Upcoming Talk

Applications of Convex Optimization in Metabolic Network Reconstruction

!Optimizer 2021

Mojtaba Tefagh

Assistant Professor

Sharif University of Technology

Since joining Stanford University, M. Tefagh has been involved with studies related to applications of convex optimization in systems biology. In 2019, M. Tefagh wrote his dissertation on "applications of convex optimization in metabolic network analysis" under the supervision of Professor Stephen P. Boyd. Since 2020, M. Tefagh has been working as an assistant professor at Sharif University of Technology and as a lead researcher at Sharif Optimization and Applications Laboratory.

Date and Time:
Sun, 14-Mar-2021, 19:00

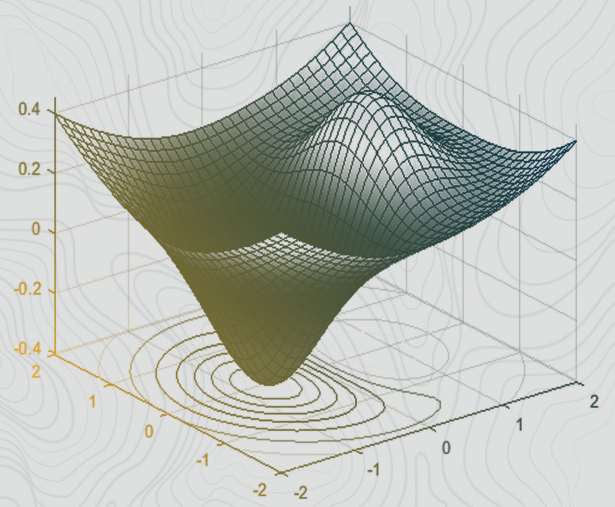
Link:
https://vc.sharif.edu/ch/soal

Abstract

More than two decades ago, the first genome-scale metabolic network reconstruction of the cellular metabolism of an organism was published, shortly after the first genome was sequenced. From that time on, the ever-increasing advances in the high-throughput omics technologies have allowed for the comprehensive reconstructions of exponentially growing sizes.

However, the vast amount of data can be a two-edged sword which makes many essential tasks computationally intractable. To overcome the demands of systems biology, even while they are outpacing Moore's law, faster computational techniques are needed to enable the current methods to scale up to match the progress of data generation in a prospective manner.

In this talk, we go over several different areas of systems biology from flux balance analysis to context-specific reconstruction and propose efficient computational methods for several tasks separately. Then we work towards a more holistic approach and discuss the idea of generalizing the multiple-measurement vectors problem from linear systems to linear programs, which is the problem of !Optimizer 2021. We will conclude by elaborating on how this approach can be immediately applied to a well-known computationally-heavy problem in metabolic network reconstruction.



مسابقه بر لبه مرزهای پژوهش

مسابقه Optimizer هر سال با هدف تشویق و گسترش پژوهش در مرزهای موضوع بهینه‌سازی و کاربردهای آن برگزار می‌شود و توانایی تشکیل تیم مناسبی از افراد که بتوانند از جنبه‌های مختلف علمی، نظیر دانش نظری، طراحی الگوریتم و توسعه نرم افزار با هم‌افزایی و هماهنگی مناسب در این رقابت به موفقیت دست یابند از جنبه‌های کلیدی در این رویداد است.

دسترسی به سوال مسابقه

سوال مسابقه **هم‌اکنون** از طریق وب‌سایت رویداد قابل دسترسی است. پس از همین الآن شروع کنید!

تاریخ‌های مهم

شروع ثبت‌نام	۱۳۹۹/۱۲/۳
پایان ثبت‌نام	۱۴۰۰/۱/۳۰
برگزاری مسابقه	تیرماه ۱۴۰۰

آیا می‌توانید تیم بهینه‌ای تشکیل دهید؟

جایزه تیم اول	۱۰میلیون تومان
جایزه تیم دوم	۶میلیون تومان
جایزه تیم سوم	۴میلیون تومان

http://soal.math.sharif.edu/
soal.math@sharif.edu
linkedin.com/company/soaloptimizer/

?SOAL
Sharif Optimization and Applications Laboratory

Sharif University of Technology

http://optimizer.math.sharif.ir/
optimizer.math@sharif.ir
optimizer_math

Optimizer

انجمن علمی دانشکده علوم ریاضی (همیند)

وب‌سایت کوئرا

?SOAL
آزمایشگاه سوال

دانشگاه صنعتی شریف

اولین ارائه از سری سخنرانی‌های آزمایشگاه سوال

کاربردهای بهینه‌سازی محدب در بازسازی شبکه متابولیکی

مجتبی تفاق

دانشکده علوم ریاضی دانشگاه صنعتی شریف

روز جهانی عدد π

اسفند ۱۳۹۹

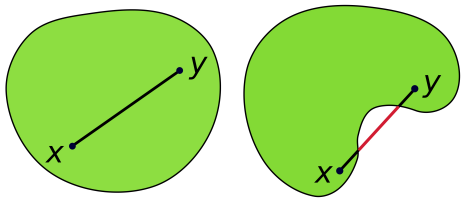
چشم‌انداز

۱	بهینه‌سازی محدب	۲
۲	زیست سامانه‌ها	۶
۳	بازسازی شبکه متابولیکی	۱۳

۱ بهینه‌سازی محدب

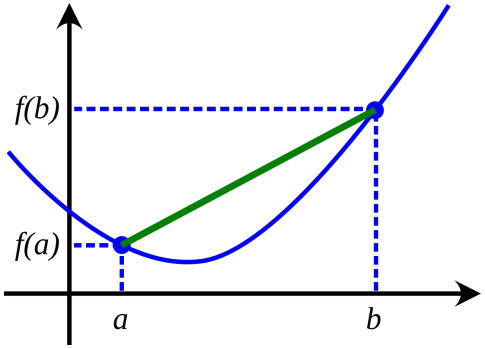
مجموعه محدب

پاره‌خط واصل بین هر دو نقطه از مجموعه داخل مجموعه است.



تابع محدب

پاره خط واصل بین هر دو نقطه از نمودار تابع بالای نمودار تابع است.



بهینه‌سازی محدب
زیست سامانه‌ها
بازسازی شبکه متابولیکی

بهینه‌سازی محدب چیست؟

بهینه‌سازی توابع محدب روی مجموعه‌های محدب!

یک مثال ساده!

- تابع هدف درجه دو
- قید نامساوی درجه دو
- قید تساوی آفین

$$\begin{aligned} \text{minimize} \quad & (x-y)^2 \\ \text{subject to} \quad & x^2 \leq 1 \\ & 2y+1=5 \end{aligned}$$

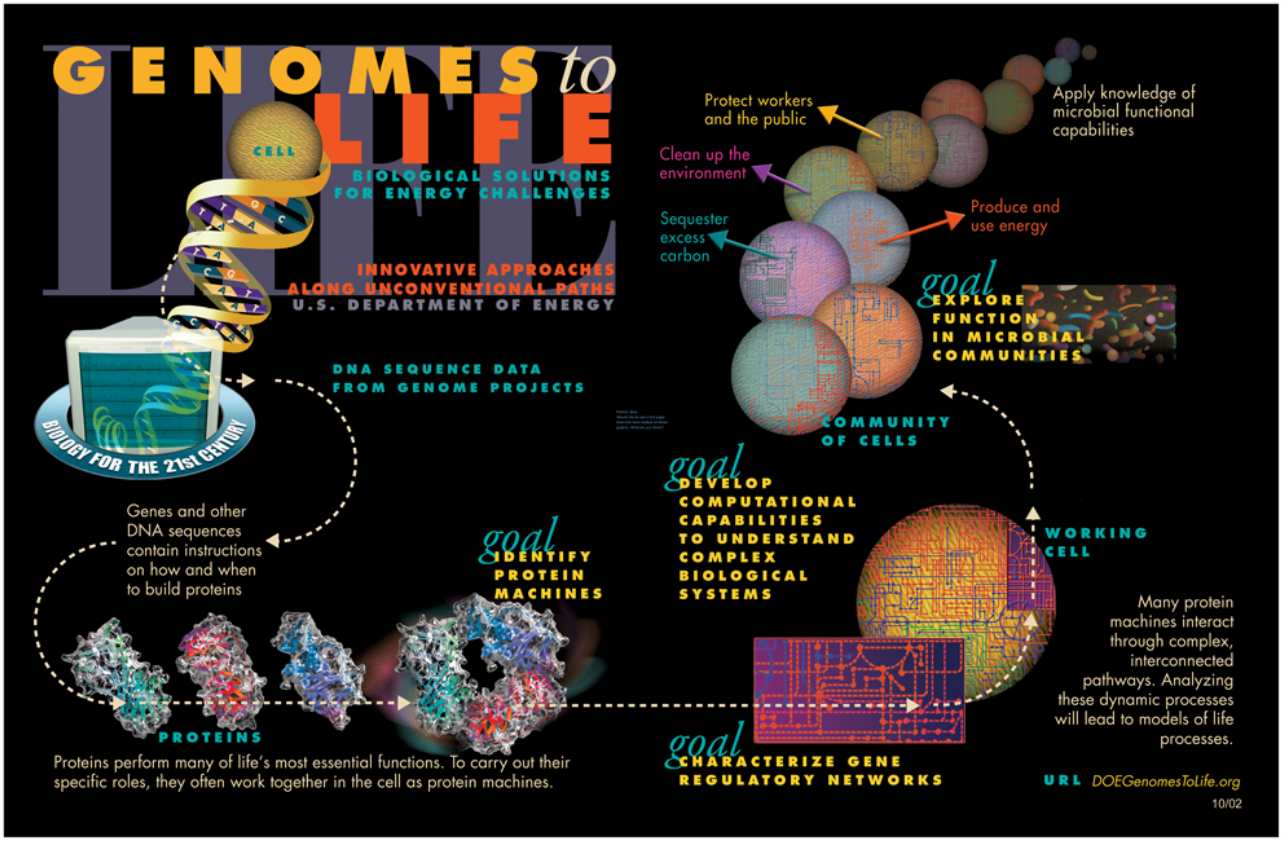
کاربردها

- مکانیک مانند دینامیک اجسام صلب
- هوافضا مانند بهینه‌سازی طراحی چندموضوعی
- اقتصاد مانند بهینه‌سازی سبد سرمایه‌گذاری
- ریاضیات مالی مانند نظریه بازی‌ها
- مهندسی برق مانند پردازش سیگنال و مخابرات
- مهندسی عمران مانند تسطیح منابع
- مهندسی صنایع مانند تحقیق در عملیات
- شاخه‌های مختلف کنترل مانند کنترل پیش‌بینانه مدل
- ژئوفیزیک مانند لرزه‌شناسی
- یادگیری ماشین مانند ماشین بردار پشتیبان
- ...

بهینه‌سازی محدب
زیست سامانه‌ها
بازسازی شبکه متابولیکی

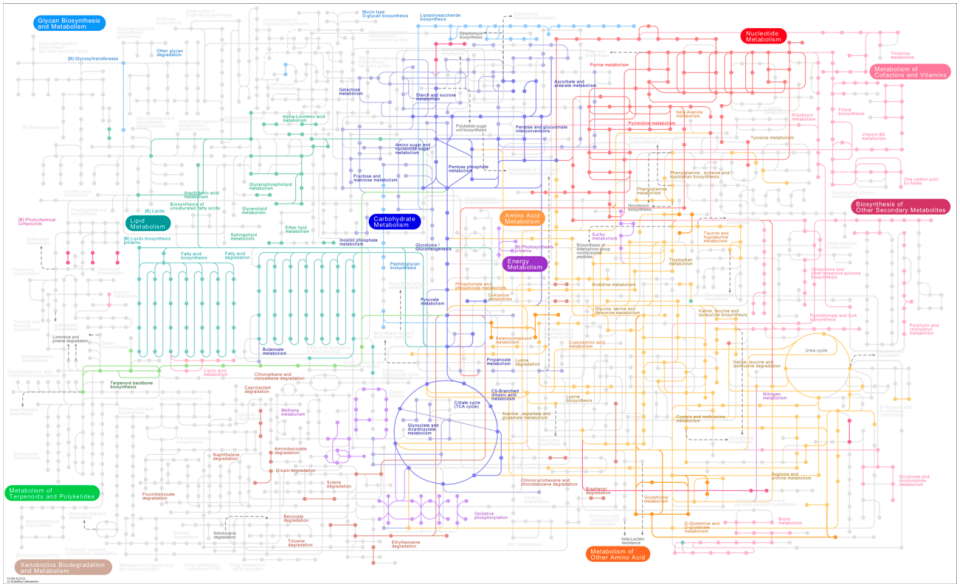
۲ زیست سامانه‌ها

شبکه‌ی متابولیکی



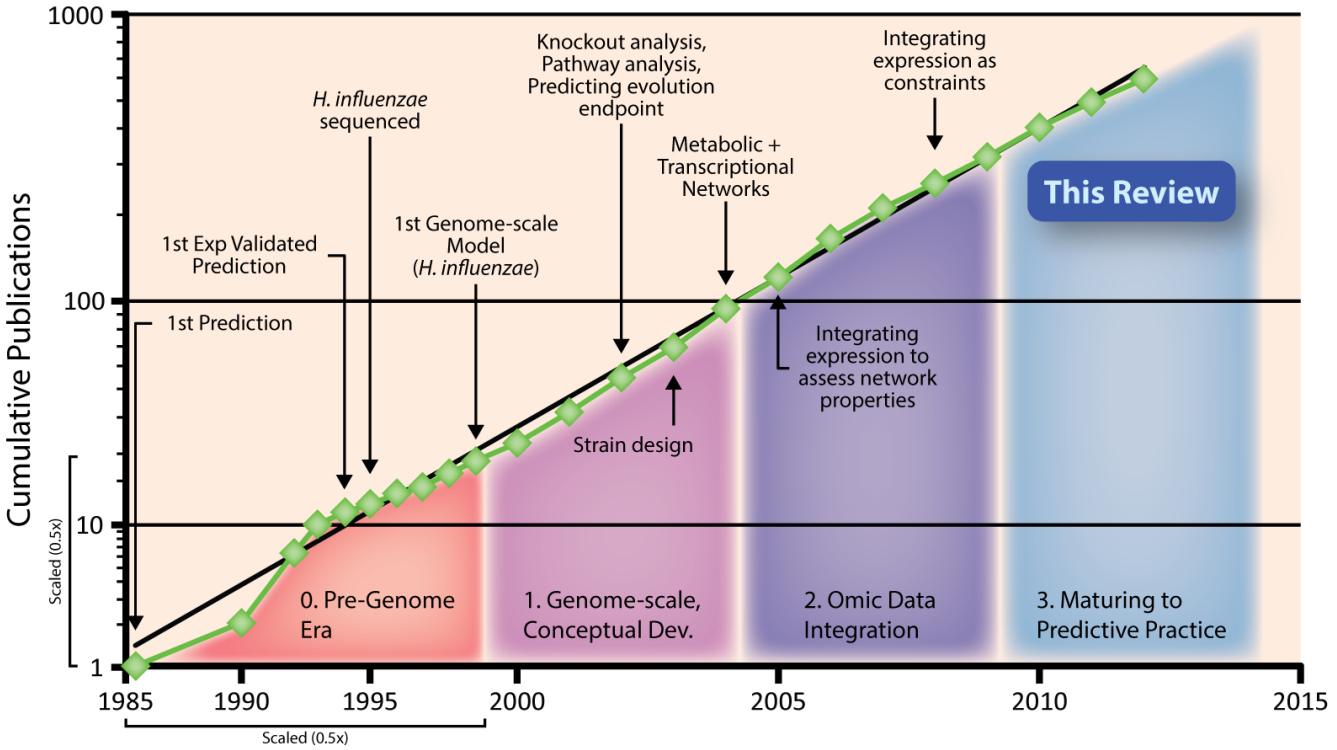
"However, many things have a plurality of parts and are not merely a complete aggregate but instead some kind of a whole beyond its parts."

Aristotle, *Metaphysics* **8.6**

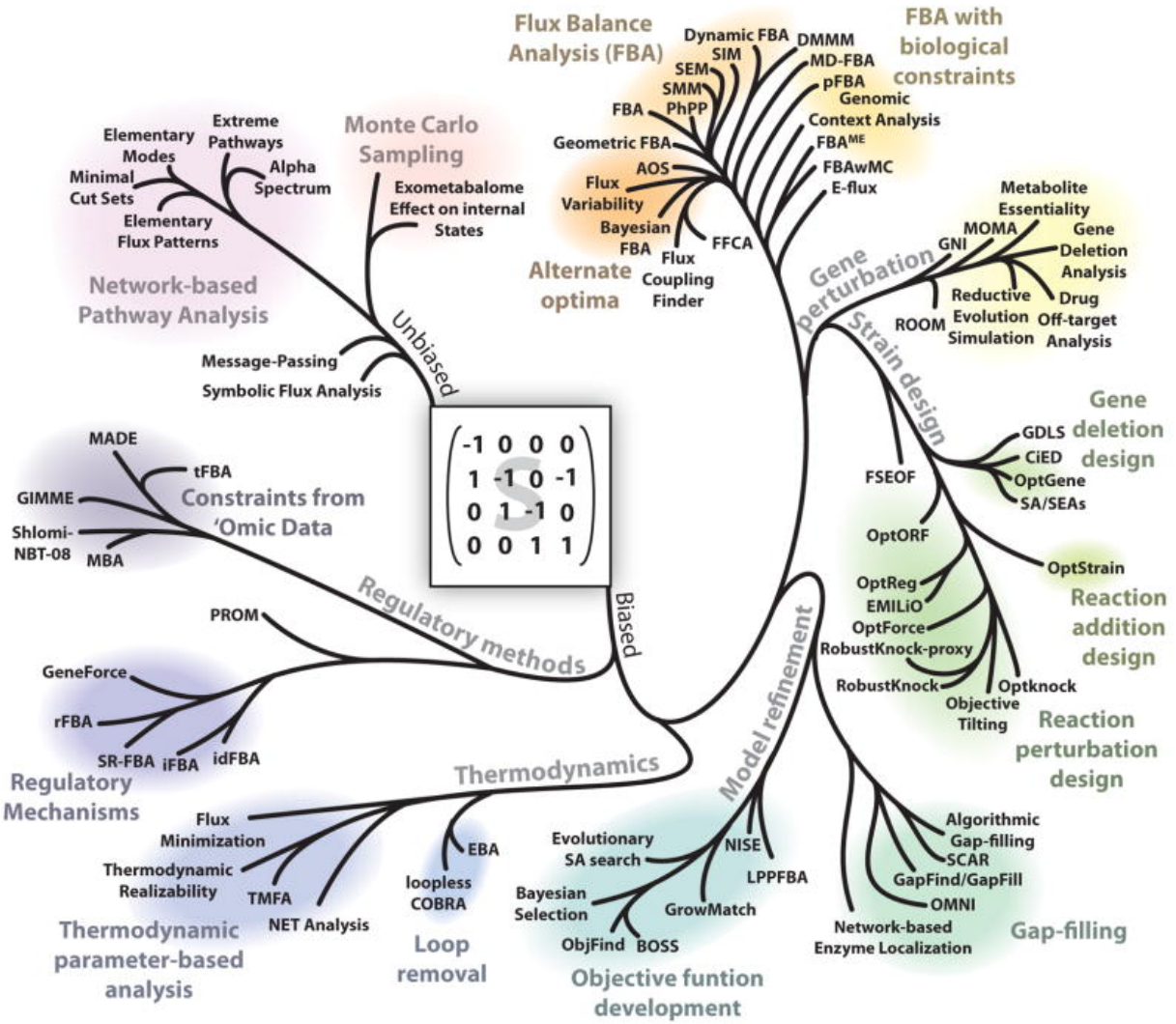


شکل ۱: یک شبکه‌ی متابولیکی از پایگاه داده‌ی KEGG

تاریخچه


1000
100
10
1
Cumulative Publications
Scaled (0.5x)
1985
1990
1995
2000
2005
2010
2015
Scaled (0.5x)
1st Prediction
1st Exp Validated Prediction
H. influenzae sequenced
1st Genome-scale Model (H. influenzae)
Knockout analysis, Pathway analysis, Predicting evolution endpoint
Strain design
Metabolic + Transcriptional Networks
Integrating expression to assess network properties
Integrating expression as constraints
This Review
0. Pre-Genome Era
1. Genome-scale, Conceptual Dev.
2. Omic Data Integration
3. Maturing to Predictive Practice

روش‌های بهینه‌سازی



تعاریف اولیه

- شبکه متابولیکی: $\mathcal{N} = (\mathcal{M}, \mathcal{R}, S, \mathcal{I})$
- متابولیت‌ها: $\mathcal{M} = \{M_i\}_{i=1}^m$
- واکنش‌ها: $\mathcal{R} = \{R_i\}_{i=1}^n$
- ماتریس استوکیومتری: S
- واکنش‌های برگشت ناپذیر: $\mathcal{I} \subseteq \mathcal{R}$
- توزیع شار: $v \in \mathbf{R}^n$
- حالت تعادل: $Sv = 0$
- برگشت‌ناپذیری ترمودینامیک: $v_{\mathcal{I}} \geq 0$
- شارهای مجاز: $\mathcal{C} = \{v \in \mathbf{R}^n \mid Sv = 0,\ v_{\mathcal{I}} \geq 0\}$

واکنش‌های بلوکه شده

تمام واکنش‌هایی را بیابید که در هر صورت غیرفعال هستند.

حل به وسیله برنامه‌ریزی خطی:

- جهت اصلی واکنش

$$\begin{aligned} \text{maximize} \quad & v_i \\ \text{subject to} \quad & v \in \mathcal{C} \\ & v_i \leq 1 \end{aligned}$$

- جهت عکس واکنش

$$\begin{aligned} \text{minimize} \quad & v_i \\ \text{subject to} \quad & v \in \mathcal{C} \\ & v_i \geq -1 \end{aligned}$$

۳ بازسازی شبکه متابولیکی

آنالیز موازنه شار

$$
\begin{aligned}
\text{find} \quad & v \\
\text{subject to} \quad & S^I v = 0, \\
& l^I \preceq v \preceq u^I, \\
& I = \{i_1, i_2, \ldots, i_k\} \subseteq \{1, 2, \ldots, n\}.
\end{aligned}
$$

$$
S = [S_1, S_2, \ldots, S_n] \quad S^I = [S_{i_1}, S_{i_2}, \ldots, S_{i_k}] \quad l = \begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \\ \vdots \\ l_n \end{bmatrix} \quad l^I = \begin{bmatrix} l_{i_1} \\ l_{i_2} \\ \vdots \\ l_{i_k} \end{bmatrix} \quad u = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} \quad u^I = \begin{bmatrix} u_{i_1} \\ u_{i_2} \\ \vdots \\ u_{i_k} \end{bmatrix}
$$

سوال مسابقه

دست‌گرمی

$$\begin{aligned} \text{find} \quad & v \\ \text{subject to} \quad & Sv = 0, \\ & l^1 \preceq v \preceq u^1. \end{aligned}$$

تازه‌کار

$$\begin{aligned} \text{minimize} \quad & \|v\|_0 \\ \text{subject to} \quad & Sv = 0, \\ & l^1 \preceq v \preceq u^1. \end{aligned}$$

بهینه‌سازی محدب
زیست سامانه‌ها
بازسازی شبکه متابولیکی

راندهای بعدی

ماهر

$$\begin{aligned} \text{minimize} \quad & \|V\|_{2,0} \\ \text{subject to} \quad & SV = 0, \\ & L \preceq V \preceq U. \end{aligned}$$

ماهر ++

$$\begin{aligned} \text{minimize} \quad & (\|V\|_{2,0}, \|(SV)^T\|_{2,0}) \\ \text{subject to} \quad & L \preceq V \preceq U. \end{aligned}$$

راند آخر

بهینه‌ساز!

$$\begin{aligned} \text{minimize} \quad & \|V\|_{2,0} \\ \text{subject to} \quad & \|(SV)^T\|_{2,0} \leq K, \\ & L \preceq V \preceq U. \end{aligned}$$

راستی‌آزمایی و رتبه‌بندی با

$$\begin{aligned} \text{find} \quad & v \\ \text{subject to} \quad & S^I v = 0, \\ & \tilde{l}_k^I \preceq v \preceq \tilde{u}_k^I, \end{aligned}$$

که در آن

$$I = \{i \mid \max_j |V_{ij}| > 0\}.$$

سخن آخر و موفق باشید!

- ماتریس‌های از ابعاد متفاوت در هر راند، تنها راهنمایی صورت سوال، و سرنخ‌های محدب
- و در نهایت چگونه با کمک دوستان خود از دست خرس فرار کنیم!