

DENOMINAZIONE INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

BIOINFORMATICA STRUTTURALE

STRUCTURAL BIOINFORMATICS

INFORMAZIONI INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

A.A.	2026-2027	CdS	BIOINFORMATICA
Codice	8068246	Canale	unico
CFU	6	Lingua	Italiano

DOCENTE RESPONSABILE DELL'INSEGNAMENTO / ATTIVITÀ FORMATIVA

Mattia Falconi

CODOCENTE

Modulo:

OBIETTIVI FORMATIVI E RISULTATI DI APPRENDIMENTO ATTESI

Italiano	OBIETTIVI FORMATIVI: Si richiede alla studentessa e 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 alla studentessa e 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: Le studentesse e 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. AUTONOMIA DI GIUDIZIO: Le studentesse e gli studenti devono dimostrare la capacità di integrare le conoscenze strutturali e le tecniche simulative al fine di gestire la complessità molecolare e di formulare giudizi e di ipotizzare azioni per la loro risoluzione, sulla base di informazioni limitate o incomplete, includendo una riflessione sulle soggettività del giudizio dell'operatore o sui limiti della tecnica o del programma utilizzato per raggiungere lo scopo. ABILITÀ COMUNICATIVE: Le studentesse e gli studenti devono saper descrivere in modo chiaro e privo di ambiguità le tecniche di simulazione acquisite, devono utilizzare un linguaggio scientifico adeguato e consono alla materia impiegando termini specialistici e di chiara validità tecnico-scientifica. La capacità comunicativa si deve estendere alla possibilità d'interlocuzione con specialisti o non specialisti del settore.
-----------------	--

	CAPACITÀ DI APPRENDIMENTO: Le studentesse e gli studenti devono sviluppare una capacità di apprendimento, basata sulla comprensione delle tecniche di base, che consenta loro uno studio autonomo di avanzate metodiche di simulazione elaborate nel settore e continuamente emergenti nel panorama della bioinformatica strutturale.
English	LEARNING OUTCOMES: <i>Students are 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.</i> KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: <i>Students are 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.</i> APPLYING KNOWLEDGE AND UNDERSTANDING: <i>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.</i> MAKING JUDGEMENTS: <i>Students must demonstrate the ability to integrate structural knowledge and simulation techniques in order to manage molecular complexity and formulate judgments and hypothesize actions for their resolution, based on limited or incomplete information, including a reflection on the subjectivity of judgment of the operator or on the limits of the technique or program used to achieve the purpose.</i> COMMUNICATION SKILLS: <i>Students must be able to describe in a clear and unambiguous way the simulation techniques acquired, they must use a scientific language that is adequate and appropriate to the subject, using specialized terms of clear technical and scientific validity. The communicative ability must extend to the possibility of interlocution with specialists or non-specialists in the sector.</i> LEARNING SKILLS: <i>Students must develop a learning ability, based on an understanding of basic techniques, which enables them to independently study advanced simulation methods developed in the field and continually emerging in the panorama of structural bioinformatics.</i>

PREREQUISITI

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

PROGRAMMA E CRONOPROGRAMMA

Italiano	Il corso fornisce alle studentesse e agli studenti 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), file pdf delle lezioni da 1 a 4.
----------	---

	- 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, modelli LLM, AlphaFold3 e le altre metodologie IA; 18 ore (di cui 8 ore di esercitazioni), file pdf delle lezioni da 5 a 15. - Si affrontano poi i metodi di predizione delle interazioni tra le molecole e le macromolecole: il drug design, le metodologie di docking molecolare e di virtual screening; 10 ore (di cui 4 ore di esercitazioni), file pdf delle lezioni da 16 a 19. - Infine, si affronta la trattazione energetica e dinamica delle macromolecole: la meccanica molecolare ed i metodi di minimizzazione dell'energia; la dinamica molecolare classica e i metodi di campionamento conformazionale avanzato; i programmi di dinamica molecolare classica; 12 ore (di cui 4 di esercitazioni), file pdf delle lezioni da 20 a 24. Il corso prevede 9 esercitazioni pratiche in ambiente Linux: 1) Banche dati delle macromolecole; 2) Uso del programma di grafica molecolare PYMOL; 3) Uso del programma di grafica molecolare CHIMERA; 4) L'allineamento strutturale di proteine attraverso il programma CHIMERA; 5) La modellazione per omologia attraverso i programmi PyMol e PyMod3; 6) Il docking molecolare proteina-proteina attraverso il programma HEX; 7) Il docking molecolare proteina-ligando attraverso il programma AutoDock e un esempio di virtual screening eseguito attraverso il programma AutoDock; 8) Uso del programma di grafica molecolare VMD; 9) Uso del programma di dinamica molecolare classica GROMACS, generazione della traiettoria e strumenti di analisi.
English	<i>The course provides students with a theoretical and practical overview of the calculation methodologies currently in use for the study of biological macromolecules.</i> <i>- 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), pdf file of lessons 1 to 4.</i> <i>- 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, LLM models, AlphaFold3 and other AI methodologies; 18 hours (of which 8 hours of exercises), pdf file of lessons 5 to 15.</i> <i>- Methods of predicting interactions between molecules and macromolecules are then addressed: drug design, molecular docking and virtual screening methodologies; 10 hours (of which 6 hours of exercises), pdf file of lessons 16 to 19.</i> <i>- Finally, the energy and dynamic treatment of macromolecules is addressed: molecular mechanics and energy minimization methods; classical molecular dynamics and advanced conformational sampling methods; classical molecular dynamics programs; 12 hours (of which 4 of exercises), pdf file of lessons 20 to 24.</i> <i>The course includes 9 practical exercises in a Linux environment: 1) Macromolecule databases; 2) Use of the molecular graphics program PYMOL; 3) Use of the molecular graphics program CHIMERA; 4) Structural alignment of proteins using the CHIMERA program; 5) Homology modeling using the PyMol and PyMod3 programs; 6) Protein-protein molecular docking using the HEX program; 7) Protein-ligand molecular docking using the AutoDock program and an example of virtual screening performed using the AutoDock program; 8) Use of the molecular graphics program VMD; 9) Use of the classical molecular dynamics program GROMACS, trajectory generation and analysis tools.</i>

TESTI ADOTTATI E BIBLIOGRAFIA DI RIFERIMENTO

Italiano	Bioinformatica, dalla Sequenza alla Struttura delle Proteine. S.Pascarella, A.Paiardini. Ed. Zanichelli. Sulla piattaforma Microsoft Teams sono disponibili, elencati lezione per lezione e con lo stesso titolo della lezione, i file PDF e il materiale delle esercitazioni che documentano dettagliatamente gli argomenti trattati in aula.
English	<i>Bioinformatics, from sequence to protein structure. S. Pascarella, A.Paiardini. Zanichelli Ed.</i>

	<i>On the Microsoft Teams platform, PDF files and exercise materials are available, listed lesson by lesson and with the same title as the lesson, which document in detail the topics covered in class.</i>
--	--

s

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI SVOLGIMENTO E METODI DIDATTICI ADOTTATI

☒ In presenza ☐ A distanza

Italiano	Lezioni frontali in aula integrate da esperienze di utilizzo dei programmi di rappresentazione e analisi molecolare (6 CFU).
<i>English</i>	<i>Classroom lectures integrated with experiences in the use of molecular graphics and analysis programs (6 CFU).</i>

MODALITÀ DI FREQUENZA

☐ frequenza obbligatoria ☒ frequenza facoltativa

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ DI FREQUENZA

Italiano	Le lezioni frontali e le esercitazioni al calcolatore sono tenute in aula. Si consiglia vivamente la frequenza.
<i>English</i>	<i>Lectures and computer exercises are held in the classroom. Attendance is strongly recommended.</i>

MODALITÀ DI VALUTAZIONE

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

COMPOSIZIONE DELLA COMMISSIONE VALUTATRICE

Mattia Falconi, Federico Iacovelli

DESCRIZIONE DELLE MODALITÀ E DEI CRITERI DI VERIFICA DELL'APPRENDIMENTO

Italiano	È previsto un esame orale alla fine del corso, della durata di circa mezz'ora, 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 della studentessa e dello studente di collegare le varie metodiche studiate, dimostrando una comprensione integrata e interconnessa dei contenuti del corso. Inoltre, e studentesse e 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 la studentessa o lo studente e gli esaminatori che servirà a valutare la capacità della studentessa o 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 della studentessa o dello studente, ma anche la sua capacità di applicare le conoscenze in contesti pratici e di pensare in modo critico e analitico. I criteri di Valutazione saranno corrispondenti a quanto richiesto dai Descrittori di Dublino: 1. Conoscenza e Comprensione (Descrittore di Dublino 1): - Valutazione della comprensione della studentessa e dello studente dei concetti e delle teorie fondamentali trattate nel corso. - Capacità di spiegare e descrivere dettagliatamente i principali argomenti del corso. 2. Applicazione della Conoscenza (Descrittore di Dublino 2): - Capacità di applicare conoscenze teoriche a situazioni pratiche e casi di studio. - Utilizzo di esempi concreti per dimostrare la comprensione. 3. Pensiero Critico e Analisi (Descrittore di Dublino 3): - Dimostrazione di pensiero critico attraverso l'analisi e la valutazione dei concetti discussi. - Capacità di identificare e discutere diverse prospettive e controargomentazioni. 4. Capacità Comunicative (Descrittore di Dublino 4): - Chiarezza e coerenza nella comunicazione orale durante l'esame. - Utilizzo efficace della terminologia tecnica e del linguaggio pertinente alla materia. 5. Capacità di Apprendimento (Descrittore di Dublino 5): - Riflessione sul processo di apprendimento e autovalutazione delle prestazioni. - Dimostrazione di apprendimento indipendente e capacità di sintetizzare informazioni da varie fonti. Modalità di graduazione del voto per esame orale: Non idoneo: importanti carenze e/o inaccuratezze nella conoscenza e comprensione degli argomenti; limitate capacità di analisi e sintesi, frequenti generalizzazioni e limitate capacità critiche e di giudizio, gli argomenti sono esposti in modo non coerente e con linguaggio inappropriato. 18-21, la studentessa o lo studente ha acquisito i concetti di base della disciplina, modo di esprimersi e linguaggio complessivamente corretti e appropriati. 22-25, la studentessa o 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 discorso. Il linguaggio è appropriato e corretto. 26-29, la studentessa o lo studente possiede un bagaglio di conoscenze completo e ben strutturato. È in grado di applicare e rielaborare in maniera autonoma, senza alcun errore, le conoscenze acquisite. Evidenzia ricchezza di riferimenti e capacità logico-analitiche con un linguaggio fluido, appropriato e vario. 30 e 30 e lode, la studentessa o lo studente possiede un bagaglio di conoscenze completo e approfondito. Sa applicare conoscenze a casi e problemi complessi ed estenderle a situazioni nuove. I riferimenti culturali sono ricchi e aggiornati. Si esprime con brillante proprietà di linguaggio. Il trattamento didattico e valutativo, comprensivo degli esami, è lo stesso per le studentesse e gli studenti frequentanti e non frequentanti.
English	<i>An oral exam is at the end of the course, lasting about half an hour, 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.</i> <i>The Evaluation criteria will correspond to what is required by the Dublin Descriptors:</i> 1. Knowledge and Understanding (Dublin Descriptor 1):



	- Evaluation of the student's understanding of the fundamental concepts and theories covered in the course. - Ability to explain and describe in detail the main topics of the course. 2. Application of Knowledge (Dublin Descriptor 2): - Ability to apply theoretical knowledge to practical situations and case studies. - Using concrete examples to demonstrate understanding. 3. Critical Thinking and Analysis (Dublin Descriptor 3): - Demonstration of critical thinking through analysis and evaluation of the concepts discussed. - Ability to identify and discuss different perspectives and counterarguments. 4. Communication Skills (Dublin 4 Descriptor): - Clarity and coherence in oral communication during the exam. - Effective use of technical terminology and language relevant to the subject. 5. Learning Capacity (Dublin Descriptor 5): - Reflection on the learning process and self-evaluation of performance. - Demonstration of independent learning and ability to synthesize information from various sources. Mark graduation method for oral exam: Not suitable: significant deficiencies and/or inaccuracies in knowledge and understanding of the topics; limited analysis and synthesis skills; frequent generalizations and limited critical and judgmental skills; the topics are presented inconsistently and with inappropriate language. 18-21, the student has acquired the basic concepts of the discipline, way of expressing himself and language that are overall correct and appropriate. 22-25, the student has acquired the basic concepts of the discipline in depth and makes connections between the various subjects. It presents linearity in the structuring of the discourse. The language is appropriate and correct. 26-29, the student has a complete and well-structured set of knowledge. The student can apply and rework the knowledge acquired autonomously, without any errors. It highlights a wealth of references and logical-analytical skills with fluid, appropriate and varied language. 30/30 cum laude, the student has a complete and in-depth wealth of knowledge. You know how to apply knowledge to complex cases and problems and extend it to new situations. The cultural references are rich and up-to-date. He expresses herself with brilliant mastery of language. The teaching and assessment process, including exams, is the same for both attending and non-attending students. 30 and 30 cum laude, the student has a complete and in-depth knowledge base, knows how to apply knowledge to complex cases and problems and extend it to new situations. The cultural references are rich and up-to-date and expresses himself with brilliant language properties. Failed: significant deficiencies and/or inaccuracies in knowledge and understanding of the topics; limited analysis and synthesis skills, frequent generalizations and limited critical and judgmental skills, the topics are presented in an inconsistent manner and with inappropriate language. There is no disparity in treatment between attending and non-attending students. The Evaluation results, discussed within the exam commission, are published in the appropriate class in Teams and rapidly verbalized in delphi.
--	--