



Implementação de funções para a criação de redes biológicas na biblioteca igraph e análise topológica.

Realizado por: Carolina Torre; Cátia Gonçalves; Joana Santos

Abordagem seguida e funcionalidade:

Para implementação de funções para a criação de redes biológicas na biblioteca igraph utilizámos a classe MetabolicNetwork, adaptamos funções dadas nas aulas e desenvolvemos outras funções que achamos necessárias:

- **all_degrees**

Esta função dá os graus de todos os nodos do grafo.

- **mean_degree**

A mean_degree permite calcular o valor do grau médio dos graus sobre todos os nodos do grafo para in-degrees, out-degrees ou ambos. Este valor pode ser usado para avaliar topologicamente o grafo pela conectividade da rede metabólica.

- **prob_degree**

Esta função dá a probabilidade de cada nodo ter um grau k, através das frequências no grafo. Sendo esta outra métrica usada para avaliar a topologia do grafo, permitindo verificar se este tem uma estrutura semelhante à de uma rede gerada aleatoriamente ou se, pelo contrário, segue uma estrutura diferente.

- **clustering_coef**

Esta métrica é utilizada para medir a tendência dos nodos de um grafo a criarem clusters. Topologicamente, um nodo com um alto coeficiente de clustering terá vizinhos altamente ligados entre si.

- **all_clustering_coefs**

A função all_clustering_coefs permite calcular os coeficientes de clustering para todos os nodos da rede metabólica.



- **mean_clustering_coef**

Esta função calcula o $C(k)$, ou seja, a média dos coeficientes do clustering para todos os nodos com grau k .

- **mean_clustering_perdegree**

Esta métrica permite calcular o $C(k)$ para todos os valores de k .

- **load_from_file**

Com esta função é possível importar a partir de um ficheiro uma rede metabólica para ser utilizada nas restantes funções.

- **top_10_metabolites**

A função `top_10_metabolites` permitem identificar os dez metabolitos envolvidos num maior número de reações.

Afim de atingir este objetivo criamos uma lista na qual se adicionam os metabolitos e o número de reações em que os mesmos estão envolvidos. Posteriormente procede-se à ordenação da lista de acordo com o número de reações e retorna-se uma lista com os dez primeiros metabolitos ou, caso o número total de metabolitos existentes seja igual ou inferior a dez, todos os metabolitos existentes.

- **reaction_distribution**

Esta função permite desenvolver um gráfico com a distribuição do número de reações por cada um dos possíveis graus do tipo “inout”.

Para tal a abordagem seguida foi a criação de um dicionário no qual se adiciona a distribuição do número de reações por cada um dos possíveis graus. Posteriormente procede-se à ordenação dos graus existentes por ordem crescente e para cada grau adiciona-se a uma variável y o número de reações atribuídas, retornando por fim, um plot de barras.

- **final_products**

Permite verificar entre todos os metabolitos aqueles que têm um outdegree igual a zero e um indegree positivo, ou seja, aqueles que são metabolitos finais, retornando uma lista com os mesmos.