

**28.03.2019**

**Засідання Президії Національної академії наук України 27 березня 2019 року**

27 березня 2019 р. під головуванням Президента Національної академії наук України академіка Б. Патона відбулося чергове засідання Президії НАН України ([Національна академія наук України](#)).

**«Про підсумки виконання цільової комплексної програми НАН України «Грід-інфраструктура і грід-технології для наукових і науково-прикладних застосувань» за 2014–2018 роки»** доповів віце-президент НАН України, директор Інституту теоретичної фізики імені М.М. Боголюбова НАН України академік А. Загородній.

За 2014–2018 рр. в рамках Програми було виконано низку проектів, спрямованих на подальший розвиток і впровадження в НАН України нових сучасних інформаційних технологій та систем високопродуктивних обчислень, які сприяють підвищенню якості й ефективності наукових досліджень.

Дослідження та роботи згідно з основними завданнями Програми здійснювалися за такими напрямками:

- технічна та сервісна підтримка й розвинення академічної грід-інфраструктури і окремих обчислювальних кластерів в установах Національної академії наук України;
- підготовка наукової молоді, фахівців із високопродуктивних обчислювальних методів наукових досліджень;
- тематичні наукові та науково-прикладні дослідження, що потребують використання високопродуктивних засобів обчислення і великих обчислювальних ресурсів.

Головним результатом Програми є те, що академічна грід-інфраструктура отримала розвиток і забезпечила виконання наукових досліджень із 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) та доступу до світових обчислювальних ресурсів. Зокрема, в жовтні 2018 року Інститут теоретичної фізики імені М. М. Боголюбова НАН України, в якому створено Базовий Координаційний й Ресурсний центр Українського національного гріду, й EGI Foundation підписали *договір EGI Affiliation Partners Programme*, який надає Україні статус асоційованого члена EGI.eu і забезпечує умови для активної участі грід-спільноти України в побудові Європейської хмари відкритої науки й відкриває доступ до участі в конкурсі європейських проектів на рівноправних умовах із асоційованими членами EGI.eu.

Серед найважливіших результатів, отриманих у ході виконання Програми, слід відзначити такі.

В Інституті теоретичної фізики імені М.М. Боголюбова НАН України та Національному науковому центрі «Харківський фізико-технічний інститут» здійснено оброблення даних експериментів ALICE та CMS на Великому адронному колайдері в ЦЕРНі. Виконано дослідження властивостей сильно взаємодіючої адронної матерії при високих густинах енергії. Розроблено та

впроваджено модернізовані програмні коди для вимірювання розподілів множинності заряджених частинок.

У Головній астрономічній обсерваторії НАН України проведено астрофізичне числове 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.

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

У Фізико-технічному інституті низьких температур імені Б. І. Веркіна НАН України за допомогою квантово-механічних методів виконано розрахунки молекулярних структур та інфрачервоних спектрів складних органічних макромолекул із графеном. Розрахунки виконано з використанням ресурсів PL-Grid (Польща) й OSG (HTCondor, США).

В Інституті молекулярної біології і генетики НАН України розроблено програмне забезпечення **S<sup>2</sup> 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 їхню узгодженість.

В Інституті харчової біотехнології та геноміки НАН України здійснено пошук речовин, здатних подолати резистентність штамів золотистого стафілокока. За результатами хемоінформатичного пошуку було відібрано 1568600 комерційно доступних сполук. На основі молекулярного скринінгу, докінгу, молекулярного моделювання і молекулярної динаміки в грід було відібрано перспективні інгібітори (22 речовини) мітотичного поділу *Staphylococcus aureus*.

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

В Інституті сцинтиляційних матеріалів НАН України розроблено систему обробки, аналізу та зберігання медичних зображень. Створено проміжне програмне забезпечення для доступу лікувально-профілактичних закладів до грід-системи збереження медичних зображень.

Науковці Інституту проблем математичних машин і систем НАН України у співпраці з фахівцями Національної медичної академії післядипломної освіти імені П. Л. Шупика НАМН України з використанням хмарної архітектури розробили та розпочали дослідну експлуатацію типового веб-порталу сімейного лікаря для оцінювання стану здоров'я його пацієнтів на основі експрес-аналізу електрокардіограми й інших результатів обстеження. Відпрацьовано взаємодію між різними хмарними сервісами.

Усі ці досягнення засвідчують, що грид-інфраструктура НАН України ефективно функціонує і забезпечує стабільні високопродуктивні обчислення. Отримано значну кількість наукових результатів, які були б неможливими без таких обчислень. Дослідження виконано на високому рівні, що відповідає світовому. Про це свідчать понад 500 публікацій у провідних високорейтингових наукових журналах. Виголошено близько 200 доповідей на міжнародних і вітчизняних конференціях. Отже, можна вважати, що Програму успішно виконано.

Водночас сучасні фундаментальні та прикладні дослідження потребують використання високопродуктивних обчислень і оброблення інформації на основі грид- та хмарних технологій. Особливої ваги ці питання набувають у зв'язку зі створенням Європейської хмари відкритої науки (ЄХВН), яку будують на основі наявної в Європі грид-інфраструктури. Багаторічний досвід виконання програм НАН України з грид-технологій та наявність розвинутої грид-інфраструктури вказують на те, що НАН України може й надалі розвивати та впроваджувати сучасні методи високопродуктивних обчислень і зробити необхідні кроки для створення української складової ЄХВН та інтегрування її в європейську хмару. Така діяльність є вкрай необхідною для повноцінного входження України в Європейський дослідницький простір. Необхідно й далі підтримувати та розширювати міжнародну співпрацю у цій сфері. У зв'язку з цим постає питання про започаткування з 2020 р. нової цільової комплексної програми, спрямованої на розроблення та застосування досягнень інформаційних технологій з урахуванням найновітніших тенденцій їхнього розвитку (хмарно-орієнтовані сервіси, машинне навчання, штучний інтелект тощо).