Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0121U111272

Відкрита

Дата реєстрації: 31-05-2021

Статус виконавця: 17 - головний виконавець

1. Загальні відомості

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

КПКВК: 654 1030

Напрям фінансування: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 90.000

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2021	90.000

2. Замовник

Назва організації: Національна академія наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 00019270

Адреса: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01030, Україна

Підпорядкованість:

Телефон: 380442350981

Телефон: 380442262341

Телефон: www.nas.gov.ua

E-mail: prez@nas.gov.ua

WWW: http://nas.gov.ua

3. Виконавець

Назва організації: Фізико-технічний інститут низьких температур імені Б. І. Вєркіна Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 03534601

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: проспект Науки, буд. 47, м. Харків, Харківський р-н., Харківська обл., 61103, Україна

Телефон: 380573402223

E-mail: ilt@ilt.kharkov.ua

4. Співвиконавець

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Науково-технічні розробки хмарної і грід-інфраструктури ФТІНТ НАН України у складі учасників Європейської грід-інфраструктури (EGI) - 2021

Назва роботи (англ)

Scientific and technological developments of the cloud and grid infrastructure of the ILTPE of NAS of Ukraine for the participation in the European Grid Infrastructure (EGI) - 2021

Мета роботи (укр)

Інтеграція пакету gromacs (розрахунки методами молекулярної динаміки) як хмарного сервісу в складі Cloud_UA (доступ через htcondor.bitp.kiev.ua). У ролі тесту буде використана прикладна задача по оптимізації моделювання фізичних властивостей наночастинок, що утворюють низькотемпературні плівки (матриці) інертних газів із вкрапленням біомолекул для нових наноструктур. Це завдання відрізняє активне використання сервісів грід і хмарної інфраструктури. У якості філії розподіленого Північно-східного регіонального грід-центру, а також члена європейської грід-інфраструктури (EGI), ФТІНТ ім. Б.І.Вєркіна НАН України планує виконувати взяті на себе зобов'язання в рамках підписаної з базовим координаційним центром угоди (OLA) по безперебійному наданню необхідних сервісів сайта UA_ILTPE_ARC обслуговуваним віртуальним організаціям українського грід сегмента так само як і локальним користувачам інституту.

Мета роботи (англ)

The purpose of this project is to integrate the gromacs package (calculations by molecular dynamics methods) as a service of the Ukrainian cloud infrastructure Cloud_UA with the OpenStack architecture, which is part of EGI Federated Cloud. For the role of the test, an applied problem will be used to optimize the simulation of the physical properties of nanoparticles, which form low-temperature films (matrixes) of inert gases with the intersection of biomolecules. The essential point is that here not just calculations as a scientific part, but active use of grid and cloud infrastructure. As a subsidiary of the distributed North-Eastern Regional Grid Center, as well as a member of the European Grid Infrastructure (EGI), the B.Verkin ILTPE of the NAS of Ukraine plans to fulfill its obligations under the agreement signed with the base coordination center (OLA) for the uninterrupted provision of necessary services of the site UA_ILTPE_ARC to the serviced virtual organizations of the Ukrainian grid segment, as well as to the local users of the institute.

Пріоритетний напрям науково-технічної діяльності: Інформаційні та комунікаційні технології

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: 48 - прикладна

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Роботи спрямовані на одержання нових знань з метою їх практичного використання.

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	04.2021	12.2021	Остаточний звіт	Науково-технічні розробки хмарної і грід-інфраструктури ФТІНТ НАН України у складі учасників Європейської грід-інфраструктури (EGI)

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 50.39

Індекс УДК: 004.7; 004.722

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Найдюк Юрій Георгійович (д. ф.-м. н., професор)

Керівники роботи:

Білоус Леонід Федорович (к. ф.-м. н.)

Відповідальний за подання документів: Білоус Леонід Федорович (Тел.: +38 (057) 341-08-16)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.