

Προτεινόμενα Θέματα διπλωματικών εργαστήριου Υπολογιστικής Φυσικοχημείας, υπο την επίβλεψη του Αν. Καθ. Γεργίου Μπουλουογούρη. χωρισμένα σε 3 κατηγορίες :

- 1) Μαθηματική μοντελοποίηση βιοχημικών δικτιών :
 - a. Μοντελοποίηση βιοχημικών διεργασιών μορφογένεσης
 - b. Υπολογιστική μοντελοποίηση πειραμάτων μικροσκοπίας φθορισμού
 - c. Μοντελοποίηση βιοχημικών ανάλογων μηχανών Turing
 - d. Επεξεργασία πληροφορίας σε Βιοχημικά δίκτυα
 - e. Βιολογικά ανάλογα υπολογιστικών μηχανών
- 2) Στατιστική περιγραφή και ανάλυση στην γενετική :
 - a. Ανάπτυξη γενετικής άλγεβρας Shannon για πεπερασμένα δήγματα
 - b. Μεταλλάξεις και γενετικής άλγεβρας Shannon
 - c. Έλεγχοι υποθέσεων με βάση την γενετικής άλγεβρας Shannon
 - d. Υπολογιστική μελέτη της συσχέτισης φαινοτύπου γονότυπου
- 3) Μελέτη Δομής, αλληλεπίδρασης βιομορίων :
 - a. Υπολογιστική μελέτη της δημιουργίας δευτεροταγούς δομής σε ολιγοπεπτίδια.
 - b. Υπολογιστικά πειράματα πρόσδεσης φαρμάκων σε πρωτεϊνικούς στόχους
 - c. Υπολογιστικά πειράματα προσδιορισμού διαπλοκών σε βιοπολυμερή
 - d. Αναζήτηση στόχων μέσω αλχημικών μεταβολών για τον σχεδιασμό νέων φαρμάκων.

email επικοινωνίας : gbouloug@mbg.duth.gr