

Czy matematyka może się przydać w medycynie?

Warsztaty MIMUW-WUM, 13 maja 2019

Miejsce spotkania: Wydział Matematyki, Informatyki i Mechaniki UW
ul Banacha 2 (wejście od Pasteura) sala 2180

9:00 – 9:15 Otwarcie

Dziekan MIMUW, prof. dr hab. Paweł Strzelecki

Dziekan Wydziału Farmaceutycznego WUM, Prof. dr hab. n. farm. Piotr Wroczyński

9:15 – 9:30 Dariusz Wrzosek, dyrektor IMSiM (MIMUW)

O Instytucie Matematyki Stosowanej i Mechaniki, historii kontaktów z WUMem i o modelowaniu

9:30 – 9:50 Urszula Foryś, Marek Bodnar (MIMUW)

Potencjał naukowy i badawczy, czyli trochę o tym co robimy

9:50 - 10:00 Katerina Makarova, Wojciech Ozimiński (WUM)

How xenoestrogens affect zebrafish embryo development: molecular docking and neural networks for predicting developmental toxicity in vivo.

10:00 – 10:15 Małgorzata Wrzosek (WUM)

I. Kompleksowa analiza wzajemnych związków pomiędzy takimi czynnikami ryzyka otyłości, jak: zaburzenia snu, objawy depresyjne, impulsywność, nieprawidłowe zachowania żywieniowe, która jest kluczowa dla zwiększenia efektywności leczenia i zapobiegania otyłości.

II. Ocena zależności pomiędzy czynnikami genetycznymi, biochemicznymi i antropometrycznymi a ryzykiem rozwoju chorób towarzyszących otyłości, w celu opracowania kompleksowego modelu leczenia otyłości ukierunkowanego na indywidualne cechy i potrzeby danego pacjenta.

10:15 - 10:25 Janek Poleszczuk (IBIB)

Wykorzystanie modelowania matematycznego w onkologii i diagnostyce chorób układu sercowo-naczyniowego

10:25 - 10:35 Milena Czajka, Maciej Małecki (WUM)

Terapia genowa, recepturowe formułacje genowe, wektorologia rAAV

10:35 – 10:50 Wojciech Goch (WUM)

I. Wyznaczania kinetyk kanału jonowego przy zastosowaniu modeli Hidden Markov Model

II. Wyznaczenie jawnego wzoru na przybliżenie rozwiązania Chemical Master Equation dla reakcji wiązania

10:50 – 11:00 Jacek Miękiś (MIMUW)

Teoria gier ewolucyjnych, ekspresja i regulacja genów

11:00 - 11:30 przerwa kawowa

11:30 - 11:40 Anna Zawada, Tomasz Hermanowski (WUM)

Zespół Projektu DUO OTM Uzupełniające Dualne Studia Magisterskie o profilu praktycznym w zakresie Oceny Technologii Medycznych

11:40 – 11:50 Monika Sobiech (WUM)

Symulacje usieciowanych układów polimerowych

11:50 - 12:00 Przemysław Biecek (MIMUW)

Wyjaśnialne uczenie maszynowe dla spersonalizowanej medycyny

Opowiem o kilku projektach z pogranicza ML i medycyny które realizujemy, w tym czysto naukowych i komercyjnych, które realizujemy na MIM UW w ramach szybciej ścieżki.

12:00 – 12:10 Błażej Miasojedow (MIMUW)

Modelowanie statystyczne w biologii i chemii

W wystąpieniu przedstawię wyniki mojej dotychczasowej współpracy z biologami, chemikami oraz bioinformatykami.

12:10 – 12:20 Mirosław Lachowicz (MIMUW)

Od mikro do makro

12:20 – 12:30 Jakub Harwacki (WUM)

Zastosowanie modeli matematycznych w dekompozycji widm ^{13}C CP MAS NMR formulacji farmaceutycznych

12:30 - 12:40 Grzegorz Bokota (CENT UW)

PartSeg, analiza zdjęć z mikroskopii wysokorozdzielczej

12:40 – 12:50 Mariusz Bodzioch (MIMUW i UWM)

Modelowanie rozprzestrzeniania się chorób zakaźnych w niejednorodnych populacjach

13:00 – 14:00 obiad

14:00 - 14:10 Monika Piotrowska (MIMUW)

Modelowanie przestrzennych procesów biologicznych

14:10 – 14:20 Wojciech Szeszkowski (WUM)

Klasyfikacja onkologiczna guzów mózgu pochodzenia glejowego na podstawie wieloczynnikowej analizy wyników spektroskopii ¹H MRS in vivo.

14:20 – 14:30 Agnieszka Wiszniewska-Matyszek (MIMUW)

Optymalizacja procesów i teoria gier
Czyli jak optymalizować, gdy ktoś/coś miesza nam szyki

14:30 – 14:40 Łukasz Paweł Kozłowski (MIMUW)

Usługi bioinformatyczne

14:40 – 16:00 Szybkie randki

Organizatorzy

Wojciech Goch (WUM)
Jacek Miękiś (MIMUW)

Streszczenia

Mariusz Bodzioch (MIMUW i UWM)

Modelowanie rozprzestrzeniania się chorób zakaźnych w niejednorodnych populacjach

Rozważane są krzyżowe epidemiologiczne modele rozprzestrzeniania się chorób zakaźnych w niejednorodnych populacjach. Występowanie grup charakteryzujących się wysokim ryzykiem transmisji choroby ma istotny wpływ na skuteczność prowadzonych akcji profilaktycznych. Badania prowadzone są na przykładzie gruźlicy i ludzi bezdomnych, stanowiących grupę wysokiego ryzyka transmisji. Na podstawie danych rzeczywistych dopasowane zostały parametry modeli. Celem jest dalsza optymalizacja strategii aktywnego wykrywania gruźlicy. Wyniki mogą być uogólniane na inne choroby zakaźne i inne populacje. Brakuje jednak danych rzeczywistych pozwalających na dopasowanie parametrów i walidację modeli.

Grzegorz Bokota (CENT UW)

PartSeg, analiza zdjęć z mikroskopii wysokorozdzielczej

Chciałbym przedstawić swoje doświadczenie z przetwarzaniem danych z mikroskopii wysokorozdzielczej (konfokalnej i elektronowej) oraz program PartSeg który powstał aby biologowie mogli łatwo wykonywać podstawowe analizy na różnorodnych danych.

Milena Czajka, Maciej Małecki (WUM)

Terapia genowa, recepturowe formułacje genowe, wektorologia rAAV
Zakład Farmacji Stosowanej prowadzi badania związane z opracowywaniem recepturowych formułacji farmaceutycznych do stosowania wewnętrznego i zewnętrznego zawierających klonowane preparaty genowe. Badania mieszczą się w nurcie prac z zakresu terapii genowej nowotworów ze szczególnym uwzględnieniem wektorologii rAAV. W toku badań wyselekcjonowano formułacje półstałe, jak pro injectione do terapii genowej wybranych nowotworów.

Wojciech Goch (WUM)

I. Wyznaczania kinetyk kanału jonowego przy zastosowaniu modeli Hidden Markov Model
II. Wyznaczenie jawnego wzoru na przybliżenie rozwiązania Chemical Master Equation dla reakcji wiązania

I. Jednym ze sposobów badania kanałów jonowych polega na scaleniu wyizolowanego kanału jonowego w membranę, a następnie badanie zmiany napięcia w zależności od przepływu jonów przez ten kanał. W efekcie otrzymujemy dane przedstawiające zmianę w czasie napięcia zależnego od dyskretnego stanu w jakim znajduje się kanał plus szum. Do modelowania wykorzystuję modele HMM, gdzie „ukryty” jest prawdziwy stan kanału właśnie ze względu na szum. Problemem jest wybranie odpowiedniej metody dofitowania parametrów kinetyki kanału dla stosunkowo dużych danych.

II. Dla prostej odwracalnej reakcji wiązania się dwóch ligandów można z układu równań Chemical Master Equation wyznaczyć rozkład stacjonarny. Rozkład ten jest zadany za pomocą funkcji specjalnych. Projekt zakłada wyznaczenie przybliżonej wartości oczekiwanej w stanie równowagi takiego układu przy pomocy prostszych funkcji.

Łukasz Paweł Kozłowski (MIMUW)

Usługi bioinformatyczne

Kilka słów na temat proteomiki, biologii strukturalnej, białek niuporządkowanych oraz uczeniu maszynowym (deep learning, SVM, ANN, algorytmy genetyczne). Ponadto, wykorzystanie NGS i SNP w interpretacji chorób ludzi.

Katerina Makarova, Wojciech Ozimiński (WUM)

How xenoestrogens affect zebrafish embryo development: molecular docking and neural networks for predicting developmental toxicity in vivo

Introduction. The Zebrafish (*Danio rerio*) is a freshwater fish, natural to Asia and very popular aquarium fish. From other hand it is very important animal model for scientists. Zebrafish embryo model is cheap, fast, robust, in vivo model, which used in many toxicological studies and does not require ethical permission. The results are highly correlated with higher vertebrates. That makes zebrafish very popular model for toxicological screening of various chemical compounds, including xenoestrogens. Xenoestrogens are compounds such as bisphenol A, atrazine, etc., which mimic the action of the physiological estrogen compounds.

Molecular docking of the chemical compounds to estrogen receptors is one of the most popular approach for screening xenoestrogens. From other hand, number of zebrafish toxicity studies report adverse effects of xenoestrogens on zebrafish development. Moreover, binding to particular type of estrogen receptors lead to specific morphological changes in zebrafish embryos. For example, binding to estrogen related receptor gamma in zebrafish always lead to malformation in otoliths.[1]

Problems I am going to solve:

- Molecular docking of the most of compounds are done for human estrogen receptors, not zebrafish.
- Number of xenoestrogen toxicity studies in zebrafish are much smaller than those of molecular docking
- There is no model to assign directly development changes in zebrafish embryos and scores of molecular docking

Thus, we are going to create such a model. We have starting data (molecular docking to human and zebrafish receptors, and zebrafish embryo toxicity studies) for 50 xenoestrogen compounds.

What I need:

molecular docking to zebrafish/human receptors for the another 100-200 compounds, partly published data

advanced model to assign changes (we can do basic, PCA, PLS, neural networks)

We are going to publish an article. I need collaboration with UW to apply for grant to get money for open access publication .

Asami, D.K., et al., Comparison of the Total Phenolic and Ascorbic Acid Content of Freeze-Dried and Air-Dried Marionberry, Strawberry, and Corn Grown Using Conventional, Organic, and Sustainable Agricultural Practices. Journal of Agricultural and Food Chemistry, 2003. 51(5): p. 1237-1241.

Jacek Miękiś (MIMUW)

Teoria gier ewolucyjnych, ekspresja i regulacja genów

Badane modele:

1. Proste modele biologii ewolucyjnej. Dynamika populacyjna, gry ewolucyjne, układy równań różniczkowych zwyczajnych. Badanie stabilności stanów równowagowych populacji (równowag Nasha) osobników grających w gry ewolucyjne.

2. Autorepresja i autoaktywacja genów z opóźnieniami czasowymi. Szukanie rozkładów prawdopodobieństwa, wartości oczekiwanej, wariancji liczby cząsteczek białka w stanie stacjonarnym prostych łańcuchów Markowa.

Janek Poleszczuk (IBIB)

Wykorzystanie modelowania matematycznego w onkologii i diagnostyce chorób układu sercowo-naczyniowego

W trakcie prezentacji opowiem najpierw o swoich pracach poświęconych wykorzystaniu metod modelowania matematycznego we współczesnej onkologii.

W szczególności skupię się na:

- 1) opisie matematycznym synergii pomiędzy radioterapią i immunoterapią oraz możliwości jego wykorzystania do zwiększenia skuteczności terapii kombinowanych;
- 2) poszukiwaniu nowych biomarkerów odpowiedzi na immunoterapie wykorzystujące inhibitory punktów kontroli odpowiedzi układu odpornościowego;
- 3) zaawansowanych modelach predykcyjnych pozwalających na indywidualizację terapii. Ponadto przedstawię pokrótce jak modelowanie matematyczne połączone z nieinwazyjną metodą pomiaru kształtu fali pulsu (ciśnienia) w tętnicach peryferyjnych może pomóc w diagnozowaniu różnych patologii układu sercowo-naczyniowego.

Wojciech Szeszkowski (WUM)

Klasyfikacja onkologiczna guzów mózgu pochodzenia glejowego na podstawie wieloczynnikowej analizy wyników spektroskopii ¹H MRS in vivo.

Jestem fizykiem w Pracowni MR II Zakładu Radiologii Klinicznej WUM na Banacha. Od wielu lat zajmuję się zaawansowanymi technikami obrazowania MRI w neuroradiologii (spektroskopia ¹H MR; Traktografia DTI; Perfuzja mózgu ASL, DCE, DSC; fMRI). Współpracuję z prof. Ireneuszem Grudzińskim, który jest promotorem mojej pracy doktorskiej:

„Profilowanie metabolomu w guzach mózgu pochodzenia glejowego techniką ¹H MRS”.

W związku z tym dysponujemy dużym materiałem klinicznym, który wymaga zaawansowanych technik analitycznych.

Widzimy potencjalną współpracę w następujących tematach:

1. Analiza wieloczynnikowa profili metabolicznych glejaków mózgu w celu klasyfikacji onkologicznej pacjentów (metodami Principal Component Analysis – PCA, sieci neuronowe, Data mining, AI)
2. Analiza wieloczynnikowa profili metabolicznych glejaków mózgu i innych parametrów czynnościowych (perfuzyjnych, dyfuzyjnych, morfologicznych) w celu klasyfikacji onkologicznej pacjentów (metodami Principal Component Analysis – PCA, sieci neuronowe, Data mining, AI)
3. Analiza szlaków nerwowych istoty białej w mózgu i rdzeniu na podstawie badania Diffusion Tensor Imaging (DTI) - Fiber Tracking (stworzenie narzędzi do rekonstrukcji i analizy danych MR).

Anna Zawada i Tomasz Hermanowski (WUM)

Zespół Projektu DUO OTM Uzupełniające Dualne Studia Magisterskie o profilu praktycznym w zakresie Oceny Technologii Medycznych

Aktualnie większość naszego czasu zajmuje przygotowanie nowego kierunku studiów na WUM "DUO OTM - dualne uzupełniające studia magisterskie w zakresie Oceny Technologii Medycznych".

W szczególności poszukujemy wykładowców mogących poprowadzić przedmiot(-ty) "Biostatystyka w badaniach klinicznych i ocenie technologii medycznych", kursy podstawowy i zaawansowany. Jest to de facto kurs statystyki w ujęciu praktycznym, w wersji podstawowej - nakierowany na rozumienie wyników badań klinicznych, a w wersji zaawansowanej - wykonanie metaanaliz i analiz ekonomicznych (drzewa decyzyjne, modele Markowa, analiza przeżycia, aproksymacja danych funkcją ciągłą, ekstrapolowanie krzywych poza okres badania klinicznego)

Opis z przetargu (wykładowca powinien aplikować w ramach przetargu): Merytoryczny zakres przedmiotu obejmuje poznanie metod statystycznych wykorzystywanych w badaniach klinicznych w stopniu umożliwiającym swobodną interpretację wyników tych badań oraz metod statystycznych wykorzystywanych w analizach OTM, zwłaszcza metaanalizach danych klinicznych i analizach ekonomicznych. Ćwiczenia powinny owocować umiejętnością swobodnego posługiwania się metodami statystycznymi w praktyce. Ćwiczenia powinny być prowadzone z użyciem narzędzi Excel i Visual Basic; uzupełniająco studenci mogą zostać zapoznani z programami statystycznymi posiadanymi przez Zamawiającego (Statistica). Przedmiot stanowi przygotowanie do przedmiotów „Analiza kliniczna; zaawansowana synteza danych klinicznych – praktyczna nauka zawodu”, „Modelowanie w analizach ekonomicznych z zakresu OTM”, „Analiza ekonomiczna – praktyczna nauka zawodu” i powinien być zaprojektowany we współpracy z osobami je prowadzącymi.

Innym zadaniem związanym z przygotowaniem studiów jest potrzeba wsparcia w ułożeniu testów weryfikujących umiejętność analitycznego myślenia na egzaminie wstępnym

Długofalowo, w naszych pracach badawczych chcemy wykorzystywać ankiety i poszukujemy osób doświadczonych w ich przygotowywaniu oraz analizowaniu statystycznym

Prelegenci (WUM)

Mgr Milena Czajka
Katedra Farmacji Stosowanej
Wydział Farmaceutyczny

Mgr Wojciech Goch
Zakład Chemii Fizycznej
Wydział Farmaceutyczny

Mgr Jakub Harwacki
Zakład Chemii Fizycznej
Wydział Farmaceutyczny

prof. dr hab. Tomasz Hermanowski
Zakład Prawa Farmaceutycznego i Farmakoekonomiki

Dr Katerina Makarova,
Zakład Chemii Fizycznej
Wydział Farmaceutyczny

prof. dr hab. Maciej Małecki
Katedra Farmacji Stosowanej
Wydział Farmaceutyczny

dr hab. Wojciech Ozimiński
Zakład Chemii Fizycznej
Wydział Farmaceutyczny

Dr Monika Sobiech
Zakład Chemii Organicznej
Wydział Farmaceutyczny

Mgr Wojciech Szeszkowski
Zakład Radiologii Klinicznej
Wydział Lekarski

Dr hab. Małgorzata Wrzosek
Zakład Biochemii i Farmakogenomiki
Katedra Biochemii i Chemii Klinicznej
Wydział Farmaceutyczny

mgr Anna Zawada
Studium Farmakoekonomiki, HTA, Marketingu i Prawa Farmaceutycznego Szkoły Biznesu
Politechniki Warszawskiej

Prelegenci (MIMUW)

dr hab. Przemysław Biecek
Instytut Matematyki Stosowanej i Mechaniki
Zakład Statystyki Matematycznej

dr hab. Marek Bodnar
Instytut Matematyki Stosowanej i Mechaniki
Zakład Biomatematyki i Teorii Gier

dr Mariusz Bodzioch
Wydział Matematyki i Informatyki
Uniwersytet Warmińsko-Mazurski
i MIMUW

mgr Grzegorz Bokota
CENT Laboratorium Genomiki Funkcjonalnej i Strukturalnej

prof. dr hab. Urszula Foryś
Instytut Matematyki Stosowanej i Mechaniki
Zakład Biomatematyki i Teorii Gier

dr Łukasz Paweł Kozłowski
Instytut Informatyki

prof. dr hab. Mirosław Lachowicz
Instytut Matematyki Stosowanej i Mechaniki
Zakład Biomatematyki i Teorii Gier

dr hab. Błażej Miasojedow
Instytut Matematyki Stosowanej i Mechaniki
Zakład Statystyki Matematycznej

prof. dr hab. Jacek Miękisz
Instytut Matematyki Stosowanej i Mechaniki
Zakład Biomatematyki i Teorii Gier

dr hab. Monika Piotrowska
Instytut Matematyki Stosowanej i Mechaniki
Zakład Biomatematyki i Teorii Gier

dr Janek Poleszczuk
Instytut Biocybernetyki i Inżynierii Biomedycznej im. Macieja Nałęcz Polskiej Akademii Nauk
i MIMUW

dr hab. Agnieszka Wiszniewska-Matyszkiewicz
Instytut Matematyki Stosowanej i Mechaniki
Zakład Biomatematyki i Teorii Gier

prof. dr hab. Dariusz Wrzosek
Instytut Matematyki Stosowanej i Mechaniki
Zakład Równań Fizyki Matematycznej