научне критике и вредновања сопственог научноистраживачког рада. Такође, на предлог Заједнице, бира се део чланова других најбитнијих тела у науци: Националног савета за научни и технолошки развој, Одбора за акредитацију научноистраживачких организација, Комисије за стицање научних звања и Одбора за етику у науци.

Директор

