

ленні результатів експериментів CMS та ALICE на БАК. Проведена підготовча робота відкриває унікальну можливість для наших науковців із ХФТІ та ІТФ взяти безпосередню участь у дослідженнях на БАК. В ІМФ, ФТІНТ, ІК проводять дослідження фізичних властивостей наноструктур, у тому числі й біологічного походження.

Дуже ефективно застосування грид-технологій в астрономії і астрофізиці. Це, зокрема, стосується моделювання динаміки галактик і зоряних скупчень. Такі дослідження проводять на кластері ГАО у співпраці з німецькими колегами. Науковці ІТФ, ГАО і КНУ спільно зі швейцарськими колегами на основі гриду створили віртуальну рентгенівську і гамма-обсерваторію, яка обробляє дані, отримані на рентгенівських і гамма-космічних телескопах. Мета цих досліджень — з'ясування природи так званої темної матерії, однієї з найактуальніших проблем сучасної фізики.

Не менш перспективним є застосування гриду в молекулярній біології і генетиці. Це і розрахунки спектрів ДНК, і моделювання молекулярної динаміки біологічних макромолекул (білків, нуклеїнових кислот та їхніх комплексів) у різних умовах, і конструювання ліків. Для підвищення ефективності таких досліджень створено віртуальну лабораторію MolDynGrid.

О.В. ПАЛАГІН,
академік НАН України,
заступник директора Інституту кібернетики
ім. В.М. Глушкова НАН України

Інформатика як галузь посідає особливе місце в сучасному процесі науково-технічного розвитку, адже інформаційні технології — це складник усіх без винятку високих технологій, тому вони постійно перебувають у центрі уваги керівників

Нааявність основ національної грид-інфраструктури допомогла Україні стати учасником найпрестижніших європейських грид-проектів і колаборацій. Зокрема, це EGEE, WLCG, EGI, що відкрило можливість повномасштабної міжнародної співпраці з використанням грид-технологій. Завдяки цьому Україна вже давно перестала бути білою плямою на картах світових грид-мереж, у чому дуже легко переконалися, відкривши будь-яку з них.

Діяльність Академії з упровадження грид-технологій знайшла підтримку і на державному рівні. Зокрема, це впливає з Указу Президента України від 11 вересня 2008 року № 827/2008 та Розпорядження Кабінету Міністрів України від 5 листопада 2008 р. № 1421-р, яким затверджено концепцію Державної цільової науково-технічної програми з упровадження та використання грид-технологій. НАН України спільно з МОН України було доручено розробити проект такої програми і подати на затвердження в Кабінет Міністрів. Цей проект розроблено, він проходить процедуру узгодження з профільними міністерствами. Сподіваюся, що, попри всі труднощі поточного моменту, програму буде затверджено. Це стане ще одним кроком на шляху інтеграції України у світову спільноту.

та політиків розвинених країн, передусім супердержав. І це не випадково. За оцінками Світового банку, у світовій індустрії ІТ обертаються вже трильйони доларів.

Зверну увагу лише на один, але найсучасніший та найактуальніший зі страте-

гічного погляду напрям, що базується на розробленні методологічних, математичних і технологічних засад розв'язання надскладних задач. Їхньою особливістю є те, що вони дають змогу вирішувати комплексні реальні соціально-економічні, екологічні, науково-технічні та інші проблеми без їх спрощення, яке часто-густо зводить нанівець результати. Розв'язання таких задач потребує не тільки великих обчислювальних потужностей, а й принципово нових і складних математичних методів системного аналізу, математичного моделювання, оптимізації та штучного інтелекту, у цілому – нових інформаційних технологій і систем. Складність цих задач не тільки у величезній розмірності й надзвичайній ємності системно-аналітичного складника, а й у міждисциплінарності, що відповідно зумовлює декомпозицію та територіальну розподіленість процесів, створення методів і технологій кооперативної взаємодії співвиконавців та нову, раніше не опрацьовану вповні проблему системної інтеграції знань у цілому і під час виконання конкретних трансдисциплінарних проектів.

Наведу кілька прикладів, що ілюструють можливості ІТ. Важливі результати і великий досвід отримано в спільних роботах з АНТК ім. О.К. Антонова, які були зорієнтовані на широкий клас розрахункових задач на базі суперкомп'ютерного комплексу СКІТ. До основних класів задач математичного моделювання ввійшли задачі міцнісного аналізу (розрахунки монолітної моделі планера, агрегата літака, літака в цілому) та задачі аеродинамічного проектування й оптимізації: моделі ізольованого крила, ізольованого фюзеляжу, повного компонування літака в крейсерській конфігурації тощо.

Визначено вимоги до технічних засобів, системного та прикладного програмного забезпечення для постановки на кластерному комплексі СКІТ з метою оптималь-

ного наближення до особливостей архітектури комплексу для ефективної реалізації розрахункових задач. Запропоновані математичні моделі напружено-деформованого стану тіла вміщують слабкотривкі прошарки, продовгуваті тріщини, зосереджені маси та ін. Шляхом використання класів розривних функцій методу скінчених елементів побудовано та обґрунтовано обчислювальні схеми підвищеного порядку точності.

Ідеться про розв'язування дискретних та напівдискретних задач великої розмірності. Увагу акцентовано на дослідженні задач із наближеними вихідними даними, зі стрічковими, профільними та розрідженими матрицями великої розмірності (порядок 10^6 – 10^7) та оцінками достовірності отриманих розв'язків.

Розвинуто апарат аналітичного перетворення великих масивів чисельної інформації та наближення функцій шляхом їх стиснення до аналітичних виразів із використанням найкращої чебишевської рівномірної апроксимації.

У сфері розв'язання екологічних проблем гетерогенних ґрунтових середовищ при великих об'ємах повнозв'язаних даних створено методологічні засади, принципово нові математичні моделі й методи та інформаційні технології, що орієнтовані на ефективне вирішення проблем екології, раціонального природокористування, оптимізації режимів забезпечення великих міст підземними водами, будівництва, добування корисних копалин, створення підземних споруд тощо. Цей технологічний комплекс узято як приклад складної системи, що розвивається.

У результаті багаторічних досліджень, проведених в Інституті кібернетики ім. В.М. Глушкова спільно з профільними інститутами наук про Землю та механіки, створено математичні моделі опису основних просторових процесів, характерних для природно-складних

тривимірних ґрунтових об'єктів. Ці моделі є класами надскладних математичних задач для рівнянь у частинних похідних із розривними розв'язками, які раніше неможливо було навіть ставити. Сьогодні для них створено ефективні методи розв'язання.

Наприклад, при реальних характеристиках динамічної системи з масивом поновлюваних даних 10^9 з часом їхніх змін близько 30 років це вимагає 45 годин роботи суперкомп'ютера СКІТ. Зауважимо, що зроблено тільки перший крок до розв'язання цієї задачі. Оскільки, наприклад, під час видобувної діяльності відбувається порушення ґрунтових мас, що потребує самоналаштування інформаційних технологій на об'єкт за даними моніторингу та шляхом розв'язання серій зворотних задач, де затрати збільшуються на порядки. Це не єдиний приклад того, що подальший розвиток інформаційних технологій пов'язаний із ростом потужності наявного суперкомп'ютерного комплексу.

Дуже цікаві результати отримано в розпізнаванні структурних компонентів просторової конформації білків. Ідеться про клас NP-повних задач із залученням Байєсових суперкомп'ютерних процедур. Результати важливі для створення нових ліків, вакцин, каталізаторів тощо.

Ще один приклад складного трансдисциплінарного проекту — магнітокардіографічний комплекс. Він відзначається надзвичайною чутливістю до тангенціальних компонентів хвилі збудження в серці і меншою залежністю вимірюваного поля від впливу багаточастотного середовища. Це досить складна технічна і математична проблема, оскільки рівень магнітних полів, породжених серцем людини, у тисячі разів нижчий, аніж природні і штучні поля навколишнього середовища. Для їх вимірювань придатні тільки датчики на основі надпровідникових квантових інтерферо-

метрів (СКВІДів), які працюють при наднизьких температурах.

Висока перешкодозахищеність дає можливість обстежити пацієнтів у звичайному приміщенні без застосування коштовної екранувальної камери, яку використовують у більшості зарубіжних центрів.

У результаті досліджень у НДІ кардіології ім. М.Д. Стражеска підтверджено, що магнітокардіографічний метод справді має найкращу чутливість у діагностиці найбільш поширених і небезпечних захворювань серця. Це діагностика ішемії міокарда, оцінювання її вираженості і прогнозування ефективності терапії; визначення ризику й уточнення механізму виникнення аритмій, а також прогнозування ефективності антиаритмічної терапії і найважливіше — діагностування кардіологічних захворювань на ранніх стадіях, коли їх лікування найефективніше. Неінвазійність і невелика тривалість обстеження дають можливість використати магнітокардіографію для масового моніторингу населення.

Останній приклад із галузі комп'ютерних інтелектуалізованих приладів — це «Флоратест» — портативний хронофлуорометр для експрес-діагностики фотосинтезу рослин. Він дає змогу швидко оцінити рівень впливу природного довкілля і забруднень на живі рослини. Робота приладу базується на вимірюванні в реальному часі кривої індукції флуоресценції хлорофілу.

Основні сфери його застосування:

- реальне *оцінення життєдіяльності* рослин після засухи, морозу, зчеплення, внесення пестицидів;
- експрес-визначення оптимальних доз хімічних добрив та біологічних добавок, що дає змогу оптимізувати кількість добрив і добавок та зменшити вміст нітратів у овочах;
- реальне визначення забруднення води, ґрунтів і повітря пестицидами, важкими металами і промисловими викидами;

- автоматизація досліджень у галузі фізіології рослин.

У процесі розроблення створено віртуальну лабораторію з проектування широкого класу приладів, бо віртуалізація — це одна з центральних парадигм розвитку сучасної інформатики.

Щодо головних проблем, які існують у сфері сучасних інформаційних технологій, то йдеться насамперед про системоутворювальну функцію інформатики в розв'язанні проблеми міждисциплінарності в наукових дослідженнях. Прогрес таких досліджень у межах традиційної парадигми розвитку науки сьогодні стримують:

- диференціація, нерівномірність та замкненість наукових дисциплін і теорій;
- слабкість системологічних досліджень еволюції наукових теорій і відсутність системології міждисциплінарних досліджень;

- неконструктивність спроб побудувати формалізовану наукову картину світу;
- відсутність достатнього досвіду й засобів забезпечення ефективної системної інтеграції та трансдисциплінарної взаємодії на рівні конструктивних наукових теорій.

Розв'язання цієї проблеми потребує посиленої уваги та спеціальної програми ІТ-підтримки. Один із її складників має стосуюнок до науки, другий — до створення Єдиної національної системи інформатизації типу ОГАС Глушкова, але на сучасному рівні. Свого часу такий проект ми подавали до Агентства інвестицій та інновацій, його обговорено в Кабміні попереднього складу. Сьогодні він може набути ще більшої актуальності у зв'язку з появою академічної мережі UARNET та українського GRID-сегмента, які можуть стати складниками загальнодержавної інфраструктури інформатизації.

В.Ф. МАЧУЛІН,
академік НАН України,
директор Інституту фізики напівпровідників
ім. В.Є. Лашкарьова НАН України

Сьогодні вже ні в кого немає сумнівів у тому, що розв'язання проблеми енергоощадження є одним із пріоритетів розвитку енергетики України.

Важливий напрям енергоощадної політики держави — економія електричної енергії, яку використовуємо для освітлення. Сьогодні в Україні на ці цілі витрачають майже 30% усієї виробленої електроенергії. Приблизно така ж ситуація і в інших країнах світу.

Звичні для всіх нас такі джерела світла, як лампи розжарювання, вже відходять в історію. Адже не більше як 7% від усієї електричної енергії, яку споживає лампа розжарювання, перетворюється на світло, решта трансформується в тепло та інші види випромінювання.

Вагомою альтернативою стали люмінесцентні лампи, енергетична ефективність яких уже в 2,5–4 рази вища порівняно з лампами розжарювання.

Однак такі освітлювальні прилади є вакуумними, містять у собі ртуть і потребують досить складних пускорегулювальних пристроїв для запуску і підтримки стабільного газового розряду (щоб не було мерехтіння) і, крім того, мають порівняно невеликий строк служби (до 10–15 тис. годин).

Останні досягнення в галузі фізики напівпровідників, оптики та оптоелектроніки допомогли створити твердотільні джерела світла з енергетичною ефективністю в 10–15 разів вищою порівняно з лампами розжарювання. Вони не містять ртуті, вакуумних