

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0223U003648

Державний реєстраційний номер: 0122U201915

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 06-06-2023

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Розробка паралельної програми для моделювання нових функціональних матеріалів на основі металевих наночастинок, розвиток методики передбачення афінності зв'язування між протеїнами і малими органічними сполуками в задачах молекулярного докування, удосконалення алгоритмів оптимізації архітектури бездротових меш-мереж.

Початок етапу: 02.2022

Закінчення етапу: 12.2022

Вид звітнього документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свенціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380322761978, 380322761158

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01601, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442343243

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): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 112.270
--

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Розвиток методів комп'ютерного моделювання та розробка програмного забезпечення для вирішення науково-практичних задач із використанням високопродуктивних обчислень на базі Західного регіонального грид-центру і УНГ. ЕТАП 2

Назва роботи англійською:

Development of computer simulation methods and application software for solving scientific and practical problems using high-performance computing based on the Western Regional Grid Center and UNG. Stage 2

Реферат українською:

Розроблено та застосовано алгоритми моделювання низки складних систем для вирішення наукових і науково-практичних задач, а саме: (i) розробка паралельного програмного коду для проведення ефективного крупномасштабного мезоскопічного моделювання методом молекулярної динаміки для опису нових функціональних матеріалів на основі полімерних сполук та наночастинок; (ii) розвиток методики машинного навчання для передбачення афінності зв'язування між протеїнами і малими органічними сполуками в задачах молекулярного докування; (iii) розробка алгоритмів оптимізації безпроводних меш-мереж; (iv) створення ресурсу хмарних обчислень для проведення наукових обчислень із використанням GPU-прискорювачів. Актуальність кожної із запропонованих задач є важливою з точки зору виготовлення нових функціональних композитних матеріалів, при пошуку та розробці ліків, а також при оптимізації архітектури меш-мереж, що використовують технологію Bluetooth. Проект реалізовувався на базі Західного регіонального грид-центру. За результатами роботи було опубліковано одну статтю у високореєтинговому журналі та ще одну подано до друку.

Реферат англійською:

Algorithms for modeling a number of complex systems have been developed and applied to solve scientific and applied research problems, namely: (i) development of a parallel software code for effective large-scale mesoscopic modeling using the molecular dynamics method to describe new functional materials based on polymer compounds and nanoparticles; (ii) development of machine learning techniques for predicting binding affinity between proteins and small organic compounds in molecular docking problems; (iii) development of optimization algorithms for wireless mesh networks; (iv) creating a cloud computing resource for scientific computing using GPU accelerators. The relevance of each of the proposed tasks is important from the point of view of the production of new functional composite materials, in the search and development of drugs, as well as in the optimization of the architecture of mesh networks using Bluetooth technology. The project was realized at the Western Regional Grid Center. Based on the results obtained in this work, one article was published in a high-rank journal and another one was submitted for publication.

Індекс УДК: 53.072;53:004, 577.2, 57:51-76;57.02.001.57, 551.5.001.57, 001.5; 001.57; 001.5:51-7; 001.5:007

Коди тематичних рубрик: 29.03.77, 34.15, 34.03.23, 37.21.77, 43.01.77

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Ільницький Ярослав Миколайович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

IX. Бібліографічний опис

Simončič, M., Lukšič, M., Druchok, M., Machine learning assessment of the binding region as a tool for more efficient computational receptor-ligand docking. // J. Mol. Liq. - 2022 - Vol. 353, P. 118759 (DOI: 10.1016/j.molliq.2022.118759)

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Брик Тарас Михайлович
д. ф.-м. н., 01.04.02

Перелік осіб-виконавців

Іванків Олександр Львович
(к. ф.-м. н.)

Дручок Максим Юрійович
(к. ф.-м. н., с.д., 01.04.24)

Пацаган Тарас Миколайович
(д. ф.-м. н., с.д., 01.04.24)

Фаренюк Олег Ярославович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Пацаган Т.М.

Телефон

+38 (032) 276-06-14

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності



Юрченко Тетяна Анатоліївна