## Sesja Sprawozdawcza Użytkowników KDM On-Line

Dzień 1 - 2 lutego 2021

Chair	Sesja	Czas		0	lusia i Namatal	Numer	ACIDADA	Townst Brownston!
		Start	Koniec	Czas	lmię i Nazwisko	Grantu	Afiliacja	Temat Prezentacji
Maciej Szpindler	BIOLOGIA	09:00	09:20	00:20	Profesor Grzegorz Chałasiński, Dyrektor Marek Michalewicz		UW, ICM; Przewodniczący Rady Naukowej ICM	Powitanie
		09:20	09:50	00:30	Krzysztof Rządca		UW, MIM	Pan tu nie stał! Nauka, praktyka i zdrowy rozsądek w superkomputerowych systemach kolejkowych
		09:50	10:05	00:15	Piotr Setny	GA76-7	UW, CENT	Oddziaływanie peptydów fuzyjnych wirusa grypy z błonami lipidowymi
		10:05	10:20	00:15	Stanisław Dunin-Horkawicz	GA71-24	UW, CENT	Sequence-structure relationships in highly-regular proteins
		10:20	10:35	00:15	Anna Karnkowska	G72-16	UW, Wydział Biologii	Genomika i metagenomika mikroorganizmów eukariotycznych
		10:35	10:50	00:15	Wiesław Nowak, K. Walczewska- Szewc	GA76-10	UMK, Wych. Fiz. Astr. I Inf. Stos.	Badania struktury kanału potasowego Kir6.2/SUR1 odpowiedzialnego za wydzielanie insuliny metodami dynamiki molekularnej
		10:50	11:30	00:40	Przerwa			
		11:30	11:45	00:15	Michał Boniecki	G73-4	Międzynarodowy Instytut Biologii Molekularnej i Komórkowej	Simulations of the formation of protein-RNA complexes using a coarse grain model (SimRNP)
		11:45	12:00	00:15	Joanna Panecka	GA73-25	UW, CENT	Dynamika oddziaływań homotetramerycznego enzymu reduktazy pterydynowej 1 z wybranymi ligandami.
		12:00	12:15	00:15	Nithin Chandran prezentacja w języku angielskim	GB76-30	Miedzynarodowy Instytut Biologii Molekularnej i Biologii Komórki	Modeling of RNA and RNA-protein complexes (Badania kompleksów RNA i RNA-białko za pomocą symulacji Monte Carlo).
		12:15	12:30	00:15	Joanna Miszkiewicz	GB74-7	UW, CENT	Odtworzenie eksperymentalnej krzywej topnienia dupleksów RNA metodą dynamiki molekularnej
		12:30	12:45	00:15	Silvio Osella prezentacja w języku angielskim	GA73-16	UW, CENT	Rational Design of Bio-Organic Systems for Biomimetic Applications

		12:45	13:30	00:45	Przerwa			
Michał Hermanowicz	INFORMATYKA / MEDYCYNA	13:30	13:45	00:15	Adam Sieradzan	G65-12	GA71-21	Wprowadzanie błony lipidowej do gruboziarnistego pola siłowego UNRES
		13:45	14:00	00:15	Paweł Gora	G74-17	UW, MIM	Optymalizacja leczenia nowotworu
		14:00	14:15	00:15	Michał Jagielski, Miron Kursa	GR80-2	UW, ICM	Modelowanie nadciekłej turbulencji na maszynie wektorowej NEC
		14:15	14:30	00:15	Łukasz Górski	GR81-14	UW, ICM	Wyjaśnialność i modele językowe w informatyce prawniczej
		14:30	14:45	00:15	Piotr Śpiewak	G55-0	PW, Wydział Inżynierii Materiałowej	Modelowanie ab initio właściwości transportowych w materiałach termoelektrycznych z wykorzystaniem funkcjonałów hybrydowych
	INŻYNIERIA MATERIAŁOWA	14:45	15:15	00:30	Przerwa			
		15:15	15:30	00:15	Paweł Szarek	G49-17	UW, CENT	Kompleksy metali przejściowych w roli urządzeń dla elektroniki molekularnej.
		15:30	15:45	00:15	Marcin Zemła	G62-1	PW, Wydział Inżynierii Materiałowej	He w Fe
		15:45	16:00	00:15	Damian Sobieraj, Jan Wróbel	GB79-6	PW, Wydział Inżynierii Materiałowej	Modelowanie stabilności fazowej i właściwości stopów o wysokiej entropii
	CM	16:00	16:20	00:20	Franciszek Rakowski	GS80-31	UW, ICM	COVID-19
	KDM	16:20	16:35	00:15	Maciej Szpindler		UW, ICM	Podsumowanie obliczeń w ICM w latach 2018-2020