

# Работна среща и официално откриване на изчислителен комплекс „МАДАРА”

<http://madara.orgchm.bas.bg>



8 Юни 2010г., Институт по органична химия с Център по фитохимия – БАН

## ПРОГРАМА

12:30-13:00	<b>Регистрация</b>	
13:00-13:15	<b>Откриване на работната среща</b>	ст.н.с. I ст. дхн Петко Иванов - ИОХЦФ-БАН
13:15-13:30	<b>Теоретични модели в неорганичното материалознание</b>	ст.н.с. II ст. д-р Наташа Трендафилова – ИОНХ - БАН
13:30-13:45	<b>Числено моделиране на нестабилности на повърхнини: модели на групиране на стъпала</b>	ст.н.с. II ст. д-р Веселин Тончев – ИФХ -БАН
13:45-14:00	<b>Молекулното моделиране – средство или цел</b>	доцент д-р Аля Таджер - Софийски университет „Климент Охридски”
14:00-14:15	<b>Моделиране на антиоксидантна активност</b>	доцент д-р Живко Велков - Югозападен университет „Неофит Рилски”
14:15-14:30	<b>Изясняване на структурата и свойствата на субнано размерни каталитични системи чрез изчислително моделиране</b>	проф. дхн Георги Вайсилов - Софийски университет „Климент Охридски”
14:30-14:40	<b>Видове технологични платформи за „Супер компютри” от Fujitsu. Референтни проекти</b>	Вяра Чангърова – старши мениджър клиенти, Fujitsu
14:40-15:00	<b>Представяне на технологичната платформа на проекта „Мадара” – структура и компоненти на изчислителната инфраструктура</b>	Николай Павлов – консултант технологични решения СТЕМО, ООД Тодор Тодоров – консултант технологични решения, Fujitsu
15:00-15:15	<b>Приложение на TDDFT при периодични системи</b>	ст.н.с. II ст. д-р Валентин Алексиев – ИК - БАН
15:15-15:30	<b>Компютърният експеримент като основен подход в проектирането на нови материали и нанотехнологии</b>	ст.н.с. I ст. дхн Андрей Милчев – ИФХ -БАН
15:30-16:00	<b>Кафе пауза</b>	
16:00-16:15	<b>Българската ГРИД инфраструктура</b>	ст.н.с. II ст. д-р Емануил Атанасов – ИПОИ - БАН
16:15-16:30	<b>e-NMR: ЯМР изчислителна инфраструктура</b>	ст.н.с. II ст. д-р Николай Василев – ИОХЦФ - БАН
16:30-16:50	<b>NetApp unified storage platforms for Grid and Cloud environments. Reference projects.</b>	Dr. Hans Lamprecht – Key Account Manager SEE
16:50–17:00	<b>Commodity базирани технологични платформи за „Супер компютри” от Fujitsu</b> - PRIMERGY BX900 - PRIMERGY CX100	Тодор Тодоров – консултант технологични решения Fujitsu
17:00-17:15	<b>Разпределена софтуерна система за обработка на данни и числени симулации на атмосферни процеси</b>	гл.ас. д-р Атанас Терзийски – Пловдивски университет „Паисий Хилендарски”
17:15-17:30	<b>Електрофилен афинитет: мярка за реактивоспособност при ароматното заместване</b>	проф. дхн Борис Гълъбов – Софийски университет „Климент Охридски”
17:30-17:45	<b>In silico изследвания на биологично активни съединения за целите на лекарствения дизайн и за оценка на екологичния риск</b>	ст.н.с. I ст. д-р Илза Пъжева – ЦЛБМИ - БАН
17:45-18:00	<b>Някои възможности на програмите GAUSSIAN09, NWCHEM, GAMESS за приложения в органичната химия</b>	ст.н.с. I ст. дхн Хозе Канети – ИОХЦФ -БАН
<b>18:00-18:30</b>	<b>Официално откриване на изчислителен комплекс „МАДАРА”</b>	ст.н.с. I ст. д-р Божидар Чорбанов - Директор на ИОХЦФ - БАН
18:30-19:30	<b>На чаша вино с „МАДАРА”</b>	

