

Marco Pasi

Adresse: BMSSI - Institut de Biologie et Chimie des Protéines
7, passage du Vercors - 69367 Lyon - FRANCE

Tel: +33 4 72 72 26 71

E-mail: marco.pasi@ibcp.fr

Web: <http://marcopasi.net>



Qualification CNU **sections 31 & 64.**

Expériences de Recherche et Education

- 2014 – **Chercheur** BMSSI Lyon, avec R. Lavery: dépendance en séquence de la **structure, mécanique, électrostatique et interactions de l'ADN** sur la base de MD à la microseconde.
- 2012 – 2014 **Enseignant-Chercheur** LCVMM EPFL Lausanne, avec J. H. Maddocks: **modélisation gros-grain de la mécanique de l'ADN** basée sur longues simulations MD.
- 2009 – 2012 **Chercheur** BMSSI Lyon avec K. Zakrzewska, R. Lavery: développement et paramétrisation d'un modèle gros-grain des **protéines** et du logiciel de simulation & analyse associé (CPython); étude des bases moléculaires de l'**énantiosélectivité des lipase** avec MD et métadynamique.
- 2006 – 2010 **Thèse Biotechnologie Industrielle** LMM, Université de Milano-Bicocca, avec Prof. L. De Gioia et Dr. E. Papaleo: étude des bases moléculaires de l'adaptation des **enzymes aux faibles températures** avec simulations MD et **analyse phylogénétique**.
- 2005 – 2006 **Mémoire Master 2** LMM, Université de Milano-Bicocca, avec Prof. L. De Gioia: Simulations moléculaires pour l'**étude comparatif d'enzymes homologues**.
- 1999 – 2006 **Licence et Master 1 et 2, Biotechnologie Industrielle** mention très bien, Université de Milano-Bicocca: spécialité **biochimie** et **bioinformatique**.

Intérêts de Recherche

- Propriétés mécaniques de protéines et ADN, relation entre mécanique, interactions faibles, électrostatique et fonction biologique;
- **interactions ADN-protéines** et ADN-médicament: mécanique et thermodynamique de la reconnaissance spécifique, rôle du solvant et des ions;
- Développement de **modèles simplifiés de la physique des protéines et de l'ADN**, et d'outils pour l'**analyse et la prédiction des interactions ADN-protéines**.

Activités d'enseignement - récapitulatif

- 2014 **Chargé de TD** *Mathématiques II* (14h) L1 Architecture, EPFL;
- 2013 – 2014 **Chargé de TD** *Analyse Avancée I* (56h) L1 Génie physique, EPFL;
- 2012 – 2013 **Chargé de TD** *Algèbre Linéaire I & II* (56h) L1 Génie chimique, EPFL;
- 2008 – 2009 **Chargé de TD** *Théorie des Systèmes Biologique* (20h) Master 2 en Bioinformatique, Université de Milano-Bicocca;

Publications - récapitulatif

- ▶ **12 articles** publiés dans des journaux internationaux à comité de lecture (rang A: NAR, JCTC, JPCB, FEBS, etc. 180 citations, h-index: 8), 1 article en préparation;
- ▶ **12 communications orales** dans séminaires et conférences internationales;
- ▶ **8 communications affichées** dans conférences internationales.

Compétences

- Chimie, modélisation moléculaire et bioinformatique
- ▶ Chimie physique numérique des **protéines** et de l'**ADN**;
 - ▶ Simulations de **dynamique moléculaire, énergie libre** (Métadynamique);
 - ▶ Analyse des **mouvements collectifs, modèles à sauts markoviens**;
 - ▶ Développement de **champs de force**, DFT (Gaussian);
 - ▶ Modélisation **Gros-grain** de protéines et ADN;
 - ▶ **Analyse de séquences** (BLAST, FASTA), **HMMs, phylogénétique** (Phylip), bases de données biologiques (Uniprot, PDB, SCOP, ENCODE);
 - ▶ Simulation moléculaire, analyse et visualisation: GROMACS, Amber, NAMD, MMTK, Chimera, PyMOL & VMD.
- Programmation et analyse de données
- ▶ 10+ années d'expérience en **programmation scientifique**: simulation moléculaire et visualisation, modélisation mathématique et développement d'algorithme, exploration de base de données biologique, analyse statistique et représentation graphique quantitative;
 - ▶ Courant en **Python** (numpy, pandas, scipy, CPython), **C, Fortran, C++**;
 - ▶ **MPI / OpenMP**: programmation extensible sur architectures HPC hybrides;
 - ▶ Analyse et visualisation de données: **Matlab, R, PyLab** et **Gnuplot**;
 - ▶ **PHP, HTML5, CSS3, JavaScript**: expérience en développement web;
- Langages
- italien**: langue maternelle; **anglais**: langue maternelle;
français: excellent écrit et oral; **espagnol, allemand**: débutant.

Encadrement d'étudiants

- 2015 Encadrement d'un étudiant L3: propriétés physiques de l'ADN dans la reconnaissance spécifique par les protéines.
- 2010 Co-encadrement d'un étudiant M2: étude par métadynamique de l'énantiosélectivité de CALB.
- 2008 Encadrement d'un étudiant L3: Modèles de réseau gaussien des protéines.
- 2007 Co-encadrement d'un étudiant L3: Dynamique moléculaire des formes mutées d'une amylase adaptée au froid.

Contrats de Recherche

- 2014 – Allocation post-doctorale sur le projet ANR "Chrome" (France);
- 2010 – 2011 Alloué 150k heures de calcul sur les ressources du CINES (France);
- 2009 – 2010 Allocation post-doctorale sur le projet ANR "Expenantio" (France);
- 2009 Allocation séjour de recherche à l'étranger du MIUR (Italie);
- 2008 – 2009 Alloué 100k heures de calcul sur les ressources du Cineca (Italie);
- 2006 – 2009 Bourse d'allocation doctorale du MIUR (Italie);

Publications

1. Pasi M., Maddocks J.H., Lavery R. Analyzing ion distributions around DNA: sequence dependent potassium ion distributions from microsecond MD simulations. *Nucl. Acids Res.*, **43** 2412–23 (2015)
2. Pasi M., Maddocks J.H., *et al.*, Lavery R. μ ABC: a systematic microsecond molecular dynamics study of tetranucleotide sequence effects in B-DNA. *Nucl. Acids Res.*, **42** 12272–83 (2014)
3. Petkevičiūtė D., Pasi M., Gonzalez O. and Maddocks J.H. cgDNA: a software package for the prediction of sequence-dependent coarse-grain free energies of B-form DNA. *Nucl. Acids Res.* **42** e153 (2014)
4. Lavery R., Maddocks J.H., Pasi M. and Zakrzewska K. Analyzing ion distributions around DNA. *Nucl. Acids Res.*, **42** 8138–8149 (2014)
5. Pasi M., Lavery R. and Ceres N. PaLaCe: a coarse-grain model to study mechanical properties of proteins. *J. Chem. Theory Comput.*, **9** 785–793 (2013)
6. Ceres N., Pasi M. and Lavery R. Protein solvation energies based on residue burial. *J. Chem. Theory Comput.*, **8** 2141–2144 (2012)
7. Pasi M., Tiberti M., Arrigoni A. and Papaleo E. Xpyder: a PyMOL plugin to map correlated motions and their networks on the three-dimensional structure. *J. Chem. Inf. Model.*, **52** 1865–1874 (2012)
8. Papaleo E., Pasi M., Tiberti M. and De Gioia L. Molecular dynamics of mesophilic-like mutants of a cold-adapted enzyme: insights into distal effects induced by the mutations. *PLOS ONE*, **6** e24214 (2011)
9. Papaleo E., Tiberti M., Invernizzi G., Pasi M., and Ranzani V. Molecular determinants of enzyme cold adaptation: comparative structural and computational studies of cold- and warm-adapted enzymes. *Curr. Prot. Pept. Sci.*, **12** 657–683 (2011)
10. Blanchet C., Pasi M., Zakrzewska K. and Lavery R. CURVES+ web server for analyzing and visualizing the helical, backbone and groove parameters of nucleic acid structures. *Nucl. Acids Res.*, **39 suppl 3** W68–W73 (2011)
11. Pasi M., Riccardi L., Fantucci P., De Gioia L. and Papaleo E. Dynamic properties of a psychrophilic α -amylase in comparison with a mesophilic homologue. *J. Phys. Chem. B*, **113** 13585–13595 (2009)
12. Papaleo E., Pasi M., Riccardi L., Sambì I., Fantucci P. and De Gioia L. Protein flexibility in psychrophilic and mesophilic trypsins. Evidence of evolutionary conservation of protein dynamics in trypsin-like serine-proteases. *FEBS Letters*, **582** 1008–1018 (2008)

Talks (sélection)

1. Pasi M*, Maddocks J. H. and Lavery R. Sequence determines the structure and microsecond-scale dynamics of B-DNA and its bound cations. *Journées Ouvertes en Biologie, Informatique & Mathématiques*, Clermont-Ferrand (2015)
2. Pasi M*, Maddocks J. H. and Lavery R. Systematic microsecond molecular dynamics study of tetranucleotide sequence effects in B-DNA. *Fluctuations in Structured Coulomb Fluids*, ENS Lyon (2015)
3. Lavery R.*, Pasi M. and Ceres N. Coarse-grain and all-atom approaches to macromolecular recognition. *Modeling cellular life: From single molecules to cellular function*, CECAM EPFL Lausanne (2014)

4. Pasi M^{*}, Maddocks J. H. and Lavery R. Systematic microsecond molecular dynamics study of tetranucleotide sequence effects in B-DNA. *ABC general meeting*, Barcelona (2014)
5. Lavery R.^{*}, Ceres N. and Pasi M. Atomistic and coarse-grain studies of biomacromolecules and their interactions. *Frontiers in dynamics simulations of biological molecules*, Barcelona (2013)
6. Lavery R.^{*}, Ceres N. and Pasi M. Steps towards predicting protein-protein interactions. *Exploring protein interactions through theory and experiment* CECAM EPFL Lausanne (2012)
7. Pasi M.^{*}, Ceres N. and Lavery R. PaLaCe: a coarse-grain model to study mechanical properties of proteins. *Nordita Scientific Program: Dynamics of Biomolecular Processes* Nordita Stockholm (2012)
8. Pasi M.^{*} and Zakrzewska K. Thermodynamics and kinetics of substrate recognition by CALB. *Expenantio general meeting IBCP Lyon* (2012)
9. Lavery R.^{*}, Sacquin-Mora S., Ceres N. and Pasi M. From molecular mechanics to function. *CBSB11: From Computational Biophysics to Systems Biology* Forschungszentrum Jülich (2011)
10. Pasi M.^{*}, Ceres N. and Lavery R. PaLaCe: a coarse-grain model to study mechanical properties of proteins. *Journées du Centre Blaise Pascal ENS Lyon* (2011)
11. Pasi M.^{*} and Zakrzewska K. The role of substrate recognition in the enantioselectivity of CALB. *BMSSI Seminar Aussois* (2011)

Posters (sélection)

1. Pasi M.^{*}, Maddocks J.H. and Lavery R. *Joint FEBS-EMBO conference*, Paris (2014)
2. Tiberti M.^{*}, Arrigoni A., Invernizzi G., Lambrughli M., Pasi M. and Papaleo E. *Frontiers in dynamics simulations of biological molecules*, Barcelona (2013)
3. Pasi M.^{*}, Ceres N. and Lavery R. *Topological Aspects of DNA Function and Protein Folding* Isaac Newton Institute, Cambridge (2012)
4. Ceres N.^{*}, Pasi M. and Lavery R. *CBSB11: From Computational Biophysics to Systems Biology* Forschungszentrum Jülich (2011)
5. Papaleo E.^{*}, Tiberti M., Pasi M., Riccardi L., Mereghetti P., Fantucci P. and De Gioia L. *Free-energy calculations with PLUMED* CECAM EPFL Lausanne (2010)
6. Pasi M.^{*}, Tiberti M., Riccardi L., Fantucci P., De Gioia L. and Papaleo E. *Computational Systems Biology* CECAM EPFL Lausanne (2009)
7. Papaleo E.^{*}, Pasi M., Riccardi L., Mereghetti P., Fantucci P. and De Gioia L. *Biomolecular Simulation EMBO Pratical Course, 2008* Institut Pasteur Paris (2008)
8. Papaleo E.^{*}, Pasi M., Riccardi L., Fantucci P., and De Gioia L. *PNRA Meeting on Antarctic Biology* Follonica (2007)