

ЗАТВЕРДЖЕНО
 постановою Президії НАН України
 від 11.03.2020 № 84

КОНЦЕПЦІЯ

**Цільової програми наукових досліджень НАН України
 «Математичне моделювання у міждисциплінарних дослідженнях
 процесів і систем на основі інтелектуальних суперкомп'ютерних,
 грид- і хмарних технологій»**

Цільова програма наукових досліджень НАН України «Математичне моделювання у міждисциплінарних дослідженнях процесів і систем на основі інтелектуальних суперкомп'ютерних, грид- і хмарних технологій» на 2021–2025 роки (далі – Програма) відповідає:

- пріоритетним напрямом розвитку науки і техніки на період до 2020 р. відповідно до Закону України «Про пріоритетні напрями розвитку науки та техніки» (редакція від 16.01.2016), а саме: статті 3, п.1: «Фундаментальні наукові дослідження з найбільш важливих проблем розвитку науково-технічного, соціально-економічного, суспільно-політичного, людського потенціалу для забезпечення конкурентоспроможності України в світі та сталого розвитку суспільства і держави»;
- середньостроковим пріоритетним напрямом інноваційної діяльності галузевого рівня на 2017–2021 роки (постанова Кабінету Міністрів України від 18 жовтня 2017 року № 980);
- Положенню про цільові програми наукових досліджень НАН України і цільові наукові (науково-технічні) проекти НАН України (постанова Президії НАН України від 19.18.2018 № 340).

Визначення проблем, на розв'язання яких спрямована Програма

У сучасному світі неможливо створювати нову конкурентоздатну продукцію без застосування передових інформаційних технологій. Стало очевидним, що математичне моделювання дає можливість на порядок (а інколи і більше) підвищити ефективність розв'язання різноманітних задач, зокрема у сфері науки, техніки, економіки, промисловості, державного управління, в галузі національної безпеки та оборони тощо. Створення новітніх інформаційних технологій визначає рівень науково-технічного розвитку держави. Вони дозволяють розширити горизонти пізнання світу, вивчати нові процеси, об'єкти та явища. З іншого боку, завдяки використанню методів математичного

моделювання, комп'ютерних технологій можна розв'язувати великорозмірні надскладні обчислювальні задачі. Для прикладу, при математичному моделюванні міцнісних характеристик літака в цілому виникає необхідність у розв'язуванні системи лінійних алгебраїчних рівнянь, порядок якої становить близько 30 млн. Постає проблема подолання трансобчислювальної складності.

В такому випадку високопродуктивні обчислення і суперкомп'ютерні технології на основі паралельних обчислень є одним з основних інструментів (а інколи і єдиним) математичного моделювання в наукових й інженерних дослідженнях.

Математичне моделювання як методологія дослідження нових процесів, об'єктів та явищ методами обчислювального експерименту є універсальною, інваріантною відносно предметної галузі, може бути локомотивом наукових досліджень для потреб розвитку будь-якої сфери: науки, економіки, національної безпеки та оборони України тощо.

Єврокомісія започаткувала декілька Європейських платформ, щоб сприяти розвитку суперкомп'ютерних технологій, таких, як Європейська хмара відкритої науки, Європейська технологічна платформа для високопродуктивних обчислень з метою спільного розроблення та використання суперкомп'ютерних технологій та їх застосувань, а також Суперкомп'ютерні ексафлопсні проекти в рамках програми ЄС досліджень та інновацій «Горизонт 2020». Крім того, Єврокомісія з питань єдиного цифрового ринку Європи оголосила амбітний проєкт і анонсувала виділення 1 млрд. євро на створення власного Європейського суперкомп'ютера, який посідав би лідируючі позиції в списку Top 500 та забезпечував дослідження та інновації за участю вчених, бізнесу та промисловості, зокрема для розроблення штучного інтелекту та розв'язання складних задач у таких сферах, як охорона здоров'я та безпека.

Впровадження в Європі та світі Європейської хмари відкритої науки та пріоритетів Відкритої науки, подальший розвиток інструментів та потужності ІКТ дає можливість створення спільної інфраструктури даних для проведення міждисциплінарних та багатодисциплінарних досліджень на інституційному, національному та міжнародному рівні.

Підтримка та розвиток спільної мережі між науковими установами для віддаленого та спільного доступу до даних, розвиток e-інфраструктур на основі високопродуктивних та з високою пропускну здатністю обчислень, зберігання та оброблення даних зі швидкістю та потужністю, які були неможливі раніше, створення нових інструментів для колективних досліджень та нові способи їх оцінювання дозволяють суттєво підвищити ефективність і результативність зв'язків між вченими НАН України та світу в спільних колабораціях. Відкриття даних зовнішньому світу дають можливість НАН України створювати центри компетенції та цифрові інноваційні

хаби для міжнародного співробітництва з аналогічними центрами та бізнесом через державно-приватне співробітництво. Наслідком цього стала поява нових методів та інструментів дослідження, які були просто неможливі ще десять років тому.

Машинне навчання, штучний інтелект і технології віртуальної реальності є прикладами інновацій, пов'язаних з даними, які можуть спричинити трансформаційні зміни у різних дослідженнях протягом найближчого десятиліття.

Нині в Україні створено інфраструктуру для математичного моделювання на основі високопродуктивних обчислень на базі ресурсних центрів. Завдяки зусиллям Інституту теоретичної фізики імені М.М.Боголюбова НАН України такі центри були об'єднані в грид-мережу – Український національний грид (УНГ), що забезпечує широкому колу академічних установ та інших організацій доступ до необхідного обчислювального ресурсу для математичного моделювання процесів і явищ у різних галузях науки та інженерії.

Роботи на підтримку формування такої інтегрованої інформаційної інфраструктури наукових досліджень виконувались у рамках Державної цільової науково-технічної програми впровадження і застосування грид-технологій на 2009–2013 роки і комплексної цільової програми НАН України «Грид-інфраструктура і грид-технології для наукових і науково-прикладних застосувань» (2014–2018 рр.). Головним змістом зазначених робіт було об'єднання українських кластерів у грид-інфраструктуру УНГ, збільшення пропускної здатності каналів обміну даних, підвищення потужності та якості обчислювальних грид-кластерів, впровадження у наукові дослідження грид- і хмарних технологій розподілених обчислень. Натомість програма «Математичне моделювання у міждисциплінарних дослідженнях процесів і систем на основі інтелектуальних суперкомп'ютерних, грид- і хмарних технологій», що пропонується, спрямована на проблему розвитку математичного й програмного забезпечення паралельних обчислень та їх застосувань у різних галузях науки і інженерії, розвиваючи на сучасному етапі напрям програми наукових досліджень НАН України «Створення ефективних інтелектуальних інформаційних технологій, високопродуктивних ЕОМ та засобів захисту інформації» («Інтелект») на 2010–2015 рр. У технічному сенсі програма спирається на результати, отримані за обома напрямками.

На сьогодні Інститут кібернетики імені В.М.Глушкова НАН України – базовий ресурсний центр УНГ – має одну з найпотужніших кластерних систем – суперкомп'ютерний комплекс СКІТ з піковою продуктивністю близько 120 терафлопс і декілька десятків технологій, що дозволяють з великою ефективністю вирішувати найскладніші задачі економіки, екології, захисту інформації, закономірностей біологічних процесів, космічних досліджень тощо.

Комплекс СКІТ пройшов сертифікацію як ресурсний центр Українського національного гриду і є членом Європейської грид-інфраструктури EGI. На його базі створено Центр колективного користування НАН України.

Інститут кібернетики імені В.М.Глушкова НАН України безкоштовно надає обчислювальний ресурс суперкомп'ютера СКІТ і підтримку обчислювального процесу понад 30 академічним установам, університетам та іншим державним організаціям і підприємствам.

Досвід математичного моделювання процесів різної природи свідчить, що найбільший ефект досягається з урахуванням міждисциплінарного характеру досліджень і спільних зусиль дослідників різних галузей. Так, створено новітні комп'ютерні технології математичного моделювання складних систем і процесів для сфери державного управління та прийняття рішень для Бюджетного комітету Верховної Ради України спільно з Державною установою «Інститут економіки та прогнозування НАН України» та Інститутом телекомунікацій і глобального інформаційного простору НАН України. Розроблено низку технологій «Надра» для аналізу стану і прогнозу динаміки процесів, які відбуваються в гідротехнічних спорудах, ґрунтових схилах, масивах ґрунтів, що зазнають техногенного впливу. Зараз спільно з Інститутом геологічних наук НАН України технологія Nadra-3D використовується в роботах з оцінки запасів підземних вод регіонів України, для прийняття стратегічних рішень у сфері природокористування та будівництва важливих споруд. Спільно з літакобудівниками створено програмно-технічний комплекс на базі суперкомп'ютера СКІТ та адаптовано його для розв'язання розрахункових задач надвеликої розмірності (аеродинаміка, міцність, проектування, обробка результатів) АНТК «Антонов» на основі нових моделей та методів, що забезпечують нову якість і достовірність комп'ютерного моделювання. Здійснено математичне моделювання процесів в'язкого руйнування товстостінних елементів трубопроводів з дефектами стоншення (спільно з Інститутом електрозварювання імені С.О.Патона НАН України). Це дозволяє визначати залишковий ресурс відповідальних конструкцій та приймати обґрунтовані рішення щодо продовження нормативних термінів їх безпечної експлуатації.

Проте разом зі зростанням можливостей комп'ютерів для наукових та інженерних досліджень виникають і проблеми їх створення та застосування. Збільшення числа процесорів (ядер) у паралельних комп'ютерах означає суттєве збільшення комунікаційних втрат і зниження їх ефективності. Вже зараз є істотні відмінності за рахунок комунікаційних втрат між максимальною та експлуатаційною продуктивністю. Виявилось, що необхідно переосмислити всі відомі методи обробки інформації щодо паралельних архітектур, враховуючи як властивості математичної моделі, так і характеристики паралельного

комп'ютера. Критичною стає проблема накопичення похибок заокруглення при обчисленнях. При цьому необхідно враховувати, що для різних паралельних комп'ютерів MIMD-, SIMD-архітектури, гібридної (MIMD, SIMD) архітектури алгоритми і програми відрізнятимуться. Причому для багатьох задач збільшення кількості обчислювальних пристроїв ще не означає прискорення їхньої дії. Оптимізація топології комп'ютерів для конкретної задачі стає нагальною необхідністю.

В найближчій перспективі – ера ексафлопсних обчислень (тисяча трільйонів операцій з плаваючою крапкою в секунду). Перехід до ексафлопсних обчислень змінює саму парадигму використання суперкомп'ютерів, її програмну модель. Критичну роль починають відігравати не обчислення, а процес збереження, переміщення та ефективного використання даних.

Інформатика майбутнього – це квантова інформатика. На сьогодні у світі вже виконано низку принципів досліджень щодо квантової обробки інформації. Передбачається, що створення повноцінного масштабованого квантового комп'ютера та застосування його для криптоаналізу дозволить побудувати принципово нові моделі й методи захисту інформації. На часі також дослідження проблем квантових обчислень для математичного моделювання, що забезпечить інтенсивний, принципово новий шлях нарощування ресурсу високопродуктивних обчислень. І одним із завдань Програми є підготуватись до цього вже зараз.

Ключовою проблемою математичного моделювання процесів, систем та об'єктів, незалежно від їх природи (механічних, фізичних, економічних, медичних, соціальних тощо), є проблема достовірності отримуваних комп'ютерних результатів. Відомо, що в ряді випадків при вирішенні наукових та інженерних задач на комп'ютерах користувачі одержують машинні розв'язки, які не містять фізичного змісту. Тому є багато причин, але найчастіше це відбувається через похибки в початкових даних, відмінності властивостей математичних і машинних моделей задач, відмінності арифметики і комп'ютерної арифметики та ін. Принципово, що у зв'язку з цим математичну модель з наближеними даними слід розглядати як таку, що має апіорі невизначені властивості, які можуть змінюватися в межах похибки вихідних даних.

Звідси випливає одне з завдань математичного моделювання: в комп'ютерному середовищі дослідити властивості машинної задачі, побудувати алгоритм отримання наближеного розв'язку та дати оцінку його точності.

Крім того, в сучасних умовах визначальну роль у вивченні й управлінні складними процесами і системами різної природи (фізичними, соціально-економічними, екологічними та іншими) відіграє проблема великих даних (Big Data), що породжена як гігантськими

обсягами первинних даних, накопичених цивілізацією, так і наявними темпами прискорення їх накопичення внаслідок реалізації концепції «розумних об'єктів» (на зразок регіону, міста, підприємства, дому). Внаслідок цього виникла нагальна потреба розроблення методів і засобів інтелектуального аналізу великих обсягів даних у реальному часі з метою розпізнавання в них прихованих закономірностей, автоматичного видобування релевантних нових знань, побудови на цій основі сценаріїв поведінки складних систем та застосування сучасних високопродуктивних обчислювальних ресурсів.

Очевидно, що використання тільки національного обчислювального ресурсу звужує можливості математичного моделювання з точки зору ресурсного забезпечення. Тому актуальним і доцільним є створення в рамках концепції УНГ інфраструктури хмарних обчислень і її інтеграція в Європейський дослідницький простір та Європейську хмару відкритої науки.

Інноваційний підхід до реалізації Програми забезпечить реалізація парадигми: комп'ютерна математика, високопродуктивні обчислення (НРС), штучний інтелект. Реалізація такої тріади дозволяє істотно перерозподілити роботи з постановки і розв'язування задач між користувачем і комп'ютером порівняно з традиційними технологіями, автоматизувати процес математичного моделювання, забезпечити достовірність комп'ютерних розв'язків та істотне скорочення часу математичного моделювання.

Мета Програми

Головною метою програми є розроблення методології та створення сучасної інформаційної і ресурсної інфраструктури математичного моделювання складних процесів різної природи, систем та об'єктів у різних галузях економіки й суспільства.

Програма націлена на підвищення ефективності наукових досліджень та отримання принципово нових результатів, на вирішення нерозв'язних задач на основі новітніх світових досягнень в галузі інтелектуального аналізу великих даних, системного аналізу, штучного інтелекту, високопродуктивних обчислень і суперкомп'ютерних, гід-та хмарних технологій.

Сьогодні в усіх галузях народного господарства неможливо досягти значного прогресу без впровадження новітніх комп'ютерних технологій на основі нових досягнень у галузі комп'ютерних наук. Розроблення уточнених математичних моделей, урахування якомога більшого числа факторів, забезпечення достовірності комп'ютерних розв'язків, одержання, зберігання, передавання й перетворення інформації в системах управління приводить до розв'язання задач

надвеликої розмірності, для реалізації яких недостатньо ресурсів сучасних персональних комп'ютерів і робочих станцій. Вирішення проблеми лежить у площині створення математичного інструментарію та розроблення суперкомп'ютерного ресурсу з використанням вітчизняних і світових досягнень, у тому числі грид- і хмарних ресурсів та їх інтеграції у Європейський дослідницький простір. Можливості сучасних суперкомп'ютерів (висока продуктивність і значні об'єми запам'ятовуючих пристроїв) дозволяють вирішувати нові науково-технічні проблеми проривного характеру для багатьох галузей народного господарства, істотно скорочувати кошти і час на розроблення об'єктів сучасної техніки.

Структура Програми

Математичне моделювання у міждисциплінарних дослідженнях процесів і систем різної природи як методологія дослідження нових процесів, об'єктів та явищ методами інтелектуального аналізу великих даних (Big Data), системного аналізу, штучного інтелекту та обчислювального експерименту є універсальною, інваріантною відносно предметної галузі і може бути локомотивом наукових досліджень для потреб розвитку будь-якої сфери людської діяльності: науки, економіки, національної безпеки та оборони України тощо.

Структура програми відповідає пріоритетним напрямкам досліджень і включає такі розділи.

1. Розроблення методологічних основ математичного моделювання на основі суперкомп'ютерних технологій.
2. Розроблення методів високопродуктивних обчислень (HPC) та інтелектуальних систем для автоматизації дослідження та розв'язання складних задач.
3. Розвиток об'єднаної грид- і хмарної інфраструктури для розподілених обчислень та її інтегрування в Європейську хмару відкритої науки, розроблення хмарно-орієнтованих сервісів, сервісів машинного навчання та штучного інтелекту.
4. Розроблення та дослідження методології, моделей та інструментів системного аналізу в міждисциплінарних дослідженнях на основі інтелектуального аналізу великих даних (Big Data).

Очікувані результати Програми

Основним результатом виконання Програми буде досягнення нового рівня фундаментальних знань у галузі математичного моделювання, інтелектуального аналізу великих даних і створення конкурентоспроможних технологій аналізу й управління складними процесами і явищами різної природи на основі штучного інтелекту, суперкомп'ютерних, грид- і хмарних технологій, що дозволять отримати принципово нові результати в різних сферах науки й інженерії, людської діяльності, у тому числі:

- створення теоретичних засад та науково-обґрунтованої методології математичного моделювання, оптимізації, оптимального керування та ідентифікації складних процесів та систем на основі високопродуктивних обчислень та суперкомп'ютерних технологій;

- розроблення та дослідження математичних моделей міждисциплінарних, неklasичних, з розривними розв'язками, дробовими похідними, наближеними або неточними вихідними даними, побудова моделей на основі інтелектуального аналізу даних;

- розроблення та дослідження методів та комп'ютерних алгоритмів високопродуктивних обчислень (HPC), включаючи паралельні, розподілені, гетерогенні, гібридні, грид- та хмарні обчислення; оцінка якості комп'ютерного розв'язку в умовах наближених даних;

- дослідження технологій квантових обчислень, багаторозрядної арифметики, оптимізації обчислень для математичного моделювання на основі суперкомп'ютерних технологій;

- розроблення методів оброблення, зберігання, стиснення, переміщення та інтелектуального аналізу великих обсягів даних, розроблення теорії та засобів захисту інформації та кібернетичної безпеки;

- розроблення методології створення інтелектуальних систем для побудови моделей, методів, програмного забезпечення, автоматичного дослідження та розв'язування задач, адаптивного налаштування методів і програм на комп'ютерне середовище, створення інтелектуальних програмно-технічних комплексів з елементами штучного інтелекту;

- розроблення методології системного аналізу, методів і засобів системної математики для розв'язання широкомасштабних міждисциплінарних завдань в різних галузях народного господарства країни;

- розроблення теоретичних основ, методів і алгоритмів ймовірно-статистичного та інтелектуального аналізу даних, а також моделей динамічних процесів в економіці, фінансах, екології, медицині за наявності структурно-параметричних невизначеностей в даних і моделях;

- створення систем підтримки прийняття рішень та онлайн-інструментарій для моделювання і візуалізації стратегії соціально-економічного розвитку України;

- розроблення інструментарію для оцінювання та сценарного планування сталого розвитку об'єднаних територіальних громад в ході проведення адміністративно-територіальної реформи в Україні;

- розроблення наукових платформ, нових методів та інструментів з обробки відкритих даних, зокрема на основі машинного навчання, глибинного навчання, штучного інтелекту і технології віртуальної реальності;

- формування механізмів та стимулів з відкриття даних, забезпечення ефективної координації наукових фундаментальних і прикладних досліджень, які потребують високопродуктивних обчислень і обробки великих масивів даних;

- створення віртуального центру компетенції, що інтегрований у віртуальний центр компетенції EGI, для передачі та обміну знань і навичок використання гід- та хмарної інфраструктури для обробки великих об'ємів даних;

- розширення співробітництва з міжнародними гід- і хмарними платформами, створення умов для інтеграції у світовий дослідницький простір, розширення участі у світових, зокрема європейських, проєктах;

- створення віртуального національного центру компетентності з цифрової науки та надання інформаційно-обчислювальних послуг національним та міжнародним дослідникам та їхнім колабораціям;

- математичне моделювання складних процесів і систем для різних галузей науки й інженерії з використанням суперкомп'ютерних технологій, зокрема: математичне моделювання аеродинаміки, міцності, прогнозування експлуатаційного ресурсу, обробка даних для машинобудівних галузей України (літакобудування, суднобудування, трубопровідний транспорт, промислове та цивільне будівництво тощо); комп'ютерне моделювання в галузі нанотехнологій; дослідження стану техногенно-геологічних систем вугленосних формацій і вивчення генерованих в них фізичних полів і геологічних процесів; моделювання екологічної стійкості міст і навколишнього природного середовища, моделювання та розв'язання медико-біологічних проблем; прогнозування соціально-економічних процесів з метою сприяння будові відкритого суспільства в інтересах сталого розвитку; чисельне моделювання нестационарних взаємозв'язаних електромагнітних, теплових і гідромеханічних процесів в електромагнітних системах;

- обробка зображень і розпізнавання образів під час моніторингу поверхні Землі за знімками, отриманими з супутників; моделювання змін клімату з метою вжиття невідкладних заходів щодо боротьби з такими змінами та їх наслідками; створення матеріалів із заданими характеристиками тощо.

Виконання Програми передбачає проведення комплексних міждисциплінарних досліджень та впровадження отриманих результатів, співпрацю установ НАН України з університетами, підприємствами різних галузей народного господарства, а також залучення молодих учених до виконання проєктів Програми.

Важливим результатом виконання Програми також може бути збереження і залучення вітчизняного науково-технічного та виробничого потенціалу до інноваційного напрямку розвитку науки і технологій, створення нових робочих місць для висококваліфікованих працівників, поліпшення навколишнього середовища та якості життя людини, створення міжнародного попиту на українську науку.

Строки виконання Програми та орієнтовний обсяг фінансування

Виконання Цільової програми наукових досліджень НАН України «Математичне моделювання у міждисциплінарних дослідженнях складних процесів і систем на основі суперкомп'ютерних, гід- і хмарних технологій» передбачається протягом 2021–2025 рр.

Фінансування Програми планується здійснювати протягом п'яти років за рахунок коштів державного бюджету України та інших джерел.

Ефективне виконання завдань Програми потребує фінансування обсягом 15 млн. грн. на рік.

З огляду на світові тенденції, зростання кількості користувачів та рівня складності задач, а також виняткову важливість застосування сучасних суперкомп'ютерних комплексів для забезпечення реалізації наукових досліджень і розробок за пріоритетними напрямками необхідно вжити заходів щодо модернізації та збільшення потужності суперкомп'ютера СКІТ до 150 Тфлопс із перспективою подальшого її нарощування до 400–450 Тфлопс.

Організації – потенційні виконавці

У Програмі передбачається участь наукових установ відділень інформатики, математики, механіки, наук про Землю, фізики і астрономії, біохімії, фізіології і молекулярної біології, економіки, фізико-технічних проблем матеріалознавства, фізико-технічних проблем енергетики НАН України та інших установ у співпраці з закладами вищої освіти.

Базою фундаментальних досліджень і технічних засобів з високопродуктивних обчислень будуть Інститут кібернетики імені В.М.Глушкова НАН України, Центр колективного користування суперкомп'ютерним комплексом СКІТ, Український національний гід та його інфраструктура.