Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U004991

Державний реєстраційний номер: 0124U003762

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 23-12-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Діязоалкани та їх похідні: квантово-хімічні дослідження електронної будови та механізмів реакцій на їх основі

Початок етапу: 03.2025

Закінчення етапу: 11.2025

Вид звітного 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, Київ, 01033, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR:

Розмір організації:

Телефон: 380442393333

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, Київ, 01001, Україна

Форма власності: Державна

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR:

Розмір організації:

Телефон: 380442981629

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - Договір (замовлення) з міністерством, іншим центральним органом виконавчої влади, академією наук (головним розпорядником бюджетних коштів на проведення ДіР)

Напрям фінансування: 2.1 - Фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - Кошти загального фонду державного бюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 2201300

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 13775.008

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:

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 проєкту. Даним проєктом 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 динейтрону 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:

Modern scientific research today is difficult to imagine without the use of computer technologies, so the creation of infrastructure that will increase the level of use of computer technologies in research in Ukraine is an urgent 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: 0000-0002-7908-914

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Комп'ютерний кластер

Назва НТП англійською: Computer cluster

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Пристрої (вироби технічні), Методичні документи

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Комп'ютерний блок (10 нод) • Supermicro SYS-621C-TN12R Modular Platform 2U rack-mount • CPU: 2 x 28-core Intel Xeon Scalable 5520+ (5th Gen) total 56 cores • RAM: 4 x 64GB DDR5-4800 Registered ECC total 256GB, ~4.5GB/core • GPU: 1 x NVIDIA A100, 80GB HBM2e (Ampere architecture) • SSD: 1 x Intel D3-S4520 SATA SSD 960GB ~550MB/s I/O performance • Interconnect: Mellanox ConnectX-3 2 x 10Gb/s RoCE RDMA adapter Графічний акселератор (3 шт.) NVIDIA A100, 80GB HBM2e, Ampere architecture, passive cooling, PCIe, 4.0 x16 (no dp out), підтримка MIG

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення продуктивності праці

Вплив НТП на довкілля: Не впливає на довкілля значним чином

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

- **Початок етапу:** 03.2025
- **Закінчення етапу:** 11.2025

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 обгрунтування:**
- **Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**
- **Очікуваний термін окупності (років):**
- **Додаткова інформація:**

Назва НТП українською: Веб-платформа кластеру

Назва НТП англійською: Web-platform of the cluster

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Програмні продукти, програмно-технологічна документація

Галузь застосування:72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Платформа онлайн-доступу користувачів до комп'ютерного кластеру КНУ імені Тараса Шевченка

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення продуктивності праці

Вплив НТП на довкілля: Не впливає на довкілля значним чином

Впровадження НТП: Впроваджено

Практична реалізація НТП

- **Початок етапу:** 03.2025
- **Закінчення етапу:** 11.2025

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 обгрунтування:**
- **Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:**
- **Очікуваний термін окупності (років):**
- **Додаткова інформація:**

Назва НТП українською: Тестове середовище для розробки засобів інтеграції обчислювального кластера із зовнішніми інформаційними системами

Назва НТП англійською: Test environment for developing tools for integrating a computing cluster with external information systems

НТП, яку передбачалося створити: Створено

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Програмні продукти, програмно-технологічна документація

Галузь застосування: 72. Наукові дослідження та розробки

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Продукт виконаний у вигляді віртуальної машини, де встановлено системне програмне забезпечення, зазвичай доступне користувачам на вхідних та робочих вузлах - клієнти планувальника, бібліотеки та компілятори, реалізація MPI. Також на цій же машині розгорнуто сервіси, які повторюють поведінку служб керування кластера - планувальник, та каталог користувачів. Таким чином користувачі можуть тестувати запуск задач, їх моніторинг, керування даними, тощо.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Підвищення продуктивності праці

Вплив НТП на довкілля: Не впливає на довкілля значним чином

Впровадження НТП:Впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 03.2025

Закінчення етапу: 11.2025

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 обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

Kuryliuk V., et al. Atomistic study of mechanical properties of SiGe hollow-core nanowires // Materials Research Express. – 2025. – Vol. 12. – Art. 085006. (Scopus, Q3, DOI: https://doi.org/10.1088/2053-1591/adfd28).

Plujko V. A., Gorbachenko O. M., Romanovskyi N. O. Systematics of pygmy dipole resonance energies in medium and heavy atomic nuclei with neutron excess // Nuclear Physics and Atomic Energy. – 2025. – Vol. 26, № 2. – P. 105–112. (Scopus, Q3, DOI: https://doi.org/10.15407/jnpae2025.02.105)

Gorbachenko O. M., Plujko V. A. Deformation parameters of atomic nuclei from photoabsorption data and its impact on photoabsorption cross sections // Ukrainian Journal of Physics. – 2025. – Vol. 70, № 3. – P. 151. (Scopus, Q3, DOI: https://doi.org/10.15407/ujpe70.3.151).

Abe K., et al. Prospects for dark matter observations in dwarf spheroidal galaxies with the Cherenkov Telescope Array Observatory // Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 2025. – Vol. 544. – P. 2946–2986. (Scopus, Q1, DOI: https://doi.org/10.1093/mnras/staf1798).

Shuvakin S., Ivonin S., Pendyukh V., Pashenko O., Shishkina S., Kozytskiy A., Rozhenko A., Manthe U., Spengler T., Volochnyuk D., Ryabukhin S. Preparative [3+2] cycloaddition of CH□N□ to acrylate derivatives: revising, scope and synthetic applications // ChemRxiv. – 2024. – 11 December. (Препринт, DOI: https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2024-5w2q4).

Vashchenko O.V., Ivanova H.V., Bondarchuk T.V., Doroshchuk R.O., Raspertova I.V., Rozhenko A.B., Volochnyuk D.M., Ryabukhin S.V., Lampeka R.D., Khomenko D.M. Synthesis of 3-Aminomethyl-5R-1,2,4-Triazoles by Cyclization of Amidrazones: Multigram Approach and Revised Reaction Mechanism // European Journal of Organic Chemistry. – 2025б 28, e202500646 (Scopus, Q2, DOI: https://doi.org/10.1002/ejoc.202500646).

Zhou F.-Y., Lu H., Huang X., Han Y., Zhang Y., Han H., Tsykalchuk L., Nyporko A., Yu Q. Cytochrome CYP72A15 may play a role in metabolic resistance to mesotrione in wild radish // Pesticide Biochemistry and Physiology. – 2025. – Vol. 210. – Art. 106380. (Scopus, Q1, DOI: https://doi.org/10.1016/j.pestbp.2025.106380).

Musienko A., Nyporko A. Structure-based in silico discovery of Aurora kinase inhibitors as next-generation herbicides // Molecular Informatics. – 2025. (Scopus Q2, submitted).

Anisimov A. V., Marchenko O. O., Nasirov E. M., et al. Comparative Analysis of Neural Network Models for Text Classification Problems // Cybernetics and Systems Analysis. – 2025. – Vol. 61. – P. 339–346. (Scopus, Q3, DOI: https://doi.org/10.1007/s10559-025-00772-0).

Анісімов А. В., Марченко О. О., Насіров Е. М., Тарануха В. Ю. Налаштування моделей на основі BERT для аналізу емоційного забарвлення текстів // Кібернетика та системний аналіз. – 2026. – № 3 (Прийнято до друку).

Kuryliuk V., Olikh O., et al. Estimation of the thermal conductivity of porous silicon using molecular dynamics and machine learning methods // V International Conference Condensed Matter and Low Temperature Physics CM&LTP 2025. Book of Abstracts. – Kharkiv, 2025. – P. 238. (chrome-extension://efaidnbmnnnibpcajpcglclefindmkaj/https://www.ilt.kharkov.ua/cmltp2025/doc/Book_of_Abstracts_2025

Оліх О., та ін. Застосування алгоритмів машинного навчання до обчислення рухливості носіїв заряду у кремнії // X Українська наукова конференція з фізики напівпровідників УНКФН-10. – Ужгород, 2025. – С. 395–396 (https://drive.google.com/file/d/1XbatAE3FUxA9E8jrDWVrH_Y75mbAv9SU/view).

Sakhno N. Simulation experiments for direct dineutron decay observation // European Nuclear Physics Conference 2025. – Caen, France, September 21–26 2025. URL: (Scopus, https://indico.in2p3.fr/event/30430/contributions/157651/)

Плюйко В. А., Горбаченко О. М., Романовський Н. О. Аналіз систематик енергій пігмі дипольного резонансу атомних ядер // XXXII Щорічна наукова конференція Інституту ядерних досліджень НАН України. – Київ, 26–30 травня 2025. – С. 38–39 (https://indico.kinr.kyiv.ua/event/4/book-of-abstracts.pdf).

Янковський О., Усачов А. С., Безшийко О. А., Голінка-Безшийко Л. О. Розробка алгоритму пошуку зміщених вершин з VELO-треків для тригера HLT1 на LHCb // XXXII Щорічна наукова конференція Інституту ядерних досліджень НАН України. – Київ, 2025. – С. 94–95 (https://indico.kinr.kyiv.ua/event/4/book-of-abstracts.pdf).

Клекоць Д., Голінка-Безшийко Л., Безшийко О. Символьна регресія в аналізі даних колайдерних експериментів // International Conference of Young Scientists and Post-Graduate Students IEP-2025. – Uzhhorod, 20–23 May 2025. – P. 59–61.

Stepanov M., Zadorozhna L., Hnatyk B. Neutrino constraints on WIMP and superheavy dark matter annihilation/decay in the Shapley supercluster // Astronomy and Space Physics in the Kyiv University. – Kyiv, 27–30 May 2025. – P. 43 (https://observ.knu.ua/conference/book-of-abstracts/).

Pravosud R., Adamov O., Marchenko O. Dialogue Style Transfer with Reinforcement Learning and Parameter Efficient Fine-Tuning // Flexible Query Answering Systems. FQAS 2025. – LNCS, Vol. 16119. – Springer, Cham, 2026. (Scopus, DOI: https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-032-05607-8_22).

Anisimov A. V., Marchenko O. O., Nasirov E. M., Taranukha V. Y. Wikipedia-grounded Dataset for Question Answering, Verification, and Text Generation for Ukrainian Language // IT&I-2025. – CEUR Workshop Proceedings, 2025 (Scopus, http://iti.fit.univ.kiev.ua/en/conference-proceedings/).

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Толстанова Ганна Миколаївна
д. б. н., професор, 03.00.04

Перелік осіб-виконавців

Безшийко Олег Анатолієвич
(к. ф.-м. н., с.н.с.)

Бойко Юрій Володимирович
(к.ф.-м.н., доц., 01.04.10)

Борецький Олександр Францович
(к. т. н.)

Волочнюк Дмитро Михайлович
(д. х. н., професор, 02.00.03)

Гнатик Богдан Іванович
(д. ф.-м. н., професор, 01.03.02)

Горбаченко Олександр Миколайович
(к. ф.-м. н., 01.04.16)

Завадський Ігор Олександрович

Курилюк Василь Васильович
(к. ф.-м. н., доц., 01.04.07)

Марченко Олександр Олександрович
(д.ф.-м.н., професор, 01.05.01)

Нипорко Олексій Юрійович
(к. б. н., доц., 03.00.11)

Оліх Олег Ярославович
(д. ф.-м. н., професор, 01.04.07)

Плюйко Володимир Андрійович
(д.ф.-м.н., професор, 01.04.16)

Роженко Олександр Борисович
(д. х. н., професор, 02.00.03)

Рябухін Сергій Вікторович
(д. х. н., доц., 02.00.03)

Сахно Надія Вікторівна
(к. т. н., н.с)

Слюсар Євген Андрійович

Судаков Олександр Олександрович
(к. ф.-м. н., доц.)

Тарануха Володимир Юрійович
(к. т. н., старший науковий співробітник, 05.13.06)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Фощій Сніжана Миколаїна

Телефон

+380675001151

Реєстратор Юрченко Тетяна Анатоліївна

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Тетяна Анатоліївна