КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА
01033, м. Київ, вул. Володимирська, 60, тел. 239-33-33

ПОГОДЖУЮ
Проректор з наукової роботи
Київського національного
університету імені Тараса Шевченка

Ганна ТОЛСТАНОВА

ПРОМІЖНИЙ ЗВІТ
(анотований звіт)
про виконану роботу в рамках реалізації проєкту
з виконання наукових досліджень і розробок
«Вирішення сучасних проблем хімії, біомедицини, фізики та матеріалознавства з використанням центру високопродуктивних обчислень і машинного навчання»

Науковий керівник проєкту Ігор КОМАРОВ

Рік завершення, номер етапу 2024, етап №1

Підготовку звіту завершено 13 грудня 2024 р.

1. **Назва конкурсу** «Дослідницькі інфраструктури для проведення передових наукових досліджень»
2. **Номер державної реєстрації проєкту №** 2023.05/0024, РК № 0124U003762
3. **Номер Договору про надання грантової підтримки** від 01 серпня 2024 року **№** 234/0024
4. **Підстава для реалізації проєкту з виконання наукового дослідження і розробки**
   Рішення наукової ради Національного фонду досліджень України
   протокол від 27 червня 2024 року № 20
5. **Найменування організації/установи грантоотримувача** Київський національний університет імені Тараса Шевченка
6. **Власне ім'я та ПРІЗВИЩЕ наукового керівника проєкту** Ігор КОМАРОВ
7. **Місце основної роботи та посада наукового керівника проєкту** Навчально-науковий Інститут високих технологій Київського національного університету імені Тараса Шевченка, директор
8. **Терміни та тривалість виконання проєкту:**
   Тривалість проєкту 29 місяців
   Початок 01.08.2024
   Закінчення 31.12.2026
   Тривалість звітного етапу 5 місяців
   Початок 01.08.2024
   Закінчення 31.12.2024
9. **Обсяги фінансування проєкту:**
   Загальний обсяг фінансування:
   за заявкою на отримання грантової підтримки 30 000 000,00 грн
   за рішенням наукової ради НФДУ 30 000 000,00 грн
   Обсяг фінансування звітного етапу:
   за заявкою на отримання грантової підтримки 5 000 000,00 грн
   за договором на отримання грантової підтримки 5 000 000,00 грн
   фактичний 4 994 012,60 грн
10. **Перелік виконавців з оплатою праці**

№ з/п	Прізвище, ім'я, науковий ступень, вчене звання	Основне місце роботи або навчання	Наявність статусу молодого вченого (на момент подачі звіту)	Посада за проєктом	Форма залучення виконавця (договір ЦПХ, строковий трудовий договір)	Основні завдання у проєкті (стисло окреслити функції)	Особистий підпис
1	Комаров Ігор, доктор хімічних наук, професор	Київський національний університет імені Тараса Шевченка		Науковий керівник (провідний науковий співробітник)	договір ЦПХ	Загальне наукове керівництво, адміністрування проєкту, взаємодія з консультаційною радою, проведення та організація комунікаційних заходів	13.12.2024
2	Роженко Олександр, доктор хімічних наук, ст. наук.	Інститут органічної хімії Національної академії		Виконавець (старший науковий співробітник)	договір ЦПХ	Керівник групи теоретичної хімії, хемо- та біоінформати	13.12.2024

	співроб.	наук України				ки	
3	Плюйко Володимир, доктор фізико-математичних наук, доцент	Київський національний університет імені Тараса Шевченка		Виконавець (старший науковий співробіт-ник)	договір ЦПХ	Наукове керування підрозділом фізичної групи, Проведення розрахунків параметрів напівпровідн икових структур з використання м методу символьної регресії, аналіз даних та підготовка публікацій.	13.12.2024
4	Марченко Олександр, доктор фізико-математичних наук, професор	Київський національний університет імені Тараса Шевченка		Виконавець (старший науковий співробіт-ник)	договір ЦПХ	Розроблення методів тонкого налаштуванн я великих мовних моделей для виконання низки прикладних задач.	13.12.2024
5	Рябухін Сергій, доктор хімічних наук, професор	Київський національний університет імені Тараса Шевченка		Виконавець (старший науковий співробіт-ник)	договір ЦПХ	Проведення дослідження в галузі теоретичної хімії та хемоінформа тики	13.12.24
6	Волочнюк Дмитро, доктор хімічних наук, професор	Інститут органічної хімії Національ-ної академії наук України		Виконавець (старший науковий співробіт-ник)	договір ЦПХ	Проведення дослідження в галузі теоретичної хімії та хемоінформа тики	13.12.24
7	Нипорко Олексій, кандидат біологічних наук, доцент	Київський національний університет імені Тараса Шевченка		Виконавець (старший науковий співробіт-ник)	договір ЦПХ	Проведення дослідження в галузі біоінформати ки	13.12.2024
8	Безшийко Олег, кандидат фізико-математичних наук, доцент	Київський національний університет імені Тараса Шевченка		Виконавець (старший науковий співробіт-ник)	договір ЦПХ	Проведення дослідження в галузі фізики ядра, елементарних частинок та високих енергій і медичної фізики	13.12.24
9	Гнатик	Київський		Виконавець	договір	Проведення	

	Богдан, доктор фізико-математичних наук, професор	національний університет імені Тараса Шевченка		(старший науковий співробітник)	ЦПХ	досліджень з математичного моделювання магнітогідродинамічних процесів в космічний плазмі з використанням MMODA-платформи для доступу до європейських хмарних обчислень.	13.12.2024
10	Оліх Олег, доктор фізико-математичних наук, професор	Київський національний університет імені Тараса Шевченка		Виконавець (старший науковий співробітник)	договір ЦПХ	Підготовка програмних кодів для молекулярно-динамічного моделювання процесів теплового транспорту в твердотільних структурах, виконання тестових розрахунків коефіцієнта теплопровідності модельних наноструктур	13.12.2024
11	Курилюк Василь, кандидат фізико-математичних наук, доцент	Київський національний університет імені Тараса Шевченка		Виконавець (старший науковий співробітник)	договір ЦПХ	Дослідження молекулярно-динамічного моделювання процесів теплового транспорту в твердотільних структурах. Підготовка програмних кодів для молекулярно-динамічного моделювання процесів теплового транспорту в твердотільних структурах, виконання тестових розрахунків коефіцієнта теплопровідності модельних наноструктур	13.12.24

12	Горбаченко Олександр, кандидат фізико-математичних наук	Київський національний університет імені Тараса Шевченка		Виконавець (старший науковий співробіт-ник)	договір ЦПХ	Проведення розрахунків на кодах TALYS, EMPIRE, GEANT та написання Python скриптів для симуляції експерименту Аналіз розрахунків, підготовка матеріалів до публікацій.	13.12.2024
13	Сахно Надія, кандидат технічний наук	Київський національний університет імені Тараса Шевченка		Виконавець (старший науковий співробіт-ник)	договір ЦПХ	Математична обробка результатів, статистична обробка експериментальних даних, забезпечення контролю якості виконання частини проекту фізичної групи.	13.12.2024
14	Завадський Ігор, доктор фізико-математичних наук, доцент	Київський національний університет імені Тараса Шевченка		Виконавець (старший науковий співробіт-ник)	договір ЦПХ	Розробка великих лінгвістичних моделей та їх навчання, програмування, проведення експериментів, підготовка звітів, публікацій та матеріалів на конференції.	13.12.2024
15	Тарануха Володимир, кандидат фізико-математичних наук	Київський національний університет імені Тараса Шевченка		Виконавець (молодший науковий співробіт-ник)	договір ЦПХ	Розробка великих лінгвістичних моделей та їх навчання, пошук та підготовка наборів даних та текстових корпусів для навчання моделей, програмування, проведення експериментів, підготовка звітів, публікацій та матеріалів на	13.12.2024

						конференції	
16	Бойко Юрій, кандидат фізико-математичних наук, доцент	Київський національний університет імені Тараса Шевченка		Виконавець (старший науковий співробіт-ник)	договір ЦПХ	Проектування змін до архітектури обчислювального кластера ІОЦ з урахуванням встановлення нових вузлів зберігання даних, вузлів віртуалізації та обчислювальних вузлів	13.12.24
17	Судаков Олександр, кандидат фізико-математичних наук, доцент	Київський національний університет імені Тараса Шевченка		Виконавець (старший науковий співробіт-ник)		Розробка, тестування та впровадження політик, системного програмного забезпечення та його конфігурації для забезпечення колективного використання нового типу вузлів з графічними прискорювачами	13.12.2024
18	Слюсар Євген, кандидат технічних наук	Київський національний університет імені Тараса Шевченка	Молодий вчений	Виконавець (молодший науковий співробіт-ник)	договір ЦПХ	Встановлення та тестування коректної роботи у конкурентному режими використовуваного у проекті прикладного програмного забезпечення	13.12.24
19	Борецький Олександр, кандидат технічних наук	Київський національний університет імені Тараса Шевченка	Молодий вчений	Виконавець (молодший науковий співробіт-ник)	договір ЦПХ	Проектування та реалізація схеми розміщення обладнання для забезпечення рівномірного навантаження на системи енергоживлення та забезпечення температурного режиму роботи обладнання.	3.12.24

11. **Стислий зміст проєкту** *(актуальність, мета, основні завдання, ідеї, гіпотези тощо до 20 рядків)*

Актуальність. Сучасні наукові дослідження сьогодні важко собі уявити без застосування комп'ютерних технологій, тому створення інфраструктури, що дозволить підвищити рівень використання комп'ютерних технологій в дослідженнях в Україні є актуальною задачею.
Мета проєкту. Даним проєктом передбачається створення нової дослідницької інфраструктурної одиниці – потужного комп'ютерного кластера Київського національного університета імені Тараса Шевченка (далі – КНУТШ), обладнаного пакетами програм, та проведення на ньому наукових досліджень в галузі фізики ядра, елементарних частинок, високих енергій, хемо- та біоінформатики, штучного інтелекту та комп'ютерної лінгвістики.
Основні завдання, ідеї, гіпотези: отримання характеристик спектрометра для проведення експерименту з розпаду динейтрону через канал електронного розпаду в дейтрон; використання потенціалів міжатомної взаємодії, параметризованих методами машинного навчання, для молекулярно-динамічного моделювання процесів теплового транспорту в різних матеріалах; дослідження в астрофізиці високих енергій у напрямі гравітаційно-хвильової та нейтринної астрономії з реєстрацією подій одночасно в різних спектральних діапазонах та через різні канали спостережень; квантовохімічні дослідження нових класів органічних молекул – потенційних будівельних блоків для медичної хімії та агрохімії; комп'ютерний аналіз взаємодії хімічних сполук з біологічними мішенями; розробка, адаптація та тонке налаштування великих нейронних лінгвістичних моделей і прикладних систем на їх основі; оптимізація обчислювальних процесів, генерація зв'язних текстів заданого змісту, а також розпізнавання в текстах та соцмережах пропаганди, фейків.

12. **Основні результати виконання попереднього етапу** *(за наявності, до 20 рядків)* -
13. **Номер та назва звітного етапу** *(за наявності)* Етап № 1 Симуляції експериментів з розпаду динуклонних систем (динейтрон), напрацювання методів і підходів до прогнозування теплофізичних властивостей матеріалів і структур різної розмірності та морфології, інтеграція VIRGO.UA у платформу Multi-Messenger Online Data Analysis

14. **Опис процесу реалізації проєкту** *(опишіть хід виконання, які дослідження проводились, які методики використовувались, які гіпотези вдалось довести/спростувати тощо, до 50 рядків)*

Організаційна робота. На початку реалізації проєкту була проведена перша організаційна зустріч виконавців (kick-off meeting); подальша організація роботи і координація робіт проводилася шляхом тісного спілкування між учасниками, як безпосереднього, так і через соцмережу (Вайбер). Конкретні технічні проблеми розв'язувалися протягом коротких нарад (було проведено 3 наради). 19.11.2024 відбулася зустріч з членами Консультаційної Ради проєкту, провідними вченими, на якій обговорено результати проєкту на той момент і подальші плани. Створено веб-сайт проєкту.
Організація закупівель. Для закупівлі обладнання і устаткування, що планувалося за проєктом, було отримано дозвіл Мінцифри, оголошено державні торги через систему ProZorro, проведено аукціон, визначено переможців торгів і укладено з ними договори на постачання обладнання. На середину грудня 2024 року все заплановане обладнання було замовлене КНУТШ, у повній відповідності до списку, що фігурує в заявці, в межах запланованих коштів. Здійснено проєктування та розпочата реалізація схеми розміщення обладнання для забезпечення рівномірного навантаження на системи енергоживлення та забезпечення температурного режиму роботи обладнання, а також запускові та тестові роботи по комплектації комп'ютерного кластеру. Спроєктовано зміни до архітектури існуючого обчислювального кластера ІОЦ з урахуванням встановлення нових вузлів зберігання даних, вузлів віртуалізації та обчислювальних вузлів.
Наукові дослідження. Оскільки на даному етапі нове обладнання проходить процедуру закупівлі, тестування та налаштування, наукові дослідження складалися з підготовчих робіт

(вибір об’єктів для подальшої роботи, збір та підготовка даних для обчислень), а також тестові обчислення на існуючому комп’ютерному кластері КНУТШ. Зокрема, здійснювалася розробка моделі спектрометру для спостереження динейтрону з використанням кодів GEANT, TALYS, а також налагодження взаємодії розрахунків на базі Python скриптів: симуляція в коді GEANT спектрометру та розрахунок в коді TALYS перерізів ядерних реакцій для спостереження динейтрону; порівняння баз даних параметрів квадрупольної деформації атомних ядер в різних збуджених станах та аналіз аналітичних виразів для енергії низькорозташованого ядерного стану; отримано дані спостережень нейтринних телескопів для побудови фізичних моделей прискорення космічних променів та генерування багатоканальних сигналів від астрофізичних джерел (таких як Cygnus X та MGRO J1908+06); почалася інтеграція VIRGO.UA в платформу Multi-Messenger Online Data Analysis (MMODA); проведена підготовка програмних кодів для молекулярно-динамічного моделювання процесів теплового транспорту і транспорту частинок іонізуючого випромінювання в твердотільних структурах, виконання тестових розрахунків коефіцієнта теплопровідності модельних наноструктур; тестувано програмне забезпечення, призначене для виконання квантово-хімічних розрахунків (пакети ORCA та TURBOMOLE); проведене квантово-хімічні розрахунки термодинамічних характеристик реакцій незаміщених метилакрилатів із діазометаном та структури продуктів їх взаємодії; здійснена валідація результатів квантово-механічних розрахунків та оптимізація розрахункових моделей для реакції циклопропанування алкенів за допомогою діазометану експериментальним шляхом; встановлено та тестовано пакети програм для молекулярної механіки та динаміки, забезпечено віддалений доступ до них, здійснювалася підготовка вхідних завдань; проведена кросвалідація моделей нейронних мереж для розпізнавання фейкових новин; здійснювалося розроблення моделі для побудови прикладних систем класифікації текстів.

15. Результати виконання звітного етапу відповідно до Технічного завдання до проміжного етапу проєкту з виконання наукового дослідження і розробки / Календарного плану виконання наукового дослідження і розробки:

15.1. Заплановані завдання звітного етапу проєкту *(перерахуйте завдання звітного етапу, окреслені у Календарному плані виконання наукового дослідження і розробки, до 20 рядків)*

Завдання 1.1 Розробка моделі спектрометру для спостереження динейтрону. Підготовка програмних кодів для молекулярно-динамічного моделювання процесів теплового транспорту в твердотільних структурах, виконання тестових розрахунків коефіцієнта теплопровідності модельних наноструктур. Отримання даних спостережень віддалено гамма- та нейтринних телескопів, для побудови фізичних моделей прискорення космічних променів та генерування багатоканальних сигналів від астрофізичних джерел.

Завдання 2.1 Встановлення та тестування пакетів квантово-хімічних та програм для молекулярної механіки та динаміки, забезпечення віддаленого доступу до них, підготовка вхідних завдань. 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 2.2-2.4.

Завдання 3.1 Розроблення методів тонкого налаштування великих мовних моделей для виконання низки прикладних задач.

Завдання 4.1 Запускові та тестові роботи по комплектації комп'ютерного кластеру

Завдання 5.1 Проведення установчої зустрічі з визначення порядку дії, підписання угод про нерозголошення. Проведення зустрічі з Консультативною радою.

15.2. Отримані результаті звітного етапу проєкту *(опишіть отримані результати виконавцями протягом звітного етапу, посилаючись на заплановані та досягнуті цілі, задачі*

та індикатори виконання, задані в Технічному завданні до проміжного етапу проєкту з виконання наукового дослідження і розробки / Календарному плані виконання наукового дослідження і розробки. Включіть посилання на публікації у наукових виданнях, інші показники з п. 18, що є підтвердженням досягнення індикаторів виконання етапу, до 70 рядків)

Завдання 1.1. Для покращення алгоритму обчислення ймовірностей гамма-переходів в атомних ядрах з врахуванням двох збуджених ядерних станів, що необхідно для модифікації коду TALYS, було виконано порівняння значень параметрів квадрупольної деформації атомних ядер в різноманітних станах. Були обчислені значення квадрупольних деформацій у високозбудженому стані гігантського дипольного резонансу (ГДР). Також були обчислені енергії низькорозташованого ядерного стану з використанням аналітичних виразів. Результати порівнювалися з мікроскопічними обчисленнями для ізотопів Ni, Sn, Pb, які збігалися з екпериментальними даними. Отримані аналітичні вирази для фотонних силових функцій з використанням функцій відгуку та досліджені параметри фотонних силових функцій, проведена підготовка програмних кодів для моделювання процесів транспорту частинок іонізуючого випромінювання в твердотільних структурах, тестування програмних кодів для паралельної роботи на робочих станціях для моделювання процесів транспорту частинок іонізуючого випромінювання в твердотільних структурах та підготовка програмних кодів для молекулярно-динамічного моделювання процесів теплового транспорту, електричної взаємодії та масопереносу, дослідження модельних наноструктур детекторних систем. Було проведено інсталяцію програмного пакету молекулярної динаміки LAMMPS (https://www.lammps.org), виконано його налаштування та підготовлено програмні коди для виконання розрахунків коефіцієнта теплопровідності твердотільних структур методом рівноважної молекулярної динаміки. На основі розроблених програмних кодів було виконано тестові розрахунки коефіцієнта теплопровідності наноструктур на основі кремнію, що включали нанонитки Si та твердого розчину SiGe. Встановлено, що з ростом температури теплопровідність кремнієвої нанонитки монотонно зменшується, тоді як для структури на основі твердого розчину SiGe – залишається приблизно сталою в інтервалі температур 300К-1000 К. Обсерваторія VIRGO створила гамма-базу даних спостережень активних гамма-телескопів (Fermi-LAT, H.E.S.S., HAWC) за областями неба навколо потужних джерел гамма-випромінювання Cygnus X і MGRO J1908+06. Також почалася інтеграція VIRGO.UA в платформу MMODA (https://www.astro.unige.ch/mmoda/) для отримання доступу до EOSC. За матеріалами досліджень були зроблені доповіді на конференцях (з подякою НФДУ).

Завдання 2.1 Встановлені на комп’ютер та випробувані пакети квантово-хімічних програм ORCA та TURBOMOLE. Використовуючи ці пакети, проведене дослідження кінетичних та термодинамічних характеристик взаємодії діазометану з серією метилакрилатів. Показано, що регіоселективне [3+2]-циклоприєднання є кінетично контрольованим процесом і приводить до утворення виключно одного продукту через асинхронний узгоджений механізм реакції. Квантово-хімічними методами (в наближенні DFT, M06-2X/def2-TZVP) досліджено механізм спонтанної ізомеризації 1-піразолінів, які мають атом водню в положенні 3. Тривіальна міграція протону із положення 3 (атом вуглецю) в положення 1 (атом азоту), очевидно, не відбувається через спрогнозовані високі активаційні бар’єри відповідної реакції. В той же час, в разі участі в реакції основи (наприклад, іншої молекули піразоліну), очікувані енергії активації є значно нижчими і узгоджуються із спонтанним проходженням реакції навіть при низькій температурі. Підготовлені дані і проведено квантово-механічні розрахунки для встановлення механізму реакції взаємодії діазометану з різноманітними алкенами, підібрано та синтезовано набір алкенів з усіма можливими варіаціями замісників для вивчення їх впливу на реакційну здатність, регіо- та стереохімію процесу. Проведено низку тестових реакцій по підбору умов для оптимального перебігу останніх. Проведено оптимізацію розрахункової моделі. Було інстальовано та протестовано програмне забезпечення GROMACS версій 2018.8, 2021.5 та 2024.2. для розрахунків молекулярної динаміки великих модельних систем в атомному

масштабі, а також комбінованих QM/MM (квантова механіка/молекулярна механіка) розрахунків. Як тестові вхідні завдання були підготовлені задачі для розрахунку молекулярної динаміки мускаринових рецепторів ацетилхоліну 2 типу, інтегрованих у фрагмент мембрани, та цитохромів P450 в умовах, що реалістично відтворюють клітинне оточення. Також було розпочато встановлення та тестування програмного забезпечення AMBER та тестування віддаленого доступу до обчислювальних ресурсів за допомогою протоколів SSH та SFTP. Було протестовано програмне забезпечення Gaussian версій 2009 E.01, 2016 A.03 та 2016 C.01. Як тестові вхідні завдання були підготовлені задачі для розрахунку енергії системи в одиничній точці, оптимізації геометрії досліджуваних систем, розрахунку коливальних спектрів, пошуку перехідних станів та ab initio молекулярної динаміки. Механічна частина досліджуваних систем розраховувалась з використанням силових полів UFF та Amber, які комбінувалися з різними вищезазначеними функціоналами. При виконанні тестових завдань повідомлення про помилки або некоректні структурні та/або термодинамічні параметри досліджуваних систем були відсутні.

Завдання 3.1 Зусилля були зосереджені на отриманні даних для визначення стилістичних відтінків та особливостей мови, а також маркування даних для визначення ознак фактичної некоректності. Мета аналізу – знайти маркери невірності фактів, а також сприйняття та несприйняття ключових повідомлень, маркери пропаганди, мови ворожнечі та насильства тощо. Створено набори даних для розроблення прикладних систем класифікації – тексти, які містять фейкові новини та елементи ворожої пропаганди. Ці елементи тексту позначені вручну. Наші набори даних складаються з текстів англійською та українською мовами.

Розроблення моделі для побудови прикладних систем класифікації текстів складалося з двох етапів: вибору та аналізу оптимальної базової архітектури трансформера; тонкого налаштування базової моделі до прикладної задачі за відповідними цільовими наборами даних. Для вибору базової архітектури було досліджено низку великих мовних моделей типу Bert: BERT, ALBERT, DistilBERT, BART, ELECTRA, MobileBERT, RoBERTa. В якості базового варіанту архітектури була обрана google-bert/bert-base-uncased. Для точного налаштування під прикладну задачу класифікації текстів були використані спеціально заготовлені корпуси текстів, що містять приклади fake-news та елементи пропаганди. При навчанні використано оптимізатор параметрів моделі AdamW. Додатково було використано лінійний розклад зменшення швидкості навчання протягом всіх епох навчання. Навчання проводилось партіями розміром 32 тексти за крок. В якості функції оцінки при навчанні було використано CrossEntropyLoss.

Завдання 4.1 Спроєктовано схему розміщення обладнання з урахуванням високого енергоспоживання нових вузлів із графічними прискорювачами. Проаналізовано потоки повітря, наявні засоби кондиціонування та температурні режими в серверній кімнаті та визначено оптимальні місця для встановлення нового обладнання з урахуванням рівномірного охолодження. Відповідно до проєкту, проведено монтажно-запускові роботи першої черги новоствореного кластеру. Нова схема розміщення передбачає поділ обладнання на дві симетричні групи, які включають нові обчислювальні вузли, старі обчислювальні вузли та вузли які забезпечують сервісну інфраструктуру. Також група обладнання включає мережеві компоненти та засоби комутації. Кожна з груп розміщена у окремій серверній стійці. У стійці обладнання розміщено рівномірно з встановленням більш теплонавантажених серверів у нижній частині для кращої конвекції охолоджуючого повітря. Підхід з використанням двох симетричних стійок дозволяє проводити сервісне обслуговування почергово залишаючи половину ресурсів у доступному для користувачів стані.

Завдання 5.1 Проведена організаційна зустріч виконавців (kick-off meeting); 19.11.2024 року відбулася зустріч з членами Консультаційної Ради проєкту, провідними вченими, на якій обговорено результати проєкту і подальші плани. Підписано угоду про нерозголошення.

15.3. Відхилення від Календарного плану виконання наукового дослідження і розробки (за наявності) *(вкажіть та детально обґрунтуйте можливі відхилення від Технічного завдання до проміжного етапу проєкту з виконання наукового дослідження і розробки / Календарного плану виконання наукового дослідження і розробки, до 30 рядків)* **немає**

16. Наукова цінність і актуальність отриманих результатів *(науково-технічної продукції), їх порівняння з українськими та/або кращими закордонними аналогами, до 30 рядків)*

На даному етапі виконання проєкту проводиться валідація методів дослідження, підготовка даних для розрахунків. Отримані наукові дані стосуються лише фізики ядра і високих енергій (див. вище посилання на матеріали доповідей на конференціях). Ці дослідження проведено на рівні найкращих вітчизняних та закордонних аналогів.

17. Практична цінність результатів для потреб оборони, безпеки, економіки та/або суспільства України *(у разі наявності, до 30 рядків)*

На даному етапі виконання проєкту про практичну цінність результатів для потреб оборони, безпеки, економіки та/або суспільства України говорити поки що рано.

18. Основні кількісні індикатори виконання звітного етапу *(у таблиці мають бути відображені індикатори, які було заплановано в Технічному завданні до проміжного етапу проєкту з виконання наукового дослідження і розробки із зазначенням відповідного фактичного кількісного виконання цих індикаторів. Якщо у Технічному завданні до проміжного етапу проєкту з виконання наукового дослідження і розробки кількісні показники не планувались, то у таблиці відображаються лише показники у разі їх наявності / виконання)*

№ з/п	Індикатори виконання	Заплановано (відповідно до КП), кількість	Фактично отримано (відповідно до КП), кількість
1.	**Публікація результатів:**		
1.1.	Статті у журналах, що індексуються наукометричними базами даних:		
	- Scopus та/або Web of Science Core Collection, всього, од.		
	з них із квартилем Q1 і Q2 на момент опублікування, од.		
	з них із квартилем Q3 і Q4 на момент опублікування, од.		
1.2.	Статті у наукових журналах (без квартилю), збірниках наукових праць, матеріалах конференцій тощо, що індексуються наукометричними базами даних Scopus або Web of Science Core Collection (крім тих, що увійшли до п.1.1) , од.		
1.3.	Статті у фахових виданнях України категорії		

	«Б» , од.		
1.4.	Статті у періодичних виданнях інших країн, що мають ISSN, од.		
1.5.	Публікації у матеріалах конференцій, тезах доповідей та виданнях, що не включені до переліку наукових фахових видань України та не індексуються наукометричними базами даних Scopus або Web of Science Core Collection, од.		
1.6.	Монографії та розділи монографій, опубліковані (або підготовлені і подані до друку) у закордонних видавництвах іноземними мовами, од.		
1.7.	Монографії та розділи монографій, опубліковані (або підготовлені і подані до друку) в українських видавництвах, од.		
1.8	Словники, довідники, енциклопедії, видані українськими та/або закордонними видавництвами , од.		
1.9	Інші публікації, які не описані у пп. 1.1-1.8, од.		
2.	**Презентація та дисемінація результатів:**	3	7
2.1.	Міжнародні науково-комунікативні заходи, конференції, од.	1	4
2.2.	Всеукраїнські та регіональні науково-технічні/промислові виставкові заходи, од.		
2.3.	Представлення розробки/бізнес-плану/результатів проєкту на:		
	інноваційних фестивалях, од.		
	конкурсах стартапів, од.		
	акселераційних програмах, од.		
	хакатонах, од.		
2.4.	Науково-популярні публікації з метою поширення інформації про результати проєкту для загальної (широкої) аудиторії, од.	0	1
2.5.	Представлення інформації про результати проєкту на науково-популяризаційних заходах (Дні науки, Наукові пікніки тощо) , од.	2	2
2.6.	Інші заходи, які не описані у пп. 2.1-2.5, од.		
3.	**Охоронні документи на об'єкти права інтелектуальної власності (ОПІВ)**		
3.1.	Отримано патентів України на винахід, од.		
3.2.	Отримано свідоцтв України на промисловий		

	зразок , од.		
3.3.	Отримано патентів України на корисну модель, од.		
3.4	Отримано охоронний документ на ОПІВ інших країн, од.		
3.5	Інші ОПІВ, які не описані у пп. 3.1-3.4, од.		
3.6	Подано заявок на отримання охоронного документу на ОПІВ України та /або інших країн, од.		
4.	**Впровадження та використання наукових або науково-практичних результатів:**		
4.1.	Підписання (укладання) договорів (угод) на впровадження (використання) результатів проєкту (окрім індивідуальних), серед них:		
4.1.1	Господарських договорів/контрактів, од./тис.грн.		
4.1.2	Ліцензійних договорів/договорів на ноу-хау, од./тис.грн.		
4.1.3	Грантових угод, од./тис.грн.		
4.1.4	Інші договори (угоди), які не описані у пп. 4.1.1-4.1.3, од./тис. грн.		
4.4	Документально підтверджено використання результатів у практиці органів державної/місцевої влади, суспільних практиках тощо, од.		
4.5	Проведено маркетингові дослідження, перемовини з потенційними замовниками із підписанням протоколу (меморандуму, угоди) про наміри комерційного впровадження результатів, од.		
4.6	Подано заявок на державні, міжнародні наукові гранти (окрім індивідуальних) , од.		
5.	**Створено чи істотно удосконалено/покращено існуючі:**	3	3
5.1.	Пристрої (макет, експериментальний/дослідний зразок) , од.	1	1
5.2.	Матеріали, процеси, технології, технологічні регламенти, цифрові продукти та електронні сервіси, од.	2	2
5.3.	ТУ, ДСТУ, будівельні норми, зареєстровані проєкти законодавчих актів, од.		
5.4.	Наукові (науково-технічні) послуги, од.		
5.5	Іншу продукцію, яка не описана у пп. 5.1-5.4, од.		

19. **Відхилення від запланованих індикаторів, зазначених у п. 18** *(у разі наявності зазначити і обґрунтувати причини таких відхилень та їх вплив на подальше виконання проєкту, до 20 рядків)* **Немає**

20. **Вихідні дані щодо показників виконання відповідно до п. 18** *(зазначити дані про публікації, конференції, отримання ОПІВ, впровадження, створення НТП, залучення молодих вчених тощо з додаванням Web-посилання (за наявності) на ресурси, де вони розміщенні)*

Презентація та дисемінація результатів:

Міжнародні науково-комунікативні заходи, конференції:

1) Плюйко В.А., Горбаченко О.М., Романовський Н.О. “Аналіз систематик енергій пігмі дипольного резонансу ізотопах Ni, Sn, Pb” III Міжнародна науково-практична конференція «Актуальні проблеми науки та освіти: реалії та перспективи», 11 листопада 2024 Київ, Україна, матеріали конференції, стор. 116-118, https://man.org.ua/files/11_11_2024_k.pdf

2) Olersandr Gorbachenko, Volodymyr Plujko "Analysis of ambiguities in determination of cross sections of the radioisotopes 99mTc, 177Lu formation", «XI міжнародна конференція «Медична фізика – сучасний стан, проблеми, шляхи розвитку. Новітні технології», 25-27 вересня 2024 р., КНУ. імені Тараса Шевченка, Україна; програма конференції: https://conference.rb.knu.ua/

3) M. Stepanov, L. Zadorozhna, B. Hnatyk «Gamma-Ray Emission from Dark Matter Annihilation and Decay in Galaxy Clusters: Implications for WIMP Detection» на міжнародній конференції «Current problems in astronomy and astrophysics», 23 - 26th of September 2024, Lviv-2024 Abstracts book, P.94-95. https://physics.lnu.edu.ua/wp-content/uploads/Abstracts_CPAA-2024.pdf

4) Зустріч із провідними зарубіжними вченими, членами Консультаційної ради проєкту.
Запис зустрічі з Консультаційною радою проєкту:
https://drive.google.com/file/d/1Y8kUlaoJt9I-sKcKcmE2CcnicK7uwiVu/view?usp=sharing

Науково-популярні публікації з метою поширення інформації про результати проєкту для загальної (широкої) аудиторії

1) Веб-сайт проєкту (з відображенням параметрів нового кластера, новинами, і ін):
http://project.hpcc.knu.ua

Представлення інформації про результати проєкту на науково-популяризаційних заходах:

1) Науково-популяризаційний захід «Нобелівський тиждень у КНУ: хімія».
Обговорення завдань проєкту, які резонують з цьогорічними Нобелівськими преміями, в рамках Нобелівського тижня в КНУ відображено в новинах:
https://knu.ua/news/13358

2) Науково-популяризаційний профорієнтаційний захід «КНУ ЕКСПО-осінь2024».
Презентація проєкту науковим керівником широкому загалу – абітурієнтам, їх батькам, студентам, співробітникам університету відображено в новинах КНУ:
https://knu.ua/news/13377

Створено чи істотно удосконалено/покращено існуючі:

Пристрої:

1) Розроблено проєкт оновлення існуючого комп’ютерного кластеру КНУТШ (див. Додаток 1) і розпочато роботи з його модернізації.

Цифрові продукти та електронні сервіси:

1) Код для навчання нейронних мереж та тонкого налаштування LLM для задач класифікації текстів (3 файли, 5 zip-архівних файли):
https://github.com/projectsuniv/autumn2024

2) Програма, в якій порівнюються квадрупольні деформації основного стану ядер та визначених по розщепленню перерізів фотопоглинання в області гігантських дипольних

резонансів з аналізу параметрів гігантських дипольних резонансів (7 файлів, 2 теки з параметрами):
https://github.com/GITraven13/BetadefGDR/tree/main

До звіту додаються електронні копії наукових публікацій, охоронних документів, інша наукова продукція із вказанням DOI *(окрім матеріалів, які містять інформацію з обмеженим доступом, Додаток 1 до Проміжного звіту)***.**
- у випадку необхідності надання друкованої версії звіту, до нього додаються друковані додатки *(окрім великих (більше 50 сторінок) за обсягом - монографії, підручники, словники тощо та інші матеріали).*

21. **Рішення науково-технічної ради організації/установи грантоотримувача щодо результатів розгляду Проміжного звіту** *(стисло зазначити текст висновку ради про відповідність/невідповідність виконаних за проєктом робіт Технічному завданню до проміжного етапу проєкту з виконання наукового дослідження і розробки***)**

Схвалити результати виконання проміжного етапу реалізації проєкту «Вирішення сучасних проблем хімії, біомедицини, фізики та матеріалознавства з використанням центру високопродуктивних обчислень і машинного навчання», що виконується у 2024 році за рахунок грантової підтримки НФДУ за конкурсом «Дослідницькі інфраструктури для проведення передових наукових досліджень», відповідно до технічного завдання та календарного плану Договору від від 01 серпня 2024 року № 234/0024 (науковий керівник – доктор хімічних наук, професор Комаров Ігор Володимирович, реєстраційний номер 2023.05/0024); оприбуткувати на баланс Університету обладнання першої черги комп'ютерного кластеру Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Додаток 2 – копія витягу з протоколу вченої (наукової, науково-технічної, технічної) ради або іншого керівного (дорадчого) органу (за відсутності зазначеної ради) організації/установи грантоотримувача.

22. **Анотація основних результатів звітного етапу проєкту** *(готується українською та англійською мовами, до 30 рядків кожною мовою, викладається науково-популярним стилем)*

На першому етапі виконання проєкту проведено організацію закупівлі обладнання, що планувалося за проєктом, а саме – джерел безперебійного живлення, комп'ютерної ноди і модуля пам'яті. Здійснено проєктування та розпочата реалізація схеми розміщення обладнання для забезпечення рівномірного навантаження на системи енергоживлення та температурного режиму роботи обладнання, а також запускові та тестові роботи по комплектації комп'ютерного кластеру. Спроектовано зміни до архітектури існуючого обчислювального кластера з урахуванням встановлення нових вузлів зберігання даних, вузлів віртуалізації та обчислювальних вузлів. Розроблено модель спектрометру для спостереження динейтрону з використанням кодів GEANT, TALYS, а також проведено симуляцію в коді GEANT спектрометру та розрахунок в коді TALYS перерізів ядерних реакцій для спостереження динейтрону. Проведено порівняння баз даних параметрів квадрупольної деформації атомних ядер в різних збуджених станах та аналіз аналітичних виразів для енергії низькорозташованого ядерного стану. Отримано дані спостережень нейтринних телескопів для побудови фізичних моделей прискорення космічних променів та генерування багатоканальних сигналів від астрофізичних джерел (таких як Cygnus X та MGRO J1908+06). Почалася інтеграція VIRGO.UA в платформу Multi-Messenger Online Data Analysis. Проведена підготовка програмних кодів для молекулярно-динамічного моделювання процесів теплового транспорту і транспорту частинок іонізуючого випромінювання в твердотільних структурах, виконання тестових розрахунків коефіцієнта теплопровідності модельних наноструктур. Тестовано програмне забезпечення, призначене для виконання квантово-хімічних розрахунків (ORCA, TURBOMOLE); проведено

розрахунки термодинамічних характеристик реакцій незаміщених метилакрилатів із діазометаном та структури продуктів їх взаємодії; здійснена валідація результатів квантово-механічних розрахунків та оптимізація розрахункових моделей для реакції циклопропанування алкенів за допомогою діазометану експериментальним шляхом. Встановлено та тестовано пакети програм для молекулярної механіки та динаміки, забезпечено віддалений доступ до них, здійснювалася підготовка вхідних завдань; проведена кросвалідація моделей нейронних мереж для розпізнавання фейкових новин. Здійснювалася розробка моделі для побудови прикладних систем класифікації текстів.

At the first stage of the project, purchase of equipment planned for the project was organized, namely - uninterruptible power supplies, a computer node and a memory module. Design of the equipment installation scheme to ensure a uniform power supply and temperature regime of the equipment was carried out and the installation of the equipment was started. Changes to the architecture of the existing IOC computing cluster were designed, taking into account the installation of new data storage nodes, virtualization nodes and computing nodes. A spectrometer model for dineutron observation was developed using the GEANT, TALYS codes, as well as the adjustment of programs based on Python scripts was done for the following calculations: simulation in the GEANT spectrometer code and calculation in the TALYS code of nuclear reaction cross sections for dineutron observation; comparison of databases of parameters of quadrupole deformation of atomic nuclei in different excited states and analysis of analytical expressions for the energy of the low-lying nuclear state. Data from observations of neutrino telescopes were obtained for the developing of physical models for cosmic ray acceleration and generating multi-channel signals from astrophysical sources (such as Cygnus X and MGRO J1908+06); integration of VIRGO.UA into the Multi-Messenger Online Data Analysis (MMODA) platform was started. Preparation of program codes for molecular dynamics modeling of heat transport processes and transport of ionizing radiation particles in solid-state structures was carried out, test calculations of thermal conductivity coefficient of model nanostructures were performed; software for quantum-chemical calculations (ORCA and TURBOMOLE) was tested; quantum-chemical calculations of thermodynamic characteristics of reactions of unsubstituted methyl acrylates with diazomethane and structures of their interaction products were carried out. The results of quantum mechanical calculations were validated and the calculation models for the cyclopropanation reaction of alkenes with diazomethane were optimized experimentally. Software packages for molecular mechanics and dynamics were installed and tested, remote access to them was provided, and input tasks were prepared; cross-validation of neural network models for fake news recognition was carried out. A model was developed for text classifications.

Додаток 3

23. За наявності науково-технічної продукції обґрунтування її переваг у порівнянні з аналогами, що існують, до 10 рядків –

24. Опис шляхів та способів подальшого використання результатів виконання Проєкту в суспільній практиці.

Встановлене обладнання, разом з існуючим комп'ютерним кластером, вже може використовуватися науковцями України для проведення розрахунків в рамках своїх досліджень, в порядку, визначеному Правилами роботи кластеру.

Примітка: Проміжний звіт не містить відомостей, заборонених до відкритого опублікування.

Науковий керівник Проєкту
Провідний науковий співробітник
Ігор КОМАРОВ

Додаток 1

Презентація та дисемінація результатів:

Міжнародні науково-комунікативні заходи, конференції:

Громадська організація
“Міжнародна асоціація науковців”

Державна установа
“Інститут економіки та прогнозування
Національної академії наук України”

Національний університет харчових технологій

Національний університет
“Полтавська політехніка імені Юрія Кондратюка”

Громадська організація
“Європейська Асоціація Економістів”

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Лодський університет (Польща)

Національний технологічний інститут
Мотилала Неру Аллахабад (Індія)

Батумський державний університет
імені Шота Руставелі (Грузія)

Університет менеджменту безпеки в Кошицях (Словаччина)

Варшавська школа економіки (Польща)

Міжнародна Асоціація Науковців Громадська Організація
IAS
2021

МАТЕРІАЛИ
ІІІ Міжнародної
науково-практичної конференції
“АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ НАУКИ ТА ОСВІТИ: РЕАЛІЇ ТА ПЕРСПЕКТИВИ”
11 листопада 2024 року, м. Київ

2024

III Міжнародна науково-практична конференція
"АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ НАУКИ ТА ОСВІТИ: РЕАЛІЇ ТА ПЕРСПЕКТИВИ"
11 листопада 2024 року *https://man.org.ua*

УДК 539.17

Плюйко Володимир Андрійович
д.ф.-м.н., проф.
Горбаченко Олександр Миколайович
к.ф.-м.н.
Романовський Назарій Олегович
студент магістратури
Київський національний університет імені Тараса Шевченка, м. Київ

АНАЛІЗ СИСТЕМАТИК ЕНЕРГІЙ ПІГМІ ДИПОЛЬНОГО РЕЗОНАНСУ НА ІЗОТОПАХ Ni, Sn, Pb

Гамма випромінювання супроводжує більшість ядерних реакцій. Процеси гамма випромінювання та фотопоглинання в атомних ядрах можна описати за допомогою фотонних силових функцій [1-2]. Наявність пігмі дипольного резонансу одночасно з гігантським дипольним резонансом може суттєво вплинути на поведінку таких функцій і тим самим на розрахунок спостережних характеристик ядерних реакцій [3,4]. Особливо це важливо для аналізу розповсюдження хімічних елементів у Всесвіті [5].

В даній роботі обчислені енергії дипольного пігмі резонансу на ізотопах Ni, Sn, Pb за допомогою аналітичних виразів, які були отримані з використанням двох моделей, а саме 1) аналогом гідродинамічної моделі Штейнведеля-Йенсена в якій рідина кору і надлишку нейтронів вібрують одна відносно іншої (SIS - модель) [6] та 2) аналогом моделі Гольдхабера- Теллера, коли нейтронно-надлишкова та протонна густини коливаються відносно їх загального центру мас (модель INW) [7]. Результати таких обчислень порівнюються з мікроскопічними розрахунками представленими на рисунках 3-4 роботи [8] і наведені на рисунку 1.

Наша апроксимація для енергії пігмі резонансу відповідає лінійному наближенню по параметру нейтронної шкіри y до точної формули підходу INW і має вигляд:

$$E_{p,INW} = 45.6 \cdot A^{-1/6} \cdot \left[\frac{Z}{A_c}\right]^{1/2} \left[\frac{y \cdot 3R_{av}}{[3R_{av}^2 + (\pi^2 - 6)a^2]}\right]^{1/2} \left[1 - \frac{y[R_{av}^2 + \pi^2 a^2/3]}{20R_{av}a^2}\right],$$

де $A_c = 2 \cdot Z$ – масове число кору,

$R_{av} = (R_n + R_p)/2$,

$y = R_n - R_p$ - товщина шкіри ядра,

R_p, R_n – радіус протонного та нейтронного розподілів Фермі,

$a \cong 0.57$ фм – середнє значення дифузності нуклонних розподілів.

III Міжнародна науково-практична конференція
"АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ НАУКИ ТА ОСВІТИ: РЕАЛІЇ ТА ПЕРСПЕКТИВИ"
11 листопада 2024 року *https://man.org.ua*

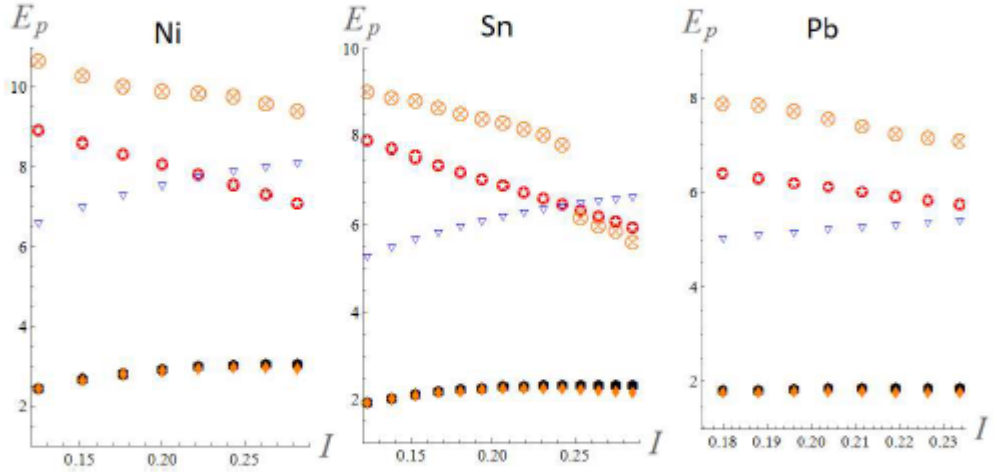


Рис. 1. Порівняння систематик енергій пігмі дипольного резонансу для ізотопів Ni, Sn, Pb з мікроспопічними розрахунками роботи [8] в залежності від параметра нейтронно-протонної асиметрії $I = (N - Z)/A$.

Позначення: ⊗ – розрахунки за мікроскопічною моделлю [8]; ▽ – обчислення за SIS моделлю[6]; ♦ – точний вираз моделі INW на основі формул (5),(6),(9) з [7]; ○ – наближена модель INW (формула (10) з [7]); ● – наша аппроксимація до моделі INW.

Видно, що 1) для точної моделі INW (на відміну від наближеної моделі (формула (10) з [7])) у відсутності нейтронної шкіри енергія пігмі дипольного резонанса дорівнює нулю, 2) наша апроксимація до точної формули INW практично збігається з точним виразом, 3) при використаних параметрах обчислень, з мікроскопічними результатами краще всього збігаються обчислення за наближеною формулою з [7].

Плюйко Володимир Андрійович та Горбаченко Олександр Миколайович дякують фонду НФДУ за часткову підтримку досліджень (грант НФДУ 2023.05/0024 "Вирішення сучасних проблем хімії, біомедицини, фізики та матеріалознавства з використанням центру високопродуктивних обчислень і машинного навчання").

Список використаних джерел

1. Goriely S., Dimitriou P., Wiedeking M. et al Reference database for photon strength functions. Eur. J. Phys. A – 2019.– Vol. 55. – P. 172 URL: https://doi.org/10.48550/arXiv.1910.06966
2. Goriely S., Plujko V. Simple empirical E1 and M1 strength functions for practical applications// Phys. Rev. C, 2019, V.99, 014303(8). URL: https://doi.org/10.1103/PhysRevC.99.014303
3. Gorbachenko O., Kadenko I., Plujko V., Solodovnyk K. Comparison of practical expressions for E1 photonstrength functions. EPJ Web of Conferences 239, 03012 (2020),4pp, URL: https://doi.org/10.1051/epjconf/202023903012

Додаток 1 (продовження)

4. Горбаченко О.М., Плюйко В.А., Кучер А.І., Петренко В.М. Опис фотопоглинання фотонними силовими функціями із збудженням збудженням двох резонансних станів. Ядерна фізика та енергетика, 24(1) (2023) стор. 17–21 URL: https://doi.org/10.15407/jnpae2023.01.017

5. Arnould M., Goriely S. Takahashi K. The r-process of stellar nucleosynthesis: Astrophysics and nuclear physics achievements and mysteries. Physics Reports, 2007. Vol. 450, Is. 4-6. Pp 97-213. URL: https://doi.org/10.1016/j.physrep.2007.06.002

6. Suzuki Y., Ikeda K., Sato H.. New Type of Dipole Vibration in Nuclei, Prog. Theor. Phys. 1990. Vol. 83, 180. URL: https://doi.org/10.1143/PTP.83.180

7. Isacker P. V., Nagarajan M., Warner D. Effect of the neutron skin on collective states of nuclei. Phys. Rev. C. 1992. Vol.45, R13. URL: https://doi.org/10.1103/PhysRevC.45.R13

8. Paar N., Nikšić T., Vretenar D., Ring P. Isotopic dependence of the pygmy dipole resonance. Phys. Lett. B. 2005. Vol.606(3-4), 288-294. URL: https://doi.org/10.1016/j.physletb.2004.12.011

Додаток 1 (продовження)

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Навчально-науковий центр радіаційної безпеки

Всеукраїнське об'єднання медичних фізиків та інженерів

European Federation of Organizations for Medical Physics

погодили

XI міжнародну конференцію «Медична фізика – сучасний стан, проблеми, шляхи розвитку. Новітні технології»

25-27 вересня 2024 року

онлайн, Zoom

ПРОГРАМА

25 вересня 2024 року (підключення за **Київським часом**)	
09:45-10:00	Технічна частина
09:45-13:00	**Приєднатися до конференції:** **Посилання: https://knu-ua.zoom.us/j/81496924351** **Ідентифікатор конференції: 814 9692 4351** **Код доступу: 173821**
10:00-10:20	***Відкриття. Привітання.*** ***Модератор: Людмила Асламова,*** *директорка Навчально-наукового центру радіаційної безпеки, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Україна.* ***Володимир Бугров,*** ректор Київського національного університету імені Тараса Шевченка, Україна; ***Kamal Akbarov,*** *представник ВООЗ в Україні,* ***Sören Mattsson,*** Лундський університет, Університетська лікарня Сконе, Мальме, Швеція; ***Brenda Byrne,*** генеральний секретар EFOMP **Групове фото**

Додаток 1 (продовження)

11:30-11:45	Дослідження впливу індукційної помірної гіпертермії на гетерогенність МРТ зображень саркоми-45, **Валерій Орел,** *лікар-радіолог, Національний інститут раку, Україна*
11:45-12:00	Прогнозування кісткового віку дітей за допомогою глибокого навчання на основі рентгенівських знімків кистей рук, **Іван Рябко,** *технік-дозиметрист, Національна дитяча спеціалізована лікарня «ОХМАТДИТ», Україна*
12:00-12:15	Модифіковані алгоритми лінійного сканування в комп'ютерній томографії, **Костянтин Лапітан,** *асистент ННІ комп'ютерної фізики та енергетики, ХНУ ім. В.Н. Каразіна, Україна*
12:15-12:30	Адаптивне знешумлення МРТ-зображень мозку з використанням нейронних мереж та розбиття на діапазони, **Денис Слюсаренко,** *аспірант факультету радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Україна*
12:30-12:45	До перевіреної практики управління дозами опроміненя пацієнтів у педіатричній радіології, **Birutė Gricienė,** *завідувачка відділу клінічного радіаційного нагляду, Лікарня Вільнюського університету Santaros Klinikos, Литва*
12:45-13:00	Оцінка ризику вторинного раку за допомогою протоколів візуалізації тазової конічної променевої комп'ютерної томографії, **Sundus Osman,** *студентка, Каунаський технологічний університет, Литва*
13:00-13:15	Аналіз неоднозначностей визначення перерізів утворення радіоізотопів ^{99m}Tc, ^{177}Lu, **Олександр Горбаченко,** *завідувач НДЛ «Ядерної спектроскопії» фізичного факультету, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Україна*
13:15-13:35	**Загальна дискусія. Обговорення пропозицій. Заключні підсумки. Фільм.** ***Модератор:*** ***Людмила Асламова,*** *директор Навчально-наукового центру радіаційної безпеки Київського національного університету імені Тараса Шевченка, Україна;* **Sören Mattsson,** *Lund University, Skåne University Hospital Malmö, Sweden;* **Сергій Радченко**, *завідувач кафедри медичної радіофізики, факультет радіофізики, електроніки та комп'ютерних систем Київського національного університету імені Тараса Шевченка, Україна;* **Вадим Чумак,** *головний науковий*

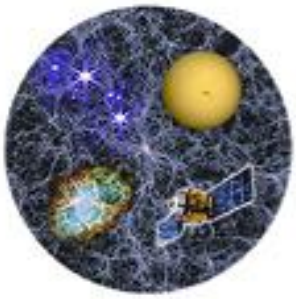
Додаток 1 (продовження)

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ЛЬВІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ ІВАНА ФРАНКА

ЗБІРНИК ТЕЗ

АКТУАЛЬНІ ПРОБЛЕМИ АСТРОНОМІЇ ТА АСТРОФІЗИКИ

23 - 26 вересня 2024 р.



ABSTRACTS BOOK

CURRENT PROBLEMS IN ASTRONOMY AND ASTROPHYSICS

23 - 26th of September 2024

Львів-2024 / Lviv-2024

spectra of gamma-ray emission from the Shapley Supercluster, providing essential information for planning future CTAO observations. Additionally, neutrinos, another product of hadronic mechanisms, can be produced in the decay of charged pions and muons. The detection of neutrinos alongside gamma-ray emission would provide strong evidence for hadronic processes in the ICM of galaxy clusters. We also consider galaxy clusters as potential sources of UHECRs. According to the Hillas criterion, galaxy clusters — due to their large sizes ($\sim$1 Mpc) and magnetic fields ($\sim$5 μG) — could potentially accelerate cosmic rays up to 10^{20} eV. Our research includes prospects for observing neutrinos with IceCube and KM3NeT observatories, as well as analyzing UHECRs detected in the Shapley Supercluster region using recent data from the Pierre Auger Observatory.

Acknowledgements. This work was supported by the National Research Foundation of Ukraine under project No. 2023.03/0149.

References

1. Liu A., et al., 2024, The SRG/eROSITA All-Sky Survey: First catalog of superclusters in the western Galactic hemisphere (arXiv:2402.08454)

Gamma-Ray Emission from Dark Matter Annihilation and Decay in Galaxy Clusters: Implications for WIMP Detection

M. Stepanov[1], L. Zadorozhna[1,2], B. Hnatyk[3]

[1] *Taras Shevchenko National University of Kyiv, Hlushkova ave. 4, 03127, Kyiv, Ukraine*

[2] *Niels Bohr Institute, Jagtvej 155A, 2200, Copenhagen, Denmark*

[3] *Astronomical Observatory of Taras Shevchenko National University of Kyiv, Observatorna str. 3, Kyiv, 04053, Ukraine*

The existence of dark matter (DM) has been inferred from numerous astronomical observations, highlighting its critical role in the universe. However, the properties of DM remain largely elusive, with gravitational interactions being the only ones observed so far. Extensions of the Standard Model (SM) propose various DM particle candidates across a broad

Додаток 1 (продовження)

mass spectrum. These particles may reveal themselves by decaying or annihilating into SM particles, including photons.

We present an analysis of gamma-ray emission resulting from DM annihilation and decay in galaxy clusters, with a focus on the four central clusters of the Shapley Supercluster and the Perseus Cluster. Our study explores Weakly Interacting Massive Particles (WIMPs) as potential DM candidates, emerging naturally from SM extensions addressing the gauge hierarchy problem [1].

Utilizing the CLUMPY code, we calculate astrophysical J- and D-factors for smooth DM distributions, excluding substructures [2]. Our findings show that while annihilation signals scale with the square of DM density, decay signals are directly proportional to total DM mass, enhancing decay signatures in more massive objects. We analyze gamma-ray fluxes and evaluate detection prospects using sensitivity forecasts for next-generation instruments like the Cherenkov Telescope Array Observatory [3].

Our research underscores the importance of considering both annihilation and decay scenarios in indirect DM searches and offers a framework for future observational strategies targeting large cosmic structures.

Acknowledgements. The research was supported by the National Research Foundation of Ukraine under project No. 2023.05/0024.

References

1. Miguel A. S´anchez-Conde, Mirco Cannoni, Fabio Zandanel, Mario E. G´omezd and Francisco Pradae, “Dark matter searches with Cherenkov telescopes: nearby dwarf galaxies or local galaxy clusters?”, Journal of Cosmology and Astroparticle Physics, Issue 12, id. 011, (2011).

2. Basudeb Dasgupta, Ranjan Laha, “Neutrinos in IceCube/KM3NeT as probes of Dark Matter Substructures in Galaxy Clusters”, Phys.Rev. D86, 093001, (2012).

3. B.S. Acharya, et al., “Science with the Cherenkov Telescope Array”, Science with the Cherenkov Telescope Array. Edited by CTA Consortium, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., ISBN 9789813270091, 213pp, (2019).

Додаток 1 (продовження)

Представлення інформації про результати проєкту на науково-популяризаційних заходах:

Новини

Поширити 93 Post

Нобелівський тиждень у КНУ: хімія

10.10.2024



Всього : 1 Фотографія : 1

Продовжуємо Нобелівський тиждень у КНУ. Шведська королівська академія наук вирішила присудити Нобелівську ***премію з хімії 2024 року*** *одразу трьом вченим: з одного боку Девіду Бейкеру «за обчислювальний дизайн білка», та з іншого – Демісу Хассабісу та Джону Джамперу «за передбачення структури білка».*

Про це говоримо з експертами **Хімічного факультету** та **Навчально-наукового інституту високих технологій** Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Директор ННІ високих технологій, професор, доктор хімічних наук **Ігор Комаров** зауважує, що рішення Нобелівського комітету щодо відзначення Нобелівською премією з хімії у цьому році здивувало, якщо не спантеличило багатьох хіміків. Без сумніву, ці відкриття є дійсно нобелівськими, революційними і важливими для майбутнього прогресу фундаментальної науки і таких прикладних галузей, як медицина, матеріалознавство. *«За комп'ютерний дизайн протеїнів» (Девід Бейкер, США)* та *«За передбачення структури протеїнів» (Деміс Гассабіс і Джон Джампер, Великобританія)* – так лаконічно сформулював Нобелівський комітет суть відзначених наукових досягнень. Важлива деталь, завуальована цією лаконічністю, – дизайн і передбачення здійснюються з використанням методів машинного навчання – одного з інструментів Штучного Інтелекту (ШІ). «Знову ШІ!» – доводиться чути від колег-хіміків. Мабуть, це єдиний випадок в історії Нобелівських премій, коли одна й та ж галузь наукової діяльності отримала таке високе визнання у двох номінаціях – з фізики і з хімії. «Подивимося, що буде з економіки в цьому році, а може, й з літератури, туди ШІ теж проникає» – жартують науковці. Хай там як, досягнення ШІ, що відзначені премією з хімії, – визначні і дуже важливі для людства.

Додаток 1 (продовження)

Ігор Володимирович вважає, що відзначення досягнень в галузі ШІ Нобелівськими преміями 2024 року як у фізиці, так і в хімії свідчить про те, що ця галузь дуже стрімко проникає в усі види людської діяльності. Це є безумовним прогресом, і цей прогрес не зупинити. Однак існує думка, що настільки стрімкий розвиток ШІ становить також і значну загрозу для людства. Ця загроза недооцінена багатьма вченими, що розробляють штучний інтелект, хоча деякі експерти, такі, як відомий фізик *Макс Тегмарк,* досить обґрунтовано застерігають вчених від необачних дій. Та сьогоднішня подія не про загрози, звичайно. Використання комп'ютерних методів і ШІ для передбачення структури протеїнів – це нові можливості сучасних технологій, зокрема, в галузі охорони здоров'я. Річ у тім, що протеїни – ключові актори у п'єсі, яку ми називаємо «життям». *Річард Докінз,* відомий англійський еволюційний біолог, писав, що протеїни є тими молекулярними машинами, які виконують більшість важливих функцій у живих організмах. А функції, як вже давно відомо, залежать від будови молекул. Протеїни складаються з досить простих «будівельних блоків» – залишків амінокислот. Чи можна, знаючи послідовність цих будівельних блоків, вивести тривимірну будову протеїнів, а відповідно, оцінити їхні функції? І навпаки – створити за допомогою комп'ютера бажану будову протеїну віртуально і передбачити, яка послідовність будівельних блоків її забезпечить? Цьогорічні Нобелівські лауреати показали, що так. Ще кілька десятиліть тому це здавалося фантастичним, але ШІ перетворив фантастику на реальність. Тепер вчені мають інструмент раціонального, направленого впливу на функції протеїнів у живих організмах. Це потрібно там, де протеїни «не справляються» зі своїми функціями в живих організмах, що призводить до хвороб. Отже, відкриття, відзначені Нобелівською премією з хімії надають значного поштовху раціональному пошуку лікарських засобів.

Науковці КНУ розуміють виклики і тенденції в сучасній науці. Ігор Комаров розповів про початок виконання в Університеті амбітного інфраструктурного проєкту, що фінансується Національним фондом досліджень України. Цей проєкт має назву «Вирішення сучасних проблем хімії, біомедицини, фізики та матеріалознавства з використанням центру високопродуктивних обчислень і машинного навчання» і націлений на створення в КНУ потужного комп'ютерного кластера. На цьому кластері українські вчені матимуть змогу виконувати обчислення, зокрема, з використанням методів машинного навчання, що відзначені Нобелівкою цього року.

Додаток 1 (продовження)

Інформація Підрозділи університету Абітурієнтам Наука Студентам Ресурси Новини Пошук EN

КИЇВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ ТАРАСА ШЕВЧЕНКА

Новини

Поширити 0 Post

КНУ ЕКСПО-осінь2024: акцент на природничо-технічні спеціальності

21.10.2024



Всього : 25 Фотографія : 1

«Від студента до Нобелівського лавреата» – тема КНУ ЕХРО-осінь2024. Якщо ми здатні мріяти, творити, будувати сміливі плани навіть у темні часи, ми вистоїмо. І тоді країні дуже знадобляться талановиті вчені, дослідники та першопрохідники, яких найефективніше плекає Шевченків університет. Тому День відкритих дверей – це завжди надпотужна презентація освітніх можливостей КНУ імені Тараса Шевченка.

Ректор КНУ **Володимир Бугров** привітав гостей, що **19 жовтня** зібралися у Червоному корпусі:

«Цього року КНУ визнано одним із тисячі найкращих світових університетів. Він перший і єдиний серед українських закладів вищої освіти увійшов до найавторитетнішого міжнародного Шанхайського рейтингу. Це стало можливим завдяки високим показникам академічної та дослідницької ефективності Університету. Ми також вдячні нашим випускницям, які своїми здобутками прославляють Alma mater: правозахисниці, лавреатці Нобелівської премії 2022 року Олександрі Матвійчук і математикині, лавреатці Філдсівської премії Марині Вязовській. Носити ім'я випускника і студента Шевченкового університету – це відповідальна справа. Але ми допоможемо вам це зробити.

Додаток 1 (продовження)

якщо у ваших пріоритетах – розвиток і самореалізація. Родина КНУ вдячна захисницям і захисникам за можливість працювати!»

Незмінний ведучий усіх університетських подій **Володимир Зубченко,** директор Бізнес-школи КНУ Корпорації «Науковий парк Київський університет імені Тараса Шевченка», наголосив на важливій інформації: *«Нині в Університеті працює 27 підрозділів, понад 25 тисяч студентів, 2 тисячі викладачів, майже 400 освітніх та дослідницьких програм, серед яких – 83 унікальні. КНУ – це простір освітніх перспектив. Тут твоя унікальність стає суперсилою!»*

Упродовж КНУ EXPO-Осінь 2024 представники структурних підрозділів Університету консультували щодо освітніх можливостей факультетів та інститутів на 33 локаціях. Як завжди, програма Дня відкритих дверей, відповідно до освітньої специфіки підрозділів, пропонувала вікторини й інтерактивні ігри, демонстрацію дослідів, майстеркласи, екскурсії, різноманітні тренінги, бізнес-ігри тощо.

Особливістю цьогорічного осіннього КНУ EXPO був акцент на презентацію тих спеціальностей, що мають особливу підтримку держави: природничі науки, математика, механічна та електрична інженерія, біохімічні технології, електроніка тощо. Таке активне заохочення молоді дає свої результати: за підсумками вступної кампанії-2024, з набором на «складні» спеціальності в КНУ справи значно кращі, ніж в інших ЗВО.

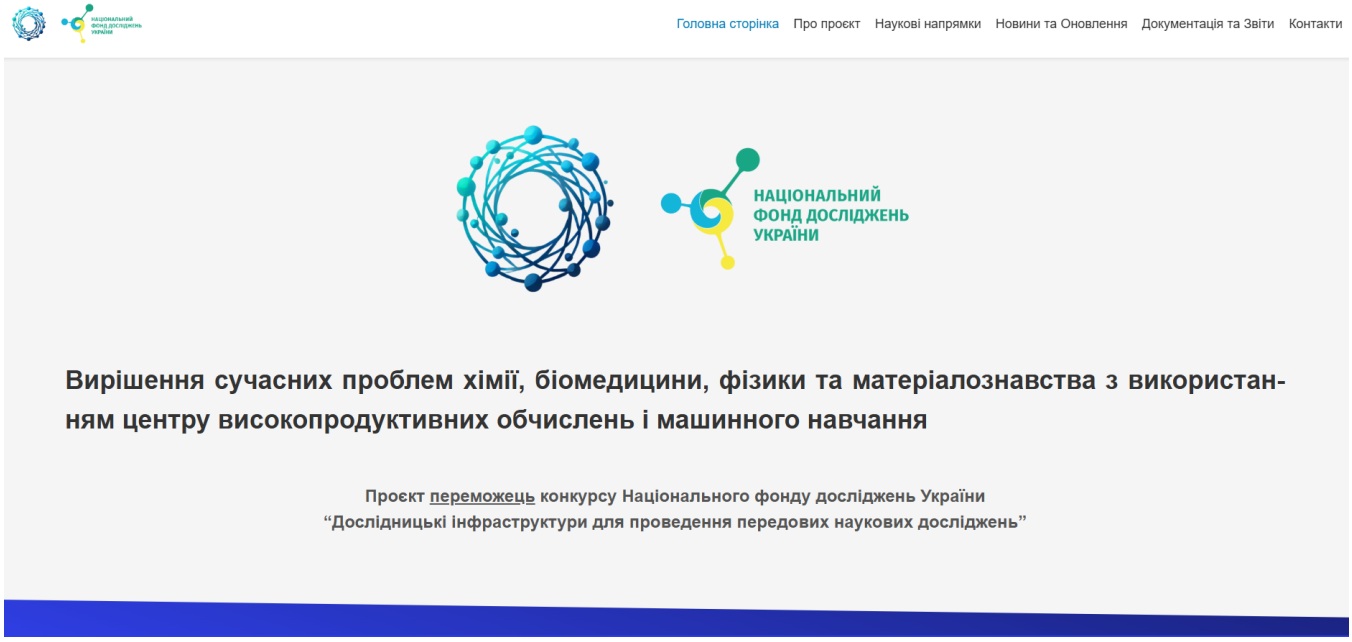
«Актуальність цих спеціальностей в тому, що ми, на жаль, маємо захищатися. В умовах воєнного стану підготовка відповідних фахівців зміцнює економічні та оборонні потужності країни, – коментує тематичну спрямованість експозиції ННІ високих технологій **Іван Войтешенко**, доцент кафедри молекулярної біотехнології та біоінформатики ННІВТ. – *Різні кафедри Інституту займаються проєктами, наприклад, з розробки активних речовин, що сприяють загоєнню ран; з удосконалення напівпровідникових приладів; з покращення ефективності наночастинок тощо. Якщо говорити про спеціальності майбутнього, то напрями вивчення штучного інтелекту будуть ще довго актуальними, і це підтвердив список лавреатів останньої Нобелівської премії. У такому аспекті ми намагалися показати можливості Інституту високих технологій. Інститут створювався за ідеєю міждисциплінарності, і ми переконуємо, що фізика, хімія і біологія не можуть існувати одне без одного. А сьогодні електроніка є ще одним інструментарієм, який дозволяє це все поєднати».*

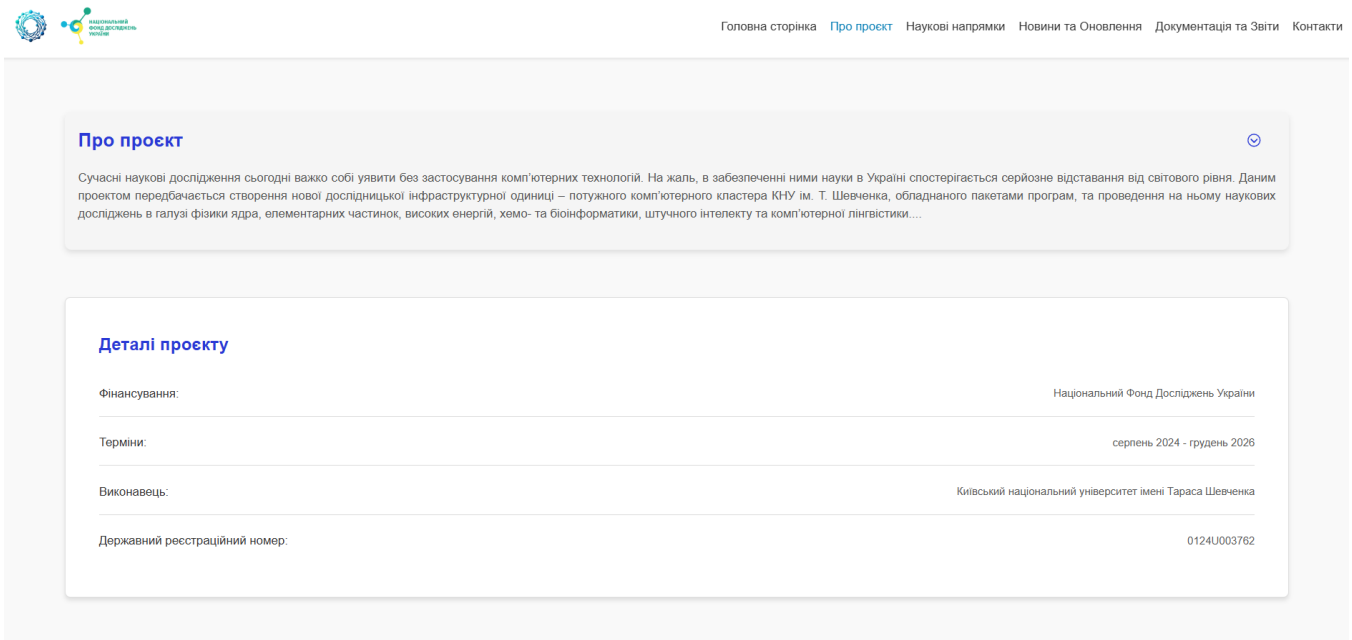
Також на локації ННІ високих технологій директор інституту професор **Ігор Комаров** презентував новий, амбітний проєкт **«Вирішення сучасних проблем хімії, біомедицини, фізики та матеріалознавства з використанням центру високопродуктивних обчислень і машинного навчання»**, фінансування якого Національним фондом досліджень України розпочалося у серпні цього року. За цим проєктом у нашому університеті буде створено сучасний, потужний комп'ютерний кластер. Науковці ННІВТ, ФРЕКСу, Факультету комп'ютерних наук та кібернетики, Фізичного та інших факультетів разом зі студентами здійснюватимуть складні розрахунки у галузі хімії, фізики, машинного навчання. Цей кластер буде унікальною можливістю для наших студентів відразу, з самого початку навчання опинитися на передньому краї науки!

Додаток 1 (продовження)

Науково-популярні публікації з метою поширення інформації про результати проєкту для загальної (широкої) аудиторії

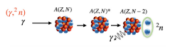
Веб-сайт проєкту





Додаток 1 (продовження)

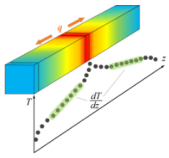
Наукові напрямки



«Полювання» на динейтрон

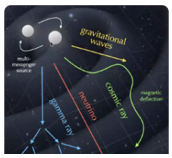
Розрахунок значень рівнів енергій можливих енергетичних станів двонуклонних систем. Симуляція розпаду динуклонних систем (динейтрон) із застосуванням ...

Читати далі



Аналіз процесів теплового транспорту в матеріалах на атомарному рівні

Напрацювання методів і підходів до прогнозування теплофізичних властивостей матеріалів і структур різної розмірності та морфології.

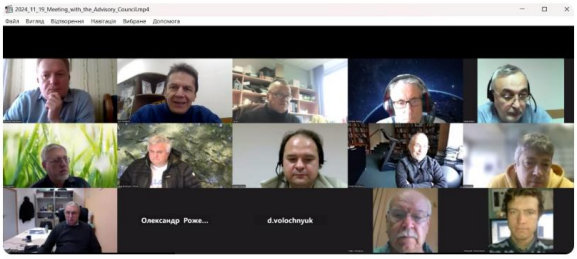


Інтеграція VIRGO.UA у платформу Multi-Messenger Online Data Analysis (MMODA, https://www.astro.unige.ch/mmoda/ та отримання доступу до European Open Science Cloud (EOSC)

Дослідження в астрофізиці високих енергій у новітньому напрямі гравітаційно-хвильової та нейтринної астрономії, де реєструються події одночасно в різн...

Читати далі

Новини та оновлення



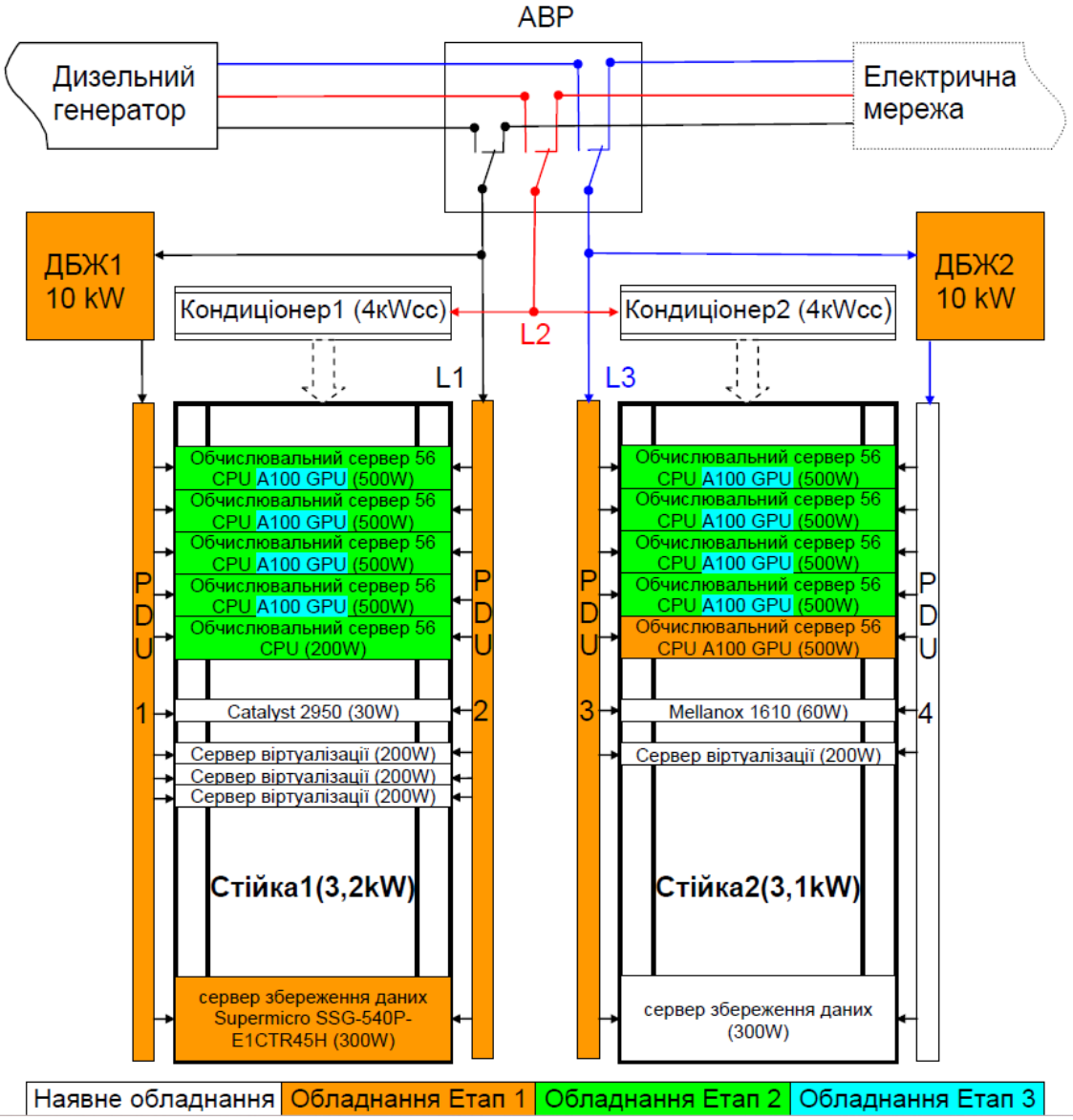
Зустріч з членами Консультаційної Ради

19.11.2024 року відбулася зустріч з членами Консультаційної Ради проєкту, провідними вченими, на якій обговорено результати проєкту і подальші плани.

19.11.2024

Додаток 1 (продовження)

Проєкт оновленого комп'ютерного кластеру



ВИТЯГ

із протоколу № 10 засідання Науково-технічної ради
Київського національного університету імені Тараса Шевченка
від 10 грудня 2024 року

Усього членів ради – 40
Присутні – 30
Голосували – 30

СЛУХАЛИ: Про результати виконання проміжного етапу реалізації проєктів НФДУ та відповідність виконаних проєктів технічним завданням і календарним планам.

Про виконання проміжного етапу реалізації проєкту «Вирішення сучасних проблем хімії, біомедицини, фізики та матеріалознавства з використанням центру високопродуктивних обчислень і машинного навчання», що виконується у 2024 році за рахунок грантової підтримки НФДУ за конкурсом «Дослідницькі інфраструктури для проведення передових наукових досліджень», відповідно до технічного завдання та календарного плану Договору від 01 серпня 2024 року № 234/0024 (науковий керівник – доктор хімічних наук, професор Комаров Ігор Володимирович, реєстраційний номер 2023.05/0024).

ВИСТУПИЛИ: начальник науково-дослідної частини (далі – НДЧ) Недибалюк О.А. та науковий керівник проєкту Комаров І.В.

УХВАЛИЛИ: За результатами відкритого голосування («за» – 30, «проти» – немає, «утримались» – немає):

1) схвалити результати виконання проміжного етапу реалізації проєкту «Вирішення сучасних проблем хімії, біомедицини, фізики та матеріалознавства з використанням центру високопродуктивних обчислень і машинного навчання», що виконується у 2024 році за рахунок грантової підтримки НФДУ за конкурсом «Дослідницькі інфраструктури для проведення передових наукових досліджень», відповідно до технічного завдання та календарного плану Договору від 01 серпня 2024 року № 234/0024 (науковий керівник – доктор хімічних наук, професор Комаров Ігор Володимирович, реєстраційний номер 2023.05/0024);

2) оприбуткувати на баланс Університету обладнання першої черги комп'ютерного кластеру Київського національного університету імені Тараса Шевченка;

3) звітну документацію подати до НФДУ у спосіб та терміни, визначені умовами Договору від 01 серпня 2024 року № 234/0024.

Голова Науково-технічної ради,
проректор з наукової роботи **Ганна ТОЛСТАНОВА**

Секретар Науково-технічної ради,
Вчений секретар НДЧ **Наталія КАРАУЛЬНА**

Додаток 3

Анотація

На першому етапі виконання проєкту проведено організацію закупівлі обладнання, що планувалося за проєктом, а саме – джерел безперебійного живлення, комп’ютерної ноди і модуля пам’яті. Здійснено проєктування та розпочата реалізація схеми розміщення обладнання для забезпечення рівномірного навантаження на системи енергоживлення та температурного режиму роботи обладнання, а також запускові та тестові роботи по комплектації комп'ютерного кластеру. Спроектовано зміни до архітектури існуючого обчислювального кластера з урахуванням встановлення нових вузлів зберігання даних, вузлів віртуалізації та обчислювальних вузлів. Розроблено модель спектрометру для спостереження динейтрону з використанням кодів GEANT, TALYS, а також проведено симуляцію в коді GEANT спектрометру та розрахунок в коді TALYS перерізів ядерних реакцій для спостереження динейтрону. Проведено порівняння баз даних параметрів квадрупольної деформації атомних ядер в різних збуджених станах та аналіз аналітичних виразів для енергії низькорозташованого ядерного стану. Отримано дані спостережень нейтринних телескопів для побудови фізичних моделей прискорення космічних променів та генерування багатоканальних сигналів від астрофізичних джерел. Почалася інтеграція VIRGO.UA в платформу MMODA. Проведена підготовка програмних кодів для молекулярно-динамічного моделювання процесів теплового транспорту і транспорту частинок іонізуючого випромінювання в твердотільних структурах, виконання тестових розрахунків коефіцієнта теплопровідності модельних наноструктур. Тестовано програмне забезпечення, призначене для виконання квантово-хімічних розрахунків (ORCA, TURBOMOLE); проведено розрахунки термодинамічних характеристик реакцій незаміщених метилакрилатів із діазометаном та структури продуктів їх взаємодії; здійснена валідація результатів квантово-механічних розрахунків та оптимізація розрахункових моделей для реакції циклопропанування алкенів за допомогою діазометану експериментальним шляхом. Встановлено та тестовано пакети програм для молекулярної механіки та динаміки, забезпечено віддалений доступ до них, здійснювалася підготовка вхідних завдань; проведена кросвалідація моделей нейронних мереж для розпізнавання фейкових новин. Здійснювалася розробка моделі для побудови прикладних систем класифікації текстів.

At the first stage of the project, purchase of equipment planned for the project was organized, namely - uninterruptible power supplies, a computer node and a memory module. Design of the equipment installation scheme to ensure a uniform power supply and temperature regime of the equipment was carried out and the installation of the equipment was started. Changes to the architecture of the existing IOC computing cluster were designed, taking into account the installation of new data storage nodes, virtualization nodes and computing nodes. A spectrometer model for dineutron observation was developed using the GEANT, TALYS codes, as well as the adjustment of programs based on Python scripts was done for the following calculations: simulation in the GEANT spectrometer code and calculation in the TALYS code of nuclear reaction cross sections for dineutron observation; comparison of databases of parameters of quadrupole deformation of atomic nuclei in different excited states and analysis of analytical expressions for the energy of the low-lying nuclear state. Data from observations of neutrino telescopes were obtained for the developing of physical models for cosmic ray acceleration and generating multi-channel signals from astrophysical sources; integration of VIRGO.UA into the MMODA platform was started. Preparation of program codes for molecular dynamics modeling of heat transport processes and transport of ionizing radiation particles in solid-state structures was carried out, test calculations of thermal conductivity coefficient of model nanostructures were performed; software for quantum-chemical calculations (ORCA and TURBOMOLE) was tested; quantum-chemical calculations of thermodynamic characteristics of reactions of unsubstituted methyl acrylates with diazomethane and structures of their interaction products were carried out. The results of quantum mechanical calculations were validated and the calculation models for the cyclopropanation reaction of alkenes with diazomethane were optimized experimentally. Software packages for molecular mechanics and dynamics were installed and tested, remote access to them was provided, and input tasks were prepared; cross-validation of neural network models for fake news recognition was carried out. A model was developed for text classifications.