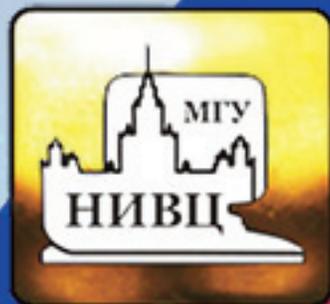


НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ
МОСКОВСКОГО
ЦЕНТР
УНИВЕРСИТЕТА
ИМЕНИ **М.В. ЛОМОНОСОВА**



ВСЕРОССИЙСКИЙ
ФЕСТИВАЛЬ
НАУКА
НАУКА **0+** **МОСКВА** 2020

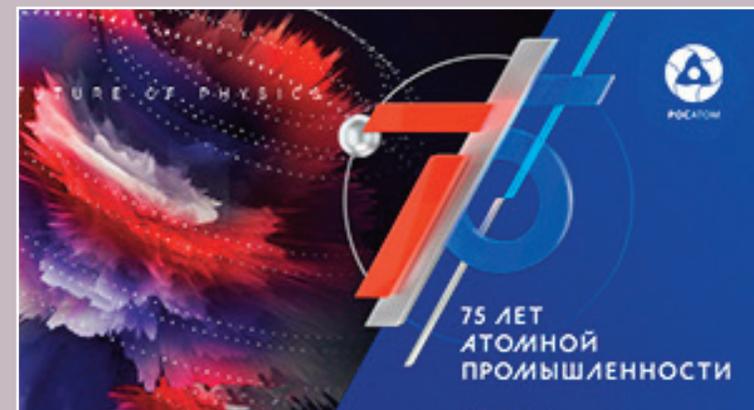


Оргкомитет НИВЦ по проведению 15-го Всероссийского фестиваля «Наука 0+» выражает благодарность подразделениям и сотрудникам, которые принимали участие в его организации и представлении научных разработок вычислительного центра на площадках фестиваля





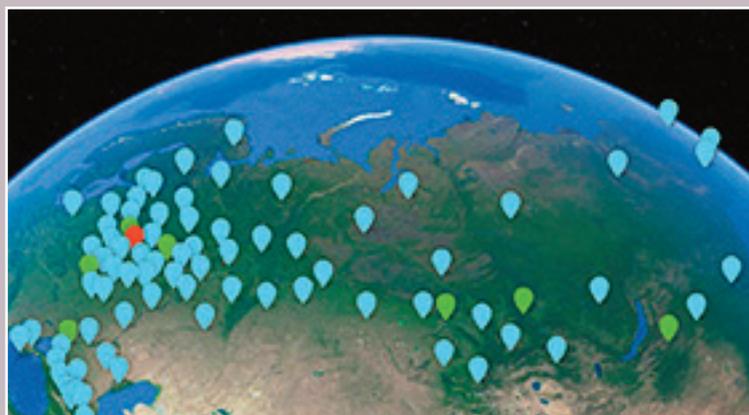
Тема Фестиваля – физика будущего. Изучая причины явлений, формулируя их законы, физика не только объясняет прошлое и настоящее, но и заглядывает в будущее.



Всероссийский Фестиваль науки NAUKA 0+ — крупнейший просветительский проект в области популяризации науки в мире — реализуется ежегодно с октября по ноябрь в 80 регионах нашей страны на более чем 400 площадках.



Этот фестиваль прошёл в год 75-летия отечественного атомного проекта, в становление которого внесли значительный вклад сотрудники Московского университета.



Организатором Всероссийского фестиваля науки выступили Министерство науки и высшего образования РФ при поддержке Правительства Москвы, МГУ имени М.В.Ломоносова и Российской академии наук.



В этом году фестиваль отметил 15-летний юбилей и прошёл в новом формате, сочетающем онлайн- и офлайн-мероприятия.

Центральные события Всероссийского Фестиваля прошли в Москве 9–11 и 17–18 октября.



Чтобы обеспечить социальное дистанцирование и в то же время дать возможность всем желающим побывать на Фестивале физически, срок его проведения был увеличен.



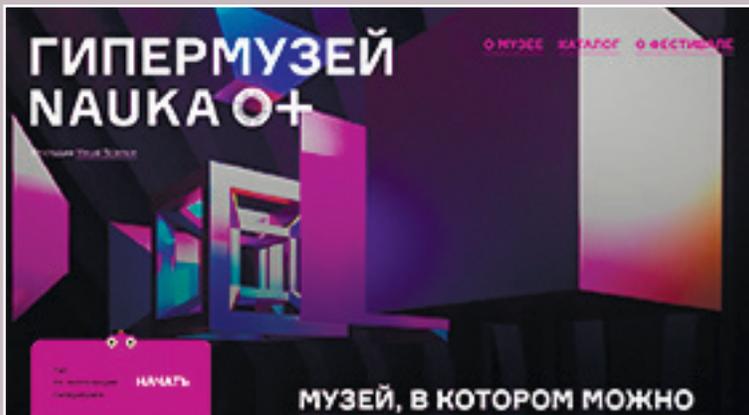
Программа охватила свыше 10 000 мероприятий: лекции Нобелевских лауреатов, ведущих российских учёных и популяризаторов науки, вебинары и мастер-классы, виртуальные лабораторные.



Мероприятия: дискуссии о будущем человечества, показы научных фильмов, соревнования роботов, научные бои Science Slam, экскурсии на предприятия, квизы и квесты, а также первый виртуальный музей науки.



Фестиваль ежегодно проходит во время «нобелевской недели», комментарий ректора по результатам присуждения главной научной премии в мире — обязательный атрибут торжественной церемонии открытия.



Традиционно Фестиваль NAUKA 0+ в Москве открыл ректор МГУ академик Виктор Садовничий. Его лекция была посвящена вкладу российских учёных в Нобелевскую премию этого года.



Гипермузей — это попытка найти новый формат для научного музея в пандемию, когда дистанционные экспозиции оказались особенно востребованы.

Гипермузей будет развиваться, подстраиваясь под меняющиеся условия.



Мероприятия: увлекательные научные шоу, интерактивные выставки, телемосты с Международной космической станцией и российской антарктической станцией «Восток».



Глава «Росатома» А.Е. Лихачев отметил, что быть на открытии юбилейного фестиваля науки — это, безусловно, большая честь и огромное удовольствие. Он выразил уверенность, что в совместном сотрудничестве МГУ и «Росатома» будет сделано много открытий в области совершенствования классических ядерных реакторов.



РОСАТОМ

75 ЛЕТ
РОССИЙСКОЙ
АТОМНОЙ
ПРОМЫШЛЕННОСТИ



Далее с приветствием выступил заместитель министра науки и высшего образования Российской Федерации член-корреспондент РАН С.В.Люлин, назвал Фестиваль науки площадкой диалога между министерством, вузами и талантливой молодежью. По словам замминистра, фестиваль позволяет привлекать молодежь в вузы и науку, дает новый импульс для взаимодействия всех, кто интересуется исследованиями, инновациями, технологиями.



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ



Заместитель министра просвещения Российской Федерации В.С.Басюк поприветствовал гостей фестиваля науки от имени министра и педагогических работников системы общего образования. Он подчеркнул, что каждый фестиваль неповторим по-своему и именно в его рамках делают свои первые шаги наши будущие учёные.



МИНИСТЕРСТВО
ПРОСВЕЩЕНИЯ РФ



Вице-президент РАН Ю.Ю. Балегга приветствовал гостей и участников фестиваля от армии отечественных учёных и штаба российской науки — Российской академии наук. Ю.Ю. Балегга пожелал кораблю фестиваля удачного плавания в море науки и в качестве действующего учёного-астрофизика выразил свою поддержку идее проложить курс этого корабля именно в сторону вопросов и проблем фундаментальной физики.



РОССИЙСКАЯ
АКАДЕМИЯ НАУК

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ КОМПЛЕКС МГУ имени М.В. ЛОМОНОСОВА



<https://rcc.msu.ru>

Суперкомпьютер
«Ломоносов-2»
пиковая
производительность
5,5 Pflap/s



Суперкомпьютер «Ломоносов»
пиковая производительность 1,7 Pflap/s



ЛЕКЦИЯ «СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ КОМПЛЕКС МГУ»

https://www.youtube.com/watch?v=Lu0bVeDf_Zo

А.С. Антонов, к.ф.-м.н., ведущий н.с.
лаборатории параллельных информационных технологий

Суперкомпьютер «Ломоносов»

Пиковая производительность	1700.21 TFlop/s
Производительность (Linpack)	901.90 TFlop/s
Эффективность	53%
Вычислительных узлов (Intel)	5 104
Вычислительных узлов (ГПУ)	1 065
Вычислительных узлов (PowerXCell)	30
Процессоры Intel Xeon 5570, 5670	12 346
NVIDIA Tesla X2070	2 130
Число процессорных ядер (x86)	52 168
Число процессорных ядер (ГПУ)	954 240
Оперативная память	92 ТБайт
Коммуникационная сеть	QDR Infiniband / 10 GE
Система хранения данных	1.75 ПБайт, Lustre, NFS, ...
Операционная система	Clustrx T-Platforms Edition
Занимаемая площадь (вычислитель)	252 м ²
Энергопотребление (вычислитель)	2.8 МВт

«Ломоносов-2»



«Ломоносов»

«Чебышев»

SCI



5.5 Pflops

1.7 Pflops

60 Tflops

12 Gflops

БЭСМ-6

«Стрела»



1 млн. оп/сек.

2000 оп/сек.



1956

1968

2000

2007

2009

2014



ЛЕКЦИЯ «СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЙ КОМПЛЕКС МГУ»

https://www.youtube.com/watch?v=Lu0bVeDf_Zo

А.С. Антонов, к.ф.-м.н., ведущий н.с.
лаборатории параллельных информационных технологий

инфраструктура



Суперкомпьютер «Ломоносов-2»

Пиковая производительность	5 505 TFlop/s
Производительность (Linpack)	2 478 TFlop/s
Эффективность	50%
Вычислительных узлов	1 722
Центральные процессоры	Intel Haswell-EP E5-2697v3, Intel Xeon Gold 6126, Intel Xeon Gold 6142, Intel Xeon Gold 6240
Ускорители	Nvidia Tesla K40M, Nvidia P100, Nvidia V100
Оперативная память	114 ТБайт
Коммуникационная сеть	FDR Infiniband / 10 GE
Система хранения данных	1392 ТБайт, Lustre, Panasas
Операционная система	CentOS 7

1 стойка = 256 узлов:
Intel Xeon + NVIDIA K40 + NVIDIA P100 + NVIDIA V100
7 стоек = 5.5 PFlop/s



Использование суперкомпьютера МГУ
«Ломоносов-2»: спецэффекты
для фильма «Время первых».



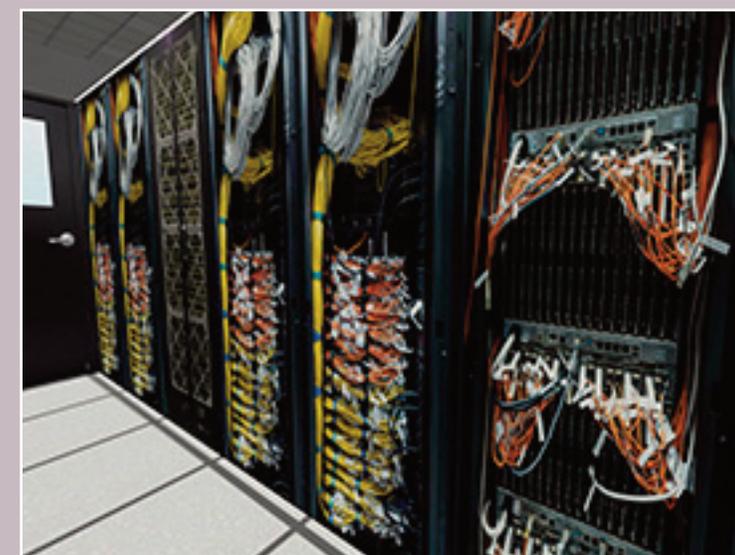
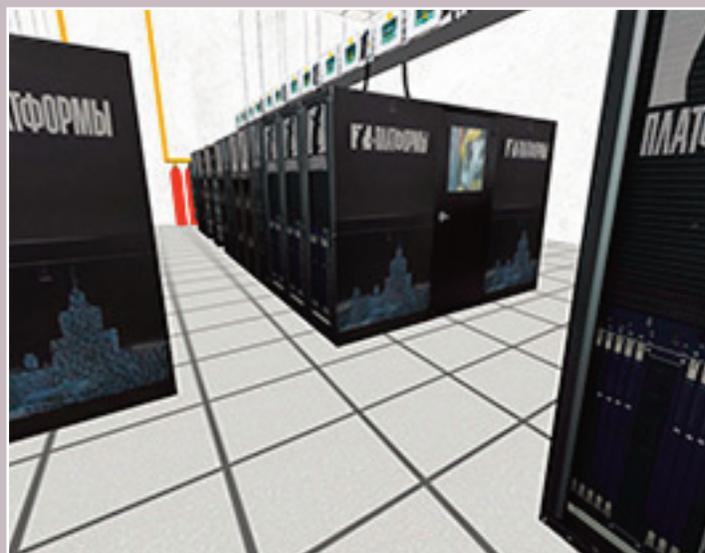
М.Тимошкин - студент 1-го курса магистратуры факультета ВМК МГУ, занявший 2-е место за разработку данного проекта в Молодёжном конкурсе научных исследований НИВЦ МГУ-2020.



Соболев С.И. - Научный руководитель проекта – к.ф.-м.н., с.н.с. НИВЦ

«ВИРТУАЛЬНЫЙ ОНЛАЙН-ТУР ПО СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОМУ КОМПЛЕКСУ МГУ»

Онлайн-экскурсия «Виртуальный онлайн-тур по суперкомпьютерному комплексу МГУ» была представлена в виртуальном Музее науки фестиваля Наука 0+. Это цифровое пространство, которое открылось в год 15-летия фестиваля для всех желающих посетителей. Бесплатная онлайн-площадка с уникальными стендами, 3d-экспонатами, научными экспозициями, информационными карточками, гидами и даже секретами.





В.Б. Сулимов,
д.ф.м.н., заведующий лабораторией вычислительных систем и прикладных технологий программирования

ЛЕКЦИЯ «ПРИМЕНЕНИЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРОВ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ЛЕКАРСТВ»

www.youtube.com/watch?v=HGu85eKTT5g



- ### Разработка нового лекарства
- Гематологический Научный Центр РАН
 - Лаб. Профессора Ф.И.Атауллаханова – биофизика, биохимия
 - НИВЦ МГУ
 - Лаб. В.Б.Сулимова (Димонта) - Докинг, КеепBASE, дизайн ингибиторов
 - Лаб. В.В.Воеводина – Распределенные вычисления
 - Институт Органической Химии им.Н.Д.Зелинского РАН – синтез новых ингибиторов
- Дизайн молекул → Суперкомпьютерные расчеты больших массивов молекул → синтез лучших кандидатов → биохимические измерения**

Открыт и запатентован новый класс прямых ингибиторов тромбина

На рисунке показано положение 4-х новых ингибиторов в активном центре тромбина

На разработку понадобилось около 1,5 лет

IC50=2 наноМоля

Ингибирующая активность новых ингибиторов выше, чем у аргатробана

IC50=100 наноМолей



ДОКИНГ
ПРИМЕНЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
ДЛЯ РАЗРАБОТКИ НОВЫХ ЛЕКАРСТВ

В.Б. Сулимов, А.Б. Сулимов

ДОКИНГ
ПРИМЕНЕНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ
ДЛЯ РАЗРАБОТКИ НОВЫХ ЛЕКАРСТВ

М.В. Ломоносов 1711-1765

... Surely every medicine is an innovation; and he that will not apply new remedies, must expect new evils ...

... Каждое лекарство есть инновация; а кто не хочет применять новые средства, должен ждать новых бед ...

Sir Francis Bacon (1561-1626)



Д.М. Фырнин - технический руководитель проекта,
ведущий программист лаборатории информационных систем

ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ МУЗЫКАЛЬНОЕ ПРИЛОЖЕНИЕ КОНЦЕРТ TINY ORCHESTRA

(Маленький Оркестр)
bamboo-kids.com/science-2020



У посетителей образовательного музыкального приложения Концерт Tiny Orchestra, была возможность поиграть дистанционно и бесплатно скачать это приложение. Дети смогли попробовать себя в роли дирижера, а их родители — посоревноваться со своим ребёнком в увлекательной музыкальной викторине.



