

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U000220

Державний реєстраційний номер: 0124U0003762

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 07-01-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Симуляції експериментів з розпаду динуклонних систем, напрацювання методів та підходів до прогнозування теплофізичних властивостей матеріалів і структур різної розмірності та морфології, інтеграція VIRGO.UA у платформу Multi-Messenger Online Data Analysis

Початок етапу: 08.2024

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітнього документа: Проміжний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Код за ЄДРПОУ: 02070944

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 60, м. Київ, 01033, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442393333, 380442393230

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національний фонд досліджень України

Код за ЄДРПОУ: 42734019

Місцезнаходження: вул. Бориса Грінченка, 1, м. Київ, 01001, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442981622, 380442981622

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 4994.013

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Вирішення сучасних проблем хімії, біомедицини, фізики та матеріалознавства з використанням центру високопродуктивних обчислень і машинного навчання

Назва роботи англійською:

Solving modern problems of chemistry, biomedicine, physics and materials science using the center of high-performance computing and machine learning

Реферат українською:

Актуальність. Сучасні наукові дослідження сьогодні важко собі уявити без застосування комп'ютерних технологій, тому створення інфраструктури, що дозволить підвищити рівень використання комп'ютерних технологій в дослідженнях в Україні є актуальною задачею. Мета проекту. Даним проектом передбачається створення нової дослідницької інфраструктурної одиниці – потужного комп'ютерного кластера Київського національного університету імені Тараса Шевченка (далі – КНУТШ), обладнаного пакетами програм, та проведення на ньому наукових досліджень в галузі фізики ядра, елементарних частинок, високих енергій, хемо- та біоінформатики, штучного інтелекту та комп'ютерної лінгвістики. Основні завдання, ідеї, гіпотези: отримання характеристик спектрометра для проведення експерименту з розпаду динейтронну через канал електронного розпаду в дейтрон; використання потенціалів міжатомної взаємодії, параметризованих методами машинного навчання, для молекулярно-динамічного моделювання процесів теплового транспорту в різних матеріалах; дослідження в астрофізиці високих енергій у напрямі гравітаційно-хвильової та нейтринної астрономії з реєстрацією подій одночасно в різних спектральних діапазонах та через різні канали спостережень; квантовохімічні дослідження нових класів органічних молекул – потенційних будівельних блоків для медичної хімії та агрохімії; комп'ютерний аналіз взаємодії хімічних сполук з біологічними мішенями; розробка, адаптація та тонке налаштування великих нейронних лінгвістичних моделей і прикладних систем на їх основі; оптимізація обчислювальних процесів, генерація зв'язних текстів заданого змісту, а також розпізнавання в текстах та соцмережах пропаганди, фейків.

Реферат англійською:

Relevance. Modern scientific research today is difficult to imagine without the use of computer technologies, so the creation of an infrastructure that will allow increasing the level of use of computer technologies in research in Ukraine is a relevant task. Project goal. This project envisages the creation of a new research infrastructure unit – a powerful computer cluster of the Taras Shevchenko National University of Kyiv (hereinafter – KNUTKH), equipped with software packages, and conducting scientific research on it in the field of nuclear physics, elementary particles, high energies, chemo- and bioinformatics, artificial intelligence and computer linguistics. Main tasks, ideas, hypotheses: obtaining the characteristics of a spectrometer for conducting an experiment on the decay of a dineutron through the electron decay channel into a deuteron; using interatomic interaction potentials, parameterized by machine learning methods, for molecular-dynamic modeling of heat transport processes in various materials; research in high-energy astrophysics in the direction of gravitational-wave and neutrino astronomy with the registration of events simultaneously in different spectral ranges and through different observation channels; quantum-chemical studies of new classes of organic molecules – potential building blocks for medicinal chemistry and agrochemistry; computer analysis of the interaction of chemical compounds with biological targets; development, adaptation and fine-tuning of large neural linguistic models and application systems based on them; optimization of computational processes, generation of coherent texts of a given content, as well as recognition of propaganda and fakes in texts and social networks.

Індекс УДК: 547.9;577.1.01

Коди тематичних рубрик:31.23.01

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Комаров Ігор Володимирович

Науковий ступінь: д. х. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Модель спектрометра

Назва НТП англійською: Spectrometer model

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Програмні продукти

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Здійснено проектування та розпочата реалізація схеми розміщення обладнання для забезпечення рівномірного навантаження на системи енергоживлення та температурного режиму роботи обладнання, а також запускові та тестові роботи по комплектації комп'ютерного кластеру. Спроековано зміни до архітектури існуючого обчислювального кластера з урахуванням встановлення нових вузлів зберігання даних, вузлів віртуалізації та обчислювальних вузлів. Розроблено модель спектрометра для спостереження динейтронів з використанням кодів GEANT, TALYS, а також проведено симуляцію в коді GEANT спектрометра та розрахунок в коді TALYS перерізів ядерних реакцій для спостереження динейтронів. Проведено порівняння баз даних параметрів квадрупольної деформації атомних ядер в різних збуджених станах та аналіз аналітичних виразів для енергії низькорозташованого ядерного стану. Отримано дані спостережень нейтринних телескопів для побудови фізичних моделей прискорення космічних променів та генерування багатоканальних сигналів від астрофізичних джерел. Почалася інтеграція VIRGO.UA в платформу Multi-Messenger Online Data Analysis. Тестовано програмне забезпечення, призначене для виконання квантово-хімічних розрахунків ; проведено розрахунки термодинамічних характеристик реакцій незаміщених метилакрилатів із діазометаном та структури продуктів їх взаємодії; здійснена валідація результатів квантово-механічних розрахунків та оптимізація розрахункових моделей для реакцій циклопропанування алкенів за допомогою діазометану експериментальним шляхом. Встановлено та тестовано пакети програм для молекулярної механіки та динаміки. Забезпечено віддалений доступ до них, здійснювалася підготовка вхідних завдань; проведена кросвалідація моделей нейронних мереж для розпізнавання фейкових новин. Здійснювалася розробка моделей для побудови прикладних систем класифікації текстів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Фізика ядра і високих енергій

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Аналітичні вирази для фотонних силових функцій

Назва НТП англійською: Analytical expressions for photon force functions

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Було виконано порівняння значень параметрів квадрупольної деформації атомних ядер в різноманітних станах. Були обчислені значення квадрупольних деформацій у високоезбудженому стані гігантського дипольного резонансу (ГДР). Також були обчислені енергії низькорозташованого ядерного стану з використанням аналітичних виразів. Результати порівнювалися з мікроскопічними обчисленнями для ізоотопів Ni, Sn, Pb, які збігалися з експериментальними даними. Отримані аналітичні вирази для фотонних силових функцій з використанням функцій відгуку та досліджені параметри фотонних силових функцій, проведена підготовка програмних кодів для моделювання процесів транспорту частинок іонізуючого випромінювання в твердотільних структурах, тестування програмних кодів для паралельної роботи на робочих станціях для моделювання процесів транспорту частинок іонізуючого випромінювання в твердотільних структурах та підготовка програмних кодів для молекулярно-динамічного моделювання процесів теплового транспорту, електричної взаємодії та масопереносу, дослідження модельних наноструктур детекторних систем. Було проведено інсталяцію програмного пакету молекулярної динаміки LAMMPS, виконано його налаштування та підготовлено програмні коди для виконання розрахунків коефіцієнта теплопровідності твердотільних структур методом рівноважної молекулярної динаміки. На основі розроблених програмних кодів було виконано тестові розрахунки коефіцієнта теплопровідності наноструктур на основі кремнію, що включали нанонитки Si та твердого розчину SiGe. Встановлено, що з ростом температури теплопровідність кремнієвої нанонитки монотонно зменшується, тоді як для структури на основі твердого розчину SiGe – залишається приблизно сталою в інтервалі температур 300K-1000 K. Обсерваторія VIRGO створила гамма-базу даних спостережень активних гамма-телескопів за областями неба навколо потужних джерел гамма-випромінювання Cygnus X і MGRO J1908+06.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Фізика ядра і високих енергій

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

ІХ. Бібліографічний опис

Презентація та дисемінація результатів – 7; створено чи істотно удосконалено/покращено існуючі – 3

Х. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Толстанова Ганна Миколаївна

д. б. н., 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Безшийко Олег Анатолійович

(к. ф.-м. н., 01.04.16)

Бойко Юрій Володимирович

(к. ф.-м. н., 01.04.10)

Борецький Олександр Францович

(к. т. н.)

Волочнюк Дмитро Михайлович

(д. х. н., 02.00.03)

Гнатик Богдан Іванович

(д. ф.-м. н.)

Горбаченко Олександр Миколайович

(к. ф.-м. н.)

Завадський Ігор Олександрович

(д. ф.-м. н., 01.05.01)

Курилюк Василь Васильович

(к. ф.-м. н., 01.04.07)

Марченко Олександр Анатолійович

(д. ф.-м. н., 01.04.18)

Нипорко Олексій Юрійович

(к. б. н., 03.00.02, 03.00.11)

Оліх Олег Ярославович

(д. ф.-м. н., 01.04.07)

Плюйко Володимир Андрійович

(д. ф.-м. н., 01.04.16, 01.04.16)

Роженко Олександр Борисович

(д. х. н., 02.00.03, 02.00.08)

Рябухін Сергій Вікторович

(д. х. н., 02.00.03)

Сахно Надія Вікторівна

(к. т. н.)

Слюсар Євген Андрійович

(к. т. н.)

Судаков Олександр Олександрович

(к. ф.-м. н., 01.04.03)

Тарануха Володимир Юрійович

(к. ф.-м. н., 01.05.01)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Бурих А.А.

Телефон

+38 (044) 239-31-88

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

