

DOTT. GABRIELE AUSIELLO

BIOINFORMATICA 6 CFU

SPECIALISTICA IN BIOINFORMATICA

PROGRAMMA

ITA: Elementi di programmazione in Ruby. Algoritmo di Programmazione dinamica per l'allineamento di due sequenze. Costruzione di matrici di sostituzioni.

ENG: Elements of programming in Ruby. Dynamic programming algorithm for the alignment of two sequences. Construction of Substitution Matrices.

Esame finale: PROVA PRATICA

Esoneri: SI, 2 PROVE PRATICHE

Risultati Apprendimento Attesi:

ITA: Capacita' di implementare in Ruby algoritmi per l'allineamento di sequenze biologiche.

ENG: Ability to implement in Ruby alignment algorithms for biological sequence.

CURRICULUM ITA

ATTIVITA' SCIENTIFICA

1992-1993

Svolge un anno di attività di ricerca, frequentando a tempo pieno il Centro degli Acidi Nucleici del CNR nel laboratorio di Paola Ballario e Patrizia Filetici dove lavora con tecniche di Biochimica e Biologia Molecolare alla caratterizzazione funzionale di proteine in *Saccharomyces Cerevisiae*.

1993-1996

Lavora alla tesi di laurea e coordina il lavoro di altri tesisti nel gruppo della prof. Manuela Helmer-Citterich presso il Dipartimento di Biologia dell'università di Roma "Tor Vergata". Si laurea in Scienze Biologiche presso l'università di Roma la Sapienza con 110 e Lode ed una tesi dal titolo: "Il riconoscimento molecolare: sviluppo di un metodo automatico per la ricostruzione di complessi proteici".

In particolare, sviluppa autonomamente un nuovo metodo di simulazione dell'interazione molecolare tra strutture proteiche che può essere applicato alla previsione del sito di interazione fra due proteine ed alla

ricostruzione di una struttura terziaria a partire da informazioni sui suoi elementi di struttura secondaria (Ausiello, 1997).

Un progetto sul riconoscimento molecolare basato sul metodo da lui sviluppato è stato oggetto di un finanziamento triennale per un Progetto Coordinato C.N.R. (partecipanti 3 gruppi universitari italiani, un gruppo C.N.R. italiano e un gruppo universitario straniero) nell'ambito del programma "Sviluppo di algoritmi innovativi per la simulazione dinamica e statica del riconoscimento molecolare".

In questo periodo ha una collaborazione all'estero, con il dr. Alfonso Valencia (CNB-CSIC, Madrid) in un lavoro in cui il riconoscimento molecolare è affrontato dal punto di vista delle mutazioni correlate in un allineamento multiplo di proteine con la stessa funzione (Pazos, 1997).

Queste due prime pubblicazioni sono segnalate in Medline come "of special interest" per valutazione proveniente da Current Opinion Journals, ed hanno rispettivamente 266 e 55 citazioni (fonte: ISI Web of Science in data 11/2012).

1997-1998

Come vincitore di una borsa di studio Telethon, intraprende un progetto di studio e analisi di superfici proteiche associate ad una funzione, coordinando nel gruppo della Prof. Manuela Helmer-Citterich il lavoro di due laureati. Crea un nuovo metodo che, in analogia al profilo calcolato da un allineamento multiplo di sequenze proteiche, definisce un profilo 3D in grado di identificare una funzione (per esempio di legame ad un nucleotide) sulla superficie di una proteina (De Rinaldis, 1998). Lo sviluppo di questo metodo viene finanziato dal Progetto Finalizzato Biotecnologie del C.N.R..

1998-1999

Impiegato per un anno presso la EDS Italia s.p.a. (multinazionale di servizi informatici) dove approfondisce la conoscenza di diverse metodologie informatiche.

2000-2001

Collabora con il Prof. Giovanni Cesareni allo sviluppo della banca dati MINT (Zanzoni, 2002), attualmente una delle più utilizzate banche dati di interazioni proteiche. Svolge una collaborazione all'estero, nell'ambito del progetto CEE "ELM Eukaryotic Linear Motifs" (Puntervoll, 2003) finanziato dalla Comunità Europea, con il Dott. Toby Gibson dell'EMBL. Collabora alla creazione ed al popolamento della banca dati di motivi funzionali eucariotici ELM, che è attualmente uno dei principali strumenti per l'annotazione funzionale di sequenze proteiche. Questi due lavori hanno rispettivamente 343 e 362 citazioni (fonte: ISI Web of Science in data 11/2012).

2001-2002

Svolge attività di ricerca come borsista Telethon nel gruppo della Prof. Manuela Helmer-Citterich, sia indipendentemente che coordinando e supervisionando il lavoro di tesisti e studenti di dottorato. Porta a termine lo sviluppo di una innovativa metodologia per il confronto locale di strutture proteiche, "Query3D" (Ausiello, 2005). Sull'utilizzo di questo metodo saranno basati numerosi lavori successivi (Ausiello, 2005b; Ferre', 2005; Ausiello, 2007; Zanzoni, 2007; Ausiello, 2009; Gherardini, 2010; Gherardini, 2010b; Parca, 2011; Parca, 2011b; Bianchi, 2012), e saranno presentati diversi progetti poi finanziati:

1) Progetto AIRC triennale 2001-2004 ("Specificity of recognition and/or interaction in phospho-proteins") per lo studio della specificità di interazione di fosfatasi e chinasi coi metodi del confronto delle superfici proteiche.

2) Progetto Telethon triennale 2001-2004 (n.GP0101Y01 "Multi-centre bioinformatic project for a systematic investigation of genes expressed in human skeletal muscle") dove il contributo del suo gruppo è basato sull'applicazione del metodo di confronto.

Nell'ambito di questo progetto riceve poi nel 2004 un premio di studio Telethon.

3) Partecipazione del gruppo al progetto FIRB 2001-2003 "Bioinformatica per la Genomica e la Proteomica".

Collabora al lavoro di costruzione di una banca dati di patches di superfici proteiche associate a funzione ed alla sua successiva applicazione alla predizione di funzione per proteine provenienti da progetti di "structural genomics" (Ferre', 2004; Ferre' 2005).

2002-2005

Frequenta il corso di dottorato in Biologia Cellulare e Molecolare, dell' Università di Roma "Tor Vergata", dottorandosi con una tesi dal titolo: "High-throughput exploration of functional residues in protein structures". Prosegue il suo lavoro nel campo della bioinformatica strutturale, creando una banca dati di informazioni funzionali sulle strutture a livello di singoli residui aminoacidici integrata con il metodo di ricerca di similarità sviluppato precedentemente (Ausiello, 2005b). A partire dal suo lavoro di dottorato verranno presentati diversi progetti poi finanziati:

1) Progetto Telethon biennale 2004-2006 n.GGP04273 "A bioinformatic approach for the identification of interactors of proteins involved in genetic diseases". Nell'ambito del quale riceve nuovamente un premio di studio Telethon nel 2005.

2) Progetto Airc triennale 2005-2008 "A structural approach for the analysis of recognition specificity in phospho-proteins"

3) Partecipazione del gruppo al progetto FIRB 2003-2007 "LIBI: Laboratorio Internazionale di BioInformatica"

2005-2007

Vincitore dell'assegno di ricerca biennale del Dipartimento di Biologia Evoluzionistica Sperimentale dell'Alma Mater Studiorum Università di Bologna per lo svolgimento di attività di collaborazione al progetto di ricerca: "LIBI: Laboratorio Internazionale di Bioinformatica". Nell'ambito di questa attività di ricerca si occupa di individuazione di casi di evoluzione convergente in siti funzionali di strutture proteiche (Ausiello, 2007) Segue e coordina il lavoro di ricerca di studenti di dottorato. Collabora alla progettazione e sviluppo di un nuovo metodo per l'identificazione di possibili interattori di domini SH3 (Ferraro, 2005; Ferraro, 2006; Ferraro, 2007).

2007-2008

Ha un contratto annuale di collaborazione con il Dipartimento di Scienze Biochimiche "A. Rossi Fanelli" dell'università di Roma "La Sapienza" per un progetto di ricerca della professoressa Anna Tramontano. Nell'ambito di questo progetto si occupa della identificazione automatizzata di nuovi motivi strutturali e funzionali a partire da un insieme di strutture proteiche con una funzione comune ma ignota (Ausiello, 2008). Lavora inoltre all'analisi di motivi funzionali presenti in strutture proteiche con differenti fold (Ausiello, 2009).

2008-2009

Prende servizio come Ricercatore non confermato nel settore disciplinare BIO/11 presso il Dipartimento di Biologia, Università di Roma "Tor Vergata". Prosegue l'analisi dei determinanti del riconoscimento molecolare che porta alla caratterizzazione della modularità dei siti di legame per i nucleotidi (Gherardini & Ausiello, 2010).

2009-2011

E' vincitore del finanziamento FIRB 2008 "FUTURO IN RICERCA" del MIUR come responsabile di una delle due Unità di Ricerca del Progetto quinquennale "Plant post-genomics: computational tools and analysis." finanziato per un totale di 600'000 EURO. Grazie al finanziamento avvia un gruppo di ricerca indipendente che si occupa di individuazione di siti di legame per il fosfato (Parca, 2011a; Parca 2011b) e di caratterizzazione di tasche di interazione per ligandi generici in strutture proteiche (Bianchi 2012).

2011 ad oggi

Diventa ricercatore confermato. Prosegue il lavoro sull'annotazione funzionale delle strutture proteiche, sviluppando un predittore di siti di legame per i Nucleotidi (Parca L, Gherardini PF, Truglio M, Mangone I, Ferrè F, Helmer-Citterich M, Ausiello G. Identification of nucleotide-binding sites in protein structures: a novel approach based on nucleotide modularity. PLOS ONE in press.). E' attualmente referee per numerose riviste tra le quali: Nucleic Acids Research, Bioinformatics, Proteins, BMC Bioinformatics, PLOS Computational Biology.

ATTIVITA' DIDATTICA

1993-2007

Svolge regolarmente attività di assistenza agli studenti nella stesura di tesi, sia per quanto riguarda la programmazione del lavoro che la successiva elaborazione e analisi dei risultati.

Svolge regolarmente attività di esercitazione sia sperimentale che teorica ed ha regolarmente fatto parte delle Commissioni d'esame in veste di cultore della materia nell'ambito dei seguenti corsi presso l'università di Roma "Tor Vergata":

AA1993-1997 "Laboratorio di Metodologie Genetiche" del corso di Laurea in "Scienze Biologiche"

AA2001-2002 "Bioinformatica" dei corsi di Laurea in "Biologia Cellulare e Molecolare", "Biologia Evolutiva ed Ecologia" e "Biotecnologie"

AA2002-2005 "Bioinformatica" dei corsi di Laurea Triennale in "Biologia Cellulare e Molecolare" e "Biologia Umana".

AA2005-2007 "Bioinformatica" dei corsi di Laurea Triennale in "Biologia Cellulare e Molecolare".

AA2003-2007 "Bioinformatica Molecolare" dei corsi di Laurea Specialistica in "Biologia Cellulare e Molecolare", "Biologia Umana" e "Bioinformatica".

AA 2004-2005

Svolge 1 CFU di lezioni nell'ambito del corso Bioinformatica Molecolare per i corsi di laurea Specialistica in "Biologia Cellulare e Molecolare", "Biologia Umana" e "Bioinformatica" presso l'università di Roma "Tor Vergata".

AA 2005-2008

Per 3 anni consecutivi ha l'affidamento tramite contratto retribuito del corso di Bioinformatica 3 CFU. Corso obbligatorio del 2° anno del corso di laurea triennale in Biologia Umana dell'università di Roma "Tor Vergata", frequentato regolarmente da 80 studenti.

Il livello di apprezzamento del suo corso da parte degli studenti è stato particolarmente elevato (media di 3,5 punti su 4 sui giudizi riguardanti l'insegnamento) così come rilevato dal "Nucleo di Valutazione di Ateneo". Sempre per questo corso ha preparato delle Dispense di supporto agli studenti.

Ottiene l'affidamento tramite contratto retribuito del corso di Complementi di Bioinformatica 1 CFU. Corso a scelta del 2' anno del corso di laurea triennale in Biologia Umana dell'università di Roma "Tor Vergata".

AA 2008 ad oggi

Ha l'affidamento del corso di Bioinformatica (4 CFU) nella laurea Magistrale in Bioinformatica (con l'esclusione dell' AA 2009-10 a causa dell'agitazione dei ricercatori per l'approvazione della legge Gelmini). E' tra i docenti della scuola di dottorato in "Biologia Cellulare e Molecolare" dell'università di Roma "Tor Vergata" e segue regolarmente e coordina il lavoro di diversi studenti del dottorato.

PUBBLICAZIONI

27) Parca L, Gherardini PF, Truglio M, Mangone I, Ferre' F, Helmer-Citterich M, Ausiello G. (2012). Identification of nucleotide-binding sites in protein structures: a novel approach based on nucleotide modularity. PLoS One, 7(11):e50240.

26) Giaco' L, Amicosante M, Fraziano M, Gherardini PF, Ausiello G, Helmer-Citterich M, Colizzi V, Cabibbo A. (2012). B-Pred, a structure based B-cell epitopes prediction server. Adv Appl Bioinform Chem, 5:11-21.

25) Bianchi V, Gherardini PF, Helmer-Citterich M, Ausiello G. (2012). Identification of binding pockets in protein structures using a knowledge-based potential derived from local structural similarities. BMC Bioinformatics, 13(Suppl 4):S17.

24) Palmeri A, Gherardini PF, Tsigankov P, Ausiello G, Späth GF, Zilberstein D, Helmer-Citterich M. (2011) PhosTryp: a phosphorylation sites predictor specific for parasitic protozoa of the family trypanosomatidae. BMC Genomics, 12:614.

- 23) Parca L, Mangone I, Gherardini PF, Ausiello G, Helmer-Citterich M (2011). Phosfinder: a web server for the identification of phosphate binding sites on protein structures. *Nucl. Acids Res.* 39(Web Server issue):W278-282. May 26. [Epub ahead of print].
- 22) Parca L, Gherardini PF, Helmer-Citterich M, Ausiello G (2010). Phosphate binding-sites identification in protein structures. *Nucl. Acids Res.*, 39(4):1231-1242.
- 21) Gherardini, PF, Ausiello, A, Helmer-Citterich, M. (2010). Superpose3D: a local structural comparison program that allows for user-defined structure representations. *PLoS One*, 5(8): e11988.
- 20) Gherardini, PF, Ausiello, G, Russell, RB, Helmer-Citterich, M (2010). Modular architecture of nucleotide binding pockets. *Nucl. Acids Res.*, 38: 3809-3816. [Epub 2010 Feb 25].
- 19) Ausiello, G., Gherardini, P.F., Gatti, E., Incani, O., Helmer-Citterich, M. (2009). Structural motifs recurring in different folds recognize the same ligand fragments. *BMC Bioinformatics*, 10:182.
- 18) Ausiello, G., Gherardini, P.F., Marcatili, P., Tramontano, A., Via, A., Helmer-Citterich, M. (2008). FunClust: A web server for the identification of structural motifs in a set of non-homologous protein structures. *BMC Bioinformatics*, 9,(Suppl. 2): S1.
- 17) Ferraro, E., Peluso, D., Via, A., Ausiello, G., Helmer-Citterich, M. (2007) SH3-Hunter: discovery of SH3 domain interaction sites in proteins. *Nucl. Acids Res.*, 35:W451-454.
- 16) Via, A., Peluso, D., Gherardini, P.F., de Rinaldis, E., Colombo, T., Ausiello, G., Helmer-Citterich, M. (2007) 3dLOGO: a web server for the identification, analysis and use of conserved protein substructures. *Nucl. Acids Res.*, 35:W416-419.
- 15) Ausiello, G., Peluso, D., Via, A., Helmer-Citterich, M. (2007). Local comparison of protein structures highlights cases of convergent evolution in analogous functional sites. *BMC Bioinformatics*, 8(Suppl.1): S24.

- 14) Via, A., Gherardini, P.F., Ferraro, E., Ausiello, G., Scalia Tomba, G. and Helmer-Citterich, M. (2007). False occurrences of functional motifs in protein sequences highlight evolutionary constraints. *BMC Bioinformatics*, 8:68.
- 13) Zanzoni, A., Ausiello, G., Via, A., Gherardini, P.F., Helmer-Citterich, M. (2007). Phospho3D: a database of three-dimensional structures of protein phosphorylation sites. *Nucl. Acids Res.*, 35:D229-D23.
- 12) Ferraro, E., Via, A., Ausiello, G., Helmer-Citterich, M. (2006) A novel structure-based encoding for machine-learning applied to the inference of SH3 domain specificity. *Bioinformatics*, 22:2333-2339.
- 11) Ferraro, E., Via, A., Ausiello, G., Helmer-Citterich, M. (2005). A neural strategy for the inference of SH3 domain-peptide interaction specificity. *BMC Bioinformatics*, 6(Suppl 4):S13.
- 10) Ausiello, G., Via, A., Helmer-Citterich, M. (2005). Query3d: a new method for high-throughput analysis of functional residues in protein structures. *BMC Bioinformatics*, 6(Suppl 4):S5.
- 9) Ferrè, F., Ausiello, G., Zanzoni, A., Helmer-Citterich, M. (2005). Functional annotation by identification of local surface similarities: a novel tool for structural genomics. *BMC Bioinformatics*, 6:19.
- 8) Ausiello, G., Zanzoni, A., Peluso, D., Via, A., Helmer-Citterich, M. (2005) pdbFun: Mass selection and fast comparison of annotated PDB residues. *Nucl.Acids Res.*, 33:133-137.
- 7) Ferrè, F., Ausiello, G., Zanzoni, A., Helmer-Citterich, M. (2004). SURFACE: a database of protein surface regions for functional annotation. *Nucl.Acids Res.*, 32, 240-244.
- 6) Ferrè, F., Via, A., Ausiello, G., Brannetti, B., Zanzoni, A., Helmer-Citterich, M. (2003). Development of computational tools for the inference of protein interaction specificity rules and functional annotation using structural information. *Comparative and Functional Genomics*, 4, 416-419.
- 5) Puntervoll, P., Linding, R., Gemuend, C., Chabanis-Davidson, S., Mattingsdal, M., Cameron, S., Martin, D.M.A., Ausiello, G., Brannetti, B., Costantini, A., Ferrè, F., Maselli, V., Via, A., Cesareni, G., Diella, F., Superti-

Furga, G., Wyrwicz, Ramu, C., McGuigan, C., Gudavalli, R., Letunic, I., Bork, P., Rychlewski, Kuester, B., Helmer-Citterich, M., Hunter, W.N., Aasland, R. and Gibson, T. (2003) ELM server: a new resource for investigating short functional sites in modular eukaryotic proteins. Nucl. Acids Res., 31: 3625-3630

4) Zanzoni, A., Montecchi-Palazzi, L., Quondam, M., Ausiello, G., Helmer-Citterich, M. and Cesareni, G. (2002). MINT: a Molecular INTERaction database. FEBS Letters.513, 135-140.

3) De Rinaldis, M., Ausiello, G., Cesareni, G. and Helmer Citterich, M. (1998) Three-dimensional profiles: a new tool to identify protein surface similarities. J.Mol.Biol., 284,1211-1221.

2) Pazos,F., Helmer Citterich,M., Ausiello,G. and Valencia,A. (1997).Protein docking with sequences. Correlated mutations contain information about protein-protein interaction. J.Mol.Biol., 271, 511-523.

1) Ausiello,G., Cesareni,G. and Helmer Citterich,M. (1997). ESCHER: a new docking procedure applied to the reconstruction of protein tertiary structure. Proteins, 28, 556-567.

CURRICULUM ENG

Personal information

Birth: October 28th, 1970, Rome, Italy Status: Married

Education

2005 - Ph.D. in Cellular and Molecular Biology, University of Rome "Tor Vergata"

Title of the PhD Thesis: High-throughput exploration of functional residues in protein structures.
Supervisor: Prof. Manuela Helmer-Citterich

1996 - Degree in Biology, University of Rome "La Sapienza"

Title of the Thesis: ESCHER: a new docking procedure applied to the reconstruction of protein tertiary structure. Supervisor: Prof. Manuela Helmer-Citterich

Current Position

Researcher BIO/11 in the Department of Biology of the University of Rome "Tor Vergata"

Previous Positions

2007-2008 Postdoc researcher in Bioinformatics, University of Rome "La sapienza"

2005-2007 Postdoc researcher in Bioinformatics, University of Bologna

2002-2005 PhD in Cellular and Molecular Biology, University of Rome "Tor Vergata"

2001- 2002 Telethon graduate fellow in Bioinformatics, University of Rome "Tor Vergata"

1996-1998 Graduate fellow under Prof. M. Helmer-Citterich, University of Rome "Tor Vergata"

General Research Interests

Structural Bioinformatics. Sequence analysis. Protein functional annotation. Protein structure comparison. Protein docking.

Current Lines of Research

Identification of phosphate binding sites in protein structures. Prediction of ligand binding sites in protein structures. Classification and identification of protein structural motifs.

Teaching

2005-now "Bioinformatics" for the degree in Human Biology at the University of Rome "Tor Vergata"

Memberships

2004-now Member of the BITS (Bioinformatics ITalian Society)

2002-now Member of the ISCB (International Society of Computational Biology)

Referee for

Bioinformatics, Proteins, BMC Bioinformatics, PLOS Computational Biology