



1506
UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI URBINO
CARLO BO

CORSO DI LAUREA IN
INFORMATICA APPLICATA
SCUOLA DI
SCIENZE TECNOLOGIE E FILOSOFIA DELL'INFORMAZIONE

Scienza, Metodologia e Tecnologia dell'Informazione: Venti Anni di Informatica a Urbino (2001-2021)

MauroMagnani

mauro.magnani@uniurb.it



1506
UNIVERSITÀ
DEGLI STUDI
DI URBINO
CARLO BO

Dalla Relazione della Commissione "Informatica Applicata"
(nominata con Decreto Rettorale n.750/2000 del 30/8/2000)

Cronologia di una proposta

La Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali, ha proposto l'istituzione di un corso di Informatica Applicata. Tale corso dovrebbe caratterizzarsi come corso interfacoltà o "Corso di Ateneo" e coinvolgere con una partecipazione attiva più Facoltà. La proposta della Facoltà di Scienze M.F.N. è stata presentata dal Preside in una riunione informale del Senato Accademico (11 Maggio ore 16) ed è stata accolta con favore.

Nella riunione del Senato Accademico del 23 Maggio 2000 la proposta di istituzione di un corso di Laurea in Informatica Applicata veniva inclusa tra le iniziative prioritarie dell'Università di Urbino per il prossimo triennio.

Nella riunione del Senato Accademico del 29 Giugno 2000, a seguito della comunicazione da parte della preside Dachà di una imminente riunione del Comitato Regionale di Coordinamento delle Unità Marchigiane, viene ribadita la volontà del Senato Accademico di procedere nella attivazione del corso di Informatica Applicata e, su suggerimento del Prof. Bogliolo, proposta l'istituzione di una commissione che elabori un progetto di un nuovo corso di Laurea in Informatica applicata dando mandato al Rettore di emanare apposito decreto di nomina.

Il giorno 17 Agosto 2000 il Prof Bogliolo e Magnani consegnano al Direttore Amministrativo l'elenco delle personalità che hanno espresso la propria disponibilità a partecipare a detta commissione. Con decreto Rettorale n. 750/2000 del 30 Agosto 2000 veniva costituita la Commissione incaricata di elaborare un progetto del Corso di Laurea in "Informatica Applicata "



DECRETO RETTORALE N. 750/2000

IL RETTORE
DELLA LIBERA UNIVERSITA' DEGLI STUDI DI URBINO

vedute le delibere in data 23 maggio e 29 giugno 2000 con le quali il Senato Accademico ha deliberato l'istituzione, nell'ambito dell'offerta didattica dell'Università degli Studi di Urbino per il prossimo triennio, del Corso di laurea in "Informatica Applicata" da configurarsi come un progetto di Ateneo e con il coinvolgimento e la partecipazione di diverse Facoltà dell'Università;

considerato che nell'ambito della medesima riunione del Senato Accademico del 29 giugno 2000 è stato deliberato di dare mandato al Magnifico Rettore di provvedere con un suo autonomo decreto alla costituzione di una apposita Commissione che elabori un progetto del Corso di laurea in "Informatica Applicata";

preso atto della mancanza di sufficienti competenze informatiche all'interno dell'Ateneo per procedere alla costituzione di una Commissione opportunamente e ampiamente rappresentativa, che dovrebbe comprendere un docente per ciascuno dei tre raggruppamenti scientifico-disciplinari più direttamente coinvolti (K01X, Elettronica; K05A, Sistemi di elaborazione delle informazioni; K05B, Informatica);

rilevato ancora che sono state accertate le disponibilità di alcune personalità di provata competenza nel settore dell'informatica applicata corrispondenti ai succitati profili;

DECRETA

E' costituita nel modo che segue la Commissione incaricata di elaborare un progetto del Corso di laurea in "Informatica Applicata":

- | | | |
|---------------------------|---|---------------------------|
| Prof. Mauro MAGNANI, | Ordinario di Chimica Biologica e Preside della Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali | - Coordinatore-Presidente |
| Prof. Lorenzo DONATIELLO, | Ordinario di Informatica nella Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali della Università di Bologna | - Membro |
| Prof. Enrico MACII, | Associato di Sistemi di elaborazione delle informazioni nella Facoltà di Ingegneria del Politecnico di Torino | - Membro |
| Prof. Bruno RICCO', | Ordinario di Elettronica nella Facoltà di Ingegneria dell'Università di Bologna | - Membro |
| Ing. Umberto PAOLUCCI, | Presidente Microsoft Italia e Vice President EMEA Regions Microsoft Corporation | - Membro |



La Commissione dovrà inoltre:

- fornire indicazioni sulla organizzazione delle attività didattiche del nuovo Corso, sulle necessità strutturali e funzionali e sulla loro possibile evoluzione;
- suggerire i raccordi fondamentali con realtà produttive e di ricerca (in particolare in ambito internazionale) che possano contribuire al successo formativo del nuovo Corso di "Informatica Applicata";
- delineare alcune esemplificazioni di sviluppo di software specializzato e/o di reti di comunicazione che potrebbero costituire prioritariamente oggetto di studio e ricerca nel nuovo Corso di "Informatica Applicata";
- fornire ogni altro suggerimento utile allo sviluppo dell'Ateneo compatibilmente con le risorse disponibili.

Urbino, 30 agosto 2000



IL RETTORE
(Carlo Bo)

Carlo Bo

UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI URBINO CARLO BO
 DIREZIONE GENERALE
 E' presentata in duplice copia
 E' allegata a n. 750/2000
 Urbino, 10 SET 2001
 DIRETTORE GENERALE
 Alessandro Parfetto
Alessandro Parfetto

La proposta elaborata dalla commissione è stata approvata nel Consiglio di Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali del 1 febbraio 2001, dal Senato Accademico e Consiglio di Amministrazione del 6 Aprile 2001 dal Comitato Regionale di Coordinamento il 5 Marzo 2001.

La proposta identificava anche le risorse necessarie all'apertura del corso:

Le risorse necessarie

Risorse strutturali disponibili immediatamente

- n. 1 aula da 100 posti necessaria dal 1 ° anno presso il Campus Scientifico
- n. 1 aula da 40-50 posti necessaria dal 3° anno presso il Campus Scientifico.
- n. 1 laboratorio di informatica con 30 postazioni PC a cablatura di rete presso il Campus
- n. 1 laboratorio di fisica presso il Campus Scientifico

Risorse strutturali da acquisire

- n. 1 aula da 40-50 posti dal 3° anno
- n. 1 laboratorio di ICT

Risorse di personale

della Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali

1 Professore di 1 ° fascia 2 ricercatori

della Facoltà di Scienze Ambientali 1,5 punti del nuovo budget
assegnati per il triennio 2001-2003

5 punti dall'Ateneo (delibera C.D.A. del 16.03.2001)



UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI URBINO

FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE FISICHE E NATURALI

Urbino, 19 luglio 2001

**Nuovo Corso di Laurea in
INFORMATICA APPLICATA
dell'Università degli Studi di Urbino**

Agenda:

11.45 – Introduzione

Obiettivi formativi del Corso di Laurea in Informatica Applicata e quadro generale delle attività del Corso

Mauro Magnani – Preside della Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali

12.15 - Sinergie tra università e aziende: un aiuto concreto al mondo del lavoro

Umberto Paolucci – Vice President Microsoft Corporation

12.30 - Università, territorio e impresa: sinergie in azione

Alberto Cazziol – Amministratore Delegato Etnoteam.com

12.45 - Professioni del futuro e università

Piero Valentini – Direttore Generale Gruppo Biesse

13.00 - Il Dream Team di R&D di think3

Gaetano Mazzanti – Vice President R&D di think 3

- Dichiarazione di Umberto Paolucci alla conferenza stampa del 19 luglio 2021



"Per ridurre il problema dello skill shortage nel nostro Paese sono necessari interventi congiunti da parte del governo, degli atenei e delle stesse imprese utenti e fornitrici di tecnologie", ha dichiarato Umberto Paolucci, Vice Presidente Microsoft Corporation. "Collaboriamo con le principali Università italiane con l'obiettivo di supportarle nella formazione di figure professionali qualificate per aiutare le aziende ad adottare le nuove tecnologie, a vantaggio della loro produttività e della competitività dell'intero Sistema Paese. Siamo lieti di aver partecipato alla definizione del quadro generale delle attività formative del nuovo Corso di Laurea che faciliterà l'ingresso nel mondo del lavoro dei giovani laureati, fornendo loro le competenze richieste dal mercato".

Il nuovo corso di Informatica Applicata (2001) inaugura anche una nuova modalità di programmazione di nuove iniziative in Ateneo.

Normalmente, la proposta di istituzione di un nuovo Corso di Studio nasceva dall'interno delle Facoltà con la ovvia conclusione che le decisioni finivano con l'ampliare aree già presenti in Ateneo. Per la prima volta (forse) l'istituzione di un nuovo Corso di Laurea si configurava come «un progetto di Ateneo» condiviso da più Facoltà.

Per la prima volta (forse) il Rettore istituiva una Commissione responsabile di elaborare un progetto di Corso di laurea in «Informatica Applicata» comprendeva NON solo accademici ma anche personalità di provata competenza al di fuori dell'università.

L'Ing. Umberto Paolucci , Presidente di Microsoft Italia e Vice President EMEA di Microsoft Corporation divenne membro di tale commissione e contribuì attivamente alla definizione degli obiettivi e alle modalità della loro implementazione.

Oggi dopo 20 anni celebriamo i risultati, fortemente influenzati da queste scelte strategiche originali, che hanno ricevuto una iniziale spinta propulsiva dal Prof. Giovanni Bogliolo con il quale mi hanno legato rapporti di stima ed amicizia e che qui voglio ricordare.

Binding of non-catalytic ATP to human hexokinase I highlights the structural components for enzyme–membrane association control

Camillo Rosano¹, Elisabetta Sabini^{1,2}, Menico Rizzi³, Daniela Deriu¹, Garib Murshudov², Marzia Bianchi⁴, Giordano Serafini⁴, Mauro Magnani⁴ and Martino Bolognesi^{1*}

Background: Hexokinase I sets the pace of glycolysis in the brain, catalyzing the ATP-dependent phosphorylation of glucose. The catalytic properties of hexokinase I are dependent on product inhibition as well as on the action of phosphate. *In vivo*, a large fraction of hexokinase I is bound to the mitochondrial outer membrane, where the enzyme adopts a tetrameric assembly. The mitochondrion-bound hexokinase I is believed to optimize the ATP/ADP exchange between glucose phosphorylation and the mitochondrial oxidative phosphorylation reactions.

Results: The crystal structure of human hexokinase I has been determined at 2.25 Å resolution. The overall structure of the enzyme is in keeping with the closed conformation previously observed in yeast hexokinase. One molecule of the ATP analogue AMP–PNP is bound to each N-terminal domain of the dimeric enzyme in a surface cleft, showing specific interactions with the nucleotide, and localized positive electrostatic potential. The molecular symmetry brings the two bound AMP–PNP molecules, at the centre of two extended surface regions, to a common side of the dimeric hexokinase I molecule.

Conclusions: The binding of AMP–PNP to a protein site separated from the catalytic centre of human hexokinase I can be related to the role played by some nucleotides in dissociating the enzyme from the mitochondrial membrane, and helps in defining the molecular regions of hexokinase I that are expected to be in contact with the mitochondrion. The structural information presented here is in keeping with monoclonal antibody mapping of the free and mitochondrion-bound forms of the enzyme, and with sequence analysis of hexokinases that differ in their mitochondria binding properties.

Addresses: ¹Dipartimento di Fisica – INFN and Centro Biotecnologie Avanzate – IST, Università di Genova, Largo Rosanna Benzi, 10. I-16132 Genova, Italy, ²Protein Structure Group, Department of Chemistry, University of York, Heslington, York YO1 5DD, UK, ³DISCAFF, Università del Piemonte Orientale, Viale Ferrucci, 33. I-28100 Novara, Italy and ⁴Istituto di Chimica Biologica 'G.Fornaini', Università di Urbino, Via Saffi, 2. I-61029 Urbino, Italy.

*Corresponding author.
E-mail: bolognes@fisica.unige.it

Key words: ATP, human hexokinase I, glucose recognition, glycolysis, mitochondrial membrane

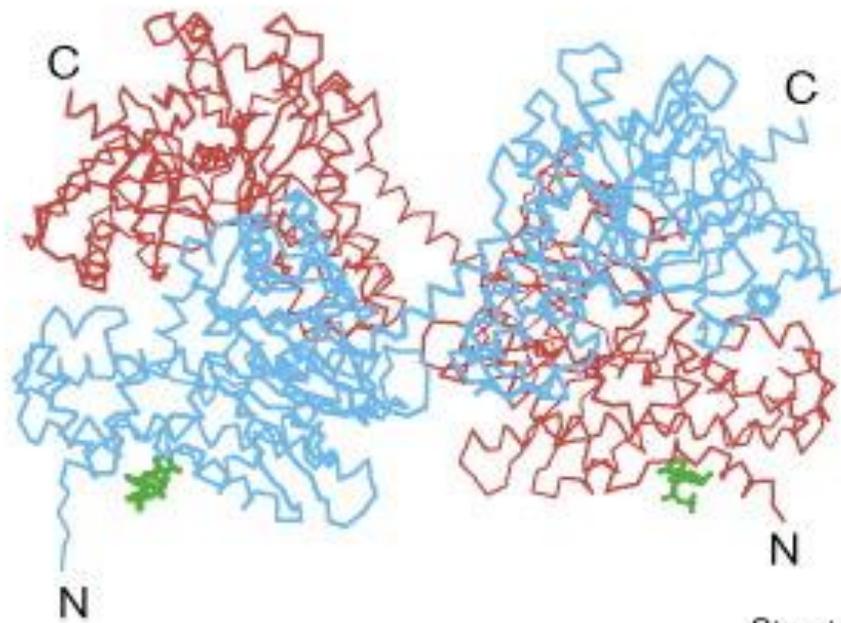
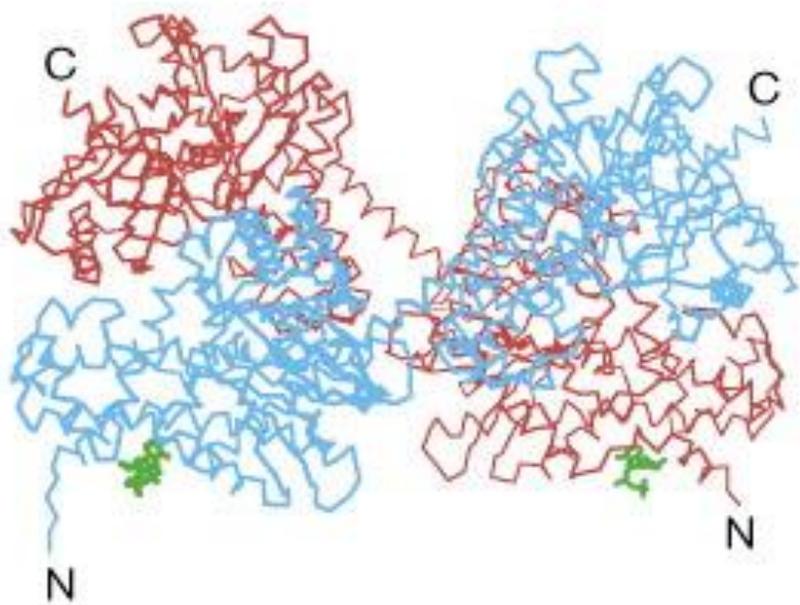
Received: 14 June 1999
Revisions requested: 2 July 1999
Revisions received: 19 August 1999
Accepted: 26 August 1999

Published: 1 November 1999

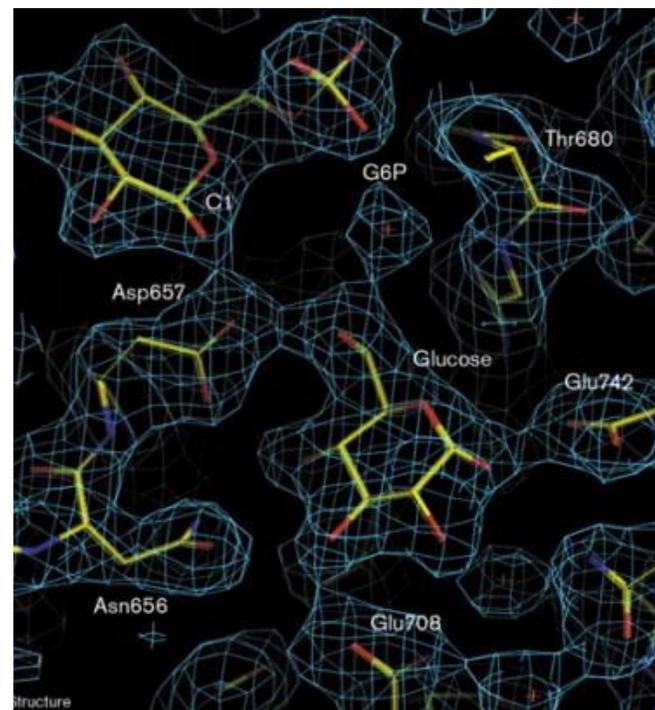
Structure November 1999, 7:1427–1437

0969-2126/99/\$ – see front matter
© 1999 Elsevier Science Ltd. All rights reserved.





Structure



Expression and purification

The tHK-I gene was expressed as recombinant enzyme in BL21(DE3) Escherichia coli cells, using the pET system, inducible with IPTG. Details about optimization of human recombinant HK-I expression in bacteria are reported by Bianchi et al. [41]. Next, tHK-I was purified to homogeneity following the purification procedure used for the full-length recombinant enzyme [42]

Crystallization

An extensive search for suitable crystal growth conditions was carried over using sparse matrix crystallization kits (Hampton Research, Laguna Hills, CA). After refinement of the physico-chemical parameters, crystals with dimensions often exceeding $0.3 \times 0.2 \times 0.1$ mm³ were obtained, in the hanging-drop geometry at 4°C using a 700 µl reservoir solution

Data collection and reduction

Diffraction data were firstly collected in-house and subsequently using synchrotron radiation at the ID14 beamline, European Synchrotron Radiation Facility ($\lambda = 0.936$ Å). Crystals were cryo-frozen at 100K using a modified mother liquor solution that contained all the protein droplet components and 15% (v/v) glycerol, as cryoprotectant. A single crystal was used to collect the 2.25 Å resolution diffracted intensities, which were processed and reduced using the programs XDISP, DENZO and SCALEPACK of the HKL package [44]. The tHK-I crystals belong to the monoclinic P21 space group with unit cell constants $a = 82.4$ Å, $b = 174.3$ Å, $c = 86.3$ Å, $\beta = 90.5^\circ$ and contain one dimer per asymmetric unit.

Structure determination and refinement

The structure of tHK-I was determined by molecular replacement methods using the program AMoRe [22] of the CCP4 suite. Rotational searches in the 12.0–5.0 Å. A random set of reflections (5%) was flagged for Rfree calculation and several cycles of simulated annealing/slow cooling were performed using the X-PLOR package [45], with R factor drop to 29.9% (Rfree = 35.2%) in the 8.0–3.5 Å resolution range. The model obtained was then subjected to 237 cycles of maximum likelihood refinement using REFMAC [46] and including bulk solvent correction. The final model (R factor 20.8%, Rfree 27.9%, for all reflections observed in the 10.0–2.25 Å resolution range) conforms quite satisfactorily to the accepted statistics for protein stereochemical parameters [23], [48] (Table 1).

Highly accurate protein structure prediction with AlphaFold

<https://doi.org/10.1038/s41586-021-03819-2>

Received: 11 May 2021

Accepted: 12 July 2021

Published online: 15 July 2021

Open access

 Check for updates

John Jumper^{1,4}✉, Richard Evans^{1,4}, Alexander Pritzel^{1,4}, Tim Green^{1,4}, Michael Figurnov^{1,4}, Olaf Ronneberger^{1,4}, Kathryn Tunyasuvunakool^{1,4}, Russ Bates^{1,4}, Augustin Židek^{1,4}, Anna Potapenko^{1,4}, Alex Bridgland^{1,4}, Clemens Meyer^{1,4}, Simon A. A. Kohl^{1,4}, Andrew J. Ballard^{1,4}, Andrew Cowie^{1,4}, Bernardino Romera-Paredes^{1,4}, Stanislav Nikolov^{1,4}, Rishub Jain^{1,4}, Jonas Adler¹, Trevor Back¹, Stig Petersen¹, David Reiman¹, Ellen Clancy¹, Michal Zielinski¹, Martin Steinegger^{2,3}, Michalina Pacholska¹, Tamas Berghammer¹, Sebastian Bodenstein¹, David Silver¹, Oriol Vinyals¹, Andrew W. Senior¹, Koray Kavukcuoglu¹, Pushmeet Kohli¹ & Demis Hassabis^{1,4}✉

Proteins are essential to life, and understanding their structure can facilitate a mechanistic understanding of their function. Through an enormous experimental effort^{1–4}, the structures of around 100,000 unique proteins have been determined⁵, but this represents a small fraction of the billions of known protein sequences^{6,7}. Structural coverage is bottlenecked by the months to years of painstaking effort required to determine a single protein structure. Accurate computational approaches are needed to address this gap and to enable large-scale structural bioinformatics. Predicting the three-dimensional structure that a protein will adopt based solely on its amino acid sequence—the structure prediction component of the ‘protein folding problem’⁸—has been an important open research problem for more than 50 years⁹. Despite recent progress^{10–14}, existing methods fall far short of atomic accuracy, especially when no homologous structure is available. Here we provide the first computational method that can regularly predict protein structures with atomic accuracy even in cases in which no similar structure is known. We validated an entirely redesigned version of our neural network-based model, AlphaFold, in the challenging 14th Critical Assessment of protein Structure Prediction (CASP14)¹⁵, demonstrating accuracy competitive with experimental structures in a majority of cases and greatly outperforming other methods. Underpinning the latest version of AlphaFold is a novel machine learning approach that incorporates physical and biological knowledge about protein structure, leveraging multi-sequence alignments, into the design of the deep learning algorithm.



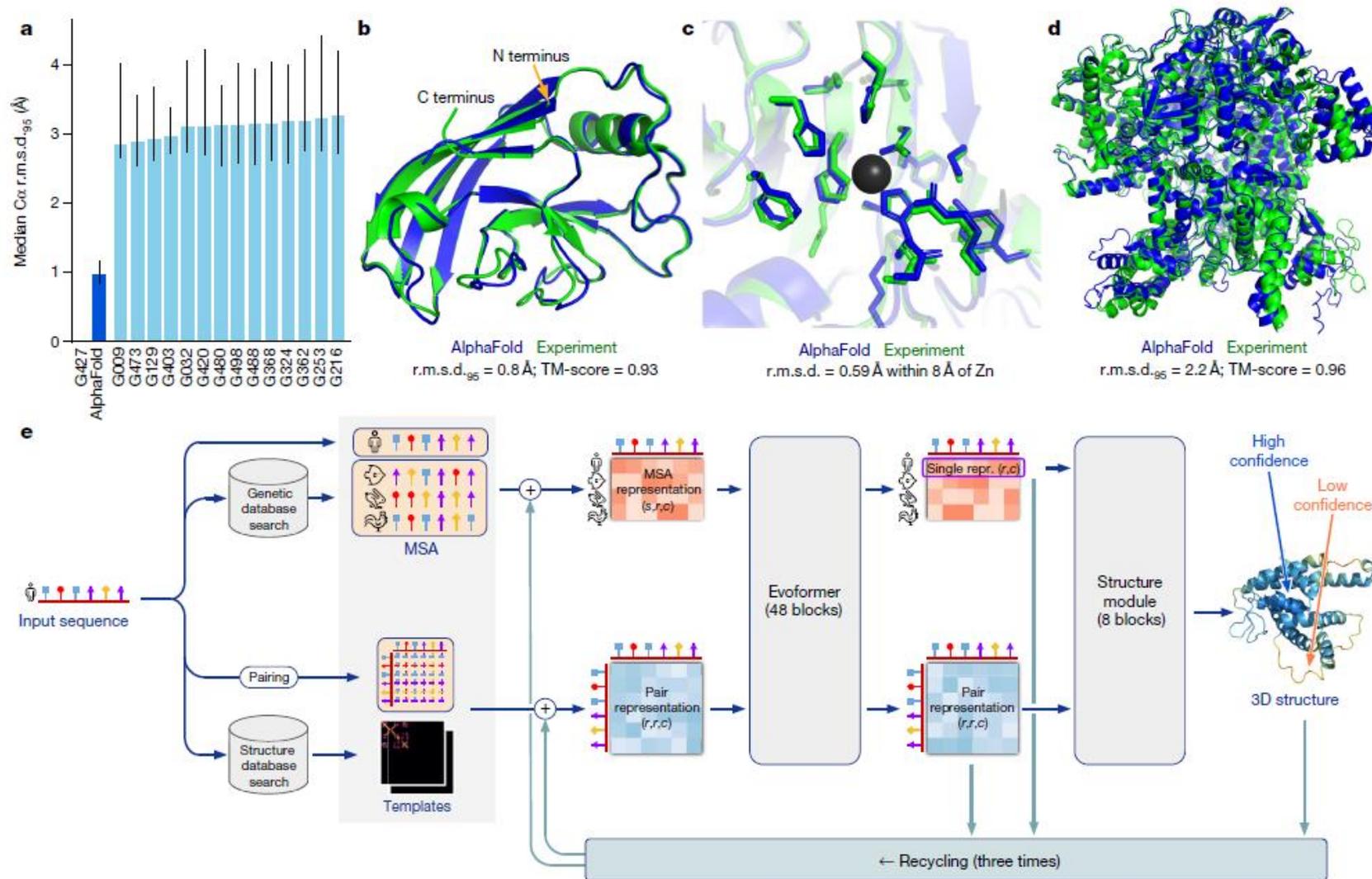


Fig. 1 | AlphaFold produces highly accurate structures. **a**, The performance of AlphaFold on the CASP14 dataset ($n = 87$ protein domains) relative to the top-15 entries (out of 146 entries), group numbers correspond to the numbers assigned to entrants by CASP. Data are median and the 95% confidence interval of the median, estimated from 10,000 bootstrap samples. **b**, Our prediction of CASP14 target T1049 (PDB 6Y4F, blue) compared with the true (experimental) structure (green). Four residues in the C terminus of the crystal structure are B-factor outliers and are not depicted. **c**, CASP14 target T1056 (PDB 6YJ1).

An example of a well-predicted zinc-binding site (AlphaFold has accurate side chains even though it does not explicitly predict the zinc ion). **d**, CASP target T1044 (PDB 6VR4)—a 2,180-residue single chain—was predicted with correct domain packing (the prediction was made after CASP using AlphaFold without Intervention). **e**, Model architecture. Arrows show the information flow among the various components described in this paper. Array shapes are shown in parentheses with s , number of sequences (N_{seq} in the main text); r , number of residues (N_{res} in the main text); c , number of channels.

<https://alphafold.ebi.ac.uk/entry/Q8I3H7>



Machine Learning in Oncology: What Should Clinicians Know?

Matthew Nagy, MPH¹; Nathan Radakovich, BA¹; and Aziz Nazha, MD^{2,3}

The volume and complexity of scientific and clinical data in oncology have grown markedly over recent years, including but not limited to the realms of electronic health data, radiographic and histologic data, and genomics. This growth holds promise for a deeper understanding of malignancy and, accordingly, more personalized and effective oncologic care. Such goals require, however, the development of new methods to fully make use of the wealth of available data. Improvements in computer processing power and algorithm development have positioned machine learning, a branch of artificial intelligence, to play a prominent role in oncology research and practice. This review provides an overview of the basics of machine learning and highlights current progress and challenges in applying this technology to cancer diagnosis, prognosis, and treatment recommendations, including a discussion of current takeaways for clinicians.

JCO Clin Cancer Inform 4:799-810. © 2020 by American Society of Clinical Oncology

Creative Commons Attribution Non-Commercial No Derivatives 4.0 License

