УДК 004.051

ОСНОВНЫЕ направления Исследований, проводимыЕ C ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ РЕСУРСОВ ЦКП «ИНФОРМАТИКА»

*Денисов Сергей Анатольевич, начальник ЦКП «Информатика» 1,*

*SDenisov@frccsc.ru*

*Кондрашев Вадим Адольфович, к.т.н., заместитель директора1,*

*VKondrashev@frccsc.ru*

*Зацаринный Александр Алексеевич, д.т.н., профессор, главный научный сотрудник1,,*[*AZatsarinny@ipiran.ru*](mailto:AZatsarinny@ipiran.ru)

*1Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук (ФИЦ ИУ РАН), г. Москва*

Аннотация: В работе представлены основные направления фундаментальных и прикладных исследований, проводимые с использованием высокопроизводительных вычислительных ресурсов вычислительной среды ЦКП «Информатика».

Ключевые слова: высокопроизводительный вычислительный комплекс, гибридная архитектура, система математического моделирования.

Центр коллективного пользования «Высокопроизводительные вычисления и большие данные» (ЦКП «Информатика») [1] обеспечивает потребности научных коллективов ФИЦ ИУ РАН и внешних пользователей в высокопроизводительных вычислительных ресурсах для проведения фундаментальных и прикладных исследований, в том числе в области материаловедения [2].

Анализ заявок на предоставление доступа к вычислительным ресурсам ЦКП показывает, что основными направлениями исследований научных коллективов ФИЦ ИУ РАН являются:

- системы искусственного интеллекта, извлечение знаний и анализ текстов;

- математические методы анализа данных и прогнозирования;

- моделирование сложных физических и технических систем;

- теоретико-вероятностные и статистические методы моделирования;

- методы и программные средства накопления и обработки данных;

- обучение с подкреплением с использованием сетевых векторно-символьных представлений.

При этом большинство задач в рамках этих направлений решаются (или планируются решения) с применением технологий искусственного интеллекта.

В связи с этим, одним актуальных и востребованных направлений исследований являются экспериментальные исследования в интересах решения задач по поиску и анализу уязвимостей искусственных нейронных сетей различных классов, по разработке методов оценки их устойчивости в условиях случайных и преднамеренных воздействий, а также методов повышения устойчивости нейронных сетей.

Отметим экспериментальные исследования по моделированию сложных физических и технических систем. К ним относятся исследования по разработке отечественной системы автоматизированного проектирования для создания ячеек энергонезависимой памяти в области материаловедения [3,4], а также исследования по совершенствованию методов моделирования неравновесных течений газовых смесей в части моделирования механик разреженного газа и высокоскоростной аэродинамики [5,6].

Продолжаются активные исследования по следующим тематикам:

- разработка методов и программных средств накопления и обработки больших данных;

- извлечение знаний и анализ текстов, например, определение депрессивности у пользователя социальной сети на основе интеллектуального анализа публикуемых текстовых сообщений и информации со страницы профиля пользователя [7];

- машинное обучение, глубокое машинное обучение, разработка моделей искусственных нейронных сетей, например, разработка алгоритмов управления автономным транспортным средством в режиме реального времени с учетом статических и динамических ограничений [8].

Наряду с научными коллективами ФИЦ ИУ РАН ЦКП используется коллективами и других организаций. Так, в последние годы экспериментальные исследования в области моделирования химических реакций, квантово-механических и молекулярно-механических расчетов, молекулярной динамики, моделирования физико-химических процессов взаимодействия молекул выполняют сотрудники ФНИЦ «Кристаллография и фотоника» РАН проводит. Активно используются вычислительные ресурсы ЦКП специалистами НИИ молекулярной электроники (НИИМЭ) в рамках решения задач по проектированию отечественной электронной компонентой базы в области микроэлектроники. Кроме того, ЦКП предоставляет возможность практической отработки знаний, полученных в ходе обучения, студентам базовых кафедр в МГУ им. М.В. Ломоносова, Московского авиационного института (МАИ), Высшей школы экономики (ВШЭ) и Российского университета дружбы народов (РУДН).

При решении задач пользователи имеют возможность выполнять расчеты в высокопроизводительной вычислительной среде ЦКП с применением таких систем моделирования как Ansys, Intel oneAPI, Gromacs, Matlab, Orca, Pytorch, Tensorflow, Keras, Quantum Espresso в фоновом (пакетном) и интерактивных режимах. Имеется возможность интеграции других систем математического моделирования в высокопроизводительную вычислительную среду ЦКП.

Список использованных источников

1. ЦКП «Информатика» // [Электронный ресурс] - http://www.frccsc.ru/ckp (дата обращения 19.09.2023)
2. Zatsarinny A.A., Abgaryan K.K. Factors determining the relevance of creating a research infrastructure for synthesizing new materials in implementing the priorities of scientific and technological development of Russia. - Russian Microelectronics. 2020. Т. 49. № 8. С. 600-602.
3. Абгарян К.К. Интеллектуальные информационные системы в микроэлектронике // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 8-14
4. Абгарян К.К., Гаврилов Е.С. Системы автоматизации научных расчетов для многомасштабного моделирования нанокомпозиционных материалов // В сборнике Математическое моделирование в материаловедении электронных компонентов. Материалы V международной конференции, 2023, с. 15-17
5. I.V. Voronich, V.A. Titarev Numerical Analysis of Rarefied Gas Flow through a System of Short Channels // Mathematical physics, vol. 63, p. 2227–2243, 2023
6. A.A. Morozov, V.A. Titarev Evolution of the Shape of a Gas Cloud during Pulsed Laser Evaporation into Vacuum: Direct Simulation Monte Carlo and the Solution of a Model Equation // Computational Mathematics and Mathematical Physics, vol. 63 (12), p. 2244-2256, 2024
7. Ignatiev N., Smirnov I. and Stankevich M. Predicting Depression with Text, Image, and Profile Data from Social Media // Proceedings of the 11th International Conference on Pattern Recognition Applications and Methods (ICPRAM 2022), 2022, p. 753-760
8. Дарьина А.Н., Прокопьев И.В. Метод активной одновременной локализации и картографирования на основе модели прогнозирующего интегрального пути для мобильных роботов // Нейрокомпьютеры: разработка, применение, 23 (6), 2021

THE MAIN DIRECTIONS OF RESEARCH CONDUCTED USING COMPUTING RESOURCES OF THE SHARED RESEARCH FACILITIES «HIGH PERFORMANCE COMPUTING AND BIG DATA» (CKP «INFORMATICS»)

S.A. Denisov, V.A. Kondrashev, A.A. Zatsarinny

Abstract: The paper presents the main directions of fundamental and applied research carried out using high-performance computing resources of the computing environment of the CKP «Informatics».

Keywords: high-performance computing cluster, hybrid architecture, mathematical modeling system.