Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

Facsimile Scheda Insegnamento

Mod. Scheda Insegnamento v. 1.1 -

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.	2025-2026
CdS	BIOINFORMMATICA
Codice	8067102
Canale	unico
CFU	6
Lingua	ITA

○ L ◉ LM ○ LM CU

Docente del modulo didattico (compilare solo per attività formative articolate in moduli)

Nome	
Cognome	

Denominazione modulo didattico (compilare solo per attività formative articolate in moduli)

Italiano	
Inglese	

Obiettivi formativi e risultati di apprendimento attesi

Italiano	OBIETTIVI FORMATIVI: 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. CONOSCENZA E CAPACITÀ DI COMPRENSIONE: 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. CAPACITÀ DI APPLICARE CONOSCENZA E COMPRENSIONE: Gli studenti devono dimostrare conoscenze e capacità di comprensione strutturale che estendono e rafforzano quelle di base che sono generalmente associate al primo corso di Laurea conseguito e che consentono di elaborare e di applicare le moderne metodologie di
Inglese	LEARNING OUTCOMES: 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. KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: 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. APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: Students must demonstrate knowledge and structural comprehension skills that extend and reinforce the basic ones that are generally associated with the first degree course achieved and that allow the elaboration and application of modern simulation methods also in support of an experimental research context.

Prerequisiti

Italiano	Conoscenze di Biochimica e di Biologia Molecolare con particolare riguardo alle strutture e ai complessi molecolari indicati nello studio di queste materie.
Inglese	Knowledge of Biochemistry and Molecular Biology with particular regard to the molecular structures and complexes indicated in the study of these subjects.

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. - Argomenti iniziali 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 in dettaglio; i livelli strutturali e i principali domini delle proteine; 8 ore (di cui 1 ora di esercitazione). - Il corso prosegue con i metodi di conservazione delle informazioni strutturali e di manipolazione delle strutture molecolari: 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, AlphaFold e le altre metodologie AI; 18 ore (di cui 9 ore di esercitazioni).
Inglese	The course provides the student with a theoretical and practical overview of the calculation methodologies currently in use for the study of biological macromolecules. - Initial topics of the course are: introduction to the Linux operating system and programs for viewing and manipulating macromolecules; the structural and conformational characteristics of proteins and nucleic acids in detail; the structural levels and main domains of proteins; 8 hours (of which 1 hour of practice). - The course continues with the methods of conservation of structural information and manipulation of molecular structures: macromolecule databases; methods for predicting the secondary structure of proteins and RNA; protein structural alignment methods; homology modeling; Fold recognition, Threading and ab initio methods, AlphaFold and other AI methodologies; 18 hours (of which 9 hours of exercises). - Methods of predicting interactions between molecules and macromolecules are then

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	È previsto un esame orale alla fine del corso che consiste in una valutazione approfondita di almeno tre argomenti trattati durante il semestre. Durante l ' esame, vengono poste domande trasversali che mirano a testare la capacità dello studente di collegare le varie metodiche studiate, dimostrando una comprensione integrata e interconnessa dei contenuti del corso. Inoltre, gli studenti potrebbero essere chiamati a confrontarsi con scenari di ricerca, in cui devono spiegare come affronterebbero determinate situazioni o problematiche basandosi sulle conoscenze acquisite durante il corso. Durante l'esame, ci sarà una discussione critica tra lo studente e gli esaminatori che servirà a valutare la capacità dello studente di argomentare, analizzare criticamente e difendere le proprie idee rispetto ai temi trattati nel corso. Questo approccio permette di valutare non solo la preparazione teorica dello studente, ma anche la sua capacità di applicare le conoscenze in contesti pratici e di pensare in modo critico e analitico.
Inglese	An oral exam is at the end of the course which consists of an in-depth evaluation of at least three topics covered during the semester. During the exam, transversal questions are asked that aim to test the student's ability to connect the various methods studied, demonstrating an integrated and interconnected understanding of the course contents. Additionally, students may be challenged with research scenarios, in which they must explain how they would address certain situations or issues based on the knowledge acquired during the course. During the exam, there will be a critical discussion between the student and the examiners which will serve to evaluate the student's ability to argue, critically analyze and defend their ideas with respect to the topics covered in the course. This approach allows us to evaluate not only the student's theoretical preparation, but also his ability to apply knowledge in practical contexts and to think critically and analytically. The Evaluation criteria will correspond to what is required by the Dublin Descriptors:

Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

Facsimile Scheda Insegnamento

Testi adottati

Italiano	Bioinformatica, dalla Sequenza alla Struttura delle Proteine. S.Pascarella, A.Paiardini. Ed. Zanichelli. 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 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. 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. Nucleic Acids Res. 2011, 39 (suppl), W68 – W73
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. 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. Nucleic Acids Res. 2011, 39 (suppl), W68 – W73

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 scientifici rimasti incompresi.
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 facoltativa
○ Frequenza obbligatoria

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.