

Школа-семинар
«Суперкомпьютеры в научных исследованиях: горизонты атомистического
моделирования и эффективного суперкомпьютерного ко-дизайна»

Программа лекций и докладов

26 ИЮЛЯ, СРЕДА

9-45 - Открытие Школы-семинара

10-00 - А.С.Семенов (АО «НИЦЭВТ»)

Ко-дизайн суперкомпьютерных приложений, системного программного обеспечения и архитектуры сети Ангара

10-30 - М.В.Горшенин (АО «МЦСТ»)

Обзор текущего состояния вычислительной платформы Эльбрус

11-00 - А.В.Мурашов (ОАО «Т-Платформы»)

Отечественные аппаратные продукты для НРС рынка, особенности их настройки и примеры использования

11-30 - В.С.Вечер (ОИВТ РАН)

Оптимизация энергопотребления при расчетах задач классической и квантовой молекулярной динамики

11-50 - В.П.Никольский (ВШЭ)

Процессоры с архитектурой ARM для высокопроизводительных вычислений

12-10 - М.Р.Халилов (ВШЭ)

Оптимизация работы MPI-программ для кластеров, использующих интерконнект Ангара

12-30 - ОБЕД

13-30 - В.В.Стегайлов (ОИВТ РАН/ВШЭ)

Гибридный суперкомпьютер на базе сети Ангара для задач вычислительного материаловедения

14-00 - А.В.Янилкин (ВНИИА)

Квантово-механические расчеты в компьютерном материаловедении

14-30 - П.Р.Левашов (ОИВТ РАН)

Суперкомпьютерное моделирование воздействия ультракоротких лазерных импульсов на вещество: достижения и проблемы

15-00 - А.А.Рыкунов (РФЯЦ-ВНИИТФ)

Уравнение состояния CaCO_3 при высоких давлениях и температурах

15-30 - М.Г.Медведев (ИНЭОС РАН)

Использование суперкомпьютеров для надёжного квантовохимического моделирования

27 ИЮЛЯ, ЧЕТВЕРГ

10-00 - Р.Г.Ефремов (ИБХ РАН/ВШЭ)

Структурно-функциональная адаптация белков к условиям мембранного окружения

10-30 - А.А.Полянский (ИБХ РАН)

Расчеты конформационной энтропии биополимеров на основании данных молекулярной динамики

11-00 - А.В.Чертович (МГУ)

Статистическая физика полимеров

11-30 - К.В.Смирнов (ВШЭ)

Анализ взаимодействий трансмембранных пептидов с липидным окружением методом молекулярной динамики

11-50 - М.А.Логунов (МФТИ)

Образование нанопор при деформации полиэтилена с/без углеродных нанотрубок

12-10 - Е.С.Длиннова (ВШЭ)

Статистический анализ погрешностей конечно-разностной схемы в методе молекулярной динамики

12-30 - ОБЕД

13-30 - М.С.Егорова (ВНИИА)

Динамическая декомпозиция по Вороному для сбалансированного параллельного моделирования движения веществ в экстремальных состояниях методами частиц

14-00 - И.М.Саитов (ВШЭ)

Фазовый переход флюид-флюид в разогретом плотном водороде

14-30 - А.В.Карavaев (РФЯЦ-ВНИИТФ)

МД моделирование влияния самооблучения на динамику дислокаций в δ -Pu

15-00 - Г.С.Смирнов (ОИВТ РАН/ВШЭ)

Псевдопотенциалы для первопринципных расчетов соединений урана

15-30 - Закрытие Школы-семинара