

Fertőzésmodellezés egy hibrid matematikai rendszerben

JUHÁSZ NÓRA^{1,2}, SADEGH MARZBAN³, RENJI HAN⁴,
BARTHA FERENC^{1,2}, RÖST GERGELY^{1,2,5}, FARKAS BORÓKA¹

¹Szegedi Tudományegyetem, Bolyai Intézet

²Egészségbiztonság Nemzeti Laboratórium

³Moffitt Cancer Center, Tampa, FL, Egyesült Államok

⁴School of Sciences, Zhejiang University of Science and Technology, Hangzhou, Kína

⁵HCEMM

Egy parciális differenciálegyenleteket és egy agent based modelt ötvöző hibrid rendszer segítségével modellezük egy sejtpopuláció fertőzésének dinamikáját térben és időben. A vírus-, vagy baktériumkoncentrációt folytonos változóként írjuk le, míg az érintett sejtek állapotváltozásait egy sztochasztikus ABM-ben reprezentáljuk. A multiskálás megközelítés intuitív motivációja nem más, mint a folyamat biológiai résztvevőinek jelentősen eltérő fizikai mérete. A PDE-ABM keretrendszerünk segítségével megvizsgáljuk a SARS-CoV-2 terjedésének mintázatait, a Paxlovid antivirális szer különböző adagolásainak hatását, illetve az ízületek bakteriális fertőzésének egy komplex, nem-standard kiegészítő kezelését is.

Szennyvízalapú modellezése, rekonstrukciója és előrejelzése a COVID-19 immunelkerülő variánsai által okozott járványkitöréseknek

POLCZ PÉTER

Pázmány Péter Katolikus Egyetem, Információs Technológiai és Bionikai Kar

Motiváció A szennyvízalapú járványanalízis ígéretes módszernek bizonyult a COVID-19 világjárvány nyomon követésére, mivel a mérési folyamat költséghatékony és kevesebb potenciális hibának van kitéve más mutatókhoz, például a kórházban kezelt vagy a detektált esetek számaihoz képest. A klinikai adatgyűjtés intenzitása a világjárvány harmadik évére drasztikusan csökkent, ekkor a szennyvízi mérések bizonyultak az egyetlen megbízható adatforrásnak a járvány aktuális állapotának becslésében. A legújabb eredmények azt sugallják, hogy a szennyvízadatok modellalapú fúziója a klinikai és más mutatókkal elengedhetetlen a jövőbeni járványfelügyeletben.

Módszer Egy korábbi munkában egy szennyvízalapú (diszkrét idejű) kompartmentális járványmodellt dolgoztunk ki kétfázisú oltási dinamikával és időben változó immunelkerüléssel. Valamint egy többlépcsős számítási módszert javasoltunk a járvány állapotának rekonstrukciójára, az ismeretlen paraméterek becslésére és a járvány várható lefutásának országos előrejelzésére. A modell alapján a napi új megbetegedések és az aktív betegek száma egyértelműen kiszámolható dinamikus inverzióval. Egy megbízható előrejelzéshez azonban elengedhetetlen egy pontos becslés a fogékony személyek számára is, amely viszont több ismeretlen változónak a függvénye. A fogékony személyek számát és az immunvesztési, immunizálási, és átfertőzési ráták idősorait interaktívan, a bilineáris feladatok mintájára ciklusonként két-két lépésben becsljük. A heurisztikus eljárás a magyarországi járványkitörések ismeretlen változóinak számítása során gyors konvergenciát mutatott, ámde az iterációk konvergenciájának formális bizonyításával nem foglalkozik ez a tanulmány.

Eredmények A 2020–22 években lefolyó járványkitörések adataival történő kiértékelések azt sugallják, hogy a szennyvízadatok felhasználása megbízhatóbbá teszi az előrejelzéseket. A számítások szerint a magyar lakosság legalább fele elveszítette immunitását az Omicron BA.1 és BA.2 alváltozatai által okozott járványkitörés során 2022 első felében. Hasonló eredményt kaptunk a BA.5 alváltozat által 2022 második felében okozott járványok esetében is. A bemutatott szennyvíz-alapú megközelítést a Nemzeti Népegészségügyi Központ munkatársaival együttműködve a magyarországi COVID-19 járványkitörések monitorizálására használtuk 2022–23-ban.

Genomok mint az evolúciós történelem dokumentuma

SZÖLLŐSI GERGELY

¹Eötvös Loránd Tudományegyetem, Biológiai Fizika Tanszék

²HUN-REN Ökológiai Kutatóközpont, Evolúciótudományi Intézet

³Okinawa Institute of Science and Technology, Model-Based Evolutionary Genomics Unit, Okinawa, Japan

A szekvencia- és genomevolúció jelenlegi legmodernebb modelljei az egyes szervezeti szinteken belüli függetlenség feltételezésén alapulnak. Noha ez a feltételezés nélkülözhetetlen a nagyméretű és folyamatosan növekvő szekvenciaadatok elemzéséhez, korlátozza az evolúciós múlt rekonstrukcióját és annak megértését, hogy a biológiai rendszerek különböző elemei, mint az aminosavak, gének vagy fajok, hogyan hatnak egymásra. Kutatásunk célja, hogy megszabaduljunk ezektől a korlátoktól. Hierarchikus probabilisztikus modellekkel és újabban machine learning eljárásokkal segítjük a jelenleg függetlennek kezelt koevolúciós függőségek modellezését.

Ezen modellek alkalmazásával meghatároztuk az baktériumok filogenetikai fájának gyökerét (Coleman et al. 2021), ami lehetővé tette a bakteriális közös ős rekonstrukcióját. Ezt követően a többsejtűség kialakulását vizsgálva az Opisthokonta szupergrupon belül az állatok és gombák genetikai változásainak útvonalát rekonstruáltuk (Ocaña-Pallarès et