

Научно-практическая конференция «Вычисления с использованием
графических процессоров в биологии и биоинформатике»
24-25 мая 2010 г., Московский государственный университет
имени М.В.Ломоносова

ПРОГРАММА КОНФЕРЕНЦИИ
(предварительная)

24 мая 2010 г., Биологический факультет МГУ, аудит. М-1

09-30 Открытие. Вступительное слово.

академик М.П. Кирпичников, декан Биологического факультета МГУ
академик А.Р. Хохлов, проректор МГУ
профессор А.В. Старовойтов, директор ФГУ ЦИТиС Минобрнауки

СЕССИЯ I – ТЕХНОЛОГИЯ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ МЕТОДЫ

Председатели: А.Р.Хохлов, А.В.Старовойтов

10.00 – 10.20 Тенденции развития архитектуры масштабируемых суперЭВМ (1982-2010г.г.). Галушкин А.И. (ФГНУ ЦИТиС, Интер-ЭВМ, г. Москва)

10.20-10.40 UGENE – Интегрирование решения на GPU задач вычислительной биологии. Ефремов И.Е., инновационное предприятие UNIPRO, г. Новосибирск

10.40-11.00 Гибридные вычислительные системы и их применение для высокопроизводительных вычислений в области биологии
Уральский Ю., Джораев А., компания NVIDIA, г. Москва.

11.00-11.20 Задача клеточного автомата.

Перепелкин Е., НОЦ «Параллельные вычисления», ОИЯИ, г. Дубна

11.20-11.40 Эффективное перемножение разреженных матриц на графических процессорах. Аветисян А.И., Институт системного программирования РАН, г. Москва

11.40-12.00 –кофе-брейк

Председатели: А.И.Галушкин, В.Л.Голо

12.00-12.20 Использование технологии nVidia CUDA для вычисления меры многочастичной квантовой запутанности
Чернявский А., ВМК МГУ

12.20-12.40 Сверхплотные блейд-решения на архитектуре NVIDIA Fermi. Ткачев Д.Ф., компания Т-Платформы, г.Москва

12.40-13.00 Компьютерный дизайн лекарственных веществ. Зефиоров Н.С., Палюлин В.А. (Химфак МГУ)

13.00-13.20 Аналитические методы и нейросетевые технологии в решении задач по программе «Протеом человека». Галушкин А.И. (ФГНУ ЦИТиС, Интер-ЭВМ, г. Москва)

13.20-13.40 О переработке пакетов программ обработки данных по сборке генома по методике «шотган» для портирования на CUDA. Алексеев Д. (НИИ ФХМ, г. Москва)

13.40 Начало стендовой сессии в фойе аудит. М-1. Стендовая сессия проводится непрерывно до конца конференции. Участникам конференции предоставляются стенды стандартного размера. Просьба иметь двусторонний скотч для крепления к стенду.

14.30-15.30 Перерыв

24 мая 2010 г. , Биологический факультет МГУ, аудит. 557

СЕССИЯ II – GPU В ПОСТГЕНОМНЫХ ТЕХНОЛОГИЯХ

Председатели: Р.Г.Ефремов, Г.Ю.Ризниченко

15.30-15.50 Название доклада уточняется
Чеканов Н.Н., Прохорчук Е.Б., Скрябин Г.К., Центр "Биоинженерия" РАН, г. Москва

15.50-16.10 Выявление и анализ функциональных сигналов в регуляторных районах генов микро-РНК млекопитающих.
Вишневский О.В. ИЦиГ СО РАН, г. Новосибирск.

16.10-16.30 Поиск регулярных последовательностей в промоторах из геномов различных групп организмов с использованием критерия серий.
Шеленков А.А., Коротков Е.В. Центр «Биоинженерия» РАН, г. Москва

16.30-16.50 Информационно-аналитическое сопровождение проекта «Протеом человека» с использованием персональных супер-ЭВМ. Старовойтов А.В., Галушкин А.И., Лисица А.В., Арчаков А.И. (ИБМХ РАМН, г. Москва)

16.50-17.10 Комплексные модели регуляции электронных потоков в субклеточных системах.
Рубин А.Б., Красильников П.М., Ризниченко Г.Ю. кафедра биофизики Биофака МГУ

17.10-17.30 3D визуализация изображений, получаемых с электронного микроскопа.
Игнатенко А.В. ВМК МГУ

18.00 фуршет (корпус А, кафе)

СЕССИЯ III – МОДЕЛИРОВАНИЕ

Председатели: К.В.Шайтан, А.В.Чертович

09.30-09.50 Адаптация потенциала погруженного атома для молекулярно динамического моделирования конденсированных веществ на GPU.

Быстрый Р.Г., Казённов А.М., Морозов И.В., Писарев В.В., Стегайлов В.В.
МФТИ, ОИВТ РАН, г. Москва

09.50-10.10 Исследование моделей жидкокристаллических фаз ДНК с помощью компьютерного моделирования методом Монте-Карло. В.Н.Блинов, В.Л.Голо, А.А. Киреева, К.В.Шайтан, МГУ имени М.В.Ломоносова

10.10-10.30 Эффективная компьютерная программа для молекулярно динамического моделирования молекулярных систем на графических процессорах с визуализацией. Засецкий А.Ю. Физический факультет МГУ.

10.30-10.50 Разработка гибридной высокопроизводительной вычислительной платформы для прикладного компьютерного моделирования задач взаимодействия макромолекул. Морозов И.И., Коваленко И.Б, Барсегов В.А. , Жмуров А.А. , Казенов А.М. , Трифонов С.В. , Холодов Я.А. . Кафедра вычислительной математики, Московский физико-технический институт, Department of Chemistry, University of Massachusetts, Биологический факультет МГУ

10.50-11.10 Применение графических процессоров для ускорения расчетов при решении сложных задач математической физики. Коробкова С.В. (компания ВОКОРД), Скрибцов П.В. (ООО Павлин Технологии)

11.10-11.30 Новые перспективы для молекулярного моделирования методом Монте Карло при использовании GPU Nvidia

В.С. Дуняшев, А.К. Лященко, В.Л. Дуняшев ИОНХ РАН

11.30-12.00 кофе-брейк

Председатели: Н.К.Балабаев, М.Ю.Антонов

12.00-12.15 Приглашенный гость.

Andy Keane, Генеральный директор подразделения Tesla, NVIDIA.

12.15-12.35 Аппаратно-программная платформа CUBLIC для моделирования биологических систем. А.А. Емельянов, А.Б. Терентьев, (ООО НИУ СВТ)

12.35-12.55 Реализация метода Монте-Карло с использованием графических процессоров для моделирования распространения излучения применительно к задачам биомедицинской диагностики. М.Ю. Кириллин, И.И. Фикс. (ИПФ РАН)

12.55-13.15 Качественная визуализация на основе шейдеров. Гаврилов Н.И., Турлапов В.Е. (ННГУ)

13.15-13.35 GLSL и OpenCL- сравнительный опыт вычислений. Боголепов Д.К., Турлапов В.Е. (ННГУ)

13.35-13.55 Моделирование пространственно_временных паттернов активности нейронных систем с динамической архитектурой. Д.Ф. Иудин, В.Б. Казанцев, И.В. Мухин, А.Б. Терентьев (ННГУ, ИПФ РАН, НГМА)

13.55-14.10 Применение параллельных вычислений в моделировании адсорбции фармацевтически активных веществ пористыми матрицами.
Колнооченко А.В., РХТУ им.Д.И.Менделеева

14.10-15.00 перерыв

25 мая 2010 г. , Биологический факультет МГУ, аудит. М-1

Председатели: К.В.Шайтан, В.Л.Голо

15.00 – 17.30 КРУГЛЫЙ СТОЛ

15.00-15.15 Опыт организации сетевых экспертных сообществ

Райков А.Н. д.т.н., действительный государственный советник Российской Федерации

Участники совещания могут выступить с краткими (до 5 мин.) сообщениями, касающимися перспектив освоения технологии CUDA в России, конкурентоспособности GPU в сравнении с кластерами и др. Формирование открытой экспертной группы для свободного обмена опытом применения персональных суперкомпьютеров.

На данный момент имеются заявки по следующим темам:

Краткие сообщения на круглом столе:

- 1) Опыт разработки массивно-параллельных версий системы data-mining PolyAnalyst для Tesla GPU кластерных архитектур (Блохин В., Киселев М., компании «АналитикПроект» и «МегапьютерИнтеллидженс»)
- 2) О переработке системы TextAnalyst на платформу NVIDIA (Харламов А., Воронков И., НТЦ «Микросистемы»/ЦИТиС)
- 3) Платформа создания комплексов нечетких моделей для интеллектуальной поддержки принятия решений с использованием технологии NVIDIA (Борисов В.В., Смоленский филиал МЭИ)
- 4) Виртуальные нейросетевые процессоры – метод кросс-платформенного ускорения расчета нейросетевых задач на современных многоядерных процессорах. (Скрибцов П., компания «Павлин-Технологии»)

Вопросы для обсуждения на круглом столе:

- 1) Программа «Университетский кластер»: интеграция образования, науки и индустрии (Аветисян А.И., ИСП РАН)

- 2) Интеграция деятельности ученых и экспертов с использованием технологий семантического анализа: роль графических процессоров" (Кудрявцев А.М., технологическая компания "КуБ")
- 3) О создании экспертной группы для развития применений графпроцессоров для решения научных задач
- 4) О целесообразности тематического конкурса РФФИ «Применение графических процессоров для молекулярной биологии и биоинформатики»
- 5) Обсуждение стендовой сессии

17.30 –Заккрытие конференции, принятие решения

18.00 фуршет (корпус А, кафе)

СТЕНДОВАЯ СЕССИЯ

Начало стендовой сессии 24 мая в 13.40 в фойе аудит. М-1. Стендовая сессия проводится непрерывно до конца конференции. Участникам конференции предоставляются стенды стандартного размера. Просьба иметь двусторонний скотч для крепления к стенду.

Молекулярное моделирование фосфолипидных наночастиц с использованием гетерогенных вычислительных систем

Чернобровкин А.Л., Холина В.А., Мирошниченко Ю.В., Лисица А.В. Институт биомедицинской химии имени В.Н.Ореховича РАН, ООО «КуБ»

GPU-алгоритм восстановления поверхности из облака точек

Козлов Д. А., Турлапов В. Е. Нижегородский Государственный Университет им. Н.И. Лобачевского

Нейросетевые технологии и их роль в программе «Протеом человека»

Галушкин А.И. ФГНУ Центр информационных технологий и систем органов исполнительной власти (ФГНУ ЦИТус), Международный центр по информатике и электронике (ИнтерЭВМ), neurocomputer@yandex.ru

Платформа создания комплексов нечетких моделей для интеллектуальной поддержки принятия решений с использованием технологий NVIDIA

В.В. Борисов¹, М.М.Зернов², А.Г. Забурдаев³ vborisov@etna-it.ru, zmmioml@yandex.ru, azaburdaev@etna-it.ru

Опыт разработки массивно-параллельных версий системы data mining PolyAnalyst для TESLA GPU и кластерных архитектур.

Блохин В., Аналитик Проект, vblokhin@ap.ru Киселев М., Megaputer Intelligence, mkiselev@megaputer.ru

Вопросы построения персональных суперкомпьютерных конфигураций на базе графических процессоров

Аляутдинов М.А.(ИНТЕРЭВМ), Воронков И.М. (ИНТЕРЭВМ)

Применение графических процессоров для 2D и 3D распознавания лиц.

Коробкова С.В. (компания ВОКОРД), Манолов А.И. (компания ВОКОРД)

paraslonic@gmail.com

Пакеты программ обработки изображений для вычислительных систем на базе процессоров NVIDIA

Аляутдинов М.А. (ИнтерЭВМ), Коробкова С.В. (компания ВОКОРД), Нгуен В.Х. (ИнтерЭВМ)

Виртуальные нейросетевые процессоры – метод кроссплатформенного ускорения расчета нейросетевых задач на современных многоядерных процессорах.

Долгополов А.В., Скрибцов П.В. ООО «ПАВЛИН Технологии»

Универсальный алгоритм распознавания объектов на фото и видео с применением аппаратного ускорения вычислений на современных многоядерных процессорах.

Скрибцов П.В., Долгополов А.В. ООО «ПАВЛИН Технологии», <http://www.pawlin.ru>

О построении моделей процессов и явлений на вычислительных системах с использованием графических процессоров NVIDIA

Пантюхин Д.В.¹, Аведьян Э.Д.²¹ Международный центр по информатике и электронике (ИнтерЭВМ), dim_beavis@mail.ru ² Центр информационных технологий и систем органов исполнительной власти (ЦИТиС), avedian@mail.ru

О переработке системы TextAnalyst на платформу NVIDIA

Воронков И.М., А.А. Харламов МФТИ(ГУ) iliav_scn@mail.ru, НПИЦ «Микросистемы» kharlamov@analyst.ru

Эффективное перемножение разреженных матриц на графических процессорах.

Аветисян А.И. Институт системного программирования РАН

Моделирование деления клеток.

Железняков А.О. Физфак МГУ

Опыт применения графических вычислений в задачах молекулярной биофизики

Кондратьев М.С., Кабанов А.В., Самченко А.А., Хечинашвили Н.Н., Комаров В.М.

Институт биофизики клетки РАН, ma-ko@bk.ru

Отыскание глобального минимума функции потенциальной энергии атомного кластера Морса.

Деянов Р.З. МГУ имени М.В.Ломоносова, факультет ВМК deyanov@math-lab.ru

Возможности высокопроизводительной вычислительной инфраструктуры МФТИ для решения прикладных задач численного моделирования

А.М. Казенов¹, А.Е. Алексеенко¹, И.И. Морозов¹, Я.А. Холодов¹.

¹ Научно-образовательный центр по высокопроизводительным вычислениям, Московский физико-технический институт kazenov@gmail.com

Применение параллельных вычислений в моделировании адсорбции фармацевтически активных веществ пористыми матрицами.

Колнооченко А.В. РХТУ им.Д.И.Менделеева

Исследование проницаемости модельных мембранных систем методом молекулярной динамики.

М.Ю. Антонов, К.В. Шайтан.

Кафедра биоинженерии Биологического факультета МГУ имени М.В.Ломоносова
mikhail@moldyn.org

Моделирование пространственно_временных паттернов активности нейрональных систем с динамической архитектурой.

Д.Ф. Иудин, В.Б. Казанцев, И.В. Мухин, А.Б. Терентьев ННГУ, ИПФ РАН, НГМА.

Новые перспективы для молекулярного моделирования методом Монте Карло при использовании GPU Nvidia

В.С. Дуняшев, А.К. Лященко, В.Л. Дуняшев ИОНХ РАН.

Исследование спектральных свойств бактериородопсина и его мутантов гибридными методами квантовой химии и молекулярной динамики (QM/MM).

Орехов Ф.С., Шайтан А.К., Соколова О.С., Шайтан К.В.

МГУ имени М.В.Ломоносова, биологический ф-т, Москва, f.orekhov@gmail.com