

## 1. Η πληροφορική στη μελέτη και προστασία της βιοποικιλότητας

**Διδάσκοντες:** Καθ. Α. Νικολαΐδου | Αναπλ. Καθ. Α. Λεγάκις | Επικ. Καθ. Π. Μεγαλοφώνου | Λεκτ. Α. Παρμακέλης

**Μάθημα:** Υποχρεωτικό

**Εξάμηνο:** Γ΄

**Περιεχόμενο Μαθήματος:**

- **Τα δεδομένα της βιοποικιλότητας:** μορφή, κατηγορίες, χρήση
- **Μέθοδοι για την ανάλυση της βιοποικιλότητας:** Βάσεις δεδομένων, Στατιστικές αναλύσεις, Χρονικές αναλύσεις, Χωρικές αναλύσεις, Μοντέλα, GIS
- **Εφαρμογές της πληροφορικής στη βιοποικιλότητα:** Συστηματική, βιογεωγραφία και εξέλιξη (Επιστημονική ονομασία και ταξινόμηση, Περιγραφή ειδών, κλειδες και φυλογενετικά δεδομένα, Δεδομένα δειγματοληψιών και παρατηρήσεων και κατανομή ειδών), Κατανομή των οργανισμών στο χώρο (Εφαρμογή λογισμικού για την ανάλυση χωροκρατικότητας, Συσχετίσεις πληθυσμών και οικολογικών παραγόντων, Στατιστική ανάλυση βιοκοινωνιών), Ανάλυση συμπεριφοράς, Διαχείριση βιολογικών συλλογών, Διαχείριση μεταδεδομένων, Οπτικοποίηση (visualization) των δεδομένων της βιοποικιλότητας, Δικτύωση γνώσης (knowledge networking) για τη βιοποικιλότητα, Εξόρυξη δεδομένων βιοποικιλότητας (data mining), Η χρήση των δεδομένων της βιοποικιλότητας από μη ειδικούς: ανάλυση αβεβαιότητας (uncertainty analysis), εξαγωγή συμπερασμάτων από ατελείς πληροφορίες (reasoning with incomplete information), δημιουργία αυτομάτων περιλήψεων (automatic summarization).

### ΜΑΘΗΜΑΤΑ ΕΠΙΛΟΓΗΣ

## 2. Ειδικά Θέματα Βιοπληροφορικής I: Δομές Δεδομένων - Βάσεις Δεδομένων - Σχεδιασμός Βάσεων Βιολογικών Δεδομένων

**Διδάσκοντες:** Λεκτ. Ηρ. Βαρλάμης | Λεκτ. Α. Μιχαήλ

**Μάθημα:** Επιλογής

**Εξάμηνο:** Γ΄

**Περιεχόμενο Μαθήματος:**

- **Δομές Δεδομένων:** Εισαγωγή. Η έννοια του Αφηρημένου Τύπου Δεδομένων (ΑΤΔ). Πίνακες, Εγγραφές, Σύνολα Συμβολοσειρές (strings). Στοιβες, Αναδρομή, Λίστες, Δένδρα, (δυναμικά δένδρα, δυναμικά δένδρα αναζήτησης), Ισοζυγισμένα δένδρα (AVL). Γράφοι (υλοποίηση, αλγόριθμοι). Αναζήτηση με μετασχηματισμό κλειδιού (hashing). Υλοποίηση των ΑΤΔ με μια γλώσσα αντικειμενοστραφούς προγραμματισμού (C++ ή JAVA).
- **Βάσεις Δεδομένων:** Εννοιολογική μοντελοποίηση βάσεων δεδομένων, Αρχιτεκτονική των συστημάτων Διαχείρισης Βάσεων Δεδομένων, Μοντέλα Δεδομένων (Ιεραρχικό, Δικτυακό, Σχεσιακό), Σχεσιακή αλγεβρα, Σχεσιακός λογισμός. Κανονικοποίηση Βάσεων Δεδομένων, Η Δομημένη Γλώσσα Ερωτήσεων (SQL), Προγραμματισμός συνθέτων queries σε SQL, Ερώτηση με χρήση παραδείγματος (QBE), Σύγχρονες τάσεις Βάσεων Δεδομένων (αντικειμενοστραφείς, κατανομημένες, πολυμέσα, χρονολογικές), Στοιχεία σχεδιασμού βάσεων δεδομένων.
- **Σχεδιασμός Βάσεων Βιολογικών Δεδομένων:** Εφαρμογές σε συγκεκριμένα παραδείγματα σχεδιασμού βάσεων βιολογικών δεδομένων.

## 3. Ειδικά Θέματα Βιοπληροφορικής II: Αρχιτεκτονική Εφαρμογών Διαδικτύου και Βιοπληροφορική

**Διδάσκων:** Δρ. Ι. Χαμόδρακας

**Μάθημα:** Επιλογής

**Εξάμηνο:** Γ΄

**Περιεχόμενο Μαθήματος:**

- **Αρχιτεκτονική Εφαρμογών στο διαδίκτυο:** Αρχιτεκτονική Client/Server και ο συσχετισμός της με το WWW, αρχιτεκτονικές πολλών στρωμάτων (n-tier), ο ρόλος του WEB Server, αρχιτεκτονική OSF DCE, αρχιτεκτονική DNA, αρχιτεκτονική WAP, WAP servers, Application Servers, ενδιάμεσο λογισμικό (middleware - corba, activeX, transaction servers, message passing, message queues).
- **Οικοδόμηση εφαρμογών:** Σχεδιασμός και μοντελοποίηση, πρωτοκόλλα και προγραμματισμός (Client Side Programming: HTML, DHTML, XML, scripting languages, Server Side Programming: JSP, ASP, CGI), πρόσβαση σε κληρονομημένα (legacy) συστήματα, επικοινωνία με βάσεις δεδομένων και συστήματα πολυμέσου, τρόποι και περιβάλλοντα υλοποίησης συναλλαγών (transactions).
- **Ασφάλεια εφαρμογών στο διαδίκτυο:** ασφάλεια πρόσβασης και διακίνησης της πληροφορίας, σύμμετρη και ασύμμετρη κρυπτογραφία, ψηφιακές υπογραφές, έμπιστες τρίτες οντότητες, Ψηφιακά πιστοποιητικά, το πρωτόκολλο X509.3, δομές PKI και PKIX, πιστοποίηση Servers και Clients, τα πρωτόκολλα SSL, TSL, S/MIME, PGP, IPSEC.
- **Υλοποίηση Εφαρμογών:** Εργαλεία ανάπτυξης, Ειδικές εφαρμογές σε συστήματα Βιοπληροφορικής.

#### **4. Ειδικά Θέματα Βιοπληροφορικής III: Πολύπλοκα Προσαρμοστικά Συστήματα**

Περισσότερες πληροφορίες για το συγκεκριμένο μάθημα μπορείτε να βρείτε στην εξής διεύθυνση : <http://users.softlab.ntua.gr/~brensham/CourseCAS/>

**Διδάσκουσα:** Αναπλ. Καθ. Ε. Τζαφέστα

**Μάθημα:** Επιλογής

**Εξάμηνο:** Γ΄

**Περιεχόμενο Μαθήματος:**

- **Εισαγωγή**
- **Συμπεριφορικά Μοντέλα:** Μοντέλα κίνησης, ελέγχου και ρύθμισης συμπεριφοράς πραγματικών και τεχνητών ζώων, Κινητηριακός έλεγχος, Προβλήματα και μοντέλα μάθησης (χωρική, συσχετιστική κλπ.)
- **Πληθυσμιακά Μοντέλα:** Οικολογικά μοντέλα, Μοντέλα κοινωνικών εντόμων, Μοντέλα κοπαδιών και ομάδων
- **Εξελικτικά Μοντέλα:**
  - A. Τεχνικές : Γενετικοί και εξελικτικοί αλγόριθμοι, Γενετικός προγραμματισμός, Εξέλιξη ιεραρχικών δομών και classifiers
  - B. Προβλήματα : Εξελικτικά φαινόμενα σε πληθυσμούς, Εξελικτικά σταθερές στρατηγικές, Το πρόβλημα της συνεργασίας, Δημιουργία ειδών, Συμβίωση και συμβιογένεση
- **Αναπτυξιακά Μοντέλα:** Μορφογένεση, γραμματικές παραγωγής και L-systems, Συστήματα αυθαιρέτων κανόνων ανάπτυξης
- **Μοριακά Μοντέλα:** Μοντελοποίηση μεταβολικών οδών και κυτταρικής ρύθμισης
- **Κυτταρικά Αυτόματα:** Μονοδιάστατα και διδιάστατα κυτταρικά αυτόματα, Αυτοαναπαραγόμενες μορφές, Προσαρμοστικές μορφές

- **Δυναμικά Συστήματα:** Θεμελιώδεις έννοιες, Περιγραφή συστημάτων και φαινομένων σε δυναμικά συστήματα, Στοιχεία ανάλυσης δυναμικών συστημάτων, Γραφικά κριτήρια, Ντετερμινιστικό χάος

## 5. Ειδικά Θέματα Βιοπληροφορικής IV: Ειδικά Θέματα Βιοπληροφορικής

Από το εαρινό εξάμηνο 2006-2007 στα πλαίσια του μαθήματος "Ειδικά Θέματα Βιοπληροφορικής" διδάσκεται το μάθημα "Τεχνολογίες Μικροσυστοιχιών και Εφαρμογές".

### Τεχνολογίες Μικροσυστοιχιών και Εφαρμογές

Διδάσκοντες: Επικ. Καθ. Ι. Π. Τρουγκάκος, | Λεκτ. Β. Προμπονάς | Δρ. Ι. Μιχαλόπουλος

**Μάθημα:** Επιλογής

**Εξάμηνο:** Γ΄

**Περιεχόμενο Μαθήματος:**

- **Εισαγωγή στην τεχνολογία των μικρο-συστοιχιών DNA:** Τύποι μικρο-συστοιχιών DNA (cDNA vs oligo arrays), τεχνολογίες παραγωγής μικρο-συστοιχιών DNA (printed/spotted vs on-site synthesis), τύποι πειραματικών διατάξεων (one dye vs two dye experiments), βιοϊατρικά ερωτήματα που μπορούν να προσεγγιστούν μέσω των μικρο-συστοιχιών DNA.
- **Εκτέλεση πειραμάτων I: Πειραματικός σχεδιασμός για μικρο-συστοιχίες DNA υψηλής πυκνότητας:** Εστίαση του πειραματικού σχεδιασμού στο βιολογικό πρόβλημα, το δόγμα γονιδιακής ομαδοποίησης, επαναλήψεις πειραμάτων και επαναληψιμότητα, πηγές θορύβου και βιολογικής ποικιλότητας.
- **Εκτέλεση πειραμάτων II: Από την προετοιμασία των δειγμάτων στην συλλογή των προτύπων γονιδιακής έκφρασης:** Προετοιμασία δειγμάτων, απομόνωση RNA και σήμανση, υβριδισμός του chip, σάρωση και ψηφιοποίηση του υβριδισμένου chip, εντοπισμός και απομόνωση κάθε spot (Gridding), κανονικοποίηση (Normalization / Data row), αντιστοίχιση (ένα spot - ένα γονίδιο / Gene Annotation), δημιουργία βάσεων για την ανάλυση των δεδομένων (datamart), πρότυπα γονιδιακής έκφρασης και γονιδιακή οντολογία (TMEV-4, Go-Miner), επιβεβαίωση δεδομένων γονιδιακής έκφρασης (validation) μέσω ποσοτικού Real-Time PCR, Μελλοντικές προοπτικές και τεχνολογικές προεκτάσεις.
- **Από τις μετρήσεις γονιδιακής έκφρασης μέσω μικρο-συστοιχιών DNA, στην ανάλυση δεδομένων:** Ποσοτικά μέτρα γονιδιακής έκφρασης, τεχνικές ανάλυσης εικόνας μικρο-συστοιχιών, αλγόριθμοι για την κανονικοποίηση-διαβάθμιση (scaling)-φιλτράρισμα, απομάκρυνση θορύβου, υπολογισμός σχετικής έκφρασης (fold change) και στατιστικής σημαντικότητας.
- **Διαφορές και ομοιότητες γονιδιακής έκφρασης:** Υπολογιστικές τεχνικές εκτίμησης διαφοράς/ομοιότητας της γονιδιακής έκφρασης: μέτρα γραμμικής συσχέτισης, εντροπία και αμοιβαία πληροφορία (mutual information), δυναμική προσέγγιση των δεδομένων γονιδιακής έκφρασης.
- **Τεχνικές εξόρυξης δεδομένων στη γονιδιωματική:** Έλεγχος ποιότητας, μετασχηματισμοί, σύνοψη και οπτικοποίηση δεδομένων, μείωση διαστάσεων, επιλογή και εξαγωγή χαρακτηριστικών. Τεχνικές μηχανικής μάθησης: μάθηση μετά και άνευ διδασκάλου, clustering, κατηγοριοποίηση, ανάλυση πρωτεουσών συνιστωσών (principal component analysis), ανάλυση παλινδρόμησης, Τεχνητά Νευρωνικά Δίκτυα, Self Optimizing Maps, Support Vector Machines.
- **Ολοκλήρωση δεδομένων από μικρο-συστοιχίες DNA με άλλες πηγές πληροφορίας:** Γενοτυπικά και Φαινοτυπικά δεδομένα, αλληλουχίες γονιδιωμάτων και λειτουργικός χαρακτηρισμός, Οντολογίες επικεντρωμένες στη βιολογία [Gene Ontology, EC Nomenclature]. Θεωρία δικτύων/γράφων και εφαρμογές σε δίκτυα γονιδίων/πρωτεϊνών. Συστημική Βιολογία (Systems Biology).
- **Πρότυπα μικρο-συστοιχιών DNA, βάσεις δεδομένων (MIAME-MGED) και σχετιζόμενες πηγές πληροφοριών:** Αναγκαιότητα καθορισμού προτύπων. Η κοινότητα των πειραματιστών μικρο-συστοιχιών (MGED) και οντολογία. Περιγραφή του προτύπου MIAME

(Minimum Information About a Microarray Experiment). Σχετικές διαδικτυακές πηγές. Το υπολογιστικό πακέτο Bioconductor.

- **Εφαρμογή μεθόδων βιοπληροφορικής στην ανάλυση δεδομένων από μικροσυστοιχίες που περιέχουν ολόκληρο το γονιδίωμα του ποντικού:** Απομόνωση και χαρακτηρισμός γονιδιακών υπογραφών διαφορετικής έκφρασης σε σύνδρομα πρόωμης γήρανσης που σχετίζονται με βλάβες στο DNA.
- **Εφαρμογές μικρο-συστοιχιών DNA που περιέχουν όλο το ανθρώπινο γονιδίωμα στη μελέτη βιοϊατρικών προβλημάτων:** Μοριακή καρκινογένεση και ανάπτυξη αντοχής σε χημειοθεραπευτικά φάρμακα, λειτουργική ανάλυση βιοδεικτών γήρανσης ή καρκινογένεσης σε ανθρώπινα καρκινικά κύτταρα.
- **Εφαρμογές μικρο-συστοιχιών στην πρωτεομική - Μικροσυστοιχίες πρωτεϊνών / Μικρο-συστοιχίες κυττάρων:** Τύποι μικρο-συστοιχιών, προετοιμασία δειγμάτων και υβριδισμός, τεχνολογικά προβλήματα, μελλοντικές προκλήσεις και κατευθύνσεις.
- **Προσομοίωση δικτύων βιοχημικών αντιδράσεων:** Εισαγωγή, Βιβλιοθήκες βιοχημικών μονοπατιών, Μεθοδολογίες για την in-silico απεικόνιση/περιγραφή βιοχημικών μονοπατιών, (SBML, CellML, BioPAX), Μαθηματικές μεθοδολογίες για την προσομοίωση βιοχημικών δικτύων αντιδράσεων, Μαθηματικές μεθοδολογίες της μεταβολικής μηχανικής (Ανάλυση Μεταβολικών Ροών, Ανάλυση Μεταβολικού Ελέγχου), Λογισμικό προσομοίωσης βιοχημικών δικτύων αντιδράσεων (Gepasi, Copasi, CellDesigner, Matlab), Η μελέτη του βιοσυνθετικού δικτύου αντιδράσεων του νευροδιαβιβαστικού γλουταμινικού οξέως σε εγκεφαλικό ιστό ποντικών, ως παράδειγμα για την ορθολογική μελέτη της ρύθμισης μεταβολικών διεργασιών και την ανάπτυξη συστημικών (systemic) προσεγγίσεων στο χώρο της βιοχημείας.

Για το εαρινό εξάμηνο 2003-2004, 2004-2005 και 2005-2006 στα πλαίσια του μαθήματος "Ειδικά Θέματα Βιοπληροφορικής" είχε διεξαχθεί το μάθημα "Αλγεβρικοί και Γεωμετρικοί Αλγόριθμοι στη Μοριακή Βιολογία" (<http://www.di.uoa.gr/~erga/AlgGewBio.html>). Το μάθημα θα γίνει σε συνδιδασκαλία με το προσφερόμενο από το Π.Μ.Σ του Τμήματος Πληροφορικής μάθημα "[Αλγεβρικοί και Γεωμετρικοί Αλγόριθμοι στη Μοριακή Βιολογία](#) (Π.Μ.Σ. 507)" με συντονιστή και διδάσκοντα τον Καθηγητή Ιωάννης Ζ. Εμίρη.

### Αλγεβρικοί και Γεωμετρικοί Αλγόριθμοι στη Μοριακή Βιολογία

**Διδάσκων:** Καθ. Ι. Εμίρης

**Μάθημα:** Επιλογής

**Εξάμηνο:** Γ΄

**Περιεχόμενο Μαθήματος:**

- Αλγόριθμοι, ασυμπτωτική πολυπλοκότητα και κλάσεις πολυπλοκότητας. Ταξινόμηση, αλγεβρικοί αλγόριθμοι.
- Επισκόπηση και περιοχές του γνωστικού αντικείμενου. Δομές δεδομένων. DNA, RNA και πρωτεΐνες.
- Αλληλουχίες, σύγκριση και ευθυγράμμιση αλληλουχιών. Δυναμικός προγραμματισμός. Πολυπλοκότητα.
- Ευθυγράμμιση με κενά κι επεκτάσεις. Μοντέλα Markov για ακολουθίες. Υπολογισμός δευτεροταγούς δομής.
- Γεωμετρία των Αποστάσεων: τριγωνική και τετραεδρική ανισότητα. Υπολογισμός τριτοταγούς δομής.
- Γραμμική άλγεβρα και βελτιστοποίηση.
- Μελέτη και επίλυση πολυωνυμικών συστημάτων
- Αναπαράσταση μοριακής επιφάνειας για πρόσδεση μορίου σε υποδοχέα.
- Υπολογισμός πρόσδεσης με: ένωση σφαιρών, τριγωνοποίηση Delaunay, επιφάνεια Connolly.