

## ΠΕΡΙΓΡΑΜΜΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

### (1) ΓΕΝΙΚΑ

<b>ΣΧΟΛΗ</b>	ΘΕΤΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ		
<b>ΤΜΗΜΑ</b>	ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ ΚΑΙ ΤΗΛΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ		
<b>ΕΠΙΠΕΔΟ ΣΠΟΥΔΩΝ</b>	ΜΕΤΑΠΤΥΧΙΑΚΟ		
<b>ΚΩΔΙΚΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ</b>	M103	<b>ΕΞΑΜΗΝΟ ΣΠΟΥΔΩΝ</b>	2
<b>ΤΙΤΛΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ</b>	Αλγόριθμοι στη Δομική Βιοπληροφορική		
<b>ΑΥΤΟΤΕΛΕΙΣ ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ ΔΡΑΣΤΗΡΙΟΤΗΤΕΣ</b> <i>σε περίπτωση που οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται σε διακριτά μέρη του μαθήματος π.χ. Διαλέξεις, Εργαστηριακές Ασκήσεις κ.λπ. Αν οι πιστωτικές μονάδες απονέμονται ενιαία για το σύνολο του μαθήματος αναγράψτε τις εβδομαδιαίες ώρες διδασκαλίας και το σύνολο των πιστωτικών μονάδων</i>	<b>ΕΒΔΟΜΑΔΙΑΙ ΕΣ ΩΡΕΣ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑ Σ</b>	<b>ΠΙΣΤΩΤΙΚ ΕΣ ΜΟΝΑΔΕ Σ</b>	
	4	6	
<i>Προσθέστε σειρές αν χρειαστεί. Η οργάνωση διδασκαλίας και οι διδακτικές μέθοδοι που χρησιμοποιούνται περιγράφονται αναλυτικά στο (δ).</i>			
<b>ΤΥΠΟΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ</b> <i>γενικού υποβάθρου, ειδικού υποβάθρου, ειδίκευσης γενικών γνώσεων, ανάπτυξης δεξιοτήτων</i>	Ειδίκευσης γενικών γνώσεων		
<b>ΠΡΟΑΠΑΙΤΟΥΜΕΝΑ ΜΑΘΗΜΑΤΑ:</b>			
<b>ΓΛΩΣΣΑ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ και ΕΞΕΤΑΣΕΩΝ:</b>	ΑΓΓΛΙΚΗ		
<b>ΤΟ ΜΑΘΗΜΑ ΠΡΟΣΦΕΡΕΤΑΙ ΣΕ ΦΟΙΤΗΤΕΣ ERASMUS</b>	ΝΑΙ		
<b>ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΗ ΣΕΛΙΔΑ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ (URL)</b>	<a href="https://eclass.uoa.gr/courses/D464/">https://eclass.uoa.gr/courses/D464/</a>		

### (2) ΜΑΘΗΣΙΑΚΑ ΑΠΟΤΕΛΕΣΜΑΤΑ

<p><b>Μαθησιακά Αποτελέσματα</b></p> <p><i>Περιγράφονται τα μαθησιακά αποτελέσματα του μαθήματος οι συγκεκριμένες γνώσεις, δεξιότητες και ικανότητες καταλλήλου επιπέδου που θα αποκτήσουν οι φοιτητές μετά την επιτυχή ολοκλήρωση του μαθήματος.</i></p> <p><i>Συμβουλευτείτε το Παράρτημα Α</i></p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● Περιγραφή του Επιπέδου των Μαθησιακών Αποτελεσμάτων για κάθε ένα κύκλο σπουδών σύμφωνα με το Πλαίσιο Προσόντων του Ευρωπαϊκού Χώρου Ανώτατης Εκπαίδευσης</li> <li>● Περιγραφικοί Δείκτες Επιπέδων 6, 7 &amp; 8 του Ευρωπαϊκού Πλαισίου Προσόντων Διά Βίου Μάθησης και το Παράρτημα Β</li> <li>● Περιληπτικός Οδηγός συγγραφής Μαθησιακών Αποτελεσμάτων</li> </ul>
<p>Το επίπεδο των Μαθησιακών Αποτελεσμάτων για τον εν λόγω κύκλο σπουδών σύμφωνα με το Πλαίσιο προσόντων του ΕΧΑΕ (<a href="https://modip.uoa.gr/fileadmin/depts/uoa.gr/modip/uploads/chrisima_entypa/Ethniko_plaisio_prosonton_kai_mathisiaka_apotelesmata.pdf">https://modip.uoa.gr/fileadmin/depts/uoa.gr/modip/uploads/chrisima_entypa/Ethniko_plaisio_prosonton_kai_mathisiaka_apotelesmata.pdf</a>) είναι το 8. Ειδικότερα μετά την παρακολούθηση του μαθήματος οι φοιτητές:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>● Διαθέτουν γνώσεις στα πλέον προχωρημένα όρια της εφαρμογής των Αλγορίθμων στο πεδίο της Δομικής Βιοπληροφορικής και στη διασύνδεσή του με άλλα πεδία.</li> <li>● Κατέχουν πλέον προχωρημένες και εξειδικευμένες δεξιότητες, συμπεριλαμβανομένης της σύνθεσης και της αξιολόγησης που απαιτούνται για την επίλυση κρίσιμων προβλημάτων στην έρευνα ή την καινοτομία και για τη διεύρυνση και τον επαναπροσδιορισμό των υφιστάμενων γνώσεων ή της υφιστάμενης επαγγελματικής πρακτικής. Η εφαρμογή των αλγορίθμων σε βιολογικά ζητήματα με εφαρμογές στην υγεία, όπως η αξιοποίηση μεθοδολογιών για την</li> </ul>

κατανόηση των σχέσεων δομής-δράσης πρωτεϊνικών στόχων που χρησιμοποιούνται για τον σχεδιασμό φαρμάκων και την αντιμετώπιση ασθενειών.

- Δύνανται να επιδείξουν ουσιαστικό κύρος, καινοτομία, αυτονομία, επιστημονική και επαγγελματική ακεραιότητα και σταθερή προσήλωση στη διαμόρφωση νέων ιδεών ή διαδικασιών στην πρωτοπορία πλαισίων εργασίας ή σπουδής, συμπεριλαμβανομένης της έρευνας. Οι φοιτητές είναι ικανοί να υλοποιούν ερευνητικές εργασίες, θέτοντας στόχους και εκπονώντας ένα στρατηγικό σχέδιο λειτουργώντας ανεξάρτητα και οργανώνοντας την πληροφορία που χειρίζονται μετατρέποντάς τη σε γνώση. Επίσης, αναπτύσσουν κριτική σκέψη και διευρύνουν το συνεργατικό πνεύμα λειτουργώντας ως μέλη μιας ομάδος.

### Γενικές Ικανότητες

Λαμβάνοντας υπόψη τις γενικές ικανότητες που πρέπει να έχει αποκτήσει ο πτυχιούχος (όπως αυτές αναγράφονται στο Παράρτημα Διπλώματος και παρατίθενται ακολούθως) σε ποια / ποιες από αυτές αποσκοπεί το μάθημα:

Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών, με τη χρήση και των απαραίτητων τεχνολογιών

Προσαρμογή σε νέες καταστάσεις

Λήψη αποφάσεων

Αυτόνομη εργασία

Ομαδική εργασία

Εργασία σε διεθνές περιβάλλον

Εργασία σε διεπιστημονικό περιβάλλον

Παράγωγή νέων ερευνητικών ιδεών

Σχεδιασμός και διαχείριση έργων

Σεβασμός στη διαφορετικότητα και στην πολυπολιτισμικότητα

Σεβασμός στο φυσικό περιβάλλον

Επίδειξη κοινωνικής, επαγγελματικής και ηθικής υπευθυνότητας και

ευαισθησίας σε θέματα φύλου

Άσκηση κριτικής και αυτοκριτικής

Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης

.....

Άλλες...

.....

Το μάθημα αποσκοπεί στα εξής:

- Αναζήτηση, ανάλυση και σύνθεση δεδομένων και πληροφοριών
- Προσαρμογή σε νέες καταστάσεις
- Λήψη αποφάσεων
- Αυτόνομη εργασία
- Ομαδική εργασία
- Εργασία σε διεπιστημονικό περιβάλλον
- Παράγωγή νέων ερευνητικών ιδεών
- Σχεδιασμός και διαχείριση έργων
- Σεβασμός στη διαφορετικότητα και στην πολυπολιτισμικότητα
- Άσκηση κριτικής και αυτοκριτικής

Προαγωγή της ελεύθερης, δημιουργικής και επαγωγικής σκέψης

### (3) ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΟ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

Η Δομική Βιοπληροφορική είναι ένα διεπιστημονικό πεδίο το οποίο εστιάζει στην αντιμετώπιση των προκλήσεων της σύγχρονης Βιολογίας σε κυτταρικό και μοριακό επίπεδο εφαρμόζοντας σύγχρονους αλγορίθμους. Η 3D δομή των βιολογικών μακρομορίων καθορίζει τη λειτουργία και την αλληλεπίδραση αυτών. Η έρευνα που διεξάγεται υποστηρίζει τον σχεδιασμό νέων φαρμάκων με βάση τη γεωμετρική δομή των μακρομοριακών στόχων και βελτιστοποιεί την απόδοση των ενζύμων που εμπλέκονται σε βιοτεχνολογικές διεργασίες. Θέματα που καλύπτει το μάθημα περιλαμβάνουν:

- Δυναμικό προγραμματισμό και εφαρμογές αυτού στην πρόβλεψη της τριδιάστατης δομής
- Η 3D γεωμετρία των πρωτεϊνών (μήκη δεσμών, γωνίες, τριτοταγής/τεταρτοταγής δομή)
- Περιστρεφόμενοι δεσμοί, μοριακά γραφικά, πρωτεϊνική βάση δεδομένων (PDB, βάση 3D δομών). Σύγκριση πρωτεϊνικών δομών: RMSD, γεωμετρικός κατακερματισμός, διαμορφομερή.
- Προσδιορισμός της τριδιάστατης δομής. Έμφαση δίδεται στον πυρηνικό μαγνητικό συντονισμό (NMR) με γεωμετρία αποστάσεων και κρυσταλλογραφία ακτίνων Χ με πειραματικά δεδομένα περίθλασης κρυστάλλων. Μέθοδοι όπως η κρυσταλλογραφική μικροσκοπία
- Σχεδιασμός φαρμάκων. In silico πρόσδεση μορίων, αναπαράσταση μοριακών επιφανειών
- Μηχανική μάθηση, σύγκριση και στοίχιση δομών, αναζήτηση με βάση την ομολογία
- Ολοκλήρωση ερευνητικών υποδομών (εθνικές και ευρωπαϊκές (ESFRI))

#### (4) ΔΙΔΑΚΤΙΚΕΣ και ΜΑΘΗΣΙΑΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ - ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ

<p><b>ΤΡΟΠΟΣ ΠΑΡΑΔΟΣΗΣ</b>  <i>Πρόσωπο με πρόσωπο, Εξ αποστάσεως εκπαίδευση κ.λπ.</i></p>	<p>Πρόσωπο με πρόσωπο</p> <p>Κατά τη διάρκεια της πανδημίας covid-19 αξιοποιήθηκαν οι δυνατότητες της εξ' αποστάσεως εκπαίδευσης που παρείχε το Τμήμα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών του ΕΚΠΑ.</p> <p>Σε όλες τις περιπτώσεις ο τρόπος παράδοσης είναι με powerpoint παρουσίαση, προβολή σύντομων βίντεο και χρήση του πίνακα</p>												
<p><b>ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΩΝ ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΑΣ ΚΑΙ ΕΠΙΚΟΙΝΩΝΙΩΝ</b>  <i>Χρήση Τ.Π.Ε. στη Διδασκαλία, στην Εργαστηριακή Εκπαίδευση, στην Επικοινωνία με τους φοιτητές</i></p>	<p>Πλατφόρμα τηλεδιάσκεψης, χρήση ηλεκτρονικού οπτικοακουστικού υλικού στις διαλέξεις, ηλεκτρονικό ταχυδρομείο. Στο <b>eclass</b> αναρτώνται σε ηλεκτρονική μορφή το υλικό των διαλέξεων και διαδικτυακές διευθύνσεις που παραπέμπουν σε επιπλέον υλικό και πληροφορίες, βίντεο που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την κατάρτιση των φοιτητών. Επίσης στον ίδιο δικτυακό τόπο αναρτώνται και οι ασκήσεις που δίδονται. Επιλεγμένα <b>βίντεο</b> των διαλέξεων αναρτώνται επίσης σε διαδικτυακή πλατφόρμα</p>												
<p><b>ΟΡΓΑΝΩΣΗ ΔΙΔΑΣΚΑΛΙΑΣ</b>  <i>Περιγράφονται αναλυτικά ο τρόπος και μέθοδοι διδασκαλίας.          Διαλέξεις, Σεμινάρια, Εργαστηριακή Άσκηση, Άσκηση Πεδίου, Μελέτη &amp; ανάλυση βιβλιογραφίας, Φροντιστήριο, Πρακτική (Τοποθέτηση), Κλινική Άσκηση, Καλλιτεχνικό Εργαστήριο, Διαδραστική διδασκαλία, Εκπαιδευτικές επισκέψεις, Εκπόνηση μελέτης (project), Συγγραφή εργασίας / εργασιών, Καλλιτεχνική δημιουργία, κ.λπ.</i></p> <p><i>Αναγράφονται οι ώρες μελέτης του φοιτητή για κάθε μαθησιακή δραστηριότητα καθώς και οι ώρες μη καθοδηγούμενης μελέτης σύμφωνα με τις αρχές του ECTS</i></p>	<table border="1" data-bbox="646 958 1300 1249"> <thead> <tr> <th><b>Δραστηριότητα</b></th> <th><b>Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</b></th> </tr> </thead> <tbody> <tr> <td>Διαλέξεις</td> <td>42 ώρες</td> </tr> <tr> <td>Σεμινάρια</td> <td>10 ώρες</td> </tr> <tr> <td>Ασκήσεις</td> <td>50 ώρες</td> </tr> <tr> <td>Εργασία</td> <td>48 ώρες</td> </tr> <tr> <td><b>Σύνολο Μαθήματος</b></td> <td><b>150 ώρες</b></td> </tr> </tbody> </table>	<b>Δραστηριότητα</b>	<b>Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</b>	Διαλέξεις	42 ώρες	Σεμινάρια	10 ώρες	Ασκήσεις	50 ώρες	Εργασία	48 ώρες	<b>Σύνολο Μαθήματος</b>	<b>150 ώρες</b>
<b>Δραστηριότητα</b>	<b>Φόρτος Εργασίας Εξαμήνου</b>												
Διαλέξεις	42 ώρες												
Σεμινάρια	10 ώρες												
Ασκήσεις	50 ώρες												
Εργασία	48 ώρες												
<b>Σύνολο Μαθήματος</b>	<b>150 ώρες</b>												
<p><b>ΑΞΙΟΛΟΓΗΣΗ ΦΟΙΤΗΤΩΝ</b>  <i>Περιγραφή της διαδικασίας αξιολόγησης</i></p> <p><i>Γλώσσα Αξιολόγησης, Μέθοδοι αξιολόγησης, Διαμορφωτική ή Συμπερασματική, Δοκιμασία Πολλαπλής Επιλογής, Ερωτήσεις Σύντομης Απάντησης, Ερωτήσεις Ανάπτυξης Δοκιμίων, Επίλυση Προβλημάτων, Γραπτή Εργασία, Έκθεση / Αναφορά, Προφορική Εξέταση, Δημόσια Παρουσίαση, Εργαστηριακή Εργασία, Κλινική Εξέταση Ασθενούς, Καλλιτεχνική Ερμηνεία, Άλλη / Άλλες</i></p> <p><i>Αναφέρονται ρητά προσδιορισμένα κριτήρια αξιολόγησης και εάν και που είναι προσβάσιμα από τους φοιτητές.</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Έως 4 ασκήσεις για την καλύτερη κατανόηση εννοιών που διδάσκονται στο μάθημα (50%).</li> <li>• Course project (Απαλλακτική) το οποίο περιλαμβάνει ένα μέρος υλοποίησης, προφορική παρουσίαση και τελική έκθεση (45%) από ομάδες 2-3 ατόμων.</li> <li>• 5% προφορική συμμετοχή στο μάθημα.</li> </ul> <p>Ο υπολογισμός του βαθμού της απαλλακτικής έχει ως εξής:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• 10% για την πρόοδο που σημειώνεται καθ' όλη τη διάρκεια του εξαμήνου και τις πλήρωση των υποχρεώσεων που προκύπτουν από το μάθημα,</li> <li>• 20% για την τελική παρουσίαση της απαλλακτικής εργασίας,</li> <li>• 15% από την παράδοση της έκθεσης που αφορά στην απαλλακτική εργασία.</li> </ul> <p>Για να διασφαλισθεί η επιτυχής ολοκλήρωση του μαθήματος οι φοιτητές θα πρέπει να περάσουν την βάση στις ασκήσεις και στην απαλλακτική.</p>												

--	--

## (5) ΣΥΝΙΣΤΩΜΕΝΗ-ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- Προτεινόμενη Βιβλιογραφία:

- Baxevanis & Ouellette. Practical Guide to the Analysis of Genes and Proteins. Wiley. Μετάφραση
- Bourne and Weissig, Structural Bioinformatics - collection of chapters
- Branden and Tooze, Introduction to Protein Structure. Ελληνική μετάφραση.
- Choset, Kavraki et al. Principles of Robot Motion: Theory, Algorithms, and Implementations.
- Durbin, Eddy, Krogh, Mitchison. Biological sequence analysis. Cambridge 1998. Μετάφραση 2016
- A.Lesk, Intro to bioinformatics, Introduction to Protein Architecture, Intro to protein science. Oxford
- B. Rupp. Biomolecular Crystallography: Principles, Practice, and Application to Structural Biology

- Συναφή επιστημονικά περιοδικά:

Bioinformatics / BMC Bioinformatics / BMC Structural Biology / Journal of Structural Bioinformatics  
Journal of Structural Biology / Current Protocols in Bioinformatics  
IEEE transactions on computational biology & bioinformatics