

- *Комп'ютерне моделювання фізичних явищ і процесів у конденсованих системах: стан та перспективи розвитку (доповідач — доктор фізико-математичних наук Т.М. Брик)*
- *Динаміка швидкохідних суден: світові тенденції та перспективи (доповідач — член-кореспондент НАН України Г.О. Воропаєв)*
- *Про нагородження відзнаками НАН України та Почесними грамотами НАН України і Центрального комітету профспілки працівників НАН України (доповідач — академік НАН України В.Л. Богданов)*
- *Кадрові та поточні питання*

ІЗ ЗАЛИ ЗАСІДАНЬ ПРЕЗИДІЇ НАН УКРАЇНИ 19 квітня 2023 року

Засідання Президії НАН України 19 квітня 2023 р. відбулося під головуванням президента НАН України академіка НАН України А.Г. Загороднього.

Члени Президії НАН України заслухали доповідь директора Інституту фізики конденсованих систем НАН України доктора фізико-математичних наук **Тараса Михайловича Брика** про стан та перспективи розвитку напрямку комп'ютерного моделювання фізичних явищ і процесів у конденсованих системах (докладніше див. на с. 29).

Від часу створення першого найпростішого методу комп'ютерного моделювання — методу Монте-Карло відбулися революційні зміни, пов'язані з розробленням принципово нових алгоритмів, завдяки яким сьогодні можна моделювати реальні фізичні процеси з використанням мільярдів частинок. Таке моделювання, що, по суті, є високоточним комп'ютерним експериментом, ґрунтується на законах статистичної фізики і дає можливість однозначно задавати та контролювати основні термодинамічні параметри досліджуваної системи. За допомогою сучасних методик комп'ютерного моделювання можна вивчати фундаментальні проблеми, які мають велике технологічне значення, зокрема мікроскопічні механізми згортання протеїнів, молекулярні процеси, що спричиняють рак або хворобу Альцгеймера, мікроскопічну структуру та іонний транспорт через біологічні мембрани, структуру й динаміку нанокомпозитів тощо.

Сьогодні у провідних світових дослідницьких центрах спостерігається стрімке поширення застосувань передових методик комп'ютерного моделювання у фізиці, хімії, біології, матеріалознавстві та нанотехнологіях.

Новим важливим напрямом досліджень є першопринципне (*ab initio*) комп'ютерне моделювання фізико-хімічних процесів на електронному рівні. Першопринципним його називають



Виступ доктора фізико-математичних наук Тараса Михайловича Брика

тому, що електронна підсистема, яка відповідає за утворення хімічних зв'язків у речовині, розраховується на квантовому рівні без жодних модельних припущень. Отриманий у такий спосіб розподіл електронної густини визначає сили, що діють на іони, і, відповідно, рух атомарних частинок. Важливою перевагою першопринципного комп'ютерного моделювання є можливість досліджувати різноманітні системи в умовах, для яких реальні експерименти практично неможливі. Зокрема, основні фундаментальні знання про будову, атомний склад, температуру, швидкість поширення звуку в ядрі та зовнішній оболонці ядра Землі походять з *ab initio* комп'ютерного моделювання кристалічного та рідкого заліза і його сплавів з легкими елементами за надвисоких (до 400 ГПа) тисків.

Дослідження з використанням першопринципного комп'ютерного моделювання спрямовані на пошук нових матеріалів, зокрема на розшифрування структури металічного водню, що утворюється за високих тисків, встановлення особливостей гідратних оболонок складних молекулярних систем та з'ясування ролі електронної підсистеми у динаміці рідин.

В Україні останніми десятиліттями методи атомістичного комп'ютерного моделювання застосовують у багатьох установах НАН України та інших наукових організаціях. Тому розвиток досліджень за цим напрямом потребує посилення координації в межах країни та розширення співпраці з іноземними вченими.

Комп'ютерне моделювання критично залежить від розвитку обчислювальної інфраструктури. Першопринципне моделювання з великою кількістю електронів вимагає потужних суперкомп'ютерів. Частково потреби науковців в обчислювальних ресурсах задовольнялися кластерами Українського національного гріду, які активно нарощували свою потужність до початку широкомасштабного російського вторгнення у 2022 р. Тому у повоєнний період, коли ці ресурси будуть дуже затребуваними, необхідно забезпечити подальший розвиток Українського національного гріду.

Перспективи розвитку комп'ютерного моделювання пов'язані з машинним навчанням — підходом, який використовує схему нейронної мережі. В Інституті фізики конденсованих систем НАН України машинне навчання застосовують для передбачення стикування білків (рецепторів) і малих органічних сполук (лігандів), динамічних властивостей конденсованих систем тощо.

Інститут є визнаним в Україні та за її межами центром досліджень з комп'ютерного моделювання процесів у конденсованих системах. За цією тематикою протягом останніх років виконано низку міжнародних проєктів, зокрема проєкт Рамкової програми ЄС «Горизонт-2020», освітній проєкт «Еразмус+», численні міжнародні проєкти двостороннього співробітництва. Авторитет львівської школи статистичної фізики було продемонстровано на конференції *Ulam Computer Simulation Workshop* (Львів, 2017), на якій з доповідями виступили провідні світові експерти з комп'ютерного моделювання, зокрема Даан Френкель (Кембридж, Велика Британія), Джованні Чіккотті (Рим, Італія) та ін. У відомий пакет програм комп'ютерного моделювання AMBER включено розроблений в Інституті оригінальний алгоритм пришвидшення сольватаційної динаміки згортання протейнів.

Значну увагу в Інституті приділяють питанням підготовки висококваліфікованих кадрів для роботи з потужними кластерними системами та суперкомп'ютерами, активно залучають студентську молодь.

В обговоренні доповіді взяли участь завідувач відділу теорії конденсованих середовищ і ядерної матерії Інституту теоретичної фізики ім. О.І. Ахієзера ННЦ «Харківський фізико-технічний інститут» академік НАН України О.С. Бакай; головний науковий співробітник Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України член-кореспондент НАН України В.М. Антонов; завідувач відділу білкової інженерії та біоінформатики Інституту молекулярної біології і генетики НАН України член-кореспондент НАН України О.І. Корнелюк; радник при Президії НАН України академік НАН України І.Р. Юхновський; академік-секретар Відділення фізики і астрономії НАН України академік НАН України В.М. Локтев.

* * *

Далі члени Президії НАН України заслухали доповідь директора Інституту гідромеханіки НАН України члена-кореспондента НАН України **Геннадія Олександровича Воропаєва** про світові тенденції та перспективи розвитку напряму з вивчення динаміки швидкохідних суден (докладніше див. на с. 37).

Дослідження в цій галузі прикладної гідромеханіки концентруються на вивченні взаємодії корпусів суден з нерегулярними хвилями і розробленні методів зменшення опору їх руху. Для цього використовують різні ідеї, зокрема організацію руху в режимах глісування та суперкавітації, створення повітряної подушки, використання багатокорпусних суден та суден з малою площею ватерлінії для зменшення хвильового опору.

Дослідження, що інтенсивно розвиваються в Інституті гідромеханіки НАН України, є підґрунтям для вирішення фундаментальних та прикладних проблем вивчення закономірностей обтікання об'єктів, що рухаються, статичної стійкості суден, розроблення гідродинамічної теорії руху суден, теорії підводного крила, розвитку теорії та створення методів розрахунку головних параметрів гідротранспорту, аеро- та гідродинаміки швидкохідних суден з динамічними принципами підтримки (глісерів, суден на підводних крилах, екранопланів тощо).



Виступ члена-кореспондента НАН України Геннадія Олександровича Воропаєва

Інститут має експериментальну базу, зокрема два найбільші в Україні дослідні басейни, які входять до складу «Експериментального комплексу для гідродинамічних досліджень Інституту гідромеханіки НАН України», що має статус національного надбання, і кадровий потенціал для ефективного проведення теоретичних та експериментальних досліджень гідродинаміки швидкохідних суден.

За підсумками систематизованих експериментальних досліджень у дослідних басейнах Інституту запропоновано оптимальну трикорпусну гідродинамічну схему (тримаран) та схему частково розвантаженого за допомогою повітряної подушки катамарана. Зокрема, результати досліджень показали, що для відкритого моря оптимальним варіантом з точки зору підвищення морехідності судна є тримаран. Основну частку водотоннажності в ньому зосереджено в центральному корпусі, а бічні корпуси мають вигляд невеликих поплавків (аутригерів). Для мілководдя та прибережної зони оптимальним є частково розвантажений за допомогою повітряної подушки катамаран. При цьому ступінь оптимального розвантаження визначається умовами плавання. За результатами цих досліджень у ДП «Дослідно-проектний центр кораблебудування» (м. Миколаїв) було розроблено проекти таких суден.

Результати, отримані з використанням експериментального комплексу для гідродина-



Виступ члена-кореспондента НАН України Сергія Вікторовича Дзядевича

мічних досліджень Інституту, регулярно висвітлюються на міжнародних та вітчизняних науково-технічних конференціях. Зокрема, в рамках VIII Міжнародної науково-практичної конференції «Комп'ютерна гідромеханіка», що відбулася в Інституті гідромеханіки НАН України у 2022 р., було організовано спеціальну секцію «Комп'ютерні методи обробки експерименту», на якій представлено результати науково-дослідних робіт, проведених у дослідних басейнах. Здобутки Інституту в галузі гідродинаміки суден опубліковано в провідних фахових наукових виданнях.

* * *

Серед поточних питань члени Президії НАН України заслухали й обговорили доповідь заступника голови наукової ради цільової програми наукових досліджень НАН України «Розумні» сенсорні прилади нового покоління на основі сучасних матеріалів та технологій» члена-кореспондента НАН України **Сергія Вікторовича Дзядевича**.

Протягом 2018–2022 рр. за Програмою виконувалося 28 наукових проєктів із залученням 17 установ шести відділень НАН України, а саме: Відділення хімії; Відділення біохімії, фізіології і молекулярної біології; Відділення фізики і астрономії; Відділення фізико-технічних проблем енергетики; Відділення інформатики; Відділення фізико-технічних проблем матеріалознавства.

Під час виконання Програми вирішено низку прикладних проблем, важливих для медицини, охорони довкілля та харчової промисловості. Зокрема, підготовлено до серійного виробництва бездротові мережі «розумних» мультисенсорів та біосенсорних приладів для експрес-діагностики стану виноградних і плодючих культур та контролю процесу виробництва вина.

Проведено дослідну експлуатацію портативного цифрового електрокардіографа на кафедрі анестезіології та інтенсивної терапії Національного університету охорони здоров'я України імені П.Л. Шупика МОЗ України та в кількох військових медичних закладах. Прилад впроваджено у виробництво на НВП «Метекол» (м. Ніжин).

Розроблено і створено прототип хемосенсорної системи, придатної для аналізу L- та D-стереоізомерних форм фізіологічно важливих амінокислот, пептидів, низькомолекулярних протеїнів у біологічних середовищах для експрес-діагностики ранніх стадій генетичних, онкологічних та нейродегенеративних захворювань, таких як хвороба Альцгеймера.

Виготовлено експериментальні зразки:

- кондуктометричного ферментного аналізатора для визначення концентрації аргініну з необхідним програмним та метрологічним забезпеченням, який перевірено на реальних зразках комерційних та одержаних прямим віджимом соків і засобах гігієни;

- кардіомагнітного сканера для діагностики хвороб серця «Кардіомагскан», що проходить дослідну експлуатацію в Головному військовому клінічному госпіталі;

- портативного приладу-сигналізатора загальної токсичності водних розчинів різного походження, що працює на основі масиву ферментних рН-чутливих транзисторів, апробацію якого проведено на об'єктах довкілля в польових умовах;

- портативного приладу на основі ферментних потенціометричних біосенсорів для аналізу мікотоксинів з необхідним програмним та метрологічним забезпеченням, який апробовано на зразках сільськогосподарських культур;

- фотоплетизмографа з пневматичним пристроєм для перетискання судин «Гемодин» для діагностики мікроциркулярного кровообігу, який перевірено в кількох військових медичних закладах;

- портативного мультисенсорного приладу для визначення основних метаболітів організму людини з необхідним програмним та метрологічним забезпеченням, який перевірено на зразках крові здорових людей та хворих на ниркову недостатність.

Для низки експериментальних зразків спільно з ДП «Укрметргестстандарт» виконано їхнє метрологічне забезпечення, розроблено технічну документацію, проєкти технічних умов на виробництво та експлуатаційні макети, відпрацьовано методики атестування приладів щодо деяких найважливіших характеристик, складено протоколи роботи лабораторних макетів сенсорних систем.

Більшість проєктів було виконано спільно установами різних відділень НАН України. Результати досліджень висвітлено у більш як 340 публікаціях, зокрема у таких високореєтингових журналах, як *Biosensors and Bioelectronics*, *Sensors and Actuators B*, *Analytica Chimica Acta*, *Talanta*, *Electroanalysis* та ін., представлено на понад 300 наукових форумах різного рівня; подано заявки або вже отримано близько 90 патентів України.

Президія НАН України зазначила, що завдання Програми виконано в повному обсязі, що дозволило вирішити важливі питання створення сенсорних приладів нового покоління, їхньої апробації та метрологічної атестації і є вкрай необхідним для подальшого впровадження біосенсорних технологій в аналітичну практику.

* * *

Члени Президії НАН України розглянули також низку поточних питань:

- обговорили і схвалили проєкт звітної доповіді на сесії Загальних зборів НАН України 27 квітня 2023 р. «Діяльність Національної академії наук України у звітний період. Підсумки, проблеми, завдання»;

- ухвалили постанову про подовження строку повноважень керівників низки наукових установ НАН України до припинення або скасування воєнного стану в Україні;

- затвердили програму спільної діяльності Національної академії наук України та Національної академії медичних наук України на 2023–2025 рр.;

- затвердили програму спільної діяльності Національної академії наук України та Національної академії аграрних наук України на 2023–2025 рр.;

- затвердили програму спільної діяльності Національної академії наук України та Національної академії правових наук України на 2023–2025 рр.;

- затвердили програму спільної діяльності Національної академії наук України та Національної академії педагогічних наук України на 2023–2025 рр.;

- затвердили програму спільної діяльності Національної академії наук України та Національної академії мистецтв України на 2023–2025 рр.;

- оголосили конкурс на заміщення посади директора Одеського археологічного музею НАН України;

- погодили рішення Комітету з присудження премії НАН України «За популяризацію науки» від 11 квітня 2023 р. про присудження цієї премії за 2022 р.;

- внесли зміни до Положення про премію НАН України «За популяризацію науки»;

- затвердили новий склад редакційної колегії науково-популярного журналу «Світогляд».

Затверджено:

- доктора фізико-математичних наук **Давидовського Володимира Володимировича** на посаді заступника директора з наукової роботи Інституту ядерних досліджень НАН України;

- доктора філософії **Голкову Ольгу Сергіївну** на посаді вченого секретаря Державної установи «Інститут ринку і економіко-екологічних досліджень НАН України».

Погоджено призначення:

- доктора технічних наук **Циганка Віталія Володимировича** на посаду завідувача відділу інтелектуаль-

них технологій прийняття рішень Інституту проблем реєстрації інформації НАН України;

- доктора технічних наук **Васяніна Володимира Олександровича** на посаду завідувача відділу прикладної інформатики Інституту телекомунікацій і глобального інформаційного простору НАН України;

- доктора технічних наук **Калоха Юрія Івановича** на посаду головного наукового співробітника Інституту телекомунікацій і глобального інформаційного простору НАН України;

- доктора фізико-математичних наук **Сенченкова Ігоря Костянтиновича** на посаду головного наукового співробітника Інституту механіки ім. С.П. Тимошенка НАН України;

- доктора геологічних наук **Ремезової Олени Олександрівни** на посаду завідувача відділу геології корисних копалин Інституту геологічних наук НАН України;

- кандидата фізико-математичних наук **Драпея Сергія Станіславовича** на посаду завідувача відділу Навчального центру фізичного захисту, обліку та контролю ядерного матеріалу Інституту ядерних досліджень НАН України;

- кандидата фізико-математичних наук **Кобичева Владислава Валерійовича** на посаду завідувача відділу фізики лептонів Інституту ядерних досліджень НАН України.

Відзнакою НАН України «За наукові досягнення» нагороджено:

- провідного наукового співробітника Фізико-механічного інституту імені Г.В. Карпенка НАН України члена-кореспондента НАН України **Муравського Леоніда Ігоровича** за багатолітню плідну працю вченого і педагога, вагомий творчий здобутки та значний особистий внесок у розроблення новітніх методів оптичної метрології для вирішення проблем технічної діагностики та неруйнівного контролю.

Відзнакою НАН України «За професійні здобутки» нагороджено:

- провідного наукового співробітника Інституту математики НАН України доктора фізико-математичних наук **Сисака Ярослава Прокоповича** за багатолітню плідну наукову працю, високі професійні здобутки та вагомий особистий внесок у розвиток математичних досліджень теорії груп;

- виконувача обов'язків директора Інституту фізики напівпровідників імені В.Є. Лашкарьова НАН України доктора фізико-математичних наук, професора **Мельника Віктора Павловича** за багатолітню плідну працю вченого, педагога і організатора наукових досліджень у галузі фізики напівпровідників та вагомий професійний творчий здобутки;

- головного наукового співробітника Державної установи «Науковий центр аерокосмічних досліджень Землі Інституту геологічних наук НАН України» доктора технічних наук **Якимчука Владислава Григоровича** за багатолітню плідну працю вченого у галузі дистанційних аерокосмічних досліджень та вагомий творчий здобутки;

- директора Державної установи «Науковий гідрофізичний центр НАН України» члена-кореспондента НАН України **Щипцова Олександра Анатолійовича** за багатолітню плідну працю вченого-океанографа, високі професійні здобутки в організації діяльності Центру та особистий внесок у розвиток досліджень історії морської справи України.

Відзнакою НАН України «Талант, натхнення, праця» нагороджено:

- молодшого наукового співробітника Інституту електродинаміки НАН України доктора філософії **Березниченко Вікторію Олександрівну** за плідну творчу працю та особистий внесок у практичну реалізацію технічних засобів контролю параметрів енергетичного обладнання України;

- провідного наукового співробітника Інституту технічної теплофізики НАН України доктора технічних наук **Дубовкіну Ірину Олександрівну** за плідну наукову працю, активну винахідницьку діяльність та особистий внесок у розвиток наукових досліджень у галузі енергетики;

- наукового співробітника Інституту відновлюваної енергетики НАН України кандидата технічних наук **Лисака Олега Віталійовича** за наполегливу творчу працю та особисті здобутки у розвитку наукових досліджень у галузі енергетики;

- наукового співробітника Інституту проблем машинобудування ім. А.М. Підгорного НАН України кандидата технічних наук **Чуніхіна Костянтина Вадимовича** за наполегливу творчу працю, високу публікаційну активність у міжнародних виданнях та особисті здобутки у розвитку наукових досліджень у галузі енергетики;

- старшого наукового співробітника Інституту проблем моделювання в енергетиці ім. Г.Є. Пухова НАН України кандидата технічних наук **Шкарупила Вадима Вікторовича** за наполегливу творчу працю, високу публікаційну активність та особистий внесок у розвиток наукових досліджень у галузі енергетики.

Подякою НАН України відзначено:

- провідного наукового співробітника Інституту електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України доктора технічних наук **Костіна Валерія Анатолійовича** за багаторічну плідну наукову працю та вагомий особистий здобутки в розвитку наукових досліджень у галузі зварювального матеріалознавства;

- провідного наукового співробітника Навчального центру фізичного захисту, обліку та контролю ядерного матеріалу Інституту ядерних досліджень НАН України кандидата фізико-математичних наук **Гаврилюка Віктора Івановича** за багаторічну плідну невтомну наукову, науково-організаційну і педагогічну працю, високі професійні здобутки та вагомий особистий внесок в забезпечення діяльності у сфері використання ядерної енергії;

- старшого наукового співробітника Інституту теплоенергетичних технологій НАН України кандидата технічних наук **Безценного Ігоря Валентиновича** за наполегливу творчу працю, високу публікаційну активність та особисті здобутки у розвитку наукових досліджень у галузі енергетики;

- старшого наукового співробітника Інституту газу НАН України кандидата технічних наук **Марасіна Олексія Володимировича** за наполегливу творчу працю, високу публікаційну активність у міжнародних виданнях та особистий внесок у розвиток наукових досліджень у галузі енергетики;

- наукового співробітника Інституту електродинаміки НАН України кандидата технічних наук **Маруню Юлію Василівну** за наполегливу творчу працю, високу публікаційну активність та особисті здобутки у розвитку наукових досліджень у галузі енергетики;

- наукового співробітника Інституту загальної енергетики НАН України доктора філософії **Свердлоу Анастасію Дмитрівну** за наполегливу творчу працю, високу публікаційну активність та особисті здобутки у розвитку наукових досліджень у галузі енергетики;

- завідувача сектору Інституту проблем безпеки атомних електростанцій НАН України доктора технічних наук **Сімейка Костянтина Віталійовича** за наполегливу творчу працю, високу публікаційну активність та особисті здобутки в розвитку наукових досліджень у галузі енергетики.

*За матеріалами засідання
підготувала О.О. Мележик*