



ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΙΩΑΝΝΙΝΩΝ

ΤΜΗΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ



Εβδομαδιαίο Σεμινάριο

## Υπολογιστικά εργαλεία γεωμετρικής ανάλυσης δυναμικών πρωτεϊνικών συστημάτων

**Αθανάσιος Σταυρακούδης**

*Τμήμα Οικονομικών Επιστημών, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων*

Η στατιστική ανάλυση των γεωμετρικών ιδιοτήτων των πρωτεϊνικών συστημάτων και των δυναμικών ιδιοτήτων τους, υπήρξε πάντοτε ένα από το πιο ενδιαφέροντα επιστημονικά πεδία, τις τελευταίες 3-4 δεκαετίες. Ιδιαίτερα την τελευταία δεκαετία, εξαιτίας της ραγδαίας εξάπλωσης των υπερυπολογιστών και της χρήσης τους σε προσομοιώσεις συστημάτων με βαθμούς ελευθερίας της τάξης εκατομμυρίων, υπήρξε μια μεγαλύτερη ανάγκη για εφαρμογή μεθόδων υπολογιστικής και στατιστικής ανάλυσης των αποτελεσμάτων τέτοιων προσομοιώσεων. Στη διάλεξη αυτή παρουσιάζεται η εφαρμογή ενός νέου υπολογιστικού πακέτου, του EUCB, ακρωνύμιο από το Euclidean Computational Biology, προς τιμή του Ευκλείδη, πατέρα της γεωμετρίας. Το πρόγραμμα παρέχει πλήθος επιλογών ανάλυσης προσομοιώσεων πρωτεϊνικών συστημάτων, με επίκεντρο τις γεωμετρικές τους ιδιότητες. Η έξοδος του προγράμματος μπορεί εύκολα να χρησιμοποιηθεί επίσης από άλλα πακέτα υπολογιστικής στατιστικής, όπως η γλώσσα R. Θα δοθεί έμφαση στις δυναμικές ιδιότητες (προσομοιώσεις μοριακής δυναμικής) συστημάτων πρωτεϊνών και των στατιστικών τους ιδιοτήτων, όπως κατανομές, έλεγχοι υποθέσεων, συνολοκλήρωση, ανάλυση κύριων συνιστωσών, κτλ.

Τετάρτη 12 Δεκεμβρίου 2012, 5:30μμ

Αίθουσα 201α Τμήματος Μαθηματικών

Μετά την ομιλία ακολουθεί καφές και συζήτηση στο εντευκτήριο του Τμήματος