

Реєстраційна картка НДДКР

Державний реєстраційний номер: 0122U002442

Відкрита

Дата реєстрації: 09-05-2022

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: 2201380

Напрямок фінансування: 2.5 - програми і проекти у сфері міжнародного науково-технічного співробітництва

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Загальний обсяг фінансування (тис. грн.): 120.000

У тому числі по роках (тис. грн.):

Рік	Фінансування
2022	120.000

2. Замовник

Назва організації: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 38621185

Адреса: проспект Перемоги, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380444813221

E-mail: mon@mon.gov.ua

WWW: <https://mon.gov.ua/ua>

3. Виконавець

Назва організації: Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05540014

Підпорядкованість: Національна академія наук України

Адреса: вул. Свенціцького, 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)

Нові застосування машинного навчання в прогнозуванні незвичних властивостей матеріалів

Назва роботи (англ)

New applications of machine learning in predicting unusual material properties

Мета роботи (укр)

Проект має за мету застосування нового підходу в атомістичному комп'ютерному моделюванні неупорядкованих матеріалів (металічних розплавів, скловидних систем, складних молекулярних сполук), які традиційно важко або й неможливо описати простими міжатомними потенціалами взаємодії. Новий підхід базується на принципі "машинного навчання" для встановлення багатопараметричної відповідності між миттєвими структурами атомів та поверхнею потенціальної енергії, яка потім використовується для високоточного передбачення руху атомів у системі. На даний час підхід "машинного навчання" практично не застосовується в Україні. Ми пропонуємо нові застосування "машинного навчання" до вивчення динамічних явищ у неупорядкованих системах, що практично не робилось дотепер в цій області науки, зокрема для проблем поширення звуку, теплопровідності, вихрових процесів у складних розплавах, рідинах та скловидних системах.

Мета роботи (англ)

The project aims at application of a new approach in atomistic computer simulations of disordered materials (metallic melts, glass-forming systems, complex molecular liquids), which are difficult or impossible to describe by simple interatomic interaction potentials. The new approach is based on principle of "machine learning" for estimation of many-parameter correspondence between instantaneous atomic configurations and potential energy surface, which is used then for precise prediction of atoms in the system. By the date the approach of "machine learning" practically is not used in Ukraine. We plan new applications of the "machine learning" in the studies of dynamic phenomena in disordered systems, that practically were not made by the date in this field of science, in particular, for the problems of sound propagation, heat transport, vorticity processes in complex melts, liquids and glasses.

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: дослідження в галузі природничих наук

Експерти

6. Етапи виконання

Номер	Початок	Закінчення	Звітний документ	Назва етапу
1	05.2022	08.2022	Проміжний звіт	Дослідження колективної динаміки та збуджень в розплаві Sb
2	09.2022	12.2022	Остаточний звіт	Першопринципне моделювання та машинне навчання в дослідженнях релаксаційних процесів у металічних розплавах

7. Індекс УДК тематичних рубрик НТІ

Коди тематичних рубрик НТІ: 50.07.03

Індекс УДК: 004.3-185.4; 004.7-185.4

8. Заключні відомості

Керівник організації:

Брик Тарас Михайлович (д. ф.-м. н., старший науковий співробітник)

Керівники роботи:

Брик Тарас Михайлович (д. ф.-м. н., старший науковий співробітник)

Відповідальний за подання документів: Бзовська І.С. (Тел.: +38 (032) 276-77-86)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності
УкрІНТЕІ



Юрченко Т.А.