Università degli Studi di Roma "Tor Vergata"

Facsimile Scheda Insegnamento

Mod. Scheda Insegnamento v. 1.1 -

Docente responsabile dell'insegnamento/attività formativa

Nome	Federico
Cognome	Iacovelli

Denominazione insegnamento/attività formativa

Italiano	Laboratorio di Bioinformatica Strutturale
Inglese	Laboratory of Structural Bioinformatics

Informazioni insegnamento/attività formativa

A.A. 2025/2026 ○ L ◉ LM ○ LM CU

CdS	Bioinformatica
Codice	8067827
Canale	Unico
CFU	2
Lingua	Italiano

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

Nome	Alice
Cognome	Romeo (co-docenza - 1 cfu)

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

Italiano	Analisi avanzate delle traiettorie e metodiche coarse graining
Inglese	Advanced Trajectory Analysis and Coarse graining techniques

Obiettivi formativi e risultati di apprendimento attesi

Italiano	OBIETTIVI FORMATIVI: Si richiede allo studente la conoscenza del workflow e dei programmi utilizzati per la simulazione di dinamica molecolare di complessi proteina-proteina e proteina-ligando e l'interpretazione dei risultati ottenute dalle corrispettivi analisi. 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 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 simulazione anche in assistenza ad un contesto di ricerca sperimentale.
Inglese	LEARNING OUTCOMES: The student is required to know the workflow and the programs used for the molecular dynamics simulation of protein-protein and protein-ligand complexes and the interpretation of the results obtained from the corresponding analyses. KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: The student is required to apply the acquired knowledge on macromolecule simulation techniques for 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 application of modern simulation methods also in support of an experimental research context.

Università degli Studi di Roma “Tor Vergata”

Facsimile Scheda Insegnamento

Prerequisiti

Italiano	Conoscenze di Biochimica, di Biologia Molecolare e Bioinformatica Strutturale
Inglese	Knowledge of Biochemistry, Molecular Biology and Structural Bioinformatics

Programma

Italiano	Il corso prevede un totale di 8 lezioni, ciascuna della durata di 2 ore. Ogni lezione è strutturata in modo da includere una breve parte teorica, volta a fornire le nozioni fondamentali relativi all'argomento trattato, e una parte pratica, che permetterà l'applicazione di quanto appreso attraverso esercitazioni mirate. Il corso prevede due lezioni dedicate all'implementazione di un workflow di simulazione di un complesso proteina-proteina, partendo dalla generazione del complesso con il programma Frodock, con la produzione delle topologie e coordinate di simulazione attraverso AmberTools, la simulazione di dinamica molecolare con il pacchetto GROMACS e le analisi attraverso i tool del pacchetto GROMACS fino alle analisi di MM-GBSA con MMPBSA.py del pacchetto AmberTools.
Inglese	The course includes a total of 8 lessons, each lasting 2 hours. Each lesson is structured to include a brief theoretical part, aimed at providing the fundamental concepts related to the topic, and a practical part, which will allow practical application of what has been learned through targeted tutorials. The course includes two lessons dedicated to the implementation of a simulation workflow for a protein-protein complex, starting from the generation of the complex with the Frodock program, with the production of topologies and simulation coordinates using AmberTools, the molecular dynamics simulation with the GROMACS package and the analyses using the tools of the GROMACS package up to the MM-GBSA with MMPBSA.py of the AmberTools package.

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	La valutazione finale consisterà in una prova orale nella quale verrà verificata la conoscenza dei concetti e dei workflow presentati nel corso: Lo schema di valutazione è il seguente: 18-21: Lo studente dimostra una conoscenza di base dei concetti fondamentali del corso, inclusi i workflow di simulazione per complessi proteina-proteina e proteina-ligando, le tecniche di dinamica molecolare, MM-GBSA e coarse-graining, e l'utilizzo dei software principali (Frodock, AmberTools, GROMACS, Autodock VINA, MDAnalysis). Il linguaggio è appropriato e corretto, anche se potrebbe mancare di specificità tecnica in alcuni casi. Lo studente potrebbe avere difficoltà a collegare concetti tra diverse parti del corso o ad applicare le conoscenze a situazioni nuove.
Inglese	The final evaluation will consist of an oral test in which knowledge of the concepts and workflows presented in the course will be verified: The evaluation scheme is as follows: 18-21: The student demonstrates a basic understanding of the fundamental concepts of the course, including simulation workflows for protein-protein and protein-ligand complexes, molecular dynamics techniques, MM-GBSA and coarse-graining, and the use of the main software (Frodock, AmberTools, GROMACS, Autodock VINA, MDAnalysis). The language is appropriate and correct, although it may lack technical specificity in some cases. The student may have difficulty connecting concepts between different parts of the course or applying knowledge to new situations.

Testi adottati

Italiano	
Inglese	

Bibliografia di riferimento

Italiano	Abraham, M. J. et al. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers. SoftwareX 1 – 2, 19 – 25 (2015). Case, D. A. et al. The Amber biomolecular simulation programs. J Comput Chem 26, 1668 – 1688 (2005). Salomon-Ferrer, R., Case, D. A. & Walker, R. C. An overview of the Amber biomolecular
Inglese	Abraham, M. J. et al. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers. SoftwareX 1 – 2, 19 – 25 (2015). Case, D. A. et al. The Amber biomolecular simulation programs. J Comput Chem 26, 1668 – 1688 (2005). Salomon-Ferrer, R., Case, D. A. & Walker, R. C. An overview of the Amber biomolecular

Modalità di svolgimento

☒ Modalità in presenza
☐ Modalità a distanza

Descrizione della modalità di svolgimento e metodi didattici adottati

Italiano	Vengono tenute lezioni pratiche 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 appieno la tecnica che viene 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	Practical frontal lessons are held on all the topics listed in the course programme. For each of the topics addressed, exercises are performed on the computers in the classroom, in the presence of the lecturer in order to fully understand the technique that is described during the lesson and the use of open-source programs that can be applied for the purpose. The lecturer is continuously confronting with the student during the course of the exercises in order to provide explanations or clarifications on technical or scientific aspects that have remained misunderstood.

Modalità di frequenza

○ Frequenza facoltativa
◉ Frequenza obbligatoria

Descrizione della modalità di frequenza

Italiano	Si richiede una frequenza assidua, allo scopo di far acquisire allo studente un linguaggio tecnico appropriato ed adeguate competenze di esecuzione delle metodiche di questo insegnamento.
Inglese	Attendance is mandatory in order to provide the student with an appropriate technical language and appropriate skills for performing the methods described in the course.