

Co to jest supermodelowanie i jaka może być z niego korzyść w kontekście planowania terapii w onkologii predykcyjnej

Witold Dzwinel, AGH

Nowoczesne narzędzia uczenia maszynowego wykorzystywane do budowania modeli danych, dokonujące aproksymacji (ekstrapolacji) funkcji wielowymiarowych i/lub tworzenia reprezentacji danych niestrukturalnych, coraz częściej wkraczają na teren zarezerwowany niegdyś dla modeli opartych na wiedzy, tzn. reprezentowanych przez metody i narzędzia modelowania i symulacji komputerowej. Zdecydowaną słabością modeli bazujących na danych jest wymóg ich uczenia przy pomocy ogromnej ilości danych, która byłaby w stanie zrównoważyć brak jakiegokolwiek wiedzy o modelowanym zjawisku. Zebranie takiej ilości danych w wielu przypadkach może być niemożliwe, drogie lub trudne z punktu widzenia ich normalizacji i integracji. Z kolei słabością modeli formalnych jest ich silna parametryzacja, co powoduje eksponencjalną inflację przeszukiwanej przez metody asymilacji danych przestrzeni parametrów. Z drugiej jednak strony enkapsulowana w postaci modelu matematycznego wiedza wymaga niewielkiej ilości danych pomiarowych do oszacowania parametrów modelu. Co więcej, asymilowane do modelu dane nie muszą obejmować zakresu dynamiki zjawiska, dla którego niemożliwe jest wykonanie jakiegokolwiek pomiaru. Wykład seminaryjny prezentuje ideę supermodelingu, gdzie supermodelem jest niewielki zespół sprzężonych ze sobą pod-modeli reprezentujących różnie sparametryzowany model bazowy. W ogólności, supermodel może być też zbiorem różnych, połączonych ze sobą modeli tego samego zjawiska. Sprzężenia pomiędzy modelami powodują częściową synchronizację podmodeli i bardziej efektywną penetrację przestrzeni fazowej. Sprzężenia pomiędzy parą modeli definiuje jeden parametr. Dlatego, zamiast dopasowywania czasem dziesiątek parametrów przy pomocy asymilacji danych do pojedynczego modelu bazowego, proponujemy asymilować dane pomiarowe jedynie do niewielkiej ilości parametrów sprzęgających podmodele, podczas gdy parametry poszczególnych podmodeli nie ulegają zmianie. Na podstawie wyników otrzymanych dla supermodeli zjawisk o różnej złożoności, pragniemy przedstawić zarówno zalety tego podejścia oraz przedyskutować jego ograniczenia. Szczególnie, w kontekście zastosowania supermodelingu w onkologii predykcyjnej i planowaniu terapii antynowotworowej. Celem seminarium jest przedstawienie stanu naszych badań związanych z konstrukcją supermodelu nowotworu dla niebanalnego modelu czerniaka.

Literatura

1. Dzwinel, W., Klusek, A., Siwik, L., Supermodeling in predictive diagnostics of cancer under treatment, *Computers in Biology and Medicine*, 137 (2021) 104797
2. Paszynski, M., Siwik, L., Dzwinel, W., Pingali, K., Supermodeling, a convergent data assimilation meta-procedure used in simulation of tumor progression, *Computers and Mathematics with Applications*, February 2022, in print
3. Łoś, M., Klusek, A., Hassaan, M., A., Pingali, K., Dzwinel, W., Paszyński, M., Parallel fast isogeometric L2 projection solver with GALOIS system for 3D tumor growth simulations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 343, 1-22, (2019)
4. Puzyrev, V., Łoś, M., Gurgul, G., Calo, V., Dzwinel, W., & Paszyński, M. (2019). Parallel splitting solvers for the isogeometric analysis of the Cahn-Hilliard equation. *Computer methods in biomechanics and biomedical engineering*, 22(16), 1269-1281
5. Klusek, A., Łoś, M., Paszyński, M., Dzwinel, W., Efficient model of tumor progression simulated in multi-GPU environment, *International Journal of High-Performance Computing Applications*, 33(3), 489-506, (2019)
6. Łoś, M., Paszyński, M., Klusek, A., Dzwinel, W., Application of fast isogeometric L2 projection solver for tumor growth simulations, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 306, 1257–1269, (2017)
7. Dzwinel, W., Klusek, A., Vasilyev, O.V., Supermodeling in simulation of melanoma progression, 2016 International Conference of Computational Science, ICCS 2016, San Diego, 3-6.06.2016. *Procedia of Computer Science*, 80, 999-1010, 2016