



АНДОН
Пилип Іларіонович — академік НАН України, директор Інституту програмних систем НАН України, академік-секретар Відділення інформатики НАН України, заступник голови Координаційної ради НАН України з питань інформатизації

ПРО ЦІЛЬОВУ ПРОГРАМУ НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕНЬ НАН УКРАЇНИ «МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СКЛАДНИХ МІЖДИСЦИПЛІНАРНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ НА ОСНОВІ ІНТЕЛЕКТУАЛЬНИХ СУПЕРКОМП'ЮТЕРНИХ, ГРІД- І ХМАРНИХ ТЕХНОЛОГІЙ»

Стенограма доповіді на засіданні Президії НАН України 11 березня 2020 року

У доповіді висвітлено важливість і актуальність для України створення сучасної методології, інформаційної і ресурсної інфраструктури математичного моделювання складних процесів різної природи, систем та об'єктів у різних галузях знань, побудови мережі, яка забезпечить науковим установам можливість віддаленого доступу до основних баз даних для проведення міждисциплінарних досліджень як на інституційному, так і на національному та міжнародному рівнях. Прийнято рішення про започаткування цільової програми наукових досліджень НАН України «Математичне моделювання складних міждисциплінарних процесів і систем на основі інтелектуальних суперкомп'ютерних, грід- і хмарних технологій» на 2021–2025 рр.

Шановні члени Президії!

Шановні колеги!

У сучасному світі неможливо створювати нову конкурентоспроможну продукцію без застосування передових інформаційних технологій. Уже стало очевидним, що математичне моделювання дає можливість на порядок, а в деяких випадках і більше, підвищити ефективність пошуку рішень різноманітних проблем у сфері науки, техніки, економіки тощо.

Створення новітніх інформаційних технологій визначає рівень науково-технічного розвитку держави, дозволяє розширити горизонти пізнання світу, вивчати нові процеси, об'єкти та явища. З іншого боку, використання методів математичного моделювання і комп'ютерних технологій пов'язане з необхід-

ністю розв'язування великорозмірних надскладних обчислювальних задач. Наприклад, математичне моделювання міцнісних характеристик літака в цілому приводить до системи лінійних алгебраїчних рівнянь, порядок якої становить близько 30 млн.

Отже, постає проблема подолання трансобчислювальної складності задач. У цьому аспекті високопродуктивні обчислення і суперкомп'ютерні технології на основі паралельних обчислень є одним з основних, а інколи і єдиним інструментом математичного моделювання в наукових та інженерних дослідженнях.

Математичне моделювання як методологія дослідження нових процесів, об'єктів та явищ методами обчислювального експерименту є універсальним, інваріантним відносно предметної галузі і може стати локомотивом наукових досліджень для потреб будь-якої сфери: науки, економіки, національної безпеки та оборони України тощо. Світові тренди розвитку математичного моделювання пов'язані насамперед з бурхливим зростанням суперкомп'ютерних потужностей, істотним підвищенням вимог до повноти досліджуваних моделей, надзвичайно активним розвитком в останні роки теоретичної, прикладної і обчислювальної математики, а також технологій програмування та штучного інтелекту, зокрема машинного навчання. Основними засобами реалізації високопродуктивних обчислень є суперкомп'ютери (кластерні системи), грід- та хмарні технології, графічні прискорювачі (гетерогенні системи), а також національні хмари відкритої науки.

Перші п'ять суперкомп'ютерів з рейтингу Top500 (станом на листопад 2019 р.)

Номер у рейтингу	Назва суперкомп'ютера	Швидкодія (петафлопс)
1	Summit (США)	148,6
2	Sierra (США)	94,6
3	Sunway TaihuLight (Китай)	93,0
4	Tianhe-2A (Китай)	61,4
5	Frontera (Швейцарія)	23,5

За даними міжнародного проєкту Top500, який двічі на рік оцінює 500 найпотужніших обчислювальних систем світу, нині вже всі суперкомп'ютери з рейтингу мають петафлопсну (10^{15} флопс) швидкодію. Нещодавно США заявили, що планують у 2021 р. запуск суперкомп'ютера з ексафлопсною (10^{18} флопс) продуктивністю. Найбільше суперкомп'ютерів у використанні налічується в Китаї — 216, США — 116, Японії — 29, Франції — 19. У таблиці наведено характеристики першої п'ятірки суперкомп'ютерів з рейтингу Top500. Найпотужніший на сьогодні суперкомп'ютер Summit споживає 15 МВт електроенергії, що можна порівняти з електроспоживанням понад 8 тис. середньостатистичних житлових будинків.

З метою сприяння розвитку суперкомп'ютерних технологій в ЄС Європейська комісія вже започаткувала кілька платформ, таких як Європейська хмара відкритої науки (European Open Science Cloud — EOSC), Європейська технологічна платформа для високопродуктивних обчислень з метою спільного розроблення та використання суперкомп'ютерних технологій та їх застосувань (European High-Performance Computing Joint Undertaking — EuroHPC), а також суперкомп'ютерні ексафлопсні проєкти в рамках програми ЄС з досліджень та інновацій «Горизонт-2020». Крім того, Європейська комісія з питань єдиного цифрового ринку Європи оголосила про започаткування амбітного проєкту зі створення власного європейського суперкомп'ютера, який має посісти перші позиції в рейтингу Top500 і забезпечити потреби науки, бізнесу та промисловості у проведенні досліджень та створенні інноваційних технологій, зокрема з метою розроблення штучного інтелекту, розв'язання складних завдань у сфері охорони здоров'я, безпеки тощо. На реалізацію цього проєкту передбачено виділити фінансування обсягом близько 1 млрд євро.

В Україні нині вже створено певну інфраструктуру для математичного моделювання на основі високопродуктивних обчислень на базі ресурсних центрів. Завдяки зусиллям Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова

НАН України такі центри було об'єднано в грид-мережу — Український національний грид (УНГ), що забезпечує широкому колу академічних установ та інших організацій доступ до необхідних їм обчислювальних ресурсів для математичного моделювання процесів і явищ у різних галузях науки та інженерії.

На сьогодні Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України є базовим ресурсним центром УНГ і має одну з найпотужніших кластерних систем в Україні — суперкомп'ютер СКІТ-4 з піковою продуктивністю понад 120 терафлопс і кілька десятків технологій, які дають змогу з великою ефективністю розв'язувати найскладніші задачі, які постають у таких галузях, як економіка, екологія, захист інформації, космічні дослідження, вивчення закономірностей перебігу біологічних процесів 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, який безкоштовно надає обчислювальний ресурс суперкомп'ютера СКІТ і забезпечує підтримку обчислювальних процесів для понад 30 академічних установ, університетів та інших державних організацій.

Досвід математичного моделювання процесів різної природи свідчить, що найбільший ефект зазвичай досягається в дослідженнях міждисциплінарного характеру, які поєднують зусилля фахівців з різних галузей науки. Так, 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 створено новітні комп'ютерні технології математичного моделювання складних систем і процесів для сфери державного управління та прийняття рішень.

Розроблено низку технологій «Надра» для аналізу стану і прогнозу динаміки процесів, які відбуваються в гідротехнічних спорудах, ґрунтових схилах, масивах ґрунтів, що зазнають техногенного впливу. Разом з фахівцями

Інституту геологічних наук НАН України технологію Nadra-3D було використано під час виконання робіт з оцінки запасів підземних вод регіонів України, для прийняття стратегічних рішень у сфері природокористування та будівництва важливих споруд.

Спільно з літакобудівниками ДП «Антонов» створено програмно-технічний комплекс на базі суперкомп'ютера СКІТ та адаптовано його для розв'язання розрахункових задач надвеликої розмірності в галузі аеродинаміки, міцності, проектування, обробки результатів. Цей комплекс побудовано на основі нових моделей та методів, що забезпечують високу якість і достовірність комп'ютерного моделювання.

Разом з Інститутом електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України здійснено математичне моделювання процесів в'язкого руйнування товстостінних елементів трубопроводів з дефектами стоншення. Це дало можливість у десятки разів скоротити час, необхідний для визначення залишкового ресурсу відповідальних конструкцій, і дозволило приймати обґрунтовані рішення щодо продовження нормативних термінів їх безпечної експлуатації.

У ДП «Івченко-Прогрес» використання математичного моделювання дало змогу в 2–3 рази скоротити терміни проектування окремих компонентів авіадвигунів та підвищити їх енергетичні характеристики.

Дещо детальніше зупинюся на світових трендах розвитку математичного моделювання, про які я вже згадував вище.

По-перше, разом зі зростанням можливостей комп'ютерів для виконання наукових та інженерних досліджень постають і пов'язані з цим проблеми. Так, збільшення числа процесорів (ядер) у паралельних комп'ютерах призводить до істотного зростання комунікаційних втрат і зниження ефективності їх роботи. Вже зараз через комунікаційні втрати спостерігаються помітні відмінності між максимальною та експлуатаційною продуктивністю. Виявляється, 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 слід зважати на те, що для паралельних комп'ютерів різної архітектури (MIMD, SIMD, гібридної) алгоритми і програми відрізнятимуться. Причому для багатьох задач збільшення кількості обчислювальних пристроїв ще не означає прискорення їх дії. Отже, оптимізація топології комп'ютерів для конкретної задачі стає нагальною необхідністю.

По-друге, вже у найближчій перспективі людство вступить в еру ексафлопсних обчислень. Цей перехід зумовлює зміну самої парадигми використання суперкомп'ютерів, її програмної моделі. Дедалі важливішу роль починають відігравати не самі обчислення, а процес збереження, переміщення та ефективного використання даних.

По-третє, інформатика майбутнього — це квантова інформатика. На сьогодні вже отримано низку ключових результатів з квантової обробки інформації. На думку фахівців, створення повноцінного масштабованого квантового комп'ютера та застосування його для криптоаналізу дасть поштовх до побудови принципово нових моделей і методів захисту інформації. На часі також дослідження проблем квантових обчислень для математичного моделювання, що забезпечить новий інтенсивний шлях нарощування ресурсу високопродуктивних обчислень. І готуватися до цих змін потрібно вже зараз.

Важливою проблемою математичного моделювання процесів, систем та об'єктів, незалежно від їх природи (механічні, фізичні, економічні, медичні, соціальні тощо), є проблема достовірності отримуваних комп'ютерних результатів. Як відомо, іноді при вирішенні наукових та інженерних задач на комп'ютерах користувачі одержують машинні розв'язки, які не мають фізичного змісту. Причин цьому багато, але найчастіше такий результат пов'язаний з похибками в початкових даних, відмінностями між властивостями математичних і машинних моделей задач, специфічністю

комп'ютерної арифметики тощо. У зв'язку з цим математичну модель з наближеними даними слід розглядати як таку, що має апріорі невизначені властивості, які можуть змінюватися в межах похибки вихідних даних. Звідси випливає одне із завдань математичного моделювання: дослідити в комп'ютерному середовищі властивості машинної задачі, побудувати алгоритм отримання наближеного розв'язку і дати оцінку його точності.

Крім того, в сучасних умовах визначальну роль в управлінні соціально-економічними процесами відіграє проблема великих даних (Big Data), породжена як гігантськими обсягами баз даних, накопичених цивілізацією, так і високими темпами прискорення їх накопичення внаслідок реалізації концепції «розумних об'єктів» (на зразок міста, підприємства, будинку). Отже, виникає нагальна потреба в розробленні методів і засобів поточного аналізу великих обсягів даних у реальному часі з метою автоматичного видобування з них релевантних знань для побудови математичних моделей. Це завдання можна реалізувати лише за умови застосування сучасних суперобчислювальних ресурсів усе більшої продуктивності.

Розроблення уточнених математичних моделей, урахування якомога більшої кількості факторів, забезпечення достовірності комп'ютерних розв'язків, одержання, зберігання, передавання й перетворення інформації в системах управління сприяє розв'язанню задач надвеликої розмірності, для яких недостатньо ресурсів сучасних персональних комп'ютерів і робочих станцій. Для вирішення проблеми необхідно розробити математичний інструментарій та створити суперкомп'ютерний ресурс з використанням вітчизняних і світових досягнень, у тому числі грид- і хмарних ресурсів. Можливості сучасних суперкомп'ютерів (висока продуктивність і великі об'єми запам'ятовуючих пристроїв) дозволяють вирішувати нові науково-технічні завдання проривного характеру для багатьох галузей економіки, істотно скорочувати час і заощаджувати кошти на розроблення об'єктів сучасної техніки.

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 Українського національного гріду інфраструктури хмарних обчислень та її інтеграція в європейський дослідницький простір, зокрема в Європейську хмару відкритої науки.

Інноваційний підхід до реалізації програми забезпечить втілення парадигми: комп'ютерна математика, високопродуктивні обчислення (HPC), штучний інтелект. Реалізація такої тріади дозволяє ефективніше 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 істотно скорочення часу математичного моделювання.

Шановні колеги! На ваш розгляд виносить-ся концепція нової цільової програми наукових досліджень НАН України «Математичне моделювання складних міждисциплінарних процесів і систем на основі інтелектуальних суперкомп'ютерних, грід- і хмарних технологій», розрахованої на 2021–2025 рр. Головною метою програми є розроблення методології та створення сучасної інформаційної і ресурсної інфраструктури математичного моделювання складних процесів, систем та об'єктів у різних галузях науки і інженерії. Програма спрямована насамперед на підвищення ефективності наукових досліджень міждисциплінарного характеру на основі сучасних високопродуктивних суперкомп'ютерних, грід- та хмарних технологій, технологій штучного інтелекту та машинного навчання.

Структура програми складається з таких розділів, що відображують пріоритетні напрями досліджень:

1) розроблення методологічних основ математичного моделювання на основі суперкомп'ютерних технологій;

2) розроблення методів високопродуктивних обчислень та новітніх інтелектуальних

систем для автоматизації побудови моделей, методів та програмного забезпечення для дослідження та розв'язання складних задач;

3) розвиток об'єднаної грід- і хмарної інфраструктури для розподілених обчислень та її інтегрування до Європейської хмари 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).

Основними очікуваними результатами запропонованої програми є такі:

- забезпечення розвитку національних наукових платформ, грід- та хмарної інфраструктури для обробки великих об'ємів даних; інтеграція їх у європейський дослідницький простір, у тому числі в Європейську хмару відкритої науки;

- розроблення методів математичного моделювання та ідентифікації параметрів складних систем в умовах наближених або неточних даних, розривних розв'язків, дробових похідних;

- створення методів та комп'ютерних алгоритмів високопродуктивних обчислень (HPC) на основі суперкомп'ютерних технологій, зокрема паралельних, розподілених, гетерогенних, гібридних, грід- та хмарних обчислень;

- розроблення методів дослідження та автоматичного розв'язування задач математичного моделювання на основі штучного інтелекту, адаптивного налаштування методів і програм на комп'ютерне середовище і оцінки якості комп'ютерного розв'язку;

- інтеграція національних наукових платформ, грід- та хмарної інфраструктури для обробки великих об'ємів даних до європейського дослідницького простору;

- розроблення методології системного аналізу для розв'язання широкомасштабних міждисциплінарних завдань з метою забезпечення сталого розвитку;

- створення методів та інструментів для обробки великих даних на основі штучного інте-

лекту, інтелектуального аналізу даних і технологій віртуальної реальності;

- розроблення нових методів розпаралелювання алгоритмів та їх відображення на архітектуру високопродуктивних обчислень;

- розвиток проблематики сервіс-орієнтованого компонентного програмування на основі технологій штучного інтелекту;

- удосконалення та розроблення нових методів математичного забезпечення для підтримки життєвого циклу проведення обчислювального експерименту.

Виконання програми передбачає проведення комплексних міждисциплінарних досліджень та впровадження отриманих результатів, співпрацю установ НАН України із закладами вищої освіти, установами інших відомств та підприємствами різних галузей економіки, а також залучення молодих учених до виконання проектів програми. Серед потенційних виконавців програми у НАН України можна назвати установи Відділення інформатики, Відділення наук про Землю, Відділення фізики і астрономії, Відділення біохімії, фізіології і молекулярної біології, Відділення механіки, Відділення математики, Відділення фізико-технічних проблем матеріалознавства. Базою з проведення фундаментальних досліджень і забезпечення технічних засобів для високопродуктивних обчислень будуть Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Центр колективного користування суперкомп'ютерним комплексом СКІТ, Український національний грид та його інфраструктура.

Важливим результатом виконання програми може бути також 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, формування міжнародного попиту на українську науку. Залучення до виконання програми освітніх закладів сприятиме піднесенню на істотно вищий рівень освітньої підготовки з високопродуктивних обчислень та мотивації молоді до створення новітніх суперкомп'ютерних технологій.

На завершення доповіді наведу п'ять основних аргументів, які, на мою думку, свідчать на користь започаткування цієї програми:

1. Проблема програми на сьогодні є дуже актуальною і лежить у мейнстрімі світового науково-технічного прогресу.

2. Програма спрямована на вирішення основного завдання науки — здобуття нових знань.

3. Методологія є універсальною відносно наукової сфери застосування.

4. Результати виконання програми безпосередньо впливатимуть на підвищення якості та продуктивності наукових досліджень НАН України.

5. Програма сприятиме інтеграції вітчизняної науки у світовий та європейський науковий простір, зокрема в галузі штучного інтелекту, суперкомп'ютерних, грид- і хмарних технологій.

Отже, прошу підтримати започаткування цільової програми наукових досліджень НАН України «Математичне моделювання складних міждисциплінарних процесів і систем на основі інтелектуальних суперкомп'ютерних, грид- і хмарних технологій» на 2021–2025 рр. і затвердити концепцію, структуру та склад наукової ради програми.

Дякую за увагу!

За матеріалами засідання підготувала О.О. Мележик

Philipp I. Andon

Institute of Software Systems of the National Academy of Sciences of Ukraine (Kyiv)

ABOUT THE TARGET PROGRAM OF SCIENTIFIC RESEARCHES
OF NAS OF UKRAINE “MATHEMATICAL MODELING OF COMPLEX
INTERDISCIPLINARY PROCESSES AND SYSTEMS
ON THE BASIS OF INTELLIGENT SUPERCOMPUTER,
GRID AND CLOUD TECHNOLOGIES”

Transcript of report at the meeting of the Presidium of NAS of Ukraine, March 11, 2020

The report highlights the importance and relevance for Ukraine of creating a modern methodology, information and resource infrastructure for mathematical modeling of complex processes of different nature, systems and objects in different fields of knowledge, building a network that will provide scientific institutions with remote access to basic databases for interdisciplinary research at both the institutional and national and international levels. It was decided to launch a targeted research program of the NAS of Ukraine “Mathematical modeling of complex interdisciplinary processes and systems based on intelligent supercomputer, grid and cloud technologies” for 2021-2025.