

ЗАТВЕРДЖЕНО

**Наказ ректора Київського національного
університету імені Тараса Шевченка**

2026 р. № _____

Стратегія розвитку

Центру колективного користування науковим обладнанням Київського національного університету імені Тараса Шевченка

«Центр високопродуктивних обчислень і машинного навчання»

Центр колективного користування науковим обладнанням (ЦККНО) «Центр високопродуктивних обчислень і машинного навчання» є сучасною науково-дослідною платформою, яка забезпечує доступ до високопродуктивних комп'ютерних обчислень для проведення досліджень у галузях фізики, хімії, біології, квантової хімії, хемоінформатики, математики, машинного навчання, та інших галузях науки. Основною місією центру є створення сприятливих умов для науковців, студентів, аспірантів для виконання завдань, які вимагають значних комп'ютерних обчислювальних ресурсів, а також забезпечення освітнього процесу на найвищому рівні.

Діяльність Центру передбачає модернізацію обчислювальної бази Університету та раціональне використання унікального, вартісного комп'ютерного обладнання як вітчизняного, так і імпортного виробництва. Це дозволяє максимально ефективно використовувати наукові ресурси, задовольняючи потреби дослідницької спільноти України. Центр прагне сприяти підвищенню якості освітнього процесу та наукових досліджень, а також пропонує свої послуги на договірній основі для зовнішніх замовників, забезпечуючи фінансову стійкість та розвиток інфраструктури.

Завдання ЦККНО визначаються Постановою Кабінету міністрів України від 21 червня 2022 року № 703.

Пріоритетним напрямком роботи ЦККНО є проведення наукових досліджень в галузі комп'ютерної фізики, хімії, хемоінформатики, біології, фармакології та викладання студентам і докторантам навчальних дисциплін, що вимагають залучення значних розрахункових ресурсів. Це дозволить проводити виконання високоякісних досліджень, позитивно вплине на якість публікацій в міжнародних наукових виданнях, освітній рівень та світогляд студентів та докторантів, а також конкурентоздатність науковців КНУТШ при подачі заявок на фінансування в рамках спільних європейських та міжнародних наукових проєктів та грантів.

Стратегічними напрямками, які визначають мету і завдання ЦККНО є

1. Науково-дослідна діяльність та інновації

Центр високопродуктивних обчислень та машинного навчання націлений на об'єднанні знань, досвіду та ресурсів для вирішення актуальних задач сучасної науки, де високопродуктивні комп'ютерні розрахунки відіграють вирішальну роль. Концепція науково-дослідної діяльності Центру базується на принципі відкритості всім науковцям, які потребують потужних обчислень для вирішення актуальних задач сучасної науки. Потенційними споживачами послуг Центру в Україні є факультети університетів та інститути НАН України фізичного, хімічного, біохімічного, медичного, фармацевтичного та біологічного профілю, як науковці, так і студенти. Центр є одним з найпотужніших ресурсів України і наближається до світових ресурсів за своєю продуктивністю, що дає можливість виконувати обчислення на високому науково-технічному рівні.

2. Освітня діяльність та підготовка кадрів

Наявність Центру високопродуктивних обчислень і машинного навчання дозволить готувати фахівців-теоретиків міжнародного рівня в Україні без потреби їх виїзду за кордон. Завдяки наявності Центру КНУТШ та його партнерів матимуть змогу готувати власних, кваліфікованих спеціалістів з комп'ютерних методів в хімії, фізиці та біології.

Планується застосування ресурсів Центру у навчальному процесі університету для викладання таких навчальних курсів: Паралельні обчислення, Фізика біомолекул, Сучасні комп'ютерні технології у медицині, Грид-системи та технології, Математичні методи обробки діагностичних даних, Комп'ютерна розробка лікарських препаратів, Структурна біологія та моделювання, Структурна біоінформатика, Хемоінформатика, Обчислювальна біологія.

3. Розвиток дослідницької інфраструктури

Центр високопродуктивних обчислень та машинного навчання буде інтегровано в структуру Інформаційно-обчислювального центру КНУ імені Тараса Шевченка. Цей центр складається з декількох підрозділів, укомплектованих висококваліфікованими інженерами в галузі ІТ. Обслуговування та експлуатація високопродуктивних обчислювальних систем, комп'ютерних мереж та систем зберігання даних вимагають великого спектру знань та умінь. Центр гармонійно впишеться в існуючу кадрову та технічну інфраструктуру Університету, що забезпечить його подальший сталий розвиток.

На комп'ютерному обладнанні Центру буде встановлено широкий спектр програмного забезпечення, що включатиме пакети для квантово-хімічних обчислень,

молекулярного моделювання чи розрахунків в континуальному наближенні. Це дасть можливість потенційним користувачам виконувати симуляції об'єктів будь-якого рівня – від окремих атомів, наночастинок, біомолекул - до макроскопічних матеріалів, технічних конструкцій та складних систем.

Для забезпечення справедливого розподілу ресурсів між проєктами та користувачами буде розроблена спеціалізована система планування та вдосконалене програмне забезпечення (веб-платформа доступу до ресурсів).

4. Міжнародне співробітництво та інтеграція

Центр високопродуктивних обчислень та машинного навчання націлюється на залучення до широкого кола дослідницьких проєктів, які виконуватимуться міжнародними командами дослідників. Виконання таких проєктів буде здійснюватися в рамках Європейських програм (Горизонт Європа) та американських програм (Національний Інститут здоров'я). Передбачається використання потужностей Центру, і відповідно його фінансування за кошти ЄС, в межах Європейських цифрових інноваційних хабів 2024-2027 рр. Також планується інтеграція VIRGO.UA у платформу Multi-Messenger Online Data Analysis (MMODA, <https://www.astro.unige.ch/mmoda/>) на базі Центру та отримання доступу до European Open Science Cloud (EOSC) чи його підструктур. VIRGO.UA виступатиме у ролі української сполучної ланки для MMODA.

5. Партнерство з промисловістю та комерціалізація досліджень

Діяльність центру також націлена на стимулювання інновацій. Потенційне співробітництво з комерційними установами відбуватиметься в рамках договорів про виконання науково-технічних досліджень. В цьому разі замовнику доведеться придбати комерційні ліцензії на відповідні пакети програм. Наявність розрахункового кластера дозволить партнерам з бізнесу використовувати комп'ютерний розрахунок як елемент дослідження в складних, комплексних міждисциплінарних проєктах.

6. Популяризація науки та підвищення репутації університету

Стратегія розповсюдження результатів роботи Центру та популяризації науки базується на відкритості наукової інформації, отриманої користувачами Центру, та належному захисті прав інтелектуальної власності. Наукові результати виконання завдань за участі Центру будуть висвітленими в публікаціях у фахових високореєтингових журналах. Вся неконфіденційна інформація, по можливості, буде опублікована у відкритих наукових журналах (Open Access) для забезпечення безбар'єрного поширення результатів. Планується участь у міжнародних наукових конференціях з медичної хімії, хемоінформатики, теоретичної фізики, штучного інтелекту та комп'ютерної лінгвістики з

публікаціями, виступами і демонстрацією отриманих результатів. Головним інформаційним хабом розповсюдження знань серед державних та приватних установ, а також серед широкої громадськості, буде веб-сайт Центру. Активність в соціальних мережах (Твіттер-Х, Фейсбук, Youtube) також буде націлюватися на цю ж аудиторію. Інформація на веб-сайті Центру та в соціальних мережах буде викладатися в науково-популярній формі, зрозумілій широкій громадськості. На професійну аудиторію націлюватиметься активність у мережі LinkedIn та на платформі Open Science Framework (OSF). Ідеї, плани експериментів, дані досліджень та звіти будуть надаватися без будь-яких перешкод дослідникам, які працюватимуть у Центрі, це сприятиме досягненню цілей проєктів та репутації Центру і загалом університету.

7. Фінансова стійкість та ефективність управління

Забезпечення стабільного фінансування шляхом залучення грантів, комерційної діяльності та співфінансування. Успішне виконання проєктів і надання послуг дозволить розвивати та утримувати обчислювальні ресурси власними силами.

Частина студентів, як передбачається, будуть здобувати освіту в різних галузях на умовах платного навчання на базі Центру, що також буде непрямим джерелом підтримки кластера.