

Metodi e modelli in Biofisica Computazionale (Lab)

A.A. 2023/24; SEMESTRE: secondo; CL: triennale, magistrale; NUMERO CFU: 3

DOCENTE: Attilio Vittorio VARGIU (vargiu@dsf.unica.it)

Il laboratorio vuole fornire una panoramica dei metodi contemporanei di biofisica molecolare computazionale, inclusi alcuni algoritmi di intelligenza artificiale.

Esso si articola in tre moduli:

M1 Introduzione alla struttura e alla dinamica delle proteine, delle loro interazioni reciproche e con altre biomolecole. Gli studenti familiarizzeranno con l'utilizzo di alcuni popolari programmi di visualizzazione di strutture e dinamiche di proteine e dei loro complessi con altre biomolecole.

M2 Introduzione alle tecniche di machine learning supervisionato (cluster analysis e principal component analysis) e non supervisionato (support vector machines e random forest). Per ogni argomento saranno presentati dei "case study" e verranno proposte alcune semplici esercitazioni pratiche da svolgere in aula.

M3 Introduzione al "docking molecolare", utilizzato per lo studio del legame tra biomolecole e proteine, e di ampia applicazione in tutti i processi di sviluppo razionale di nuovi farmaci. Verranno presentati i più utilizzati algoritmi di docking, per ognuno dei quali verranno presentati diversi "case study" durante la lezione. Infine, verrà svolta un'esercitazione pratica sull'utilizzo di un software di docking.

Ogni modulo consiste di una parte teorica introduttiva e di una parte pratica più sostanziale, la quale si svolgerà in ambiente Linux, utilizzando i principali comandi della shell (bash, zsh), il programma di docking basato sul deep-learning "GNINA", i programmi di visualizzazione di strutture molecolari e proteiche (Marvin, VMD) ed il linguaggio di programmazione Python per la parte pratica sul machine learning, svolta sulla piattaforma Google Colab. Non sono necessari prerequisiti specifici né di programmazione/machine learning, né di biologia.

MODALITA' DI SVOLGIMENTO PREVISTA:

Lezioni frontali e sessioni pratiche nel laboratorio di informatica.

TESTI DI RIFERIMENTO:

Selezione di capitoli di libri; slides e tutorials redatti dai docenti.

MODALITA' D'ESAME:

Prova pratica: applicazione dei metodi e programmi introdotti e utilizzati durante il corso (utilizzo di un programma di docking e/o un codice di machine-learning).