



В.М. Ефимов*, А.С. Новиков*,
А.А. Тихонов*, И.Р. Акбердин*,
В.А. Лихошвай*

Редукция динамических моделей генных сетей с помощью ортогональных преобразований

Введение. Одной из проблем, возникающих при анализе динамических моделей генных сетей, является большая размерность данных (десятки и сотни переменных и параметров, а также сотни и тысячи временных отсчетов). Однако реальная размерность моделей может быть значительно ниже за счет внутренней регулярности систем, которую можно распознать при использовании подходящих ортогональных разложений (proper orthogonal decomposition (POD), principal components analysis (PCA), singular value decomposition (SVD)). С помощью SVD-преобразований можно значительно уменьшить размерность системы дифференциальных уравнений, и преобразованная система может оказаться проще первоначальной. SVD-преобразования редко используются в биологии, однако являются обычной практикой в технических науках.

Методы и алгоритмы. Сущность метода заключается в сингулярном разложении матрицы «отсчеты–переменные», т. е. траектории динамической системы в многомерном пространстве, и отбрасывании осей (факторов) с нулевой и малой дисперсией. Оставшиеся факторы являются линейными комбинациями исходного множества переменных, а также новыми интегральными переменными, описывающими ту же самую динамическую систему с минимальной потерей информации. Обратное тоже верно, исходные переменные являются линейными комбинациями новых факторов. Замена переменных приводит к системе дифференциальных уравнений меньшей размерности, выраженной через новые факторы (Q – ортогональная матрица):

$$\dot{X} = f(X), \quad \dot{F} = XQ, \quad F = f(FQ)Q = \varphi(F)$$

Результаты. Мы исследовали семейство траекторий роста корня растения под влиянием ауксина, описываемых динамической моделью генной сети с 30 переменными и различными множествами начальных параметров. На первый фактор пришлось 68%, на первые 4 – 80% и на первые 10 – 99% общей дисперсии. Таким образом, 10 интегральных переменных вполне достаточно для формального описания системы. Все исходные переменные сделали основной вклад в первый фактор за исключением 4, которые сделали основной вклад в следующие три фактора. На рис. 1, 2 видна множественность стационарных состояний исследуемой системы.

Заключение. Ортогональные преобразования являются новым перспективным средством исследования динамических моделей генных сетей, позволяющим существенно редуцировать их структуру и размерность и визуализировать поведение системы в многомерном пространстве.

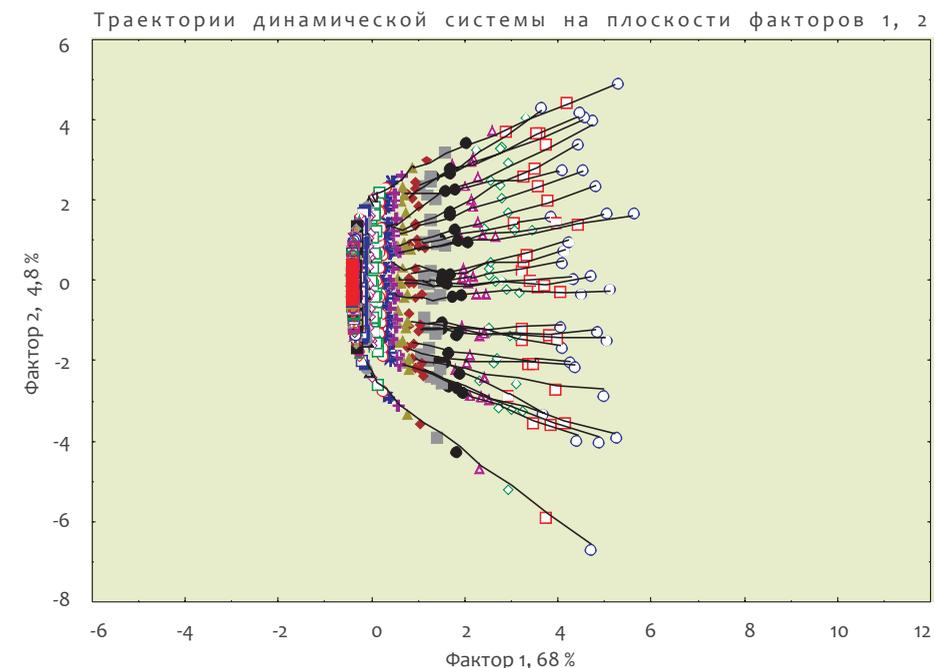


Рис. 1. Траектории динамической системы при различных начальных состояниях в проекции на плоскость факторов 1, 2.

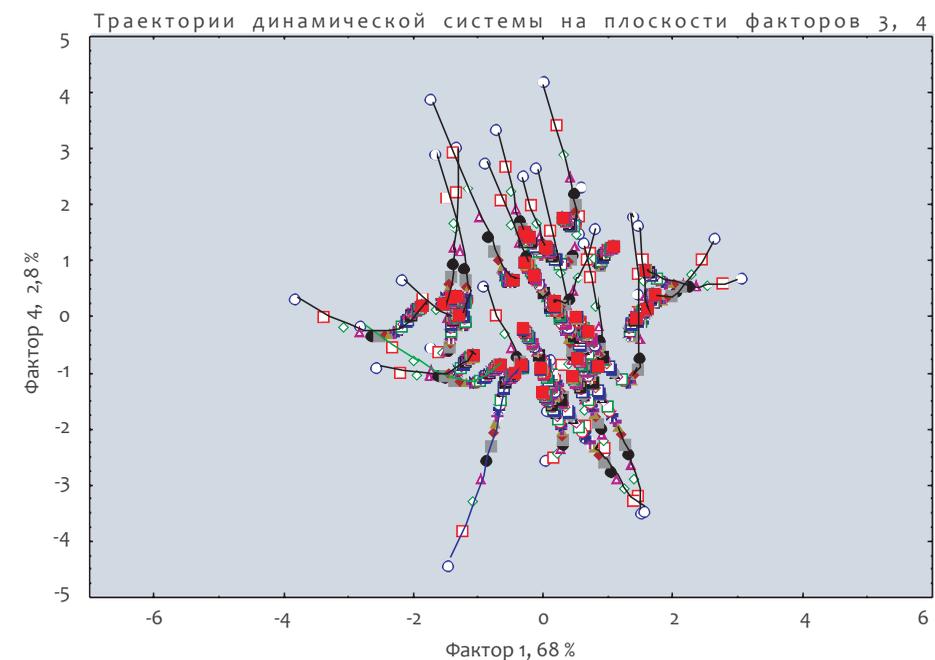


Рис. 2. Траектории динамической системы при различных начальных состояниях в проекции на плоскость факторов 3, 4.