



Поляченко Юрий

Позиция: Студент международной Суперкомпьютерной Академии

4 курс ЛФИ ФОПФ/ФПФЭ МФТИ, ОП ВФКСиЖС

☎ +7(903)531-34-25 | ✉ polyachenko.yua@phystech.edu | [polyachenkoya](#) | [polyachenkoya](#) | [polyachenkoya](#)

Обо мне

Меня зовут Поляченко Юрий, сейчас я окончил 3 курса бакалавриата ФОПФ МФТИ на образовательной программе «Выч. физика конд. сост. и живых систем». Я интересовался физическим моделированием и вычислениями с 10 класса. С тех пор я занимался N-body моделированием формирования спиральной структуры галактик из равномерного диска, а так же переносом нейтронов в кусочно-однородной среде (для MCNP).

В МФТИ под руководством Нормана Генри Эдгаровича я исследовал Леннард-Джонсовскую систему как с вычислительной так и с физической точек зрения. Я писал различные схемы распараллеливания Л-Дж на CPU (OpenMP, MPI) и на GPU (CUDA). С помощью пакета LAMMPS я исследовал микроскопически-коллективное поведение Л-Дж частиц вблизи кривой фазового равновесия. Работа докладывалась на международной конференции ELBRUS2020 и сейчас under review в PRL.

Текущая работа

Сейчас под руководством Стегайлова Владимира Владимировича я с использованием GROMACS занимаюсь in-silico воспроизведением эксперимента с кристаллическим белком. Задача является вычислительно сложной, т.к. необходимо исследовать взаимосвязь физических параметров, для чего необходимо делать расчеты по многомерным сеткам параметров, а система белок-вода может быть заметно неоднородной и к тому же содержать большое количество атомов. Данные еще набираются, но уже на текущем этапе 1 траектория может занимать до 30 Гб в формате xtc.

Так же на стажировке в EPFL в лаборатории LBM я работаю над проверкой применимости метода MaSIF-site для докинга белков в воде. Каждая траектория, содержащая 50,000 дампов и занимающая ~ 5 Гб в xtc, требует попарного анализа кадров, что создает вычислительно-сложную задачу.

Пост-обработка результатов в обоих проектах происходит с использованием python.

Академия

В связи с моими интересами и задачами, стоящими в моей текущей работе, я хочу пройти трек «Python для HPC». Я думаю, программа данного трека поможет мне эффективнее реализовывать обработку данных на python в моих текущих работах. К тому же, я планирую продолжать исследования в области вычислительной биофизики, а в этой области python является общепринятым стандартом как обработки, так и часто даже генерации данных, поэтому я считаю, что изучение HPC-стороны этого языка поможет мне в целом в профессиональном развитии.

С уважением, Поляченко Юрий