

Β' ΕΞΑΜΗΝΟ

1. Υπολογιστική Ανάλυση Ακολουθιών Βιομακρομορίων

Λιδάσκοντες: Ι. Αλμυράντης | Β. Προμπονάς

Μάθημα: Υποχρεωτικό

Εξάμηνο: Β'

Περιεχόμενο Μαθήματος:

- **Εισαγωγή :** Ακολουθίες Πρωτεϊνών και DNA
- **Μέθοδοι εύρεσης ομοιοτήτων σε ακολουθίες:** Ομολογία και ομοιότητα ακολουθιών και η σημασία τους, Οι αλγόριθμοι δυναμικού προγραμματισμού, Ολική στοίχιση (Global Alignment) και ο αλγόριθμος των Needleman και Wunsch, τοπική στοίχιση (Local Alignment) και ο αλγόριθμος των Smith και Waterman, Υπολογισμός της στατιστικής σημαντικότητας της στοίχισης, Οι πίνακες ομοιότητας και η σημασία τους, Οι ποινές για τα κενά, Ευρετικές μέθοδοι για αναζητήσεις ομοιοτήτων σε βάσεις δεδομένων (BLAST, FASTA κτλ).
- **Πολλαπλή στοίχιση ακολουθιών:** Πολυδιάστατοι αλγόριθμοι δυναμικού προγραμματισμού, Ευρετικές μέθοδοι πολλαπλής στοίχισης ακολουθιών (CLUSTAL, DIALIGN, MULTALIN κτλ), φυλογενετικά δέντρα και πολλαπλές στοιχίσεις
- **Χαρακτηρισμός μοτίβων και περιοδικοτήτων σε αλληλουχίες πρωτεϊνών και DNA**
- **Αλγόριθμοι πρόγνωσης στηριζόμενοι στην ακολουθία πρωτεϊνών και DNA:** Εμπειρικές στατιστικές μέθοδοι, Μέθοδοι ομαδοποίησης (Clustering), Νευρωνικά Δίκτυα, Hidden Markov Models, Γενετικοί αλγόριθμοι. Εφαρμογές των μεθόδων αυτών για:
 - Πρόγνωση δευτεροταγούς δομής πρωτεϊνών και RNA
 - Πρόγνωση διαμεμβρανικών τμημάτων πρωτεϊνών και προσανατολισμού τους
 - Εύρεση πιθανών γονιδίων σε ακολουθίες DNA
 - Πολλαπλές στοιχίσεις ακολουθιών με χρήση Hidden Markov Models (HMMER, SAM, HMM-Pro κτλ)
 - Κατάταξη ακολουθιών σε οικογένειες

2. Υπολογιστική Ανάλυση Δομών Βιομακρομορίων

Λιδάσκοντες: Σ. Χαμόδρακας | Η. Ηλιόπουλος | Μ. Βλάση | Ν. Παπανδρέου

Μάθημα: Υποχρεωτικό

Εξάμηνο: Β'

Περιεχόμενο Μαθήματος:

- Εισαγωγή - Οι δομές των βιομορίων - Μέθοδοι προσδιορισμού
- Αναγνώριση "διπλώματος" (fold recognition)
- Ταίριασμα (υπέρθεση) δομών στο χώρο

- Συγκριτική προτυποποίηση με ομολογία - "Υφανση"(Comparative homology modelling - threading)
- Προτυποποίηση (modelling) της πρωτεϊνικής στερεοδιάταξης με μοριακή μηχανική και δυναμική
- "Αγκυροβόληση" (docking) υποκαταστατών (ligands) σε πρωτεΐνες - Σχεδίαση φαρμάκων
- Δομική αναγνώριση ("αγκυροβόληση"- docking) πρωτεϊνών-πρωτεϊνών
- Μέθοδοι αξιολόγησης ποιότητας δομών - Μέθοδοι ελέγχου γεωμετρίας δομών

3. Γλώσσες Προγραμματισμού και Εργαλεία Λογισμικού στη Βιοπληροφορική - II

Λιδάσκοντες: Β. Προμπονάς

Μάθημα: Υποχρεωτικό

Εξάμηνο: Β΄

Περιεχόμενο Μαθήματος:

ΜΕΡΟΣ Ι ΓΛΩΣΣΑ JAVA

- Οργάνωση σε κλάσεις και αντικείμενα, Θεμελιώδεις κλάσεις Java, Applets και μικροεφαρμογές, Στοιχεία γραφικών και interfaces, Κατανεμημένοι υπολογισμοί, JavaBeans, Εφαρμογές της JAVA στην Βιοπληροφορική - Το πρόγραμμα BIOJAVA

ΜΕΡΟΣ II ΓΛΩΣΣΑ PERL

- Βαθμωτά δεδομένα (scalars), λίστες, πίνακες, συμβολοσειρές. Δομές ελέγχου. Υποπρογράμματα και πέρασμα παραμέτρων. Ευρετήρια (hashes). Είσοδος/έξοδος. Διαχείριση κανονικών εκφράσεων (regular expressions), Αναζήτηση και ταύτιση προτύπων (pattern matching), Εφαρμογές της PERL στην Βιοπληροφορική - Το πρόγραμμα BIOPERL

4. Μοριακή Αναγνώριση - Μοριακές Ασθένειες - Δομικός Σχεδιασμός Φαρμάκων

Λιδάσκοντες: Σ. Χαμόδρακας | Η. Ηλιόπουλος | Μ. Βλάση | Β. Οικονομίδου | Γ. Γουλιέλμος | Ν. Παπανδρέου

Μάθημα: Υποχρεωτικό

Εξάμηνο: Β΄

Περιεχόμενο Μαθήματος:

- Δομικά στοιχεία βιομορίων: Διαστάσεις και περιβάλλον των βιομορίων,
- Αλληλεπιδράσεις μεταξύ βιομορίων: Κατηγορίες αλληλεπιδράσεων μεταξύ πρωτεϊνών, Κατηγορίες αλληλεπιδράσεων μεταξύ πρωτεϊνών και νουκλεϊνικών οξέων

- Μοριακή Αναγνώριση: Σταθερές σύνδεσης και αποχωρισμού, Ενέργεια σύνδεσης, Παράδειγμα Μοριακής Αναγνώρισης, Τρόποι σταθεροποίησης εγκλεισμένων ιοντικών φορτίων, Εντροπικοί όροι στην δημιουργία συμπλόκων, Βαθμοί Μοριακής Αναγνώρισης- Αναγνώριση Υψηλής Πιστότητας, Εξέλιξη και μοριακή αναγνώριση, Αλληλεπιδράσεις πρωτεϊνών και νουκλεϊνικών οξέων.
- **Ενεργειακή ανάλυση αλληλεπιδράσεων:** Μοριακή Μηχανική, Εισαγωγή στη μεθοδολογία του «απ' αρχής» διπλώματος της πρωτεΐνης, Η Εμπειρική συνάρτηση Δυναμικής Ενέργειας, Ελαχιστοποίηση της δυναμικής ενέργειας, Οι επιφάνειες δυναμικής ενέργειας, Ενθαλπία και Εντροπία., Μοριακή Δυναμική
- **Το δίπλωμα των πρωτεϊνών - Μοριακοί ακόλουθοι:** Νέες απόψεις για το δίπλωμα με ή χωρίς ενδιάμεσες καταστάσεις, Η σημασία της τοπολογίας του μορίου, Μοριακοί ακόλουθοι.
- **Βιολογικές Μεμβράνες και Μεμβρανικές Πρωτεΐνες:** Σύνθεση και δομή βιολογικών μεμβρανών, Μεμβρανικές πρωτεΐνες, Δομή μεμβρανικών πρωτεϊνών, Οικογένειες Μεμβρανικών Πρωτεϊνών,Κανάλια και υποδοχείς.
- **Η κυτταρική μετατόπιση των πρωτεϊνών:** Η λειτουργία του ενδοπλασματικού δικτύου, Αναγνώριση του στόχου και σηματοδότες προορισμού, Μετάθεση των πρωτεϊνών στα μιτοχόνδρια, τους χλωροπλάστες και στο πυρήνα.
- **Σχεδιασμός Φαρμάκων:** Μεθοδολογία, Σχεδιασμός φαρμάκων με βάση την δομή του στόχου, Προβλήματα - Αντίσταση των μολυσματικών ασθενειών και του καρκίνου στους θεραπευτικούς παράγοντες.
- **Χημική Μεταβίβαση Σήματος:** Συνήθεις μοριακοί μηχανισμοί για μεταβίβαση σημάτων, Ορμόνες, νευρομεταδότες, τοπικοί χημικοί μεσολαβητές, Μεταβίβαση σήματος στις μεμβράνες και το κυτόπλασμα, Στεροειδείς ορμόνες και οι υποδοχείς τους. Φερομόνες

5. Μεθοδολογία της Έρευνας

Διδάσκοντες: Σ. Χαμόδρακας | Λ. Μαργαρίτης | Ε. Μουδριανάκης | Γ. Ροδάκης | Η. Ηλιόπουλος | Γ. Γουλιέλμος

Μάθημα: Υποχρεωτικό

Εξάμηνο: Β΄

Περιεχόμενο Μαθήματος:

- Γενικά θέματα.
- Επιστήμες, Επιστημονικός κλάδος και επιστημονική έρευνα
- Βιολογική Έρευνα.
- Δεοντολογία και ηθική στην επιστημονική έρευνα και ειδικότερα στις Βιολογικές επιστήμες
- Βιοπληροφορική και ηθικά προβλήματα. Ο ρόλος του βιοπληροφορικού στα διάφορα στάδια της έρευνας.
- Πως γράφονται, αξιολογούνται και δημοσιεύονται τα αποτελέσματα μιας έρευνας στον επιστημονικό τύπο (περιοδικά, συνέδρια κ.λ.π).
- Επιλογή επιστημονικού περιοδικού (πηγές, πληροφορίες, οδηγίες προς συγγραφείς, σύστημα κριτών, αξιολόγηση των περιοδικών)
- Είδη άρθρων (ανασκόπηση, γράμματα κ.λπ.). Δομή μιας ερευνητικής εργασίας (περίληψη, εισαγωγή, υλικό και μέθοδος, αποτελέσματα, συζήτηση).
- Αξιολόγηση μιας εργασίας με το σύστημα κριτών. Πως απαντάμε στα σχόλια των κριτών.
- Εφαρμογές.