

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ НЕКОТОРЫХ МОДЕЛЕЙ БИОИНФОРМАТИКИ

Акиншин А.А.

Алтайский Государственный Технический Университет им. И.И. Ползунова, Кафедра Прикладной Математики, 656038, Российская Федерация, Алтайский край, г. Барнаул, пр. Ленина 46, Тел.: (3852)29-08-68, Факс: (3852)36-78-64, E-mail: andrey.akinshin@gmail.com

Одной из актуальных задач биоинформатики является изучение режимов функционирования моделей генных сетей, некоторые из которых были рассмотрены в рамках данной работы (см. [1]). К сожалению, современные математические пакеты не позволяют выполнить полноценный анализ ряда нестандартных задач. Поэтому для их решения был разработан программный комплекс PhasePortraitAnalyzer, который реализует специфичные численные алгоритмы с последующей визуализацией результатов расчётов в виде интерактивных представлений. Проект написан на C#, но в своём ядре использует язык программирования R для решения стандартных задач вычислительной математики (язык R — это свободная программная среда вычислений с открытым исходным кодом, которая содержит в себе десятки тысяч реализаций различных численных методов).

Одной из наиболее изученных в работе моделей является нелинейная циклическая динамическая система химической кинетики:

$$\dot{x}_1 = f_1(x_n) - x_1, \quad \dot{x}_2 = f_2(x_1) - x_2, \quad \dots, \quad \dot{x}_n = f_n(x_{n-1}) - x_n. \quad (1)$$

Вектор (x_1, x_2, \dots, x_n) соответствует концентрациям полимеров некоторой генной сети, а функция f определяет зависимость скорости синтеза полимера x_i от концентрации полимера x_{i-1} . В биологических интерпретациях часто используются отрицательные обратные связи, которые моделируются функцией Хилла: $f_i(w) = a \cdot (1 + w^m)^{-1}$.

Для системы (1) подробно описан фазовый портрет, детально проанализированы стационарные точки (они соответствуют гомеостазу генной сети) и периодические траектории (соответствуют биоритмам). Реализован новый эффективный алгоритм для поиска всех циклов системы при определённых условиях (см. [1]). Вместе с анализом исходной непрерывной модели строится и анализируется двойственная дискретная модель (см. [2]). В программном комплексе предусмотрена генерация разнообразных отчётов об исследуемых системах, включающих графические иллюстрации.

Литература.

1. Лихошвай В.А., Голубятников В.П., Демиденко Г.В., Евдокимов А.А., Фадеев С.И. Теория генных сетей // *Системная компьютерная биология. Интеграционные проекты*. — Новосибирск: СО РАН, 2008. Выпуск 14. Стр. 395—480.
2. Акиншин А.А., Голубятников В.П. Геометрические характеристики циклов в некоторых симметричных динамических системах // *Вестник НГУ, Серия “Математика, механика, информатика”*, Том 12, Выпуск 2, 2012. Стр. 3—12.