

Session Program

October 1, 2014



1. bwHPC-Symposium

Rechenprojekte und Ergebnisse // Computing Projects and Results

KIT Campus Süd, Gebäude 30.10, NTI Hörsaal
76131, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Engesserstrasse 5

Wed, October 1

1:15 PM

Rechenprojekte und Ergebnisse // Computing Projects and Results

Session |

Location: KIT Campus Süd, Gebäude 30.10, NTI Hörsaal, 76131, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Engesserstrasse 5

13:15 – 13:35

Quantenchemie - Rechnungen auf dem bwUniCluster

Speaker

Dr Sung Sakong

13:35 – 13:55

Anforderungen aus den Geowissenschaften für Erdsystemsimulationen

Speaker

Dr Kirsten Warrach-Sagi

13:55 – 14:15

Quantenchemische Einsichten in die Elektronenstruktur emissiver Platinkomplexe mit Farbstoff-basierten Liganden

Speaker

Prof. Rainer Winter

14:15 – 14:35

Simulating Return Distributions with Bootstrap

Speaker

Mr Matthias Böhm

14:35 – 14:45

Pause - 10 min

14:45 – 15:05

Facilitating the Application of Halogen Bonds in Chemical Biology & Drug Discovery

Speaker

Prof. Frank Böckler

15:05 – 15:20

Molecular Dynamics Studies of Long Range Conformational Transitions

Speaker

Dr Volker Knecht

15:20 – 15:35

CFD-Analyse der Ernährungsweise ausgestorbener und heute lebender Seelilien

Speaker

Ms Janina Dynowski

15:35 – 15:50

Exploring the basic modules of life by simulation

Speaker

Mr Claude SINNER

15:50 – 16:00

Investigation of Energy Transport in Spinsystems with Dipolar Interactions

4:00 PM

Speaker

Mr Frank Hantschel