



ЗАГОРОДНІЙ

Анатолій Глібович — академік НАН України, віце-президент НАН України, директор Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, голова наукової ради цільової комплексної програми НАН України «Грід-інфраструктура і грід-технології для наукових і науково-прикладних застосувань»

ПРО ПІДСУМКИ ВИКОНАННЯ ЦІЛЬОВОЇ КОМПЛЕКСНОЇ ПРОГРАМИ НАН УКРАЇНИ «ГРІД-ІНФРАСТРУКТУРА І ГРІД-ТЕХНОЛОГІЇ ДЛЯ НАУКОВИХ І НАУКОВО-ПРИКЛАДНИХ ЗАСТОСУВАНЬ» ЗА 2014–2018 рр.

Стенограма доповіді на засіданні Президії НАН України 27 березня 2019 року

У доповіді наведено найважливіші результати, отримані під час виконання цільової комплексної програми НАН України «Грід-інфраструктура і грід-технології для наукових і науково-прикладних застосувань» за 2014–2018 рр.

Вельмишановний Борисе Євгеновичу!
Вельмишановні члени Президії!

Цільова комплексна програма наукових досліджень НАН України «Грід-інфраструктура і грід-технології для наукових і науково-прикладних застосувань», затверджена постановою Президії НАН України від 11.12.2013 № 164-а, виконувалася протягом 2014–2018 рр. і виникла як природне продовження Державної науково-технічної програми з впровадження і використання грід-технологій.

Метою програми був подальший розвиток грід-технологій та розширення сфери їх застосування в наукових і науково-прикладних дослідженнях у НАН України, розроблення і впровадження нових апаратних і програмних методів та засобів високопродуктивних наукових обчислень, забезпечення участі вчених НАН України в міжнародних грід-проектах і організаціях. Її основними завданнями і пріоритетними напрямами було визначено:

1. Розвиток матеріально-технічної бази грід-технологій і високопродуктивних обчислень та їх застосування в наукових і науково-практичних дослідженнях, а саме:

- підтримка та розвиток базового координаційного центру Українського національного гріду (УНГ);

- розвиток ресурсних центрів (грід-сайтів);
- побудова об'єднаної інфраструктури для розподілених обчислень, яка складається з традиційної грід-інфраструктури та хмарної інфраструктури;

- розроблення каталогу універсальних сервісів УНГ і впровадження сервісно-орієнтованих обчислень;

- забезпечення пропускну здатності оптоволоконних каналів зв'язку між ресурсними центрами не менше ніж 1 Гб/с та підвищення її до вимог європейської мережі GEANT-3;

- розвиток і супроводження комплексної системи захисту інформації УНГ;

- системне інтегрування УНГ у європейську інфраструктуру та Європейську хмару відкритої науки.

2. Застосування грід-технологій у фундаментальних дослідженнях та підтримка віртуальних організацій у таких тематичних напрямках:

- фізика і астрофізика високих енергій, астрономія;

- науки про життя;

- фізичні основи матеріалознавства, нанофізика і наноматеріали;

- геофізика, метеорологія, кліматологія, науки про Землю;

- суспільно-економічні науки.

3. Застосування грід-технологій та підтримка відповідних високопродуктивних обчислень у прикладній сфері:

- практична медицина (у співпраці з Національною академією медичних наук України);

- інженерні розрахунки;

- екомоніторинг, дистанційне зондування Землі, прогнозування природних явищ.

4. Підготовка фахівців з грід-технологій та хмарних обчислень:

- підготовка фахівців з грід-технологій та хмарних обчислень;

- запровадження курсів цифрової науки у закладах вищої освіти України.

Загалом за програмою було виконано 93 проекти із загальним фінансуванням 11 235 тис. грн. Головним результатом програми стало те, що академічна грід-інфраструктура на-

була розвитку і було забезпечено виконання наукових досліджень з використанням грід- та хмарних технологій, що сприяло активізації міжнародної співпраці, налагодженню ефективних зв'язків з американським відкритим науковим грідом (OSG), польським грідом (PL-Grid), міжнародними грід-організаціями (EGI, WLCG), а також забезпечено доступ до світових обчислювальних ресурсів.

За роки виконання програми за першим її напрямом забезпечено подальший розвиток матеріально-технічної бази грід-технологій і високопродуктивних обчислень, розширено їх застосування в наукових і науково-практичних дослідженнях. Збережено та забезпечено функціонування Національної грід-інфраструктури України (NGI-UA) як повноправного члена міжнародного грід-співтовариства. Станом на грудень 2018 р. грід-інфраструктура NGI-UA налічувала 13 грід-сайтів у стані «сертифікований» (промислова експлуатація), які відповідають умовам Угоди щодо операційного рівня EGI:

- 1) Kharkov-KIPT-LCG2 — Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут» (ННЦ ХФТІ);

- 2) UA-BITP — Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України;

- 3) UA-IMBG — Інститут молекулярної біології і генетики НАН України;

- 4) UA-ISMA — Інститут сцинтиляційних матеріалів НАН України;

- 5) UA-KNU — Київський національний університет імені Тараса Шевченка;

- 6) UA-BITP-ARC — Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України;

- 7) UA-ICYB-ARC — Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України;

- 8) UA-ILTP-ARC — Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАН України;

- 9) UA-PIMEE — Інститут проблем моделювання в енергетиці ім. Г.С. Пухова НАН України;

- 10) UA-NSCMBR — Науковий центр з медико-біотехнічних проблем НАН України;

- 11) UA_ICMP_ARC — Інститут фізики конденсованих систем НАН України;

12) UA-IRE — Інститут радіофізики і електроніки ім. О.Я. Усикова НАН України;

13) UA-IFBG — Інститут харчової біотехнології та геноміки НАН України.

Загалом уся грид-інфраструктура України охоплює 23 кластери, однак, як я вже сказав, лише 13 з них відповідають європейським стандартам.

Наявність робочої грид-інфраструктури та її відповідність технічним вимогам EGI дали змогу визначити УНГ як основу для створення Української хмари відкритої науки та робити кроки для подальшого її інтегрування в Європейську хмару відкритої науки, що є одним із заходів, передбачених Розпорядженням Кабінету Міністрів України «Про схвалення Концепції розвитку цифрової економіки та суспільства України на 2018–2020 роки» від 17.01.2018 № 67-р. Зокрема, у жовтні 2018 р. Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України, в якому створено базовий координаційний і ресурсний центр УНГ, та European Grid Initiative Foundation (EGI Foundation) підписали договір про участь у програмі EGI Affiliation Partners Programme, який надає Україні статус асоційованого члена EGI.eu. Інформацію про це розміщено на офіційному сайті Європейської грид-ініціативи, а представником України в цій європейській інфраструктурі є НАН України. Це дає можливість усім учасникам української грид-спільноти брати активну участь у конкурсі європейських проектів EGI на рівноправних умовах з постійними та асоційованими членами EGI.eu.

Серед найважливіших результатів, отриманих за другим напрямом програми, слід відзначити такі:

- забезпечено активну участь грид-центру рівня TIER-2 WLCG (Worldwide LHC Computing Grid) і фахівців ННЦ ХФТИ в експерименті CMS на Великому адронному колайдері в ЦЕРН. За останні два роки виконання програми вдалося оновити серверне обладнання і систему зберігання даних, що дозволило задовольнити вимоги експерименту щодо технічного забезпечення;

- забезпечено участь грид-центру рівня TIER-3 Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України в обробленні даних експерименту ALICE в ЦЕРН. Створено хмарну інфраструктуру під керуванням системи OpenStack, що відкриває можливості для організації обчислювальних хмарних середовищ і хмарних сховищ, які діють за принципом IaaS — Infrastructure as a Service (інфраструктура як сервіс). Хмарний сайт ВІТР-UA у 2015 р. було зареєстровано в інфраструктурі WLCG Cloud Service та підключено до експерименту ALICE в хмарному середовищі;

- створено умови для активного використання грид-інфраструктури в наукових дослідженнях такими віртуальними організаціями, як MolDynGrid (молекулярна біологія), MatModEn (математичне моделювання в задачах енергетики), CompuChemGridUA (квантова хімія), Multiscale (широкий спектр науково-прикладних задач), VIRGO.UA (космологія і астрофізика).

Використання грид-технологій дало змогу одержати низку важливих результатів у різних галузях науки. Так, у галузі астрономії і астрофізики було виконано дослідження властивостей темної матерії та отримано обмеження на параметри моделей фізики частинок, що залучаються для пояснення темної матерії. Оброблено дані астрофізичних обсерваторій, космічних супутників, розроблено програмне забезпечення для астрофізичних грид-обчислень (Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України).

У Головній астрономічній обсерваторії НАН України проведено астрофізичне чисельне моделювання динамічної еволюції зоряних систем галактик та галактичного центру. Досліджено злиття надмасивних чорних дір при космологічному поєднанні масивних галактик. Оброблено дані цифрового спектрального огляду неба MaNGA.

У галузі наук про життя, молекулярної та клітинної біології досягнуто важливих результатів. Наприклад, в Інституті молекулярної біології і генетики НАН України проведено розрахунки молекулярної динаміки білків, які

є мішенями для розроблення нових лікарських препаратів. Результати розрахунків використано для інтерпретації експериментального дослідження білків та їх нанокмпозитних комплексів методом ЯМР-спектроскопії (спільно з дослідниками з Польщі). Розроблено програмне забезпечення S^2 solver для обчислення узагальненого параметра упорядкування з даних моделювання молекулярної динаміки складних об'єктів. Проведено порівняльний аналіз параметра упорядкування цитокіну ЕМАР II за даними ядерного магнітного резонансу та молекулярної динаміки і встановлено їх узгодженість.

В Інституті харчової біотехнології та геноміки НАН України із застосуванням високопропускового молекулярного скринінгу, докінгу, молекулярного моделювання і молекулярної динаміки здійснено відбір інгібіторів білків Z-кільця *Staphylococcus aureus* з метою пошуку антибіотиків, здатних подолати резистентність штамів золотистого стафілокока. За результатами хемоінформатичного пошуку з використанням опорної речовини PC190723 і критеріїв «Tanimoto70» було відібрано 1 568 600 комерційно доступних сполук і створено бібліотеку, придатну для подальшого віртуального скринінгу засобами віртуальної організації CSLabGrid. За отриманими в грид результатами було відібрано 22 речовини — перспективні інгібітори мітотичного поділу *Staphylococcus aureus*.

У Науковому центрі з медико-біотехнічних проблем НАН України методами чисельного моделювання та грид-обчислень досліджено динаміку великих нейросистем. З використанням розроблених інструментальних засобів у грид побудовано області існування нових химерних станів у тривимірних моделях Курамото–Сакагучі.

Науковцями Інституту проблем математичних машин і систем НАН України у співпраці з фахівцями Національної медичної академії післядипломної освіти ім. П.Л. Шупика НАМН України сформульовано актуальні для України напрями персоналізованої медицини, в тому числі запропоновано валеологічне ба-

чення індивідуальної траєкторії здоров'я пацієнта впродовж його життя та спеціальну класифікацію діагностичних приладів для контролю цієї траєкторії, що відповідають європейським цільовим орієнтирам щодо охорони здоров'я. З використанням хмарної архітектури розроблено і розпочато дослідну експлуатацію типового веб-порталу сімейного лікаря для оцінювання стану здоров'я його пацієнтів на основі експрес-аналізу електрокардіограми та інших результатів обстеження. Відпрацьовано взаємодію між різними хмарними сервісами.

В Інституті сцинтиляційних матеріалів НАН України розроблено систему обробки, аналізу та зберігання медичних зображень. Створено проміжне програмне забезпечення для доступу лікувально-профілактичних закладів до грид-системи збереження медичних зображень та забезпечено підтримку використання грид-сервісів віртуальної організації Medgrid на базі Національного інституту серцево-судинної хірургії ім. М.М. Амосова НАМН України, а також виконано підключення до використання грид-сервісів Інституту медичної радіології ім. С.П. Григор'єва НАМН України.

Один із проектів програми було присвячено розвитку віртуального центру цифрової науки. В рамках цього проекту розроблено інформаційну веб-технологію, яка дозволяє здійснювати прогноз метеорологічних умов з високою роздільною здатністю на довільній території (Інститут проблем математичних машин і систем НАН України).

В Інституті молекулярної біології і генетики НАН України з використанням грид-сервісу проведено інтеграцію профілів генної експресії в плаценті людини за фізіологічних умов перебігу вагітності, зокрема ускладнених затримкою розвитку плоду.

На кафедрі математики Київського академічного університету підготовлено методичні онлайн-рекомендації для практичних занять з машинного навчання в галузі прикладних задач.

У Фізико-технічному інституті низьких температур ім. Б.І. Веркіна НАН України за допомогою квантово-механічних методів виконано розрахунки молекулярних структур та інфра-

червоних спектрів таутомерів 5-хлорурацилу і кількох конформерів 5-бромуридину, визначено найстабільніші його конформери. Розрахунки свідчать про можливість утворення комплексів цих речовин з графеном. Розраховано також енергії взаємодії в цих комплексах складних органічних макромолекул з графеном.

В Інституті металофізики ім. Г.В. Курдюмова НАН України досліджено динамічну поведінку металів при деформації та електронну структуру металовмісних сполук. Розраховано енергію точкових дефектів у берилії.

В Інституті фізики конденсованих систем НАН України за допомогою мезоскопічної молекулярної динаміки досліджено агрегацію та самоорганізацію плямисто-декорованих наночастинок в об'ємі і в порі, здійснено комп'ютерне моделювання кластерів і кластерних кристалів у розчинах білка лізоциму та моделювання функціоналізованих вуглецевих нанотрубок.

Активно розвивається міжнародне співробітництво. Партнерами УНГ у сфері грід-технологій є ЦЕРН, польський грід (PL-Grid), європейська грід-інфраструктура (EGI), відкритий науковий грід США (OSG). Дуже важливо, що така тісна міжнародна кооперація дає змогу грід-спільноті України не лише брати активну участь у побудові Європейської хмари відкритої науки, а й використовувати грід-ресурси іноземних партнерів.

Отже, наведені вище приклади засвідчують, що грід-інфраструктура НАН України ефективно функціонує і забезпечує стабільні високоефективні обчислення. Отримано значну кількість наукових результатів, які були б неможливими без таких обчислень. Дослідження виконувалися на високому світовому рівні, що підтверджено понад 500 публікаціями у

провідних високореєтингових наукових журналах. Крім того, зроблено близько 200 доповідей на міжнародних і вітчизняних конференціях. Тому можна вважати, що програму було успішно виконано.

Що ж далі? Зважаючи на світові тенденції розвитку ІТ-галузі в останні роки, а також завдання Цифрового порядку денного України, слід зазначити, що наступна цільова програма НАН України (якщо доцільність її буде визнано) передусім має орієнтуватися на широке застосування хмарних технологій, розроблення технологій штучного інтелекту та машинного навчання, інтелектуального оброблення текстів і баз даних. Розроблення такої програми передбачає глибоке осмислення її завдань з урахуванням наявних інтелектуальних і технічних ресурсів, визначення пріоритетів та основних напрямів і вже потім, на основі аналізу всіх об'єктивних показників, формування концепції програми. Ця робота потребує часу і значних зусиль. З огляду на це координаційна робоча група цільової комплексної програми НАН України «Грід-інфраструктура і грід-технології для наукових і науково-прикладних застосувань» ухвалила рішення поки що не ініціювати питання про продовження програми, а підготувати впродовж 2019 р. обґрунтування і сформулювати концепцію нової програми, яка враховуватиме новітні напрями розвитку інформаційних технологій.

При цьому, щоб не допустити призупинення процесу впровадження грід- та хмарних технологій, цю діяльність у 2019 р. профінансовано на основі Програми інформатизації НАН України. Конкурс вже оголошено.

Дякую за увагу!

За матеріалами засідання підготувала О.О. Мележик