

Program péntek (május 27.)

9.30-10.05 Valiskó Mónika

PE Mérnöki Kar

Nanopórusok modellezése redukált modellekkel

10.05-10.40 Ispánovity Péter

ELTE Fizikai Intézet, Anyagfizikai Tanszék

Diszlokációlavinák numerikus modellezése

10.40-11.00 Szünet

11.00-11.35 Boda Dezső

PE Mérnöki Kar

Ágens-alapú modellek. Mi a közös a komplex fizikai és a komplex adaptív rendszerekben?

11.35-12.00 Egedy Attila

PE Mérnöki Kar

Molekuláktól a teljes technológiáig: Multiscale modellezés a vegyészmérnökségben

12.00-12.10 Tornai Gábor

Streamnovation, BrianQC

BrianQC: HF és DFT gyorsítása GPU-val

12.10-13.30 Ebédszünet

Program péntek (május 27.)

13.30-13.55 Horváth Krisztián

PE Mérnöki Kar

Makroszkopikus mérés versus mikroszkopikus gondolkodás. Egy analitikai kémikus gondolatai.

13.55-14.20 Mester Dávid

BME VBK FKAT

Csökkentett skálázódású gerjesztett állapotú kvantumkémiai módszerek

14.20-14.45 Tajti Attila

ELTE Kémiai Intézet

Nagy molekulák elektrongerjesztéseinek számítása fragmens modellből

14.45-15.10 Paragi Gábor

MTA-SZTE Biomimetikus Rendszerek

Kutatócsoport, PTE Fizika Intézet

Energia Dekompozíció és Quadriplex rendszerek

15.10-15.30 Szünet

15.30-16.05 Szilágyi Botond

BME Pharmatech Modell Laboratórium

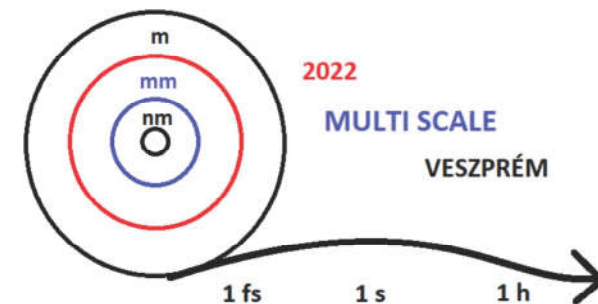
Multiscale szimulációk a gyógyszeriparban: a kristályosítás esete

16.05-16.40 Iglói Ferenc

Wigner Fizikai Kutatóközpont

Fotoszintetizáló baktériumtelepek statisztikus fizikai vizsgálata

16.40 Zárszó



Szimulációk több skálán, időben és térben Workshop

2022.
május 26-27.

MTA VEAB Székház
Veszprém, Vár u. 37.