Министерство образования и науки Российской Федерации Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

«Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

| УДК | УТВЕРЖДАЮ | |
|-------------------------------|--------------------------------|------|
| $\mathcal{N}^{\underline{o}}$ | Зав. НИЛ «Математическая биоло | КИЛС |
| Инв. № | и биоинформатика», ИПММ | |
| | ФГАОУ ВО «СПбПУ», | |
| | д.б.н. | |
| | М. Г. Самсонова | a |
| | «» 2016 г. | |

ОТЧЕТ О НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСНОЙ РАБОТЕ

по теме:

«Стохастическое моделирование экспресии генов»

| Выполнил студент гр. №53601/4 |
|-------------------------------|
| Д. В. Яковлев |
| «» 2016 г. |
| Руководитель НИР, к.фм.н. |
| В.В. Гурский |
| « » 2016 г. |

Санкт-Петербург 2016

РЕФЕРАТ

Отчёт 21 стр., 1 часть, 8 рис., 1 таблица, 5 источников СТОХАСТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭКСПРЕСИИ ГЕНОВ

СОДЕРЖАНИЕ

| Введение | 4 |
|---|-----|
| 1 Постановка задачи | 5 |
| 2 Модель | 6 |
| 2.1 Реакции присоединения/отсоединения ТФ | 6 |
| 2.2 Реакции транскрипции и трансляции | 6 |
| 2.3 Реакции диффузии и деградации | 6 |
| 3 Инструменты для моделирования | LO |
| 3.1 StochPy, GillesPy | L C |
| 3.2 fern | LC |
| 3.3 StochKit | LC |
| 3.4 DEEP | L C |
| 4 Результаты | L 1 |
| 4.1 Описание реакций | L 1 |
| 4.2 Разработка программного обеспечения | 2 |
| 4.3 Экспериментальные расчёты | 2 |
| 4.4 Выводы | 2 |
| СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ | 15 |

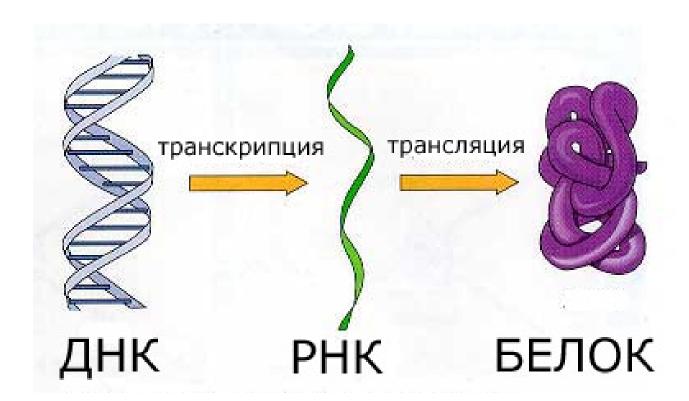
Введение

Цель научноисследовательской работы:

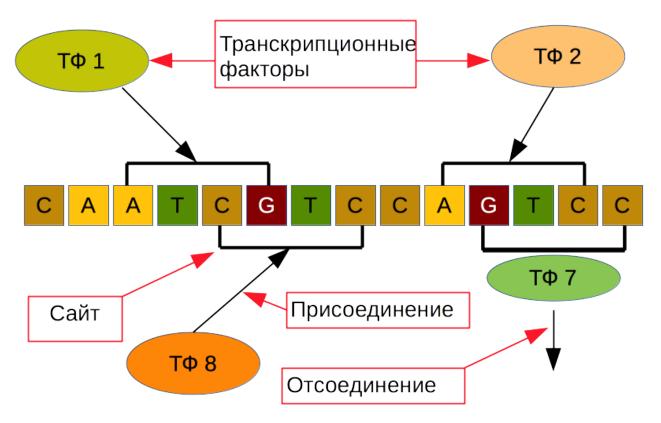
- Описать реакции экспресии генов
- Разработка программного обеспечения для стохастического моделирования экспресии генов.
- Анализ экспериментальных рассчётов
- Выводы

1 Постановка задачи

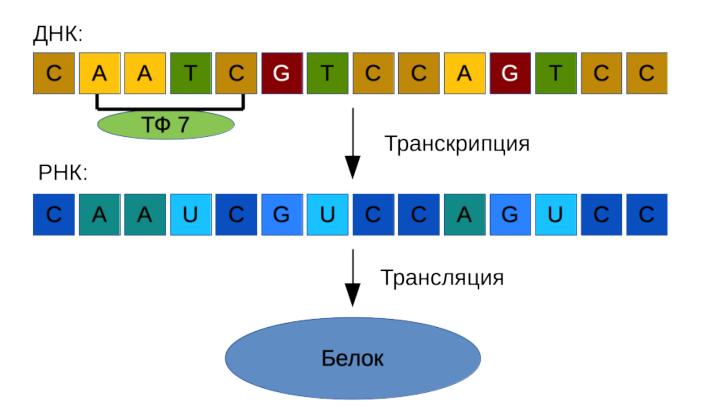
2 Модель



- 2.1 Peakuuu npucoeduhehus/omcoeduhehus $T\Phi$
- 2.2 Реакции транскрипции и трансляции
- 2.3 Реакции диффузии и деградации



Для каждого сайта определено какой ТФ может присоединиться. Сайтов – 611 и ТФ – 8.

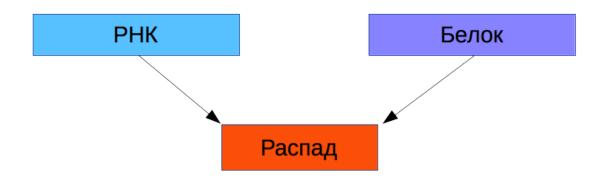


Вероятность транскрипции зависит от количества присоединённых ТФ, трансляции – от количества РНК.

Диффузия:



Деградация:



Вероятности деградации и диффузии линейно зависят от концетраций.

- 3 Инструменты для моделирования
- 3.1 StochPy, GillesPy
- 3.2 fern
- $3.3 \quad StochKit$
- 3.4 **DEEP**

4 Результаты

4.1 Описание реакций

Опишем реакции для одного ядра (для остальных ядер аналогично). Для каждого сайта присоединения реакции присоединения и отсоединения будут иметь одинаковый вид. Основным отличием будет какой именно ТФ присоединяется/отсоединяется. Для активаторов (в нашей работе это **cad** или **bcd**) реакции примут следующий вид:

$$N^{unbinded} \xrightarrow{C_i \cdot N^{unbinded}} N^{binded} + A$$
$$N^{binded} + A \xrightarrow{C_i \cdot N^{binded}} N^{unbinded}$$

Для репрессоров реакции будут выглядеть так:

$$N^{unbinded} \xrightarrow{C_i \cdot N^{unbinded}} N^{binded} + R$$

$$N^{binded} + R \xrightarrow{C_i \cdot N^{binded}} N^{unbinded}$$

где C_i - коэффициент присоединения к i-ому сайту, R - количество репрессоров и A - количество активаторов.

Теперь запишем реакции транскрипции и трансляции:

$$\varnothing \xrightarrow{p_{\lambda} \cdot p_{\alpha}^{A} \cdot p_{\beta}^{R}} mRNA$$

$$mRNA \xrightarrow{p_{\gamma} \cdot mRNA} N^{unbinded}$$

где $p_{\lambda},\,p_{\alpha},\,p_{\beta},\,p_{\gamma}$ - коэффициенты транскрипции, активации, регрессии и трансляции соотвественно.

Реакции деградации:

$$mRNA \xrightarrow{p_{\theta} \cdot mRNA} \varnothing$$

$$N^{unbinded} \xrightarrow{p_{\phi} \cdot N^{unbinded}} \varnothing$$

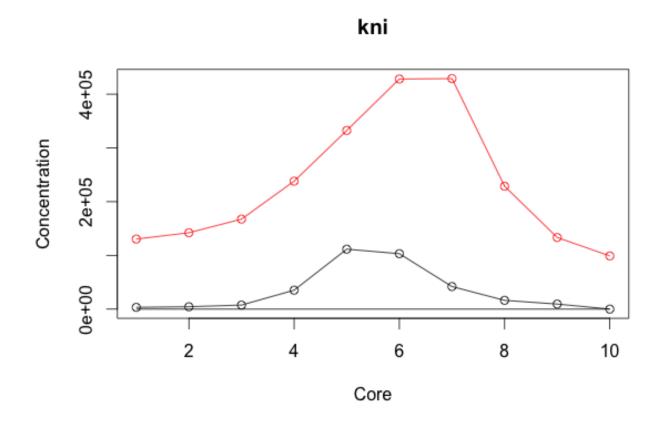
где p_{θ}, p_{ϕ} - коэффициенты деградации мРНК и белка соотвественно. Так же нужно учесть диффузию - перетекание белка в соседние ядра:

$$\begin{split} N_i & \xrightarrow{p_{\xi} \cdot max(N_i - N_{i+1}, 0)} N_{i+1} \\ N_i & \xrightarrow{p_{\xi} \cdot max(N_i - N_{i-1}, 0)} N_{i-1} \end{split}$$

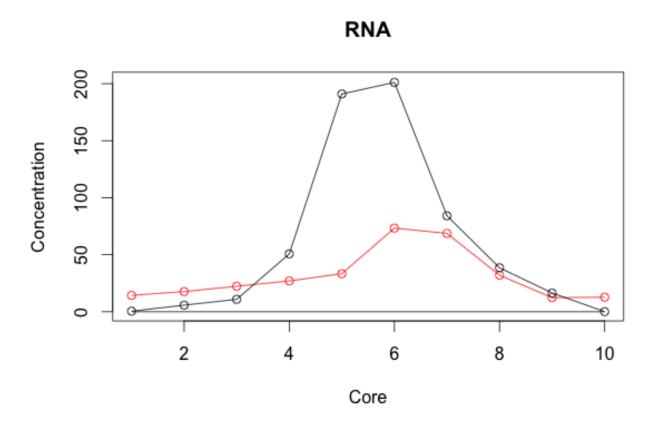
где p_{ξ} - параметр диффузии, i - номер ядра. В результате наша модель имеет 7 параметров - $p_{\lambda},\,p_{\alpha},\,p_{\beta},\,p_{\gamma},\,p_{\theta},\,p_{\phi},\,p_{\xi}.$

4.2 Разработка программного обеспечения

4.3 Экспериментальные расчёты



4.4 Выводы



выводы

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ