

Biologiska nätverks struktur och funktion

Petter Holme

KTH, CSC, Beräkningsbiologi

8e September, 2008

<http://www.csc.kth.se/~pholme/>

Definition

Ett system av ett stort antal enheter vars globala egenskaper kommer från interaktionen mellan enheterna (och inte bara från enheternas individuella egenskaper).

- *Populationsbiologi*: Djurflockar, Sociala insekter, ...
- *Ekonomi*: Finansmarknaden, lokalisering, ...
- *Samhället*: Biltrafik, vänskapskontakter, organisationer, ...
- *Fysik*: Magnetism, supraleddning, ...
- *Datavetenskap*: Internet, sensornätverk, ...
- *Biokemi, Cellbiologi, Utvecklingsbiologi*, ...

Definition

Ett system av ett stort antal enheter vars globala egenskaper kommer från interaktionen mellan enheterna (och inte bara från enheternas individuella egenskaper).

- *Populationsbiologi: Djurflockar, Sociala insekter, ...*
- *Ekonomi: Finansmarknaden, lokalisering, ...*
- *Samhället: Biltrafik, vänskapskontakter, organisationer, ...*
- *Fysik: Magnetism, supraledning, ...*
- *Datavetenskap: Internet, sensornätverk, ...*
- *Biokemi, Cellbiologi, Utvecklingsbiologi, ...*

Definition

Ett system av ett stort antal enheter vars globala egenskaper kommer från interaktionen mellan enheterna (och inte bara från enheternas individuella egenskaper).

- *Populationsbiologi*: Djurflockar, Sociala insekter, ...
- *Ekonomi*: Finansmarknaden, lokalisering, ...
- *Samhället*: Biltrafik, vänskapskontakter, organisationer, ...
- *Fysik*: Magnetism, supraledning, ...
- *Datavetenskap*: Internet, sensornätverk, ...
- *Biokemi, Cellbiologi, Utvecklingsbiologi*, ...

Definition

Ett system av ett stort antal enheter vars globala egenskaper kommer från interaktionen mellan enheterna (och inte bara från enheternas individuella egenskaper).

- *Populationsbiologi*: Djurflockar, Sociala insekter, ...
- *Ekonomi*: Finansmarknaden, lokalisering, ...
- *Samhället*: Biltrafik, vänskapskontakter, organisationer, ...
- *Fysik*: Magnetism, supraledning, ...
- *Datavetenskap*: Internet, sensornätverk, ...
- *Biokemi, Cellbiologi, Utvecklingsbiologi*, ...

Definition

Ett system av ett stort antal enheter vars globala egenskaper kommer från interaktionen mellan enheterna (och inte bara från enheternas individuella egenskaper).

- *Populationsbiologi*: Djurflockar, Sociala insekter, ...
- *Ekonomi*: Finansmarknaden, lokalisering, ...
- *Samhället*: Biltrafik, vänskapskontakter, organisationer, ...
- *Fysik*: Magnetism, supraleddning, ...
- *Datavetenskap*: Internet, sensornätverk, ...
- *Biokemi, Cellbiologi, Utvecklingsbiologi*, ...

Definition

Ett system av ett stort antal enheter vars globala egenskaper kommer från interaktionen mellan enheterna (och inte bara från enheternas individuella egenskaper).

- *Populationsbiologi*: Djurflockar, Sociala insekter, ...
- *Ekonomi*: Finansmarknaden, lokalisering, ...
- *Samhället*: Biltrafik, vänskapskontakter, organisationer, ...
- *Fysik*: Magnetism, supraleddning, ...
- *Datavetenskap*: Internet, sensornätverk, ...
- *Biokemi, Cellbiologi, Utvecklingsbiologi, ...*

Definition

Ett system av ett stort antal enheter vars globala egenskaper kommer från interaktionen mellan enheterna (och inte bara från enheternas individuella egenskaper).

- *Populationsbiologi*: Djurflockar, Sociala insekter, ...
- *Ekonomi*: Finansmarknaden, lokalisering, ...
- *Samhället*: Biltrafik, vänskapskontakter, organisationer, ...
- *Fysik*: Magnetism, supraleddning, ...
- *Datavetenskap*: Internet, sensornätverk, ...
- *Biokemi, Cellbiologi, Utvecklingsbiologi, ...*

metoder att studera komplexa system

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

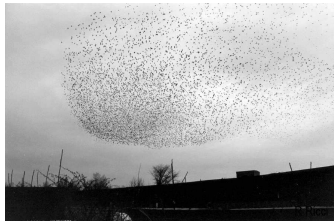
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



modell som fångar
egenskaper hos individen



makroskopiska egenskaper
överensstämmande med
observationer



modeller för komplexa system

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

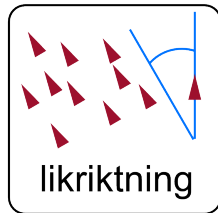
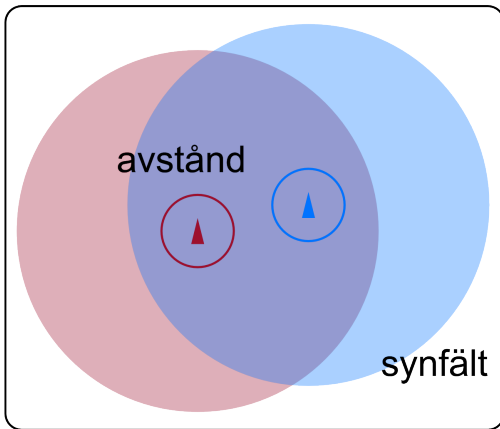
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



modeller för komplexa system

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

applet från:

<http://cmol.nbi.dk/models/boids/boids.html>



vad är komplexa nätverk?

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

Ingen väldigt klar definition, men de brukar ha följande egenskaper:

- Ett system av många agenter med ett flöde (av information, material, ...) mellan enheterna.
- Enheterna är kopplade i ett relativt statistiskt, och inte alltför tätt kopplat, nätverk.
- Nätverket är till viss del slumpmässigt, men har även regelbundenheter.

I sådana fall kan man använda mått av nätverksstruktur — hur nätverket skiljer sig från ett slumpmässigt nätverk — för att säga något om hur det dynamiska systemet (flödet) uppför sig.

vad är komplexa nätverk?

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

Ingen väldigt klar definition, men de brukar ha följande egenskaper:

- Ett system av många agenter med ett flöde (av information, material, ...) mellan enheterna.
- Enheterna är kopplade i ett relativt statistiskt, och inte alltför tätt kopplat, nätverk.
- Nätverket är till viss del slumpmässigt, men har även regelbundenheter.

I sådana fall kan man använda mått av nätverksstruktur — hur nätverket skiljer sig från ett slumpmässigt nätverk — för att säga något om hur det dynamiska systemet (flödet) uppför sig.

vad är komplexa nätverk?

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

Ingen väldigt klar definition, men de brukar ha följande egenskaper:

- Ett system av många agenter med ett flöde (av information, material, ...) mellan enheterna.
- **Enheterna är kopplade i ett relativt statistiskt, och inte alltför tätt kopplat, nätverk.**
- Nätverket är till viss del slumpmässigt, men har även regelbundenheter.

I sådana fall kan man använda mått av nätverksstruktur — hur nätverket skiljer sig från ett slumpmässigt nätverk — för att säga något om hur det dynamiska systemet (flödet) uppför sig.

vad är komplexa nätverk?

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

Ingen väldigt klar definition, men de brukar ha följande egenskaper:

- Ett system av många agenter med ett flöde (av information, material, ...) mellan enheterna.
- Enheterna är kopplade i ett relativt statistiskt, och inte alltför tätt kopplat, nätverk.
- **Nätverket är till viss del slumpmässigt, men har även regelbundenheter.**

I sådana fall kan man använda mått av nätverksstruktur — hur nätverket skiljer sig från ett slumpmässigt nätverk — för att säga något om hur det dynamiska systemet (flödet) uppför sig.

vad är komplexa nätverk?

Ingen väldigt klar definition, men de brukar ha följande egenskaper:

- Ett system av många agenter med ett flöde (av information, material, ...) mellan enheterna.
- Enheterna är kopplade i ett relativt statistiskt, och inte alltför tätt kopplat, nätverk.
- Nätverket är till viss del slumpmässigt, men har även regelbundenheter.

I sådana fall kan man använda mått av nätverksstruktur — hur nätverket skiljer sig från ett slumpmässigt nätverk — för att säga något om hur det dynamiska systemet (flödet) uppför sig.

exempel: internet

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

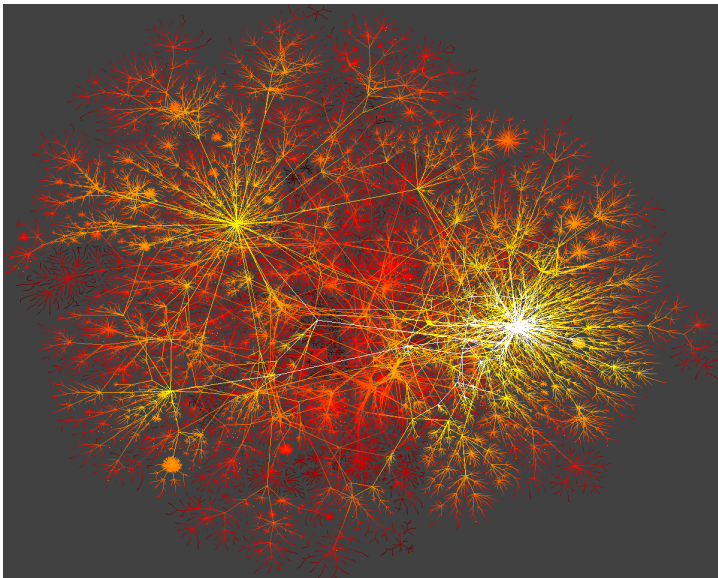
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



exempel: metabolism

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

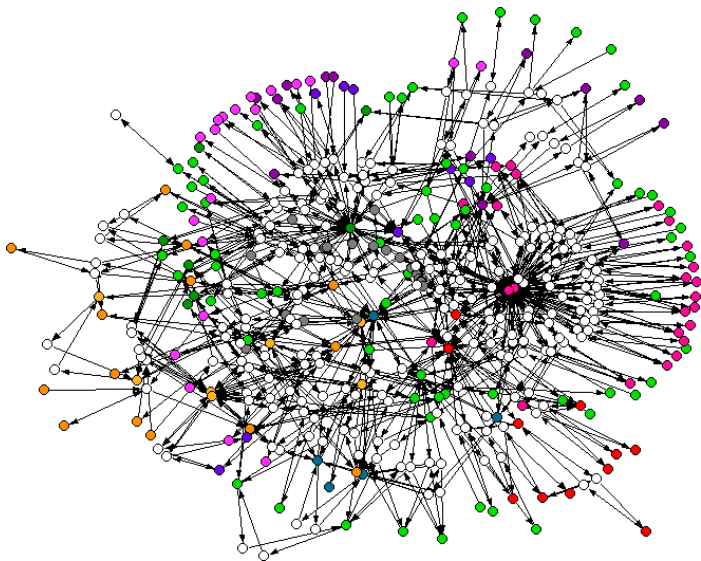
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



exempel: nätverksforskare

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

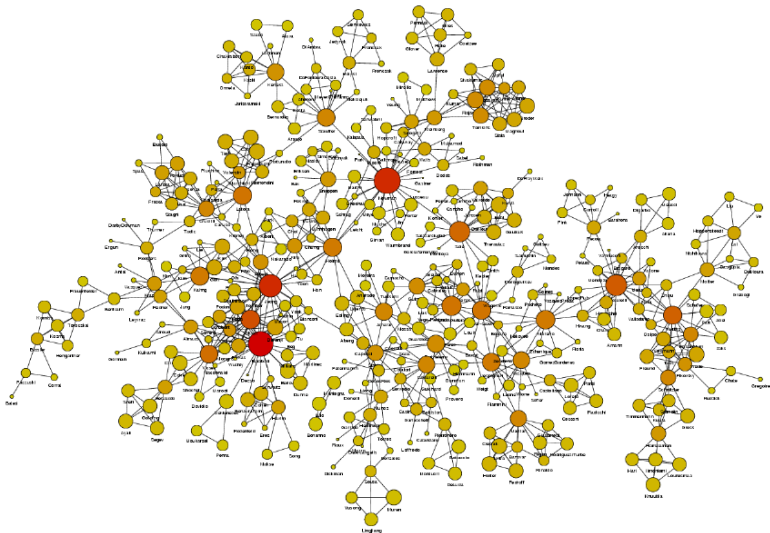
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



exempel: skolkompisar

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

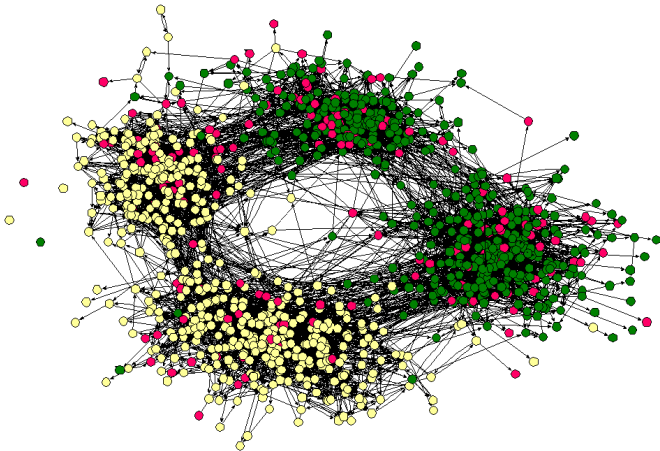
komplexa
system

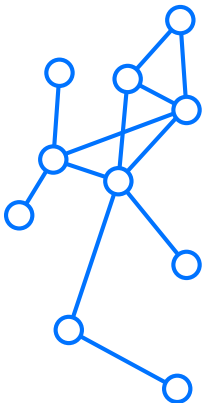
komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

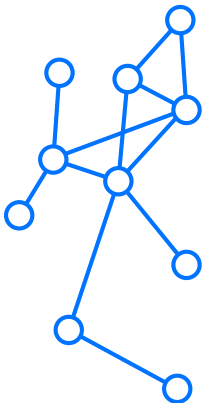




Definition

En graf $G = (V, E)$ är en mängd av noder V och en mängd länkar E (par av noder).

Många underklasser av grafer finns — enkla grafer, multigrafer, viktade grafer, riktade grafer, ...



Definition

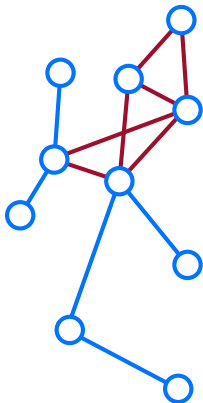
En funktion från grafer till tal.

$$f(G) \in \mathbb{R}$$

Definition

En funktion från noder och grafer

till tal. $f(G, i) \in \mathbb{R}$



number of triangles: 3

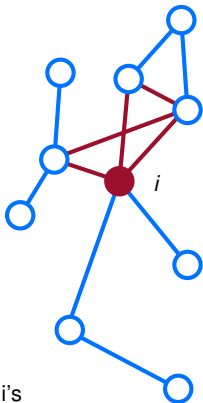
Definition

En funktion från grafer till tal.

$$f(G) \in \mathbb{R}$$

Definition

En funktion från noder och grafer till tal. $f(G, i) \in \mathbb{R}$



i's
number of triangles: 2

Definition

En funktion från grafer till tal.

$$f(G) \in \mathbb{R}$$

Definition

En funktion från noder och grafer
till tal. $f(G, i) \in \mathbb{R}$

vad är nätverksstruktur

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

- Hur nätverket skiljer sig mot ett slumpmässigt nätverk.
- **lite mer tekniskt:** hur nätverksmått skiljer sig mellan ett visst nätverk och genomsnittliga värden i en motsvarande *nollmodell* eller *referensmodell*
- **referensmodell 1:** Slumpgrafer (Poisson-slumpgrafer, Erdős-Rényi-grafer). Antalet noder, och sannolikheten för en länk mellan ett par av noder är fixt, resten slumpmässigt.
- **referensmodell 2:** Slumpgrafer med fix grad (konfigurationsmodellen). Antalet noder, och graden för varje nod är fix, resten slumpmässigt.

vad är nätverksstruktur

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

- Hur nätverket skiljer sig mot ett slumpmässigt nätverk.
- **lite mer tekniskt:** hur nätverksmått skiljer sig mellan ett visst nätverk och genomsnittliga värden i en motsvarande *nollmodell* eller *referensmodell*
- **referensmodell 1:** Slumpgrafer (Poisson-slumpgrafer, Erdős-Rényi-grafer). Antalet noder, och sannolikheten för en länk mellan ett par av noder är fixt, resten slumpmässigt.
- **referensmodell 2:** Slumpgrafer med fix grad (konfigurationsmodellen). Antalet noder, och graden för varje nod är fix, resten slumpmässigt.

vad är nätverksstruktur

- Hur nätverket skiljer sig mot ett slumpmässigt nätverk.
- **lite mer tekniskt:** hur nätverksmått skiljer sig mellan ett visst nätverk och genomsnittliga värden i en motsvarande *nollmodell* eller *referensmodell*
- **referensmodell 1:** Slumpgrafer (Poisson-slumpgrafer, Erdős-Rényi-grafer). Antalet noder, och sannolikheten för en länk mellan ett par av noder är fixt, resten slumpmässigt.
- **referensmodell 2:** Slumpgrafer med fix grad (konfigurationsmodellen). Antalet noder, och graden för varje nod är fix, resten slumpmässigt.

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

vad är nätverksstruktur

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

- Hur nätverket skiljer sig mot ett slumpmässigt nätverk.
- **lite mer tekniskt:** hur nätverksmått skiljer sig mellan ett visst nätverk och genomsnittliga värden i en motsvarande *nollmodell* eller *referensmodell*
- **referensmodell 1:** Slumpgrafer (Poisson-slumpgrafer, Erdős-Rényi-grafer). Antalet noder, och sannolikheten för en länk mellan ett par av noder är fixt, resten slumpmässigt.
- **referensmodell 2:** Slumpgrafer med fix grad (konfigurationsmodellen). Antalet noder, och graden för varje nod är fix, resten slumpmässigt.

vad är nätverksstruktur

- Hur nätverket skiljer sig mot ett slumpmässigt nätverk.
- **lite mer tekniskt:** hur nätverksmått skiljer sig mellan ett visst nätverk och genomsnittliga värden i en motsvarande *nollmodell* eller *referensmodell*
- **referensmodell 1:** Slumpgrafer (Poisson-slumpgrafer, Erdős-Rényi-grafer). Antalet noder, och sannolikheten för en länk mellan ett par av noder är fixt, resten slumpmässigt.
- **referensmodell 2:** Slumpgrafer med fix grad (konfigurationsmodellen). Antalet noder, och graden för varje nod är fix, resten slumpmässigt.

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

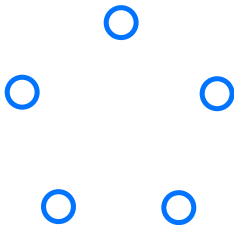
komplexa
system

komplexa
nätverk

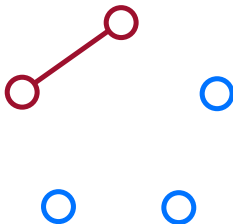
nätverks-
struktur

nätverksbiologi

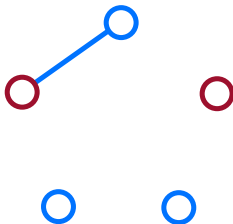
appendix



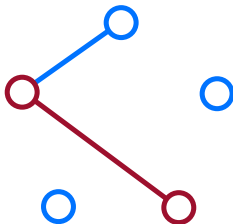
för alla par av noder,
med sannolikhet p , lägg till en länk



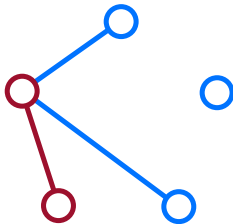
för alla par av noder,
med sannolikhet p , lägg till en länk



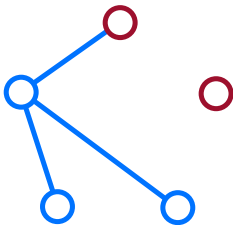
för alla par av noder,
med sannolikhet p , lägg till en länk



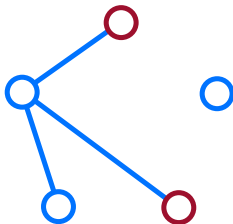
för alla par av noder,
med sannolikhet p , lägg till en länk



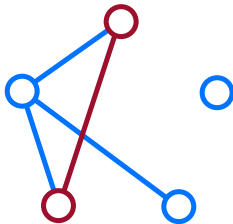
för alla par av noder,
med sannolikhet p , lägg till en länk



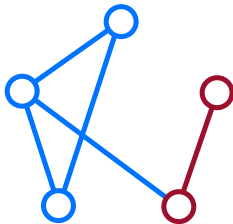
för alla par av noder,
med sannolikhet p , lägg till en länk



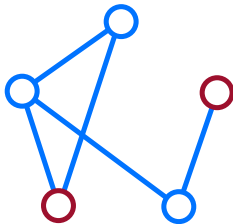
för alla par av noder,
med sannolikhet p , lägg till en länk



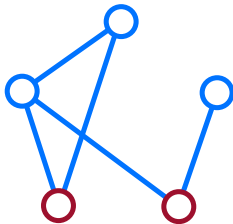
för alla par av noder,
med sannolikhet p , lägg till en länk



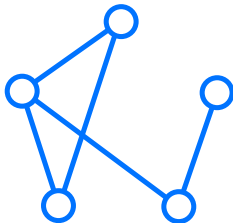
för alla par av noder,
med sannolikhet p , lägg till en länk



för alla par av noder,
med sannolikhet p , lägg till en länk



för alla par av noder,
med sannolikhet p , lägg till en länk



för alla par av noder,
med sannolikhet p , lägg till en länk

slumpgrafer med fix grad

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

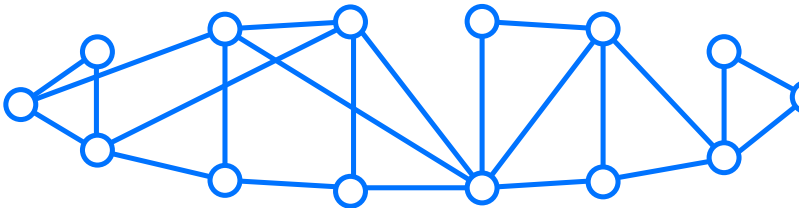
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



starta från den ursprungliga grafen
välj ett par länkar, länka om dem

slumpgrafer med fix grad

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

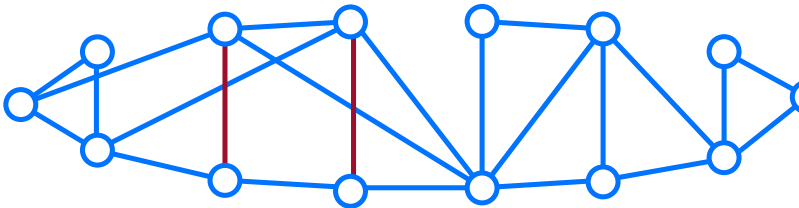
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



starta från den ursprungliga grafen
välj ett par länkar, länka om dem

slumpgrafer med fix grad

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

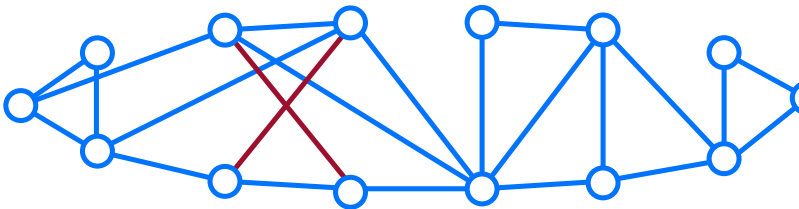
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



starta från den ursprungliga grafen
välj ett par länkar, länka om dem

slumpgrafer med fix grad

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

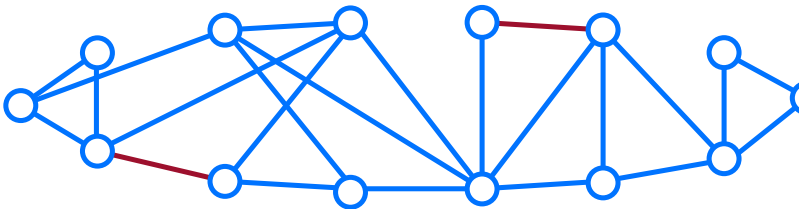
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



starta från den ursprungliga grafen
välj ett par länkar, länka om dem

slumpgrafer med fix grad

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

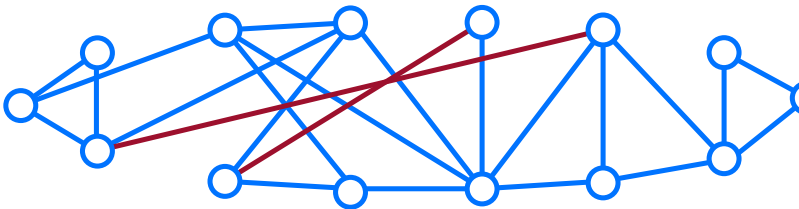
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



starta från den ursprungliga grafen
välj ett par länkar, länka om dem

slumpgrafer med fix grad

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

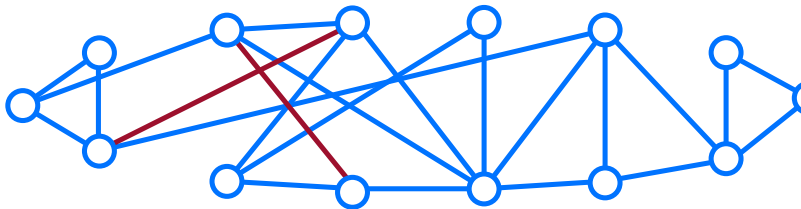
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



starta från den ursprungliga grafen
välj ett par länkar, länka om dem

slumpgrafer med fix grad

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

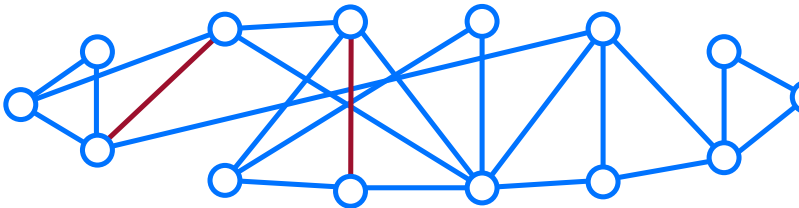
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



starta från den ursprungliga grafen
välj ett par länkar, länka om dem

En överblick av vetenskapliga frågeställningar

- Hur kan man mäta nätverksstruktur?
- Varför har verkliga nätverk den struktur man kan mäta?
- Hur påverkar nätverksstrukturen dynamiska system på nätverket?
- Hur kan man ändra nätverket för att uppnå en viss funktion hos systemet som helhet?

En överblick av vetenskapliga frågeställningar

- Hur kan man mäta nätverksstruktur?
- Varför har verkliga nätverk den struktur man kan mäta?
- Hur påverkar nätverksstrukturen dynamiska system på nätverket?
- Hur kan man ändra nätverket för att uppnå en viss funktion hos systemet som helhet?

En överblick av vetenskapliga frågeställningar

- Hur kan man mäta nätverksstruktur?
- Varför har verkliga nätverk den struktur man kan mäta?
- Hur påverkar nätverksstrukturen dynamiska system på nätverket?
- Hur kan man ändra nätverket för att uppnå en viss funktion hos systemet som helhet?

En överblick av vetenskapliga frågeställningar

- Hur kan man mäta nätverksstruktur?
- Varför har verkliga nätverk den struktur man kan mäta?
- Hur påverkar nätverksstrukturen dynamiska system på nätverket?
- Hur kan man ändra nätverket för att uppnå en viss funktion hos systemet som helhet?

En överblick av vetenskapliga frågeställningar

- Hur kan man mäta nätverksstruktur?
- Varför har verkliga nätverk den struktur man kan mäta?
- Hur påverkar nätverksstrukturen dynamiska system på nätverket?
- Hur kan man ändra nätverket för att uppnå en viss funktion hos systemet som helhet?

Biologiska nätverks struktur och funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

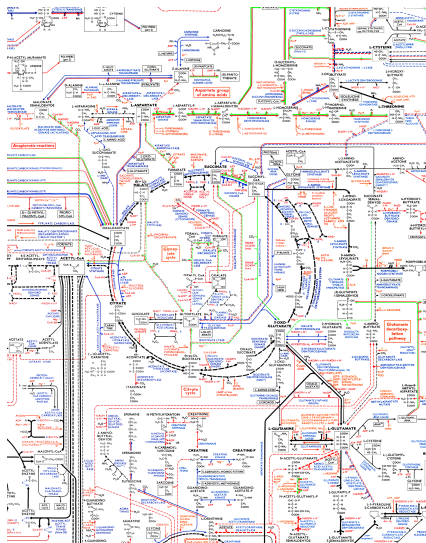
komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

- Metaboliska nätverk.
- Protein-interaktionsnätverk.
- Genregleringsnätverk.



Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

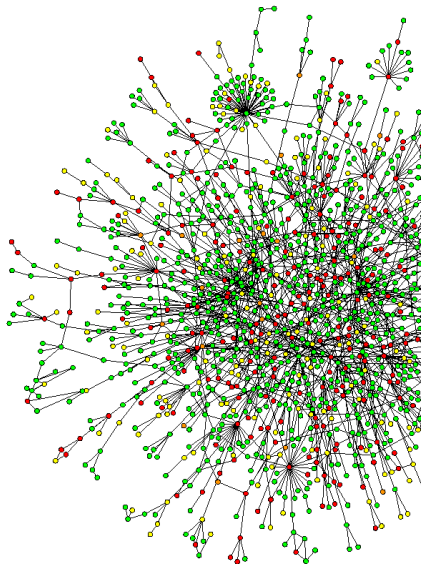
komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

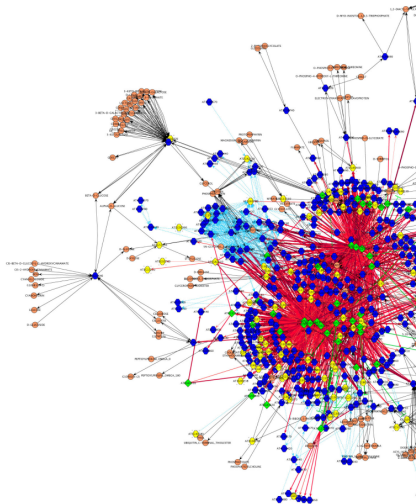
nätverksbiologi

appendix

- Metaboliska nätverk.
- Protein-
interaktionsnätverk.
- Genregleringsnätverk.



- Metaboliska nätverk.
- Protein-
interaktionsnätverk.
- Genregleringsnätverk.



Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

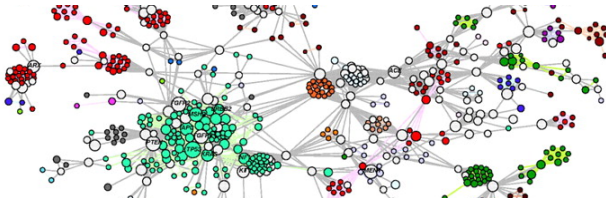
nätverksbiologi

appendix

noder: gener

länkar:

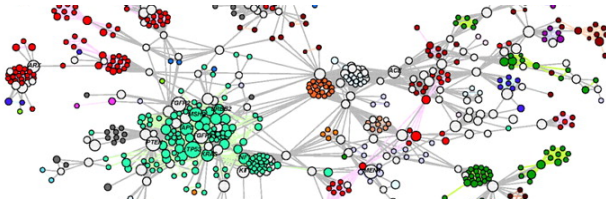
- kausala (aktivering, inhibering)
- korrelationer (i genexpression, vetenskapliga artiklar, ...)
- genfusion
- samma sjukdomar



noder: gener

länkar:

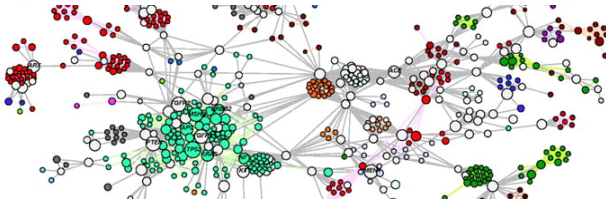
- **kausala** (aktivering, inhibering)
- korrelationer (i genexpression, vetenskapliga artiklar, ...)
- genfusion
- samma sjukdomar



noder: gener

länkar:

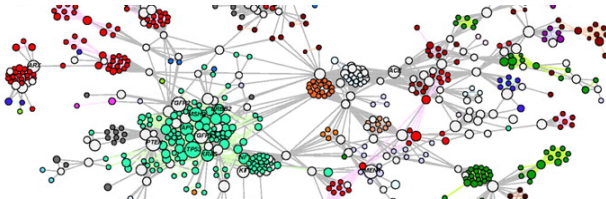
- kausala (aktivering, inhibering)
- korrelationer (i genexpression, vetenskapliga artiklar, ...)
- genfusion
- samma sjukdomar



noder: gener

länkar:

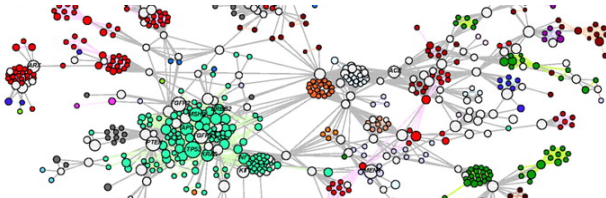
- kausala (aktivering, inhibering)
- korrelationer (i genexpression, vetenskapliga artiklar, ...)
- **genfusion**
- samma sjukdomar



noder: gener

länkar:

- kausala (aktivering, inhibering)
- korrelationer (i genexpression, vetenskapliga artiklar, ...)
- genfusion
- samma sjukdomar



noder: proteiner

länkar: mellan proteiner som kan binda till varandra fysiskt

metaboliska nätverk

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

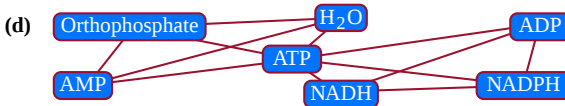
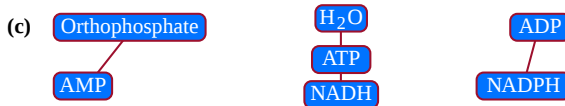
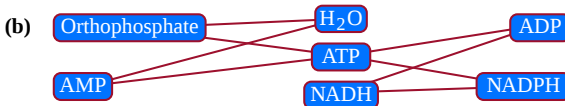
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



metaboliska nätverk: min forskning

- Är metabolismen modulär? Kan ett metabolismen delas upp i moduler (subsystem som är relativt oberoende, och har en biologiskt specifik funktion).
- Hur kan man reducera ett kemiskt reaktionssystem till en graf så att så mycket information som möjligt behålls?

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

metaboliska nätverk: min forskning

- Är metabolismen modulär? Kan ett metabolismen delas upp i moduler (subsystem som är relativt oberoende, och har en biologiskt specifik funktion).
- Hur kan man reducera ett kemiskt reaktionssystem till en graf så att så mycket information som möjligt behålls?

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

metaboliska nätverk: min forskning

- Är metabolismen modulär? Kan ett metabolismen delas upp i moduler (subsystem som är relativt oberoende, och har en biologiskt specifik funktion).
- Hur kan man reducera ett kemiskt reaktionssystem till en graf så att så mycket information som möjligt behålls?

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

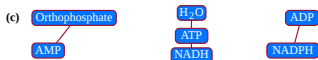
komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

- Är metabolismen moduler? Kan ett metabolismen delas upp i moduler (subsystem som är relativt oberoende, och har en biologiskt specifik funktion).
- Hur kan man reducera ett kemiskt reaktionssystem till en graf så att så mycket information som möjligt behålls?



Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

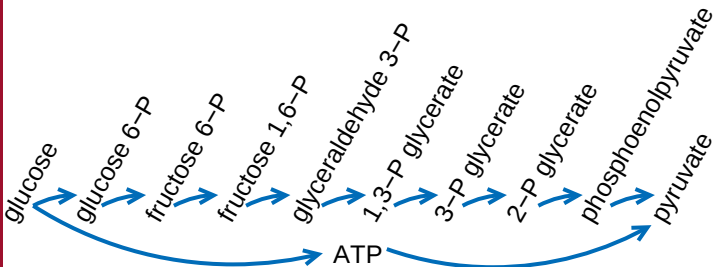
nätverksbiologi

appendix

Vanliga substanser som finns överallt i cellen & är med i många reaktioner $\Rightarrow$

Utgör ingen begränsning för någon reaktion $\Rightarrow$

Ett metaboliskt nätverk säger mer om de tas bort ur nätverket



Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

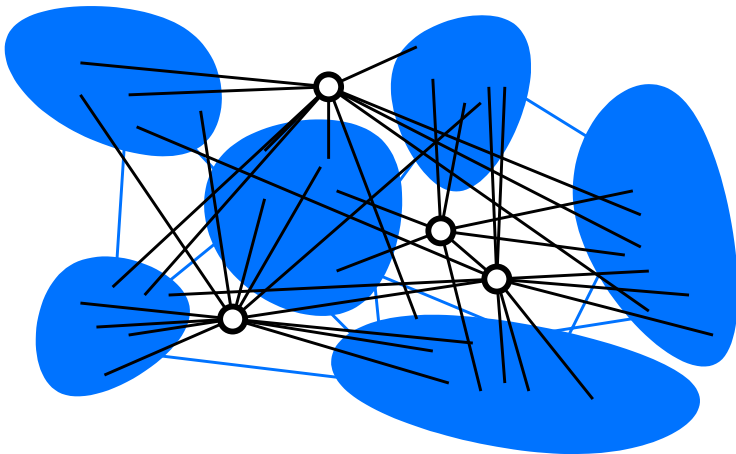
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

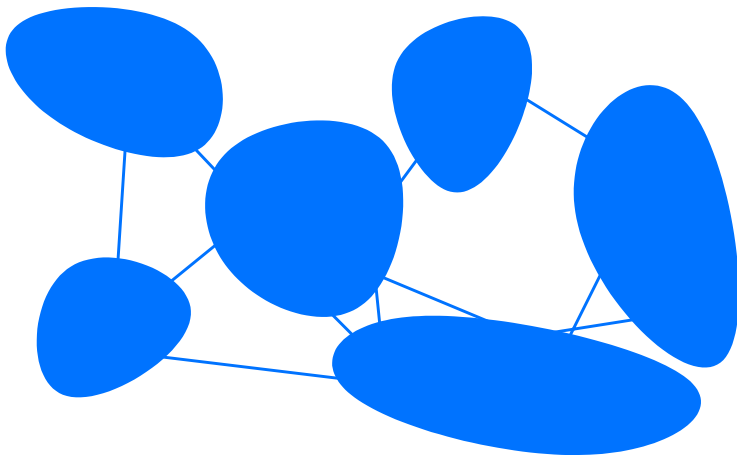
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



Wagner & Fell, 2001

ATP
ADP
NADP+
NADPH
NAD+
NADH

Schuster *et al.*, 2002

ATP
ADP
NADP+
NADPH

 P_i
 H_2O
 H^+
 PP_i
CMP

Ma & Zeng, 2003

ATP
ADP
NADP+

NAD+

 P_i
 H_2O

 CO_2
 O_2
 NH_3

valutametaboliter: definition

Δ — ett mått på hur bra ett nätverk kan delas upp i kluster av hög, inombords länkdensitet

- ta bort metaboliter i grad-ordning (börja med substansen med flest grannar, o.s.v.)
- de noder som, om borttagna, ger det högsta Δ -värdet är mängden av valutametaboliter

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

valutametaboliter: definition

Δ — ett mått på hur bra ett nätverk kan delas upp i kluster av hög, inombords länkdensitet

- ta bort metaboliter i grad-ordning (börja med substansen med flest grannar, o.s.v.)
- de noder som, om borttagna, ger det högsta Δ -värdet är mängden av valutametaboliter

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

valutametaboliter: definition

Δ — ett mått på hur bra ett nätverk kan delas upp i kluster av hög, inombords länkdensitet

- ta bort metaboliter i grad-ordning (börja med substansen med flest grannar, o.s.v.)
- de noder som, om borttagna, ger det högsta Δ -värdet är mängden av valutametaboliter

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

valutametaboliter i människan

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

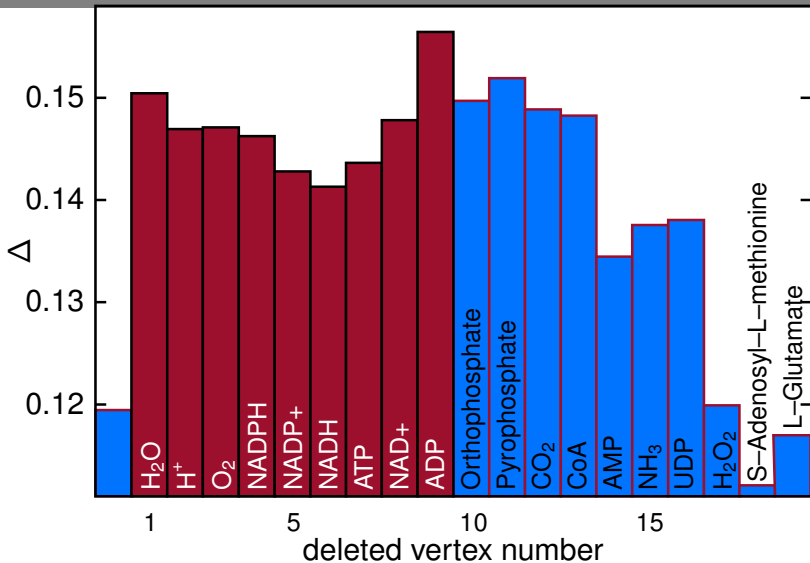
komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix



valutametaboliter i människan

Wagner & Fell, 2001

ATP
ADP
NADP+
NADPH
NAD
NADH

Schuster *et al.*, 2002

ATP
ADP
NADP+
NADPH

P_i
H₂O
H⁺
PP_i
CMP

Ma & Zeng, 2003

ATP
ADP
NADP+

NAD

P_i
H₂O

CO₂
O₂
NH₃

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

organism	substr.-prod.	substr.-substr.	substance nw.	reaktionsnät
människa	0.140(1)	0.124(1)	0.139(1)	0.143(2)
människa (BiGG)	0.179(2)	0.174(1)	0.161(2)	0.235(5)
<i>S. cerevisiae</i>	0.116(1)	0.107(1)	0.116(1)	0.086(1)
<i>C. elegans</i>	0.115(1)	0.105(1)	0.113(1)	0.084(1)
<i>M. musculus</i>	0.135(1)	0.121(1)	0.135(1)	0.094(1)
<i>R. norvegicus</i>	0.128(1)	0.117(1)	0.129(1)	0.079(1)
<i>D. melanogaster</i>	0.126(1)	0.116(1)	0.125(1)	0.101(2)
<i>M. genitalium</i>	0.049(1)	0.049(1)	0.048(1)	0.074(1)
<i>E. coli</i>	0.126(1)	0.115(1)	0.126(1)	0.113(2)

modularitet för olika organismer

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

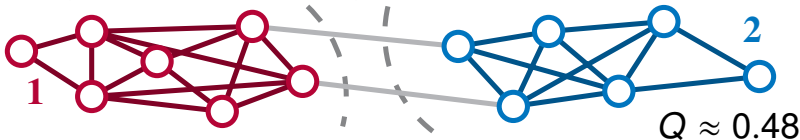
organism	antal	noder	länkar	Δ
djur	5	1621	4662	0.157
växter	1	1561	4302	0.144
svampar	2	1281	3654	0.150
bakterier	99	1050	2739	0.140

modularitet (av en partition)

Definition

$$Q = \sum_i \left[e_{ii} - \left(\sum_j e_{ij} \right)^2 \right] \quad (1)$$

summan är över en partition i kluster och e_{ij} är andelen länkar som går mellan kluster i och j



modularitet (av en graf)

Definition

$$\hat{Q}(G) = \max_{\text{partitions}} Q \quad (2)$$

(referensmodell: slumpgrafer)

Definition

$$\hat{Q}(G) = \max_{\text{partitions}} Q - \left\langle \max_{\text{partitions}} Q \right\rangle \quad (3)$$

(referensmodell: slumpgrafer med en fix mängd grader)

funktionella matchningsscorer

Biologiska
nätverks
struktur och
funktion

PETTER
HOLME

komplexa
system

komplexa
nätverk

nätverks-
struktur

nätverksbiologi

appendix

$\phi_{CF}(c, f)$	andeler noder med funktionen f hörande till kluster $c \in C$, mängden definierade kluster
$\phi_F(f)$	andelen noder med funktion f
$\phi_C(c)$	andelen noder i kluster c

Definition

$$\nu = \sum_{c \in C} \sum_{f \in F} |\phi_{CF}(c, f) - \phi_C(c)\phi_F(f)| \quad (4)$$

Definition

$$\mu = \nu - \langle \nu' \rangle \quad (5)$$