

Научная школа «Суперкомпьютерное моделирование сложных систем»

4

От редакторов выпуска. Облачные технологии для eScience и eEngineering: моделирование сложных систем

5

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ СЛОЖНЫХ ФИЗИЧЕСКИХ И ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

Суперкомпьютерное моделированиеnanoструктурных комплексов
с учетом нелокальности транспортных процессов

6

Маслов В. Г., Чивилихин С. А., Бухановский А. В., Свitenков А. И.

Высокопроизводительный программный комплекс моделирования конформационно-зависимых свойств белков
в задачах рационального дизайна лекарственных препаратов

12

**Спельников Д. М., Князев С. Н., Балахонцева М. А., Буздалов М. В.,
Порозов Ю. Б., Маслов В. Г., Бухановский А. В.**

Калужная А. В., Бухановский А. В.Методы и технологии распределенного вычислительного эксперимента
для обеспечения защиты Санкт-Петербурга от наводнений**Косухин С. С., Ковальчук С. В., Бухановский А. В.**Графическая инструментальная оболочка для создания виртуальных полигонов
моделирования сложных систем: применение в морских исследованиях и разработках**Безгодов А. А., Есин Д. В., Карсаков А. С., Нечаев Ю. И., Иванов С. В.****МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ В НАУКАХ ОБ ОБЩЕСТВЕ И ЧЕЛОВЕКЕ**Моделирование и оптимизация движения городского пассажирского транспорта
в среде облачных вычислений CLAVIRE**Иванов С. В., Князьков К. В., Чуров Т. Н., Духанов А. В., Бухановский А. В.**

Эвристические алгоритмы моделирования и оптимизации структуры неоднородных комплексных сетей

Каширин В. В., Иванов С. В., Бухановский А. В.

Метод моделирования бизнес-процессов в информационных системах на основе журналов событий

Ходырев И. А., Бухановский А. В.Технология распределенного сбора и обработки больших объемов данных из социальных медиа
Якушев А. В.Расчет динамики распространения ВИЧ на базе модели контактной эпидемиологической сети
в среде облачных вычислений CLAVIRE**Иванов С. В., Насонов Д. А.**Мобильный сервис поддержки принятия решений в экстремальных ситуациях
на основе облачных технологий второго поколения**Карбовский В. А., Богачева А. В., Иванов С. В.**Инструментальная оболочка для создания геоинформационных систем управления
урбанизированными территориями**Загарских А. С., Карсаков А. С., Иванов С. В., Бухановский А. В.****ИНФРАСТРУКТУРНОЕ И МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ
МОДЕЛИРОВАНИЯ ДИНАМИКИ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ В ОБЛАЧНЫХ СРЕДАХ**Технология построения проблемно-ориентированных сред для научных исследований
в рамках модели персонального облака**Чуров Т. Н., Насонов Д. А., Болгова Е. В.**Распределенное планирование процесса исполнения композитных приложений в иерархических облачных средах
Смирнов П. А., Бухановский А. В.Особенности планирования загрузки вычислительных ресурсов в облачных средах второго поколения
на основе модели отложенных вычислений во временных окнах**Боченина К. О., Духанов А. В.**Методы построения и использования моделей производительности облачных сервисов
Ковальчук С. В., Чиркин А. М., Князьков К. В.Интерактивная среда визуального анализа и интерпретации комплексных сетей
большого объема с учетом особенностей эмоционального состояния оператора**Ковальчук С. В., Безгодов А. А., Терехов Д. М., Бухановский А. В.**Программный инструментарий для распределенного мультиагентного моделирования сложных систем
Князьков К. В.Предметно-ориентированная технология хранения и обработки больших объемов данных
в облачной платформе CLAVIRE**Ковальчук С. В., Разумовский А. В., Спивак А. И.**Подход к быстрому внедрению программного обеспечения, полученного в рамках НИОКР,
в учебный процесс с применением платформы CLAVIRE**Духанов А. В.****Contents**

From Editors. Cloud computing for e-Science and e-Engineering tasks: complex systems simulation

SIMULATION OF COMPLEX PHYSICAL AND CHEMICAL SYSTEMS DYNAMICS

Supercomputer simulation of nanostructure complexes with account of nonlocal of transport processes

Maslov V. G., Chivilikhin S. A., Boukhanovsky A. V., Svitenskov A. I.

High-performance workspace for conformational modeling in rational drug design
***Spel'nikov D. M., Knyazev S. N., Balakhontseva M. A., Buzdalov M. V., Porozov Y. B.,
Maslov V. G., Bukhanovskiy A. V.***

16

Ensemble forecast technology for storm surges prediction in Saint-Petersburg
Kalyuzhnaya A. V., Boukhanovsky A. V.

21

Methods and technologies for distributed computational experiment for St. Petersburg flood protection
Kosukhin S. S., Kovalchuk S. V., Boukhanovsky A. V.

27

Graphic toolkit for virtual testbed creation: application for marine research and design
Bezgodov A. A., Esin D. V., Karsakov A. S., Nechaev Yu. I., Ivanov S. V.

34

SIMULATION OF COMPLEX SYSTEMS DYNAMICS IN SOCIAL SCIENCES

Simulation and optimization of the urban transport with Cloud Computing Platform CLAVIRE
Ivanov S. V., Knyazkov K. V., Tchurov T. N., Dukhanov A. V., Boukhanovsky A. V.

39

Heuristic algorithms for modeling and optimization of complex networks structures
Kashirin V. V., Ivanov S. V., Boukhanovsky A. V.

45

Business process modelling method based on event logs
Khodyrev I. A., Boukhanovsky A. V.

50

Technology for distributed crawling and analysis of big data from social media
Yakushev A. V.

55

Simulation of HIV population dynamics through complex network modelling within Cloud Computing Platform CLAVIRE
Ivanov S. V., Nasonov D. A.

61

Mobile decision support second-generation cloud technologies based service for emergency situations
Karbovskii V. A., Bogacheva A. V., Ivanov S. V.

66

Instrumental shell to create geoinformation management systems for urbanized areas
Zagarskikh A. S., Karsakov A. S., Ivanov S. V., Boukhanovsky A. V.

72

INFRASTRUCTURE AND METHODOLOGICAL FOUNDATION FOR SIMULATION OF COMPLEX SYSTEMS DYNAMICS USING CLOUD COMPUTING ENVIRONMENTS

Personal cloud technology for building scientific problem-oriented environment
Churov T. N., Nasonov D. A., Bolgova E. V.

77

Distributed scheduling for composite applications in hierarchical cloud environments
Smirnov P. A., Boukhanovsky A. V.

82

Characteristics of a computational resources load planning in 2nd generation cloud environment
using model of delayed computations in time windows

Bochenina K. O., Dukhanov A. V.

89

Methods for development and usage of cloud services performance models
Kovalchuk S. V., Chirkov A. M., Knyazkov K. V.

94

Interactive environment for visualization and analysis of large complex networks using affective state of the user
Kovalchuk S. V., Bezgodov A. A., Terekhov D. M., Boukhanovsky A. V.

100

Software development kit for modeling of multi-agent complex systems
Knyazkov K. V.

105

Domain-specific technology for big data storing and processing within cloud computing platform CLAVIRE
Kovalchuk S. V., Razumovskiy A. V., Spivak A. I.

109

The approach for rapid the scientific software to the learning process with the use of CLAVIRE platform
Dukhanov A. V.

116