



▶ 新闻动态

▶ 图片新闻

▶ 头条新闻

▶ 综合新闻

▶ 学术活动

▶ 科研动态

[首页](#) [机构概况](#) [机构设置](#) [科研成果](#) [研究队伍](#) [研究生培养](#) [国际交流](#) [人才招聘](#)

现在位置: [首页](#) > [新闻动态](#) > [科研动态](#)

章祥荪课题组在分子生物网络拓扑结构方面取得喜人进展

2011-10-08 | 编辑:

国家数学与交叉科学中心章祥荪、吴凌云、王勇研究组以最优化模型和算法为主要数学工具,对生物信息学中序列、结构、功能、网络等几个不同层次的若干问题做了深入研究,在基因调控网络的推断、蛋白质相互作用网络的预测、蛋白质结构与功能研究与疾病成因的分析、以及用组合和图论方法解决基因组研究中的其他一些问题取得了系统的研究成果。

运筹学与生物和医学的交叉研究是当前国际上的研究热点和前沿领域。在对一些复杂生物现象建模和医学数据处理的研究过程中,运筹学本身也得到了发展的动力。尤其是近年随着基因组学和蛋白质组学研究的逐步深入,面临的挑战性问题越来越多。例如对大规模数据的处理和利用,对具有NP-难本质的生物学模型的求解,成为全球科学家关注的问题。

2010年,课题组在分子生物网络的拓扑结构研究方面取得重要进展。众所周知,许多类型的复杂网络如生物网络和社会网络都具有模块(社团)结构。识别复杂网络的模块结构有助于更清楚地理解网络的整体和局部性质。例如在蛋白质相互作用网络(见附图)中的模块负责执行基本生命功能,如DNA转录、mRNA翻译等。因此探测生物分子网络的模块结构已引起数学界、物理学界和生物学界许多学者的关注。一个比较重要的概念是Newman和Girvan (Physical Review E, 2004)提出的一种衡量网络社团结构的模式函数 Q ,目前很大一部分模块探测的方法集中于利用各种启发式算法来极大化 Q 。然而Fortunato and Barthélemy (PNAS, 2007)等发现模式函数 Q 存在着严重缺陷,称为resolution limit,即当网络规模很大时,优化 Q 不能识别出规模较小的模块。章祥荪小组分析了网络模块结构的性质,即在什么条件下模块是不可分的。并提出了一种新的、能更准确地刻画复杂网络模块结构的测度,称为模式密度 D (Physical Review E)。与 Q 相比,新的模式测度 D 的最大特点是考虑了模块的密度,因而能克服 Q 中没有模块顶点信息的缺陷。在进一步的研究,设计了求解模式密度 D 的谱分解方法,将其应用于蛋白质相互作用网络,并与 Q 的结果进行了系统比较来说明两者差异(BMC Systems Biology, 2010)。为了更清楚地了解 Q 和 D 这两个模式测度的优缺点,他们用离散凸规划方法对 Q 和 D 进行了解析,从理论上分析模式函数 Q 和 D 在刻画复杂网络模块结构的优缺点,指出了它们适合的网络类型(Europhysics Letters, 2009)。该论文被EPL选为2009年代表最前沿、最具创新性和最大进展研究方向的论文之一(<http://www.eps.org/news/epl-best-of-2009>)。

最近,该小组提出了一种全新的模块结构探测的运筹学模型。该模型首次将模块探测问题定量表述为一个整数线性规划问题,分析了其理论计算复杂性,并给出了基于最小割的启发式算法。数值实验表示了该算法能够克服 Q 存在resolution limit问题。这部分研究工作已被著名组合优化杂志J. of Comb. Optimization 接受。目前该小组已经将这些理论和建模方法应用到生物网络的分析中,如蛋白质相互作用网络、转录调控网络、信号转导网络和代谢网络等(IET Systems Biology, 2009; BMC Bioinformatics, 2010; Amino Acids 2010)。

除此以外,该小组还在其他生物信息学问题上取得了重要的进展。比如,张世华博士的一篇论文,引进了将多个蛋白质三维结构元件一起装配到大分子复合物的低温电子显微镜(cryo-EM)图象中的计算方法。这一研究成果被国际生物信息学顶级会议ISMB接受为口头报告,并同时发表在Bioinformatics杂志上。文章在发表后不久,即获得了“Faculty of 1000 Biology”(简称F1000)的推荐。

这些成果生动地说明,最优化模型和算法在复杂生物问题的抽象建模和数据处理方面有着很大的潜力。同时我们也欣喜地看到,运筹学在很多实际的生物问题中找到了新的方向和课题,特别是图论、组合数学、最优化理论与算法、复杂网络这些分支成为数学与生物科学交叉的先遣重点。

[\[关闭窗口\]](#)

研究院十年庆典

研究院电子政务平台

用户名:

密码:

中科院邮件系统

国家自然科学基金委

▶ SEARCH

[院长信箱](#)

[地理位置](#)

