



СЕРПІЄНКО

Іван Васильович — академік НАН України, директор Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України



ХІМІЧ

Олександр Миколайович — член-кореспондент НАН України, заступник директора Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ: ВІД МЕЛМ ДО ЕКЗАФЛОПСІВ

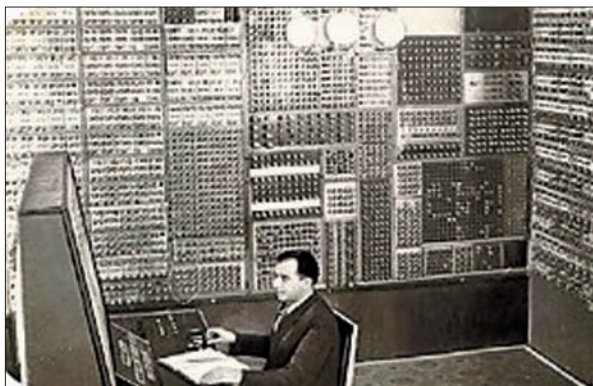
У статті простежено еволюцію математичних і технічних засобів комп'ютерного моделювання від найперших комп'ютерів до сучасних суперкомп'ютерів та від вузькоспеціалізованих розрахункових задач до міждисциплінарних моделей, які відповідають потребам широкого кола галузей вітчизняної економіки. Коротко схарактеризовано математичні напрями, в яких Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України має унікальні досягнення світового рівня. Їх поєднання з суперкомп'ютерними технологіями та сучасними напрямками інтелектуального моделювання може дати проривний ефект для отримання нових знань у сфері цифрових технологій, які сьогодні стрімко розвиваються в усьому світі.

Математичне моделювання як методологія дослідження нових процесів, об'єктів та явищ методами обчислювального експерименту є універсальною, інваріантною відносно предметної галузі і може стати локомотивом наукових досліджень для потреб розвитку будь-якої галузі: науки, економіки, національної безпеки та оборони України тощо.

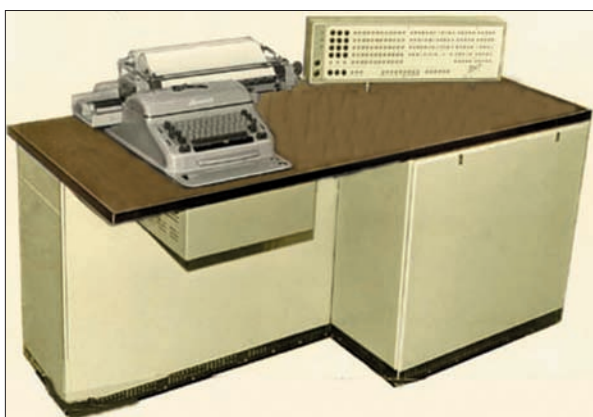
Математичне моделювання — це сукупність фундаментальних і прикладних наукових напрямів, спрямованих на вивчення процесів і явищ засобами математичних методів, обчислювальних алгоритмів і комп'ютерних технологій. Високопродуктивні обчислення і суперкомп'ютерні технології на основі паралельних обчислень сьогодні є одним з основних інструментів (а іноді і єдиним) математичного моделювання в наукових та інженерних дослідженнях. Процес математичного моделювання має, як правило, складний міждисциплінарний характер і потребує інтегрованих знань з багатьох дисциплін. Завдання з простими рішеннями вже не є актуальними.

В Інституті кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України та установах Кібернетичного центру НАН України накопичено значний технологічний та математичний інструментарій для методологічної і практичної підтримки розв'язання найскладніших задач сьогодення [1].

Україна — комп'ютерна держава. У 60-х роках минулого століття в Україні було створено першу на теренах континентальної Європи Малу електронну лічильну машину (МЕЛМ).



Мала електронна лічильна машина (МЕЛІМ)



Машина для інженерних розрахунків «МИР-1»

Головна заслуга в цьому прориві належала академіку Сергію Олексійовичу Лебедеву. Створення МЕЛІМ мало велике наукове і практичне значення, пов'язане із забезпеченням оборонних потреб СРСР та вирішенням завдань, які поставали при виконанні науково-дослідних робіт у різних галузях науки і техніки.

Слід зазначити, що створення та розвиток вітчизняних розробок обчислювальної техніки супроводжувалися отриманням серйозних результатів у галузі математичної теорії. Акцент змістився на розроблення чисельних методів розв'язання задач, орієнтованих на цифрову обробку і комп'ютерну реалізацію.

Провідниками ідеології математичного моделювання на основі комп'ютерних технологій в СРСР були Анатолій Олексійович Дородніцин і Олександр Андрійович Самарський.

А.О. Дородніцин одним з перших серед радянських учених ясно усвідомив величезну революціонізуючу роль ЕОМ у науково-технічному прогресі і багато в чому сприяв широкій комп'ютеризації народного господарства. Він дав путівку в життя низці вітчизняних ЕОМ. До кола його інтересів входили роботи зі створення прикладних програм і обчислювальних систем для наукових досліджень, автоматизації проектування і планування тощо.

У 1970-х роках в Інституті кібернетики АН УРСР під керівництвом Віктора Михайловича Глушкова було створено серію машин «МИР» (рос. Машины для инженерных расчетов), які передували персональним комп'ютерам. Ці розробки сприяли значному розширенню сфери застосування обчислювальної техніки в наукових та інженерних дослідженнях, у математичному моделюванні процесів та об'єктів різної природи. Характерною особливістю комп'ютерів серії «МИР» є зручність взаємодії людини з комп'ютером, а також наявність арифметики довільної розрядності. Алгоритмічна мова серії «МИР» вирізняється простотою і орієнтована на розв'язування інженерних задач. Внутрішня мова цих комп'ютерів має високий ступінь інтерпретації, що дає можливість контролювати виконання алгоритму і легко втручатися в хід обчислень шляхом уже введеного алгоритму, формули, коефіцієнта тощо. Зокрема, мова «Аналітик», якою було оснащено «МИР-2», давала змогу безпосередньо формулювати завдання з аналітичними перетвореннями формул і обчислювати аналітичні вирази похідних та інтегралів. Можна відзначити такі характеристики новизни та оригінальності, які вирізняли комп'ютери серії «МИР» серед наявних тоді радянських і зарубіжних комп'ютерних розробок і які є актуальними й донині:

- довільна розрядність арифметики, причому оператор «розрядність» можна було використовувати в будь-якому місці програми;
- інтерпретація мови високого рівня в комп'ютері;
- наявність спеціальної мови високого рівня «Аналітик», яка додатково дозволяла без-

посередньо формулювати завдання з аналітичними перетвореннями введених в комп'ютер формул.

Комп'ютерне моделювання на основі математичних методів ставало одним з основних засобів розроблення та створення новітніх підходів при проектуванні та керуванні складними технологічними процесами. Зокрема, в 1970-х роках Інститут кібернетики і завод «Арсенал» спроектували першу в СРСР автоматизовану систему керування гальванічним багатоменклатурним виробництвом. У цій системі розв'язувався великий комплекс економіко-математичних та оптимізаційних задач.

Під час роботи над системою «Гальванік» виявилось, що для розроблення математичної моделі та її функціонування важливим є створення математичного методу поточного розв'язання оптимізаційних задач, які виникають при визначенні чергового запуску деталей в обробку. Саме для цього І.В. Сергієнко запропонував оригінальний підхід для розв'язання дискретних оптимізаційних задач, який згодом було названо схемою методу вектора спаду. Як показали пізніші дослідження, алгоритмічна схема методу вектора спаду виявилася ефективною і дала можливість розробити на її основі ціле сімейство нових методів для розв'язання складних багатоекстремальних дискретних задач.

Наприкінці 1970-х — на початку 1980-х років на основі ідеї академіка В.М. Глушкова розпочалася робота зі створення нової архітектури багатопроцесорних суперкомп'ютерів. Ідею розроблення макроконвеєрної обчислювальної системи було реалізовано під керівництвом академіка В.С. Михалевича вже після смерті В.М. Глушкова. Було створено промислові зразки макроконвеєрного обчислювального комплексу МОК ЄС-1766 — першої багатопроцесорної обчислювальної системи з розподіленою пам'яттю і високою ефективністю розпаралелювання процесів розв'язування задач. При цьому макроконвеєрна організація обчислень дозволила отримати майже лінійне зростання продуктивності комп'ютера зі збільшенням кількості процесорів.

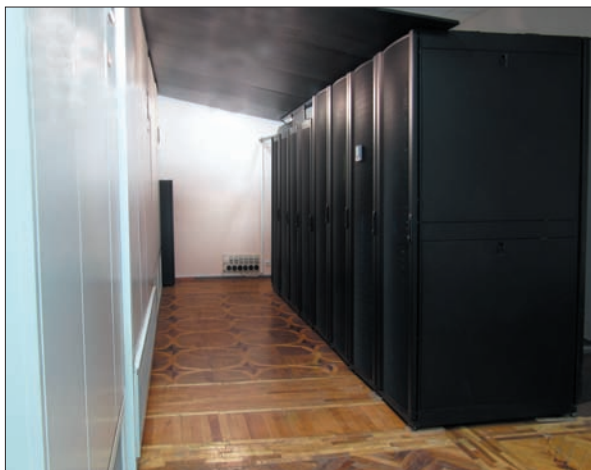


Макроконвеєрний обчислювальний комплекс МОК ЄС-1766

На МОК було розв'язано низку прикладних задач великої складності, а саме: задачі дослідження на міцність літака ІЛ-86 в цілому в інтересах ЦАГІ ім. проф. М.Є. Жуковського, чисельного моделювання ядерного вибуху спільно зі співробітниками Всесоюзного науково-дослідного інституту експериментальної фізики, дослідження взаємодії атмосфери та океану за програмою відділу обчислювальної математики АН СРСР. Результати їх розв'язування показали високу ефективність МОК і добру корельованість даних чисельних та натурних експериментів.

За ініціативою та за підтримки А.О. Дородніцина вийшла друком перша в СРСР монографія з паралельних чисельних методів «Численные методы для многопроцессорного комплекса ЕС МВК». Кілька інновацій було запропоновано як у теоретичному, так і в прикладному аспектах математики. Зокрема, розроблено циклічну схему збереження та обробки даних на розподілених обчислювальних системах, яка увійшла у світову практику створення збалансованих паралельних обчислювальних алгоритмів. Завдяки цій схемі вдалося позбутися обмеження на ефективність внаслідок ефекту Гайдна.

Сімейство суперкомп'ютерів СКІТ. На сьогодні в Україні створено інфраструктуру для математичного моделювання на основі високопродуктивних обчислень на базі ресурсних центрів, основу яких становить суперкомп'ютер Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова —



Суперкомп'ютер для інформаційних технологій СКІТ

СКІТ. Завдяки зусиллям Інституту теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова такі центри було об'єднано у грид-мережу — Український національний грид, що забезпечує широкому колу академічних інститутів та інших організацій доступ до необхідного обчислювального ресурсу для математичного моделювання процесів і явищ у різних галузях науки та інженерії.

Роботи, спрямовані на формування і підтримку такої інтегрованої інформаційної інфраструктури наукових досліджень, виконувалися в рамках Державної цільової науково-технічної програми впровадження і застосування грид-технологій на 2009–2013 рр. і комплексної цільової програми НАН України «Грид-інфраструктура і грид-технології для наукових і науково-прикладних застосувань» (2014–2018 рр.). Головною метою цих робіт було об'єднання українських кластерів у грид-інфраструктуру УНГ, збільшення пропускної здатності каналів обміну даних, підвищення потужності та якості обчислювальних грид-кластерів, впровадження в наукові дослідження грид- і хмарних технологій розподілених обчислень. Слід зазначити, що УНГ сприяв інтенсивному розвитку і методів математичного моделювання для обробки так званих великих даних (Big Data).

Сьогодні Інститут кібернетики має одну з найпотужніших кластерних систем — супер-

комп'ютер СКІТ-4 і володіє кількома десятками технологій, які дозволяють з великою ефективністю вирішувати найскладніші завдання економіки, екології, захисту інформації, дослідження та захисту навколишнього середовища, космічних досліджень, досліджень закономірностей біологічних процесів та ін. На комплексі СКІТ щороку співробітники установ 12 з 14 відділень НАН України та багатьох університетів МОН розв'язують 40–50 тис. задач. Комплекс СКІТ пройшов сертифікацію і працює як ресурсний центр Українського національного гриду, є членом європейської грид-інфраструктури EGI. У рамках співпраці УНГ з EGI комплекс СКІТ брав участь в обробленні даних Великого адронного колайдера (експеримент ALICE).

Типове використання СКІТ: дослідження білків, скринінг ДНК, розроблення нових ліків, проектування споруд і техніки (суден, літаків, гелікоптерів, вузлів електростанцій), економічне моделювання тощо. Налагоджено застосування в екології (зокрема, моделювання впливів споруд глибоководного суднового ходу «Дунай — Чорне море» на гідрологічні та морфодинамічні параметри у транскордонному контексті, прогнозування наслідків скидів вод АЕС у водосховища і прогнозування затоплення прибережних зон і заплав), енергозбереженні (система «Маневр» для оптимізації рішень у задачах добового погодинного електричного і теплового навантаження енергоблоків теплоцентралі), геології і видобутку корисних копалин (система «Надра» для аналізу усталеного руху рідини в природних тривимірних багатокомпонентних ґрунтових об'єктах з повним чи частковим вологонасиченням, програми моделювання та обробки даних сейсмозвідки складнобудованих нафтогазових родовищ з наявністю ризикових геологічних розломів, зон тріщинуватості, соляних куполів тощо), метеорології (система зведених гідрометеорологічних моделей з урахуванням супутникової інформації) та багато інших.

Спільно з літакобудівниками фахівці Інституту кібернетики розробили програмно-технічний комплекс на базі суперкомп'ютера

СКІТ і адаптували його для розв'язання розрахункових задач ДП «Антонов» надвеликої розмірності (аеродинаміка, міцність, проектування, оброблення результатів) на основі нових моделей та методів, що забезпечують нову якість і достовірність комп'ютерного моделювання.

Суперкомп'ютери успішно застосовують і в інших галузях, зокрема для розроблення новітніх комп'ютерних технологій математичного моделювання складних систем і процесів в інтересах сфери державного управління, для прийняття рішень. За ініціативою 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 ефективний сучасний інструментарій для розрахунку різних варіантів бюджетно-податкової політики на державному та регіональному рівнях і прогнозування середньострокових наслідків прийнятих рішень [2].

Створено низку технологій, зокрема технологію Nadra-3D, спрямованих на аналіз стану і прогноз динаміки процесів, які відбуваються в гідротехнічних спорудах, технічних конструкціях, ґрунтових схилах, масивах ґрунтів, що зазнають впливу великих забудов, підземних споруд, добування корисних копалин та ін., і пов'язані з рухом рідини та явищами теплопровідності. Зараз спільно з Інститутом геологічних наук НАН України технологія Nadra-3D використовується в роботах з оцінки запасів підземних вод регіонів України, для прийняття стратегічних рішень у сфері природокористування та будівництва важливих споруд.

Проте внаслідок значного відставання фінансових можливостей від необхідного мінімуму для розвитку й оновлення устаткування протягом останніх 5 років апаратна складова комплексу СКІТ поступово застаріває у фізичному й моральному сенсі. Отримане фінансування, в тому числі за конкурсними проектами і грантами, Інститут кібернетики спрямовує на підтримку працездатності та розвиток комплексу СКІТ. Так, за рахунок проектних коштів

за останні роки вдалося створити кілька нових корисних сегментів кластера для задач тривимірного моделювання і штучного інтелекту. Однак, незважаючи на ці зусилля, остаточний вихід з ладу більшої частини устаткування 10-річної давнини призвів до зменшення загальної потужності комплексу.

За нашими оцінками, для подовження терміну працездатності комплексу і збереження перспективи застосування СКІТ у науковій роботі необхідно оновити його ключове обладнання і довести продуктивність щонайменше до 100 терафлопсів. Слід зазначити, що видатки на нове обладнання разом з експлуатаційними витратами є набагато меншими за вартість оренди відповідного об'єму ресурсів на платформах хмарних обчислень Amazon Web Services чи Microsoft Azure. Орієнтовний термін окупності інвестицій у СКІТ становить 3 роки. Значну частину наявного устаткування, зокрема систему охолодження, шафи, систему безперебійного живлення, можна і далі використовувати у процесі розвитку комплексу СКІТ. Крім того, завдяки швидкій мережі комплекс СКІТ набагато ефективніший, ніж хмарні ресурси для задач з великими розрахунковими сітками.

Сімейство інтелектуальних комп'ютерів Інпарком. Інший напрям розвитку високопродуктивних обчислень — комп'ютери середньої ланки. Інтелектуальні комп'ютери сімейства Інпарком призначені для дослідження і розв'язання наукових та інженерних задач. Вони покликані заповнити нішу між персональними комп'ютерами з порівняно низьким обчислювальним ресурсом та суперкомп'ютерами. Реалізується принцип «не числом, а вмінням». На відміну від традиційних, інтелектуальні комп'ютери забезпечують дослідження властивостей задач та автоматизацію процесу адаптивного налаштування алгоритмів, програм та архітектури комп'ютера на властивості задачі. Ще одним чинником для створення комп'ютерів середньої ланки (робочих станцій) стала економічна складова — для деяких задач математичного моделювання (середніх за складністю) достатньо ресурсу робочих станцій, тоді як



Інпарком 256
32 вузли
256 процесорних ядер
512 ГБт оперативної пам'яті
2,5 терафлопси



Інпарком_g
4 вузли
32 процесорних ядра
96 ГБт оперативної пам'яті
5 терафлопсів
8 GPU
Nvidia Tesla M2090



Інпарком_pg
1 вузол
8 процесорних ядер
48 ГБт оперативної пам'яті
3 терафлопсів
2 GPU Nvidia Tesla K40



Інпарком_hr
1 вузол
64 процесорних ядра
192 ГБт оперативної пам'яті
3,5 терафлопси

використання суперкомп'ютерів дуже коштовна річ. Робочі станції можна використовувати також і як інструмент для відлагодження програм для суперкомп'ютерів.

У рамках цього проекту Інститут кібернетики спільно з ДП «Електронмаш» розробили концепцію та створили сімейство інтелектуальних паралельних комп'ютерів Інпарком різноманітних архітектур: багатоядерної (MIMD), гібридної (MIMD, SIMD) та MIMD-архітектури на основі новітніх процесорів Intel Xeon Phi.

З використанням Інпарком розв'язано складні задачі в різних галузях інженерії. Створено та впроваджено в практику цивільного і промислового будівництва першу вітчизняну інтелектуальну систему автоматизації проектування унікальних будівельних конструкцій (спільно з компанією «ЛІРА-САПР»). Досягнуто істотного скорочення часу отримання проектних рішень, що дало можливість перейти до тривимірних математичних моделей при прийнятті проектних рішень і збільшити надійність комп'ютерного моделювання. Така система особливо важлива в практиці висотного будівництва, для супроводу життєвого циклу будівель з метою їх безпечної експлуатації. Розв'язано аеродинамічні задачі обтікання планера АН-148 (спільно з ДП «Антонов»), проведено газодинамічні і міцнісні розрахунки деталей та вузлів авіадвигунів (спільно з ДП «Івченко-Прогрес»). Здійснено математичне моделювання процесів в'язкого руйнування товстостінних елементів трубопроводів з дефектами стоншення (спільно з Інститутом електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України). Це дає можливість для визначення залишкового ресурсу відповідальних конструкцій та прийняття обґрунтованих рішень щодо подовження нормативних термінів їх безпечної експлуатації. Зазначений методологічний підхід до чисельного моделювання не має світових аналогів і використовується в Інституті електрозварювання ім. Є.О. Патона НАН України для потреб атомної енергетики та трубопровідного транспорту України. Отримано суттєве скорочення часу розрахунків з вико-

ристанням вітчизняних суперкомп'ютерів (від 20 до 60 разів). Реалізовано моделювання процесу обтікання виробу і визначення аеродинамічних характеристик літальних апаратів (спільно з ДККБ «Луч»), математичне моделювання процесів фільтрації в багатокомпонентних геологічних середовищах, зокрема водоносних шарах Чернігівського регіону з розгалуженою мережею поверхневих водотоків (площа поверхні — $184\,000 \times 222\,000$ м) (спільно з Інститутом геологічних наук НАН України) тощо.

Наукові напрями з математичного моделювання та споріднених дисциплін. Стає очевидним, що з розвитком комп'ютерного парку на перший план досліджень виходять проблеми математичного характеру. Розроблення уточнених математичних моделей, залучення до комп'ютеризації все ширшого кола галузей, врахування якомога більшої кількості факторів, забезпечення достовірності комп'ютерних розв'язків, одержання, зберігання, передавання й перетворення інформації в системах керування, автоматизація обробки даних потребують нових концептуальних рішень і підходів з урахуванням новітніх принципів обробки, збереження та передачі даних.

Швидкими темпами розвиваються дослідження в галузі моделювання, оптимізації, ідентифікації об'єктів, процесів і систем різної природи, захисту інформації та надійності складних технічних систем, керування динамічними об'єктами, системного аналізу в міждисциплінарних дослідженнях, інтелектуального моделювання, паралельної математики та програмування, цифровізації різних галузей економіки.

В Інституті кібернетики створено моделі та високоточні методи дослідження процесів у багатокомпонентних середовищах. Було запропоновано (академік НАН України В.С. Дейнека) використання класів розривних функцій для дослідження крайових та початково-крайових задач з умовами спряження. Створено методологію побудови таких моделей та високоточні скінченноелементні алгоритми їх дискретизації з використанням

відповідних класів розривних функцій. Важливо, що побудовані дискретні моделі за точністю не гірші, ніж аналогічні для відповідних класів задач з гладкими розв'язками. Математичне моделювання впливу наявних природних та штучних тонких включень на досліджувані процеси (фільтрація води, фільтрація-вологоперенос) дозволило уточнити певні диференціальні вирази (умови спряження), що породжують нові неklasичні математичні задачі з розривними розв'язками [3].

Досягнення українських вчених у галузі дискретної, неперервної, недиференційованої, стохастичної та гладкої оптимізації визнано не лише в Україні, а й у світі. Представники київської школи кібернетики В.С. Михалевич, І.В. Сергієнко, Б.М. Пшеничний, Ю.М. Ермольєв, Н.З. Шор є авторами добре відомих світовій спільноті методів, таких як «київський віник», метод вектора спаду, метод лінеаризації, методи стохастичного програмування, метод розширення простору [4].

Розмірність реальних прикладних дискретних оптимізаційних задач, які виникають на сучасному етапі, на порядок перевищує розмірність задач, які розв'язували раніше. На часі розв'язання задач трансобчислювальної складності. Для них не можна використовувати наявні методи оптимізації для розв'язання складних оптимізаційних задач, оскільки для отримання оптимального рішення знадобляться місяці і навіть роки. Отже, потрібне створення принципово нових математичних методів, які є комбінацією взаємодіючих алгоритмів, що цілеспрямовано збирають і використовують інформацію про розв'язувану задачу, виконують налаштування алгоритму на цю задачу.

Для вирішення зазначеної проблеми розроблено і апробовано серію алгоритмів глобального рівноважного пошуку нового покоління для розв'язування задач про максимальний зважений розріз графа великої розмірності (до 50 000 вершин). Розроблено високоефективні об'єднання (портфелі та команди) алгоритмів для розпаралелювання процесу розв'язування складних дискретних оптимізаційних задач

великої розмірності, що виникають при прийнятті рішень у різних сферах людської діяльності (в економіці, космічних дослідженнях, біології тощо) [5].

Важливим напрямом досліджень є розвиток моделей і методів стохастичної оптимізації, в яких у явній формі враховуються імовірнісний характер досліджуваних процесів, а також ризик, пов'язаний з невизначеністю як невід'ємною ознакою процесу прийняття рішень. Актуальність цього наукового напрямку визначається необхідністю системного всебічного аналізу перспектив розвитку економіки, енергетики, сільськогосподарського виробництва та їх впливу на навколишнє середовище і людину. Розроблено лінійні, нелінійні та динамічні проблеми оптимізації складних технічних, економічних, соціологічних, біологічних систем, що включають у явному вигляді показники ризику, стохастичні мінімаксні та нестационарні задачі для керування екстремальними явищами з потенційно катастрофічними наслідками. Зазначені вище методи розроблено і впроваджено для оптимізації стохастичних мереж з випадковими потоками, оптимального контролю за забрудненням довкілля, планування сільського господарства, виробництва енергії, оптимізації комунікаційних систем, процесів управління запасами, забезпечення надійності технічних систем тощо [6].

Ще одним перспективним напрямом робіт є розроблення алгоритмів розв'язання задач великої розмірності на основі методів недиференційовної оптимізації, а саме субградієнтних методів з перетворенням простору на сполучені з різними схемами декомпозиції (за обмеженнями, за змінними та їх комбінаціями). Розроблені в Інституті кібернетики методи недиференційовної оптимізації використовувалися для розв'язання задач оптимального проектування структур відмовостійких мереж. Зокрема, було розглянуто задачі проектування мережі мінімальної вартості за умови виходу з ладу окремих її ланок, знаходження пропускних здатностей дуг відмовостійкої орієнтованої мережі, проектування оптимальної логічної структури відмовостійкої мережі, модерні-

зації відмовостійкої мережі, оптимізації мереж з урахуванням неповноти інформації, задачі перспективного планування перевезень та знаходження оптимальної номенклатури рухомого складу [7].

Розвинено теорію комбінаторної оптимізації на основі введеного формального означення поняття комбінаторного об'єкта у випадку нескінченних дискретних просторів, що дозволяє строго формалізувати як відомі, так і нові класи задач комбінаторної оптимізації. Для розв'язування прикладних задач розроблено ряд метаевристичних алгоритмів, зокрема кооперативного типу, які використовувалися при створенні інформаційних технологій розв'язування широкого кола проблем моделювання, оптимізації, підтримки прийняття рішень, серед яких — розв'язування оптимізаційних задач комбінаторного типу з різних класів, моделювання соціально-економічних процесів, побудова систем захисту і приховування інформації в спеціальних мережах та керування такими системами, керування рухомими роботизованими системами, оптимізація мереж різного призначення, проблеми обчислювальної біології та розроблення ефективних енергоощадних технологій [8].

Розроблено теорію розв'язування екстремальних задач на комбінаторних конфігураціях, а саме, на перестановках, сполученнях, розбиттях та розміщеннях з лінійною, квадратичною і дробово-лінійною цільовими функціями з обмеженнями й без них. Для розв'язання таких задач запропоновано метод спрямованого структурування, суть якого полягає в побудові орієнтованого структурного графа для певної комбінаторної конфігурації, на якому цільова функція частково упорядкована. На основі цих даних будують найчастіше поліноміальний алгоритм розв'язку задачі. Такий метод можна використовувати при розв'язуванні задач, у яких застосовуються різні комбінаторні конфігурації, наприклад у банківсько-фінансовій сфері, а також задач, пов'язаних з обробкою великих об'ємів даних, що, як правило, супроводжує розв'язання важливих задач у космічній галузі, екології, метеорології тощо [9].

Розроблено ефективні методи для вирішення широкого класу задач аналізу надійності складних технічних систем, оцінки ризику екологічно небезпечних виробництв, створення високонадійних систем захисту інформації. Розроблено національний стандарт ДСТУ 4145-2002 «Цифровий підпис, що ґрунтується на еліптичних кривих». Розроблено основи побудови інфраструктури центрів сертифікації відкритих ключів в Україні, які є невід'ємною складовою систем електронного документообігу. Розроблено новий метод стеганографічного захисту інформації, сумірний зі світовими досягненнями в цій галузі. В інтересах державних органів розроблено нові оригінальні алгоритми розв'язання задач комп'ютерної стеганографії, які дають можливість приховано передавати інформацію відкритими каналами зв'язку, а також, не знаючи таємного стеганоключа, робити висновки щодо наявності прихованої інформації в цифрових аудіо- та відеоконтейнерах і зображеннях. Цей напрям очолюють академіки НАН України І.М. Коваленко і В.К. Задірака [10, 11].

Розроблено нові методи і алгоритми керування динамічними об'єктами в умовах невизначеності. Створено ряд комп'ютерних систем, моделювальних комплексів і тренажерів, пов'язаних з керуванням космічними апаратами, пошуком рухомих об'єктів та стаціонарних цілей, керуванням безпечним злетом і посадкою літаків, «м'якою посадкою», перехопленням цілей у конфліктній ситуації. Цю тематику успішно розвивають академіки НАН України В.М. Кунцевич, А.О. Чикрій та їхні учні [12, 13].

Системний підхід до дослідження складних міждисциплінарних проблем різної природи розвивається в роботах академіка М.З. Згуровського. Засобами системного аналізу як прикладної наукової методології розроблено методологічні і теоретичні основи формалізації й вирішення міждисциплінарних задач, які стосуються різних предметних галузей. Запропоновано методи формалізації системних задач, приведення їх до форми вирішення в реальних умовах, що характеризуються наяв-

ністю великої кількості суперечливих цілей, різних видів невизначеностей і ризиків. Розроблено обчислювальні алгоритми і процедури вирішення практичних задач міждисциплінарного характеру для застосувань, що належать до науково-технічної та соціально-економічної сфер діяльності людини [14].

Розвинуто теорію паралельної та комп'ютерної математики. Вперше запропоновано шарово-циклічну схему розподілу та обробки інформації на комп'ютерах паралельної MIMD-архітектури. Схема увійшла у світову практику паралельних обчислень як інструмент побудови збалансованих масштабованих паралельних алгоритмів. Запропоновано методи структурної регуляризації розріджених матриць, реалізовано кеш-когерентні методи обробки даних. Фундаментальні результати отримано при дослідженні математичних моделей з наближеними даними: розвинуто теорію збурень, теорію похибок для задач псевдоінверсії та зваженої псевдоінверсії (вперше отримано оцінки для випадку незбігу рангу вихідної та збуреної матриць); одержано оцінки повної похибки розв'язків лінійних систем з наближеними даними прямими та ітераційними методами [15].

Одночасно з розвитком архітектури і апаратного забезпечення високопродуктивних обчислювальних систем, математичної теорії розгорнуто дослідження принципів створення математичного та системного програмного забезпечення масштабованих паралельних систем. Нові фундаментальні результати в цьому напрямі отримали академік НАН України О.А. Летичевський та його учні [16]. Розвиваючи ідеї і методи В.М. Глушкова, було створено систему інсерційного моделювання, за допомогою якої можна досліджувати багатозадачні розподілені інформаційні системи, створювати інструментальні системи проектування, які підтримують процес проектування розподіленої програмної системи від аналізу вимог до генерації коду. Потрібно відзначити прикладну спрямованість фундаментальних результатів. З практичної точки зору отримані результати дозволяють перенести тестування

програмного забезпечення на рівень тестування формальної моделі.

Основною проблемою верифікації досі залишається проблема комбінаторного вибуху кількості станів моделі. Очевидно, що за такої кількості досяжних станів перевірка моделі за допомогою прямого перебору практично нездійсненна. Тому створення оптимізаційних методів тестування програмного забезпечення є видатним результатом. Слід також зазначити, що результати роботи мають успішне комерційне впровадження у спільних з фірмою Motorola проектах.

Ідею збирання програмних модулів за принципом збирного конвеєра (як в автомобільній промисловості) свого часу висловив В.М. Глушков. Уперше в колишньому СРСР їй було втілено у вигляді технологічних ліній розроблення програм для військово-морського флоту. В роботах академіка НАН України П.І. Андона та його колег на базі теоретичних основ створення програмного забезпечення високопродуктивних обчислювальних систем сформовано формальний апарат, який містить концепції, моделі, методи та інженерні рішення щодо гарантування якості програмного забезпечення [17].

Великі перспективи застосування комп'ютерних методів у галузі медицини бачив ще М.М. Амосов, який завідував відділом в Інституті кібернетики, а потім був радником при дирекції. На початку 1970-х років М.М. Амосов оцінив важливість досліджень з робототехніки і передбачив їх актуальність. Такі дослідження у його відділі були пов'язані зі створенням макетів автономних рухомих роботів і розробленням нейромережових систем керування. Було створено перший в колишньому СРСР автономний транспортний робот ТАІР, який демонстрував цілеспрямований рух у природному середовищі.

На сьогодні в галузі медичної інформатики за результатами комп'ютерного аналізу та математичних моделей отримано фундаментальні правила симетрії у ДНК. На основі правил симетрії суто теоретично, тобто без результатів експериментів рентгеноструктурного аналі-

зу, які використовували Дж. Уотсон і Ф. Крік, було показано, що модель ДНК повинна мати протилежні напрямки ниток. Одержані правила симетрії істотно доповнюють сучасні уявлення щодо запису генетичної інформації в ДНК і білках [18].

У галузі цифрової медицини розроблено та експериментально досліджено інформаційну технологію і технічні засоби безконтактних магнітометричних досліджень біологічних і технічних об'єктів. Створено інноваційні магнітокардіографічні комплекси, які використовують у Національному військово-медичному клінічному центрі Міністерства оборони України та Українській військово-медичній академії для діагностики захворювань серцево-судинної системи на дуже ранніх стадіях. На такій стадії ці хвороби неможливо діагностувати іншими засобами. Розроблено електрокардіографічно-фотометричний програмно-апаратний комплекс, який вирізняється портативністю, поєднує глибину аналізу з наочністю представлення результатів, включає алгоритми діагностики 4-го покоління та повністю автоматизує діагностичний висновок [19].

Розроблено інформаційну технологію для отримання в реальному часі за допомогою «розумних» бездротових сенсорних мереж інформації про наслідки дії на рослини стресових факторів (хвороб, посухи та ін.), зокрема на великих територіях зеленого покриву мегаполісів, сільськогосподарських угідь, заповідників і лісопаркових масивів. «Розумний» сенсор, який є базовим компонентом цифрової технології, використовується в портативних комп'ютерних приладах сімейства «Флоратест», які випускаються серійно і застосовуються на агропідприємствах та в організаціях екологічного спрямування [20].

Розроблено математичні моделі, методи та алгоритми моделювання та розпізнавання міміки і артикуляції людини. Запропоновано нові методи виділення та ідентифікації мімічних і емоційних проявів, що відповідають сучасному світовому рівню в цій галузі досліджень. Отримані результати є перспективними для подальших досліджень, розроблення і впроваджен-

ня в наукових установах і організаціях НАН України, в закладах освіти як елемент передачі інформації жестовою мовою спілкування, в IT-індустрії для оптимізації передачі інформації в мережах мобільного зв'язку, де потенційними споживачами є компанії-розробники інформаційно-комунікаційних технологій, та в інших зацікавлених структурах, які займаються створенням систем комунікації для людей з вадами слуху [21].

Співробітники Інституту кібернетики ім. В.М. Глушкова, Інституту телекомунікацій і глобального інформаційного простору та Українського мовно-інформаційного фонду на чолі з академіками НАН України О.В. Палагіним і В.А. Широковим розробили теоретичні засади онтологічних лексикографічних інформаційно-аналітичних експертних систем для обробки науково-технічної інформації у широкому класі предметних областей [22].

Очевидно, що обмежений перелік посилань переважно на ключові монографії не відображає повної картини інформаційного забезпечення зазначених напрямів. Повний їх список можна знайти, зокрема, в пошукових системах.

В Інституті кібернетики проводиться цілеспрямована підготовка спеціалістів з цифровізації наукових досліджень та їх застосувань. При Інституті діє філія кафедри автоматизованих систем обробки інформації і управління Національного технічного університету України «Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського». Інститут є базовим для кафедри теоретичної кібернетики та методів оптимального керування Державної наукової установи «Київський академічний університет» НАН України та МОН України. Інститут тісно співпрацює з кафедрами факультету комп'ютерних наук та кібернетики Київського національного університету імені Тараса Шевченка.

Наукові розробки вчених Відділення інформатики зі створення нових математичних методів і технологій розв'язання надскладних завдань науки та інженерії не мають аналогів у світі. Їх відзначено багатьма Державними преміями України в галузі науки і техніки та преміями імені видатних учених НАН України.

Проблеми і перспективи математичного моделювання. Разом з розвитком математичного інструментарію, зростанням можливостей комп'ютерів для наукових та інженерних досліджень ростуть і проблеми їх створення та застосування. Збільшення числа процесорів (ядер) у паралельних комп'ютерах означає суттєве збільшення комунікаційних втрат і зниження їх ефективності. Вже зараз є істотні відмінності внаслідок комунікаційних втрат між максимальною та експлуатаційною продуктивністю. Виявилось, що потрібно переосмислити всі відомі методи обробки інформації стосовно паралельних архітектур, враховуючи як властивості математичної моделі, так і характеристики паралельного комп'ютера. Критичною стає проблема накопичення похибок заокруглення при обчисленнях. При цьому слід враховувати, що для різних паралельних комп'ютерів SIMD-, SIMD-архітектури, гібридної (MIMD, SIMD) архітектури алгоритми і програми відрізнятимуться. Причому для багатьох задач більше обчислювальних пристроїв ще не означає швидше. Оптимізація топології комп'ютерів для конкретної задачі стає нагальною потребою. У фіксованому комп'ютерному середовищі залишаються нерозв'язними задачі детермінації та розв'язання деяких класів задач, зокрема некоректних і погано обумовлених задач.

У найближчій перспективі — ера ексафлопсних обчислень (мільйон трильйонів операцій з плаваючою крапкою в секунду). Перехід до ексафлопсних обчислень змінює саму парадигму технології використання суперкомп'ютерів, її програмну модель. Критичну роль починають відігравати не обчислення, а процес збереження, переміщення та ефективного використання даних.

Інформатика майбутнього — це квантова інформатика. На сьогодні у світі вже виконано ряд принципових досліджень щодо квантової обробки інформації. Передбачається, що створення повноцінного масштабованого квантового комп'ютера та застосування його для криптоаналізу дозволить побудувати принципово нові моделі і методи захисту інформації. На часі також дослідження проблем квантових

обчислень для математичного моделювання, що забезпечить інтенсивний, принципово новий шлях нарощування ресурсу високопродуктивних обчислень. І одне із завдань сьогодні — підготуватися до цього вже зараз.

Сьогодні на часі створення нових вітчизняних комп'ютерних технологій (у тому числі інтелектуальних) для забезпечення якомога більшої кількості галузей економіки науковим підґрунтям та високопродуктивним обчислювальним ресурсом на рівні світових вимог для створення новітніх технологій, інтеграції цього напрямку у світовий та європейський науковий дослідницький простір.

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 наявними темпами прискорення їх накопичення внаслідок реалізації концепції «розумних об'єктів» (на зразок міста, підприємства, дому). Через це постала нагальна потреба у розробленні методів і засобів поточного аналізу великих обсягів даних у реальному часі з метою автоматичного видобування з них релевантних знань для побудови математичних моделей, що так само може стати реальним лише за умови застосування сучасних суперобчислювальних ресурсів усе більшої продуктивності.

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 УНГ інфраструктури хмарних обчислень і її інтеграція в Європейський дослідницький простір та Європейську хмару відкритої науки.

Ключовою проблемою математичного моделювання процесів, систем та об'єктів незалежно від їх природи (механічних, фізичних, економічних, медичних, соціальних тощо) є пробле-

ма достовірності отримуваних комп'ютерних результатів. Відомо, що в ряді випадків при вирішенні наукових та інженерних задач на комп'ютерах користувачі одержують машинні розв'язки, які не мають фізичного змісту. Цьому є багато причин, але найчастіше це відбувається через похибки в початкових даних, відмінності властивостей математичних і машинних моделей задач, відмінності арифметики і комп'ютерної арифметики та ін. Принципово, що 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. Одне з головних завдань математичного моделювання — в комп'ютерному середовищі дослідити властивості машинної задачі, побудувати алгоритм отримання наближеного розв'язку і дати оцінку його точності.

Інноваційний підхід до математичного моделювання забезпечить реалізація такої парадигми: комп'ютерна математика (некласичні математичні моделі, математичні моделі з наближеними даними, достовірність розв'язків тощо); високопродуктивні обчислення (НРС) (паралельні, розподілені, гібридні, гетерогенні, ґрид- та хмарні обчислення, екзафлопсні, квантові обчислення); штучний інтелект (автоматизація розроблення прикладного програмного забезпечення, автоматизація процесу дослідження та розв'язування задач, адаптивне автоматичне налаштування методів і програм на комп'ютерне середовище, глибинне навчання, реалізація концепції знань при створенні інтелектуальних програмно-технічних засобів).

Реалізація такої тріади для будь-якої галузі дозволяє істотно 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 істотне скорочення часу математичного моделювання.

REFERENCES

[СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ]

1. Sergienko I.V. *Topical Direction of Informatics. In memory of V.M. Glushkov*. Springer, 2014. <https://doi.org/10.1007/978-1-4939-0476-1>
2. Dovhyi S.O., Sergienko I.V. (eds.) *Informatsiyno-analitychne suprovodzhennya byudzhethnoho protsesu*. Kyiv, 2013. [Інформаційно-аналітичне супроводження бюджетного процесу. За ред. Довгого С.О., Сергієнка І.В. К.: Інформаційні системи, 2013.]
3. Sergienko I.V., Deineka V.S. *Optimal Control of Distributed Systems with Conjugation Conditions*. New York: Kluwer Academic Publishers, 2005. <https://doi.org/10.1007/b104441>
4. Sergienko I.V. *Methods of Optimization and Systems Analysis for Problems of Transcomputational complexity*. Springer, 2012. <https://doi.org/10.1007/978-1-4614-4211-0>
5. Sergienko I.V., Shilo V.P. *Zadachi diskretnoy optimizatsii: problemy, metody resheniya, issledovaniya*. Kyiv: Naukova Dumka, 2003. [Сергієнко І.В., Шило В.П. *Задачі дискретної оптимізації: проблеми, методи рішення, дослідження*. К.: Наук. думка, 2003.]
6. Derieva E.N., Knopov P.S. *Estimation and Control Problems for Stochastic Partial Differential Equations. Springer Optimization and its Applications*. V. 83. Springer-Verlag New York, 2013. <https://doi.org/10.1007/978-1-4614-8286-4>
7. Shor N.Z., Sergienko I.V., Shilo V.P., Stetsyuk P.I. *Zadachi optimalnogo proektuvannya nadiynykh merezh*. Kyiv: Naukova Dumka, 2005. [Шор Н.З., Сергієнко І.В., Шило В.П., Стецюк П.І. та ін. *Задачі оптимального проектування надійних мереж*. К.: Наук. думка, 2005.]
8. Hulianytskyi L.F., Riasna I.I. *Formalization and Classification of Combinatorial Optimization Problems*. In: Butenko S., Pardalos P., Shylo V. (eds) *Optimization Methods and Applications. Springer Optimization and Its Applications*. V. 130. Cham: Springer Int. Publ. AG, 2017. https://doi.org/10.1007/978-3-319-68640-0_11
9. Donets G.A., Sergienko I.V. *Chislovyye grafy i postroyeniye diskretnykh obrazov*. Kyiv: Naukova Dumka, 2014. [Донець Г.А., Сергієнко І.В. *Числові графи і побудова дискретних образів*. К.: Наук. думка, 2014.]
10. Kovalenko I.N., Kochubinskii A.I. *Asymmetric Cryptographic Algorithms. Cybernetics and Systems Analysis*. 2003. **39**(4): 49. <https://doi.org/10.1023/B:CASA.0000003504.91987.d9> [Коваленко І.Н., Кочубинський А.І. Асиметричні криптографічні алгоритми. *Кибернетика і системний аналіз*. 2003. № 4. С. 95–100.]
11. Zadiraka V.K., Oleksyuk O.S. *Kompyuterna aryfmetyka bahatorozryadnykh chysel*. Kyiv: Ekonomichna dumka, 2003. [Задірака В.К., Олексюк О.С. *Комп'ютерна арифметика багаторозрядних чисел*. К.: Економічна думка, 2003.]
12. Kuntsevich V.M. *Upravleniye v usloviyakh neopredelennosti: garantirovannyye rezultaty*. Kyiv: Naukova Dumka, 2006. [Кунцевич В.М. *Управління в умовах неопределенності: гарантовані результати*. К.: Наукова думка, 2006.]
13. Chikrii A.A. *Conflict controlled processes*. Dordrecht, Boston, London: Springer Science and Business Media, 2013. <https://doi.org/10.1007/978-94-017-1135-7>
14. Zgurovsky M.Z., Pankratova N.D. *Osnovy systemnoho analizu*. Kyiv: BVH, 2007. [Згуровський М.З., Панкратова Н.Д. *Основи системного аналізу*. К.: Видавнична група BVH, 2007.]
15. Khimich A.N., Molchanov I.N., Popov A.V., Chistyakova T.V., Yakovlev M.F. *Parallelnyye algoritmy resheniya zadach vychislitelnoy matematiki*. Kyiv: Naukova Dumka, 2008. [Химич А.Н., Молчанов И.Н., Попов А.В., Чистякова Т.В., Яковлев М.Ф. *Параллельные алгоритмы решения задач вычислительной математики*. К.: Наук. думка, 2008.]
16. Letichevsky A.A. *Insertionnoye modelirovaniye. Upravlyayushchiye sistemy i mashiny*. 2012. (6): 3. [Летичевский А.А. *Инсерционное моделирование. Управляющие системы и машины*. 2012. № 6. С. 3–14.]
17. Andon P.I., Koval H.I., Korotun T.M., Lavrishcheva K.M., Suslov V.Yu. *Osnovy inzheneriyi yakosti prohramnykh sistem*. Kyiv: Akadempriodyka, 2007. [Андон П.І., Коваль Г.І., Коротун Т.М., Лаврішчева К.М., Суслов В.Ю. *Основи інженерії якості програмних систем*. 2-ге вид. Київ: Академперіодика, 2007.]
18. Gupal A.M., Sergienko I.V. *Simmetriya v DNK. Metody raspoznavaniya diskretnykh posledovatelnoyey*. Kyiv: Naukova Dumka, 2016.

- [Гупал А.М., Сергиенко И.В. *Симметрия в ДНК. Методы распознавания дискретных последовательностей*. К.: Наук. думка, 2016.]
19. Chaikovsky I., Primin M., Nedayvoda I., Budnyk M. Magnetocardiography in unshielded setting: heart electrical image based on 2D and 3D data in comparison with perfusion image based on PET results – clinical cases. Chapter 3. Coronary Artery Diseases. Zagreb: In-Tech, 2012. P. 43–58. <https://doi.org/10.5772/30122>
 20. Romanov V., Mintser O., Galelyuka I., Degtjaruk V., Chernetsky V., Chaykovsky I. Computer devices and information technologies for medicine. *Information Technologies & Knowledge*. 2016. **10**(1): 21.
 21. Кривонос Ю.Н., Крак Ю.В., Бармак О.В. *Системы жестовой коммуникации: моделирование информационных процессов*. К.: Наук. думка, 2014.
[Кривонос Ю.Г., Крак Ю.В., Бармак О.В. *Системы жестовой коммуникации: моделирование информационных процессов*. К.: Наук. думка, 2014.]
 22. Palagin A.V. An Ontological Conception of Informatization of Scientific Investigations. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2016. **52**(1): 1. <https://doi.org/10.1007/s10559-016-9793-6>
[Палагин А.В. Онтологическая концепция информатизации научных исследований. *Кибернетика и системный анализ*. 2016. № 1. С. 3–9.]

I.V. Sergienko, A.N. Khimich

Glushkov Institute of Cybernetics of the National Academy of Sciences of Ukraine (Kyiv)

MATHEMATICAL MODELING: FROM MESM TO EXAFLOPS

The article traces the evolution of mathematical and technical means of computer simulation from the very first computers to modern supercomputers and from highly specialized computational tasks to interdisciplinary models that meet the needs of a wide range of industries in the domestic economy. The mathematical directions in which the Glushkov Institute of Cybernetics of NAS of Ukraine has made unique world level achievements are briefly described. Combining them with supercomputer technology and advanced areas of intelligent modeling can result in a breakthrough effect that will provide new knowledge in the field of digital technology that is rapidly evolving around the world today.