# Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

## Scheda Insegnamento/Attività Formativa

### Docente responsabile dell'insegnamento/attività formativa

| | |
|---|---|
| Nome | Mattia |
| Cognome | Falconi |

### Denominazione insegnamento/attività formativa

| | |
|---|---|
| Italiano | Bioinformatica Strutturale |
| Inglese | Structural Bioinformatics |

### Informazioni insegnamento/attività formativa

| | |
|---|---|
| A.A. | 2024/2025 |
| CdS | BIOINFORMATICA |
| Codice | 8067102 |
| Canale | unico |
| CFU | 6 |

### Obiettivi formativi e risultati di apprendimento attesi

| | |
|---|---|
| Italiano | OBIETTIVI FORMATIVI:<br>Si richiede allo studente la conoscenza dell'architettura e della morfologia delle macromolecole biologiche. La conoscenza delle banche dati delle macromolecole, delle tecniche di simulazione e dei programmi utilizzati per la rappresentazione, l'analisi e la predizione strutturale delle biomolecole.<br><br>CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPRENSIONE:<br>Si richiede allo studente la capacità di applicare le conoscenze acquisite sulle tecniche di simulazione delle macromolecole alla comprensione di problemi strutturali. Si richiede inoltre l'abilità nel risolvere problemi strutturali di base ma anche la capacità di individuare quelli inusuali o complessi, la capacità interpretativa per la loro risoluzione, anche in contesti multidisciplinari e sperimentali ma legati ad una componente molecolare.<br><br>CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPRENSIONE: |

| | |
|---|---|
| Inglese | LEARNING OUTCOMES:<br>The student is required to know the architecture and morphology of biological macromolecules. Knowledge of macromolecule databases, simulation techniques and programs used for the representation, analysis and structural prediction of biomolecules.<br><br>KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:<br>The student is required to apply the acquired knowledge on macromolecule simulation techniques to the understanding of structural problems. It is also required the ability to solve basic structural problems but also the ability to identify unusual or complex problems, the interpretative capacity for their resolution, even in multidisciplinary and experimental contexts but linked to a molecular component.<br><br>APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING:<br>Students must demonstrate knowledge and structural comprehension skills that extend and |

## Prerequisiti

| | |
|---|---|
| Italiano | Conoscenze di Biochimica e di Biologia Molecolare |
| Inglese | Knowledge of Biochemistry and Molecular Biology |

## Programma

| | |
|---|---|
| Italiano | Il corso fornisce allo studente una panoramica teorica e pratica delle metodologie di calcolo attualmente in uso per lo studio delle macromolecole biologiche.<br>Argomenti del corso sono: introduzione al sistema operativo Linux e ai programmi per la visualizzazione e la manipolazione delle macromolecole; le caratteristiche strutturali e conformazionali delle proteine e degli acidi nucleici; i livelli strutturali e i principali domini delle proteine; le banche dati delle macromolecole; i metodi per la predizione della struttura secondaria delle proteine e dell'RNA; i metodi di allineamento strutturale delle proteine; la modellazione per omologia; i metodi di Fold recognition, Threading ed ab initio, AlphaFold2 e altre metodologie AI; il drug design, le metodologie di docking molecolare e di virtual screening; la meccanica molecolare ed i metodi di minimizzazione dell'energia; la dinamica |

| | |
|---|---|
| Inglese | The course provides the student with a theoretical and practical overview of the calculation methods currently in use for the study of biological macromolecules.<br>Course topics include: introduction to the Linux operating system and programs for displaying and manipulating macromolecules; the structural and conformational characteristics of proteins and nucleic acids; structural levels and major protein domains; macromolecule databases; methods for predicting the secondary structure of proteins and RNAs; protein structural alignment methods; modeling by homology; fold recognition, threading and ab initio methods, the AlphaFold2 and other AI methods; drug design, molecular docking methodologies and virtual screening; Molecular mechanics and energy minimization methods; classical molecular dynamics and advanced conformational sampling |

## Modalità di svolgimento

☒ Modalità in presenza
☐ Modalità a distanza

## Descrizione della modalità di svolgimento e metodi didattici adottati

| | |
|---|---|
| Italiano | Vengono tenute lezioni frontali su tutti gli argomenti elencati nel programma del corso. Per ognuna delle tematiche affrontate vengono eseguite delle esercitazioni sui computer in aula, in presenza del docente, allo scopo di far comprendere allo studente la tecnica che è stata descritta durante la lezione e l'uso dei programmi open-source che possono essere utilizzati allo scopo. Il docente si confronta continuamente con lo studente durante lo svolgimento delle esercitazioni allo scopo di fornire delucidazioni o chiarimenti su aspetti tecnici o |
| Inglese | Lessons are held on all the topics listed in the course program. For each of the topics dealt with, exercises are performed on the computers in the classroom, in the presence of the teacher, in order to make the student understand the technique that was described during the lesson and the use of open-source programs that can be used for the purpose. The teacher continually confronts the student during the exercises in order to provide clarifications on technical or scientific aspects that have not been understood. |

## Modalità di frequenza

○ Frequenza obbligatoria
○ Frequenza facoltativa

## Descrizione della modalità di frequenza

| | |
|---|---|
| Italiano | Si richiede una frequenza assidua sia alle lezioni che alle esercitazioni, allo scopo di far acquisire allo studente un linguaggio tecnico/scientifico appropriato ed adeguate competenze di esecuzione delle metodiche di questo insegnamento. |
| Inglese | Attendance is required for both lessons and exercises, in order to provide the student with an appropriate technical/scientific language and appropriate skills for performing the methods described in the course. |

## Modalità di valutazione

- ☐ Prova scritta
- ☒ Prova orale
- ☐ Valutazione in itinere
- ☐ Valutazione di progetto
- ☐ Valutazione di tirocinio
- ☐ Prova pratica
- ☐ Prova di laboratorio

## Descrizione delle modalità e dei criteri di verifica dell'apprendimento

| | |
|---|---|
| Italiano | Viene effettuato un esame orale che vede approfonditi almeno 3 argomenti trattati nel corso. Durante l'esame vengono fatte domande trasversali per saggiare la capacità dello studente di collegare le varie metodiche oggetto del corso, oppure vengono proposti scenari di ricerca per capire come lo studente li vorrebbe affrontare sulla base delle conoscenze acquisite.<br><br>Modalità di graduazione del voto per esame orale<br>18-21, lo studente ha acquisito i concetti di base della disciplina, modo di esprimersi e linguaggio complessivamente corretti e appropriati.<br>22-25, lo studente ha acquisito in maniera approfondita i concetti di base della disciplina, ed effettua i collegamenti fra le varie materie. Presenta linearità nella strutturazione del |

| | |
|---|---|
| Inglese | An oral examination is carried out which includes at least 3 topics covered in the course. During the exam, cross-sectional questions are asked to test the student's ability to link the various methods described in the course, or research scenarios are proposed to understand how the student would like to deal with them based on the knowledge acquired.<br><br>Graduation procedure for oral exams<br>18-21, the student has acquired the basic concepts of the discipline, mode of expression and language that is generally correct and appropriate.<br>22-25, the student has acquired in depth the basic concepts of the discipline, and makes connections between the various subjects, presenting linearity in the structuring of speech. |

## Testi adottati

| | |
|---|---|
| Italiano | Bioinformatica, dalla Sequenza alla Struttura delle Proteine. S.Pascarella, A.Paiardini. Ed. Zanichelli.<br><br>Sulla piattaforma Microsoft Teams sono a disposizione i file PDF delle lezioni ed il materiale delle esercitazioni. |
| Inglese | Bioinformatics, from sequence to protein structure. S. Pascarella, A.Paiardini. Zanichelli Ed. URL<br><br>The lessons PDF files and the tutorial material are available on the Microsoft Teams platform. |

## Bibliografia di riferimento

| | |
|---|---|
| Italiano | Abraham, M.J.; Murtola, T.; Schulz, R.; Páll, S.; Smith, J.C.; Hess, B.; Lindahl, E. GROMACS: High Performance Molecular Simulations through Multi-Level Parallelism from Laptops to Supercomputers. SoftwareX 2015, 1–2, 19–25.<br><br>Blanchet, C.; Pasi, M.; Zakrzewska, K.; Lavery, R. CURVES+ Web Server for Analyzing and Visualizing the Helical, Backbone and Groove Parameters of Nucleic Acid Structures. |
| Inglese | Abraham, M.J.; Murtola, T.; Schulz, R.; Páll, S.; Smith, J.C.; Hess, B.; Lindahl, E. GROMACS: High Performance Molecular Simulations through Multi-Level Parallelism from Laptops to Supercomputers. SoftwareX 2015, 1–2, 19–25.<br><br>Blanchet, C.; Pasi, M.; Zakrzewska, K.; Lavery, R. CURVES+ Web Server for Analyzing and Visualizing the Helical, Backbone and Groove Parameters of Nucleic Acid Structures. |

Altre informazioni

| | |
|---|---|
| Italiano | |
| Inglese | |