

ЗАГОРОДНІЙ

Анатолій Глібович —
академік НАН України,
президент НАН України

ВАСІЛЬЄВ

Олександр Олексійович —
кандидат хімічних наук,
завідувач відділу Інституту
проблем матеріалознавства
ім. І.М. Францевича НАН
України

МІЛЕНІН

Олексій Сергійович —
доктор технічних наук,
провідний науковий
співробітник Інституту
електрозварювання
ім. Є.О. Патона НАН України

СВІСТУНОВ

Сергій Якович —
кандидат технічних наук,
завідувач відділу Інституту
теоретичної фізики
ім. М.М. Боголюбова НАН
України

ШАДУРА

Віталій Миколайович —
кандидат фізико-математичних
наук, заступник директора
з наукової роботи Державної
наукової установи «Київський
академічний університет»

ШЕВЧЕНКО

Андрій Юрійович —
кандидат фізико-математичних
наук, консультант дирекції
Державної наукової установи
«Київський академічний
університет»

ВІДКРИТА НАУКА В НАН УКРАЇНИ: ШЛЯХ ВІД ІНФРАСТРУКТУРИ ДО УЧАСТІ У ФЕДЕРАЦІЇ EOSC

У статті обґрунтовано стратегію участі Національної академії наук України у Федерації європейської хмари відкритої науки (EOSC). Запропоновано поетапну модель формування вузлів EOSC за участю НАН України: від перших тематичних вузлів до мультидисциплінарного вузла НАН України та створення федерації тематичних, e-інфраструктурних і загальноакадемічних вузлів НАН України. Така модель зберігає автономію вузлів і відкриває можливості для їхньої взаємодії з іншими вузлами Федерації EOSC, створюючи основу для координації міждисциплінарних досліджень на національному та європейському рівнях. Як приклад формування ресурсно-сервісної бази майбутнього тематичного EOSC-вузла НАН України розглянуто проєкт MATSCI-NASU, спрямований на побудову пілотного EOSC-вузла з матеріалознавства, який виконують інститути НАН України в рамках конкурсу EOSC Gravity. Окрему увагу приділено досвіду Українського національного гріду, концепції Web of FAIR Data and Services, архітектурі Федерації EOSC, цифровим дослідницьким середовищам, а також зв'язку FAIR-даних із розвитком штучного інтелекту, цифрових двійників і e-технологій.

Ключові слова: відкрита наука, EOSC, Федерація EOSC, FAIR-дані, НАН України, DataverseUA, тематичні вузли, дослідницька інфраструктура, матеріалознавство, штучний інтелект, цифрові двійники.

Відкрита наука і цифрова трансформація досліджень. В останні роки докорінно змінилися умови, в яких працює українська наука. Повномасштабна війна, руйнування інфраструктури, обмеженість фінансових ресурсів, відтік кадрів і водночас зростання потреби в науково обґрунтованих рішеннях поставили перед науковими установами завдання нового типу. Сьогодні наука має не лише зберігати наукові школи і продукувати результати високого рівня, а й безпосередньо працювати на зміцнення обороноздатності, технологічної автономності, енергетичної й екологічної безпеки, сприяти економічному відновленню та підвищенню якості державної політики.

За цих умов розвиток дослідницької інфраструктури та відповідного, зручного для її використання цифрового дослідницького середовища стає однією з передумов стійкості й кон-

курентоспроможності науки. Сучасне цифрове дослідницьке середовище має пов'язувати дані, публікації, програмний код, моделі, обчислювальні ресурси, лабораторні сервіси, результати досліджень так, щоб їх можна було знайти, перевірити, поєднати і повторно використати.

Швидко зростання обсягів даних супроводжується двома взаємопов'язаними проблемами. Перша — зростання потреби у сховищах, хмарних і високопродуктивних обчисленнях та відповідне збільшення енергетичних витрат на їх підтримку. Друга — значні втрати наукової цінності через неналежне управління даними, відсутність метаданих і невідтворюваність частини досліджень. У першому звіті експертної групи Єврокомісії щодо європейської хмари відкритої науки (EOSC)¹ зазначалося, що велика частина дослідницьких даних не потрапляє в репозитарії даних, а багато експериментів неможливо відтворити. Відповіддю на цю ситуацію стала Європейська хмарна ініціатива 2016 року², яка поєднала ідею EOSC із розвитком Європейської інфраструктури даних.

За період 2016—2026 рр. EOSC пройшла шлях від Європейської хмарної ініціативи до операційної Федерації автономних вузлів. Для України участь у цій федерації має подвійне значення: з одного боку, забезпечує українським дослідникам доступ до європейських даних, обчислень і сервісів, а з іншого — дозволяє внести українські дані, програмні інструменти, дослідницькі компетенції й інформацію про тематичні спільноти до спільного Європейського дослідницького простору.

У Національній академії наук України є всі передумови для входження у Федерацію EOSC. В установах НАН України зосереджено значну частину наукового обладнання, центрів колективного користування науковим обладнанням, обчислювальних ресурсів, експериментальних

даних, результатів довготривалих спостережень, наукових колекцій. Метою цієї статті є обґрунтування моделі створення федерації тематичних, е-інфраструктурних і загально-академічних вузлів EOSC в НАН України. Як перший пілотний напрям запропоновано матеріалознавство — галузь, у якій природно поєднуються експеримент, моделювання, новітні матеріали, промислові застосування, оборонні потреби.

Від Європейської хмарної ініціативи до Федерації EOSC. Щоб зрозуміти сучасне значення EOSC, важливо простежити не лише хронологію, а й зміни логіки цієї ініціативи. У 2016 р. EOSC було визначено в межах Європейської хмарної ініціативи як надійне відкрите дослідницьке середовище для зберігання, обміну, оброблення та повторного використання наукових даних³. На першому етапі акцент робили на подоланні фрагментації інформаційних інфраструктур, розвитку хмарних і високопродуктивних обчислень та створенні спільного європейського ринку даних і знань.

Дуже швидко стало зрозуміло, що проблема не зводиться до фізичного зберігання файлів. Дослідницькі дані мають бути придатними до пошуку, доступу, поєднання з іншими ресурсами і повторного використання. Саме тому в основу EOSC було покладено принципи FAIR (Findable, Accessible, Interoperable, Reusable) [1]. Це перевело дискусію від загального гасла відкритості до конкретних вимог: наявності метаданих, стійких ідентифікаторів, машинозчитуваних форматів, інформації про походження та зв'язку даних із публікаціями, програмним кодом, методами й обладнанням.

Наступним кроком стало усвідомлення, що навіть добре описані дані самі по собі не створюють повноцінного дослідницького середовища. Досліднику потрібні засоби пошуку сервісів, керований доступ до ресурсів, інструменти аналізу й моделювання, обчислювальні середовища, репозитарії та підтримка користувачів. Так виникла концепція Web of FAIR Data and Services — вебмережі FAIR-даних і пов'я-

¹ Realising the European Open Science Cloud: First report and recommendations of the Commission High Level Expert Group on the European Open Science Cloud. European Commission, 2016. <https://surl.li/qtpkrr>

² European Cloud Initiative — Building a competitive data and knowledge economy in Europe. COM(2016) 178. 19 April 2016. <https://surl.li/cobvhw>

³ Там само.



Рис. 1. Еволюція EOSC від Європейської хмарної ініціативи до Федерації вузлів та спільного європейського простору даних для досліджень та інновацій

заних із ними сервісів, дослідників та е-інфраструктур⁴.

У першій половині 2020-х років EOSC було закріплено як одну з інфраструктур політики відкритої науки рамкової програми Horizon Europe. Стратегічна програма EOSC наголосила на важливості побудови системи взаємозв'язку FAIR-даних, програмних кодів, публікацій, сервісів, стандартів, реєстрів і дослідницьких спільнот. Програма INFRAEOSC 2023—2025 послідовно підтримувала розвиток наукових кластерів, сервісів EOSC Core і Exchange, довірених репозитаріїв, підготовку вузлів, інтеграцію FAIR-ресурсів, придатність даних до машинного читання та компетентності кураторів даних⁵.

Сучасний етап характеризується переходом EOSC від порталу або каталогу сервісів до Федерації EOSC. Федерація являє собою систему систем, у якій вузли різних типів зберігають інституційну автономію, але вза-

ємодіють на основі спільних правил довіри, доступу, інтероперабельності, моніторингу й сервісного управління⁶. Вузли можуть бути тематичними, національними, регіональними, е-інфраструктурними або інституційними, різнитися за обсягом і типом сервісів, які вони забезпечують. Їхня цінність визначається реальними ресурсами, сервісами, користувачами та здатністю працювати з іншими вузлами.

Отже, розвиток EOSC — це перехід від ідеї європейської хмари науки до федерації рівноправних вузлів, поєднаних в єдину систему (рис. 1). Для України цей перехід означає, що наявність репозитаріїв, харвестера або інформаційного порталу є важливим чинником, але цих ресурсів відкритої науки недостатньо. Операційна інтеграція починається тоді, коли за українським ресурсом стоїть відповідальний провайдер із правилами доступу, відповідним каталогом сервісів, якісними метаданими, моніторингом, підтримкою користувачів, здатний взаємодіяти з іншими вузлами Федерації EOSC.

⁴ The Strategic Research & Innovation Agenda and its Multi-Annual Roadmap. EOSC Association. Version 1.3, 1 November 2024. <https://surl.li/scfoir>

⁵ Turning FAIR into reality. Final report and action plan from the European Commission expert group on FAIR data. <https://data.europa.eu/doi/10.2777/1524>

⁶ Six Recommendations for implementation of FAIR practice by the FAIR in practice task force of the European open science cloud FAIR working group. <https://data.europa.eu/doi/10.2777/986252>

Сучасна концепція EOSC: вебмережа FAIR-даних та сервісів і наукове загальне благо. Саме поняття вебмережі FAIR-даних та сервісів (Web of FAIR Data and Services) підкреслює, що Федерація EOSC має бути не сукупністю ізольованих репозитаріїв чи каталогів, а середовищем взаємопов'язаних цифрових об'єктів, метаданих, сервісів та е-інфраструктур, які можуть бути знайдені і є доступними, інтероперабельними та придатними для повторного використання за спільними правилами. Щоб дані мали відповідний контекст і наукове значення, має бути зрозумілим їхнє походження. Термін FAIR у цій рамці стосується насамперед даних і метаданих, але в сучасній політиці відкритої науки поступово поширюється на ширше коло цифрових дослідницьких об'єктів, таких як публікації, програмний код, дослідницьке програмне забезпечення, моделі, алгоритми, відтворювані робочі процеси та інші цифрові результати досліджень [2–4].

Для таких об'єктів важливою є не лише відкритість доступу, а й можливість надійного пошуку, цитування, перевірки та повторного використання. Тому вони, а також пов'язані з ними дані та результати, мають бути ідентифіковані стійкими ідентифікаторами, описані достатніми відкритими метаданими і пов'язані між собою через посилання на публікації, авторів, організації, проекти, версії, ліцензії та інші дослідницькі об'єкти. Для дослідницького програмного забезпечення це розширення принципів FAIR формалізовано у FAIR4RS [5], а для обчислювальних робочих процесів (computational workflows) та моделей машинного навчання розробляють спеціалізовані рекомендації й метрики FAIR-оцінювання⁷ [4–6].

Європейська хмара відкритої науки задумана як трансформаційна платформа для розвитку відкритої науки і орієнтована на можливість її використання різними спільнотами — дослідниками, новаторами, установами, R&D-відділами наукомістких компаній та широким загалом. Тому EOSC часто визначають

як форму наукового загального блага [7]. Це визначення потребує уточнення. Дані, опубліковані з якісними метаданими, можуть одночасно використовувати багато дослідників, але обчислювальні потужності, сховища, сервіси аналізу, довготривале збереження є обмеженими ресурсами. Тому EOSC поєднує відкритість цифрових об'єктів із правилами розподілу обчислень, квотами, пріоритетами, політиками доступу та відповідальністю провайдерів.

Ця суперечність особливо помітна в роботі референтного EOSC-вузла — EOSC EU Node, де користувачі отримують доступ до репозитаріїв, віртуальних машин, notebook-середовищ та інших сервісів у межах визначених груп, лімітів і механізмів розподілу ресурсів. Відкритість у цьому разі не означає необмеженості. Вона означає прозорі умови, справедливі правила і можливість повторного використання результатів досліджень.

Звідси випливає питання сталості функціонування EOSC. Якщо ресурси створюються окремими установами, проектами або країнами, але використовуються ширшою спільнотою, необхідно визначити, хто фінансує їхню підтримку, оновлення, кібербезпеку, кураторство даних і допомогу користувачам. Саме тому європейську дискусію про майбутнє EOSC у наступній рамковій програмі ЄС (FP10) зосереджено на збереженні партнерської моделі, яка поєднує внески Європейської комісії, держав-членів ЄС, асоційованих країн, дослідницьких інфраструктур, університетів, академій наук та надавачів цифрових сервісів [8].

Для дослідника практична цінність Web of FAIR Data and Services полягає в можливості пройти послідовний дослідницький сценарій: знайти дані або сервіс, пройти автентифікацію та авторизацію, отримати доступ до обчислювального чи аналітичного середовища, виконати оброблення та аналіз даних, депонувати отриманий результат у репозитарії з присвоєнням стійкого ідентифікатора та описати його так, щоб інша група могла зрозуміти походження даних, перевірити результат або повторно використати його у власному дослідженні.

⁷ Horizon Europe Work Programme 2023–2025. Research Infrastructures: Enabling an operational, open and FAIR EOSC ecosystem (INFRAEOSC). <https://sur.li/qulcei>

EOSC має спростити проходження цього маршруту, але не може автоматично створити метадані, визначити наукові пріоритети або замінити відповідальність дослідників та установ за якість ресурсів.

Тому для України участь у EOSC не може бути одностороннім отриманням європейських ресурсів. Вона має поєднувати використання сервісів Федерації EOSC з внесенням українських наборів даних, інструментів і тематичних е-інфраструктур у каталоги ресурсів та сервісів Федерації. Такий підхід дає змогу уникнути позиції пасивного користувача і забезпечити суб'єктну роль української науки у спільному Європейському дослідницькому просторі.

Українські передумови: досвід гріду, політики відкритої науки та інфраструктура даних. Досвід Українського національного гріду є важливим «прообразом» створення тематичних вузлів та їх участі у Федерації EOSC. За підтримки НАН України було створено розподілену обчислювальну інфраструктуру грід-кластерів наукових установ, а ННЦ «Харківський фізико-технічний інститут» та Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова (ІТФ) НАН України вибудували довготривалу взаємодію з Європейською грід-інфраструктурою (European Grid Infrastructure, EGI) і CERN для розв'язання задач фізики високих енергій, моделювання та оброблення даних Великого адронного колайдера [9, 10]. Цей досвід показав, що українські наукові установи здатні підтримувати грід-ресурси, брати участь у спільній роботі міжнародної грід-федерації, дотримуватися спільних операційних правил і бути учасниками глобальних наукових процесів. Можна навести приклади успішного використання грід-технологій для розв'язання задач системної біології, структурної біології та молекулярної динаміки білків і макромолекулярних комплексів; для неемпіричних квантово-механічних розрахунків фізичних властивостей фрагментів металізованої ДНК; для розв'язання фундаментальних і науково-прикладних задач фізики, хімії, матеріалознавства, а також біології; для досліджень у галузі

математичного і комп'ютерного моделювання складних технологічних процесів.

Однак поширення грід-технологій на інші дисципліни залишалося обмеженим. Найуспішнішими були спільноти, які мали стандартизовані задачі, міжнародно погоджене програмне забезпечення, зрозумілий обчислювальний сценарій та спеціалізовану підтримку. Для багатьох інших галузей бар'єр входу був високим: потрібно було адаптувати предметні застосунки, підготувати дані і сформувати зрозумілу користувачку пропозицію. Це і стало причиною того, що в окремих галузях досліджень використання грід-технологій не мало проривного ефекту. Отже, досвід впровадження грід-технологій у НАН України засвідчив, що наявність обчислювальних ресурсів є лише необхідною умовою і сама по собі, без тематичних сервісів і підтримки, не створює широкого попиту.

EOSC використовує напрацювання EGI у федеративній автентифікації і авторизації, каталогах ресурсів, моніторингу, службах підтримки й управлінні сервісами, але має ширшу мету. Грід був передусім інфраструктурою розподілених обчислень. EOSC поєднує дані, репозитарії, програмні інструменти, обчислення, правила доступу, дослідницькі середовища і тематичні спільноти. Щоб не повторити обмежене залучення дисциплін, стратегію руху до Федерації EOSC потрібно будувати навколо реальних тематичних сценаріїв, а не абстрактної пропозиції ресурсів.

В Україні основу переходу до Федерації EOSC заклав Національний план щодо відкритої науки, затверджений Кабінетом Міністрів України у 2022 р.⁸ Він визначив завдання розвитку відкритого доступу, управління дослідницькими даними, популяризації принципів FAIR та формування компетентностей відкритої науки. Дорожня карта інтеграції України до Європейського дослідницького простору до 2027 року⁹ пов'язує відкриту науку з модернізацією дослідницьких

⁸ Про затвердження національного плану щодо відкритої науки: розпорядження Кабінету Міністрів України від 08.10.2022 № 892-р. <https://surl.li/uktvqk>

⁹ Дорожня карта інтеграції України до Європейського дослідницького простору на період до 2027 року: на-

інфраструктур, міжнародною участю та цифровою трансформацією наукової системи.

Для НАН України практичним етапом стало створення інфраструктури відкритої науки в рамках виконання цільових проєктів OPENS у 2023—2024 рр. та OPENS2 у 2025—2026 рр. [11], зокрема створення репозитарію відкритих даних НАН України DataverseUA¹⁰.

Створення інтегрованого у міжнародну мережу репозитарію DataverseUA дало українським дослідникам можливість публікувати результати досліджень не лише в закордонних репозитаріях, а й у цифровій інфраструктурі НАН України. Його основна роль полягає в депонуванні наборів даних, їх описі метаданими, забезпеченні доступу, цитування, версіонування та довготривалого збереження. У межах майбутніх тематичних EOSC-вузлів DataverseUA можна використовувати як репозитарний компонент: адміністратор репозитарію може технічно впроваджувати узгоджені дисциплінарні схеми метаданих, якщо їх розроблено відповідними науковими спільнотами й кураторами даних. Підтримка користувачів здійснюється окремими сервісами вузла, зокрема helpdesk, кураторами даних, каталогом ресурсів та інтеграційними інтерфейсами.

У НАН України вже сформувалася власна Інфраструктура відкритої науки, склад якої визначено розпорядженням Президії НАН України від 12.06.2024 № 350 (із змінами). До неї входять харвестер відкритої науки, видавнича платформа журналів, репозитарії наукових текстів, відкритих даних і препринтів, центр компетенції з управління дослідницькими даними, платформа репозитаріїв установ НАН України та центри колективного користування науковим обладнанням. Ці елементи створюють основу для відкритого доступу, збереження, опису й міжнародної видимості результатів досліджень. Наступним завданням є їх поєднання з каталогами ресурсів, сервісною

підтримкою, обчислювальними середовищами та федеративними інтерфейсами, необхідними для майбутніх EOSC-вузлів НАН України.

Особлива роль у такій моделі належить центрам колективного користування науковим обладнанням (ЦККНО). У сучасному розумінні дослідницька інфраструктура має надавати не лише доступ до приладів, а й цифрові сервіси роботи з даними, отриманими на цьому обладнанні. Тому ЦККНО доцільно розглядати як провайдерів FAIR-даних, методичної експертизи та цифрових сервісів аналізу даних, а не лише як місця користування приладами. У поєднанні з дисциплінарними профілями метаданих, репозитаріями, обчислювальними середовищами та сервісами підтримки такі ресурси можуть стати важливою складовою майбутніх тематичних вузлів EOSC за участю НАН України.

Модель Федерації EOSC-вузлів НАН України. НАН України є багатодисциплінарною системою, у якій різні галузі мають відмінні типи дослідницьких даних, стандарти метаданих, моделі доступу, міжнародні зв'язки та відповідні рівні цифрової готовності. Тому практично доцільною є поетапна модель входження НАН України до Федерації EOSC.

Насамперед необхідно зрозуміти, що таке вузол EOSC, які сервіси він повинен підтримувати, яка архітектура вузла пропонується і як взаємодіятимуть вузли у Федерації EOSC.

Основним документом, який містить відповіді на ці питання, є EOSC Federation Handbook, другу редакцію якого прийнято у 2026 р. [6]. У цій статті ми дуже стисло наведемо архітектурну будову вузла.

Після тривалого обговорення в робочих групах EOSC було запропоновано архітектуру вузла, яка складається з таких сервісів (рис. 2):

- **кореневі сервіси вузла (Node Core Capabilities)** забезпечують операційну роботу самого вузла, а також взаємодію з іншими вузлами Федерації EOSC. До них належать автентифікація та авторизація користувачів, каталог і реєстр ресурсів, підтримка користувачів, моніторинг, облік використання ресурсів, конфігурація, робочий простір користувача та базові правила сервісного управління. Частина

каз Міністерства освіти і науки України від 31.12.2025 № 1732. <https://surl.it/vknjxk>

¹⁰ Репозитарій відкритих даних НАН України DataverseUA. Офіційний вебпортал.

<https://opendata.nas.gov.ua/dataverse/dataverseua>

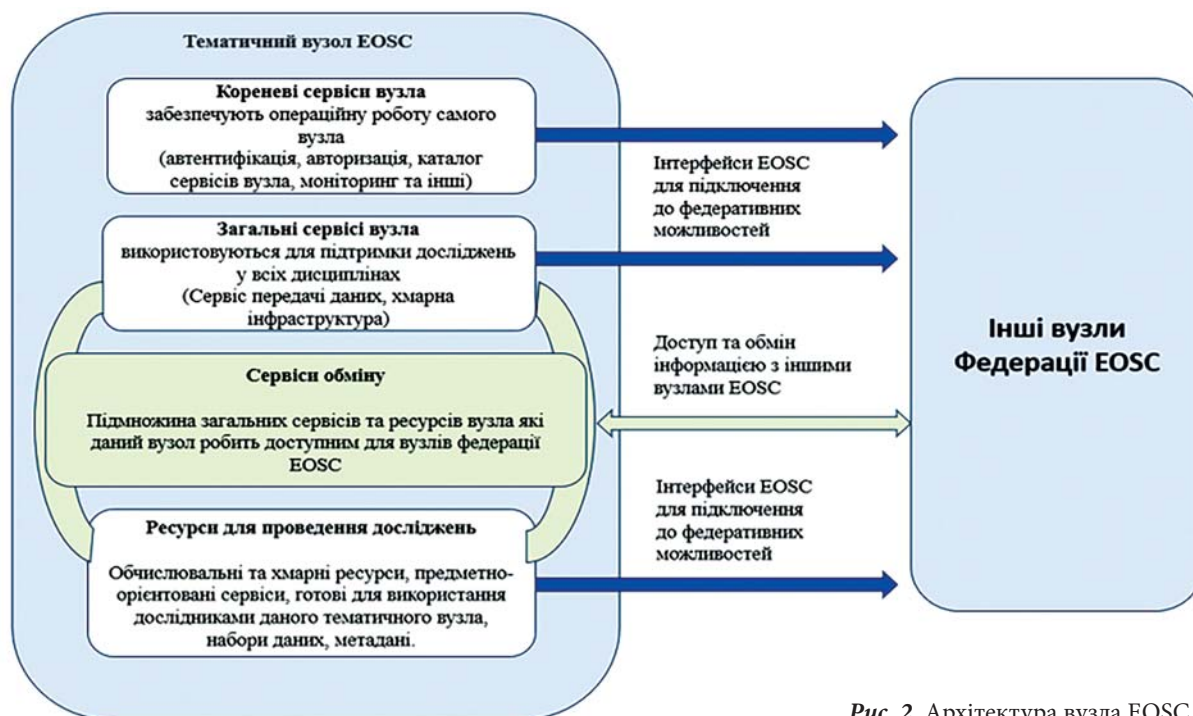


Рис. 2. Архітектура вузла EOSC

сервісів є обов'язковою для вузла (наприклад, служба каталогу та реєстру ресурсів, сервіс автентифікації та авторизації), а частина — рекомендованою для інсталяції (наприклад, облік використання ресурсу);

- **ресурси вузла (Node Resources)** складаються з обчислювальних ресурсів, ресурсів зберігання даних досліджень і програмних додатків для проведення тематичних досліджень, зазвичай перелічених у каталозі, до яких кінцеві користувачі цього вузла мають прямий доступ.

У свою чергу, **ресурси вузла** поділяються на три категорії:

- 1) **загальні сервіси вузла (Node Generic Capabilities)** — це сервіси, які використовують для підтримки наукових досліджень у переважній більшості наукових досліджень, вони забезпечують виконання повсякденних завдань, а тому є актуальними для всіх вузлів EOSC (наприклад, сервіс передачі даних або доступ до хмарної інфраструктури);

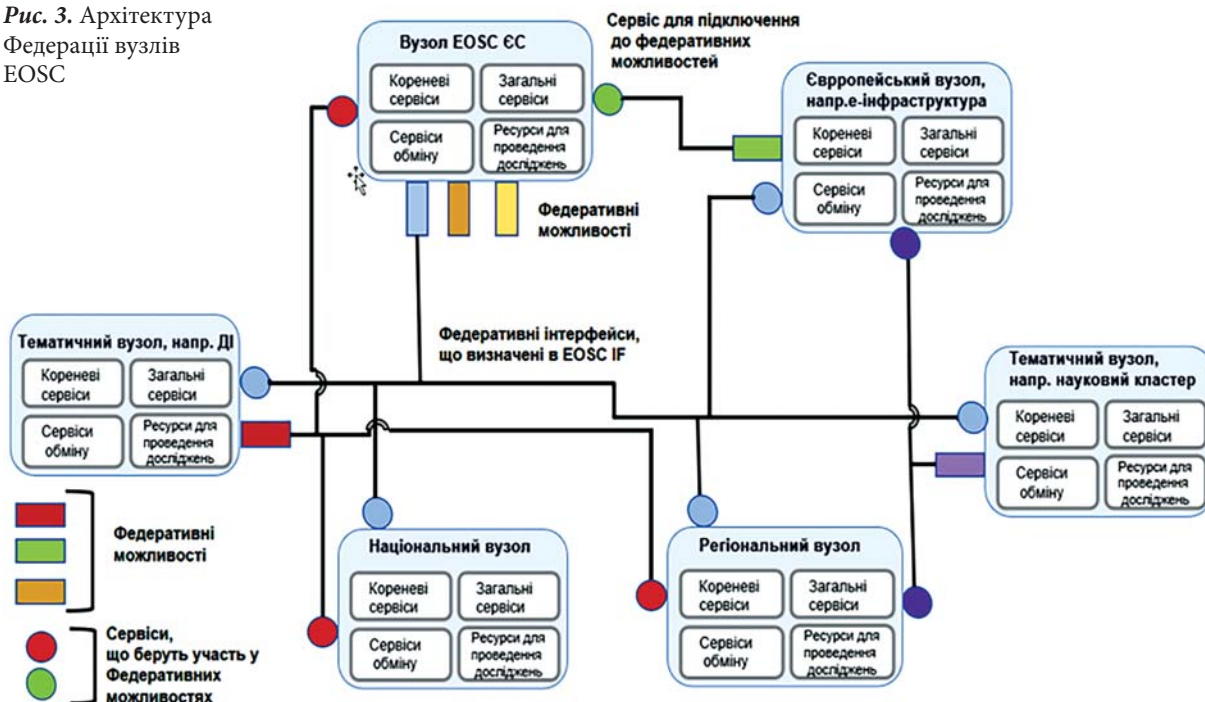
- 2) **ресурси для проведення досліджень (Node Research Resources)** — це сервіси, що включають доступ до обчислювальних ресур-

сів, дослідницьких робочих процесів для проведення тематичних досліджень, які підготовлені до використання дослідниками, набори дослідницьких даних, шаблони опису метаданих та спеціалізоване програмне забезпечення, що інстальовано і налаштовано для роботи на цьому вузлі;

- 3) **сервіси обміну вузла (Node Exchange)** — це погоджена підмножина загальних і предметних сервісів, які вузол робить доступними іншим вузлам Федерації EOSC відповідно до визначених політик доступу, умов використання і процедур підключення. Ці ресурси й сервіси входять в EOSC Exchange, яка включає набори послуг, даних та інших дослідницьких продуктів, що колективно надаються автономними EOSC-вузлами і стають доступними користувачам через Федерацію EOSC.

Федеративність EOSC означає, що тематичні, національні, регіональні, європейські та е-інфраструктурні вузли взаємодіють між собою через узгоджені інтерфейси, політики доступу, описи сервісів та механізми довіри [6]. У такій моделі користувач, який автентифікуєть-

Рис. 3. Архітектура
Федерації вузлів
EOSC



ся в довіреному середовищі одного вузла, може бути розпізнаний іншими вузлами Федерації EOSC і отримати доступ до її ресурсів.

Для взаємодії з Федерацією EOSC вузол має налаштувати відповідні сервіси: сервіс автентифікації та авторизації користувачів вузла, каталог ресурсів і сервісів, правила доступу, засоби моніторингу, сервіс підтримки користувачів, сервіс обліку використання ресурсів. Як у випадку сервісу автентифікації, частина цих компонентів може бути власною для вузла, а частина — спільною або делегованою провайдеру, якщо це не порушує автономії вузла та його відповідальності за власні ресурси, сервіси й політики доступу (рис. 3).

Слід зазначити, що обчислювальні ресурси та ресурси зберігання даних, які використовують для проведення дослідження, не обов'язково є частиною вузла. Тематичний EOSC-вузол НАН України може використовувати ресурси національного рівня, наприклад репозитарій відкритих даних НАН України DataverseUA або обчислювальний хмарний кластер в ІТФ НАН України, реалізуючи відповідний доступ до цього ресурсу. З іншого боку, вузол може ви-

користовувати ресурси установи, наприклад локальний репозитарій даних, також реалізуючи відповідний доступ до цього ресурсу. Такі ресурси і сервіси прописано в каталозі сервісів вузла, і зазвичай вони можуть не входити до сервісів обміну вузла, тобто доступ до них можливий тільки в рамках цього вузла.

Вище вже зазначалося, що побудова тематичних вузлів EOSC в НАН України — це тривалий процес, що потребує відповідних організаційних, технічних та програмних рішень, застосованих насамперед співробітниками установ НАН України, які мають бажання створити такий вузол.

На першому етапі в НАН України може бути розгорнуто пілотний тематичний EOSC-вузол, наприклад з матеріалознавства, використовуючи обчислювальні ресурси ЦККНО «Ресурсний центр для грід- та хмарних технологій» Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України. Він надаватиме доступ до сервісів для обчислень і моделювання задач матеріалознавства, якими користуватимуться наукові групи відповідних віртуальних лабораторій цифрового дослідницького середови-

ща. Репозитарій DataverseUA має виконувати роль репозитарного компонента такого вузла: забезпечувати депонування, збереження, опис метаданих, доступ, цитування та версіонування підготовлених дослідницьких даних з матеріалознавства.

Для забезпечення взаємодії пілотного вузла з Федерацією EOSC необхідно налаштувати мінімальний набір кореневих сервісів вузла: автентифікацію та авторизацію користувачів, каталог ресурсів і сервісів, засоби моніторингу, підтримку користувачів, правила доступу та інші компоненти, які потрібні для операційної роботи вузла і його федеративної взаємодії.

Тоді тематичний EOSC-вузол з матеріалознавства НАН України буде здатний напряму співпрацювати з європейськими тематичними й інфраструктурними вузлами Федерації EOSC, зокрема MatOSC, PaNOSC та ін., е-інфраструктурними провайдерами, EGI, EOSC EU Node та іншими ресурсами Федерації EOSC.

Після створення пілотного тематичного EOSC-вузла НАН України з матеріалознавства отриманий досвід буде використано для підготовки інших тематичних вузлів, зокрема в біоінформатиці, науці про довкілля та інших галузях досліджень, у яких є відповідні дані, сервіси, обладнання, користувацькі спільноти й операційна спроможність підтримувати власний вузол.

На другому етапі може формуватися мультидисциплінарний EOSC-вузол для тих наукових спільнот, інститутів, які мають цінні дані, обладнання, методики, але не можуть самостійно підтримувати повний операційний контур окремого вузла. Такий вузол може використовувати результати створення пілотного вузла з матеріалознавства, а саме: операційну структуру, методичні матеріали, шаблони опису ресурсів, загальні профілі метаданих, процедури підтримки користувачів і спільні або делеговані сервіси, а також отримувати частину кореневих сервісів шляхом співпраці з діючими провайдерами сервісів, зокрема від е-платформи ІТФ НАН України.

У практичному вимірі це означає, що до вже налаштованих кореневих сервісів можуть під-

ключатися нові ресурси та предметно орієнтовані сервіси інших наукових напрямів. Це дозволить надавати сервіси для федеративної взаємодії, використовувати спільні або делеговані сервіси без необхідності щоразу створювати повний вузол з нуля.

На третьому етапі НАН України може сформувати федерацію тематичних, е-інфраструктурних та загальноакадемічних вузлів. Її завданням буде не централізоване підпорядкування ресурсів одному оператору, а координація взаємодії вузлів для проведення міждисциплінарних досліджень в Україні та спільних досліджень із європейськими партнерами. Така координація може здійснюватися через координаційну раду федерації вузлів НАН України, а також через меморандум між установами-учасниками, який визначає ролі, відповідальність, правила взаємодії, порядок використання спільних або делегованих сервісів і механізми представлення ресурсів у Федерації EOSC.

Федерація вузлів НАН України потрібна для того, щоб перетворити розрізнені дані, сервіси й експертизу 14 відділень Академії на національний академічний простір дослідницьких ресурсів, даних та знань, здатний працювати для української держави, суспільства, науки й промисловості. Ці ресурси формуються як на основі власних експериментів, спостережень і розрахунків, так і шляхом аналізу зовнішніх даних та інтеграції міжнародних наукових результатів. Проте без спільної цифрової платформи вони залишаються переважно розрізненими дисциплінарними масивами знань, обмеженими в інституційному, технічному й організаційному плані.

Призначення федерації EOSC-вузлів НАН України полягає в узгодженні взаємодії тематичних вузлів через спільні правила автентифікації та авторизації, каталоги ресурсів і сервісів, загальні шаблони метаданих, політики доступу, маршрути депонування, сервіси підтримки користувачів і механізми представлення підготовлених ресурсів у Федерації EOSC. У такій моделі автономні вузли зберігають відповідальність за власні дані, сервіси й політики

доступу, але отримують можливість діяти як складові єдиної академічної системи систем. Їхня узгоджена взаємодія дає змогу створити простір, у якому дані, моделі, дослідницькі робочі процеси (workflows), експертизу та цифрові сервіси можна використовувати для міждисциплінарних досліджень, підтримки промисловості, державної політики, оборони, охорони здоров'я, відновлення інфраструктури, забезпечення екологічної безпеки та для інших національних потреб України.

У цьому сенсі федерація вузлів НАН України є, з одного боку, технічним маршрутом інтеграції з EOSC, а з другого — інструментом перетворення накопичених академічних знань на керований, доступний і придатний до повторного використання національний ресурс. Частина цього ресурсу може бути представлена у Федерації EOSC, тоді як інша частина може використовуватися всередині України для вирішення регіональних, галузевих і загальнодержавних завдань.

Отже, запропонована модель описує поступове розширення участі НАН України у Федерації EOSC. Тематичний EOSC-вузол з матеріалознавства НАН України може продемонструвати готовність наукової спільноти НАН України до участі у Федерації як щодо підготовки та використання обчислювальних сервісів, так і щодо використання ресурсів і сервісів Федерації EOSC. Тематичний EOSC-вузол з матеріалознавства забезпечуватиме також консультування та підтримку наукових спільнот, які ще не можуть створити власний вузол, і в подальшому федерація вузлів НАН України сформує організаційну та цифрову основу для міждисциплінарних досліджень на національному та європейському рівнях.

Слід зауважити, що наявні провайдери дослідницьких ресурсів — наукові установи, ЦККНО, лабораторії, репозитарії, наукові групи — діють на всіх етапах і залишаються відповідальними за якість, підтримку та умови використання конкретних ресурсів у рамках взаємодії з Федерацією EOSC.

Матеріалознавчий пілотний проєкт MATSCI-NASU і взаємодія з MatOSC. Прак-

тичним кроком до створення тематичного EOSC-вузла з матеріалознавства НАН України є проєкт MATSCI-NASU, який виконують наукові установи НАН України у 2026 р. за підтримки програми EOSC Gravity. Його метою є розроблення управлінської моделі для тематичного вузла НАН України з матеріалознавства¹¹, проєктування дослідницьких ресурсів вузла та створення формату метаданих для моделювання та аналізу даних. Проєкт важливий для набуття досвіду створення тематичного вузла, перевірки ключових передумов його майбутньої операційної роботи й поширення досвіду на інші тематичні вузли.

До проєкту залучено Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М. Францевича (ІПМ) НАН України та Київський академічний університет. Такий склад поєднує обчислювальну інфраструктуру, матеріалознавчу експертизу, підготовку кадрів, управління дослідницькими даними й освоєння європейських практик відкритої науки.

ІТФ НАН України надає хмарні й обчислювальні ресурси, робочі середовища для аналізу та моделювання, забезпечує інсталяцію та перевірку роботи кореневих сервісів вузла, підготовку й тестування механізмів федеративного доступу. ІПМ НАН України визначає наукове ядро: типи даних, методики, вимоги до опису результатів, експериментальні й обчислювальні ланцюги та потреби користувачів. Київський академічний університет і Центр компетенції з управління дослідницькими даними НАН України забезпечують підготовку шаблонів метаданих, консультації, навчання та підтримку кураторів даних.

Пілотний проєкт MATSCI-NASU має охопити цілісний користувацький сценарій: опис наукової задачі, інвентаризацію програмних та обчислювальних ресурсів на кожному етапі моделювання, підготовку відповідних метаданих, керований доступ, використання об-

¹¹ EOSC Gravity. MATSCI-NASU: Designing the Governance, Core Readiness, and Pilot Use Case for the NASU Materials Science Thematic Node, 2026. <https://surl.li/syzoe>

числювального або аналітичного середовища, депонування результатів у DataverseUA з можливістю їх повторного використання. Саме повний сценарій дає змогу перевірити, чи має інфраструктура вузла практичну цінність для дослідника.

Важливою є взаємодія з проектом MatOSC, спрямованим на підготовку європейського тематичного вузла з матеріалознавства¹². Така співпраця дозволяє узгоджувати термінологію, тематичні онтології, словники та метадані, описи сервісів, вимоги до користувачів і підходи до якості наборів даних згідно з практиками провідних європейських наукових центрів. Для українського пілотного проекту це принципово: він має від самого початку розвиватися не як ізольована національна система, а як сумісна частина ширшої федерації.

До розвитку ініціативи MATSCI-NASU можуть поступово долучатися наукові групи Інституту електрозварювання ім. Є.О. Патона, Інституту металофізики ім. Г.В. Курдюмова та інших установ НАН України. Їхні робочі процеси з моделювання матеріалів та аналізу даних дадуть змогу перевірити різні типи ресурсів та завдань у матеріалознавстві: моделювання матеріалів, зварювальні і термомеханічні процеси, структурні характеристики нових матеріалів, механічні випробування, підготовку даних для машинного навчання. Результатом має стати узгоджений набір сервісів і правил тематичного вузла.

Тематична цифрова дослідницька інфраструктура та віртуальні дослідницькі середовища. Основою для формування ресурсно-сервісної бази матеріалознавчого вузла може стати тематична цифрова дослідницька інфраструктура — система, що поєднує партнерів (наукові установи, університети, наукомісткі компанії), віртуальні лабораторії, набори даних, програмні засоби, обчислювальні ресурси, правила доступу, навчання та підтримку. Її не слід ототожнювати з окремим вебсайтом або хмарним кластером. Її функція полягає у

перетворенні розрізнених ресурсів на зрозумілі користувацькі сервіси.

Європейський досвід свідчить, що практичне формування Федерації EOSC спирається на великі тематичні дослідницькі інфраструктури і наукові кластери. В рамках проекту OSCARS (Open Science Clusters' Action for Research and Society, 2024—2027) було створено наукові кластери ENVRI-FAIR, EOSC-Life, ESCAPE, PaNOSC і SSHOC, які об'єднали дослідницькі інфраструктури у сферах довкілля, наук про життя, фізики і астрономії, фотонних і нейтронних джерел, соціальних і гуманітарних наук. Ці п'ять міжгалузевих наукових кластерів пов'язують провідні європейські дослідницькі інфраструктури з EOSC¹³. Вони гармонізують дані, інструменти та робочі процеси в різних дисциплінах, щоб зробити результати досліджень відшукуваними (такими, що можуть бути знайдені), доступними, сумісними та повторно використовуваними (принципи FAIR).

Ефективним компонентом тематичної цифрової інфраструктури можуть бути цифрові дослідницькі середовища (Virtual Research Environments, VRE), ресурси яких можуть використовувати віртуальні лабораторії. Вони є цифровим продовженням фізичних лабораторій і ЦККНО, але не замінюють їх.

Віртуальне дослідницьке середовище можна визначити як платформу відкритої науки для спільної роботи з розподіленими наборами даних, обчислювальними ресурсами, аналітичними інструментами та сервісами обробки даних, публікації й візуалізації результатів. Усередині цього середовища створюються тематичні віртуальні лабораторії (VLabs), що поєднують програмні застосунки і відтворювані робочі процеси, підготовлені набори даних із метаданими та відповідною документацією, які дають змогу перевірити або повторити дослідження для конкретної наукової задачі. Отже, VRE є спільною платформою, тоді як VLab є її предметно орієнтованим сервісним середовищем.

¹² EOSC Gravity. MatOSC: Preparing an EOSC Materials Node, 2026. <https://surli.cc/qlldgn>

¹³ Science-Clusters.eu. Cross-domain research infrastructure collaboration for Open Science. <https://science-clusters.eu/>

Наприклад, при створенні тематичного EOSC-вузла Blue-Cloud 2026¹⁴ спочатку було сформовано Blue-Cloud Virtual Research Environment (Blue-Cloud VRE), в межах якого окремі VLab надають групам (спільнотам) з морських досліджень робочі середовища для аналізу даних і моделювання процесів у сферах фізики, біології та довкілля в океані за відповідними напрямками науки про море.

Для тематичної цифрової інфраструктури з матеріалознавства в НАН України, як ресурсно-сервісної бази майбутнього тематичного EOSC-вузла, створюється віртуальне дослідницьке середовище, в межах якого працюють тематичні віртуальні лабораторії для окремих наукових спільнот або дослідницьких сценаріїв з відповідних наукових установ НАН України.

У загальних випадках можна обмежитися цифровим дослідницьким середовищем або тематичними сервісами, не створюючи віртуальні лабораторії, оскільки формальною одиницею вузла є не «лабораторія», а підтримуваний ресурс із провайдером, користувачами, документацією, умовами доступу і показниками якості.

Віртуальні лабораторії можуть підтримувати оброблення та аналіз даних з мікроскопічних та спектроскопічних досліджень, структурного аналізу, комп'ютерного моделювання й машинного навчання для матеріалознавства, поєднуючи відповідні набори даних, програмні інструменти, обчислювальні ресурси та відтворювані workflow.

Проте в центрі такої інфраструктури має бути дослідницький сценарій: з якими входними даними працює дослідник, які сервіси та програмні інструменти використовує, який результат отримує, як цей результат зберігається й описується метаданими, а також як його може перевірити або повторно використати інша наукова група.

Кожна віртуальна лабораторія має поєднувати три рівні. Перший — процеси цифрового аналізу та моделювання, обчислень або оброблення даних. Другий — наукову методику, експертну інтерпретацію і контроль якості ре-

зультатів. Третій — управління даними: створення метаданих, документацію, умови доступу, ліцензії, обмеження, цитування, та зв'язок із репозитарієм.

Сукупність таких віртуальних лабораторій, спільних цифрових сервісів, інфраструктури репозитаріїв, каталоги ресурсів і сервісів, підтримка користувачів — усе це формує ресурсно-сервісну базу тематичного напрямку. А доповнення мінімальним операційним контуром вузла та федеративними інтерфейсами взаємодії з вузлами Федерації EOSC може стати основою для створення формального тематичного EOSC-вузла НАН України з матеріалознавства.

EOSC, штучний інтелект, цифрові двійники та координація дій. Стратегічний зв'язок EOSC із розвитком штучного інтелекту визначається якістю дослідницьких даних. Моделі машинного навчання в матеріалознавстві, біоінформатиці, енергетиці, кліматичних дослідженнях, промисловості потребують великих, повних, ліцензійно зрозумілих і придатних для автоматизованого опрацювання наборів даних. Тому FAIR-дані є не окремою адміністративною вимогою, а необхідною основою науки, готовою до використання штучного інтелекту.

У матеріалознавстві алгоритми вже дають змогу переглядати великі масиви хімічних структур і формувати переліки перспективних кандидатів на нові матеріали [12]. Автономні лабораторні системи можуть поєднувати обчислювальний прогноз, роботизований синтез і експериментальну перевірку [13]. Однак прогноз стабільної структури ще не є відкриттям готового технологічного матеріалу. Між цифровою гіпотезою і практичним застосуванням стоять уточнювальні розрахунки, синтез, структурна характеристика, вимірювання властивостей, оцінка відтворюваності та відкриття даних для незалежної перевірки.

Цифрові двійники є наступним рівнем інтеграції даних і моделей. Сучасний цифровий двійник — це не статична копія об'єкта, а динамічна система, в якій фізичний об'єкт або процес пов'язано з експериментальними даними, обчислювальними моделями і механізмами зворотного зв'язку. Новітні дослідження в ма-

¹⁴ Blue-Cloud 2026. Blue-Cloud Virtual Research Environment and Virtual Laboratories. <https://surl.li/utvqug>

теріалознавстві демонструють поєднання спектроскопічних даних і теоретичних розрахунків у хімічних цифрових двійниках, моделювання мікроструктури матеріалів та оцінювання невизначеності їхніх властивостей [14–16].

Такі системи потребують не лише даних, а й онтологій, знаньових графів, версій моделей, інформації про походження, відтворюваних робочих процесів і доступу до обчислень. Саме тому Web of FAIR Data and Services є природною інфраструктурною основою цифрових двійників. Досвід використання FAIR digital twins у європейських дослідницьких проєктах засвідчує необхідність інтеграції даних, моделей і робочих процесів разом із їх машиночитуваним описом [17].

Для України особливого значення набувають цифрові двійники матеріалів, енергетичних систем і критичної інфраструктури. Репозитарії даних про пошкодження конструкцій, характеристики матеріалів, дефекти, умови експлуатації та результати моделювання можуть стати основою прогнозування залишкового ресурсу, оцінки ризиків і вибору стратегій відновлення. У цьому разі відкрита наука перетворюється з політики публікації на інструмент технологічної модернізації.

Розвиток таких застосувань потребує міжсекторальної взаємодії наукових установ, університетів, органів державної влади, підприємств і громад. Федерація EOSC-вузлів НАН України може забезпечити науковий рівень цієї взаємодії: якісні дані, перевірені моделі та робочі процеси, обчислювальні сервіси, експертизу та підготовку фахівців.

Пріоритетні кроки для НАН України. Передумовою реалізації стратегії участі Національної академії наук України у Федерації EOSC є формування зрозумілої ціннісної пропозиції для дослідників. Використання EOSC має скорочувати час пошуку ресурсів, спрощувати доступ до обчислень і програмних засобів, полегшувати опис та збереження результатів, розширювати можливості міжнародної співпраці. Без демонстрації такої практичної користі сама наявність інфраструктури не забезпечить її використання.

Перший крок — сформувати перші тематичні вузли на базі тих організацій НАН України, які вже мають достатні наукові, технічні й кадрові ресурси для підтримки мінімального операційного контуру вузла. Базовим прикладом може бути матеріалознавчий напрям — проєкт MATSCI-NASU. Вибір наступних тематичних напрямів має ґрунтуватися на наявності даних, обладнання, користувацької спільноти, відповідальної команди, міжнародних партнерств і здатності підтримувати кореневі, загальні, предметні та федеративні сервіси вузла.

Другий крок — для створення наступних тематичних вузлів провести інвентаризацію ресурсів як потенційних провайдерів сервісів вузла. Для кожного ресурсу потрібно визначити провайдера, користувачів, умови доступу, типи даних, формати, необхідні метадані, документацію, обмеження, очікуваний результат і порядок підтримки. Така інвентаризація має охоплювати не лише ресурси перших тематичних вузлів, а й дані, обладнання, методики та експертизу академічних інститутів і ЦККНО, які в майбутньому можуть використовувати спільні сервіси вузла НАН України.

Третій крок — розгорнути дисциплінарні профілі метаданих і пов'язати їх із DataverseUA та іншими сервісами репозитаріїв відкритих даних або PID-сервісами. Загальні поля метаданих у репозитарії мають бути доповнені шаблонами для основних типів експериментальних та обчислювальних даних. Профілі потрібно узгоджувати з міжнародними онтологіями, словниками і практиками відповідних спільнот, зокрема для тих тематичних напрямів, які готуються до прямої взаємодії з європейськими тематичними вузлами.

Четвертий крок — забезпечити мінімальний операційний контур перших тематичних вузлів. Йдеться не про створення загального сервісного шару для всієї НАН України на початковому етапі, а про практичне налаштування сервісів, достатніх для роботи конкретної тематичної спільноти: доступу до ресурсів та сервісів, каталогу ресурсів, підтримки користувачів, моніторингу, управління даними, маршрутів депоновання та федеративної взаємодії. При цьому

не всі сервіси й ресурси мають автоматично виводитися до EOSC Exchange, частина з них може забезпечувати внутрішню роботу вузла або пряму взаємодію з іншими тематичними, національними чи е-інфраструктурними вузлами.

П'ятий крок — сформувати вузол НАН України для ширшої академічної спільноти. Його завданням має бути підтримка інститутів, відділень і наукових спільнот, які мають цінні дані, обладнання або експертизу, але не можуть самостійно підтримувати повний операційний контур окремого вузла. Такий вузол має надавати спільні або делеговані сервіси, допомагати з описом ресурсів, організацією доступу, підготовкою даних до повторного використання, навчанням, консультаціями, перевіркою метаданих, підтримкою ліцензування і депонування.

Шостий крок — перевірити готовність вузлів у наскрізних користувацьких сценаріях та їхню інтероперабельність з вузлами Федерації EOSC. Дослідник має пройти повний маршрут: знайти ресурс, пройти автентифікацію та авторизацію, отримати доступ до сервісу або обчислювального середовища, виконати аналіз чи моделювання, підготувати дані й метадані, депонувати результат і забезпечити можливість його перевірки або повторного використання. Лише такий сценарій дозволяє оцінити реальну операційну готовність вузла.

Сьомий крок — сформувати федерацію вузлів НАН України як наступний рівень координації. Вона має об'єднати тематичні, е-інфраструктурні та загальноакадемічні вузли не через централізоване підпорядкування, а через узгоджені політики, координаційну раду та операційний комітет, меморандум між установами-учасниками, спільні вимоги до інтероперабельності, сервісного управління, метаданих, підтримки користувачів і федеративної взаємодії, наприклад робочих процесів за підтримки кількох вузлів. Саме така федерація може стати організаційною основою для міждисциплінарних досліджень в Україні та участі українських спільнот у спільних дослідженнях із європейськими партнерами для вирішення глобальних проблем та відновлення України.

Реалізація цих кроків не потребує завершення всіх реформ або створення ідеальної загальнонаціональної платформи. Їх можна здійснювати через послідовні пілотні проекти, які швидко виявляють проблеми, дають вимірюваний результат і створюють рішення для масштабування.

Консультації з цих питань надають у Центрі компетенції з управління дослідницькими даними НАН України (Київський академічний університет)¹⁵.

Висновки. Україна перебуває на етапі, коли відкрита наука має перейти від декларативної політики до операційної інфраструктури. Для НАН України це означає виконання Національного плану щодо відкритої науки, забезпечення міжнародної видимості репозитаріїв, а також здатності надавати якісні дані, сервіси, обчислювальні середовища, тематичну експертизу і підтримку користувачів у межах Федерації EOSC.

Оптимальною організаційною моделлю є етапне формування вузлів EOSC за участю НАН України. На першому етапі один або кілька зрілих тематичних напрямів можуть створювати власні тематичні вузли на базі наукових установ НАН України, які мають достатні ресурси для підтримки мінімального операційного контуру вузла, предметних сервісів і федеративної взаємодії. На наступному етапі вузол НАН України може забезпечити спільне сервісне середовище для тих інститутів, відділень і наукових спільнот, які мають цінні дані, обладнання або експертизу, але не можуть самостійно підтримувати повний набір сервісів окремого вузла. У перспективі це створює основу для федерації тематичних, е-інфраструктурних і загальноакадемічних вузлів НАН України, з відповідними координаційною радою та операційним комітетом вузлів Академії для узгодження спільної політики, стандартів та підтримки міждисциплінарних досліджень на основі меморандуму між установами-учасниками.

Така модель не створює нової централізованої ієрархії. Кожний вузол зберігає відпові-

¹⁵ Центр компетенції з управління дослідницькими даними НАН України при Київському академічному університеті. <https://fair-center.bitp.kyiv.ua/contacts/>

дальність за власні дані, метадані, сервіси, користувачські спільноти і правила доступу, але діє в межах спільних вимог інтероперабельності, довіри, сервісного управління і федеративної взаємодії. При цьому не всі внутрішні ресурси вузла мають автоматично входити до EOSC Exchange: частина з них може використовуватися всередині тематичної або національної спільноти, частина — для прямої співпраці з європейськими тематичними або е-інфраструктурними вузлами, а до EOSC Exchange може вводитися лише підготовлена й погоджена підмножина ресурсів.

Матеріалознавство є найбільш підготовленим і стратегічно важливим напрямом для першого пілотного вузла. Проект MATSCI-

NASU, взаємодія з MatOSC, репозитарій DataverseUA, обчислювальна інфраструктура ІТФ НАН України і компетенції установ-партнерів дають можливість перевірити повний цикл — від даних і сервісів до федеративного доступу, взаємодії з європейськими тематичними вузлами та повторного використання результатів.

Стратегічно EOSC слід розглядати як цифрову інфраструктуру відкритої науки, готової до використання штучного інтелекту і цифрових двійників. Участь НАН України у Web of FAIR Data and Services створить умови не лише для доступу до європейських ресурсів, а й для перетворення українських даних, сервісів і компетенцій на складову спільного європейського простору досліджень, інновацій та повоєнного відновлення.

REFERENCES

[СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ]

1. Wilkinson M.D. et al. The FAIR Guiding Principles for Scientific Data Management and Stewardship. *Scientific Data*. 2016. 3: 160018. <https://doi.org/10.1038/sdata.2016.18>
2. Wilkinson M.D. et al. Community-driven governance of FAIRness assessment: an open issue, an open discussion. EOSC Association. Dec. 1, 2022. <https://doi.org/10.5281/zenodo.7390482>
3. Chue Hong N.P. et al. FAIR principles for research software version 1.0 (FAIR4RS Principles v1.0). Research Data Alliance, 2022. <https://doi.org/10.15497/RDA00068>
4. Wilkinson S.R. et al. An Ecosystem of Services for FAIR Computational Workflows. Preprint ArXiv.org. 2025. arXiv:2505.15988v2. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2505.15988>
5. Limani F., Tofik L., Latif A., Tochtermann K. FAIR for machine learning model: principles and assessment metrics. Nov. 21, 2025, version 1.1. <https://doi.org/10.5281/zenodo.17673536>
6. EOSC Federation Handbook. Version 2.0. 30 Jan. 2026. <https://doi.org/10.5281/zenodo.18454649>
7. Bertelli A., Acciai M., Rossi G. The European Open Science Cloud as a common good: Potentials and limitations of this endeavour. *Open Research Europe*. 2025. 5: 19. <https://doi.org/10.12688/openreseurope.19170.2>
8. EOSC Steering Board. EOSC as an indispensable component of the FP10 European Partnership portfolio. Zenodo, 2026. <https://doi.org/10.5281/zenodo.20021810>
9. Zagorodniy A., Zinov'ev G., Martynov Ye., Svystunov S., Shadura V. Grid — a new data-processing technology for science. *Visn. Nac. Akad. Nauk Ukr.* 2005. (6): 17—25.
[Загородній А.Г., Зінов'єв Г.М., Мартинов Є.С., Свістунів С.Я., Шадур В.М. Грід — нова інформаційно-обчислювальна технологія для науки. *Вісник НАН України*. 2005. № 6. С. 17—25.]
10. Zagorodny A.G. On the results of implementation of targeted research program of NAS of Ukraine “Grid infrastructure and grid technology for scientific and practical applications” in 2014—2018 (transcript of report at the meeting of the Presidium of NAS of Ukraine, March 27, 2019). *Visn. Nac. Akad. Nauk Ukr.* 2019. (6): 57—61.
[Загородній А.Г. Про підсумки виконання комплексної програми НАН України «Грід-інфраструктура і грід-технології для наукових і науково-прикладних застосувань» за 2014—2018 рр. (стенограма доповіді на засіданні Президії НАН України 27 березня 2019 р.). *Вісник НАН України*. 2019. № 6. С. 57—61.]
11. Khimich O.M. On the results of the implementation of the targeted scientific and technical project of the NAS of Ukraine “Creation and implementation of the open science infrastructure at the NAS of Ukraine (OPENS)” for 2023—2024 (transcript of scientific report at the meeting of the Presidium of NAS of Ukraine, February 19, 2025). *Visn. Nac. Akad. Nauk Ukr.* 2025. (4): 69—73. <https://doi.org/10.15407/visn2025.04.069>
[Хіміч О.М. Про результати виконання цільового науково-технічного проекту НАН України «Створення і впровадження інфраструктури відкритої науки в НАН України (OPENS)» на 2023—2024 роки (стенограма доповіді на засіданні Президії НАН України 19 лютого 2025 р.). *Вісник НАН України*. 2025. № 4. С. 69—73.]

12. Merchant A. et al. Scaling deep learning for materials discovery. *Nature*. 2023. **624**: 80—85. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06735-9>
13. Szymanski N.J. et al. An autonomous laboratory for the accelerated synthesis of inorganic materials. *Nature*. 2023. **624**: 86—91. <https://doi.org/10.1038/s41586-023-06734-w>
14. Willcox K., Segundo B. The role of computational science in digital twins. *Nature Computational Science*. 2024. **4**: 147—149. <https://doi.org/10.1038/s43588-024-00609-4>
15. Qian J. et al. Digital Twin for Chemical Science: a case study on water interactions on the Ag(111) surface. *Nature Computational Science*. 2025. **5**: 793—800. <https://doi.org/10.1038/s43588-025-00857-y>
16. Robertson A.E. et al. Microstructure-based variational deep material networks for robust uncertainty quantification in materials digital twins. *npj Computational Materials (Nature Partner Journals)*. 2026. <https://doi.org/10.1038/s41524-026-02054-5>
17. Islam S. et al. FAIR digital twins for biodiversity: enabling data, model, and workflow integration. *npj Biodiversity (Nature Partner Journals)*. 2026. <https://doi.org/10.1038/s44185-025-00116-3>

Anatoly G. Zagorodny

National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-7953-6726>

Oleksandr O. Vasiliev

I.M. Frantsevich Institute for Problems of Materials Science of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-8358-7665>

Oleksii S. Milenin

Paton Electric Welding Institute of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-9465-7710>

Sergiy Ya. Svistunov

Bogolyubov Institute for Theoretical Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, Ukraine

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6502-4634>

Vitaly M. Shadura

Kyiv Academic University, Kyiv, Ukraine

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-6294-5606>

Andrii Yu. Shevchenko

Kyiv Academic University, Kyiv, Ukraine

ORCID: <https://orcid.org/0000-0001-7229-5395>

OPEN SCIENCE AT THE NAS OF UKRAINE: THE PATH FROM INFRASTRUCTURE TO PARTICIPATION IN THE EOSC FEDERATION

The article substantiates the strategy of participation of the National Academy of Sciences of Ukraine in the European Open Science Cloud (EOSC) Federation. A phased model of the formation of EOSC nodes with the participation of the NAS of Ukraine is proposed: from the first thematic nodes to the multidisciplinary node of the NAS of Ukraine and the creation of a federation of thematic, e-infrastructure and general academic nodes of the NAS of Ukraine. Such model preserves the autonomy of the nodes and opens up opportunities for their interaction with other nodes of the EOSC Federation, creating a basis for the coordination of interdisciplinary research at the national and European levels. As an example of the formation of the resource and service base of the future thematic EOSC node of the NAS of Ukraine, the authors consider the MATSCI-NASU project aimed at building a pilot EOSC node in materials science, which is being implemented by the institutes of the NAS of Ukraine within the framework of the EOSC Gravity competition. Special attention is paid to the experience of the Ukrainian National Grid, the concept of the Web of FAIR Data and Services, the architecture of the EOSC Federation, digital research environments, as well as the connection of FAIR data with the development of artificial intelligence, digital twins and e-technologies.

Keywords: Open Science, EOSC, EOSC Federation, FAIR data, NAS of Ukraine, DataverseUA, thematic nodes, research infrastructure, materials science, artificial intelligence, digital twins.

Cite this article: Zagorodny A.G., Vasiliev O.O., Milenin O.S., Svistunov S.Ya., Shadura V.M., Shevchenko A.Yu. Open Science at the NAS of Ukraine: the path from infrastructure to participation in the EOSC Federation. *Visn. Nac. Akad. Nauk Ukr.* 2026. (9): 7—22. <https://doi.org/10.15407/visn2026.09.007>