



Russian Supercomputing Days 2025



Суперкомпьютерное образование на примере анализа геномных данных и моделирования управления пространственно-нерегулярными кустовыми нефтегазовыми скважинами*

Губайдуллин Ирек Марсович, профессор, д.ф.-м.н., зав. лаб. математической химии Института нефтехимии и катализа (ИНК) УФИЦ РАН, зав. базовой (в ИНК) кафедры технологии нефти и газа уфимского государственного нефтяного технического университета (УГНТУ), **+7 (917) 340-50-22**

Руководитель Научно-образовательной социальной школа НОСш_АЛМА-Уфа

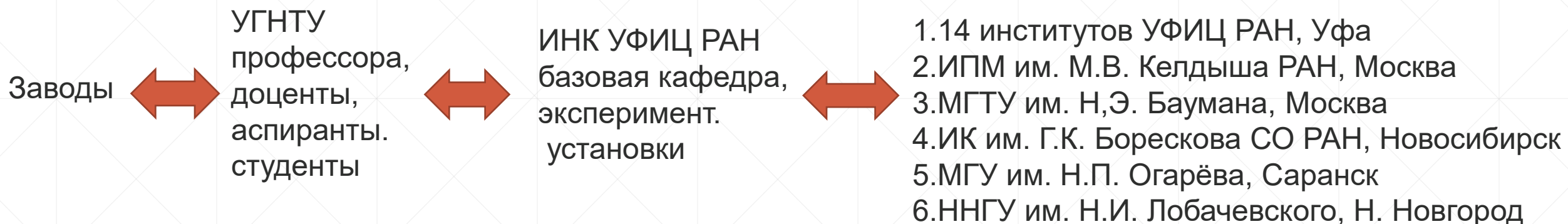
irekmars@mail.ru

*Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда
(проект № 25-71-20005)

Структура

Научно-образовательной социальной школы НОСш_АЛМА-Уфа

*Школа функционирует на базовой кафедры уфимского государственного нефтяного технического университета (УГНТУ) «Технология нефти и газа (ТНГ)»
в Институте нефтехимии и катализа Уфимского федерального исследовательского центра РАН (ИНК УФИЦ РАН)*



Кадровый состав: д.ф.-м.н. – 3, к.ф.-м.н – 9, к.б.н. - 1 по специальностям: 1) 1.4.4. – физическая химия; 2) 1.2.2. – математическое моделирование, численные методы и комплексы программ; 3) 1.5.3. – молекулярная биология;
Работают профессорами и доцентами в УГНТУ на кафедрах технологии нефти и газа, информационных технологий и прикладной математики, цифровых технологий и моделирования. ГАЗПРОМ, РОСНЕФТЬ, БашНЕФТЬ, Нефтеавтоматики и другие
Аспиранты (УГНТУ и ИДУ УФИЦ РАН) – 8, магистры и бакалавры – около 50 студентов.

«Международная научная конференция «Суперкомпьютерные дни в России». 29 – 30 сентября 2025г., г. Москва, Россия.

Научно-образовательная социальная школа НОСш_АЛМА-Уфа irekmars@mail.ru, +7 (917) 340-50-22

Темы реализованных и действующих научно-практических проектов:

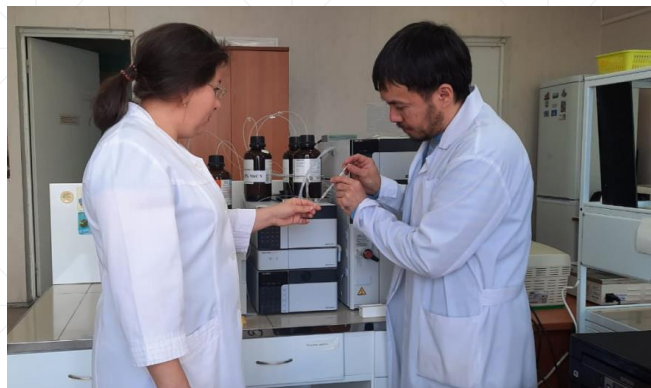
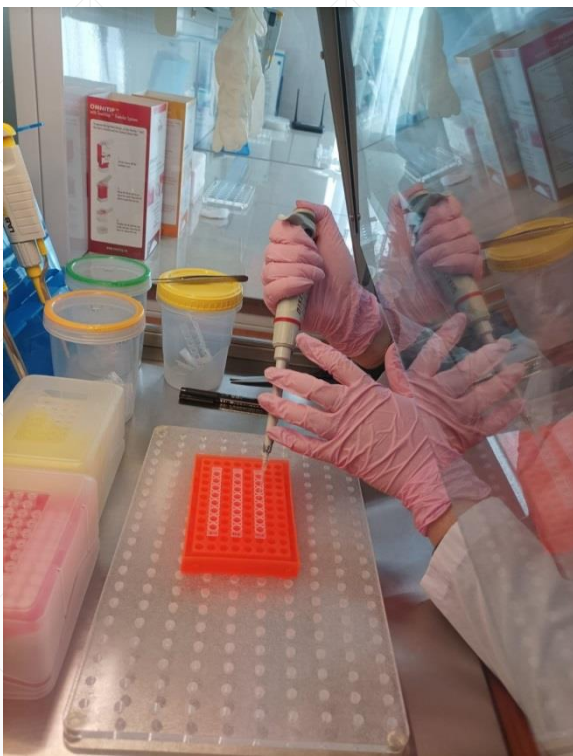
1. Моделирование реакции петлевой изотермической амплификации и создание компьютерных программ дизайна праймерных систем (**РФФИ-20-37-90091** «Разработка программы дизайна праймеров для Loop AMPlification – петлевой изотермической амплификации на основе технологий машинного обучения», **Институт биохимии и генетики УФИЦ РАН, Уфа**);
2. Моделирование управления пространственно-нерегулярными кустовыми нефтегазовыми скважинами (проекты **РНФ**: 1) **№ 21-71-20047** – «Разработка теоретических основ и создание высокопроизводительных алгоритмов для двухфазных математических моделей фильтрации жидкости в коллекторах трещиновато-порового типа»; 2) **№ 25-71-20005** – «Разработка мортарно-согласованной численной технологии решения многомасштабных задач совместной фильтрации несмешивающихся флюидов в трещиновато-пористых коллекторах пластов сложного геологического и литологического строения», **ИПМ им. М.В. Келдыша РАН**);
3. Исследование влияния распараллеливания на производительность эволюционных алгоритмов при решении задачи оптимального управления гидрирования углеводородов (проекты **РФФИ** - **№ 15-07-01764_А** - «Оптимальное управление химическими реакциями металлокомплексного катализа», **№ 18-07-00341_А** – «Оптимизация и управление химико-технологическими системами на основе численного моделирования кинетики с использованием высокопроизводительной вычислительной техники»; (**РНФ 19-71-00006** - «Разработка математического и программного обеспечения многокритериального оптимального управления реакциями металлокомплексного катализа», **МГТУ им. Н.Э. Баумана**);
4. Исследование кинетических особенностей и математическое моделирование процесса низкотемпературной паровой конверсии углеводородов на родий-содержащих катализаторах (**Институт катализа им. Г.К. Борескова СО РАН и ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Н. Новгород**);
5. И другие – **26 выполненных и ныне действующих проектов РФФИ и РНФ** с более **10 организаций** (заводы, институты и университеты).

«Международная научная конференция «Суперкомпьютерные дни в России». 29 – 30 сентября 2025г., г. Москва, Россия.

Научно-образовательная социальная школа НОСш_АЛМА-Уфа irekmars@mail.ru, +7 (917) 340-50-22

1. Моделирование реакции петлевой изотермической амплификации и создание компьютерных программ дизайна праймерных систем. Институт биохимии и генетики УФИЦ РАН, Уфа

Тестирование подобранных праймеров
в лабораторных условиях



Доктор хим. наук
Равиль Ринатович
Гарафутдинов

**АСПИРАНТ – Лиана
Ульфатовна
Ахметзянова**

Магистрант, Валерий
Хайритдинов



Кандидат биолог. наук, Ассоль
Рафиковна Сахабутдинова

Руководитель проектов – д.ф.-
м.н., зав. лаб. в ИНК и зав.
кафедры в УГНТУ,
Губайдуллин И.М.



Проектирование, разработка базы данных Математическое моделирование реакций.
Внутренний параллелизм объекта и процесса - расщепление по физико-химическим
процессам, по пространству и т.д.

Анализ больших данных и
параллельные алгоритмы и
комплексы программ

«Международная научная конференция «Суперкомпьютерные дни в России». 29 – 30 сентября 2025г., г. Москва, Россия.

Научно-образовательная социальная школа НОСш_АЛМА-Уфа irekmars@mail.ru, +7 (917) 340-50-22

Применение амплификации (многократное увеличение копий участка ДНК с определённой нуклеотидной последовательностью)

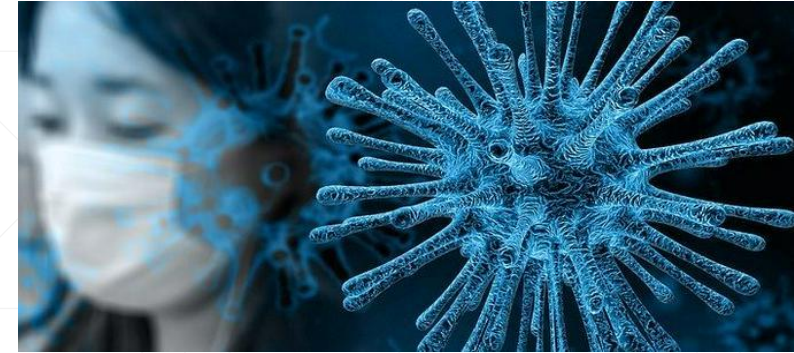
5

Бактерии



А – Аденин; G – Гуанин;
С – Цитозин; Т – Тимин

Вирусы



ДНК (Дезоксирибонуклеиновая кислота)

Комплементарность ДНК



3,5 миллиардов букв

```
1 >1 dna:chromosome chromosome:SolTub_3.0:1:1:88663952:1 REF
2 CCATTTTAAAGGTCAAATGTGACCCAGAGCAGGCAAAACCCAAATTTTATCGATTTTCGT
3 GTGCAATAGTCTATGGAGTTTTTGGTGATCTGGAATTCGACATAAGTTATGCTAAAAAA
4 TTTTGTGTACGTCTGTAAAGACCTTAGCTATGAAGCCAGTTAGCCCTCACGGCCAAAACA
5 TACCATTTTGAAGGTCAAATATGCCCCGAATCTGGTAAACCCCCCAATTTGCCGATTATC
6 ATGTGCTATAGTCCATGGACTTTTTGGTGATCTGGAATTTTCGACATACTTTTGCCTAAA
7 ATTTTCGTACACTTCCGTTAAACCTTAGCTATGGATCCAGTTAGACTTCGCGGCCAAAA
8 GGTCCCATTTTAAAGGTCAAATGTACCCAGAGCAGAAAAACCCCAATTTTACCGATTT
9 TCATGTGCTACAGTCAATGTACTTTTTGGTGATCTGAAATTTTCGACATAATTTTGTCTAA
10 AAATTTTGTGGACGTCCGTTAAGCCTTAGCTATGGAACCCAGTTAGCCCTCACGGCCAAA
11 CGTCCCATTTTGAAGGTCAAATGTGCCTAAAGAAGGTAAACCCCTACTTTGCCGATTTTC
12 ATGTGCTATAGTCTACAGACTTTTTGTGATCTGGAATTCAAACATAATTTTGCCTAAAAT
13 TTTTCGTGGACGGACGATAAGATCTTAGTTATGGAGGGTATTAGCCATCACAGCCAAAAC
```

«Международная научная конференция «Суперкомпьютерные дни в России». 29 – 30 сентября 2025г., г. Москва, Россия.

Научно-образовательная социальная школа НОШ_АЛМА-Уфа irekmars@mail.ru, +7 (917) 340-50-22

Полимеразная цепная реакция (ПЦР)



1. Денатурация (93-95°C)
2. Отжиг праймера (50-65°C)
3. Элонгация (72°C)

Праймеры для ПЦР



"Цена ошибки высока!"

11 марта 2020 года ВОЗ объявил о пандемии коронавирусной инфекцией COVID-19, вызванную коронавирусом SARS-Cov-2 во всём мире. На тот день зараженных было около **125 000** человек

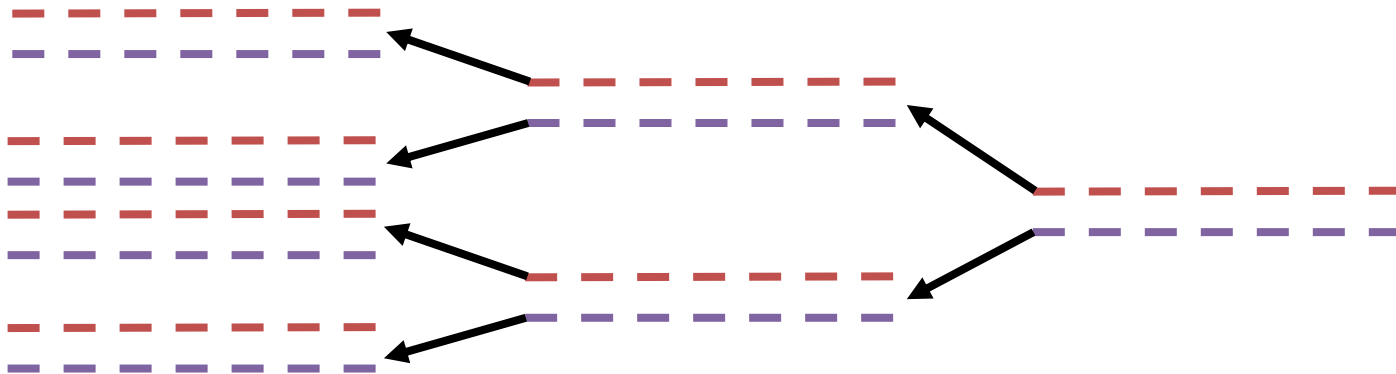
На 24 .10. 2023

зараженных **696 906 211** человек,

умерло **6 930 731** человек.



Полимеразная цепная реакция (ПЦР)



1. Денатурация (93-95°C)
2. Отжиг праймера (50-65°C)
3. Элонгация (72°C)



На получение ложных результатов в ПЦР-диагностике - как **ложноположительных**, так и **ложноотрицательных** - могут повлиять различные обстоятельства.

Применение ПЦР - требует строжайшего соблюдения всех этапов анализа

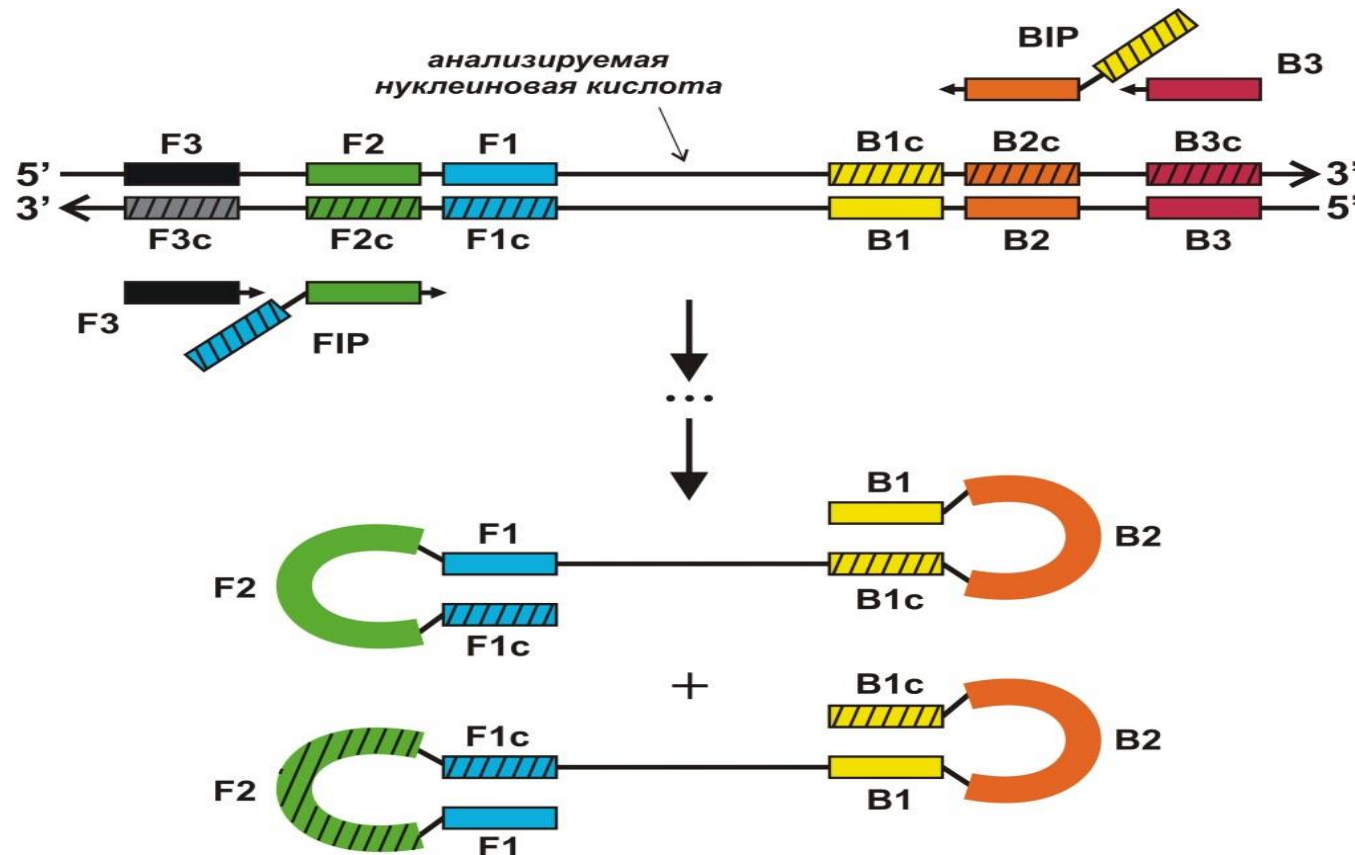
Петлевая изотермическая амплификация (Loop-mediated isothermal **AMP**lification (**LAMP**))

Компоненты для LAMP

- ✓ **Праймеры** – синтетические олигонуклеотиды длиной в среднем 20-25 нуклеотидов,
- ✓ **ДНК-полимераза (Bst)** — фермент, обеспечивающий синтез цепей ДНК (*Bacillus stearothermophilus*)
- ✓ **Водяная баня или термостат.**

Преимущества:

- ✓ фиксированная T_m (от 60 до 65 °C)
- ✓ быстрота (от 15 до 40 минут)
- ✓ чувствительность



- ✓ два внешних праймера: **F3** (Forward) и **B3** (Backward),
- ✓ два внутренних праймера: **FIP** (Forward Inner Primer) и **BIP** (Backward Inner Primer),
- ✓ два петлевых праймера: **Loop Primer B** и **Loop Primer F**

Программы дизайна праймеров для LAMP

9

Название	Ссылка	Язык программирования	Интерфейс	Длина последовательности, нт	Чтение РНК последовательности	Доступность
NEB LAMP Primer Design Tool (New England Biolabs)	https://lamp.neb.com/#/	Java	да	100-2000	нет	free, online
Primer Explorer V5 (ChemicalCo. LTD)	http://primerexplorer.jp/lampv5e/index.html	Java	да	До 2000	нет	free, online
FastPCR (Primer Digital LTD)	http://www.primerdigital.com/fastpcr.html	Java	нет	Без огранич.	нет	free
GLAPD (Shanghai Jiao Tong University)	https://github.com/jiqingxiaoxi/GLAPD	C, CUDA C, Perl, Linux	нет	Без огранич.	нет	for pay
LAMP Designer (Premier Biosoft)	http://www.premierbiosoft.com/isothermal/lamp.html	no data	да	до 15000000	нет	for pay

«Международная научная конференция «Суперкомпьютерные дни в России». 29 – 30 сентября 2025г., г. Москва, Россия.

Научно-образовательная социальная школа НОСш_АЛМА-Уфа irekmars@mail.ru, +7 (917) 340-50-22

Петлевая изотермическая амплификация (Loop-mediated isothermal **AMP**lification (**LAMP**))

Критерии подбора праймеров для LAMP:

1. Длина праймера (15-30 нуклеотидов, для внутренних праймеров 30-50 нуклеотидов);
 2. GC-состав (оптимальное 40-60%);
 3. Температура отжига (оптимальная T_m в пределах 55-65°C);
-
4. Сближенное расположение (рекомендуемое расстояние для F3/F2 1–10 нуклеотидов, для F2/F1с 10–25 нуклеотидов, для F1с/B1с 0–30 нуклеотидов); как следствие, средний размер ампликона (120-220 п.н.);
 5. Исключение образования гомо- и гетеродимеров (длиной более 2 нуклеотидов).
 6. Исключение повторяющихся нуклеотидов в праймере.

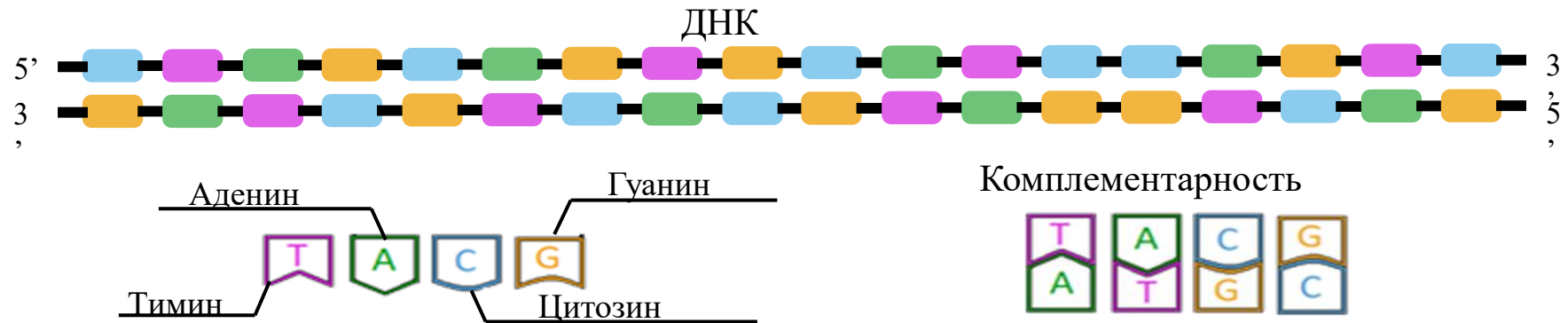
известное

новое

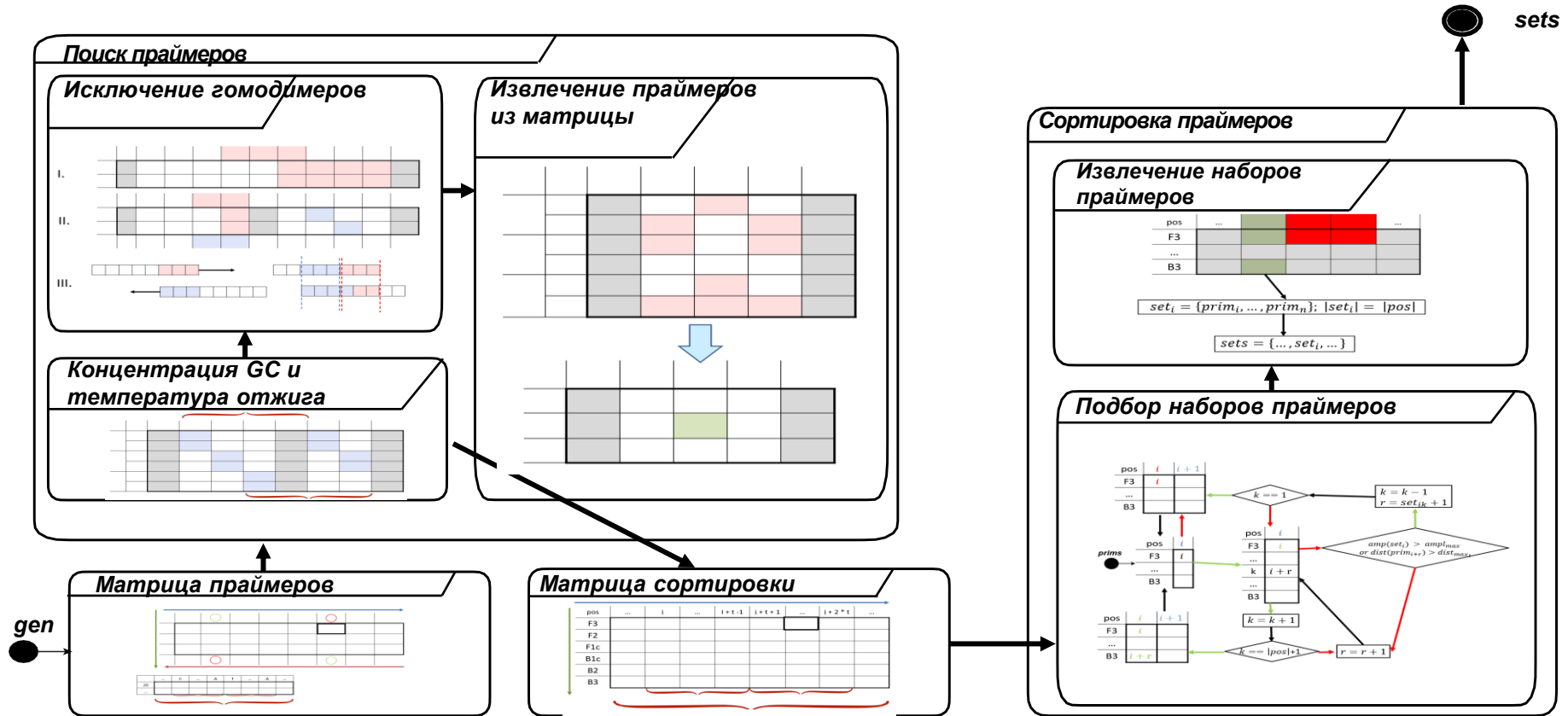
«Международная научная конференция «Суперкомпьютерные дни в России». 29 – 30 сентября 2025г., г. Москва, Россия.

Научно-образовательная социальная школа НОСш_АЛМА-Уфа irekmars@mail.ru, +7 (917) 340-50-22

Входные данные

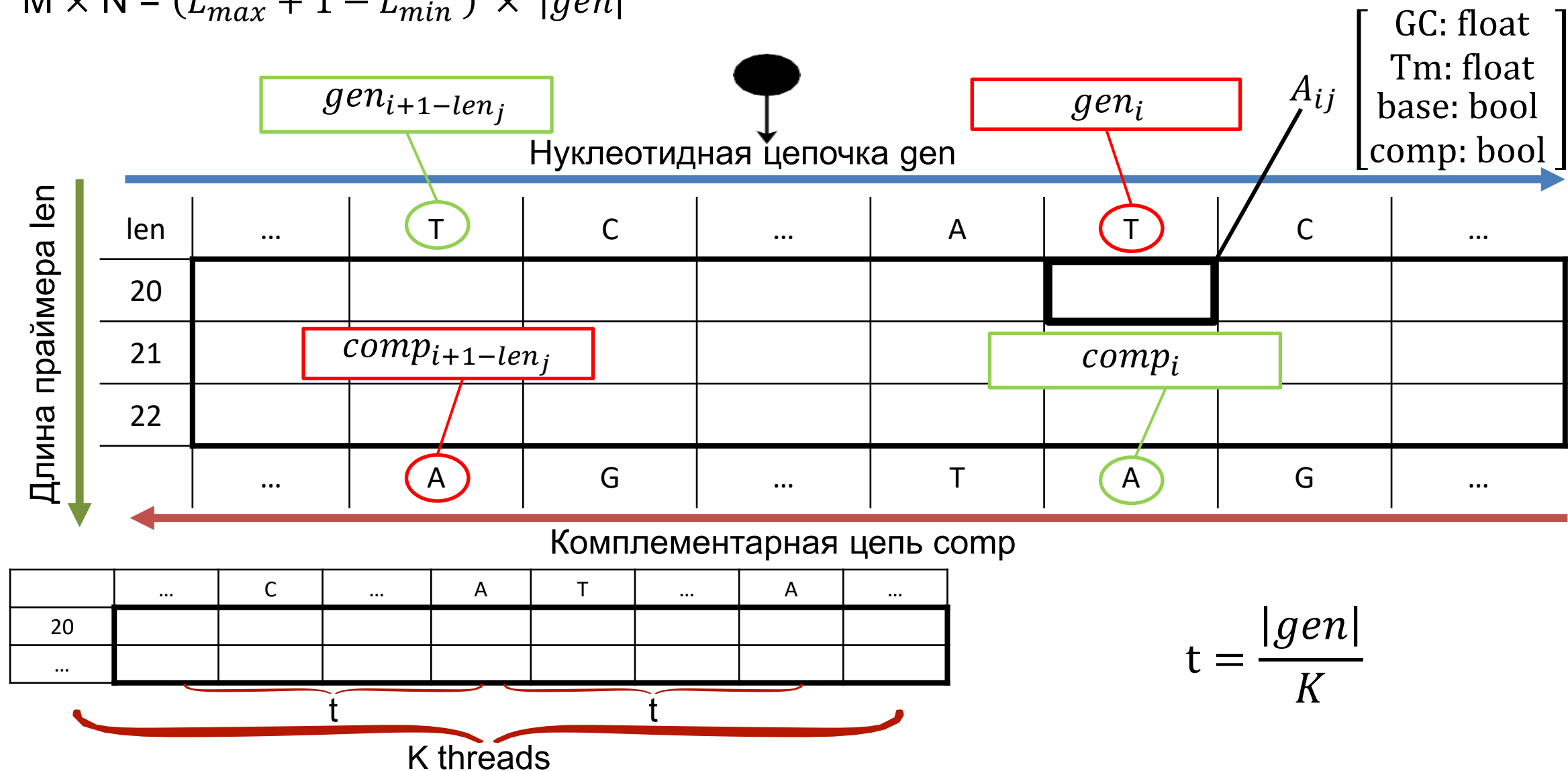


Параллельный алгоритм для CUDA



Матрица праймеров

$$M \times N = (L_{max} + 1 - L_{min}) \times |gen|$$



GC:

$$GC_{ij} = \sum_{k=i-len_j}^i \frac{100}{len_j} * gen_k \in \{G, C\}; \Delta GC_j = \frac{1}{len_j}$$

$$Na^+ = 0.05$$

Tm:

$$Tm = 78.327 + 17.127 \cdot (\lg[Na^+]) + 0.461 \cdot (GC_{ij}) - \frac{491.84}{L}$$

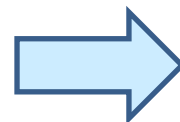
		t							
len		...	T	C	T	...	T	C	...
20	GC		50	55	50		40	45	
	Tm		51,69	53,74	51,69		47,59	49,64	
21	GC		47,62	52,38	47,62		38,1	42,86	
	Tm		52,05	54	52,05		48,15	50,1	
22	GC		50	54,55	50		36,36	40,91	
	Tm		54,27	56,13	54,27		48,68	50,54	

$+\Delta GC_j$ $-\Delta GC_j$
 $+\Delta Tm_j$ $-\Delta Tm_j$

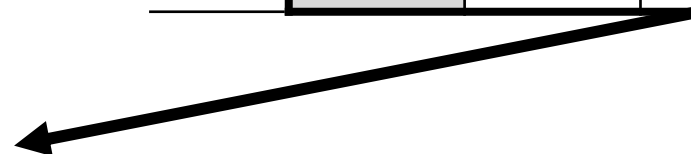
$$GC_{IJ} \in [50; 53]$$

$$Tm_{IJ} \in [52; 54]$$

len		...	T	C	T	...
20	GC		50	55	50	
	Tm		51,69	53,74	51,69	
21	GC		47,62	52,38	47,62	
	Tm		52,05	54	52,05	
22	GC		50	54,55	50	
	Tm		54,27	56,13	54,27	



len	...	T	C	T	...
20		—	—	—	
21		—	+	—	
22		—	—	—	



$prims = \{ \dots, prim_{ij}, \dots, prim_{tk}, \dots \}$, где для $prim_{ij}$ и $prim_{tk}$:

$$(i + 1 - len_j) * \max(len) + |prim_{ij}| \geq (k + 1 - len_t) * \max(len) + |prim_{tk}|$$

$$M \times N = |pos| \times |prims|$$

$$t = \frac{|prims|}{K}$$

$$A_{ij} \in [1; |prims|]$$

Праймеры prim

Позиции в наборе pos

pos	...	i	...	i+t-1	i+t+1	...	i+2*t	...
F3								
F2								
F1c								
B1c								
B2								
B3								

t

t

K threads

Извлечение наборов праймеров

pos	...	i	$i+1$	$i+3$	...
F3		i	$i+1$	$i+4$	
...					
B3		n			

$$set_i = \{prim_i, \dots, prim_n\}; |set_i| = |pos|$$

$$sets = \{\dots, set_i, \dots\}$$



Общая блок-схема



- **Язык программирования:**
 - C++.
 - CUDA.
- **Графический процессор**
 - Графический процессор: **NVIDIA GeForce RTX 3080.**
 - Количество физ. ядер: **8 704 (136 мультипроцессоров).**
 - Тактовая частота: **1.44 ГГц.**
 - Пиковая производительность: **29 TFLOPS.**
 - Память: **10 Гб.**
- **Наборы данных**
 - *Rhodopirellula baltica*: **$7.1 * 10^6$**
 - *Eilema griseolum*: **$20 * 10^6$**
- **Исследуемые показатели**
 - Время t_K , K – количество потоков.
 - Ускорение $a(k) = \frac{t_1}{t_K}$, K – количество потоков.

Поиск праймеров

Количество потоков	Ускорение, раз
1	1,000
64	3,638
256	14,479
1024	53,650
4096	124,225
16 384	170,176

Сортировка в наборы

Количество потоков	Ускорение, раз
1	1,000
64	1,211
256	4,642
1024	16,372
4096	57,184
16384	129,260

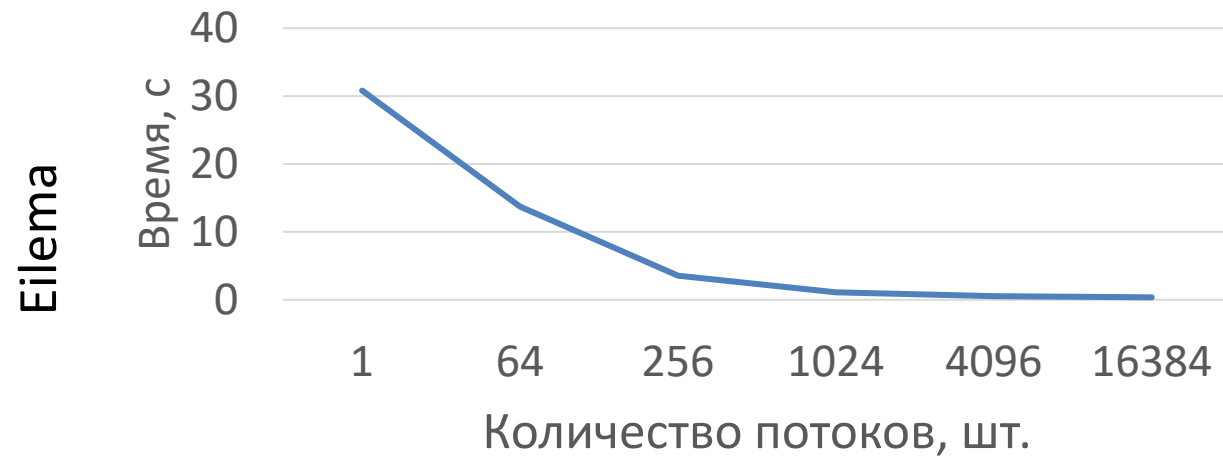
Количество потоков	Ускорение, раз
1	1,000
64	2,244
256	8,693
1024	27,663
4096	59,126
16384	84,808

Количество потоков	Ускорение, раз
1	1,00
64	1,13
256	3,55
1024	10,84
4096	30,43
16384	53,11

Поиск праймеров



Сортировка праймеров



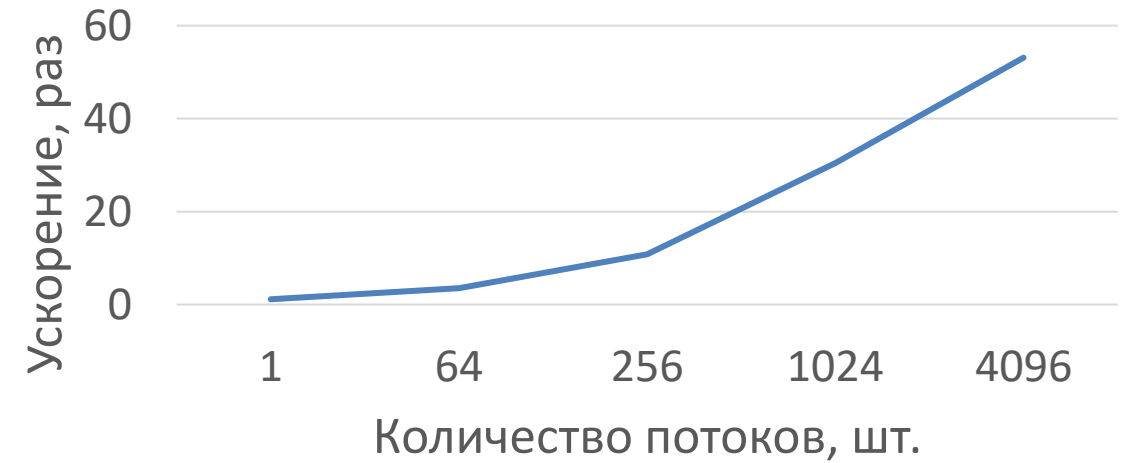
Поиск праймеров



Сортировка праймеров



Eilema



Цель группы

Создание компьютерной платформы с программными комплексами математического моделирования и оптимизации химико-флюидодинамических и технологических процессов и аппаратов

В.н.с. ИПМ им. М.В.
Келдыша РАН, д.ф.-м.н.,
Поляков Сергей
Владимирович



Заве. Лаб. математической
химии ИНК УФИЦ РАН,
д.ф.-м.н., профессор
Губайдуллин Ирек Марсович



Н.с. ИПМ им. М.В.
Келдыша РАН, к.ф.-м.н.,
Тарасов Никита Игоревич

В.н.с. ИПМ им. М.В.
Келдыша РАН, д.ф.-м.н.,
Подрыга Виктория
Олеговна



Главный специалист отдела
ГДИС РН –БашНИПИнефть,
к.ф.-м.н.,
Бобренёва Юлия Олеговна

В.н.с. ИПМ им. М.В.
Келдыша РАН, д.ф.-м.н.,
Повещенко Юрий
Андреевич,.



**Докторанты: Пескова Е.Е (Саранск);
Язовцева О.С. (Москва)**
**Ишимбайский катализаторный
завод, Зайнуллин Равиль Забитович**



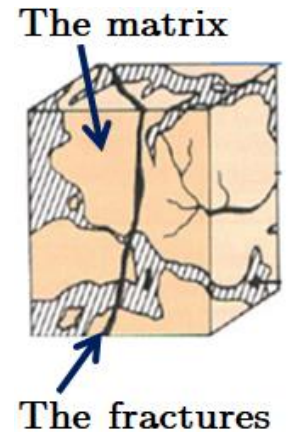
Ведущий специалист отдела
ГДИС РН –БашНИПИнефть,
старший преподаватель УГНТУ,
Узянбаев Равиль Мунирович

2. Моделирование управления пространственно-нерегулярными кустовыми нефтегазовыми скважинами

- Значительная часть нефти (около 60%) находится в карбонатных коллекторах
- Трудоемкие модели, длительные расчеты
- Моделирование добычи нефти в трещиновато-пористом коллекторе с кустистой структурой (кусты скважин)

Нефтяные скважины

Актуальность



Кусты скважин



Математическая модель

$$\frac{\partial(\varphi^\alpha \rho_o^\alpha S_o^\alpha)}{\partial t} + \nabla(\rho_o^\alpha \vec{U}_o^\alpha) + q_o^\alpha = 0, \quad q_o^m = -q_o^f = -\rho_o^m \sigma \lambda_o^m (P^f - P^m), \quad (1)$$

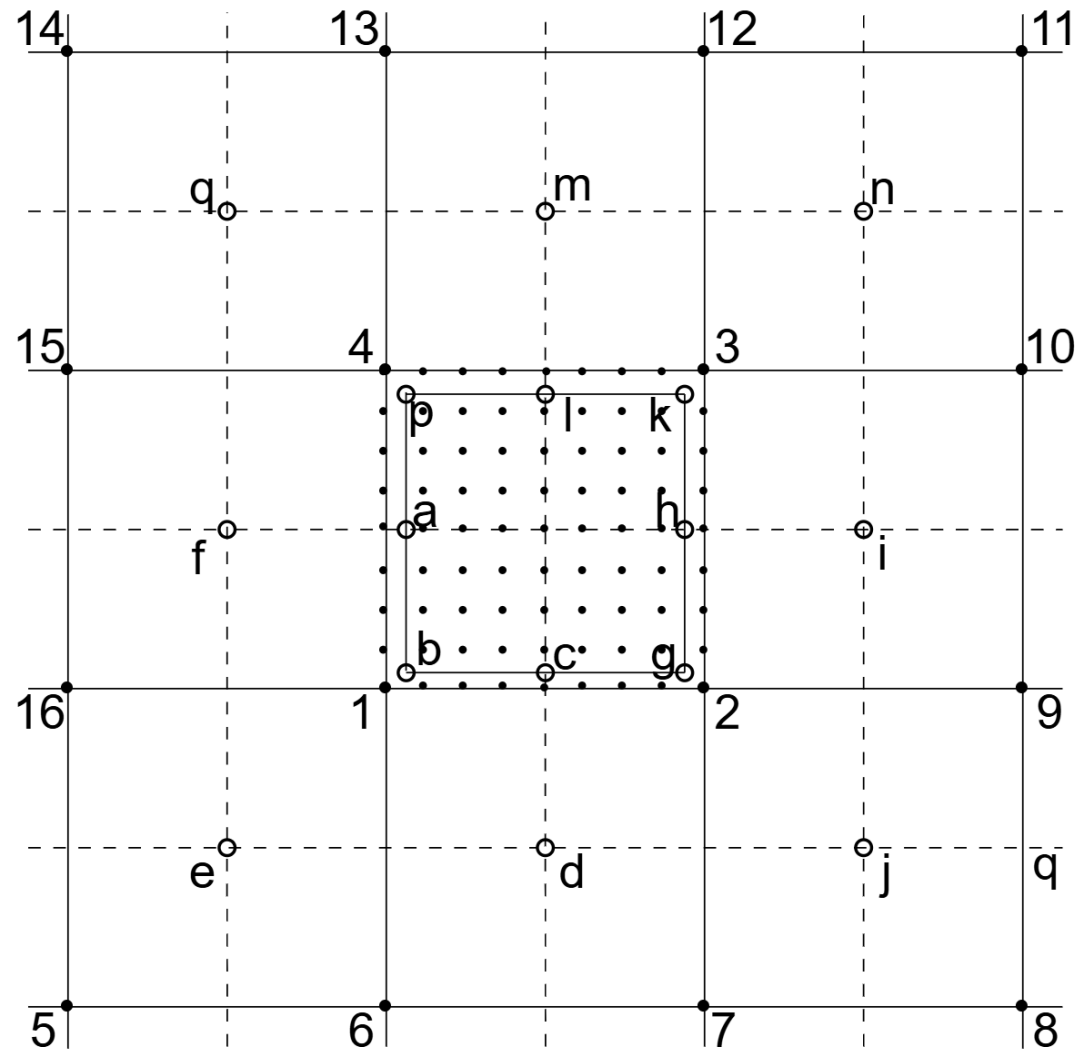
$$\frac{\partial(\varphi^\alpha \rho_w^\alpha S_w^\alpha)}{\partial t} + \nabla(\rho_w^\alpha \vec{U}_w^\alpha) + q_w^\alpha = 0, \quad q_w^m = -q_w^f = -\rho_w^m \sigma \lambda_w^m (P^f - P^m), \quad (2)$$

$$\lambda_o^m = \frac{k^m k_{ro}(S_o^m)}{\mu_o}, \quad \lambda_w^m = \frac{k^m k_{rw}(S_w^m)}{\mu_w}, \quad (3)$$

$$\vec{U}_o^\alpha = -\frac{k^\alpha k_{ro}(S_o^\alpha)}{\mu_o} \text{grad} P^\alpha, \quad \vec{U}_w^\alpha = -\frac{k^\alpha k_{rw}(S_w^\alpha)}{\mu_w} \text{grad} P^\alpha. \quad (4)$$

$$P^m|_{t=0} = P_0, \quad P^f(0;0) = P_b, \quad \left. \frac{\partial P^f}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial P^f}{\partial x} \right|_{x=l} = 0, \quad \left. \frac{\partial P^f}{\partial y} \right|_{y=0} = \left. \frac{\partial P^f}{\partial y} \right|_{y=l} = 0. \quad (5)$$

Расчетная сетка



1÷16 - нумерация узлов макросетки

1÷4 - нумерация узлов микросетки

○ обозначение пересечения потоковых линий

Потоковые контуры:

Для узла 1 - abcdef,

Для узла 2 - cghijd,

Для узла 3 - ihklmn,

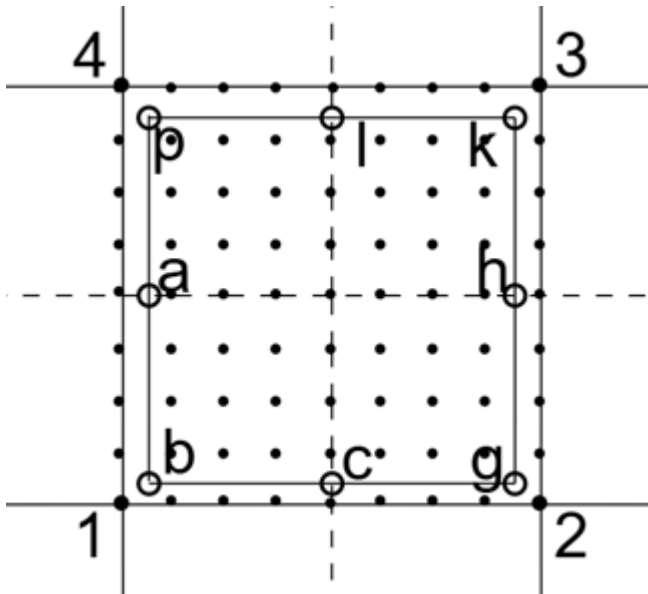
Для узла 4 - lpaqfm.

Символьный метод прогонки

Балансное соотношение (из классической прогонки) $A_i \bar{u}_{i-1} - C_i \bar{u}_i + B_i \bar{u}_{i+1} = -\bar{F}_i, \quad i = \overline{1, N-1}.$

$\bar{u}_i, i = 0, \dots, N$ – сеточная функция

Полиномиальное представление сеточной функции: $\bar{u}_i = c_{0i}^u + c_{1i}^u \pi_1 + c_{2i}^u \pi_2 + c_{3i}^u \pi_3 + c_{4i}^u \pi_4$



$\pi_1, \pi_2, \pi_3, \pi_4$ – давление в узлах 1-4

$\bar{\beta}_i = c_{0i}^\beta + \sum_{n=1}^4 c_{ni}^\beta \pi_n$ – прогоночный коэффициент

$\bar{F}_i = c_{0i}^F + \sum_{n=1}^4 c_{ni}^F \pi_n$ – правая часть балансного соотношения

$$\alpha_{i+1} = \frac{B_i}{C_i - \alpha_i A_i}, \quad \bar{\beta}_{i+1} = \frac{A_i \bar{\beta}_i + \bar{F}_i}{C_i - \alpha_i A_i}, \quad i = 1, \dots, N-1.$$

Символьный метод прогонки

Итерации на макросетке (внешние): $\bar{u}_{ik}^{s+1} = \bar{u}_{ik}^s + \delta \bar{u}_{ik}^s$.

Невязка на внешней итерации: $F(u_{ik}^s, u_{i-1k}^s, u_{i+1k}^s, u_{ik-1}^s, u_{ik+1}^s) = F_{ik}^s$.

Прогоночные формулы для балансных соотношений (после линеаризации):

$$D_{ik} \delta u_{ik}^s + (-\tau A_{ik}^x \delta u_{i-1k}^s + \tau C_{ik}^x \delta u_{ik}^s - \tau B_{ik}^x \delta u_{i+1k}^s) + (-\tau A_{ik}^y \delta u_{ik-1}^s + \tau C_{ik}^y \delta u_{ik}^s - \tau B_{ik}^y \delta u_{ik+1}^s) = 0 - \tau F_{ik}^s.$$

ИЛИ

$$D_{ik} v_{ik} + (-\tau A_{ik}^x v_{i-1k} + \tau C_{ik}^x v_{ik} - \tau B_{ik}^x v_{i+1k}) + (-\tau A_{ik}^y v_{ik-1} + \tau C_{ik}^y v_{ik} - \tau B_{ik}^y v_{ik+1}) = 0 - \tau F_{ik}^s,$$

где $v = \delta u^s$

«Международная научная конференция «Суперкомпьютерные дни в России». 29 – 30 сентября 2025г., г. Москва, Россия.

Научно-образовательная социальная школа НОСш_АЛМА-Уфа irekmars@mail.ru, +7 (917) 340-50-22

Символьный метод прогонки

Итерации на микросетке (внутренние) $\bar{v}^{r+1} = \bar{v}^r + \delta \bar{v}^{r+1}$.

Здесь $\bar{v} = c_0^v + \sum_{n=1}^4 c_n^v \pi_n$

Невязка на внутренних итерациях:

$$G_{ik} = D_{ik} v_{ik} + (-\tau A_{ik}^x v_{i-1k} + \tau C_{ik}^x v_{ik} - \tau B_{ik}^x v_{i+1k}) + (-\tau A_{ik}^y v_{ik-1} + \tau C_{ik}^y v_{ik} - \tau B_{ik}^y v_{ik+1}) + \tau F_{ik}^s = 0.$$

Метод переменных направлений на микросетке:

$$\text{По } O_x: \frac{\delta \bar{v}_{ik}^{r+1}}{\tau^r} + D_{ik} \bar{v}_{ik}^{r+1} + (-\tau A_{ik}^x \delta \bar{v}_{i-1k}^{r+1} + \tau C_{ik}^x \delta \bar{v}_{ik}^{r+1} - \tau B_{ik}^x \delta \bar{v}_{i+1k}^{r+1}) = 0 - \bar{G}_{ik}^r.$$

$$\text{По } O_y: \frac{\delta \bar{v}_{ik}^{r+2}}{\tau^{r+1}} + D_{ik} \bar{v}_{ik}^{r+2} + (-\tau A_{ik}^y \bar{v}_{ik-1}^{r+2} + \tau C_{ik}^y \bar{v}_{ik}^{r+2} - \tau B_{ik}^y \bar{v}_{ik+1}^{r+2}) = 0 - \bar{G}_{ik}^{r+1}.$$

τ^r — итерационный параметр

«Международная научная конференция «Суперкомпьютерные дни в России». 29 – 30 сентября 2025г., г. Москва, Россия.

Научно-образовательная социальная школа НОШ_АЛМА-Уфа irekmars@mail.ru, +7 (917) 340-50-22

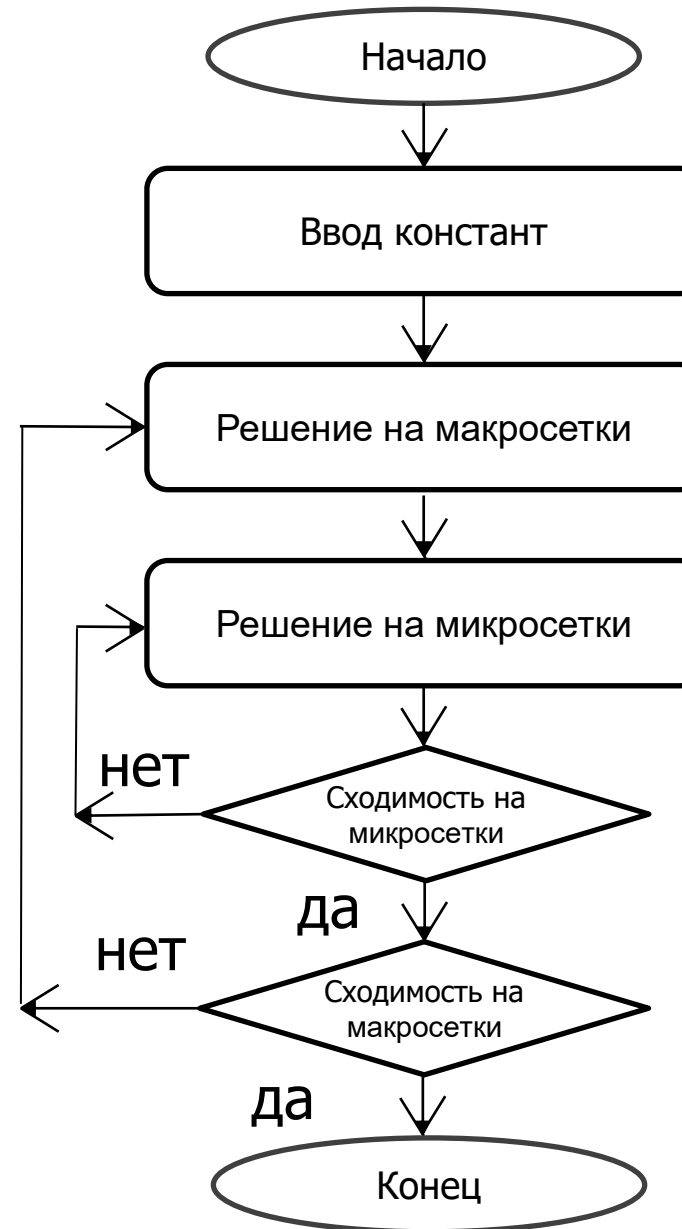
Программная реализация

К-100*	CPU Intel Xeon X5670 2,93 GHz	
	на узле	всего
Процессорных ядер	12	768
Память RAM, ГБайт	96	6144

- Вводится равномерная сетка по пространственному направлению и по времени
- Для реализации параллельного алгоритма был разработан код на языке С с использованием стандарта MPI. Многопоточность была обеспечена путем размещения дополнительных MPI-процессов внутри расчетных узлов кластера.
- Значения полиномиальных коэффициентов в узлах микросетки вычисляются точно и никак не зависят от значений сеточной функции в узлах макросетки, это свойство алгоритма символьной прогонки можно использовать при распараллеливании программного кода

*Центр коллективного пользования ИПМ им. М.В. Келдыша РАН
<http://ckp.kiam.ru>

Алгоритм расчета



$$\frac{\delta \bar{v}_{ik}^{r+1}}{\tau^r} < \varepsilon_{acc}.$$

$$|\delta P^m| < \varepsilon_1 |P^{ms}| + \varepsilon_2,$$

$$|\delta P^f| < \varepsilon_1 |P^{fs}| + \varepsilon_2,$$

Разработка отечественных информационно-вычислительных аналитических систем

- банк больших данных, программные комплексы для высокопроизводительных вычислительных систем, суперкомпьютерные центры коллективного пользования

(ИБАС)



Выводы и тенденции.

1. Эффективное образование можно вести только решая крупные научно-технические производственные задачи. В том числе и суперкомпьютерное образование.

2. Сложные задачи решаются только на основе междисциплинарного и межрегионального разделения труда. Укрепление, восстановление и создание новых совместных школ

3. Любое компьютерное образование, особенно суперкомпьютерное образование требуют огромный системный анализ объекта и процесса приложения с глубокими знаниями теоретических основ физики, химии, биологии, информационных технологий, анализа больших данных, вычислительной математики, классических алгоритмов

4. В процентном соотношении разработка и реализация параллельных технологий, требуют не более 10 %.

5. Серьезные практические задачи с использованием высокопроизводительных вычислений технически грамотно решаются сегодня только в центрах коллективного пользования (ЦКП)

Нет необходимости повсеместно организовать глубокое суперкомпьютерное образование со сложными программами, компетенциями

Нельзя разбрасываться кадровыми и техническими ресурсами

Суперкомпьютерное образование должно цементироваться вокруг центров коллективного пользования (ЦКП). Нет необходимости покупать суперкомпьютеры каждому университету и каждой организации

Истинное суперкомпьютерное образование это не просто объяснение параллельного алгоритма, а всестороннее, детализированное знание внутреннего параллелизма исследуемого объекта и процесса.

Самый востребованный специалист – расщепление по физико-химическим процессам

Основой суперкомпьютерного образования является полное, пост вузовское глубокое образование классических предметов – физики, химии, биологии, математики и информационных технологий.

Список значимых публикаций ([Web of Science](#)) за 2022 - 2025 г.г.

1. Barkalov, K.; **Gubaydullin, I.**; Kozinov, E.; Lebedev, I.; **Faskhutdinova, R.**; **Faskhutdinov, A.**; **Enikeeva, L.** On Solving the Problem of Finding Kinetic Parameters of Catalytic Isomerization of the Pentane-Hexane Fraction Using a Parallel Global Search Algorithm // Mathematics 2022, 10, 3665. <https://doi.org/10.3390/math10193665>. **(WOS, Q1).** **(Нижний Новгород – ННГУ им. Н. И. Лобачевского, Уфа)**

2. Sakharov, M.; **Koledina, K.**; **Gubaydullin, I.**; Karpenko, A. Studying the Efficiency of Parallelization in Optimal Control of Multistage Chemical Reactions // Mathematics 2022, 10, 3589. <https://doi.org/10.3390/math10193589>. **(WOS, Q1).** **(Москва – МГТУ им. Н.Э Баумана, Уфа)**

3. Yazovtseva, O.S., Gubaydullin, I.M., Peskova, E.E., Sukharev, L.A., Zagoruiko, A.N. Computer Simulation of Coke Sediments Burning from the Whole Cylindrical Catalyst Grain // Mathematics 2023, 11, 669. <https://doi.org/10.3390/math11030669> **(WOS, Q1).** **(Москва - В.А. Математический институт им. В.А.Стеклова РАН, Новосибирск–ИК им. Г.К. Борескова СО РАН, Саранск – МГУ Н.П. Огарева)**

4. **Sergey Koledin, Kamila Koledina, Irek Gubaydullin** Multiobjective Optimization of a Metal Complex Catalytic Reaction Based on a Detailed Kinetic Model with Parallelization of Calculations // Mathematics 2023, 11(9), 2051; <https://doi.org/10.3390/math11092051>, Q1, <https://www.mdpi.com/2227-7390/11/9/2051> **(WOS, Q1).** **(Уфа).**

5. Yuliya O. Bobreneva, Yury A. Poveshchenko, Viktoriia O. Podryga, Sergey V. Polyakov, Ravil M. Uzyanbaev, Parvin I. Rahimly, Ainur A. Mazitov 1 and Irek M. Gubaydullin. One Approach to Numerical Modeling of the Heat and Mass Transfers of Two-Phase Fluids in Fractured-Porous Reservoirs // Mathematics. 2023. Т. 11. № 3. С. 669. **(WOS, Q1).** **(Москва – ИПМ им М. В. Келдыша РАН, Уфа)**

«Международная научная конференция «Суперкомпьютерные дни в России». 29 – 30 сентября 2025г., г. Москва, Россия.

Научно-образовательная социальная школа НОШ_АЛМА-Уфа irekmars@mail.ru, +7 (917) 340-50-22

Список значимых публикаций (*Web of Science*) за 2022 - 2025 г.г.

6.. Sakharov, M., Koledina, K., Gubaydullin, I., Karpenko, A.. Parallel memetic algorithm for optimal control of multi-stage catalytic reactions. **Optimization Letters** (2023). <https://doi.org/10.1007/s11590-023-01971-4> . Published: 31 January 2023. (WOS, Q2). (Уфа, МГТУ им. Н.Э. Баумана – Москва)

7. Akhmetzianova L.U., Davletkulov T.M., Sakhabutdinova A.R., Chemeris A.V., Gubaydullin I.M., Garafutdinov R.R. Lamprimers iq: new primer design software for loop-mediated isothermal amplification (LAMP) // **Analytical Biochemistry**. – 2024. – 684. – С. 115376. DOI: 10.1016/j.ab.2023.115376. (Web of Science-Q2, Scopus-Q1, БС-2)

8. Akhmetzianova, L.U.;Mikhaylenko, C.I.; Chemeris, D.A.;Khairitdinov, V.D.; Sakhabutdinova,A.R.; Gubaydullin, I.M.; Garafutdinov, R.R.; Chemeris, A.V. Modeling a Standard Loop-Mediated Isothermal Amplification Reaction and Its Modification Involving Additional Inner Primers. **Biomolecules** 2025, 15, 0. [https://doi.org/ 10.3390/biom15050000](https://doi.org/10.3390/biom15050000). (Web of Science-Q1, Scopus-Q1, БС-1)



С 2011 по 2025 гг. Защищены **10** кандидатских и **2** докторские диссертации. **1** докторская в стадии защиты.

Реализовано **26** грантов РФФИ и РНФ, около **60** публикаций WOS и SCOPUS (из них Q1 и Q2 - **14** штук). Получены около **50** свидетельств государственной регистрации программ для ЭВМ

«Международная научная конференция «Суперкомпьютерные дни в России». 29 – 30 сентября 2025г., г. Москва, Россия.

Научно-образовательная социальная школа НОШ_АЛМА-Уфа irekmars@mail.ru, +7 (917) 340-50-22

Выездные семинары – совместные посещения театров !!!

34



Имеет очень колоссальное
значение для
суперкомпьютерного
образования !!!



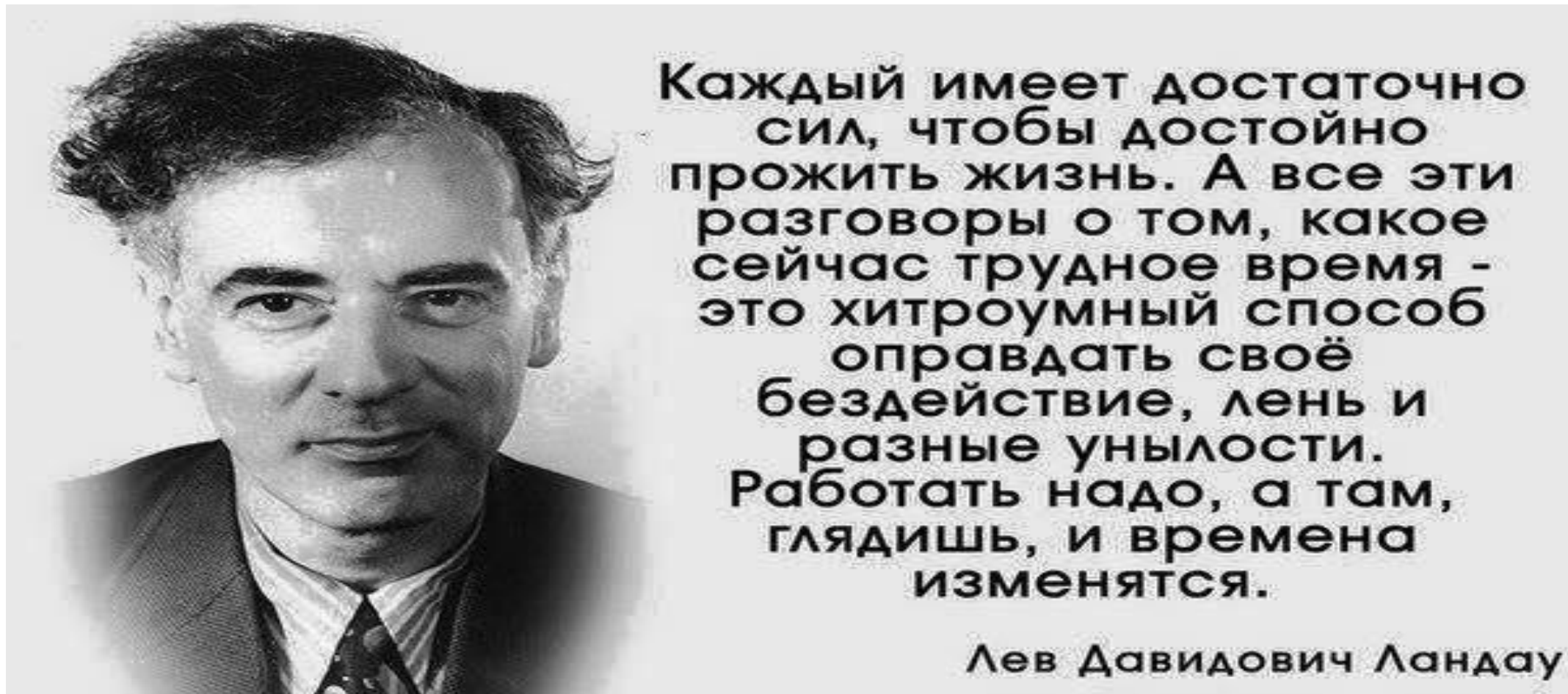
Удерживает молодежь в науке !!!

«Международная научная конференция «Суперкомпьютерные дни в России». 29 – 30 сентября 2025г., г. Москва, Россия.

Научно-образовательная социальная школа НОШ_АЛМА-Уфа irekmars@mail.ru, +7 (917) 340-50-22



Зур РАХМАТ - Огромное СПАСИБО!



«Международная научная конференция «Суперкомпьютерные дни в России». 29 – 30 сентября 2025г., г. Москва, Россия.
Научно-образовательная социальная школа НОСш_АЛМА-Уфа irekmars@mail.ru, +7 (917) 340-50-22