

ЗАТВЕРДЖУЮ
Проректор з наукової роботи
Київського національного університету
імені Тараса Шевченка
Галина ТОЛСТАНОВА
м.п.



КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН
виконання наукового дослідження і розробки на 2024 рік
«Вирішення сучасних проблем хімії, біомедицини, фізики та матеріалознавства з використанням центру високопродуктивних обчислень і машинного навчання»

Назва конкурсу: «Дослідницькі інфраструктури для проведення передових наукових досліджень»

№ етапу за Заявкою	Назва етапу виконання Проєкту	Цілі ЕВП	Заплановані завдання для ЕВП	Термін виконання (початок-завершення), місяць, рік	Індикатори виконання (науковий або інший результат, який буде отримано в межах етапу. Має відповідати і узгоджуватись з п. 5.1 ТЗ і подано у більш узагальненому вигляді. Подаються у вигляді якісно-кількісних показників)
1	Симуляції експериментів з розпаду динуклонних систем (динейтрон). напрацювання методів і підходів до прогнозування теплофізичних властивостей матеріалів і структур різної розмірності та	Виконання симуляції експериментів з розпаду динуклонних систем (динейтрон) із застосуванням кодів GEANT, TALYS і Phyton скриптів, використовуючи машинне навчання, та	Завдання 1.1 Розробка моделі спектрометру для спостереження динейтрону з використанням кодів GEANT, TALYS, а також налагодження взаємодії розрахунків на базі Python скриптів. Підготовка програмних кодів для молекулярно-динамічного моделювання процесів теплового транспорту в твердотільних структурах, виконання тестових розрахунків коефіцієнта теплопровідності модельних наноструктур. Отримання даних спостережень	серпень 2024 – грудень 2024	Індикатор 1. Звітна документація (Звіт про проміжні результати реалізації проєкту, висновок Консультаційної ради проєкту). Результати тестування у вигляді звіту. Модель спектрометру для спостереження динейтрону з використанням кодів GEANT, TALYS. Дані спостережень віддалено гамма- та нейтринних телескопів.

	<p>морфології, інтеграція VIRGO.UA у платформу Multi-Messenger Online Data Analysis</p>	<p>проведення обробки й оптимізації відбору подій для визначення параметрів розпаду динейтрона, проведення теоретичного моделювання опису процесів розпаду двонуклонних систем динейтрона. Напрацювання методів і підходів до прогнозування теплофізичних властивостей матеріалів і структур різної розмірності та морфології, що стане фундаментом для підвищення наукового рейтингу команди виконавців і передумовою їхньої подальшої участі в престижних конкурсах наукових проєктів.</p> <p>- Інтеграція VIRGO.UA у</p>	<p>віддалено гамма- та нейтринних телескопів, для побудови фізичних моделей прискорення космічних променів та генерування багатоканальних сигналів від астрофізичних джерел (таких як Cygnus X та MGRO J1908+06). (KP3)</p> <p>Завдання 2.1 Встановлення та тестування пакетів квантово-хімічних та програм для молекулярної механіки та динаміки, забезпечення віддаленого доступу до них, підготовка вхідних завдань. (KP4)</p> <p>Встановлення комерційних пакетів програм та пакетів із безкоштовною ліцензією на комп'ютерний кластер. Підготовка та виконання серії розрахункових тестів. Оцінка продуктивності вузлів кластера та створення оптимального режиму доступу та виділення ресурсів для окремих класів задач із врахуванням умов ліцензій. Проведення тестових розрахунків структур реальних молекул в різних наближеннях. Підготовка вхідних даних для виконання завдань 4.2-4.4.</p> <p>Завдання 3.1 Розроблення методів тонкого налаштування великих мовних моделей для виконання низки прикладних задач. (KP5)</p> <p>Тонке налаштування великих мовних моделей є відносно простішою задачею, аніж побудова великих мовних моделей, тому виконання цих робіт доцільно планувати на перший етап проєкту. За базові мовні моделі будуть взяті</p>
--	---	---	--

Індикатор 2. Встановлені та протестовані пакети квантово-хімічних та програм для молекулярної механіки та динаміки.

Встановлені комерційні пакети програм та пакетів із безкоштовною ліцензією на комп'ютерний кластер.

Результати тестових розрахунків структур реальних молекул в різних наближеннях.

Індикатор 3. Методи тонкого налаштування великих мовних моделей для виконання низки прикладних задач.

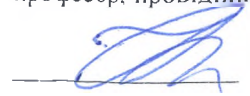
Прикладні програми, результати тестування.

<p>платформу Multi-Messenger Online Data Analysis (MMODA, https://www.astro.unige.ch/mmoda/) та отримання мінімального доступу до European Open Science Cloud (EOSC) чи його підструктур. VIRGO.UA виступатиме у ролі української сполучної ланки для MMODA. Центр буде залученим до віртуального доступу та обслуговувати веб-сервер, який дублює послуги з доступу до архівів даних та аналізу даних, а також моделювання від MMODA.</p>	<p>наявні (BERT, GPT і т.п.). Роботи складаються із побудови навчальних наборів даних, відповідних прикладним задачам, навчання моделі та проведення експериментів із замірювання якості роботи моделі. Результатом цього етапу, окрім самих оптимізованих методів налаштування, буде низка прикладних програм обробки текстів, таких як системи класифікації та розпізнавання текстів пропаганди, недостовірних новин (fake-news) та інші.</p> <p>Завдання 4.1 Запускові та тестові роботи по комплектації комп'ютерного кластеру. Проектування змін до архітектури обчислювального кластера ІОЦ з урахуванням встановлення нових вузлів зберігання даних, вузлів віртуалізації та обчислювальних вузлів. Розробка, тестування та впровадження політик, системного програмного забезпечення та його конфігурації для забезпечення колективного використання нового типу вузлів з графічними прискорювачами. Встановлення та тестування коректної роботи у конкурентному режимі використовуваного у проєкті прикладного програмного забезпечення. Проектування та реалізація схеми розміщення обладнання для забезпечення рівномірного навантаження на системи енергоживлення та забезпечення температурного режиму роботи обладнання. (KPI)</p>
--	--

Індикатор 4. Проєкт змін до архітектури обчислювального кластера ІОЦ з урахуванням встановлення нових вузлів зберігання даних, вузлів віртуалізації та обчислювальних вузлів. Спроектвані та реалізовані схеми розміщення обладнання для забезпечення рівномірного навантаження на системи енергоживлення та забезпечення температурного режиму роботи обладнання.

			Завдання 5.1 Проведення установчої зустрічі з визначення порядку дії, підписання угод про нерозголошення. Проведення зустрічі з Консультативною радою. (KP2)		Індикатор 5. Буде проведено установчу зустріч з визначення порядку дії, та буде підписано одну (1) угоду про нерозголошення
--	--	--	--	--	---

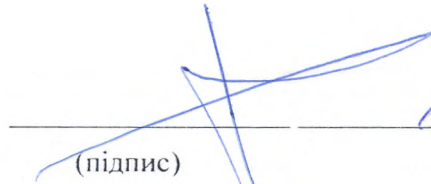
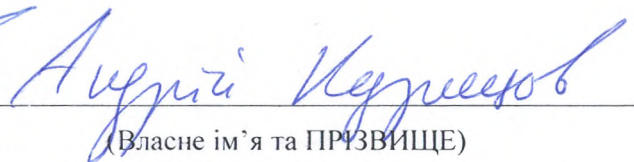
Науковий керівник Проєкту
Директор Навчально-наукового інституту високих технологій.
професор, провідний науковий співробітник



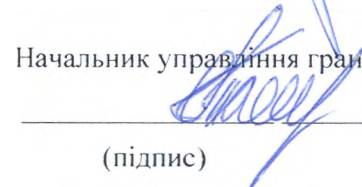
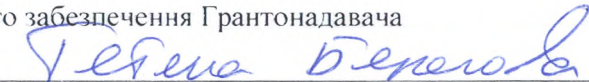
Ігор КОМАРОВ

ПОГОДЖЕНО:

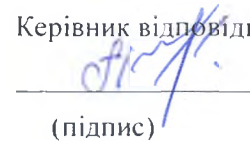
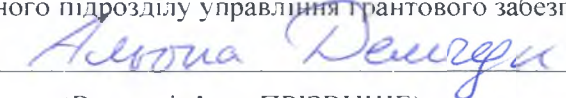
Перший заступник виконавчого директора з питань грантової підтримки Грантонадавача

 (підпис)  (Власне ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

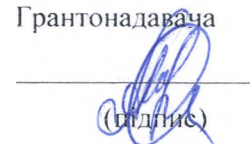
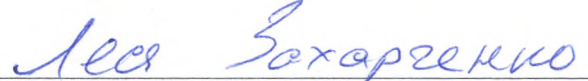
Начальник управління грантового забезпечення Грантонадавача

 (підпис)  (Власне ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

Керівник відповідного структурного підрозділу управління грантового забезпечення Грантонадавача

 (підпис)  (Власне ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

Головний спеціаліст відповідного структурного підрозділу управління грантового забезпечення Грантонадавача

 (підпис)  (Власне ім'я та ПРІЗВИЩЕ)