Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0224U033460

Державний реєстраційний номер: 0124U001308

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 27-12-2024

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розробити інтегрований підхід до високопродуктивного моделювання протеїнових комплексів, структурно-функціональних взаємозв'язків протеїнів, та прогнозування фенотипних ефектів варіації однієї амінокислоти на основі кінетичних аспектів поєднання протеїнів у клітинному середовищі

Початок етапу: 12.2023

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Навчально-науковий комплекс "Інститут прикладного системного аналізу" Національного технічного університету України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

Код за ЄДРПОУ: 25408067

Місцезнаходження: проспект Берестейський, буд. 37 , корпус 35, м. Київ, 03056, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442049701, 380442048142, 380442048360

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Центр досліджень Канзаського університету, Inc.

Код за ЄДРПОУ: 48-0680117

Місцезнаходження: 2385 Irving Hill Road, Лоренс, штат Канзас, 66045-7563, Сполучені Штати Америки (США)

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 7858645854

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 09 - договір із закордонним замовником

Напрям фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7716 - кошти замовників іноземних держав

Фактичний обсяг фінансування (тис. дол.): 23.000

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розробити інтегрований підхід до високопродуктивного моделювання протеїнових комплексів, структурно-функціональних взаємозв'язків протеїнів, та прогнозування фенотипних ефектів варіації однієї амінокислоти на основі кінетичних аспектів поєднання протеїнів у клітинному середовищі

Назва роботи англійською:

Development of an integrated approach to high-throughput modeling of protein complexes, protein structure-function relationships, and prediction of the phenotypic effects of single amino acid variation based on the kinetic aspects of protein association in cellular environment

Реферат українською:

Об'єкт досліджень -- моделі протеїнових комплексів. Мета роботи -- застосувати високопродуктивні обчислення та машинне навчання для розробки інтегрованого підходу до моделювання макромолекулярних взаємодій для прогнозування кінетичних аспектів і моделей молекулярної механіки в клітинному середовищі. Метод дослідження -- глибоке навчання, методи штучного інтелекту. В ході дослідження проведено експертизу в галузі високопродуктивних обчислень та машинного навчання, зокрема в їх застосуванні до розробки інтегрованого підходу до високопродуктивного моделювання макромолекулярних взаємодій для прогнозування кінетичних аспектів та схем збірки молекулярних механізмів у клітинному середовищі. Розроблено новітні обчислювальні підходи до структурної характеризації білкових комплексів при реалістичних макромолекулярних концентраціях, з урахуванням останніх досягнень у застосуванні штучного інтелекту та глибокого навчання для прогнозування структури білків і білкових асамблей. Представлено ідею для подальшої оптимізації обчислень. Результати досліджень, одержані при виконанні наукової роботи, впроваджені в низку навчальних курсів: "Навчання з підкріпленням". В рамках виконання проекту підготовлено до захисту 1 дисертацію PhD. Готується до опублікування 1 стаття у виданні, що індексується у БД Scopus та WoS. Результати, отримані в ході виконання НДР відповідають світовому рівню, вони є новими потужними обчислювальними підходами, що дозволять здійснювати характеристику клітинних механізмів з атомарною точністю на основі надзвичайно довгих симуляційних траєкторій, що наразі значно перевищують можливості існуючих обчислювальних методів. Ключові слова: глибоке навчання, молекулярна динаміка, розпаралелювання процесів, машинне навчання.

Реферат англійською:

Research object -- models of protein complexes. The aim of the work is to apply high-performance computing and machine learning to develop an integrated approach for modeling macromolecular interactions to predict kinetic aspects and molecular mechanics models in a cellular environment. Research method -- deep learning, artificial intelligence methods. During the study, an examination was conducted in the field of high-performance computing and machine learning, particularly in their application to the development of an integrated approach for high-performance modeling of macromolecular interactions to predict kinetic aspects and molecular assembly schemes in a cellular environment. Innovative computational approaches have been developed for the structural characterization of protein complexes at realistic macromolecular concentrations, taking into account the latest advances in the application of artificial intelligence and deep learning for predicting the structure of proteins and protein assemblies. An idea for further optimization of computations has been presented. The results of the research obtained during the scientific work have been implemented in a number of training courses: "Reinforcement Learning." As part of the project, one PhD dissertation has been prepared for defense. One article is being prepared for publication in a journal indexed in the Scopus and WoS databases. The results obtained during the research correspond to the world level; they represent new powerful computational approaches that will enable the characterization of cellular mechanisms with atomic precision based on extraordinarily long

simulation trajectories, significantly exceeding the capabilities of existing computational methods. Keywords: deep learning, molecular dynamics, process parallelization, machine learning.

Індекс УДК: 519.246, 517.95 , 519.62/64 , 004.8

Коди тематичних рубрик: 28.29.43, 27.31, 27.41.19, 28.23

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Касьянов Павло Олегович

Науковий ступінь: д.ф.-м.н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Нові обчислювальні підходи до структурної характеризації білкових комплексів

Назва НТП англійською: New computational approaches for the structural characterization of protein complexes

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії, Аналітичні матеріали

Галузь застосування: Інтелектуальні комп'ютерні засоби високої продуктивності, медико-біологічна галузь

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Розроблені підходи враховують реалістичні макромолекулярні концентрації та базуються на останніх досягненнях у застосуванні штучного інтелекту та глибокого навчання для прогнозування структури білків і білкових асамблей.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Економія енергоресурсів, Підвищення продуктивності праці

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 12.2023

Закінчення етапу: 12.2024

Споживачі продукції: Центр досліджень Канзаського університету, Inc.

Перспективні ринки: Біоінформатика та системна біологія, Наукові дослідження та розробки (R&D), Технології штучного інтелекту, Високопродуктивні обчислення (HPC), Освітні технології

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

ШІ-методологія для моделювання білкових взаємодій у біологічних системах / Згуровський М.З., Касьянов П.О., Левенчук Л.Б., Новиков В.Р. // Кібернетика і Системний Аналіз (прийнята до друку))

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи Касьянов Павло Олегович
д.ф.-м.н.

Перелік осіб-виконавців

Левенчук Людмила Борисівна
(д.філософ)

Палійчук Лілія Сергіївна
(к.ф.-м.н., 01.05.04)

Титаренко Андрій Миколайович

Відповідальний за підготовку облікових документів Палійчук Л.С.

Телефон +38 (066) 521-41-54

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

