

УДК 004.4

А.Г. Загородній, П.І. Андон, І.А. Процикевич

ВПРОВАДЖЕННЯ СУЧАСНИХ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ В НАУКОВИХ ДОСЛІДЖЕННЯХ НАН УКРАЇНИ

Наведені основні результати виконання Програми інформатизації НАН України за напрямками розвитку телекомунікаційної інфраструктури та хмарних технологій, інтеграції науково-інформаційних ресурсів, засобів підтримки наукових досліджень і Грід-технологій, засобів підтримки науково-організаційної та господарської діяльності.

Ключові слова: автоматизація наукових досліджень, інтегрована інформаційна інфраструктура, корпоративні інформаційні системи, сервіс-орієнтована архітектура, Semantic Web, онтологія.

Вступ

В процесі пізнання людство досліджує все більш глибокі аспекти природних явищ, спостереження та пояснення яких потребує все більш досконалих засобів та методів досліджень. Інтенсифікація науки та виклики, що стають перед нею, вимагають кардинальних змін методів, засобів та характеру виконання наукових досліджень. Масштаби досліджень, діапазони умов, що спостерігаються, суттєво

змінюються з часом та потребують дуже складних та масштабних експериментів, спостережень, чисельного моделювання явищ за теоретичними моделями, які генерують надвелику кількість первинних даних. Протягом розвитку наукового методу пізнання можна виділити чотири парадигми [1], кожна з яких домінувала в свій час (рис. 1).

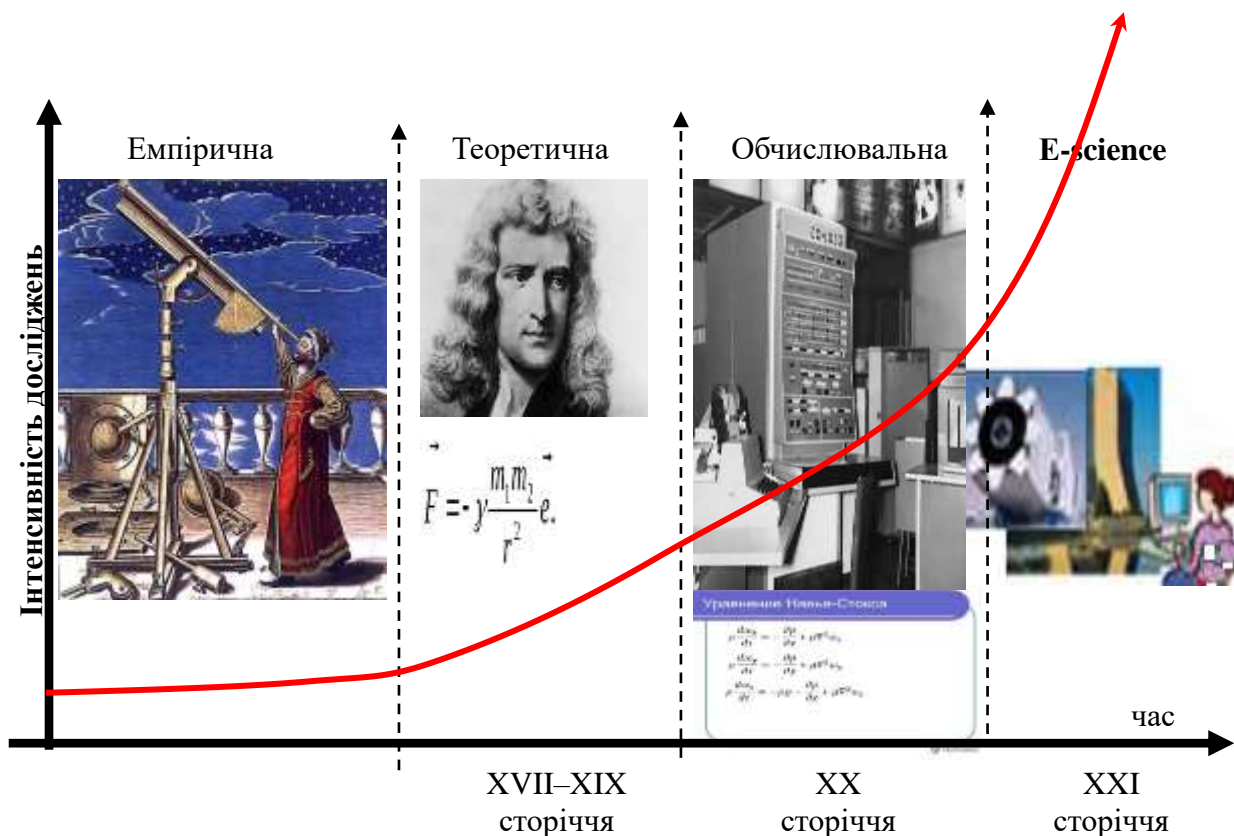


Рис. 1. Епоха парадигми e-science

На рубежі XX–XXI століть парадигма e-science прийшла на заміну емпіричній, теоретичній та обчислювальній парадигмам, які вже не могли забезпечити потрібні темпи реєстрації, накопичення, обробки та швидкості обміну необхідними обсягами наукової інформації за допомогою існуючих засобів, методів та технологій.

Характерними ознаками парадигми e-science є:

- автоматизована реєстрація та накопичення даних спостережень та експериментів на електронних носіях;
- широке використання комп'ютерних ресурсів та чисельних методів для моделювання явищ, у тому числі використання розподілених обчислювальних середовищ;
- широке використання автоматизованих методів обробки та аналізу даних для виявлення закономірностей та здобуття нових знань;
- використання глобальних мереж (Internet) для обміну результатами досліджень, наукового спілкування, доступу до накопичених наукових результатів;
- кооперація науковців та наукових ресурсів у проведенні досліджень на різних рівнях.

Виконання досліджень у таких умовах потребує об'єднання ресурсів всієї наукової спільноти на різних рівнях (установ, держав, міжнародних колаборацій), розподілення всього обсягу досліджень між окремими науковцями та науковими колективами, інтенсивного обміну результатами досліджень. Для цього як в окремих країнах, так і в цілому світі створюються відповідні інфраструктури, які здатні забезпечити швидке переміщення як первинних та оброблених даних, так і інтенсивне наукове спілкування, засновані на використанні глобальних мереж та WEB-технологій.

Перехід до нової парадигми потребує відповідної перебудови матеріальної та організаційної бази наукових досліджень, опанування кожним науковцем

нових методів виконання наукових досліджень, наукового спілкування та взаємодії у науковому процесі.

Статус Національної академії наук України як вищої державної наукової організації передбачає її провідну роль в організації та координації фундаментальних наукових досліджень, здійсненні наукового прогнозування та експертної оцінки розвитку економіки, суспільства, науки і технологій, активну участь у формуванні та реалізації державної наукової та науково-технічної політики [2].

В НАН України функціонують 3 секції, що об'єднують 14 наукових відділень. В Академії діють 6 регіональних наукових центрів подвійного з Міністерством освіти і науки України підпорядкування та Інноваційний центр в м. Києві. Основною ланкою структури НАН України є науково-дослідні інститути та прирівняні до них наукові установи. В структурі НАН України діють також інші національні наукові заклади та організації дослідно-виробничої бази, зокрема Національна бібліотека України ім. В.І. Вернадського, Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут», Національний ботанічний сад ім. М.М. Гришка, Національний центр «Мала академія наук України» МОН України та НАН України та інші. Всього на цей час в НАН України налічується 169 наукових установ і 46 організацій дослідно-виробничої бази. При НАН України діють Міжвідомча рада з координації фундаментальних досліджень, Рада президентів академій наук України, Експертна рада з питань оцінювання тем фундаментальних науково-дослідних робіт. У структурі Академії працюють два видавництва: ДП НВП Видавництво "Наукова думка" НАН України і Видавничий дім "Академперіодика" НАН України [3].

Згідно з чинним законодавством НАН України користується правами самоврядності, які полягають у самостійному визначенні тематики досліджень, своєї структури, вирішенні науково-організаційних, господарських, кадрових питань, здійсненні міжнародних наукових зв'язків [4, 5].

Для Національної академії наук України є життєво важливим постійне науково-технологічне оновлення процесів інформатизації всього циклу наукової діяльності – від наукового пошуку і планування наукових розробок до інноваційного впровадження результатів.

Стратегічною метою на цьому шляху є підтримка та розвиток інформаційної інфраструктури НАН України з під'єднанням її установ до загальнонаціональних та міжнародних науково-дослідних і освітніх телекомунікаційних мереж.

З цією метою у 2004 році була започаткована цільова програма НАН України – «Програма інформатизації НАН України» (далі – Програма) для керованого переходу до нової парадигми, створення відповідної технічної бази, інформаційних ресурсів і програмних засобів та впровадження результатів у повсякденну практику Академії.

Над виконанням Програми впродовж всього часу працювали ряд установ НАН України відповідно до затвердженої концепції Програми, пріоритетних напрямків, завдань і заходів, а також щорічної тематики, яка формувалась, уточнювалась та контролювалась базовими організаціями Програми – Інститутом програмних систем НАН України та Інститутом теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України.

Програма інформатизації НАН України: концепція, мета, напрямки, організація робіт

Для забезпечення цілеспрямованого і керованого процесу побудови, розвитку та підтримки інформаційної інфраструктури НАН України в Інституті програмних систем НАН України була розроблена Концепція Програми інформатизації НАН України [6–8], яка протягом всього періоду її функціонування постійно уточнювалась та доповнювалась.

Згідно концепції метою Програми є широке впровадження нових інформаційних технологій (НІТ) в наукову, науково-організаційну та господарчу діяльність наукових установ та організацій, Президії

НАН України, підвищення продуктивності, якості та ефективності проведення наукових досліджень.

Виходячи з потреб часу, враховуючи особливості статусу та структури НАН України розвиток інформатизації НАН України, опираючись на принципах системного підходу та включає у себе такі аспекти:

- проведення наукових досліджень для розвитку загальної фундаментальної наукової бази, на основі якої і має виконуватись розвиток НАН України;
- проведення наукових досліджень з метою науково-технічного супроводження та науково-методичного забезпечення процесу інформатизації діяльності НАН України.

Принципова новизна даного підходу – це створення системи наукового супроводу процесу розробки та впровадження нових інформаційних технологій. Крім того, такі фундаментальні наукові дослідження покликані забезпечувати пошук нових шляхів здійснення інформатизації діяльності НАН України, підвищуючи їх планомірність та ефективність.

Мета інформатизації науково-дослідницької діяльності НАН України – це прискорення отримання та поглиблення наукових знань про явища та закономірності в природі, техніці та суспільстві за рахунок використання НІТ на всіх етапах наукової роботи.

Проблема інформатизації власне наукових досліджень є багатоплановою, і для її вирішення необхідний суттєвий прогрес у галузі обчислювальної техніки, програмування, штучного інтелекту тощо.

Використання НІТ має забезпечити відкриття нових можливостей для вирішення ряду актуальних проблем культури та гуманітарної сфери науки взагалі. Однією з них є проблема збереження культурної спадщини суспільства, представленої у вигляді старовинних книг, картин, фото-, аудіо- та відеоматеріалів тощо, та забезпечення можливості широкого доступу зацікавлених користувачів до таких матеріалів, не утворюючи при цьому загрози щодо їх знищення або спотворення.

Водночас, проблема подальшої інформатизації фінансово-господарської діяльності НАН України також має ґрунтуватися на НІТ.

Тобто, проблема інформатизації наукових досліджень є багатоплановою, і для її вирішення необхідний суттєвий прогрес у розв'язанні широкого кола задач не тільки в області обчислювальної техніки, програмування, штучного інтелекту, інформаційного забезпечення, дослідженнях складних наукоємних процесів, тощо, а й побудови середовища ефективного управління діяльністю НАН України.

Для вирішення задач, націлених на створення сучасного інформаційного середовища НАН України, виділено наступні основні напрямки Програми:

- розвиток *телекомунікаційної інфраструктури та хмарних технологій* НАН України;
- розвиток *інтегрованої системи науково-інформаційних ресурсів* НАН України;
- розвиток засобів *підтримки наукових досліджень і Грід-технологій* в наукових установах НАН України;
- розвиток засобів *підтримки науково-організаційної та господарської діяльності* наукових установ та організацій, Президії НАН України.

Архітектура інформаційної інфраструктури

Специфіка процесу наукових досліджень потребує поєднання обчислювальних та інформаційних ресурсів наукових спільнот та їх сумісне використання. Проведення чисельних теоретичних обчислень, обробка результатів експериментів потребує величезних потужностей, недосяжних одному науковцю і навіть окремій науковій установі. При цьому навантаження на обчислювальні потужності в процесі наукових досліджень досить нерівномірне. В період проведення експериментів воно велике, однак процеси аналізу та оформлення результатів не потребують таких величезних потужностей. Поєднання ре-

сурсів та їх сумісне використання дозволяє згладити нерівномірності навантаження ресурсів. З урахуванням цих особливостей загальна архітектура інформаційної інфраструктури НАН України визначається наступним чином (рис. 2).

Технічну основу побудови спільного обчислювального та інформаційного середовища (інформаційної інфраструктури) НАН України складають: Академічна мережа обміну даними (АМОД) (рис. 3), обчислювальні потужності (кластерні системи, сервери) та сховища даних (датацентри) [9].

АМОД побудована з використанням волоконно-оптичних технологій. Топологія мережі включає три рівні: магістральний, регіональний та локальний.

Магістральна мережа передачі даних побудована за кільцевою топологією і забезпечує надійне функціонування мережі та динамічне керування інформаційними потоками, об'єднує опорні вузли 1-го рівня у наукових центрах НАН України. У кожному Науковому центрі (Київ, Львів, Харків, Дніпро, Одеса) є один такий вузол. Мережа здатна забезпечити обмін інформацією між науковими центрами на швидкості 10 Гбіт/с.

Регіональні мережі розбудовані в наукових центрах НАН України з використанням власних волоконно-оптичних ліній зв'язку, які зв'язують опорні вузли 2-го рівня між собою на швидкості 10 Гбіт/с, а з установами НАН України на швидкості 1–10 Гбіт/с. Ця мережа побудована за топологією «зірка», в якій кожна установа підключена до неї безпосереднім гарантованим каналом обміну даних.

Локальні мережі установ НАН України складаються з вузлів, розміщених на їх території, а також каналів передачі даних між комп'ютерами, що включені в локальну мережу. Локальні мережі під'єднуються до опорних вузлів регіональних мереж АМОД волоконно-оптичними лініями зв'язку. АМОД забезпечує весь спектр інформаційних, обчислювальних та інших послуг на кожному робочому місці на швидкості до 1 Гбіт/с.

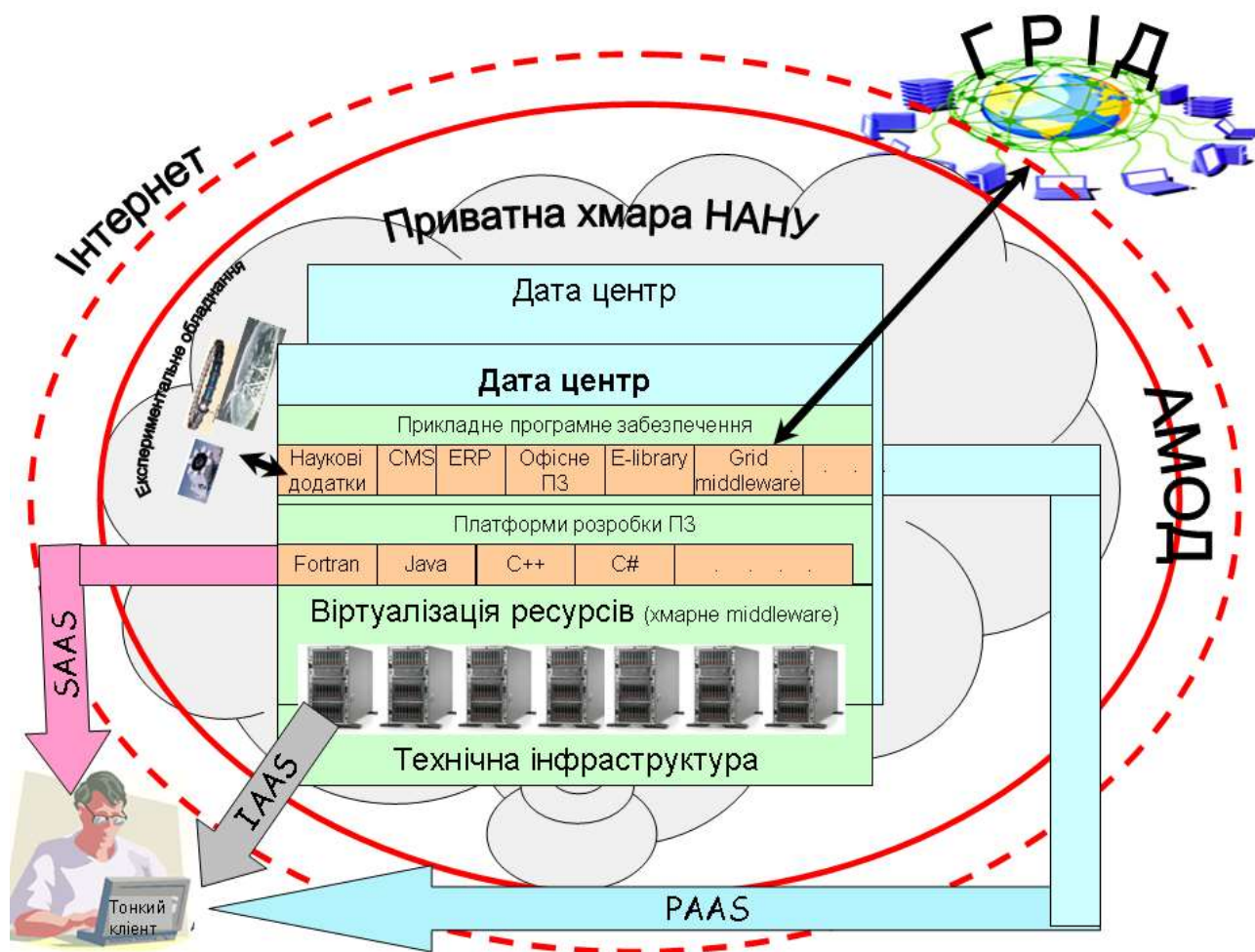


Рис. 2. Архітектура інформаційної інфраструктури НАН України

Надійність та безперерйна робота АМОД забезпечується цілодобовим моніторингом і адмініструванням телекомунікаційного обладнання мережі та системою безперерйного електроживлення. Система електроживлення складається з джерел безперерйного живлення, що розташовані в усіх кінцевих і проміжних вузлах магістральної мережі, та забезпечують їх 16-годинну роботу при відсутності стаціонарного електроживлення, трьох дизель-генераторів аварійного живлення для телекомунікаційних вузлів у м. Києві, м. Львові, м. Одесі, а також 8 стійок для забезпечення безперерйного живлення в регіональних опорних вузлах АМОД.

Сучасні апаратні засоби, що використовуються в АМОД, розроблені з урахуванням можливості забезпечення максимального захисту ресурсів мережі від несанкціонованого доступу, вірусної

активності, спаму. Адміністраторами мережі відслідковується вірусна активність, активність розсилання спаму та здійснення DOS-атак. Антивірусне та антиспамівське програмне забезпечення встановлене на поштових серверах мережі. З метою захисту від несанкціонованого доступу на вузлах усіх рівнів встановлені програмні та апаратні fire-wall, використовуються гроху-сервери. Для розпізнавання й захисту від DOS-атак використовуються програмно-апаратні можливості маршрутизаторів Juniper і комутаторів Foundry FastIron.

Загальна довжина волоконно-оптичних ліній зв'язку АМОД нині складає 1600 км, встановлено та використовується більш ніж 1200 одиниць телекомунікаційного обладнання, мережу обслуговує 11 магістральних вузлів, абонентами АМОД є 159 установ НАН України.

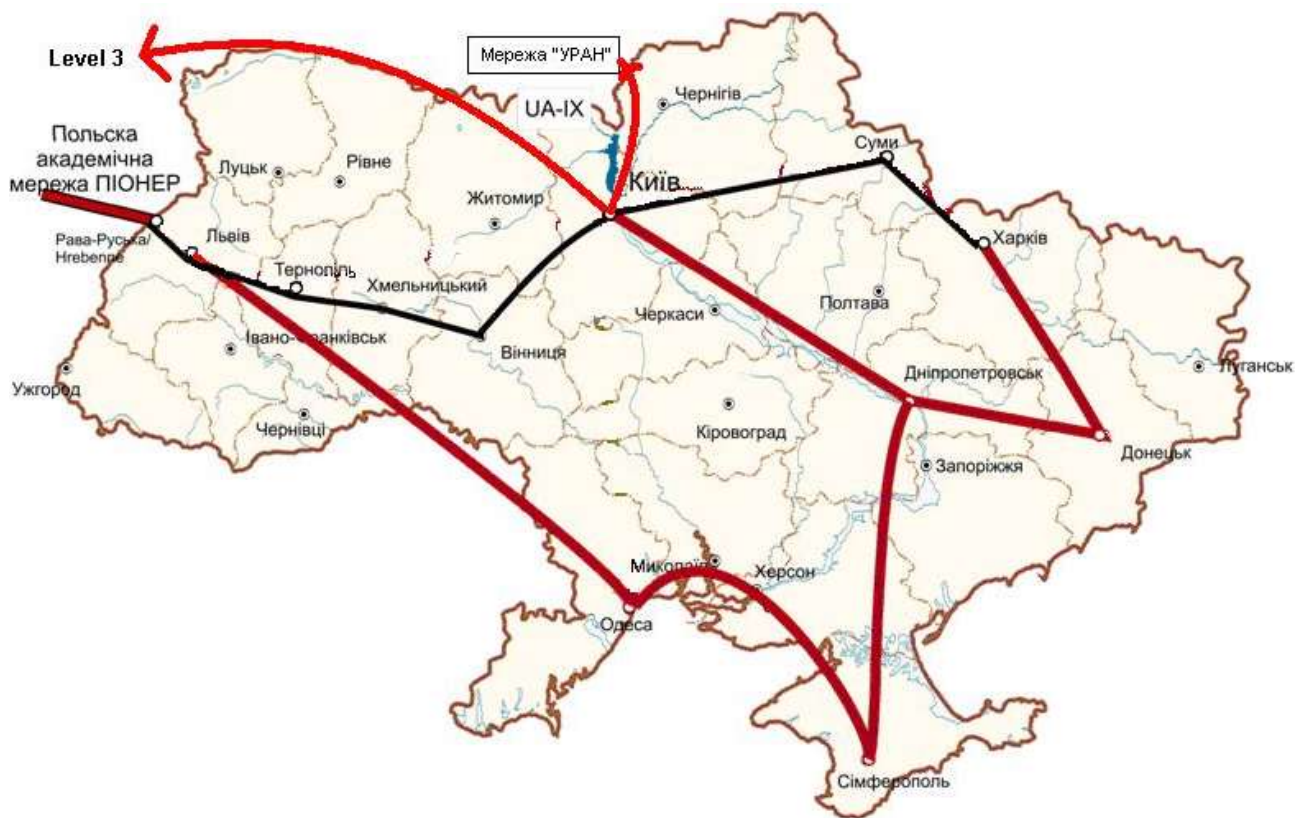


Рис. 3. Магістральна мережа передачі даних

Абонентам АМОД надаються більше двох десятків послуг та сервісів. Користувачі АМОД мають можливість працювати один з одним в єдиному інформаційному полі, не виходячи на зовнішню мережу Інтернет, проводити відео конференції, телемости, використовувати спільні інформаційні та обчислювальні ресурси.

Адміністрування АМОД здійснюється висококваліфікованими фахівцями оператора АМОД Державного підприємства “Науково-телекомунікаційний центр „Українська академічна і дослідницька мережа” (надалі ДП НТЦ «УАРНЕТ») Інституту фізики конденсованих систем НАН України”, яким забезпечується адміністративна технічна цілодобова підтримка АМОД за схемою 24/7/365 (24 години на добу, 7 днів на тиждень, 365 днів у рік) як магістральних каналів, так і міських телекомунікаційних сегментів мережі в усіх регіональних центрах НАН України

Мережа дозволяє користуватись інформаційними ресурсами всесвітньої комп’ютерної мережі та брати участь у міжнародних наукових проектах. Пряме

підключення до Польської академічної мережі PIONIER надає можливість тісної співпраці з науковцями європейських країн. Установи НАН України, що включені до АМОД, мають доступ до Української науково-освітньої мережі URAN і європейської академічної мережі GEANT.

Як обчислювальні потужності інформаційної інфраструктури НАН України виступають обчислювальні кластери, що входять до складу Українського Національного Гріду. Ця інфраструктура на сьогодні складається з 29 обчислювальних кластерів, розміщених в інститутах НАН України, що розташовані у 6 наукових центрах України і об’єднані потужними оптоволоконними каналами передачі даних Академічної мережі обміну даними з пропусковою здатністю не нижче 1 Гбіт/с. Найбільш потужні кластери зв’язані каналами 10 Гбіт/с. Обчислювальна потужність українського гріду – це 4500 процесорних ядер, сумарний обсяг жорстких дисків на серверах складає біля 500 ТБ.

Три дата-центри, що включають спеціалізовані пристрої зберігання даних

загальним обсягом 500 ТБ служать як сховища даних.

Одним з основних завдань розвитку Програми є створення хмарної інфраструктури і її використання для вирішення задач НАН України.

За умов використання хмарних технологій в НАН України робочі місця окремих науковців через локальну мережу своїх установ отримують вихід до мережі АМОД і через неї до глобальних мереж, зокрема до загальноєвропейської системи хмарних сервісів EGI Federated Cloud. Наукові установи, які мають обчислювальні потужності (кластерні системи, сервери) виділяють вільні ресурси в спільне користування. Таким же чином можуть надаватися в спільне користування і інформаційні та програмні ресурси (публікації, результати досліджень та ін.) шляхом розміщення їх на спільних або на власних ресурсах і надання до них доступу з допомогою хмарних структур. В провідних установах створені дата-центри, в яких зосереджені серверні потужності, на яких можуть виконуватися ресурсоємні програмні системи (СКБД, WEB сервери, прикладні системи, портали, ERP системи тощо).

Єдиний Науковий Інформаційний Простір

Завдання Програми інформатизації НАН України включають створення Єдиного Наукового Інформаційного Простору (ЄНІП) НАН України. ЄНІП – це комплекс технологій, програмно-технічних засобів, інформаційного, функціонального, організаційного та методичного забезпечення, спрямований на логічну інтеграцію різномірних інформаційних електронних ресурсів НАН України з метою найбільш повної інформаційної підтримки наукової та науково-організаційної діяльності вчених і НАН України в цілому.

ЄНІП покликаний допомогти науковим колективам зробити ряд кроків у напрямку інтеграції різномірних наукових, інформаційних і програмних ресурсів окремих наукових установ, надання користувачам більш ефективних засобів інтеграції і пошуку інформації, наукової кому-

нікації, співпраці та спільної роботи. Під єдиним простором розуміється не формування централізованої системи, не нав'язування всім одних і тих же рішень, а прагнення послідовністю практичних кроків, спільними зусиллями наукових колективів:

- сформулювати взаємоузгоджений набір угод, правил і стандартів;
- розробити типові рішення для реалізації прикладних систем, що підтримують інтеоперабельність розподілених гетерогенних даних і додатків;
- створити низку інформаційних систем загального призначення, що відповідають цим угодам;
- застосувати ці результати для вирішення відповідних завдань наукових установ.

ЄНІП НАН України створюється та розвивається на підставі концепції, розробленої в рамках Програми інформатизації НАН України Інститутом програмних систем НАН України. Концепція ЄНІП, окрім формулювання цілей і задачі та очікуваних результатів, понятійного апарату, концептуальних положень створення ЄНІП, включає опис інформаційного забезпечення, опис функціонального забезпечення, опис архітектури та опис додаткових видів забезпечення [10, 11].

Концептуальна інформаційна модель основних видів наукових інформаційних ресурсів в ЄНІП НАН України базується на сучасних дослідженнях та розробках, а саме.

Система Єдиного наукового інформаційного простору CERIF (Common European Research Information Format – Загальний європейський дослідницький інформаційний формат). Модель CERIF призначена для підтримки управління науково-дослідної інформацією, а також налаштування та взаємодії між дослідними інформаційними системами.

FRBR (Functional Requirements for Bibliographic Records, FRBR) Модель розроблена Міжнародною федерацією бібліотечних асоціацій та установ IFLA. FRBR включає опис концептуальної моделі (сут-

ності, їх відносини і атрибути), пропонує універсальні бібліографічні записи для всіх типів матеріалів, пов'язаних з бібліографічними ресурсами, описаними в каталогах, бібліографіях та інших бібліографічних інструментах.

Комплекс онтологій SPAR (Semantic Publishing and Referencing), що забезпечує досить детальну категоризацію відносин, які можуть виникати між науковими матеріалами в електронному вигляді, та між їх зв'язками.

Основами розробленої концептуальної інформаційної моделі є наступні положення.

Базові сутності. Основу або ядро моделі складають 5 базових або головних сутностей (об'єктів) єдиного наукового інформаційного простору. Це – Публікація, Організація, Персона, Проект і Подія. Для кожної з цих базових сутностей визначаються набори власних атрибутів чи властивостей.

Зв'язки. Екземпляри базових сутностей можуть бути пов'язані між собою як усередині однієї сутності (рекурсивні зв'язки), так і з усіма іншими сутностями зв'язками типу багато-до-багатьох. Зв'язкам притаманні властивості, тому в модель вводяться так звані сутності-зв'язки

Багатомовність. Модель підтримує багатомовність, для цього в наборах власних атрибутів кожної сутності виділяється група атрибутів, наприклад, назва, ключові слова, анотація, які можуть мати по кілька значень на різних мовах. Такі атрибути в рамках даної моделі також перетворюються в окремі сутності.

Сутності другого рівня. Визначається набір так званих сутностей другого рівня (Патент, Продукт, Обладнання, Фінансування, Метрики і т. д.) За аналогією з базовими сутностями, для них також визначаються набори власних атрибутів, багатомовних атрибутів-сутностей і сутностей-зв'язків. Будь-яка з базових сутностей може мати зв'язок з якою-небудь із сутностей другого рівня.

Класифікація. Модель не дає суворої прив'язки до певних класифікацій або категорій. Для використання класифікацій

різних типів і їх взаємних відображень у даній моделі передбачається набір сутностей під загальною назвою Класифікація. Всі сутності моделі можуть бути пов'язані з певними класифікаціями ставленням типу багато-до-багатьох. Для вирішення такого зв'язку для кожної сутності сутність-класифікатор. Таким чином, забезпечується певна гнучкість у виборі класифікаційних схем і немає суворої прив'язки до наперед заданих класифікаторів.

Наявність семантичного шару. Набір сутностей-зв'язків з прив'язкою до класифікаційних схем і їх класів, а також наявність у даній моделі фактично допоміжної або мета-сутності «Класифікація» гарантують забезпечення так званого семантичного шару даних. Використання семантичного шару робить модель гнучкою для застосування в різномірних середовищах.

Зроблені певні кроки для інформаційного забезпечення наукової діяльності та інтенсифікації наукового спілкування, а саме.

Створена протягом 8-ми років та супроводжується Інститутом програмних систем НАН України *Наукова електронна бібліотека періодичних видань НАН України (NASPLIB)*, яка має централізоване сховище інформаційних ресурсів (статей) та розподілене внесення статей у систему. NASPLIB – це бібліотека відкритого доступу і передбачає безкоштовний доступ читачів до наукової інформації в Інтернет з правом читати, завантажувати, копіювати, розповсюджувати, друкувати, проводити пошук, посилатися на повнотекстові статті, індексувати, тобто використовувати її з законною ціллю без фінансових, юридичних і технічних перешкод, що відповідає Будапештській Ініціативі Відкритого Доступу.

Наразі NASPLIB містить 114 000 статей з 454 періодичних видань НАН України. За весь час існування до бібліотеки звертались читачі з 168 країн та територій світу з 5813 населених пунктів, у тому числі з 416 населених пунктів України. За весь період функціонування NASPLIB було виконано понад 27 000 000 переглядів та понад 44 000 000 скачувань

статей. В середньому кожен добу до нас звертаються біля 2000 читачів.

Адреса бібліотеки: <http://dspace.nbuv.gov.ua/>

Розроблена, впроваджена та підтримується *Система інтеграції електронних бібліотек України*. Ця система надає можливість одночасного пошуку в електронних повнотекстових бібліотеках України. Вона використовує міжнародний стандарт з харвестінгу (збору) описової інформації про електронні інформаційні ресурси ОАІ-РМН. У цю систему можуть бути включені будь-які електронні бібліотеки України (та інших країн), що підтримують зазначений вище протокол. Володарі електронної бібліотеки можуть самостійно включити свій репозиторій у цю систему, заповнивши електронну форму, що надається, або це може зробити адміністратор системи. Після цього включення описів інформаційних ресурсів проводиться автоматично.

Оновлення документів з підключених ЕБ виконується автоматично щоденно.

Система надає можливість пошуку інформаційних ресурсів з інтегрованих електронних бібліотек за описовими метаданими, що створюють автоматизований електронний каталог. Скачування самих електронних ресурсів виконується у системі завдяки наявності в описових даних інформації їх про електронну адресу (URL).

На поточний час у системі інтегровано 59 електронних бібліотек України і містить понад 450 000 електронних документів.

Адреса системи <http://oai.org.ua>

Практично всі наукові установи підтримують власні портали та сайти, до яких є вихід з порталу НАН України.

Інформатизація наукових досліджень та грид технологій

Протягом виконання Програми НАН України «Впровадження грид-технологій та побудова кластерів в НАН України» (2006–2009 рр.) та Державної цільової науково-технічної програми «Впровадження і застосування грид-технологій

на 2009–2013 роки» побудовано Український Національний Грид (УНГ). Базовою організацією з виконання зазначених програм було призначено Інститут теоретичної фізики імені М.М. Боголюбова НАН України.

Головним досягненням виконання програм є створення української національної грид-інфраструктури виробничого типу (рис. 4), інтегрованої до найбільшої е-інфраструктури у світі – Європейської грид-інфраструктури, яка об'єднує більше, ніж 22 тисячі дослідників з усього світу. Це дало можливість забезпечити необхідні сервіси українським вченим для проведення цифрових досліджень світового рівня як самостійно, так і в колаборації з вченими інших країн, незалежно від місця їх перебування [12].

Український національний грид (УНГ) є єдиною дослідницькою е-інфраструктурою національного рівня, що розвиває цифрову науку. УНГ об'єднує 39 ресурсних центрів наукових організацій України (з них 29 НАН України). Основа УНГ – це 12 ресурсних центрів, що координуються національним операційним центром (NGI-UA), які створили грид-інфраструктуру виробничого типу, інтегровану в європейський простір. Грид-інфраструктура виробничого типу працює 24 години на добу, 7 днів на тиждень з наданням вільного доступу до обчислювальних ресурсів та ресурсів зберігання даних для дослідницьких віртуальних організацій. Завдяки інтеграції в європейську грид-інфраструктуру УНГ надає можливість проведення спільних досліджень з міжнародними дослідницькими організаціями та використання європейських ресурсів. Зростання потреб українських дослідників в обчислювальних ресурсах для обробки розподілених даних вимагає збільшення потужності існуючої інфраструктури.

За допомогою побудованої грид-інфраструктури і можливостей розподілених обчислень в інститутах НАН України отримано ряд важливих наукових результатів.

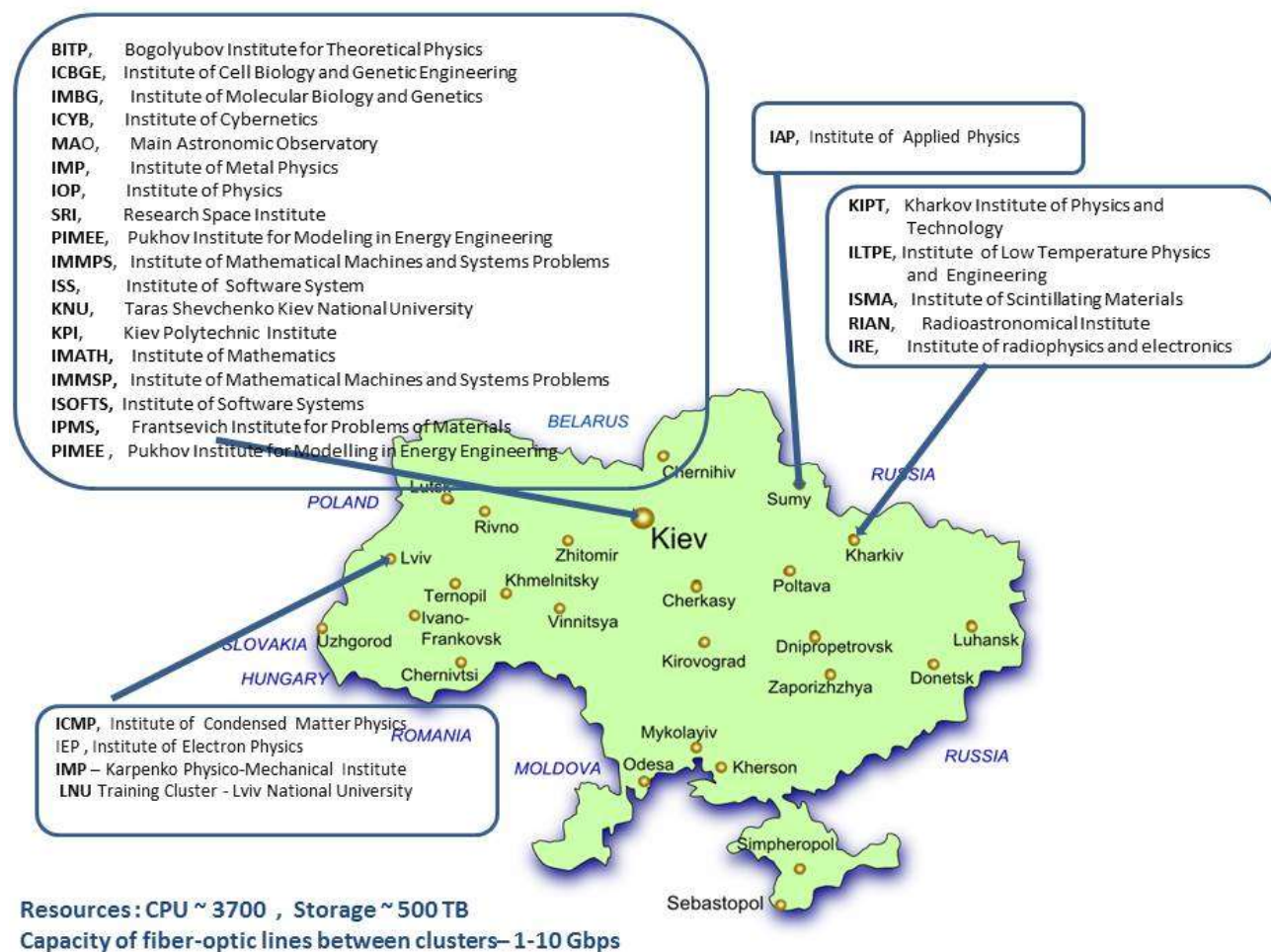


Рис. 4. Структурна схеми розміщення грід кластерів НАН України

Серед тематичних проектів, що виконувались в НАН України, в яких використовувалися грід-обчислення, насамперед слід відзначити ті, що присвячені фізиці високих енергій і астрофізиці. В цих напрямках досягнуто результати світового рівня (відкриття і дослідження нової частинки – бозону Хіггса в експерименті CMS в ЦЕРН (член колаборації – Харківський фізико-технічний інститут), нові явища і властивості надгустих станів ядерної матерії в експерименті ALICE (член колаборації – Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова).

Дуже успішними виявились дослідження в галузі молекулярної і клітинної біології (Інститут молекулярної біології і генетики, Інститут харчової біотехнології та геномики, Інститут фізики). Результати досліджень високо оцінені закордонними вченими, які чітко заявили про зацікавленість у співробітництві з українськими фахівцями і навіть підписали низку угод

про співробітництво з українськими інститутами.

Особливу увагу було приділено підтримці медичної тематики. Були виконані дуже цікаві пілотні проекти з популяційних досліджень кардіологічних захворювань з використанням реальних даних декількох обласних кардіологічних центрів України (Інститут проблем математичних машин і систем), розроблено і побудовано зразок системи збереження і обробки великих обсягів медичних даних (Інститут сцинтиляційних матеріалів). Для медичних установ МОЗ України написані методичні рекомендації з практичного поширення та використання цих результатів. У 2013 році за допомогою науковців НАН України розпочаті виконання проектів, метою яких є впровадження грід-технологій в Інституті ядерної медицини та променевої технології і Інституті серцево-судинної хірургії ім. М.М. Амосова НАМН України.

Перспективним і корисним з практичної точки зору є моделювання за допомогою ґрід-технологій структур і процесів на молекулярно-атомарному рівні, що знаходять застосування в фізиці конденсованої речовини та матеріалознавстві. Результатами досліджень можуть бути рекомендації щодо створення нових матеріалів з наперед заданими властивостями (Інститут металофізики, Фізико-технічний інститут низьких температур, Донецький фізико-технічний інститут, Інститут фізики конденсованих систем та інші).

Моделювання геофізичних, гідрофізичних і метеорологічних процесів з можливістю передбачень катастрофічних природних явищ були предметом ґрід-обчислень у проектах Інституту проблем математичних машин і систем, Морського гідрофізичного інституту, Інституту геофізики, Інституту космічних досліджень. За результатами досліджень надані практичні рекомендації для відповідних відомств і установ.

В рамках Програми інформатизації НАН України ведуться роботи із створення засобів онтологічного представлення знань (на прикладі предметної області проектування в САПР ПЛІС та інформаційно-технологічної підтримки науково-технічної творчості), з наданням сервісів формалізації представлення знань, створення та використання онтологічної бази знань наукового дослідника (Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова).

Розроблено методологічні засади побудови знання-орієнтованої інформаційної системи наукового дослідника для виконання функцій підтримки виконання наукових проектів, автоматизованої побудови онтологічних баз знань предметних дисциплін, формування тематики нових наукових досліджень, породження та перевірки наукових гіпотез, аналізу і узагальнення отриманих наукових результатів та експериментальних даних [8, 13, 14].

В частині уніфікації і формалізації представлення результатів наукових досліджень запропоновано новий спосіб представлення й використання знань і відповідну метамову нормальних форм знань, яка є розширенням відомих мета-

мов та доповненням формалізму онтологічного представлення знань.

Як основний компонент підсистеми організації колективної творчості обрано систему Redmine, що є серверним веб-додатком для керування проектами, задачами і відстеження помилок та поширюється згідно ліцензії GNU General Public License. Вироблено рекомендації до розробки UML-діаграм: підсистеми керування колективним проектом; блоку обробки лінгвістичної інформації підсистеми онтологічної репрезентації текстів; блоку керування пошуком інформації у зовнішніх джерелах; блоку персоніфікованої бази знань.

В частині онтологічних інструментів формування семантики WEB-інтерфейсу запропоновано застосування функціональних можливостей комплексу засобів ІТ-ТОДОС (Трансдисциплінарні Онтологічні Діалоги Об'єктно-орієнтованих Систем) для керування знаннями з використанням підходів трансдисциплінарного онтологічного керування інформаційними ресурсами, де науковець розглядається як джерело визначення нових знань.

Інформатизація науково-організаційної і господарчої діяльності

В діяльності НАН України, спрямованої на забезпечення наукових досліджень матеріальними, фінансовими, людськими ресурсами та їх ефективне використання на пріоритетних напрямках, можна умовно виділити ряд взаємопов'язаних процесів, таких як науково-організаційна, господарська, науково-експертна, інноваційна діяльність та інше. Основним з них є науково-організаційна діяльність, яка полягає у циклічному виконанні технологічного циклу координації досліджень на різних структурних рівнях:

- визначення пріоритетних напрямків досліджень;
- формування пропозицій щодо проведення фундаментальних і прикладних досліджень;
- експертиза пропозицій;

- аналіз результатів експертизи і визначення проектів, що потребують фінансування;
- розробка бюджету фінансування досліджень;
- планування досліджень;
- виконання досліджень;
- звітування про проведені дослідження і отримані результати;
- експертна оцінка отриманих результатів;
- аналіз результатів і формування пропозицій щодо пріоритетних напрямків досліджень.

Все це обумовлює безліч горизонтальних та вертикальних внутрішніх зв'язків, а також зовнішніх зв'язків, які мають бути враховані при автоматизації процесів діяльності НАН України.

Традиційно в першу чергу автоматизації підлягали рутинні процедури обробки різноманітних показників діяльності і формування аналітичних звітів, необхідних для оцінки стану і прийняття рішень (так звані облікові системи). Ці системи передбачають отримання показників для обробки шляхом ручного вводу з паперових документів. Таким чином облікові системи хоча й дають значне скорочення трудомісткості формування звітності для аналізу, однак при цьому додають роботи з введення даних з паперових документів. Крім того, обробити дані принципово можна лише після оформлення паперових документів, тобто лише після завершення пов'язаних процесів, що не дає змоги оперативного контролювати хід процесів і своєчасно впливати на їх хід у процесі виконання.

Для подолання цього протиріччя в інформатизації діяльності НАН України здійснюється перехід від облікових систем до так званих WorkFlow систем (систем електронного документообігу), які передбачають фіксацію у системі показників і стану процесу безпосередньо виконавцями відповідних етапів в електронному документі, який супроводжує процес і створюється ще під час планування процесу.

При використанні методології електронного документообігу: значно зменшуються трудовитрати вводу первинних даних за рахунок усунення дублювання вводу первинних даних; паперові документи можуть бути оформлені автоматично або взагалі не оформлятися; відомості, зафіксовані в документах, доступні всім учасникам процесу для аналізу у відповідності з їх посадовими обов'язками і дозволами одразу після фіксації; вплив процесів на показники може здійснюватись у режимі реального часу за мірою виконання процесів, а не після його закінчення і оформлення паперового документу; хід процесів, їх стан і відхилення від плану може контролюватися в реальному масштабі часу.

Підсистеми автоматизації діяльності НАН України в основному розраховані на експлуатацію у локальних мережах установи і забезпечують взаємодію користувачів у рамках однієї установи. Тиражування підсистем рівня установи передбачає наявність власних технічних засобів, розгортання на них програмного забезпечення, підтримку і адміністрування. Насправді не всі установи в достатній мірі забезпечені як технічними засобами, так і обслуговуючим персоналом. Тому при розвитку існуючих підсистем і розробці нових реалізується можливість розгортання підсистем у централізованих дата-центрах і на хмарних ресурсах з наданням віддаленого доступу, в тому числі і WEB доступу, що надасть змогу: значно скоротити витрати на технічне забезпечення і створення робочих місць всім учасникам процесів; значно скоротити витрати на утримання інфраструктури і зменшити потрібну кількість обслуговуючого персоналу та спростити процедуру впровадження підсистем в установах.

В рамках виконання Програми розроблені, впроваджуються та підтримуються засоби для автоматизації основних ланок науково-організаційних та господарських підрозділів НАН України [8, 15, 16], зокрема:

- впроваджена та підтримується АІС «Президія» НАН України (Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова);

- розроблена типова АІС «Установа», що впроваджена та підтримується в ряді установ НАН України (Інститут програмних систем);
- розроблена та впроваджена системи підтримки формування та виконання цільових науково-технічних програм (Інститут програмних систем);
- в стадії дослідної експлуатації знаходиться система підтримки формування та аналізу річних звітів установ НАН України (Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова, Інститут програмних систем);
- впроваджена та підтримується АІС медичних закладів НАН України (Міжнародний науково-навчальний центр інформаційних технологій та систем).

Впроваджені комплексні системи захисту відкритої інформації в автоматизованих системах Президії НАН України та гід системах (Інститут програмних систем) [17].

Висновки

В рамках Програми інформатизації НАН України, Програми НАН України «Впровадження гід-технологій та побудова кластерів в НАН України» та Державної цільової науково-технічної програми «Впровадження і застосування гід-технологій на 2009–2013 роки» підтримувалась та розвивалась обчислювальна та інформаційна інфраструктура підтримки діяльності НАН України, що відповідає вимогам часу.

Створено академічну мережу обміну даних (АМОД) з великою пропускнуною спроможністю (10 ГБ), яка об'єднує всі наукові центри України, має вихід до потужних наукових мереж у Європі та забезпечує комунікаційне середовище для інформаційної підтримки діяльності НАН України. АМОД забезпечує близько 130 установ НАН України півтора десятком різноманітних послуг та сервісів, перелік яких постійно збільшується.

Побудовано гід-інфраструктуру виробничого типу, що розвиває цифрову науку інтегровану в європейський прос-

тір. У провідних наукових установах НАН України функціонують 29 гід-вузли та створено потужні 3 дата-центри, які забезпечують обчислювальні ресурси для обробки масштабних експериментів та розрахунків теоретичних моделей, що сприяло розбудові національної гід-мережі та забезпечило участь науковців НАН України в міжнародних проектах (EGEE, Alice та ін.), розвиваються гід- і хмарна інфраструктури.

Створено та впроваджуються наукові електронні бібліотеки, Система інтеграції електронних бібліотек України, яка об'єднує 454 періодичних видань НАН України, 59 наукових видань, виходить в електронному вигляді.

Ведуться роботи з створення засобів онтологічного представлення знань (на прикладі предметної області проектування в САПР ПЛІС та інформаційно-технологічної підтримки науково-технічної творчості), з наданням сервісів формалізації представлення знань, створення та використання онтологічної бази знань наукового дослідника.

Розроблено, впроваджуються та підтримуються засоби для автоматизації основних ланок науково-організаційних та господарських підрозділів НАН України.

Хоча у розбудові інформаційної інфраструктури досягнуті певні результати, але справа далеко не закінчена і є ще невирішені задачі для її удосконалення та поширення використання.

З урахуванням сучасних потреб наукових досліджень та тенденцій розвитку інформаційних технологій потрібно не тільки нарощувати функціональне наповнення засобів автоматизації діяльності НАН України, а й якісно змінити інформаційну інфраструктуру в бік:

- інтеграції технічних, інформаційних і програмних ресурсів з використанням хмарних технологій та сучасних комп'ютерних засобів інтеграції;
- централізації обслуговування і підвищення ефективності використання ресурсів та зменшення витрат на утримання інфраструктури;

- забезпечення доступу кожного науковця до загальних (об'єднаних) ресурсів НАН України;
- автоматизації процесів (конвєрсив) отримання нових знань;
- організації співпраці установ та науковців у єдиному інформаційному просторі НАН України, а також забезпечення співпраці з світовою науковою спільнотою.

1. Jim Gray. A transformed scientific method. <http://languagelog ldc.upenn.edu/myl/JimGrayOnE-Science.pdf>
2. Статут Національної академії наук України, Затверджено Постановою Президії НАН України від 14.04.2016 р. № 2.
3. Концепція розвитку НАН України на 2014–2023 роки.
4. Закон України «Про наукову і науково-технічну діяльність».
5. Основні принципи організації та діяльності наукової установи Національної академії наук України. Затверджено Постановою Президії НАН України від 14.09.2016 р. № 180.
6. Концепція Програми інформатизації НАН України. Затверджено розпорядженням Президії НАН України від 27.02.2004 р. № 146.
7. Основні напрямки та пріоритетні завдання Програми інформатизації НАН України на 2010–2014 роки. Затверджено розпорядженням Президії НАН України від 16.03.2010 р. № 111.
8. Концептуальні положення розвитку Програми інформатизації НАН України на 2015–2019 роки. Затверджено Постановою Президії НАН України від 25.02.2015 р. № 38.
9. Програма інформатизації. Звіти про виконання. <http://programinform.nas.gov.ua/40>
10. Андон Ф.И., Резниченко В.А. Управляемые словари, таксономии, тезаурусы и онтологии в семантическом вебе. *Інженерія програмного забезпечення*. 2013. № 1(13). С. 40–48.
11. Андон Ф.И., Гришанова И.Ю., Резниченко В.А. Semantic web как новая модель информационного пространства интернет. *Проблеми програмування*. 2008. № 2–3. С. 417–430.
12. Загородний А.Г., Свистунов С.Я., Белоус Л.Ф., Головинский А.Л. UA-Grid: Украинская национальная гридпрограмма. International Conference "Parallel and Distributed Computing Systems" PDCS 2013 (Ukraine, Kharkiv, March 13–14, 2013).
13. Твердохліб Є.М., Перконос П.І., Субботін С.В. Розробка системи підтримки формування і аналізу річних звітів установ НАН України. *Проблеми програмування*. 2015. № 4. С. 93–101.
14. Твердохліб Є.М., Перконос П.І., Лой А.І. Керування потоками наукових робіт в грід-системах. *Проблеми програмування*. 2013. № 3. С. 69–78.
15. Твердохліб Є.М., Перконос П.І. Побудова інтегрованої Е-інфраструктури підтримки наукових досліджень в грід-середовищі. *Проблеми програмування*. 2012. № 2–3. С. 143–149.
16. Вендров А.М. CASE-технології. Сучасні методи і засоби проектування інформаційних систем. <http://www.citforum.ru/database/case/index.shtml>.
17. Загородний А.Г., Боровська О.М., Свистунов С.Я., Сініцин І.П., Родін Є.С. «Створення комплексної системи захисту інформаційних ресурсів у національній грід-інфраструктурі України». К.: Видавництво «Сталь». 2014. 374 с.

References

1. Jim Gray. A transformed scientific method. <http://languagelog ldc.upenn.edu/myl/JimGrayOnE-Science.pdf>
2. Statute of the National Academy of Sciences of Ukraine, approved by the Presidium of the NAS of Ukraine from 14.04.2016. N 2.
3. Conception of evolution of NAS of Ukraine for 2014–2023 years.
4. The law of Ukraine "On Science and Scientific-Technical Activity".

5. Basic principles of organization and activity of the scientific institution of the National Academy of Sciences of Ukraine. Approved by Resolution of the Presidium of the National Academy of Sciences of Ukraine dated 14.09.2016. N 180.
6. Conception of the Program of Informatics of the National Academy of Sciences of Ukraine. Approved by the order of the Presidium of the NAS of Ukraine dated February 27, 2004. N 146.
7. Main directions and priority tasks of the Program of Informatics of NAS of Ukraine for 2010-2014. Approved by the order of the Presidium of the NAS of Ukraine dated March 16, 2010. N 111.
8. Conceptual provisions of the development of the Information Science Program of the National Academy of Sciences of Ukraine for 2015-2019. Approved by the Resolution of the Presidium of the National Academy of Sciences of Ukraine dated February 25, 2015. N 38.
9. Program of informatization. Performance reports Report on implementation. <http://programinform.nas.gov.ua/40>
10. Andon F.I., Resnichenko V.A. Managed dictionaries, taxonomies, thesaurus, and ontologies in a semantic web. Software Engineering. N 1 (13). 2013. P. 40–48.
11. Andon F.I., Grishanova I.Yu., Reznichenko V.A. Semantic web as a new model of Internet information space. Problems in Programming. 2008. N 2-3. P. 417–430.
12. Zagorodniy A.G., Svistunov S.Ya., Belous L.F., Golovinsky A.L. UA-Grid: Ukrainian National Grid Program, International Conference "Parallel and Distributed Computing Systems" PDCS 2013 (Ukraine, Kharkiv, March 13-14, 2013).
13. Tverdokhlib E.M., Perkonos P.I. Construction of an integrated E-infrastructure for scientific research support in the grid environment. Problems in Programming. 2012. N 2-3. P. 143–149.
14. Tverdokhlib E.M., Perkonos P.I., Loi A.I. Management of flows of scientific works in grid systems. Problems in Programming. 2013. N 3. P. 69–78.
15. Tverdokhlib E.M., Perkonos P.I., Subbotin S.V. Development of a system of support for the formation and analysis of annual reports of institutions of the National Academy of Sciences of Ukraine. Problems in Programming. 2015. N 4. P. 93–101.
16. Vendrov A.M. CASE-technology. Modern methods and facilities for information systems designing. <http://www.citforum.ru/database/case/index.shtml>.
17. Zagorodniy A.G., Borovskaya O.M., Svistunov S.Ya., Sinitin I.P., Rodin Ye.S. "Creation of an integrated system of protection of information resources in the national grid infrastructure of Ukraine". K. : Publishing house "Steel". 2014. 374 p.

Одержано 16.08.2017

Про авторів:

Загородній Анатолій Глібович,
віце-президент НАН України,
академік НАН України,
директор і завідувач відділу теорії та моделювання плазмових процесів.

Андон Пилип Іларіонович,
академік НАН України,
директор Інституту програмних систем НАН України,
Кількість наукових публікацій в українських виданнях – 400.
Кількість наукових публікацій в зарубіжних індексованих виданнях – 10.
<http://orcid.org/0000-0001-6546-0826>.

Процикевич Ігор Андрійович,
директор ДП НТЦ «УАРНЕТ»,
кандидат фіз.-мат. наук.
Кількість наукових публікацій в українських виданнях – 20.
Кількість наукових публікацій в зарубіжних індексованих виданнях – 30.

Місце роботи авторів:

Інститут теоретичної фізики
ім. М.М. Боголюбова НАН України,
03143, м. Київ,
вул. Метрологічна, 14-б.
Тел.: +38(044) 521-34-94.
E-mail: azagorodny@bitp.kiev.ua,

Інститут програмних систем
НАН України,
03187, м. Київ, Україна,
проспект Академіка Глушкова, 40.
Тел.: +38(044) 526 3068.
E-mail: andon@isofts.kiev.ua,

Державне підприємство
Науково-телекомунікаційний центр
«Українська академічна і дослідницька
мережа» Інституту фізики конденсованих
систем НАН України»
79011, м. Львів,
вул. Свенціцького 1.
Тел./факс: +38 (032) 295-69-34, 290-23-03.
E-mail: prots@mail.lviv.ua.