## Sesja Sprawozdawcza Użytkowników KDM On-Line

| Chai<br>rma      | Sesja                  | Cza<br>Start | as<br>Koniec | lmię i Nazwisko   | Numer<br>Grantu | Afiliacja   | Temat Prezentacji   |
|------------------|------------------------|--------------|--------------|---|-----------------|---|---|
|                  | BIOLOGIA               | 09:00        | 09:20        | Profesor Grzegorz Chałasiński,<br>Dyrektor Marek Michalewicz, | Przewod         | V, ICM;<br>niczący Rady<br>owej ICM                     | Powitanie   |
|                  |                        | 09:20        | 09:50        | Krzysztof Rządca  | UV              | V, MIM  | Pan tu nie stał! Nauka, praktyka i zdrowy rozsądek w superkomputerowych systemach kolejkowych                           |
|                  |                        | 09:50        | 10:05        | Piotr Setny   | GA76-7          | UW, CENT  | Oddziaływanie peptydów fuzyjnych wirusa grypy z<br>błonami lipidowymi   |
|                  |                        | 10:05        | 10:20        | Stanisław Dunin-Horkawicz                                     | GA71-24         | UW, CENT  | Sequence-structure relationships in highly-regular proteins   |
|                  |                        | 10:20        | 10:35        | Anna Karnkowska   | G72-16          | UW,<br>Wydział<br>Biologii                              | Genomika i metagenomika mikroorganizmów eukariotycznych   |
| Maciej Szpindler |                        | 10:35        | 10:50        | Wiesław Nowak, K.<br>Walczewska-Szewc                         | GA76-10         | UMK, Wych.<br>Fiz. Astr. I<br>Inf. Stos.                | Badania struktury kanału potasowego Kir6.2/SUR1 odpowiedzialnego za wydzielanie insuliny metodami dynamiki molekularnej |
| /aciej           |                        | 10:50        | 11:30        | Przerwa   |                 |   |   |
| 2                |                        | 11:30        | 11:45        | Michał Boniecki   |                 |   | TBD   |
|                  |                        | 11:45        | 12:00        | Joanna Panecka  | GA73-25         | UW, CENT  | Dynamika oddziaływań homotetramerycznego<br>enzymu reduktazy pterydynowej 1 z wybranymi<br>ligandami.                   |
|                  |                        | 12:00        | 12:15        | Nithin Chandran<br>prezentacja w języku angielskim            | GB76-30         | Miedzynarod<br>owy Instytut<br>Biologii<br>Molekularnej | Modeling of RNA and RNA-protein complexes (Badania kompleksów RNA i RNA-białko za pomocą symulacji Monte Carlo).        |
|                  |                        | 12:15        | 12:30        | Joanna Miszkiewicz  | GB74-7          | UW, CENT  | Odtworzenie eksperymentalnej krzywej topnienia dupleksów RNA metodą dynamiki molekularnej                               |
|                  |                        | 12:30        | 12:45        | Silvio Osella<br>prezentacja w języku angielskim              | GA73-16         | UW, CENT  | Rational Design of Bio-Organic Systems for Biomimetic Applications  |
|                  |                        | 12:45        | 13:30        | Przerwa   |                 |   |   |
|                  | INFORMATYKA / MEDYCYNA | 13:30        | 13:45        | Adam Sieradzan  | G65-12          | GA71-21   | Wprowadzanie błony lipidowej do gruboziarnistego pola siłowego UNRES  |
|                  |                        | 13:45        | 14:00        | Paweł Gora  | G74-17          | UW, MIM   | Optymalizacja leczenia nowotworu  |
|                  |                        | 14:00        | 14:15        | TBD   |                 |   | TBD   |
|                  | INFORM                 | 14:15        | 14:30        | Łukasz Górski   | GR81-14         | UW, ICM   | Wyjaśnialność i modele językowe w informatyce prawniczej  |

| Michał Hermanowicz | INŻYNIERIA MATERIAŁOWA | 14:30 | 14:45 | Piotr Śpiewak               | G55-0   | PW, Wydział<br>Inżynierii<br>Materiałowej | Electronic Structure and Transport Properties of TI<br>Doped PbTe from Hybrid Functional Calculations |
|--------------------|------------------------|-------|-------|-----------------------------|---------|---|---|
|                    |                        | 14:45 | 15:15 | Przerwa                     |         |   |   |
|                    |                        | 15:15 | 15:30 | Paweł Szarek                | G49-17  | UW, CENT                                  | Kompleksy metali przejściowych w roli urządzeń dla elektroniki molekularnej.                          |
|                    |                        | 15:30 | 15:45 | Marcin Zemła                | G62-1   | PW, Wydział<br>Inżynierii<br>Materiałowej | He w Fe   |
|                    |                        | 15:45 | 16:00 | Damian Sobieraj, Jan Wróbel | GB79-6  | PW, Wydział<br>Inżynierii<br>Materiałowej | Modelowanie stabilności fazowej i właściwości stopów o wysokiej entropii                              |
|                    | ICM                    | 16:00 | 16:20 | Franciszek Rakowski         | GS80-31 | UW, ICM                                   | COVID-19  |
|                    | KDM                    | 16:20 | 16:35 | Maciej Szpindler            | UV      | V, ICM                                    | Podsumowanie obliczeń w ICM w latach 2018, 2019 2020  |