УДК 514.745.82

ИЗУЧЕНИЕ ДИСКРЕТНЫХ СТРУКТУР В НЕКОТОРЫХ ЦИКЛИЧЕСКИХ ДИНАМИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

А.А. Акиньшин

Построен граф, представляющий собой двойственную структуру к некоторым динамическим системам, определяющим модели генных сетей. Описана топология такого рода графов, выделены их ключевые свойства. Показана полезность таких построений при анализе динамических систем.

Ключевые слова: циклические динамические системы, стационарные точки, периодические траектории, графы, циклы, модели генных сетей.

Введение

Рассмотрим динамическую систему, описываемую следующей циклической системой дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{x_1} = f_1(x_n) - x_1, \\ \dot{x_2} = f_2(x_1) - x_2, \\ \quad \dots \\ \dot{x_n} = f_n(x_{n-1}) - x_n, \end{cases} \qquad (1)$$

где $f_i: \mathbb{R}^+ \to \mathbb{R}^+$ – непрерывные дифференцируемые функции.

Системы вида (*1*) фигурируют в некоторых задачах биоинформатики при рассмотрении моделей генных сетей. Переменные x_i обозначают изменяющиеся во времени концентрации веществ, причём скорость синтеза концентрации каждого следующего вещества x_i зависит от концентрации предыдущего вещества x_{i-1} (за это отвечают обратные связи, представленные функциями $f_i(x_{i-1})$), а скорость деградации пропорциональна x_i. Более подробно системы такого рода описываются в работах [1-3].

С точки зрения биологии в этой системе наибольший интерес представляют стационарные точки (состояние гомеостаза) и периодические траектории (биоритмы). Однако изучать непрерывную модель генной сети весьма сложно. На рисунке 1 представлен пример фазового портрета системы небольшой размерности, в которой возникает несколько циклов. Иногда для более подробного изучения рассматриваемых объектов бывает полезно посмотреть двойственную дискретную модель. В настоящей работе рассматривается структура, которая при выполнении ряда ограничений на исходную систему позволяет значительно сузить область поиска периодических траекторий исследуемой динамической системы.

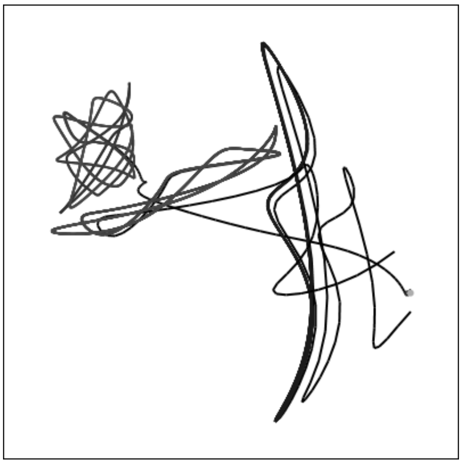

Рисунок 1 − Три траектории системы (1)

Стационарные точки

Рассмотрим некоторую стационарную точку $x^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*), x^* = \overline{0}$. Потребуем, чтобы для некоторой окрестности $V(x^*)$ этой точки выполнялось условия:

$$x_i \neq x_i^* \Rightarrow \dot{x}_i \neq 0, \quad \forall\, i \in \overline{1,n}, \;\; x \in V(x^*) \qquad (2)$$

Кроме того, потребуем, чтобы на границе $V(x^*)$ векторное поле, определяемое системой, было направлено внутрь, т.е. рассматриваемая часть динамической системы является инвариантной – траектории только входят в неё и никогда не выходят.

В этой точке рассмотрим характеристическое уравнение системы:

$$\begin{vmatrix} -1-\lambda & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & -1-\lambda & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\partial f_3}{\partial x_2} & -1-\lambda & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \frac{\partial f_n}{\partial x_{n-1}} & -1-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

Раскроем определитель и получим:

$$(-1-\lambda)^n = (-1)^n \frac{\partial f_1}{\partial x_n}\frac{\partial f_2}{\partial x_1}\cdots\frac{\partial f_n}{\partial x_{n-1}}.$$

Обозначим произведение производных с учётом знака символом Ψ, а среднее геометрическое модуля этой величины символом Υ:

$$\Psi = (-1)^n \frac{\partial f_1}{\partial x_n}\frac{\partial f_2}{\partial x_1}\cdots\frac{\partial f_n}{\partial x_{n-1}}, \Upsilon = \sqrt[n]{\Psi}$$

Если $\Psi > 0$, то будем называть точку *чётной*. Если $\Psi < 0$, то будем называть точку *нечётной*.

Если у стационарной точки найдутся собственные числа с положительной действительной частью, то такая точка будет отталкивающей, в противном случае – притягивающей. Путём несложных математических выкладок можно проанализировать собственные числа и выписать условия, при которых точка будет являться отталкивающей. Можно показать, что вид этого условия будет зависеть от чётности точки и от чётности размерности пространства n:

Вид точки	*Условие*
$n = 2r, \Psi > 0$	$\Upsilon > 1$
$n = 2r, \Psi < 0$	$\Upsilon\cos(\pi/n) > 1$
$n = 2r+1, \Psi > 0$	$\Upsilon\cos(\pi/(n-1)) > 1$
$n = 2r+1, \Psi < 0$	$\Upsilon > 1$

Граф кластеров

Будем называть *кластером* $P_{p_1p_2\cdots p_n}$ (p – двоичный n-мерный вектор, $p_i \in \{0,1\}$) такое множество точек, для которого выполняется условие:

$$\begin{cases} x_i < x_i^*, \text{если } p_i = 0, \\ x_i > x_i^*, \text{если } p_i = 1, \end{cases} \quad \forall\, i \in \overline{1,n}, x \in V(x^*)$$

Будем говорить, что кластеры *граничат по i-ой грани*, если соответствующие им бинарные векторы различаются только в одной компоненте. В силу непрерывности функций f_i и условия (*2*) можно заключить, что векторное поле, определяемое системой (*1*) по всей поверхности одной такой грани будет направлено в одну и ту же сторону, из одного кластера в другой.

Построим ориентированный граф, вершины которого будут соответствовать кластерам. Рёбра будут соединять граничащие кластеры, а их направление будет определяться направлением векторного поля. Из условия (*2*) также можно сделать вывод, что внутри отдельно взятого кластера не может возникнуть периодической траектории (т.к. x_i не меняют свой знак). А значит, если в окрестности $V(x^*)$ возникает периодическая траектория, то путь её следования проходит через ряд кластеров, образующий цикл в только что построенном графе (т.к. направление рёбер в графе кластеров совпадает с направлением векторного поля). Поэтому если мы опишем структуру рассматриваемого графа, то тем самым мы ограничим область исходной системы, в которой могут возникать циклы.

Очевидно, что количество рёбер каждой вершины (исходящих и входящих) равно размерности пространства и равно длине соответствующего двоичного вектора (т.к. каждое ребро соответствует изменению одной из его компонент). Рассмотрим два граничащих по k-ой грани кластера: $P = P_{p_1p_2\cdots p_n}$ и $Q = Q_{q_1q_2\cdots q_n}$, где

$$p_i = q_i, \text{ если } i \neq k,$$
$$p_k = 0,$$
$$q_k = 1.$$

Направление ребра между соответствующими вершинами можно установить следующим образом. Из (*1*) можно записать:

$$\dot{x_k} = f_k(x_{k-1}) - x_k.$$

Т.к. мы рассматриваем грань между двумя кластерами, то на её поверхности $x_k = x_k^* = f_k(x_{k-1}^*)$. Значит

$$\dot{x_k} = f_k(x_{k-1}) - f_k(x_{k-1}^*).$$

Отсюда можно сделать вывод: направление ребра будет определяться возрастанием или убыванием функции, а так же знаком разности между x_{k-1} и x_{k-1}^*, т.е. бинарным индексом $p_{k-1} = q_{k-1}$. Рассмотрим соответствующие пары индексов $p_{k-1}p_k$ и $q_{k-1}q_k$, выпишем для них направление ребра между вершинами.

Для убывающей функции f_k:

$$00 \to 01$$
$$11 \to 10$$

Для возрастающей функции f_k:

$$00 \to 01$$
$$11 \to 10$$

Потенциалы

Будем называть исходящую степень вершины её _потенциалом_, подразумевая под этим количество потенциальных вершин-кластеров, в которые мы можем перейти из текущей вершины. Если мы говорим о переходе из одного кластера в другой, то под изменением потенциала будет пониматься разность потенциала второго кластера и первого кластера. Назовём _потенциальным уровнем_ все кластеры с одинаковым потенциалом.

Топология графа кластеров

Рассмотрим несколько теорем, определяющих устройство графа кластеров. В силу большого объёма выкладок некоторые доказательства опущены.

Теорема 1. При переходе из одного кластера в другой потенциал либо не меняется, либо уменьшается на 2.

Доказательство. Переход от кластера к кластеру соответствует замене одной из компонент двоичного вектора. Что касается направления рёбер, то ситуация поменяется только в двух местах: в текущей компоненте и в следующей. В текущей изменение потенциала составит -1, т.к. одно исходящее ребро «исчезло», став входящим. Ситуация с изменением потенциала в следующей компоненте не определена, т.е. она может быть как +1, так и -1. Таким образом, общее изменение составит либо 0, либо -2, что и требовалось доказать.

Теорема 2. Внутри одной системы вида (3) потенциалы всех кластеров имеют одинаковую чётность.

Доказательство. Очевидно, что рассматриваемый граф является связным. В теореме 1 показано, что модуль разности потенциалов любых двух смежных кластеров чётен. Учитывая связность графа можно построить путь (по рёбрам любых направлений) из одной вершины в другую. При переходе по каждому очередному ребру потенциал не будет менять своей чётности, а значит, любые два кластера рассматриваемой системы имеют одну и ту же чётность, что и требовалось доказать.

Теорема 3. Чётность потенциала кластеров системы совпадает с чётностью стационарной точки.

Теорема 4. В пределах фиксированной размерности пространства n графы кластеров всех стационарных точек одной чётности изоморфны друг другу.

Теорема 5. В нечётномерных пространствах в пределах фиксированной размерности графы кластеров всех стационарных точек разной чётности изоморфны друг другу с точностью до единовременного изменения направлений всех рёбер.

Теорема 6. Количество вершин на уровне с потенциалом k равно $2\mathrm{C}_\mathrm{n}^\mathrm{k}$.

Применение графа кластеров

Анализ графа кластеров неоднократно применялся при рассмотрении моделей генных сетей ([4-12]). Рассмотрим простой пример полезности такой структуры. Допустим, мы имеем нечётную отталкивающую стационарную точку в трёхмерном пространстве. Подробные примеры точек такого рода можно найти в работах [13-15] – в качестве функций f_i берутся монотонно убывающие функции (для моделирования отрицательных обратных связей). Из теорем 2,3 можно заключить, что все кластеры будут обладать нечётным потенциалом. Из теоремы 6 можно сделать вывод, что на первом потенциалом уровне находится 6 вершин. Этот уровень характеризуется тем, что из каждой вершины исходит ровно одно ребро. Несложно показать, что в такой системе все 6 рассматриваемых вершин объединятся в цикл. Полученный граф проиллюстрирован на рисунке 2.

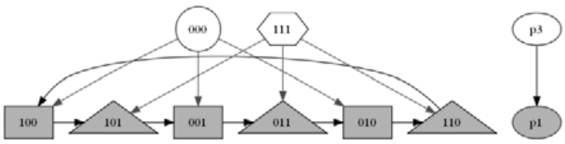

Рисунок 2 −Граф кластеров трёхмерной системы

Рассмотрим траектории, которые расположены в этом цикле. По построению ни одна траектория не может покинуть границы кластеров. Ввиду того, что мы выбрали отталкивающую стационарную точку, ни одна траектория не может неограниченно притягиваться к ней. По теореме Брауэра о неподвижной точке можно сделать очень важный вывод – в этой системе всегда существует хотя бы один цикл. Более подробно доказательство этого факта можно найти в работах [16-17].

Стоит отметить, что данный пример хорош тем, что в нём легко выбрать область $V(x^*)$, она возникает естественным образом. Однако в пространствах высших размерностей с произвольными функциями f_i и несколькими стационарными точками построение подобной области является весьма нетривиальной задачей и требует отдельного анализа.

Компьютерное моделирование

Для изучения динамических систем подобного рода был разработан программный комплекс *PhasePortraitAnalyzer*, в котором предусмотрен специальный модуль, моделирующий рассматриваемые графы. С его помощью были созданы иллюстрации к этой статье. Возможности полноценного компьютерного моделирования ограничиваются системами небольшой размерности, т.к. размерность графа возрастает экспоненциально, для пространства размерности n мы имеем 2^n вершин. На рисунке 3 представлен пример графа кластеров 5-мерной системы, который состоит из 32 вершин. Для изучения систем вида (*1*) очень важно иметь именно теоретическое описание топологии для произвольной размерности, а моделирование на ЭВМ можно использовать для проверки результатов и построения наглядных изображений.

Выводы

В работе рассмотрен пример построения графа специального вида для изучения некоторых циклических динамических систем. Детально изучена топология такого графа, сформулированы и доказаны соответствующие теоремы. Показана полезность использования такой структуры при анализе систем специального вида. Разработан специальный программный модуль, позволяющий моделировать такие графы. Результаты работы находят применение при рассмотрении некоторых задач биоинформатики [5-7].

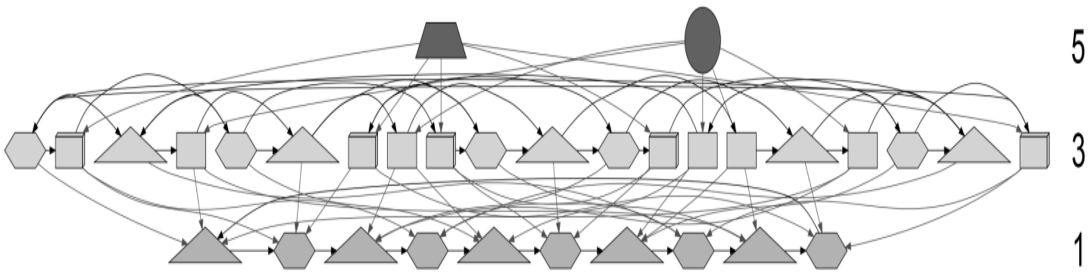

Рисунок 3– Граф кластеров пятимерной системы

Благодарности

Автор благодарит Голубятникова В.П. из Института Математики им. С.Л. Соболева СО РАН за ценные консультации при разработке математической модели.

Работа выполняется при поддержке гранта РФФИ 12-01-00074 «Прямые и обратные задачи математического моделирования генных сетей».

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лихошвай В.А., Голубятников В.П., Демиденко Г.В., Евдокимов А.А, Фадеев С.И. «Теория генных сетей» / Системная компьютерная биология. Интеграционные проекты / Под ред. Колчанова Н.А. и Гончарова С.С., Новосибирск, СО РАН, 2008, Вып. 14, С.395-480

2. Лихошвай В.А., Матушкин Ю.Г., Фадеев С.И. «Задачи теории функционирования генных сетей» / Молекулярная биология. 2001. Т.35, Вып. 6, С. 926-932

3. Murray J.D. Mathematical biology. 1. An introduction. 3-rd ed. N.Y.: Springer-Verlag, 2002

4. Акиньшин А.А., Голубятников В.П., «Геометрические характеристики циклов в некоторых симметричных динамических системах» / Вестник НГУ. Серия «Математика, механика, информатика», 2012. Т. 12, Вып. 2, С. 3-12

5. Акиньшин А.А., Голубятников В.П. «Non-uniqueness of cycles in gene networks models» / The eighth international conference on bioinformatics of genome regulation and structure \ systems biology 2012, С.28

6. Акиньшин А.А., Голубятников В.П., Гайдов Ю.А., Голубятников И.В. « Unstable cycles in gene networks models» / The eighth international conference on bioinformatics of genome regulation and structure \ systems biology 2012, С.29

7. Акиньшин А.А. « Computer analysis of phase portraits in gene networks models» / Abstracts of Young scientist's school “Bioinformatics ans systems biology” 2012, С.13

8. Акиньшин А.А., Голубятников В.П. «On Nonuniqueness of Cycles in Dissipative Dynamical Systems of Chemical Kinetics» / VI-th international conference Solitons, Collapses and Turbulence: Achievements, Developments and Perspectives 2012, С.71-72

9. Акиньшин А.А., Голубятников В.П. «Математическое и численное описание фазовых портретов некоторых нелинейных динамических систем» / Журнал «Горизонты образования», АлтГТУ / 8-ая Всероссийская научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых учёных «Наука и молодёжь» / Секция «Информационные технологии» / Подсекция «Программное обеспечение вычислительной техники и автоматизированных систем», Барнаул: Изд-во АлтГТУ, 2011. - С. 6-9

10. Акиньшин А.А., Голубятников В.П. «Математическое и компьютерное моделирование периодических режимов генных сетей» / XVIII Международная научно-практическая конференция студентов и молодых учёных «Современные техника и технологии» Том 2, С. 255-256

11. Акиньшин А.А., Голубятников В.П. «Компьютерные и математические модели функционирования генных сетей» / 50-ая Международная научная студенческая конференция «Студент и научно-технический прогресс». Секция «Математика». Новосибирский государственный университет. - Новосибирск: РИЦ НГУ, 2012, стр. 308

12. Акиньшин А.А., Голубятников В.П. «Математические и компьютерные модели функционирования генных сетей» / Международная конференция «Современные проблемы математики, информатики и биоинформатики», посвященная 100-летию А.А.Ляпунова. Новосибирск, 2011, с. 81.

13. Гайдов Ю.А. «Об устойчивости периодических траекторий в некоторых моделях генных сетей» / Сибирский журнал индустриальной математики, 2008, Т.11, №1, С.57-62

14. Гайдов Ю.А., Голубятников В.П., Лихошвай В.А. «О некоторых нелинейных динамических системах, моделирующих несимметричные генные сети» / Вестник НГУ. Серия: Математика, механика, информатика. 2010. Т. 10, Вып. 1. С. 18–28

15. Голубятников В.П., Клещёв А.Г., Клещёва К.А., Кудрявцева А.В. «Исследование фазовых портретов трёхмерных моделей генных сетей» / Сибирский журнал индустриальной математики, 2006, Т.9 №1, С.75-84

16. Гайдов Ю.А., Голубятников В.П. «О некоторых нелинейных динамиченских системах, моделирующих несимметричные генные сети» / Вестник НГУ. Серия «Математика, механика, информатика», 2007. Т. 7, Вып. 2, С. 23-32

17. Голубятников В.П., Голубятников И.В. «О периодических траекториях нелинейных динамических систем специального вида» / Вестник НГУ. Серия «Математика, механика, информатика», 2010. Т. 10, Вып. 3, С.3-16

Акиньшин Андрей Александрович *аспирант, E-mail:* ***andrey.akinshin@gmail.com***, *ФГБОУ ВПО Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, Барнаул*