Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0121U111389

Відкрита

Дата реєстрації: 04-06-2021

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: 6541030

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 100.000

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2021	100.000

2. Замовник

Назва організації: Національна академія наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 00019270

Адреса: вул. Володимирська, буд. 54, м. Київ, 01061, Україна

Підпорядкованість:

Телефон: 380442343243

E-mail: prez@nas.gov.ua

WWW: http://nas.gov.ua

3. Виконавець

Назва організації: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05540014

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: вул. Свєнціцького, буд. 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Телефон: 380322761978

Телефон: 380322761158

E-mail: icmp@icmp.lviv.ua

WWW: http://www.icmp.lviv.ua

4. Співвиконавець

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

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

Назва роботи (англ)

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 1

Мета роботи (укр)

Метою проекту є розвиток високопродуктивних алгоритмів та методів комп’ютерного моделювання складних молекулярних та колоїдних систем, що включає в себе розробку програмного забезпечення із застосуванням технологій паралельного програмування (MPI, OpenMP) та машинного навчання. Основна увага у даній роботі буде зосереджена на можливості опису біологічних молекулярних систем та вивченню їхніх властивостей комплексоутворення, адсорбціїї та інших фізико-хімічних властивостей, притаманних такого роду складним об’єктам м’якої речовини. Запропоновані підходи будуть застосовані при вирішенні декількох задач, що є актуальними з точки зору виготовлення нових функціональних матеріалів, при пошуку та розробці ліків, а також при оптимізації та керуванні біохімічними процесами в промисловості або в живих організмах. Проект буде реалізовуватися на базі Західного регіонального грід-центру та на інших грід-сайтах УНГ, які залучені в Програму.

Мета роботи (англ)

The goal of the project is to develop high-performance algorithms and methods of computer modeling for complex molecular and colloidal systems, including software development that with the use of technologies of parallel programming (MPI, OpenMP) and machine learning. The main focus of this work will be on a possibility to describe biological molecular systems and to study their self-assembly, adsorption and other physicochemical properties which are specific for such complex soft matter systems. The proposed approaches will be used to solve several problems that are important from the point of designing and manufacturing new functional materials, of searching and developing drugs, as well as of the optimization and management of biochemical processes in industry or in living organisms. The project will be performed on the basis of the Western Regional Grid Center and other UNG grid sites involved in the Program.

Пріоритетний напрям науково-технічної діяльності: Фундаментальні наукові дослідження з найважливіших проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Вид роботи: 39 - фундаментальна

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: нанотехнології, фармацевтика, розумні матеріали, очистка

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	04.2021	12.2021	Остаточний звіт	Паралелізація за допомогою технології MPI та OpenMP програмного пакету мезоскопічної молекулярної динаміки для моделювання комплексоутворення, фазової поведінки та адсорбції складних біологічних макромолекул. 2) Розробка та паралелізація (з використанням OpenMP) програми Монте-Карло для моделювання систем малих молекул в замороженій матриці пористого середовища із використанням високопродуктивних обчислень на кластері та в Грід. 3) Розвиток та застосування методів машинного навчання до задачі молекулярного докування.

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

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

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

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Брик Тарас Михайлович (д. ф.-м. н., с.н.с.)

Керівники роботи:

Ільницький Ярослав Миколайович (д. ф.-м. н., старший науковий співробітник)

Відповідальний за подання документів: Пацаган Тарас Миколайович (Тел.: +38 (032) 276-06-14)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.