ПРЕЗИДІЯ НАЦІОНАЛЬНОЇ АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

ПОСТАНОВА

19.04.2023 м. Київ № 167

Комп'ютерне моделювання фізичних
явищ і процесів у конденсованих системах:
стан та перспективи розвитку

Заслухавши та обговоривши доповідь директора Інституту фізики конденсованих систем НАН України доктора фізико-математичних наук Т.М.Брика «Комп'ютерне моделювання фізичних явищ і процесів у конденсованих системах: стан та перспективи розвитку», Президія НАН України відзначає, що атомістичне комп'ютерне моделювання є одним із важливих шляхів проведення наукових досліджень поряд з теорією та експериментом.

Від часу створення першого найпростішого методу комп'ютерного моделювання Монте-Карло відбулися революційні зміни, пов'язані з розробленням принципово нових алгоритмі завдяки яким сьогодні можна моделювати реальні фізичні процеси з використанням мільярдів частинок, що, по суті, є високоточними комп'ютерними експериментами. Таке моделювання базується на законах статистичної фізики, що дає можливість однозначно задавати та контролювати основні термодинамічні параметри досліджуваної системи. За допомогою сучасних методик комп'ютерного моделювання можна досліджувати фундаментальні проблеми, які мають велике технологічне значення, зокрема мікроскопічні механізми згортання протеїнів, молекулярні процеси, що спричиняють рак або хворобу Альцгеймера, мікроскопічну структуру та іонний транспорт через біологічні мембрани, структуру і динаміку нанокомпозитів тощо.

Широке застосування та поширення передових методик комп'ютерного моделювання в фізиці, хімії, біології, матеріалознавстві та нанотехнологіях спостерігається у діяльності провідних дослідницьких центрів країн ЄС, США, Японії й деяких інших країн.

Новим важливим напрямом досліджень є першопринципне (*ab initio*) комп'ютерне моделювання фізико-хімічних процесів на електронному рівні. Першопринципним називається тому,

що електронна підсистема, яка відповідає за утворення хімічних зв'язків у речовині, розраховується на квантовому рівні без жодних модельних припущень. Отриманий таким чином розподіл електронної густини визначає сили, що діють на іони, та, відповідно, рух атомарних частинок. Важливою перевагою першопринципного комп'ютерного моделювання є можливість досліджувати різноманітні системи в умовах, для яких реальні експерименти є практично неможливими. Зокрема, основні фундаментальні знання про будову, атомний склад, температуру, швидкість поширення звуку в ядрі та зовнішній оболонці ядра Землі походять із першопринципного комп'ютерного моделювання кристалічного та рідкого заліза і його сплавів із легкими елементами при надвисоких (до 400 гігапаскаль) тисках.

Дослідження з використанням першопринципного комп'ютерного моделювання спрямовані на фундаментальні проблеми пошуку нових матеріалів, зокрема розшифровки структури металічного водню, що утворюється при високих тисках, встановлення особливостей гідратних оболонок складних молекулярних систем та з'ясування ролі електронної підсистеми у динаміці рідин.

В Україні протягом останніх десятиліть методи комп'ютерного моделювання розвиваються та застосовуються у наукових колективах Інституту фізики конденсованих систем НАН України, Інституту фізики НАН України, Інституту теоретичної фізики ім.М.М.Боголюбова НАН України, Інституту прикладної фізики НАН України, Інституту молекулярної біології і генетики НАН України, Державної установи «Інститут харчової біотехнології та геноміки НАН України», Національного наукового центру «Харківський фізико-технічний інститут», Фізико-технічного інституту низьких температур ім.Б.І.Вєркіна НАН України, Інституту металофізики ім.Г.В.Курдюмова НАН України, Інституту радіофізики та електроніки ім.О.Я.Усикова НАН України, Інституту біоколоїдної хімії ім.Ф.Д.Овчаренка НАН України, Київського національного університету імені Тараса Шевченка, Харківського національного університету імені В.Н.Каразіна. Наукові дослідження з атомістичного комп'ютерного моделювання потребують координації в межах країни та розширення співпраці з іноземними вченими.

Комп'ютерне моделювання критично залежить від розвитку обчислювальної інфраструктури. Першопринципне моделювання з великою кількістю електронів вимагає потужних суперкомп'ютерів. Частково потреба науковців в обчислювальних ресурсах задовольнялась кластерами Українського національного ґріду, які нарощували свою потужність до початку широкомасштабного російського вторгнення у 2022 році. У повоєнний час ці ресурси будуть доконечно необхідні, тому подальший розвиток Українського національного ґріду є вкрай потрібним.

Перспективи розвитку комп’ютерного моделювання пов’язані з новим підходом «машинного навчання», який використовує схему нейронної мережі. В Інституті фізики конденсованих систем НАН України підхід «машинного навчання» застосовується для передбачення стикування білків (рецепторів) і малих органічних сполук (лігандів) та розробляється методика з передбачення динамічних властивостей конденсованих систем.

Інститут фізики конденсованих систем НАН України є визнаним в Україні та за її межами центром досліджень з комп’ютерного моделювання процесів у конденсованих системах. За цією тематикою протягом останніх років тут виконано ряд міжнародних проєктів, зокрема проєкт Рамкової програми ЄС «Горизонт-2020», освітній проєкт «Еразмус+», численні міжнародні проєкти двостороннього співробітництва. Авторитет львівської школи статистичної фізики в середовищі науковців, які займаються комп’ютерним моделюванням, було продемонстровано на конференції «Ulam Computer Simulation Workshop» (Львів, 2017), на якій з доповідями виступили провідні світові експерти комп’ютерного моделювання, зокрема Даан Френкель (Кембридж, Великобританія), Джованні Чіккотті (Рим, Італія) й інші. У відомий пакет програм комп’ютерного моделювання AMBER включено оригінальний алгоритм пришвидшення сольватаційної динаміки згортання протеїнів, запропонований інститутом.

Інститут зосереджує значну увагу на питаннях підготовки кваліфікованих кадрів для роботи з потужними кластерними системами та суперкомп’ютерами, до якої залучається студентська молодь і здійснюється підготовка молодих вчених.

Зростає кількість та рівень публікацій, в яких використовуються методи комп’ютерного моделювання, за участю вчених установи. Результати науковців оприлюднено у престижних міжнародних журналах Nature Physics, Nature Communications, Proceedings of the National Academy of Sciences of USA, Scientific Reports, Physical Review, J. Chem. Phys., J. Molec. Liquids, а також кращих вітчизняних наукових виданнях.

Зважаючи на актуальність і перспективність представлених результатів, Президія НАН України відзначає, що дослідження в галузі атомістичного комп’ютерного моделювання в Україні виконуються в широкому спектрі природничих наук, однак вимагають поліпшення координації, підготовки кадрів і залучення молоді, розвитку сучасних суперкомп’ютерних і кластерних технологій та розширення міжнародної наукової співпраці, зокрема й входження у великі міжнародні проєкти. Важливим фактором інтенсифікації досліджень з використанням методів комп’ютерного моделювання має стати подальший розвиток обчислювальної інфраструктури України і, зокрема, Українського національного ґріду.

Президія НАН України постановляє:

1. Доповідь доктора фізико-математичних наук Т.М.Брика «Комп'ютерне моделювання фізичних явищ і процесів у конденсованих системах: стан та перспективи розвитку» взяти до відома.

2. Схвалити позитивний досвід Інституту фізики конденсованих систем НАН України з використання широкого спектра методик комп'ютерного моделювання і організацію ефективної взаємодії між обчислювальними та експериментальними групами вчених.

3. Інституту фізики конденсованих систем НАН України:

3.1. У поточному році активізувати дослідження з впровадження методики «машинного навчання» в моделюванні фізико-хімічних процесів у конденсованих системах.

3.2. Протягом місяця подати до Відділення фізики і астрономії НАН України пропозиції щодо поліпшення координації досліджень з атомістичного комп'ютерного моделювання в Україні та розширення міжнародної співпраці за цим напрямом.

3.3. До кінця 2023 року запланувати і провести міжнародну конференцію з досягнень атомістичного комп'ютерного моделювання в різних галузях науки з широким залученням провідних світових експертів.

3.4. У другому кварталі поточного року подати до Президії НАН України пропозиції щодо збільшення потужності обчислювальної інфраструктури Українського національного ґріду у повоєнний період.

3.5. Враховуючи досвід освітньої діяльності інституту та відсутність україномовних підручників для закладів вищої освіти України з атомістичного комп'ютерного моделювання, до кінця 2024 року підготувати та видати підручник з методів атомістичного комп'ютерного моделювання.

4. Контроль за виконанням цієї постанови покласти на Відділення фізики і астрономії НАН України та Науково-організаційний відділ Президії НАН України.

Президент
Національної академії наук України
академік НАН України **Анатолій ЗАГОРОДНІЙ**

Національна академія наук України
Секретаріат Президії
№2
м. Київ

В.о.головного вченого секретаря
Національної академії наук України
академік НАН України **Вячеслав БОГДАНОВ**