

XOX

sesja

UŻYTKOWNIKÓW ICM

19–21 kwietnia 2017 r.

Biblioteka Uniwersytecka w Warszawie

PROGRAM



Dzień 1
środa, 19 kwietnia 2017

Początek	Koniec	Sala 265	Sala 315	Sala 256
8:30	9:00	Rejestracja - 3 piętro, Foyer		
		Powitalna kawa		
9:00	11:00	Wprowadzenie do obliczeń w ICM. Maciej Marchwiany, Maciej Szpindler, Maciej Cytowski ICM UW	Warsztaty Unicore i OpenOxide. Prof. dr hab. Piotr Bała, dr Jacek Piechota ICM UW	IBM Bluemix: Dostęp do usług i zasobów IBM w chmurze. dr Michał Sierakowski IBM Polska
11:00	11:30	Przerwa kawowa		
11:30	13:30	Warsztaty VisNow cz. 1 Bartosz Borucki ICM UW	Warsztaty Unicore Portal Prof. dr hab. Piotr Bała ICM UW	Rozwiązania IBM w obszarach HPC i HPDA Michał Iwański, Michał Kordyżon IBM Polska
13:30	14:30	Lunch		
14:30	16:30	Warsztaty VisNow cz. 2 Bartosz Borucki ICM UW		System plików dla KDM a obiektowa pamięć masowa na przykładzie IBM Spectrum scale (GPFS) i OpenStack Swift. Michał Stryga IBM Polska
16:30	17:00	Przerwa kawowa		

Dzień 2
czwartek, 20 kwietnia 2017

Początek Koniec

08:30	09:00	Rejestracja - 3 piętro, Foyer	
		Powitalna kawa	
		Sala 316	
09:00	09:20	Otwarcie sesji Prof. dr hab. Grzegorz Chałasiński, Przewodniczący Rady Naukowej ICM dr Marek Michalewicz, z-ca dyrektora ICM - Centrum Technologii Obliczeniowych	
09:20	09:50	Prezentacja zespołów i działalności ICM	
9:50	10:30	Wykład plenarny: Prof. dr hab. Wojciech Grochala, Centrum Nowych Technologii, Uniwersytet Warszawski "Przykłady wykorzystania niezwykłych nowych zasobów obliczeniowych ICM"	
10:30	11:00	Wykład sponsora: dr Ingolf Wittmann, Technical Director and HPC Leader at IBM "The Computer that could be smarter than us. Cognitive Computing."	
11:00	11:20	Przerwa kawowa	
11:20	12:00	Sala 316 dr Tomasz Pabiśiak (G44-23) Instytut Fizyki Doświadczalnej, Uniwersytet Wrocławski "Badania teoretyczne właściwości materiałów i ich powierzchni."	Sala 256 dr Piotr Korcyl (GA67-12) Uniwersytet Jagielloński "Quantum chromodynamics and HPC."
11:40	12:00	dr Magdalena Popielska (GES-16, GA65-24, G36-15) Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski "Jak oddziaływania van der Waalsa wpływają na energetykę oraz strukturę układu? - na przykładzie częściowo uwodornionego grafenu na podłożu metalicznym."	dr Przemysław Raczyński (G53-6) Instytut Fizyki, Uniwersytet Śląski "Nanoindentacja dwuwarstw fosfolipidowej nanorurkami o różnej średnicy - symulacje MD."
12:00	12:20	dr Janusz Cukras (G56-20) Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski "Modelling the magneto-chiral dichroism."	mgr Łukasz Orłowski A*STAR Computational Resource Centre, Singapore "Supercomputer within supercomputer: discovery of interconnect topologies by complete supercomputing system emulation."
12:20	12:40	dr Robert Balawender (G33-1) Instytut Chemii Fizycznej, Polska Akademia Nauk "Badanie przestrzeni chemicznej przy pomocy pochodnych alchemicznych."	Prof. dr hab. Witold Rudnicki ICM UW/ UCO UwB "Massively parallel implementation of sequential Markov Chain in Monte Carlo simulations of physical systems with pairwise interactions."
12:40	13:00	dr Piotr Garbacz (G62-25) Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski "Bezpośrednie wyznaczenie chiralności za pomocą jądrowego rezonansu magnetycznego na podstawie antysymetrii tensora sprzężenia spinowo-spinowego."	mgr Tomasz Pieńko (GA65-16) Centrum Nowych Technologii, Uniwersytet Warszawski "Transport of vitamin B12 and its conjugate with peptide nucleic acid through the E.coli BtuB outer membrane protein explored with steered molecular dynamics."
		Sala 316	
13:00	13:30	Dyskusja moderowana: "Liczyć w ICM" Moderator dyskusji: Prof. dr hab. Marek Niezgodka, Dyrektor ICM	
13:30	14:30	Lunch	
		Sala 316	
14:30	15:10	Wykład plenarny: dr hab. Joanna Sułkowska, Centrum Nowych Technologii, Uniwersytet Warszawski "Comprehensive analysis of knotted proteins - from folding to function."	
15:10	15:40	Wykład sponsora: Krzysztof Gózdź, Hewlett Packard Enterprise Polska Sp. z o.o. "Nowoczesne narzędzia obliczeniowe nauki."	
15:40	16:10	Wykład sponsora: Cray Inc.	
16:10	16:20	Przerwa kawowa	
16:20	16:40	Sala 316 mgr Mateusz Wlazło (G60-8) Wydział Fizyki, Uniwersytet Warszawski "Wyznaczanie energii swobodnych reakcji katalizy heterogenicznej z symulacji dynamiki molekularnej z pierwszych zasad."	Sala 256 dr Anna Ciechan (G46-13) Instytut Fizyki, Polska Akademia Nauk "Domieszki metali przejściowych w ZnO."
16:40	17:00	dr Maciej Śmiechowski (G53-29) Wydział Chemiczny, Politechnika Gdańska "Teoretyczna spektroskopia oscylacyjna hydratowanych związków hydrofobowych."	Prof. dr hab. Stanisław Krukowski (G15-9) Interdyscyplinarne Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego, Uniwersytet Warszawski "Polaryzacja spontaniczna w azotkach - wyznaczenie za pomocą modelu słabowego."
17:00	17:20	dr Bartosz Trzaskowski (G43-7) Uniwersytet Warszawski "Modelowanie struktur i ścieżek reakcji nowych kompleksów rutenowych, potencjalnych katalizatorów metatezy olefin."	dr hab. Dariusz Plewczyński Centrum Nowych Technologii, Uniwersytet Warszawski "Multiscale Monte Carlo simulations of Human genome at kilobase resolution."
		Sala 316	
17:20	17:50	Wykład sponsora: Jean Thomas Acquaviva, DDN Storage "IME Bridging the complexity gap."	
17:50	18:20	Wykład sponsora: HGST	
18:20	19:30	Sesja posterowa	

Dzień 3
piątek, 21 kwietnia 2017

Początek	Koniec		
08:30	09:00	Rejestracja - 3 piętro, Foyer	
		Powitalna kawa	
		Sala 256	
09:00	09:40	Wykład plenarny: Prof. dr hab. Adam Liwo, Wydział Chemii, Uniwersytet Gdański <i>"Modele gruboziarniste jako sposób na obliczenia wielkoskalowe oraz zrozumienie architektury układów (bio)molekularnych."</i>	
09:40	10:00	Sala 256	Sala 315
09:40	10:00	Obliczenia inżynierskie Matematyka	Biologia Biochemia
10:00	10:20	dr inż. Łukasz Mazurkiewicz (GB65-19) Wojskowa Akademia Techniczna <i>"Zaawansowane analizy symulacyjne w biomechanice, geomechanice i analizie konstrukcji."</i>	Prof. dr hab. Sławomir Filipek (G07-13) Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski <i>"Mechanizmy wiązania ligandów i aktywacji receptorów GPCR."</i>
10:20	10:40	dr inż. Krzysztof Rogowski (G43-8) Wydział MEIL, Politechnika Warszawska <i>"Turbina o pionowej osi obrotu - model laminarny a turbulentny."</i>	dr hab. inż. Halina Szatyłowicz (G33-17) Wydział Chemiczny, Politechnika Warszawska <i>"Fizyczne interpretacje efektu podstawnikowego."</i>
		mgr inż. Witold Krusz (GA65-18) Wydział MEIL, Politechnika Warszawska <i>"An investigation of passive methods for airfoil noise reduction in laminar boundary layer instability flow regime."</i>	dr Piotr Lipiński (G63-10) Instytut Medycyny Doświadczalnej i Klinicznej im. M. Mossakowskiego, Polska Akademia Nauk <i>"Inhibitors of NRP-1/VEGF-A interaction studied computationally."</i>
10:40	11:00	Przerwa kawowa	
		Sala 256	
11:00	11:10	dr Małgorzata Roge-Wiśniewska, Uniwersytecki Ośrodek Transferu Technologii, Uniwersytet Warszawski <i>"Komerjalizacja wiedzy."</i>	
11:10	11:40	Wykład sponsora: Robert Adamski, Intel Technology Poland sp. z o.o. <i>"The Race for Faster Machine Learning – Intel Artificial Intelligence Technical Update."</i>	
11:40	12:10	Wykład sponsora - Stuart Payne, Director of EMEA Partner Sales, Infinera <i>"Deploying Integrated photonics for data center connectivity in Research and Education networks."</i>	
12:10	12:30	Sala 256	Sala 315
12:30	12:50	Nauki obliczeniowe	Biologia Biochemia
12:10	12:30	Prof. dr hab. Krzysztof Moszyński (G33-10) Wydział Matematyki, Informatyki i Mechaniki, Uniwersytet Warszawski <i>"Divide & Conquer i 'ODZYSK' dla macierzy SCHURA."</i>	dr Michał Boniecki (G66-9) Międzynarodowy Instytut Biologii Molekularnej i Komórkowej w Warszawie <i>"SimRNA/SimRNP: gruboziarniste metody do modelowania trójwymiarowej struktury RNA i kompleksów RNA-białko."</i>
12:30	12:50	dr Michał Cieśla (G27-8) Instytut Fizyki im. M. Smoluchowskiego, Uniwersytet Jagielloński <i>"W poszukiwaniu kształtów maksymalizujących współczynnik losowych, dwuwymiarowych opakowań."</i>	dr Rafał Roszak (G65-11) Instytut Chemii Organicznej, Polska Akademia Nauk <i>"Modele oceny selektywności reakcji na potrzeby automatycznej analizy retrosyntetycznej."</i>
12:50	13:10	dr Bogdan Rosa (G49-15) Instytut Meteorologii i Gospodarki Wodnej - Państwowy Instytut Badawczy <i>"Modelowanie opadania cząstek inercyjnych w przepływach turbulentnych."</i>	dr hab. Krzysztof Zborowski (G17-8) Wydział Chemii, Uniwersytet Jagielloński <i>"Badania tautomerii różnych form 3-hydroksypirydyn-4-onu."</i>
13:10	13:30	Prof. dr hab. Piotr Bała (GB65-15) Interdyscyplinarne Centrum Modelowania Matematycznego i Komputerowego, Uniwersytet Warszawski <i>"Nowe metody programowania."</i>	mgr Agata Perlińska (GA65-25) Centrum Nowych Technologii, Uniwersytet Warszawski <i>"Wpływ zawężenia na zachowanie białka TrmD."</i>
13:30	14:30	Lunch	
		Sala 256	
14:30	15:10	Wykład plenarny: dr Wojciech Hellwing (Institute of Cosmology & Gravitation, Uniwersytet w Portsmouth) <i>"Tracking the dark matter and dark energy with supercomputers."</i>	
15:10	15:40	Wykład sponsora - dr inż. Leszek Rudniak (SymKom) <i>"ANSYS HPC solution."</i>	
15:40	16:10	Wykład sponsora - Comtegra	
16:10	16:30	Przerwa kawowa	
		Sala 256	
16:30	16:50	Fizyka	Biologia Biochemia
16:30	16:50	Prof. dr hab. Agnieszka Janiuk (G53-5) Centrum Fizyki Teoretycznej, Polska Akademia Nauk <i>"Black hole accretion in gamma ray bursts and other sources."</i>	dr Piotr Setny (GB66-18) Centrum Nowych Technologii, Uniwersytet Warszawski <i>"Efekty hydratacyjne w układach biomolekularnych."</i>
16:50	17:10	Prof. dr hab. Wojciech Dębski (GES-17) Instytut Geofizyki, Polska Akademia Nauk <i>"Symulacje procesu pęknięcia materiałów kruchych - wstępne wyniki i wnioski."</i>	Marcin Witkowski (G64-7) Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski <i>"Modelowanie widm oscylacyjnych molekuł organicznych."</i>
17:10	17:30	dr Piotr Setny (GB66-18) Centrum Nowych Technologii, Uniwersytet Warszawski <i>"Efekty hydratacyjne w układach biomolekularnych."</i>	
17:30	17:50	Marcin Witkowski (G64-7) Wydział Chemii, Uniwersytet Warszawski <i>"Modelowanie widm oscylacyjnych molekuł organicznych."</i>	
17:50		Zamknięcie sesji	