

Colloqui interdipartimentali sui nuovi metodi computazionali

Carissime/i colleghe/i, carissime/i studentesse/i, le simulazioni numeriche hanno avuto un enorme impatto sullo sviluppo delle scienze quantitative fin dall'avvento dei Computer. In particolare, negli ultimi anni, sono stati introdotti nuovi metodi computazionali che stanno trasformando (in modo talvolta inaspettato) l'attività di ricerca in parecchi settori scientifici.

Sentiamo la necessità di discutere questi sviluppi recenti a livello trasversale rispetto ai singoli dipartimenti, perché i moderni approcci computazionali vengono efficacemente applicati in tutte le scienze quantitative. Crediamo quindi che in questo ambito il cosiddetto "transfer of knowledge" offra opportunità che sono potenzialmente estremamente vantaggiose.

Per tutte queste ragioni abbiamo intenzione di organizzare un ciclo di seminari sui moderni metodi computazionali e loro applicazioni in ambito scientifico. Intendiamo strutturare questi incontri in modo assolutamente **NON specialistico**, con una presentazione degli argomenti che sia comprensibile anche a tutti coloro che non sono esperti dell'argomento in discussione. Non mancherà la descrizione di aspetti tecnici delicati, ma questi saranno limitati ai metodi computazionali utilizzati.

La lunghezza del ciclo di seminari, l'estensione e la profondità degli argomenti che verranno discussi dipenderanno in larga misura dall'interesse e dall'entusiasmo che verranno suscitati in tutta la comunità che fa parte della Macroarea di Scienze o le orbita attorno.

Decoding Drug Response: Unraveling Pharmacogenomics through Advanced Machine Learning Approaches

by GERARDO PEPE ^a

Recent advances in pharmacogenomics have generated a wealth of data of different types whose analysis has helped in the identification of signatures of different cellular sensitivity/resistance responses to hundreds of chemical compounds. Among the different data types, gene expression has proven to be the most successful for the inference of drug response in cancer cell lines. Although effective, the whole transcriptome can introduce noise in the predictive models, since specific mechanisms are required for different drugs and these realistically involve only part of the proteins encoded in the genome. We analyzed the pharmacogenomics data of 961 cell lines tested with 265 anti-cancer drugs and developed different machine-learning approaches for dissecting the genome systematically and predicting drug responses using both drug-unspecific and drug-specific genes. These methodologies reach better response predictions for the vast majority of the screened drugs using tens to a few hundred genes specific to each drug instead of the whole genome, thus allowing a better understanding and interpretation of drug-specific response mechanisms which are not necessarily restricted to the drug's known targets.

^aCentre for Molecular Bioinformatics, Dept. of Biology University of Rome Tor Vergata