

Seminaarin ensimmäisen päivän tuloksena päätettiin tehdä luentomoniste, jonka sisältö on seuraava:

Laskennalliset menetelmät biologisten systeemien ymmärtämisessä

Johdanto

1. Biologisten ilmiöiden mittakaavat --- Teemu Tuulari
2. Biologisten prosessien aikaskaalat --- Tapio Teppo
3. Solu ja dna-molekyyli --- Juho Kettunen
4. Systeemibiologian perusteet & ihmisen hierarkkinen rakenne --- Margareta Segerståhl
5. Mitä on laskennallinen tiede ja tutkimus? --- Petri Lehto

Atomitason laskennallinen mallintaminen - elektronirakenne

6. Ab initio -menetelmät --- Janne Hautsalo ja Markus Siivola
Schrödingerin yhtälö – mikä se on ja mitä se kertoo?
Aaltofunktioiteoria
Tiheysfunktionaaliteoria
Molekyylien rakenne
7. Molekyylimekaniikka ja molekyylidynamiikka --- Pasi Jylänki
Molekyylidynamiikan tyypilliset approksimaatiot biosysteemeissä
Kvanttimekaniikkaan pohjautuva molekyylidynamiikka

Kompleksiset ja suuret systeemit

8. Monte Carlo -simulaatiot --- Juho Mettomäki
9. Kokeellisen tiedon ja laskennan yhdistäminen --- Marko Sysi-Aho
10. Dissipatiivinen partikkelidynamiikka --- Jussi Vatiilo

Sovellukset

11. Proteiinien rakenne ja funktio sekä laskostumisen ennustaminen --- Janne Pylkkönen
12. Viruksen rakenne --- Jaakko Riihimäki
13. Itsejärjestäytyminen (ja rasva-aineet) --- Janne Ojanen
14. Neurolaskennan sovellukset biologisten systeemien mallinnuksessa --- Matti Pöllä

Todettiin yhdessä tuumin, että kaikissa otsikoissa pitää olla biologisuus koko ajan mukana. Kappaleiden 1. ja 2. tulee antaa vastaus kysymykseen: Mitä tänä päivänä voidaan laskea?