

ДОВІДКА

**про творчий внесок Савицького Олександра Вячеславовича
до циклу наукових праць**

“СТВОРЕННЯ ВИСОКОПРОДУКТИВНОЇ ІНФРАСТРУКТУРИ В ГРІД ДЛЯ ДОСЛІДЖЕНЬ КОНФОРМАЦІЙНИХ ЗМІН БІОПОЛІМЕРІВ”

на здобуття премії Президента України для молодих вчених 2018 року

Савицький Олександр Вячеславович займається науковою діяльністю в Інституті молекулярної біології і генетики (ІМБіГ) НАН України з 2008 р. За цей проміжок часу він захистив дисертаційну роботу кандидата біологічних наук за спеціальністю 03.00.03 – молекулярна біологія. За час роботи над циклом наукових праць він показав себе як наполегливий, цілеспрямований дослідник із міждисциплінарним підходом.

До результатів, які отримані Савицький О.В. та викладені у циклі робіт, відносяться:

- отримання просторової структури повнорозмірної тирозил-тРНК синтетази та її мутантних форм (асоційованих із нейропатією DI-CMTС) методом комп’ютерного моделювання, побудова структурних комплексів із субстратами методом молекулярного докінгу із застосуванням високопродуктивних обчислень;
- розбудова кластера ІМБіГ НАНУ (спільно з авторами циклу робіт) та створення віртуальної лабораторії MolDynGrid (концепція автоматизації розрахунків, залучення кластерів УНГ та ЕГІ), що дозволило ефективно використовувати обчислювальні ресурси в грід для розрахунків молекулярної динаміки;
- дослідження конформаційної рухливості тирозил-тРНК синтетази та її комплексів із субстратами, а також запропоновано молекулярний механізм впливу мутацій, асоційованих із захворюванням Шарко-Марі-Туса (DI-CMTС).

Із 2009 року Олександр Вячеславович учасник 7 наукових тем і проектів за даною тематикою:

- “Дослідження локальних конформаційних змін та формування метастабільних структурних елементів в тирозил-тРНК синтетазах прокаріотів та евкаріотів” (2013–2017 pp., держ. реєстр. номер – 0112U003747);
- “Створення розподіленої бази даних молекулярної динаміки та ЯМР у віртуальній лабораторії MolDynGrid” (2017 р., держ. реєстр. номер – 0117U006668);
- “Розробка та впровадження Cloud-технологій в роботу грід-сервісів віртуальної лабораторії MolDynGrid” (2014–2016 pp., держ. реєстр. номер – 0114U004667);

- “Розробка та адаптація програмного забезпечення кластеру СКІТ-4 для вирішення задач комп’ютерної структурної біології” (2013–2015 рр., держ. реєстр. номер – 0113U005318);
- “Динамічні аспекти функціонування евкаріотної тирозил-тРНК синтетази та вивчення впливу мутацій на процес аміноацилювання тРНК та виникнення нейродегенеративних захворювань” (2008–2012 рр., держ. реєстр. номер 0107V004938);
- “Розробка та впровадження комп’ютерних сервісів для аналізу молекулярної динаміки білків в віртуальній лабораторії MolDynGrid та її інтеграція в європейську грід-інфраструктуру” (2010–2013 рр., держ. реєстр. номер – 0110U005745);
- “Розвинення віртуальної лабораторії MolDynGrid як частини Української академічної грід-інфраструктури” (2009 р., держ. реєстр. номер – 01090004889).

Результати циклу робіт Савицького О.В. доповідалися і обговорювалися на 31 українських і міжнародних семінарах, школах і конференціях, зокрема в Греції (2013; 2016; 2017), Іспанії (2010; 2017), Італії (2009; 2011; 2015), Франції (2014), Швеції (2012; 2013), Португалії (2013), Польщі (2012; 2013; 2014), Чеській Республіці (2011).

Творчий внесок Савицького О.В. до циклу наукових праць **“СТВОРЕННЯ ВИСОКОПРОДУКТИВНОЇ ІНФРАСТРУКТУРИ В ГРІД ДЛЯ ДОСЛДЖЕНЬ КОНФОРМАЦІЙНИХ ЗМІН БІОПОЛІМЕРІВ”** складає 40% роботи.

При виконанні цієї роботи Савицьким О.В. опубліковано 32 публікації, серед яких 9 статей, зокрема 7 з них у міжнародних журналах (Journal of Molecular Recognition “IF: 3,31²⁰¹³”, Journal of Biomolecular Structure & Dynamics “IF: 2,9²⁰¹⁶”, Biophysical Chemistry “IF: 2,276²⁰¹¹” та інш.), що містяться в базі даних SCOPUS і тези 23 доповідей. Загальна кількість посилань на публікації складає 91 (згідно з базою даних Google Scholar), h-індекс – 6 та 46 (згідно з базою даних SCOPUS), h-індекс – 4.

к.б.н., н.с. відділу
білкової інженерії та біоінформатики
Інституту молекулярної біології
та генетики НАН України

Савицький О.В.

Директор Інституту молекулярної біології
і генетики НАН України,
академік НАН України

Єльська Г.В.



ДОВІДКА
про творчий внесок **Сальнікова Андрія Олександровича**
до циклу наукових праць

**“СТВОРЕННЯ ВИСОКОПРОДУКТИВНОЇ ІНФРАСТРУКТУРИ В ГРІД
ДЛЯ ДОСЛІДЖЕНЬ КОНФОРМАЦІЙНИХ ЗМІН БІОПОЛІМЕРІВ”**
на здобуття премії Президента України для молодих вчених 2018 року

Сальніков Андрій Олександрович є співвиконавцем ряду науково-технічних тем, що виконувались за тематикою циклу робіт в рамках державних програм в Інституті молекулярної біології і генетики НАН України з 2009 року, а саме:

- “Розробка та впровадження Cloud-технологій в роботу грід-сервісів віртуальної лабораторії MolDynGrid” (2014–2016 рр., держ. реєстр. номер – 0114U004667);
- “Розробка та впровадження комп’ютерних сервісів для аналізу молекулярної динаміки білків в віртуальній лабораторії MolDynGrid та її інтеграція в європейську грід-інфраструктуру” (2010–2013 рр., держ. реєстр. номер – 0110U005745);
- “Розвинення віртуальної лабораторії MolDynGrid як частини Української академічної грід-інфраструктури” (2009 р., держ. реєстр. номер – 01090004889).

За основним місцем роботи, в Київському національному університеті імені Тараса Шевченка, Сальніков Андрій Олександрович займається науковою діяльністю з 2009 року. В 2014 році він захистив дисертаційну роботу кандидата технічних наук за спеціальністю 05.13.05 – комп’ютерні системи та компоненти в Інституті кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України.

До результатів, які отримані Сальніковим А.О. та викладені у роботі, відносяться наступні:

- розроблено методологічні засади та побудовано високопродуктивну обчислювальну інфраструктуру в грід для проведення комп’ютерного моделювання просторової повнорозмірної структури тирозил-тРНК синтетази;
- запропоновано метод побудови масштабованої служби засвідчення та керування участю в віртуальних організаціях грід-інфраструктур із забезпеченням високої доступності, що дозволив розв’язати задачу централізованого відмовостійкого обслуговування віртуальних організацій на національному рівні;
- досліджено шляхи забезпечення виконання політик доступу до черг локальної системи керування завданнями провайдера грід-ресурсів та запропоновано метод, який дозволяє досягти цілісності та інтероперабельності

виділення ресурсів на множині провайдерів, а також врахувати вимоги обчислювальних завдань та виділити цільові розрахунки як пріоритетні;

– виконано інтеграцію віртуальної лабораторії MolDynGrid в грід-інфраструктури з використанням розроблених методів забезпечення виконання політик доступу до черг локальної системи керування завданнями провайдера грід-ресурсів та побудови масштабованої служби засвідчення та керування участю в віртуальних організаціях з забезпеченням високої доступності.

Результати робіт Сальнікова А.О. доповідалися і обговорювалися на 9 міжнародних конференціях, зокрема в Швейцарії, Італії, Швеції, Німеччині, Норвегії, Чеській Республіці, Словаччині, Польщі, Румунії в 2009-2017 роках.

Творчий внесок Сальнікова А.О. до циклу наукових праць **“СТВОРЕННЯ ВИСОКОПРОДУКТИВНОЇ ІНФРАСТРУКТУРИ В ГРІД ДЛЯ ДОСЛІДЖЕНЬ КОНФОРМАЦІЙНИХ ЗМІН БІОПОЛІМЕРІВ”** складає 30% роботи.

Кількість публікацій Сальнікова А.О., в яких представлено результати включені до циклу наукових праць, складає 24. Серед них 17 статей у фахових виданнях, зокрема 5 у міжнародних журналах, що містяться в базі даних SCOPUS, і тези 7 доповідей. Сальніковим А.О. отримано свідоцтво про реєстрацію авторського права на комп’ютерну програму «PHP VOMS-Admin», що використовується в роботі.

Загальна кількість посилань на публікації автора складає 98 (згідно з базою даних Google Scholar), h-індекс – 5 та 38 (згідно з базою даних SCOPUS), h-індекс – 3.

к.т.н., ас. кафедри комп’ютерної інженерії,
факультету радіофізики, електроніки
та комп’ютерних систем
Київського національного університету
імені Тараса Шевченка

Директор Інституту молекулярної біології
і генетики НАН України,
академік НАН України

Сальніков А.О.

Єльська Г.В.



ДОВІДКА
про творчий внесок Слюсаря Євгена Андрійовича
до циклу наукових праць

**“СТВОРЕННЯ ВИСОКОПРОДУКТИВНОЇ ІНФРАСТРУКТУРИ В ГРІД
ДЛЯ ДОСЛІДЖЕНЬ КОНФОРМАЦІЙНИХ ЗМІН БІОПОЛІМЕРІВ”**
на здобуття премії Президента України для молодих вчених 2018 року

Слюсар Євген Андрійович є співвиконавцем ряду науково-технічних тем, що виконувались за тематикою циклу робіт в рамках державних програм в Інституті молекулярної біології і генетики НАН України з 2009 року, а саме:

- “Розробка та впровадження Cloud-технологій в роботу грід-сервісів віртуальної лабораторії MolDynGrid” (2014–2016 рр., держ. реєстр. номер – 0114U004667);
- “Розробка та впровадження комп’ютерних сервісів для аналізу молекулярної динаміки білків в віртуальній лабораторії MolDynGrid та її інтеграція в європейську грід-інфраструктуру” (2010–2013 рр., держ. реєстр. номер – 0110U005745);
- “Розвинення віртуальної лабораторії MolDynGrid як частини Української академічної грід-інфраструктури” (2009 р., держ. реєстр. номер – 01090004889).

За основним місцем роботи, в Київському національному університеті імені Тараса Шевченка, Слюсар Євген Андрійович займається науковою діяльністю з 2009 року. В 2014 році він захистив дисертаційну роботу кандидата технічних наук за спеціальністю 05.13.05 – комп’ютерні системи та компоненти в Інституті кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України.

До результатів, які отримані Слюсарем Є.А. та викладені у роботі, відносяться наступні:

- розроблено метод забезпечення високої доступності даних в грід-інфраструктурах шляхом автоматизації керування розміщенням даних та реалізовано у програмному забезпеченні «RAPTOR», яке було впроваджено Українській національній грід-інфраструктурі для обслуговування центрального каталогу даних;
- розроблено методики розміщення даних у грід-інфраструктурах, які дозволили автоматизувати обслуговування даних комп’ютерних симуляцій молекулярної динаміки біополімерів та результатів їх аналізу у грід-інфраструктурах, які впроваджено у роботу віртуальної організації «MolDynGrid»;
- сформовано та реалізовано у програмних засобах політики реплікації даних, які забезпечують доступність даних автономним чином,

виключаючи необхідність постійного моніторингу та реагування з боку користувачів віртуальної лабораторії MolDynGrid;

– розроблено програмні компоненти, що забезпечують інтеграцію механізмів доступу до сховищ та каталогів даних у грід-інфраструктурах до сервісів віртуальної лабораторії MolDynGrid, зокрема інтерактивного каталогу траєкторій молекулярної динаміки.

Результати робіт Слюсаря Є.А. доповідалися і обговорювалися на 7 міжнародних конференціях, зокрема в Італії, Швеції, Німеччині, Чеській Республіці, Польщі, Румунії в 2009–2017 роках.

Творчий внесок Слюсаря Є.А. до циклу наукових праць “**СТВОРЕННЯ ВИСОКОПРОДУКТИВНОЇ ІНФРАСТРУКТУРИ В ГРІД ДЛЯ ДОСЛІДЖЕНЬ КОНФОРМАЦІЙНИХ ЗМІН БІОПОЛІМЕРІВ**” складає 30% роботи.

Кількість публікацій Слюсаря Є.А., в яких представлено результати включені до циклу наукових праць, складає 19. Серед них 13 статей у фахових виданнях, зокрема 5 у міжнародних журналах, що містяться в базі даних SCOPUS, і тези 6 доповідей. Слюсарем Є.А. отримано свідоцтво про реєстрацію авторського права на комп’ютерну програму «RAPTOR», що використовується в роботі.

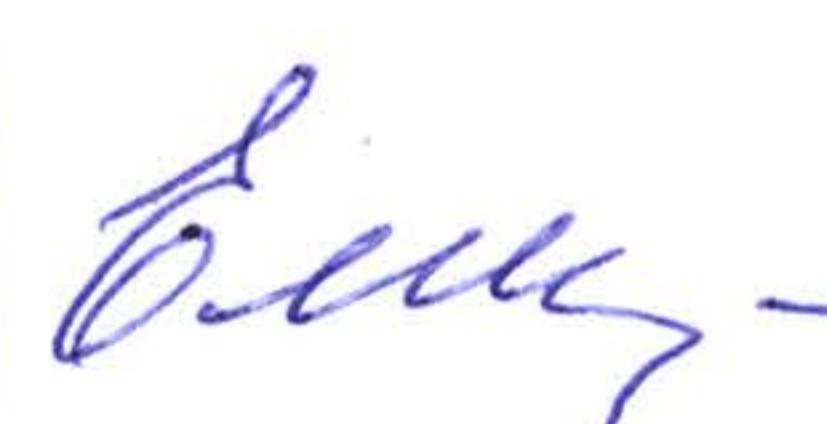
Загальна кількість посилань на публікації автора складає 80 (згідно з базою даних Google Scholar), h-індекс – 5 та 35 (згідно з базою даних SCOPUS), h-індекс – 3.

к.т.н., ас. кафедри комп’ютерної інженерії,
факультету радіофізики, електроніки
та комп’ютерних систем
Київського національного університету
імені Тараса Шевченка



Слюсар Є.А.

Директор Інституту молекулярної біології
і генетики НАН України,
академік НАН України



Єльська Г.В.