

# *bioinformatorek*

## **Polskiego Towarzystwa Bioinformatycznego**

Polish\_BioInformatics\_Society\_News

<http://ptbi.org.pl/>

**#9 (2013)**

red. Wiesław Nowak IF UMK



Szanowni Państwo,  
Niedawno zakończył się V Zjazd PTBI we Wrocławiu (28.09.2013). Na Walnym Zebraniu obecnych było ok. 40 osób. Zebrani udzielili absolutorium ustępującemu Zarządowi (działa on do końca 2013 roku), przyjęli plan finansowy na 2014, przeprowadzili dyskusję nad kierunkami działania Towarzystwa oraz wybrali nowe władze. Prezesem PTBI na kadencję 2014-2016 został wybrany dotychczasowy Skarbnik Towarzystwa, dr hab. Witold Rudnicki z ICM Uniwersytetu Warszawskiego. W swoim exposé zapowiedział, że będzie kontynuował dotychczasowe kierunki rozwoju Towarzystwa, zintensyfikuje też wysiłki na rzecz wsparcia oddolnych lokalnych inicjatyw związanych z bioinformatyką. Członkowie PTBI wybrali także pozostałych członków Zarządu: Dr inż. Aleksandra Gruca - Politechnika Śląska w Gliwicach, Inst. Informatyki; Dr hab. inż. Małgorzata Kotulska - Politechnika Wrocławska, Wydział Podstawowych Problemów Techniki, Prof. dr hab. Wiesław Nowak - UMK w Toruniu, Inst. Fizyki; Dr inż. Marta Szachniuk - IChB PAN, Inst. Informatyki Politechniki Poznańskiej. Kolejny Zjazd PTBI i Sympozjum Bioinformatyczne odbędą się 9-12 września w Warszawie, w ramach połączonego kongresu aż czterech Polskich Towarzystw naukowych: Biochemicznego, Biologii Komórki, Biofizycznego i oczywiście PTBI. Jednodniową sesję bioinformatyczną wypełnią wykłady zaproszonych wykładowców oraz doktorantów i postdoków wybrane ze streszczeń. Czynimy starania, żeby wykłady powiązane z bioinformatyką były uwzględnione także w ramach pozostałych sesji Kongresu. Ponieważ ja sam postanowiłem nie kandydować do władz PTBI kolejnej kadencji, chciałbym z tych łamów podziękować moim Koleżankom i Kolegom za dotychczasową świetną współpracę i równocześnie życzyć nowemu Zarządowi owocnej pracy na rzecz Bioinformatyki w Polsce.

Janusz Bujnicki - Prezes PTBI



### **Zarząd:**

**Janusz M. Bujnicki (prezes)**  
**Wiesław Nowak (wiceprezes)**  
**Marta Szachniuk (wiceprezes)**  
**Aleksandra Gruca (sekretarz)**  
**Witold Rudnicki (skarbnik)**

### **Komisja Rewizyjna:**

**Jacek Błazewicz (przewodniczący)**  
**Marta Pasynkiewicz-Gierula**  
**Anna Gambin**

Polskie Towarzystwo Bioinformatyczne

Adres do korespondencji:

Dr hab. Witold Rudnicki (PTBI)

ICM, Uniwersytet Warszawski

ul. Prosta 69, piętro 2

00-838 Warszawa

REGON 141348225

NIP 7010118646

Nr Konta 85 1240 1053 1111 0010 1724 1817

Składki członkowskie za rok 2013 wynoszą: 80 zł,  
studenci i doktoranci – 40 zł

W dniu 15.10.2013 liczba członków wynosiła 178.

# Informacje o zjazdach i konferencjach

## IV EURO WG Conference on Operational Research in Computational Biology, Bioinformatics and Medicine

POZNAŃ-BIEDRUSKO, 26-28 CZERWCA 2014

**Zapraszamy** na konferencję CBBM 2014, która łączy tematykę badań operacyjnych z naukami biologicznymi i medycyną. Konferencja organizowana jest pod patronatem PTBI, EURO oraz EURO CBBM – EURO Working Group on Computational Biology, Bioinformatics and Medicine.

Grupa EURO CBBM powołana została w 2006r. na kongresie EURO (Asocjacji Europejskich Towarzystw Badań Operacyjnych). Podobnie jak inne grupy tematyczne działające w ramach Asocjacji, jest jej oficjalnym instrumentem, a jej zadaniem jest popularyzacja nauk biologicznych, bioinformatyki i medycyny w badaniach operacyjnych oraz zastosowanie badań operacyjnych w naukach biologicznych. EURO CBBM liczy obecnie ok. 250 członków z krajów Europy, Azji i Ameryk Płn. Podczas kongresów EURO, grupa organizuje sesje bioinformatyczne, a w latach, w których nie odbywa się kongres - konferencje EURO CBBM (dotychczas takie konferencje odbyły się w Pradze, Rzymie i w Nottingham). W roku 2014, w Poznaniu-Biedrusko odbędzie się IV konferencja EURO CBBM. Celem konferencji jest m.in. aktywizacja środowisk naukowych związanych z bioinformatyką, biologią obliczeniową oraz badaniami operacyjnymi, prowadzących badania w Polsce i Europie Wschodniej, oraz integracja międzynarodowych środowisk wywodzących się z nauk biologicznych z tymi o profilu obliczeniowym.

### WYKŁADOWCY

prof. Marek  
Figlerowicz  
(Polska)



prof. Giuseppe  
Lancia (Włochy)

prof. Eric  
Westhof  
(Francja)



Odwiedź stronę: <http://cbbm2014.cs.put.poznan.pl>

Kontakt z organizatorami: [cbbm2014@cs.put.poznan.pl](mailto:cbbm2014@cs.put.poznan.pl)

**SPOTKAJMY SIĘ W POZNANIU!**

### WAŻNE DATY

|                        |                      |
|------------------------|----------------------|
| Zgłoszenia abstraktów: | 15 lutego 2014       |
| Powiadomienie autorów: | 1 marca 2014         |
| Wczesna rejestracja:   | 15 marca 2014        |
| Konferencja:           | 26 – 28 czerwca 2014 |



*C B B M*

**EURO**

The Association of European  
Operational Research Societies



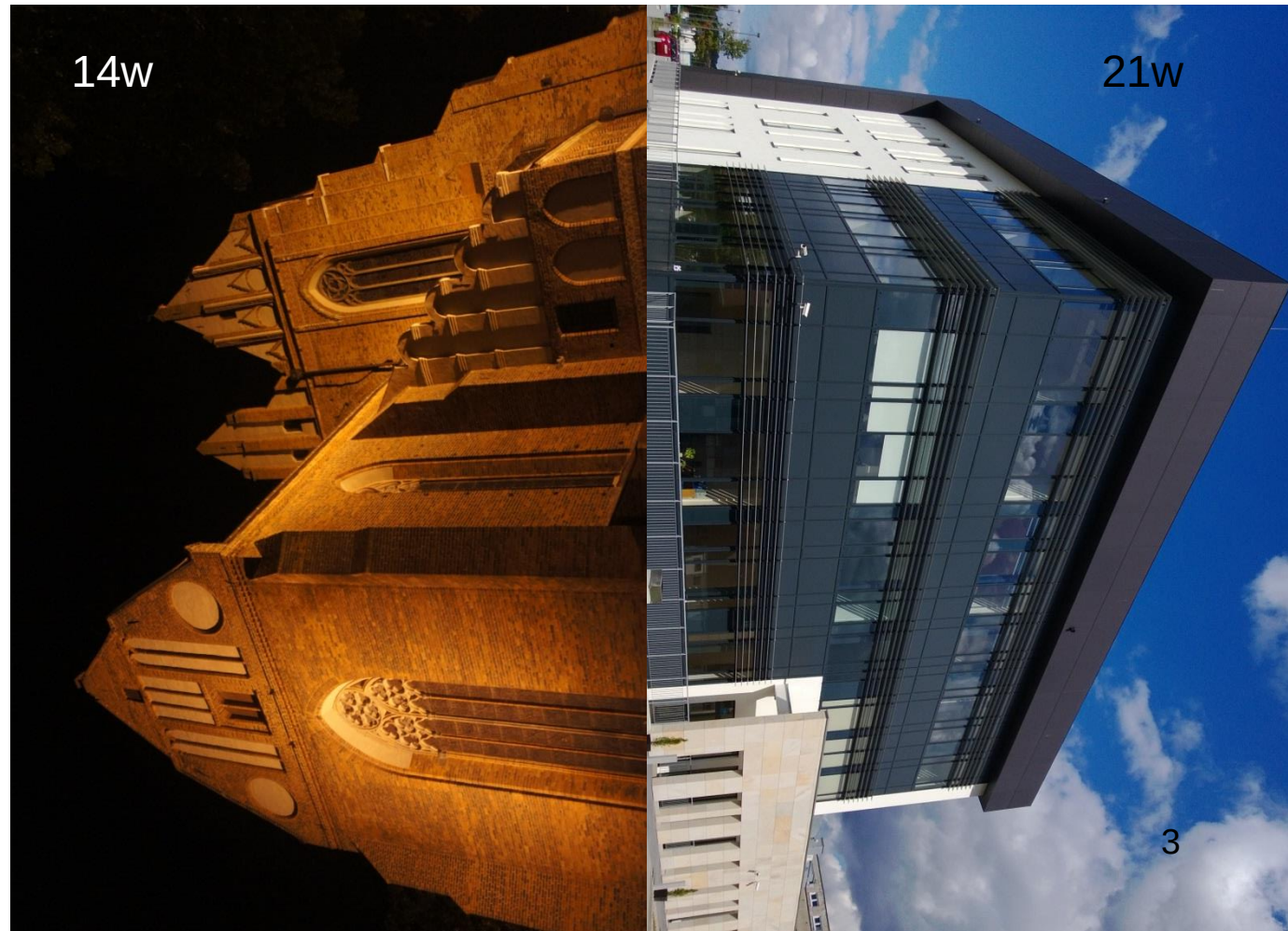


W roku 2014 konferencja **BIT14** odbędzie się w dniach  
12-14 czerwca (czwartek-sobota)  
w Instytucie Fizyki UMK w Toruniu.

Zapraszamy do zgłaszania propozycji tutoriali : `wiesiek {{ at }} fizyka.umk.pl`

14w – katedra  
św. Janów

21w – ICNT UMK



- Przypominamy, że kolejny **VII zjazd PTBI** odbędzie się w Warszawie, jesienią 2014 r. Miejscem zjazdu jest **Audytorium Maximum** (fot.) oraz Biblioteka Główna Uniwersytetu Warszawskiego, a także kampus UW. Będzie to zarazem I Kongres BIO. Organizujemy go wspólnie z PT Biochemicznym, PT Biologii Komórki i BT Biofizycznym. Oczekiwana liczba uczestników kongresu BIO: 800 osób. Podobnie jak podczas naszych „osobnych” zjazdów, młodzi naukowcy będą mieli okazję zaprezentować swoje prace w ramach sesji bioinformatycznej. Dodatkowo, w ramach pozostałych „tematycznych” sesji (np. genomika, proteomika) odbędą się wykłady polskich bioinformatyków-seniorów. Także wspólne sesje posterowe będą stanowiły świetną okazję do zaprezentowania naszych dokonań kolegom i koleżankom z innych obszarów badawczych.

Klasycyzm →

(proj. Franciszek Eichorn)



# Sprawozdania z konferencji...

**W dniach 26-19 czerwca 2013 odbyła się w Toruniu**, coroczna konferencja towarzystw bioinformatycznych Europy Północnej SocBIN13 połączona w tym roku z warsztatami BIT13 (BioInformatics in Toruń). Organizatorami byli: PTBI, SocBIN, oraz Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej UMK. W Hotelu Bulwar spotkało się blisko 150 osób zainteresowanych bioinformatyką, m.in., ze Szwecji, Danii, Litwy, Norwegii, Niemiec, Wlk. Brytanii, Szwajcarii, Rosji, USA, Kanady. *Keynote Lecture* wygłosił **Søren Brunak** z TU of Denmark („**Systems chemical analysis of adverse drug reactions extracted from electronic patient records**„). Wygłoszono 25 referatów zgrupowanych w 5 sesji tematycznych. Poziom referatów był znakomity. Dużo dyskusji odbywało się przy posterach prezentowanych w czasie 3 wieczornych sesji. W ramach środowych warsztatów BIT13 odbyło się 6 tutoriali w Instytucie Fizyki UMK. Więcej informacji, program, materiały konferencyjne i fotografie można znaleźć na stronie <http://ptbi.org.pl/SocBiN2013/>. Nowością były mini-targi pracy.

Członkowie PTBI i doktoranci uzyskali zniżki w opłacie konferencyjnej dzięki znacznej dotacji z Ministerstwa Nauki i Szkolnictwa Wyższego. Sponsorem konferencji był Urząd Marszałkowski Województwa Kujawsko-Pomorskiego. Dziękujemy ☺



WOJEWÓDZTWO  
KUJAWSKO-POMORSKIE



# Sala obrad: (a) z przodu

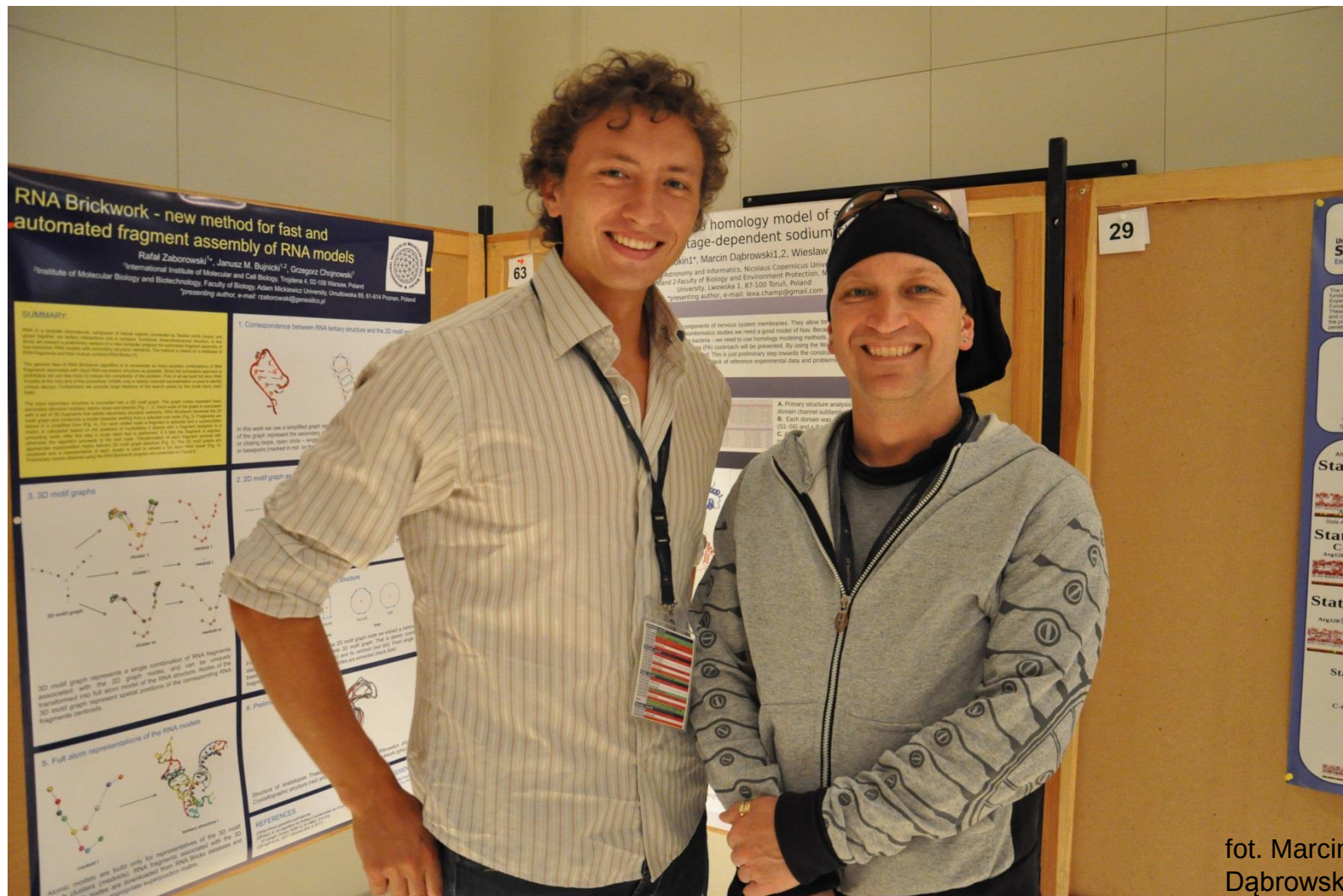


# Sala obrad: (b) z tyłu





# Kuluary – sesja posterowa



fot. Marcin  
Dąbrowski

Alex Shukin, UMK/Uzbekistan

Prof. Duncan Odom, U. of Cambridge/UK



# Zapatrzeni w gwiazdy..

fot. Marcin Dąbrowski





# i zasłuchani ....







fot. Marcin Dąbrowski

Uczestnicy konferencji SocBIN/ BIT13 w Toruniu, 26-29.06. 2013 Hotel Bulwar



# Liczby-Komputery-Życie

## III Studencka Konferencja Matematyczno-Informatyczno-Biologiczna w Krakowie

Już po raz trzeci studenci i doktoranci matematyki, informatyki, biotechnologii i biofizyki Uniwersytetu Jagiellońskiego łącząc siły, tworząc interdyscyplinarny projekt z pogranicza tych dziedzin, zorganizowali 3 Studencką Konferencję Matematyczno-Informatyczno-Biologiczną „Liczby-Komputery-Życie”. Otrzymała się ona w dniach 19 - 21 kwietnia 2013 r. w budynku Wydziału Matematyki i Informatyki Uniwersytetu Jagiellońskiego i zgromadziła ok 100 uczestników. Spotkanie miało na celu przybliżenie uczestnikom założeń i problemów jednej z najbardziej dynamicznie rozwijających się dziedzin współczesnej nauki – bioinformatyki. Wysłuchano szeregu referatów zaproszonych doświadczonych naukowców (R. Rudnicki, B. Wilczyński, M. Cieplak, M. Pasenkiewicz-Girula, P. Durka, S. Filipek, B. Wróbel, J. Śmietański, I. Rotermań) i ok. dziesięciu 20 min. referatów studenckich. Przeprowadzono konkursy abstraktów i posterów.

Szczegółowe sprawozdanie i informacje można znaleźć na stronie: [www.lkz.ksi.ii.uj.edu.pl](http://www.lkz.ksi.ii.uj.edu.pl)

**PTBI objęło swoim patronatem trzecią edycję tej interdyscyplinarnej konferencji.**

**Zaproszony referat inauguracyjny pt. „Selekcja zmiennych – zastosowanie w bioinformatyce” wygłosił Witold Rudnicki (ICM UW)**



# Symposium bioinformatyczne połączone z VI Zjazdem PTBI

odbyło się we Wrocławiu, w dniach 25.09 - 27.09.2013

(<http://ptbi.org.pl/PTBI2013/>). Przewodniczącą Komitetu

Programowego była Małgorzata Kotulska (Politechnika Wrocławska).

Obradowało ponad 80 członków PTBI oraz sympatyków bioinformatyki.

Symposium kontynuuje długą tradycję warsztatów dla doktorantów (11-te). Wykłady na zaproszenie wygłosili:

- Prof. Stanisław Cebrat, uniwersytet Wrocławski  
**Sympatric Speciation and Chromosome Evolution in the Computer Simulations**
- Prof. M. Saleet Jafri, George Mason University, Washington DC, USA,  
**Modeling the Molecular Basis of Calcium Entrained Cardiac Arrhythmias**
- Dr. Jean-Christophe Nebel, Kingston University, London, United Kingdom,  
**Protein-Protein Complex Structure Prediction**
- Prof. Andrzej Sokalski, Politechnika Wrocławska  
**Theoretical Design of New Enzymes**
- Prof. Joanna Szyda, Wrocławski Uniwersytet Przyrodniczy  
**Bioinformatic Challenges in the Analysis of Complex Traits**

Ponadto wysłuchano 19-tu krótszych referatów wybranych przez Komitet Programowy (po trudnej selekcji) spośród licznych zgłoszeń. Pozostałe prace były prezentowane w formie posterów. W trakcie Sympozjum odbyły się konkursy: na najlepszą prezentację oraz na najlepszy plakat. Wysokość nagród dla każdej kategorii wyniosła 1000 PLN. Nagrodę za najlepszą prezentację zdobył **Przemysław Gagat** (Uniwersytet Wrocławski): *"The role of vesicular trafficking in evolution of primary plastids inferred from bioinformatics analyses"*. Dwie równorzędne nagrody za **najlepszy plakat** zdobyli: **Piotr Posacki** z Uniwersytetu Wrocławskiego za plakat: *"Simulations of evolution of populations with changing mutation rate"* oraz **Mateusz Dobrychłop** z Uniwersytetu Adama Mickiewicza w Poznaniu za plakat: *"Pyry3D UCSF Chimera Extension and its application in prediction of macromolecular complexes' structure"*

(M.Kotulska, W.Nowak)



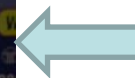
## Liczba uczestników



Zjazdowa  
statystyka



<http://ptbi.org.pl/PTBI2013/index.php/photos>



organizatorzy zjazdu PTBI we  
Wrocławiu

# Walne Zebranie PTBI wybrało Zarząd i Komisję Rewizyjną na III kadencję 2014-2016.

Na Zjeździe odbyło się Walne Zebranie członków PTBI w którym uczestniczyło blisko 40 osób. Szczegółowy protokół jest dostępny na stronach [www Towarzystwa](http://www.towarzystwa.org). Zebrani wysłuchali sprawozdania Prezesa Janusza Bujnickiego i sprawozdania Komisji Rewizyjnej przedstawionego przez Jacka Błażewicza. Skarbnik Witold Rudnicki podkreślał, że dzięki zabiegom Zarządu (wystąpienia o dotacje do MNiSzW zakończone dwukrotnie sukcesem), ostrożnemu wydawaniu środków na konferencje i regularnym wpływom ze składek już ponad 150 członków, sytuacja finansowa PTBI jest stabilna. Zebranie udzieliło absolutorium ustępującemu Zarządowi. Odbyły się wybory nowego Prezesa PTBI i Zarządu. **Prezesem został Witold Rudnicki** (ICM UW, Warszawa) Ukonstytuował się on na kadencję 2014-16 w następującym składzie:

Aleksandra Gruca (P Śl) – skarbnik

Małgorzata Kotulska (PWroc) – sekretarz

Wiesław Nowak (UMK) – wiceprezes

Witold Rudnicki – prezes

Marta Szachniuk (PP) – wiceprezes

Przewodniczącą komisji rewizyjnej została wybrana Anna Gambin (UW), a w jej skład weszli Andrzej Polański (P Śl) i Piotr Łukasiak (PP)



# Uczestnicy Sympozjum i VI Zjazdu PTBI we Wrocławiu



# Wyniki IV edycji Konkursu PTBI na Najlepszą Pracę Doktorską z Bioinformatyki w roku 2012

Do konkursu zgłoszono 6 prac. Zgodnie z regulaminem konkursu komisja konkursowa (w składzie: Wiesław Nowak, Jacek Błażewicz, Jerzy Tiuryn) poprosiła niezależnych ekspertów o nadesłanie opinii wraz z punktacją. Każda z prac była oceniana przez dwóch recenzentów. Po nadesłaniu recenzji komisja wyłoniła najlepszą

pracę, którą została rozprawa doktorska **Julii Romanowskiej** z Uniwersytetu Warszawskiego pt. *Comparing physical properties of aminoglycoside antibiotics' binding sites in RNA and proteins*  
promotor pracy: Joanna Trylska.

Nagroda: 6 000 PLN

**Serdecznie gratulujemy!**



Ps. W tym roku udało się zwiększyć nagrodę dzięki dotacji MNiSZW

# Laureatka - dr Julia Romanowska o sobie:

Moja praca w roli naukowca to trochę szczęścia, uczenie się na (własnych) błędach i przede wszystkim mnóstwo świetnych ludzi spotkanych "po drodze", którzy mi pomagali, wskazywali drogę czy popychali do działania. Na początku 5. roku studiów na Biofizyce na UW, dzięki zbiegowi okoliczności zgłosiłam się do Joasi Trylskiej z pytaniem czy nie znalazłaby dla mnie tematu na pracę magisterską. Temat znalazła, jak i miejsce do pracy, a potem tak mi się spodobało, że zostałam na doktorat. Moje atomistyczne symulacje antybiotyków wiążących się do RNA na początku wydawały mi się trochę zawile, a kontekst niezrozumiały. Jednak z czasem udało mi się z pomocą promotor pojąć jaki jest cel tych badań i mogłam zaplanować sama dalsze symulacje i analizę, aż wreszcie udało się mi napisać pracę i ją obronić. Jednak doktorat to nie tylko siedzenie przed komputerem. Joanna bardzo dobrze rozumiała, że podczas doktoratu muszę zdobyć tak różne umiejętności jak pisanie artykułów, grantów, sprawozdań, dyskusje z innymi naukowcami, zadawanie istotnych pytań podczas wykładów czy wreszcie po prostu zawieranie "naukowych" znajomości. Dzięki mojej promotor po ukończeniu doktoratu czuję się pewnie w tym świecie naukowców i mogę konkurować z osobami ze znanych światowych uniwersytetów. Tuż po ukończeniu doktoratu udało mi się dostać do bardzo dobrej grupy Prof. Rebeki Wade w Heidelbergu (Niemcy), która jest wysoko cenioną ekspert w dziedzinie symulacji metodą dynamiki brownowskiej. Tak więc mam szansę poszerzyć moją wiedzę i zyskać nowe umiejętności, a przede wszystkim pracować w kolejnej świetnej grupie naukowej. Jestem bardzo zadowolona, że jury uznało moją pracę doktorską za najlepszą spośród nadesłanych i szczególnie się cieszę, że to PTBI przyznało mi to wyróżnienie, gdyż to właśnie na pierwszym zjeździe PTBI w 2008 zadebiutowałam z ustną prezentacją wyników moich symulacji i to po angielsku (to było przeżycie!). Zawsze będę miło wspominać tamtą konferencję.



# Wyniki V edycji Konkursu PTBI na Najlepszą Pracę Magisterską z Bioinformatyki

Do konkursu zgłoszono 7 prac magisterskich obronionych w 2012 roku. Każda praca została oceniona przez 4 anonimowych recenzentów. Kryterium oceny były walory naukowe, poznawcze i praktyczne otrzymanych wyników. Zgodnie z regulaminem konkursu (szczegóły regulaminu na [stronie PTBI](#)) komisja konkursowa (w składzie: Piotr Formanowicz, Anna Gambin, Izabela Makałowska) podsumowała głosy recenzentów i przyznała jedną nagrodę główną oraz dwa wyróżnienia. Członkowie komisji nie brali udziału w ocenie prac i nie wpływali na oceny przyznawane przez recenzentów.

- **Nagroda główna: Błażej Osiński**  
z Uniwersytetu Warszawskiego  
za pracę pt. *Przewidywanie miejsc cis-regulatorowych z wykorzystaniem sygnałów epigenetycznych*  
promotor pracy: Jerzy Tiurnyn
- **Wyróżnienia:**  
**Wojciech Rosikiewicz**  
z Uniwersytetu im. Adama Mickiewicza w Poznaniu  
za pracę pt. *Analiza sekwencji TSS genów nakładających się na końcach 5' w genomach myszy i człowieka*  
promotor pracy: Izabela Makałowska  
oraz  
**Marek Szewczyk**  
z Instytutu Informatyki Politechniki Poznańskiej  
za pracę pt. *Wysoko-przepustowa statystyczna analiza parametrów struktur białkowych*  
promotor pracy: Jacek Błażewicz

Autorom nagrodzonych prac serdecznie gratulujemy!



Mgr Wojciech Rosikiewicz  
otrzymał wyróżnienie w konkursie PTBI na  
najlepszą pracę magisterską w 2012.

Pisze o sobie:

Aktualnie znajduję się w piątym wymiarze (czyt. Japonia),  
gdzie odbywam staż naukowy na Uniwersytecie Tokijskim.  
Mam tutaj szansę współpracować z twórcami bazy DBTSS,  
z której to pozyskałem dane niezbędne do przeprowadzenia

badań związanych z moją pracą magisterską. Skupiałem się w niej na opracowaniu  
nowych metod wyszukiwania genów nakładających się na  
końcach 5' w genomach człowieka i myszy. Praca ta była jednak jedynie  
wstępem do mojego obecnego projektu, kontynuuję bowiem rozpoczęty już wtedy temat  
podczas swojego doktoratu. Mam nadzieję, że wyniki moich badań zrewolucjonizują  
sposób w jaki obecnie postrzegamy regulację ekspresji genów, lub że przynajmniej uda  
się je stosunkowo dobrze opublikować.

Nagrodę pieniężną przyznaną mi w konkursie na najlepszą pracę magisterską  
planuję przeznaczyć na zakup nowych okularów oraz monitora, gdyż w wyniku ciągłej  
pracy przy komputerze, mój wzrok uległ znacznemu osłabieniu. \*

# Mgr Marek Szewczyk otrzymał wyróżnienie w konkursie PTBI na najlepszą pracę magisterską w 2012.



Będąc na pierwszym semestrze studiów magisterskich z Informatyki (na Wydziale Informatyki Politechniki Poznańskiej) zdecydowałem się na półroczny wyjazd na studia do Luksemburga w ramach programu Erasmus. Kierowała mną wówczas chęć poznania innych kultur, doskonalenia języka i zwykła ludzka ciekawość. W ramach wymiany naukowej miałem możliwość odbycia stażu w interdyscyplinarnym centrum naukowym LCSB (Luxembourg Centre for Systems Biomedicine) działającym przy Uniwersytecie Luksemburskim. Tematem przewodnim tego stażu była szeroko pojęta bioinformatyka, a konkretnie predykcja struktury trzeciorzędowej białek. Zagadnienie to, które stało się następnie tematem mojej pracy magisterskiej, analizowane było we współpracy bioinformatyków z Instytutu Informatyki PP (prof. Jacek Błazewicz i dr Marta Szachniuk) z naukowcami z LCSB (grupa dr Reinharda Schneidera).

Podczas pracy w LCSB poznałem podstawy kompletnie obcej mi do tamtej pory dziedziny nauki jaką była bioinformatyka. Zdobytą wiedzę wykorzystałem w pracy magisterskiej pt. „Wysoko-przepustowa statystyczna analiza parametrów struktur białkowych”. Zauważyłem, że przy przewidywaniu struktur białkowych wykorzystuje się pewne reguły. Zadałem sobie wówczas pytanie czy wyjątki od tych reguł rzeczywiście są wyjątkami, których nie warto przeanalizować czy usystematyzować? Zacząłem badać zależności pomiędzy wartościami wybranych parametrów struktur białkowych zakwalifikowanych jako prawidłowe bądź znacznie odległe od oczekiwanych (anomalie), a pewną abstrakcyjną klasą białka determinowaną przez mnogość elementów struktur drugorzędowych (helisy, nici beta, pętle omega). Angażując w analizę narzędzia eksploracji danych takie jak klasyfikatory, algorytmy grupujące, korelacje doszedłem do interesujących wyników.

Wracając do samej bioinformatyki - kojarzy mi się ona z zastosowaniem informatyki w problemach natury z pogranicza biologii, medycyny, chemii i fizyki. Nie jest to na pewno łatwa gałąź nauki. Z reguły informatycy mają trudności ze zrozumieniem zagadnień biologiczno-chemiczno-medycznych, a naukowcy specjalizujący się w tych dziedzinach rzadko posiadają zaawansowaną wiedzę informatyczną. Jestem pewien, że to od bioinformatyków będzie głównie zależało rozwiązywanie kluczowych problemów w biologii czy medycynie.

Obecnie pracuję jako programista w jednej z firm informatycznych w Poznaniu. Jeżeli chodzi o plany na przyszłość to rzadko planuję coś z wyprzedzeniem. Lubię spontaniczne podróże – najbardziej na dwóch kółkach. Nagrody z konkursu na pewno się rowerzyście przydadzą ☺.

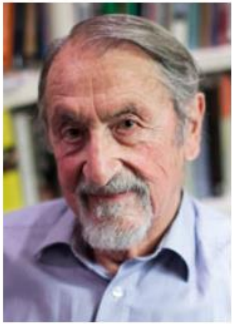


# Przypominamy adresy z informacjami o konferencjach bioinformatycznych:

- <http://www.conference-service.com/conferences/bioinformatics.html>
- <http://www.conferencealerts.com/bioinform.htm>
- <http://www.iscb.org/iscb-conferences>
- <http://www.socbin.org/conferences.shtml>



# Nagrody Nobla 2013 dla prawie bioinformatyków ...



© Nobel Media AB  
Martin Karplus



Photo: Keilana via  
Wikimedia Commons  
Michael Levitt



Photo: Wikimedia  
Commons  
Arieh Warshel

The Nobel Prize in Chemistry 2013 was awarded jointly to Martin Karplus, Michael Levitt and Arieh Warshel *"for the development of multiscale models for complex chemical systems"*.



Photo: © Yale  
University  
James E.  
Rothman



Photo: H. Goren.  
© HHMI  
Randy W.  
Schekman



Photo: © S. Fisch  
Thomas C.  
Südhof

**Chemia:** twórcy podwalin biologicznych zastosowań metod modelowania komputerowego i dynamiki molekularnej są doskonale znani wielkiej części naszej społeczności

**Medycyna:** transport komórkowy, odkrycie neureksyny, to tylko niektóre z osiągnięć tegorocznych laureatów mających wpływ na badania bioinformatyczne w PL

Gratulujemy ☺ !

# Na szerokie wody....

Prezesi PTBI (aktualny i poprzedni, tj. Janusz M. Bujnicki i Jerzy Tiurnyn) napisali i opublikowali artykuł „*Bioinformatics and Computational Biology in Poland*”, który ukazał się w znanym czasopiśmie

PLOS Computational Biology

(<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/23658507>) i jak dotąd został obejrzany przez 5374 osób (dane z 2013.09.24)

*Polecamy tę pouczającą lekturę !*



# Kto w bitach piszczy???

Kontynuujemy cykl prezentacji grup bioinformatycznych prowadzących badania w Polsce. W tym numerze zamieszczamy informacje o 2 grupach, w których działają „aktywiści” PTBI:

- o zespole działającym na Wydziale Chemii Uniwersytetu Warszawskiego (opowiada Andrzej Koliński),
- o grupie biologii obliczeniowej z Wydziału Matematyki, Informatyki Mechaniki Uniwersytetu Warszawskiego (pisze Anna Gambin, przy okazji zwracamy uwagę na seminaria BOB organizowane przez ten zespół...

Zapraszamy wszystkie polskie grupy bioinformatyczne do nadsyłania materiałów do umieszczenia w kolejnych numerach Bioinformatorka!

W ramach badań z biologii obliczeniowej **Jerzy Tiuryn** zajmuje się kilkoma zagadnieniami, do których można zaliczyć: (1) genomika porównawcza blisko spokrewnionych szczepów bakteryjnych oraz analiza rozkładu mutacji w genomach w zastosowaniu do przewidywania oporności poszczególnych szczepów na leki. (2) Analiza sekwencji promotorowych w zastosowaniu do przewidywania ewolucyjnie zachowanych elementów regulatorowych. (3) Modelowanie ewolucji rodzin genów oraz analityczne wyznaczanie rozkładów licznosci tych rodzin w poszczególnych modelach. (4) Problematyka uzgadniania drzewa gatunków z nieukorzenionymi drzewami genów. (5) Wielkoskalowe (na skalę genomową) przewidywanie wiązań dimerów czynników transkrypcyjnych z uwzględnieniem specyficzności komórkowej oraz z wykorzystaniem danych o otwartości chromatyny. Badania te są częściowo prowadzone we współpracy z National University of Singapore oraz Genome Institute of Singapore, a także z szeregiem polskich biologów i matematyków (w tym również koleżanek i kolegów z zespołu MIM UW).

**Norbert Dojer** zajmuje się szeroko rozumianą analizą sekwencji biologicznych. Jego badania obejmują: (1) algorytmy przetwarzające dane z sekwencjonowania nowej generacji, w tym m.in. mapowanie odczytów i składanie sekwencjonowanych genomów z pomocą genomu spokrewnionego, (2) metody predykcji obszarów DNA regulujących transkrypcję genów, a także analizę ich funkcji, (3) algorytmy uliniowania (alignment) wielu sekwencji.

Grupa **Anny Gambin** prowadzi badania w zakresie biologii systemów skoncentrowane na zastosowaniach w medycynie molekularnej. Prace badawcze prowadzone są w ścisłej współpracy z instytutami medycznymi w Polsce (Inst. Medycyny Doświadczalnej i Klinicznej PAN oraz Instytut Matki i Dziecka) i za granicą (Baylor College of Medicine, Huston oraz Flemish Institute for Technological Research) i dotyczą takich zagadnień jak: analiza rearanzacji genomowych, degradomika kliniczna, modelowanie onkogennych szlaków sygnałowych i efektywne algorytmy przetwarzania danych spektrometrycznych. Kolejny ciekawy międzynarodowy projekt kierowany przez Annę Gambin realizowany razem z grupą naukowców z Centrum Genetyki Molekularnej CNRS i biologami z Uniwersytetu Rolniczego w Krakowie dotyczy modelowania ewolucji transpozonów oraz aktywowania ich proliferacji w odpowiedzi na stres środowiskowy.

**Paweł Górecki** prowadzi badania związane z obliczeniowymi aspektami porównywania drzew filogenetycznych oraz dyskretnymi modelami ewolucji. Wśród głównych tematów badań znajdują się problemy uzgadniania drzew genów i gatunków, horyzontalnego transferu genów, korekcji błędów w drzewach genów, ukorzeniania drzew genów, efektywnych algorytmów rekonstrukcji superdrzew, duplikacji genów i genomów oraz probabilistycznych modeli ewolucji genów i gatunków. W ostatnich latach pojawiły się nowe zagadnienia związane z metagenomiką oraz porównywaniem dużych zbiorów sekwencji. Paweł Górecki współpracuje z Jerzym Tiurynem (UW), Oliverem Eulensteinem (Iowa State University), Szymonem Kielbasą (Leiden Medical University) oraz Pawłem Szczęsnym (UW, PAN).

**Bartek Wilczyński** pracuje nad różnymi aspektami genomiki regulatorowej. Projekty jego studentów obejmują metody wyszukiwania aktywnych sekwencji regulatorowych i modele regulacji transkrypcji przy użyciu metod uczenia maszynowego. W ostatnich latach szczególnie ciekawia go pytania związane z rolą chromatyny (modyfikacji histonów i struktury 3D) w regulacji transkrypcji.







# **Profesor Andrzej Koliński kieruje Pracownią Teorii Biopolimerów (PTB) Wydziału Chemii Uniwersytetu Warszawskiego od chwili powstania tej pracowni w 1998 roku.**

Przez około 20 lat prof. Koliński dzielił pracę na Uniwersytecie Warszawskim z zatrudnieniem na stanowiskach profesorskich w kilku renomowanych laboratoriach w USA, w tym: Department of Chemistry, Washington University, Saint Louis, Missouri, od 1985 do 1989, The Scripps Research Institute, San Diego, California, od 1991 do 1999, Donald Danforth Plant Science Center, Saint Louis, 1999-2002 i Center of Excellence in Bioinformatics, State University of New York at Buffalo, od 2002 do 2003.

Pracownia Teorii Biopolimerów zajmuje się tworzeniem nowych metod modelowania molekularnego, użytecznych w badaniach układów polimerowych i układów bimolekularnych, w szczególności białek i ich kompleksów. W wyniku badań prowadzonych w PTB powstało szereg unikalnych metod modelowania molekularnego wielkich układów polimerowych i biopolimerowych. Symulację gęstych roztworów giętkich polimerów łańcuchowych pozwoliły wyjaśnić mechanizm dyfuzji tego typu makromolekuł w ciekłych roztworach. Nowsze prace koncentrują się na obiektach biomakromolekularnych, teoretycznym badaniu struktury biopolimerów, ich dynamiki i oddziaływań. Opracowane zostało kilka metod uproszczonego (gruboziarnistego) modelowania struktury i dynamiki biomolekuł. Chyba najbardziej znany jest model CABS, służący do symulacji procesów zwijania struktury białek, ich własności dynamicznych i kompleksowania z innymi biomolekułami. Algorytmy wykorzystujące model CABS pozwalają symulować procesy długoczasowe, trudno osiągalne za pomocą klasycznych metod dynamiki molekularnej. Co bardzo ważne, rozdzielczość zredukowanego modelu CABS jest wystarczająca dla wiarygodnego odbudowania struktur pełno atomowych. Umożliwia to stosunkowo dokładne obliczeniowe przewidywanie zachowania się biomolekuł i ich kompleksów na poziomie atomowym, co ma duże znaczenie dla biologii molekularnej, racjonalnego projektowania leków, itp.

Szereg metod modelowania układów biomolekularnych tworzonych w Pracowni Teorii Biopolimerów jest dostępnych na stronie Pracowni lub szczegółowo opisanych w pracach badawczych i przeglądowych. Poprzez stronę <http://biocomp.chem.uw.edu.pl> udostępniamy m.in.: CABSserver - przewidywanie struktury białek z użyciem sekwencji celu i struktur-szablonów (lub de-novo), CABSflex - serwer generujący zestawy konformacji alternatywnych stanu natywnego, pyCABS - wrapper w pythonie ułatwiający obsługę CABS oraz aplikacje do analizy skupień (HCPM, ClusCo).

W pracowni rozwijany jest również pakiet BioShell (<http://bioshell.pl>) – biblioteka języka Java umożliwiająca różnorodne operacje z dziedziny bioinformatyki i modelowania struktur białek. Strona domowa projektu zawiera bogatą dokumentację oraz wiele przykładów ilustrujących wykorzystanie modułów BioShella z poziomu języka Python. Na bazie projektu opracowano również serwery do przewlekania białek (<http://bioshell.pl/threader>) oraz do modelowania ich dynamiki metodą sieci elastycznych (<http://bioshell.pl/ENM>)





# Uwaga doktorzy wypromowani w roku 2013 !!

- Konkurs PTBI z wysoką nagrodą 6000 zł<sup>\*)</sup> za najlepszą pracę doktorską z bioinformatyki w roku 2013 → szczegóły na stronie:  
[http://ptbi.org.pl/index.php?option=com\\_content  
&view=article&id=46&Itemid=117](http://ptbi.org.pl/index.php?option=com_content&view=article&id=46&Itemid=117)
- Powiadom znajomych, nie muszą być członkami PTBI by startować!
- Termin nadsyłania prac mija **15 marca** 2014  
(zgłoszenie = wysłanie pracy w pdf emailom)

<sup>\*)</sup> o ile będzie przyznana dotacja na ten cel



## (WLW) = Wtórne Lanie Wody czyli (RE SOURCES)

- Czasopismo Science przyznało nagrodę the [Science Prize for Inquiry-Based Instruction](http://www.aaas.org/news/releases/2013/0604_ibi.shtml) (IBI) dla kursu biologii obliczeniowej  
[http://www.aaas.org/news/releases/2013/0604\\_ibi.shtml](http://www.aaas.org/news/releases/2013/0604_ibi.shtml)
- Projekt GEUVADIS (Genetic European Variation in health and Disease) dostarczył nowych cennych danych przybliżających nas do spersonalizowanej medycyny: [http://www.ebi.ac.uk/about/news/press-releases/GEUVADIS\\_2013](http://www.ebi.ac.uk/about/news/press-releases/GEUVADIS_2013)
- W Japonii też jest towarzystwo bioinformatyczne (haj!) :  
<https://www.jsbi.org/en/about/>
- TogoTV i bioinformatyka w formie kursów wideo  
<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC3294242/> może warto i u nas?

PS. Zapraszamy do współpracy przy redagowaniu Bioinformatorka, kontakt: SRN Wiesław Nowak: wiesiek [\*at\*] fizyka.umk.pl

**Zapraszamy wszystkie nie prezentowane  
jeszcze polskie grupy bioinformatyczne do  
nadsyłania materiałów do umieszczenia w  
kolejnych numerach Bioinformatorka!**

# Polish Research Groups in Bioinformatics

In this document you find a list of Polish research groups in bioinformatics and computational biology as of May 2013, based on the article:

**Bujnicki JM, Tiuryn J (2013) Bioinformatics and Computational Biology in Poland.**

**PLoS Comput**

*Biol* 9(5): e1003048. doi:10.1371/journal.pcbi.1003048

This list was created by Kristian Rother, trainer for scientific communication (www.academis.eu). The author gives no guarantee that the information below is correct or complete, and currently no efforts for further maintenance are planned. You may distribute this document freely. *If you copy or modify parts of the document, please remove Kristian as an author and place your own name there.* ➔ Formated for Bioinformatorek #9 by Wiesław Nowak

**Warsaw (Warszawa)**

**University of Warsaw**

**Andrzej Koliński** modeling of protein structures and complexes

<http://biocomp.chem.uw.edu.pl/>

**Sławomir Filipek** modeling of structure, dynamics and interactions of membrane proteins, drug interactions

<http://www.biomodellab.eu/>

**Krzysztof Ginalski** homology detection and classification of protein superfamilies, in particular enzymes acting on nucleic acids

<http://www.cent.uw.edu.pl/pl/badania/lab/lbbs>

**Dariusz Plewczyński** meta-predictors for small molecule docking and virtual screening

[http://cs.icm.edu.pl/Systems\\_Biology/Welcome.html](http://cs.icm.edu.pl/Systems_Biology/Welcome.html)

**Joanna Trylska** development and application of methods for biomolecular simulations of large macromolecular complexes involving proteins, nucleic acids, and small molecules

<https://bionano.cent.uw.edu.pl/>

**Witold Rudnicki** GPU-accelerated algorithms in sequence alignment, machine learning, such as analysis of drug resistance mutations in HIV

<http://www.icm.edu.pl/~rudnicki/>

**Jerzy Tiuryn** sequence analyses, phylogenetics, evolution of gene families, genomics, systems biology

<http://www.mimuw.edu.pl/~tiuryn/>

**Bartek Wilczyński** computational genomics, computational enhancer prediction, Bayesian network modeling of gene regulatory networks, Biopython

<http://bartek.rezolwenta.eu.org>

**Anna Gambin** systems biology focused on applications in molecular medicine, clinical degradomics, kinetic modeling of oncogenic pathways, processing of mass spectrometry data, analysis of genomic disorders

<http://www.mimuw.edu.pl/~aniag/>



## **IBB PAS**

**Piotr Zielenkiewicz** text mining, computational modeling of protein-protein and protein-drug interactions

<http://www.ibb.waw.pl/en/structure/ibbdepartments/>

department-bioinformatics

## **Mossakowski Medical Research Centre (MMRC) PAS**

**Bogdan Lesyng** development and applications of bioinformatics and systems

biology methodologies in molecular medicine, theoretical and experimental studies of oncogenic processes, including multiscale modeling, drug design, microarray analyses, and simulations of oncogenic signaling pathways

[http://www.icm.edu.pl/~lesyng/research\\_group.html](http://www.icm.edu.pl/~lesyng/research_group.html)

## **Institute of Physics PAS**

**Marek Cieplak** protein folding and unfolding, molecular dynamics and lattice models

<http://info.ifpan.edu.pl/SL-4/index.php?group=cieplak>

## **Maria Skłodowska-Curie Memorial Cancer Centre**

**Lucjan Wyrwicz** various aspects of bioinformatics related to cancer and oncology

<http://bioinfo.pl/lw.html>

## **Institute of Fundamental Technological Research (IPPT) PAS**

**Tomasz Lipniacki** computational systems biology, stochastic simulations of regulatory systems

[http://pmbm.ippt.gov.pl/web/Main\\_Page](http://pmbm.ippt.gov.pl/web/Main_Page)

**International Institute of Molecular and Cell Biology in Warsaw (IIMCB)**  
**Janusz Bujnicki** development of predictive methods and their application in,  
e.g., protein structure prediction, prediction of intrinsic  
disorder in proteins, prediction of protein-RNA interactions,  
comparative bioinformatics of protein superfamilies,  
experimental protein engineering guided by bioinformatics,  
development of databases of information about pathways of nucleic  
acid metabolism

<http://www.genesilico.pl>

**Poznań**

**Adam Mickiewicz University (AMU)**

**Izabela Makałowska** computational analysis of gene and genome evolution

<http://ibmib.amu.edu.pl/index.php/en/integrgen-welcome>

**Wojciech Karłowski** computational genomics, including annotation and  
**functional**

analyses of small RNAs

<http://ibmib.amu.edu.pl/index.php/en/compngen-welcome>

**Borys Wróbel** computational simulation of development of multicellular  
organisms

<http://ibmib.amu.edu.pl/index.php/en/evolsys-welcome>

**Janusz Bujnicki** development of tools for RNA modeling, structural bioinformatics analyses of enzymes acting on RNA

<http://ibmib.amu.edu.pl/index.php/en/structbioinfo-welcome>

**PUT/IBCh PAS**

**Jacek Błażewicz** various aspects of computational biology, modeling of RNA metabolism, modeling of viral infections, DNA sequencing, assembling and mapping, microarray data analysis, application of Petri nets to study metabolic processes, protein structure modeling and evaluation, algorithms for RNA structural bioinformatics, GPU-based algorithms for sequence alignment and next-generation sequence data analysis

<http://www.cs.put.poznan.pl/jblazewicz/>

**IBCh PAS**

**Ryszard W. Adamiak** biomolecular NMR, molecular dynamics simulations of RNA,

tools for RNA 3D structure modeling, NMR spectra analysis

<http://www.ibch.poznan.pl/adamiak/>

**Jan Barciszewski** databases of non-coding RNAs and aminoacyl-tRNA synthetases

<http://lib.bioinfo.pl/auid:95626>

**BioInfoBank**

**Leszek Rychlewski** design of therapeutic proteins and drugs, technology transfer

<http://lib.bioinfo.pl/>



## **Wrocław**

### **Wrocław University of Technology**

**W. Andrzej Sokalski** development of computational methods for exploring origins

of enzyme catalytic activity, analysis and prediction of activity of enzyme inhibitors, rational design of biocatalysts

<http://mml.ch.pwr.wroc.pl/~sokalski/was.html>

**Olgiard Unold** machine learning, prediction of amyloidogenic regions in proteins

<http://olgiard.unold.staff.iiar.pwr.wroc.pl/>

**Małgorzata Kotulska** structural bioinformatics, quality assessment of models of protein 3D structure

<http://www.ibp.pwr.wroc.pl/KotulskaLab/index.php?menu=ludz&id=mkotulska>

**Małgorzata Bogdan** statistical human genomics, in particular on the problem of locating quantitative trait loci

<http://www.im.pwr.wroc.pl/~mbogdan/>

### **Wrocław University of Environmental and Life Sciences**

**Joanna Szyda** statistic genomics of animals

<http://theta.edu.pl/>

## **University of Wrocław**

**Stanisław Cebrat** theoretical and computational genomics, Monte Carlo simulations of genome and population evolution

[http://pl.wikipedia.org/wiki/Stanis%C5%82aw\\_Cebrat](http://pl.wikipedia.org/wiki/Stanis%C5%82aw_Cebrat)

**Gdańsk**

**University of Gdańsk**

**Adam Liwo/Cezary Czaplewski coarse-grained modeling of protein and peptide folding**

<http://www.chem.univ.gda.pl/kcht/czaplewski.shtml>

**Jerzy Ciarkowski molecular dynamics of proteins and peptides, in particular**

those associated with biological membranes

<http://www.chem.univ.gda.pl/kcht/ciarkowski.shtml>

**Sylwia Rodziewicz-Motowidło protein and peptide folding, in particular on cystatin C**

<http://www.chem.univ.gda.pl/kchmed/srm.html>

**Stanisław Ołdziej conformational transitions in proteins by molecular dynamics**

[http://www.biotech.ug.edu.pl/index\\_eng?](http://www.biotech.ug.edu.pl/index_eng?)

[mmenu=10221&katedra=5&zaklad=1](http://www.biotech.ug.edu.pl/index_eng?mmenu=10221&katedra=5&zaklad=1)

**Rajmund Kaźmierkiewicz molecular interactions, e.g., in bacterial kinases responsible**

for biofilm formation

<http://www.biotech.ug.edu.pl/index.php?>

[mmenu=10221&katedra=5&zaklad=2&rp=index.php](http://www.biotech.ug.edu.pl/index.php?mmenu=10221&katedra=5&zaklad=2&rp=index.php)

[%3Fmmenu%3D10114](http://www.biotech.ug.edu.pl/index.php?mmenu=10221&katedra=5&zaklad=2&rp=index.php%3Fmmenu%3D10114)

**Cracow (Kraków)**

**Jagiellonian University**

**Marta Pasenkiewicz-Gierula application of molecular dynamics simulations in the study of**

lipid bilayers and their interactions with various membrane active molecules

<http://lib.bioinfo.pl/auid:2133859>

**Irena Roterman-Konieczna structural bioinformatics, e.g., protein folding and interactions**

<http://www.bit.cm-uj.krakow.pl/prof/stronka-prof2.html>

**Institute of Pharmacology PAS**

**Andrzej J. Bojarski studies on the serotonin receptors; variety of computational**

techniques, such as conformational sampling in homology

modeling, virtual screening, virtual combinatorial library

design and analysis, as well as measuring ligand-protein interactions

<http://lib.bioinfo.pl/auid:1513171>



## ***Other Cities***

**Silesian University of Technology in Gliwice**

**Andrzej Polański/Andrzej Świerniak analysis of gene expression and proteomics data**

<http://zis.ia.polsl.pl/aswierniak>

**Nicolaus Copernicus University (NCU) in Toruń**

**Wiesław Nowak biomolecular simulations of conformational transitions and interactions of enzymes with small molecules, steered MD of medically important proteins**

<http://www.fizyka.umk.pl/~wiesiek/>

**Centre of Molecular and Macromolecular Studies PAS in Łódź**

**Marek Cypryk computational chemistry and modeling of chemical reaction systems**

<http://www.cbmm.lodz.pl/work.php?id=21&title=marekcypryk>

**Medical University of Lublin**

**Dariusz Matosiuk modeling of proteins, in particular membrane receptors, and their interactions with small molecule ligands**

[http://www.umlub.pl/katedra\\_i\\_zaklad\\_syntezy\\_i\\_technologii\\_chemicznej\\_srodkow\\_leczniczych\\_id\\_187.html](http://www.umlub.pl/katedra_i_zaklad_syntezy_i_technologii_chemicznej_srodkow_leczniczych_id_187.html)

**Krzysztof Józwiak modeling of proteins, in particular membrane receptors, and**

**their interactions with small molecule ligands**

[http://www.umlub.pl/samodzielna\\_pracownia\\_chemii\\_i\\_neuroinżynierii\\_medycznej\\_id\\_194.html](http://www.umlub.pl/samodzielna_pracownia_chemii_i_neuroinżynierii_medycznej_id_194.html)