

CORSO DI STUDIO: BIOINFORMATICA [8586] (LM)

ANNO ACCADEMICO 2023-2024

DENOMINAZIONE DELL'INSEGNAMENTO *MODELLISTICA MOLECOLARE [A002006]*

Principali informazioni sull'insegnamento	
Anno di corso	<i>Anno I</i>
Periodo di erogazione	<i>Il semestre (03-24/ 06-24)</i>
Crediti formativi universitari (CFU/ETCS):	6
SSD	<i>Bio/10-Biochimica (area 05/E1 General biochemistry and clinical biochemistry)</i>
Lingua di erogazione	<i>Italiano</i>
Modalità di frequenza	<i>In presenza obbligatoria (salvo motivate deroghe)</i>

Docente	
Nome e cognome	<i>Ciro Leonardo Pierri</i>
Indirizzo mail	<i>ciro.pierri@uniba.it</i>
Telefono	<i>0805443614</i>
Sede	<i>Dipartimento di Farmacia – Scienze del Farmaco</i>
Sede virtuale	<i>Incontri su Teams previo accordo</i>
Ricevimento	<i>Tutti i giorni, previo accordo via mail</i>

Organizzazione della didattica			
Ore			
Totali	Didattica frontale	Pratica (laboratorio, campo, esercitazione, altro)	Studio individuale
<i>150</i>	<i>24</i>	<i>36</i>	<i>90</i>
CFU/ETCS			
<i>6</i>	<i>3</i>	<i>3</i>	

Obiettivi formativi	<i>Gli obiettivi formativi del corso di modellistica prevedono l'acquisizione di competenze bioinformatiche per l'analisi di sequenze proteiche, l'interrogazione di database strutturali, la creazione di modelli comparativi 3D di proteine, l'analisi di interazioni proteina-ligando e la relativa misura dell'affinità di un ligando per le proteine modellate o scaricate dai database strutturali.</i>
Prerequisiti	<i>E' preferibile che gli studenti del corso abbiano una buona conoscenza della Biochimica. Inoltre, è anche preferibile che gli studenti conoscano sistemi operativi Linux e/o e linguaggi di scripting (python; perl; bash).</i>

<p>Metodi didattici</p>	<p><i>Il corso è strutturato in due parti di cui la prima è erogata mediante didattica frontale in cui gli studenti acquisiscono le nuove conoscenze circa l'esistenza di strumenti per le analisi di modellistica, mentre la seconda è erogata mediante esercitazioni in aula in cui gli studenti utilizzano gli strumenti mostrati durante le lezioni frontali. Alla fine del corso sarà cura dello studente predisporre un elaborato nella forma di un articolo scientifico da discutere in sede d'esame anche mediante la preparazione di una presentazione power-point.</i></p>
<p>Risultati di apprendimento previsti</p> <p><i>Da indicare per ciascun Descrittore di Dublino (DD=</i></p> <p>DD1 Conoscenza e capacità di comprensione</p> <p>DD2 Conoscenza e capacità di comprensione applicate</p> <p>DD3-5 Competenze trasversali</p>	<p><i>Alla fine del corso gli studenti avranno le basi per porre domande biologiche cui si possa trovare risposta mediante l'impiego delle conoscenze acquisite. In particolare, gli studenti potranno impostare ed eseguire analisi strutturali di proteine da utilizzare in vari ambiti applicativi, dalla caratterizzazione funzionale, alla regolazione della funzione, dall'identificazione di inibitori della funzione, allo studio delle variazioni conformazionali e delle interazioni tra macromolecole biologiche.</i></p> <ul style="list-style-type: none"> - Descrittore di Dublino 1: <i>Acquisizione di conoscenze avanzate nell'ambito dell'ingegneria proteica e modellistica delle macromolecole biologiche</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ Gestione di database di strutture; ○ Teoria alla base dell'analisi comparativa di famiglie proteiche; ○ Teoria alla base della creazione di modelli proteici; ○ Teoria alla base delle analisi di interazione tra macromolecole biologiche. - Descrittore di Dublino 2: <i>Utilizzazione di metodologie e piattaforme tecnologiche specifiche (bioinformatica, modellistica molecolare ingegneria proteica e metabolica) per l'identificazione e la modificazione di bersagli molecolari di interesse farmacologico e biotecnologico.</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ Programmi per l'editing di file di sequenze e di file di strutture di macromolecole biologiche (text editor e blastp) ○ Programmi per l'analisi comparativa di sequenze (JalView/ClustalW/Bioedit) ○ Programmi per l'analisi e la creazione di modelli proteici (PyMOL; SPDBV; Chimera) ○ Programmi per lo studio di interazioni tra macromolecole e/o con piccole molecole (SwissDOCK; Autodock; GramMX) ○ Programmi per l'analisi di dinamica molecolare (NAMD) - Descrittore di Dublino 3: <i>Alla fine del corso gli studenti sono tenuti a preparare un elaborato nella forma di articolo scientifico in cui riporteranno una introduzione sullo stato dell'arte della problematica affrontata (la domanda biologica), i metodi impiegati per trovare la risposta alla domanda biologica, i risultati delle loro analisi e una discussione in cui interpreteranno i risultati ottenuti. Allo stesso tempo prepareranno una presentazione con slides che riassumano quanto riportato nell'elaborato. In questo modo è atteso che gli studenti sviluppino capacità critiche e di giudizio nonché la capacità di raccogliere ed interpretare i dati nel campo delle analisi strutturali.</i>

	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Autonomia di giudizio</i> Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di <ul style="list-style-type: none"> ○ Porre una domanda biologica cui rispondere con gli approcci di modellistica studiati; ○ Interpretare i risultati delle analisi condotte nel contesto della letteratura scientifica internazionale. - Descrittore di Dublino 4: <i>Mediante la preparazione dell'elaborato e della relativa presentazione ci si aspetta che gli studenti del corso saranno sufficientemente competenti per comunicare i risultati delle analisi condotte</i> • <i>Abilità comunicative</i> Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di <ul style="list-style-type: none"> ○ Scrivere un articolo scientifico; ○ Preparare una presentazione con slides che riassumano i risultati descritti nell'articolo - Descrittore di Dublino 5: <i>Le competenze tecniche e comunicative acquisite durante il corso permetteranno agli studenti di proseguire con le analisi strutturali che potranno essere applicate in diversi campi, dallo studio delle variazioni conformazionali a quello delle interazioni proteina-ligando, i cui analisi sono da analizzare e interpretare nel contesto della letteratura scientifica.</i> • <i>Capacità di apprendere in modo autonomo</i> Al termine dell'insegnamento lo/la studente/studentessa dovrà essere in grado di <ul style="list-style-type: none"> • Gestire programmi di modellistica molecolare per rispondere a domande biologiche ad-hoc; • Scrivere un articolo scientifico che riassume i risultati delle analisi condotte • Preparare una presentazione con slides che riassume quanto riportato nell'articolo
Contenuti di insegnamento (Programma)	<i>introduzione alla modellistica molecolare; cenni di bioinformatica; campionamento di sequenze su NCBI; editor di testo e di sequenze; campionamento di sequenze via blast e analisi comparativa per gruppi tassonomici; editor di sequenze (Jalview; Bioedit) per lo sviluppo di multi allineamenti tramite ClustalW; webservices per la predizione di struttura secondaria (psipred) e fold recognition (pgenthrader); webservices per 3D protein modeling; introduzione ad AlphaFold; Intelligenza Artificiale per la predizione della struttura; introduzione al modeling 3D manuale; SwissPDBViewer/PyMOL/VMD – Visualizzazione e mutagenesi in silico; SwissPDBViewer MODELLER – Creazione modelli 3D di proteine; SwissDOCK; Docking con SwissDOCK e Autodock per lo studio di interazioni proteina-ligando; Autodock per il virtual screening di librerie chimiche. Visualizzatori molecolari per lo studio di interazioni Proteina-Proteina, e Proteina-Acidi Nucleici. GRAMM-X per il modelling proteina-proteina; HNADOCK per il modelling tra acidi nucleici o proteina-acidi nucleici. FOLDX/PRODIGY per il calcolo della binding affinity tra macromolecole biologiche e/o tra macromolecole e small molecules. NAMD per le analisi di Dinamica Molecolare.</i>
Testi di riferimento	<i>I principi di biochimica di Lehninger; Textbook of structural biology; DeepView Manual https://spdbv.vital-it.ch/manual_guide.html; Autodock tutorials http://autodock.scripps.edu/faqs-help/tutorial;</i>
Note ai testi di riferimento	<i>Sono disponibili come supporto le presentazioni (powerpoint) delle lezioni.</i>
Materiali didattici	<i>Lezioni frontali; analisi computazionali con tutoraggio personale al PC durante le ore di lezione frontale e durante le esercitazioni</i>
Valutazione	
Modalità di verifica dell'apprendimento	Colloquio orale di circa 60 minuti con presentazione di un elaborato nella forma di un articolo scientifico e di una presentazione con diapositive che riassumano il contenuto dell'elaborato, relative a un progetto di modellistica molecolare sviluppato durante lo svolgimento del corso (applicazioni su famiglie proteiche di interesse).

<p>Criteri di valutazione</p>	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Conoscenza e capacità di comprensione:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ piena padronanza nell'individuare e applicare le tecniche di modellistica più opportune, tra quelle esaminate, per rispondere a vari quesiti biotecnologici • <i>Conoscenza e capacità di comprensione applicate:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ chiarezza e completezza nell'esposizione orale dei contenuti del programma • <i>Autonomia di giudizio:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ Chiarezza e completezza nella redazione delle relazioni sulle analisi computazionali portate avanti; • <i>Abilità comunicative:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ capacità di operare collegamenti con i contenuti di altri corsi; • <i>Capacità di apprendere:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ capacità di valutazione critica dei risultati delle procedure computazionali e di integrazione di tali risultati al fine di ottenere una visione completa dell'informazione funzionale ricavata dalle analisi strutturali e del suo utilizzo in un sistema complesso quale quello macromolecolare
<p>Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale</p>	<p><i>Valutazione della conoscenza degli strumenti computazionali e bioinformatici presentati durante il corso; valutazione delle capacità dello studente di porre una domanda biologica corretta e di usare gli strumenti acquisiti durante il corso per trovare una risposta alla domanda biologica prescelta</i></p>

<p>Altro</p>	

**COURSE OF STUDY: INDUSTRIAL AND PHARMACEUTICAL BIOTECHNOLOGIES [8587]
(LM)**
ACADEMIC YEAR 2022-2023
**ACADEMIC SUBJECT COMPUTATIONAL METHODS FOR THE DESIGN OF
RECOMBINANT MACROMOLECULES [A002080]**

General information	
Year of the course	2022-2023
Academic calendar (starting and ending date)	<i>II semestre (06-03-23-16-06-23)</i>
Credits (CFU/ETCS):	6
SSD	Bio/10-Biochemistry (05/E1-Biochemistry and Clinical Biochemistry)
Language	Italian
Mode of attendance	In presence

Professor/ Lecturer	
Name and Surname	Ciro Leonardo Pierri
E-mail	Ciro.pierri@uniba.it
Telephone	+390805443614
Department and address	Department of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences, Via E. Orabona, 4; University of Bari, Italy; Piano 1, palazzo di Farmacia, Campus.
Virtual room	<i>Meetings on Teams after prior email agreement</i>
Office Hours (and modalities: e.g., by appointment, on line, etc.)	<i>Everyday, after prior email agreement;</i>

Work schedule			
Hours			
Total	Lectures	Hands-on (laboratory, workshops, working groups, seminars, field trips)	Out-of-class study hours/ Self-study hours
150	24	36	90
CFU/ETCS			
6	3	3	

Learning Objectives	Utilization of specific methodologies and Hi-Tech platforms (bioinformatics, molecular modeling, protein and metabolic engineering) for the identification and modification of molecular targets of pharmacological and biotechnological interest. Graduates of the Study Program will be able to identify the central aspects of new problems and relate them to acquired schemes or propose innovative solutions using the knowledge acquired in the field of 3D modeling of biological macromolecules. Fundamental will be the ability for autonomous assessment of the complexity of experimental data and the correct interpretation of results, especially if they are limited or incomplete. Learning to deal with Molecular Dynamics Simulations.
Course prerequisites	A good knowledge of the Biochemistry; Preferential knowledge of "Linux-like" operating systems and scripting languages (Python, Perl, Bash).

Teaching strategy	Introduction to the molecular modeling and protein engineering; bioinformatics tools; sequence sampling on NCBI; text and sequence editors; management of genomic/proteomic databases; sequence sampling via BLAST and comparative analysis for taxonomic groups; GenSmart program for plasmid design; sequence
--------------------------	---

	<p>editors (Jalview, BioEdit) for multi-alignment development using ClustalW; web services for secondary structure prediction (PSIPRED) and fold recognition (pGenTHREADER); web services for 3D protein modeling; introduction to AlphaFold; introduction to manual 3D modeling; SwissPDBViewer/PyMOL/VMD - In silico visualization and mutagenesis; SwissPDBViewer MODELLER - Creation of 3D protein models; SwissDOCK; Docking with SwissDOCK and Autodock for protein-ligand interaction studies; Autodock for virtual screening of chemical libraries; molecular viewers for Protein-Protein and Protein-Nucleic Acid interactions. GRAMM-X for protein-protein modeling; HNADOCK for modeling nucleic acid or protein-nucleic acid interactions. FOLDX/PRODIGY for calculating binding affinity between biological macromolecules and/or between macromolecules and small molecules.</p>
<p>Expected learning outcomes in terms of</p>	
<p>Knowledge and understanding on:</p>	<ul style="list-style-type: none"> ○ Acquisition of advanced knowledge in the field of protein engineering and modeling of biological macromolecules.
<p>Applying knowledge and understanding on:</p>	<ul style="list-style-type: none"> ○ Utilization of specific methodologies and technological platforms (bioinformatics, molecular modeling, protein and metabolic engineering) for the identification and modification of molecular targets of pharmacological and biotechnological interest.
<p>Soft skills</p>	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Making informed judgments and choices</i> <ul style="list-style-type: none"> • Autonomy of judgment • Graduates of the Study Program will be able to identify the central aspects of new problems and relate them to acquired schemes or propose innovative solutions using the knowledge acquired in the field of 3D modeling of biological macromolecules. Fundamental will be the ability for autonomous assessment of the complexity of experimental data and the correct interpretation of results, especially if they are limited or incomplete. • Communication skills • Capacity for self-learning • Students attending the modeling course will have acquired sufficient skills to delve into research topics and current issues related to the industrial and environmental sectors through the consultation of both printed and electronic bibliographic material, as well as the ability to access and utilize structural databases.

Syllabus	
Content knowledge	Introduction to molecular modeling and protein engineering; bioinformatics tools; sequence sampling on NCBI; text and sequence editors; management of genomic/proteomic databases; sequence sampling via BLAST and comparative analysis for taxonomic groups; GenSmart program for plasmid design; sequence editors (Jalview, Bioedit) for the development of multiple alignments using ClustalW; web services for secondary structure prediction (PSIPRED) and fold recognition (pGenTHREADER); web services for 3D protein modeling; introduction to AlphaFold; introduction to manual 3D modeling; SwissPDBViewer/PyMOL/VMD - In silico visualization and mutagenesis; SwissPDBViewer MODELLER - Creation of 3D protein models; SwissDOCK; Docking with SwissDOCK and Autodock for protein-ligand interaction studies; Autodock for virtual screening of chemical libraries; molecular viewers for Protein-Protein and Protein-Nucleic Acid interactions. GRAMM-X for protein-protein modeling; HNADOCK for modeling nucleic acid or protein-nucleic acid interactions. FOLDX/PRODIGY for calculating binding affinity between biological macromolecules and/or between macromolecules and small molecules.
Texts and readings	Biochemistry principles of Lehninger; Textbook of structural biology; DeepView Manual https://spdbv.vital-it.ch/manual_guide.html ; Autodock tutorials http://autodock.scripps.edu/faqs-help/tutorial ;
Notes, additional materials	Slides of the lessons will be available as support.
Repository	Lessons, computational analysis with personal tutoring on the computer during the front lectures and practical exercises.

Assessment	
Assessment methods	An oral interview lasting approximately 60 minutes, including the presentation of a paper in the form of a scientific article and a slideshow summarizing the content of the paper. The presentation and article should focus on a molecular modeling project developed during the course, with applications on protein families of interest.
Assessment criteria	<ul style="list-style-type: none"> • Knowledge and understanding <ul style="list-style-type: none"> ○ applying the most appropriate modeling techniques, among those examined, to address various biotechnological questions. • Applying knowledge and understanding <ul style="list-style-type: none"> ○ Clarity and completeness in the oral presentation of program content. • Autonomy of judgment <ul style="list-style-type: none"> ○ Clarity and completeness in drafting reports on computational analyses conducted • Communicating knowledge and understanding <ul style="list-style-type: none"> ○ Ability to establish connections with the content of other courses • Communication skills <ul style="list-style-type: none"> ○ Ability to explain the content of the prepared manuscript and slides • Capacities to continue learning <ul style="list-style-type: none"> ○ Ability to critically evaluate the results of computational procedures and integrate them to obtain a comprehensive understanding of the functional information derived from structural analyses and its utilization in a complex system such as macromolecules.
Final exam and grading criteria	Evaluation of the student's knowledge of computational and bioinformatic tools presented during the course; assessment of the student's ability to formulate a correct biological question and utilize the acquired tools to find an answer to the chosen biological question.
Further information	.

<p>Criteri di valutazione</p>	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Conoscenza e capacità di comprensione:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ piena padronanza nell'individuare e applicare le tecniche di modellistica più opportune, tra quelle esaminate, per rispondere a vari quesiti biotecnologici • <i>Conoscenza e capacità di comprensione applicate:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ chiarezza e completezza nell'esposizione orale dei contenuti del programma • <i>Autonomia di giudizio:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ Chiarezza e completezza nella redazione delle relazioni sulle analisi computazionali portate avanti; • <i>Abilità comunicative:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ capacità di operare collegamenti con i contenuti di altri corsi; • <i>Capacità di apprendere:</i> <ul style="list-style-type: none"> ○ capacità di valutazione critica dei risultati delle procedure computazionali e di integrazione di tali risultati al fine di ottenere una visione completa dell'informazione funzionale ricavata dalle analisi strutturali e del suo utilizzo in un sistema complesso quale quello macromolecolare
<p>Criteri di misurazione dell'apprendimento e di attribuzione del voto finale</p>	<p><i>Valutazione della conoscenza degli strumenti computazionali e bioinformatici presentati durante il corso; valutazione delle capacità dello studente di porre una domanda biologica corretta e di usare gli strumenti acquisiti durante il corso per trovare una risposta alla domanda biologica prescelta</i></p>