ΝΕΥΡΟΒΙΟΛΟΓΙΑ ΚΑΙ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΚΥΤΤΑΡΙΚΩΝ ΣΥΣΤΗΜΑΤΩΝ

3Η ΓΡΑΠΤΗ ΕΡΓΑΣΙΑ

ΚΟΚΚΙΝΟΥ ΠΑΝΑΓΙΩΤΑ

A.M : 513087

**Σκεπτικό γραφής του κώδικα**

Αρχικά παρατηρούμε πως και για τα δύο βιολογικά δίκτυα οι κώδικες που θα δημιουργήσουμε θα έχουν την εξής κατάτμηση:

1. Εγκατάσταση και φόρτωση του πακέτου igraph στο RStudio.
2. Αλλαγή καταλόγου εργασίας στον σκληρό δίσκο C:/ όπου περιέχει τα αρχεία δεδομένων που έχουν δοθεί και αφαίρεση προϋπαρχόντων μεταβλητών από το περιβάλλον.
3. Εισαγωγή των αρχείων που περιέχουν ως δεδομένα τους κόμβους και τις ακμές του γράφου που αναπαριστά το ζητούμενο βιολογικό δίκτυο.
4. Δημιουργία γράφου που αναπαριστά το ζητούμενο βιολογικό δίκτυο.
5. Υπολογισμός βαθμού όλων των κόμβων του παραπάνω γράφου.
6. Υπολογισμός της συντομότερης διαδρομής (shortest path) μεταξύ δύο κόμβων της επιλογής μας.
7. Υπολογισμός των μετρικών κεντρικότητα (betweenness), closeness και alpha για όλους τους κόμβους και ταξινόμηση των αποτελεσμάτων κατά φθίνουσα σειρά.
8. Υπολογισμός των μετρικών Kleinberg’s authority και Kleinberg’s hub για όλους τους κόμβους και ταξινόμηση των αποτελεσμάτων κατά φθίνουσα σειρά.

Στη συνέχεια θα αναλύσουμε τα παραπάνω βήματα του κώδικα ξεχωριστά για το πρώτο και για το δεύτερο γράφο, ενώ παράλληλα θα περιγράψουμε τι υλοποιούν οι συναρτήσεις που χρησιμοποιήσαμε σε κάθε βήμα. Οι συναρτήσεις που χρησιμοποιήθηκαν και η μορφοποίηση των γράφων που διαμορφώθηκαν παρακάτω επιλέχθηκαν με βάση συγκεκριμένες βιβλιογραφικές αναφορές (Csardi, 2019˙ Ognyanova, 2016˙ Pavlopoulos κ.ά., 2011˙ R Core Team, 2015).

1. Πρώτος γράφος που αφορά τον «Χάρτη Σηματοδοτικών Μονοπατιών» (SignalingPathway Maps) από τη βάση KEGG, για το μονοπάτι «Steroid hormone biosynthesis» του οργανισμού Mus Musculus (mmu00140).
2. Το πακέτο igraph είναι μια συλλογή εργαλείων ανάλυσης δικτύων που μπορεί να χρησιμοποιηθεί από την R. Για τη χρήση του χρειάζεται εγκατάστασή του στο RStudio και στη συνέχεια φόρτωση του, τα οποία πραγματοποιούνται αντίστοιχα με τις εξής εντολές:

install.packages("igraph")

library(igraph)

1. Πριν μπορέσουμε να εισάγουμε τα αρχεία στα οποία βρίσκονται τα δεδομένα με τους κόμβους και τις ακμές του γράφου θα πρέπει να ορίσουμε τον κατάλογο εργασίας μας ως τον φάκελο που τα περιέχει. Για χάρη ευκολίας θα ορίσουμε ως κατάλογο εργασίας τον σκληρό δίσκο C:/ ως εξής:

setwd("C:/")

Η παραπάνω εντολή, καθώς και οι εντολές του 1, θα πραγματοποιηθούν μία φορά στον πηγαίο κώδικα.

Στη συνέχεια θα αφαιρέσουμε από την λίστα μεταβλητών όλες τις προϋπάρχουσες μεταβλητές από το περιβάλλον του RStudio, ώστε να μην δημιουργηθεί πρόβλημα στα αποτελέσματά μας. Αυτό γίνεται με τη συνάρτηση rm() η οποία αφαιρεί τα αντικείμενα εκείνα που της έχουμε δώσει ως όρισμα. Συγκεκριμένα αν δώσουμε στην παράμετρο της list την τιμή της συνάρτησης ls(), η οποία επιστρέφει ένα διάνυσμα συμβολοσειρών χαρακτήρων που έχει τα ονόματα των αντικειμένων στο καθορισμένο περιβάλλον θα επιτύχουμε το παραπάνω ως εξής:

rm(list = ls())

1. Στα αρχεία molecular\_data.txt, molecular\_names.txt βρίσκονται ως δεδομένα η λίστα ακμών και τα ονόματα των κόμβων του γράφου αντίστοιχα. Συγκεκριμένα οι κόμβοι αναπαριστούν γονίδια σε Entrez Ids. Οπότε για τη δημιουργία του γράφου θα χρειαστεί η εισαγωγή τους στο RStudio από τον φάκελο στον οποίο βρίσκονται. Αυτό επιτυγχάνεται με τη χρήση της συνάρτησης read.table(), όπου διαβάζει ένα αρχείο σε μορφή πίνακα και δημιουργεί ένα πλαίσιο δεδομένων από αυτό. Στην περίπτωσή μας η read.table('C:/…/molecular\_data.txt’) δημιουργεί ένα πλαίσιο δεδομένων με πλήθος γραμμών του το πλήθος των ακμών που έχει ο γράφος και πλήθος στηλών του, δύο στήλες οι οποίες αναπαριστούν την αρχή και το πέρας της κάθε ακμής αυτής. Η read.table('C:/…/molecular\_name.txt’) δημιουργεί ένα πλαίσιο δεδομένων με πλήθος γραμμών το πλήθος των κόμβων που έχει ο γράφος και μία στήλη, όπου σε κάθε γραμμή υπάρχει το Entrez Id του κάθε γονιδίου. Οι εκχωρήσεις των δεδομένων αυτών θα γίνουν σε δύο καινούριες μεταβλητές, τις ed\_list και vertex\_name αντίστοιχα. Ωστόσο για μετέπειτα διευκόλυνση χρήσης των μεταβλητών αυτών θα τις μετατρέψουμε σε τύπο matrix με τη χρήση της συνάρτησης as.matrix(). Τα παραπάνω γίνονται ως εξής:

ed\_list=read.table('C:/Users/user/Desktop/Παράδοση/ΚΟΚΚΙΝΟΥ ΠΑΝΑΓΙΩΤΑ/Εργασια1/molecular\_data.txt')

ed\_list = as.matrix(ed\_list)

vertex\_name = read.table('C:/Users/user/Desktop/Παράδοση/ΚΟΚΚΙΝΟΥ ΠΑΝΑΓΙΩΤΑ/Εργασια1/molecular\_names.txt')

vertex\_name = as.matrix(vertex\_name)

1. Για τη δημιουργία του κατευθυνόμενου γράφου που αναπαριστά το βιολογικό αυτό δίκτυο, αφού οι ακμές του είναι εκχωρημένες στη μεταβλητή ed\_list θα χρησιμοποιήσουμε τη συνάρτηση graph.edgelist(ed\_list,directed=TRUE) με τη παράμετρο directed να είναι TRUE, ώστε να έχουμε ως αποτελέσμα κατευθυνόμενο γράφημα. Στη συνέχεια τις τιμές της μεταβλητής αυτής θα τις εκχωρήσουμε στη μεταβλητή net. Για το σχεδιασμό του γράφου θα χρησιμοποιήσουμε τη συνάρτηση plot με κατάλληλες παραμέτρους ώστε να έχουμε ευπαρουσίαστο αποτέλεσμα, αφού το αρχικό αποτέλεσμα με τις προκαθορισμένες τιμές είχαν ως αποτέλεσμα το γράφημα να έχει επικαλυπτόμενους κόμβους, μεγάλα σε μέγεθος βέλη των ακμών και συγκέντρωση των κόμβων στο κέντρο του παραθύρου. Επίσης, θα θέλαμε ο κάθε κόμβος να έχει ως όνομα το αντίστοιχο όνομα του γονιδίου του και όχι το αναγνωριστικό του, τα οποία θα θέλαμε να βρίσκονται όσο το δυνατόν γίνεται εντός των ορίων των κόμβων. Λόγω των παραπάνω οι τιμές ορισμένων μεταβλητών έχουν οριστεί πειραματικά. Οπότε θα έχουμε το εξής:

net = graph.edgelist(ed\_list,directed=TRUE)

plot(net,vertex.label.font = 2,

vertex.size = 5,

vertex.color = rainbow(10, 0.8, 0.8, alpha = 0.7),

vertex.label = vertex\_name,

vertex.label.color = "black",

vertex.frame.color = 'grey',

vertex.label.cex = 0.6,

vertex.label.degree = -pi/2,

edge.arrow.size = 0.25,

main='Steroid Hormone Biosynthesis for Mus Musculus (mmu00140)',

asp = 0, margin = -0.1)

Τα παραπάνω ορίζονται ως εξής:

* plot(): σχεδιάζει τo ζητούμενο γράφο.

Οι παράμετροί της που χρησιμοποιήθηκαν ορίζονται ως εξής:

net: ο γράφος που θα χρησιμοποιήσει για τη δημιουργία της απεικόνισης του.

vertex.label.font: η γραμματοσειρά του ονόματος του κόμβου.

vertex.size: το μέγεθος του κόμβου.

vertex.color: το χρώμα του κόμβου.

vertex.label: διάνυσμα χαρακτήρων που περιέχει τα ονόματα των κόμβων.

vertex.label.color: χρώμα των ονομάτων των κόμβων.

vertex.frame.color: χρώμα του περιθωρίου των κόμβων.

vertex.label.cex: μέγεθος γραμματοσειράς του ονόματος των κόμβων.

vertex.label.degree: η θέση του ονόματος των κόμβων σε σχέση με τη θέση του κόμβου. Εδώ έχει τιμή –pi/2, δηλαδή πάνω του.

edge.arrow.size: μέγεθος του άκρου του βέλους κάθε ακμής.

main: όνομα του γράφου.

asp: η αναλογία απεικόνισης του γράφου.

margin: περιθώρια κενού χώρου γύρω από το γράφο.

* rainbow(10, 0.8, 0.8, alpha = 0.7): χρήση δέκα χρωμάτων από την παλέτα rainbow με ‘κορεσμό’ 0.8 και ‘τιμή’ 0.8 για να ολοκληρώσουμε την περιγραφή HSV χρωμάτων. Επίσης, η διαφάνεια των χρωμάτων έχει οριστεί με τιμή 0.7, ώστε να φαίνονται όσο το δυνατόν γίνεται οι κόμβοι που επικαλύπτονται.

1. Θέλουμε ως αποτέλεσμα να έχουμε ένα πλαίσιο δεδομένων με δύο στήλες και πλήθος γραμμών το πλήθος των κόμβων του γράφου. Η κάθε γραμμή του θα αναπαριστά έναν κόμβο του γράφου, ενώ η πρώτη στήλη του τα ονόματα των κόμβων/γονιδίων σε Entrez Ids και η δεύτερη την τιμή του βαθμού των κόμβων αυτών. Αρχικά για τον υπολογισμό του βαθμού όλων των κόμβων του γραφήματος net χρησιμοποιούμε τη συνάρτηση degree(net) του igraph. Εκχωρούμε τα αποτελέσματά της συνάρτησης αυτής στην μεταβλητή degree\_net ως πλαίσιο δεδομένων, χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση as.data.frame(degree(net)). Στη συνέχεια θα ενώσουμε τις στήλες του πίνακα vertex\_name, όπου υπάρχουν τα ονόματα των κόμβων, και του degree\_net, όπου υπάρχουν οι αντίστοιχοι βαθμοί αυτών των κόμβων, με τη χρήση της συνάρτησης cbind(vertex\_name, degree\_net). Η εκχώρηση του παραπάνω γίνεται στη μεταβλητή degree\_data\_net, όπου τώρα η πρώτη στήλη της έχει τα ονόματα των κόμβων του γράφου και η δεύτερη τους αντίστοιχους βαθμούς τους. Τέλος, ονομάζουμε ως Molecular Name και Degree την πρώτη και δεύτερη στήλη του degree\_data\_net αντίστοιχα με τη συνάρτηση colnames(degree\_data\_net) = c('Molecular Name', 'Degree') και καλούμε τη μεταβλητή degree\_data\_net, ώστε να δούμε την τιμή της. Τα παραπάνω γίνονται ως εξής:

degree\_net = as.data.frame(degree(net))

degree\_data\_net = cbind(vertex\_name,

degree\_net)

colnames(degree\_data\_net) = c('Molecular Name',

'Degree')

degree\_data\_net

1. Για τον υπολογισμό της συντομότερης διαδρομής μεταξύ δύο κόμβων θέλουμε ως αποτέλεσμα έναν πίνακα με τη στήλη του να έχει ως όνομα την έναρξη της διαδρομής , τη γραμμή του να έχει ως όνομα το πέρας της και η τιμή του να είναι ο ελάχιστος αριθμός βημάτων μεταξύ των δύο αυτών κόμβων. Αρχικά θα φτιάξουμε ένα πλαίσιο δεδομένων όπου θα υπάρχουν οι αντιστοιχήσεις των αναγνωριστικών των κόμβων με τα ονόματά τους. Τα αναγνωριστικά τους τα βρίσκουμε με την συνάρτηση V(net) και τα ονόματά τους βρίσκονται στη μεταβλητή vertex\_name. Επομένως στη μεταβλητή new\_vertex\_name εκχωρούμε την ένωση των στηλών των δύο παραπάνω μεταβλητών ως πλαίσιο δεδομένων με τη χρήση της συνάρτησης as.data.frame(cbind(V(net),vertex\_name)). Στη συνέχεια ονομάζουμε τις δύο στήλες του ως ID και Molecular Name αντίστοιχα με τη χρήση της συνάρτησης colnames(new\_vertex\_name) = c('ID','Molecular Name'). Ως παράδειγμα θα πάρουμε τους κόμβους με αναγνωριστικά 2 και 7. Ο υπολογισμός της συντομότερης διαδρομής τους θα γίνει με τη χρήση της συνάρτησης shortest.paths(net, new\_vertex\_name[2,1], new\_vertex\_name[7,1]). Οι μεταβλητές new\_vertex\_name[2,1], new\_vertex\_name[7,1] έχουν ως τιμή το αναγνωριστικό των κόμβων, οπότε έχουμε σε αντιστοιχία τη συνάρτηση shortest\_path\_net = shortest.paths(net,2,7). Η εκχώρηση του αποτελέσματος γίνεται στη μεταβλητή shortest\_path\_net της οποίας δίνουμε όνομα στη στήλη της το όνομα του κόμβου που έχει αναγνωριστικό 2 και στη γραμμή της το όνομα του κόμβου που έχει αναγνωριστικό 7. Τα ονόματα αυτά βρίσκονται στη δεύτερη στήλη του new\_vertex\_name και μάλιστα στη 2η και 7η γραμμή αντίστοιχα. Επομένως με τις εντολές colnames(Shortest\_path\_net) = new\_vertex\_name[2,2] και rownames(Shortest\_path\_net) = new\_vertex\_name[7,2] κάνουμε τα παραπάνω και στο τέλος καλούμε τη μεταβλητή shortest\_path\_net η οποία έχει το επιθυμητό αποτέλεσμα. Τα παραπάνω γίνονται ως εξής:

new\_vertex\_name = as.data.frame(cbind(V(net),vertex\_name))

colnames(new\_vertex\_name) = c('ID','Molecular Name')

shortest\_path\_net = shortest.paths(net, new\_vertex\_name[2,1],

new\_vertex\_name[7,1])

colnames(Shortest\_path\_net) = new\_vertex\_name[2,2]

rownames(Shortest\_path\_net) = new\_vertex\_name[7,2]

shortest\_path\_net

1. Για τον υπολογισμό των μετρικών κεντρικότητα (betweenness), closeness και alpha για όλους τους κόμβους θέλουμε ως αποτέλεσμα τρεις πίνακες των οποίων το πλήθος των γραμμών θα είναι ίσο με το πλήθος των κόμβων του γράφου και πλήθος στηλών δύο, όπου η πρώτη θα έχει ως στοιχεία της τα ονόματα των κόμβων και η δεύτερη τις αντίστοιχες τιμές των μετρικών για του αντίστοιχους αυτούς κόμβους. Επίσης, θέλουμε τα αποτελέσματα να είναι ταξινομημένα κατά τη φθίνουσα σειρά των τιμών των μετρικών, δηλαδή των στοιχείων της δεύτερης στήλης τους. Θα αναλύσουμε το σκεπτικό για την betweenness το οποίο είναι ανάλογο με τις υπόλοιπες δύο μετρικές.

Αρχικά, με τη χρήση της συνάρτησης betweenness(net) βρίσκουμε τις τιμές της μετρικής betweenness για όλους τους κόμβους του γραφήματος net και στη συνέχεια εκχωρούμε τα αποτελέσματά της ως πλαίσιο δεδομένων στη μεταβλητή betweenness\_net. Στη συνέχεια ενώνουμε τη στήλη της μεταβλητής vertex\_name, όπου υπάρχουν τα ονόματα των κόμβων, με τη στήλη της betweenness\_net με τη χρήση της συνάρτησης betweenness\_net = cbind(vertex\_name,betweenness\_net). Το αποτέλεσμα της το εκχωρούμε στην μεταβλητή betweenness\_net. Θα ονομάσουμε στη συνέχεια τις δύο στήλες της betweenness\_net ως Molecular Name και Betweenness αντίστοιχα. Επίσης, θα χρησιμοποιήσουμε τη συνάρτηση order(betweenness\_net$Betweenness,decreasing = T) η οποία ταξινομεί τις γραμμές του betweenness\_net ως προς τη δεύτερη στήλη Betweenness κατά φθίνουσα σειρά με τη χρήση της παραμέτρου decreasing = T. Τέλος, με τη χρήση της συνάρτησης betweenness\_net[order(betweenness\_net$Betweenness,decreasing = T),], καλούμε το πλαίσιο δεδομένων betweenness\_net, το οποίο θα έχει και τη ζητούμενη ταξινόμηση.

Για τις μετρικές closeness και alpha θα έχουμε τα αντίστοιχα με τα παραπάνω, μόνο που θα χρησιμοποιήσουμε τις συναρτήσεις closeness(net) και alpha.centrality(net) αντίστοιχα, για να βρούμε τις τιμές τους. Οπότε θα έχουμε τα εξής:

##Betweenness

betweenness\_net = as.data.frame(betweenness(net))

betweenness\_net = cbind(vertex\_name, betweenness\_net)

colnames(betweenness\_net) = c('Molecular Name', 'Betweenness')

betweenness\_net[order(betweenness\_net$Betweenness,decreasing = T),]

##Closeness

closeness\_net = as.data.frame(closeness(net))

closeness\_net = cbind(vertex\_name, closeness\_net)

colnames(closeness\_net) = c('Molecular Name', 'Clossenness')

closeness\_net[order(closeness\_net$Clossenness,decreasing = T),]

##Alpha

alpha\_net = as.data.frame(alpha.centrality(net))

alpha\_net = cbind(vertex\_name, alpha\_net)

colnames(alpha\_net) = c('Molecular Name', 'Alpha')

alpha\_net[order(alpha\_net$Alpha,decreasing = T),]

Μια σημείωση ως προς την μετρική closeness είναι πως καθώς τρέχει ο κώδικας θα έχουμε το εξής warning:

Warning message:  
In closeness(g) :  
  At centrality.c:2784 :closeness centrality is not well-defined for disconnected graphs

Ο λόγος που εμφανίζεται είναι διότι το γράφημα είναι κατευθυνόμενο και όταν υπολογίζεται η τιμή της closeness για τους κόμβους εκείνους που έχουν in-degree=0, η συνάρτηση δεν είναι καλά ορισμένη και το γράφημα θεωρείται ‘disconnected’, που στην πραγματικότητα δεν είναι.

1. Για τον υπολογισμό των μετρικών Kleinberg’s authority και Kleinberg’s hub για όλους τους κόμβους θέλουμε ως αποτέλεσμα δύο πίνακες των οποίων το πλήθος των γραμμών θα είναι ίσο με το πλήθος των κόμβων του γράφου και το πλήθος των στηλών τους θα είναι δύο, όπου η πρώτη στήλη θα έχει ως στοιχεία της τα ονόματα των κόμβων και η δεύτερη τις αντίστοιχες τιμές των δύο αυτών μετρικών για τους αντίστοιχους κόμβους. Επίσης, θέλουμε τα αποτελέσματα να είναι ταξινομημένα κατά τη φθίνουσα σειρά των τιμών των μετρικών, δηλαδή των στοιχείων της δεύτερης στήλης τους. Θα αναλύσουμε το σκεπτικό για την Kleinberg’s authority το οποίο είναι ανάλογο με την Kleinberg’s hub.

Αρχικά με τη χρήση της συνάρτησης authority.score(net) βρίσκουμε τις τιμές της μετρικής Kleinberg’s authority για όλους τους κόμβους του γραφήματος και στη συνέχεια εκχωρούμε τα αποτελέσματά της ως πλαίσιο δεδομένων στη μεταβλητή K\_authority\_net. Για την ένωση του K\_authority\_net με την vertex\_name, θα πρέπει να την μετατρέψουμε πρώτα σε πλαίσιο δεδομένων. Αυτό γίνεται με τη συνάρτηση as.data.frame(vertex\_name), της οποίας τα αποτελέσματα τα εκχωρούμε στη μεταβλητή vertex\_name. Ενώνουμε τη στήλη της vertex\_name, όπου υπάρχουν τα ονόματα των κόμβων με την πρώτη στήλη της K\_authority\_net, όπου υπάρχουν οι τιμές της μετρικής για όλους του κόμβους, με τη συνάρτηση K\_authority\_net=cbind(vertex\_name,data.matrix(K\_authority\_net[,1])). Στη συνέχεια θα ονομάσουμε τις δύο στήλες της K\_authority\_net ως Molecular Name και Kleinberg's authority αντίστοιχα. Επίσης, θα χρησιμοποιήσουμε τη συνάρτηση order(K\_authority\_net$`Kleinberg's authority`,decreasing = T), η οποία ταξινομεί τις γραμμές του K\_authority\_net ως προς τη δεύτερη στήλη Kleinberg's authority κατά φθίνουσα σειρά με τη χρήση της παραμέτρου decreasing = T. Τέλος, με τη χρήση της συνάρτησης K\_authority\_net[order(K\_authority\_net$`Kleinberg's authority`,decreasing = T),], καλούμε το πλαίσιο δεδομένων K\_authority\_net, το οποίο θα έχει και τη ζητούμενη ταξινόμηση.

Για την μετρική Kleinberg’s hub θα έχουμε τα αντίστοιχα με τα παραπάνω, μόνο που θα χρησιμοποιήσουμε τη συνάρτηση hub.score(net), για την εύρεση των τιμών της μετρικής αυτής. Οπότε θα έχουμε τα εξής:

##K authority

K\_authority\_net = as.data.frame(authority.score(net))

vertex\_name = as.data.frame(vertex\_name)

K\_authority\_net = cbind(vertex\_name, data.matrix(K\_authority\_net[,1]))

colnames(K\_authority\_net) = c('Molecular Name', "Kleinberg's authority")

K\_authority\_net[order(K\_authority\_net$`Kleinberg's authority`,decreasing = T),]

##K Hub

K\_hub\_net = as.data.frame(hub.score(net))

K\_hub\_net = cbind(vertex\_name, data.matrix(K\_hub\_net[,1]))

colnames(K\_hub\_net) = c('Molecular Name', "Kleinberg's hub")

K\_hub\_net[order(K\_hub\_net$`Kleinberg's hub`,decreasing = T),]

**Πηγαίος κώδικας**

Ο πηγαίος κώδικας για το πρώτο βιολογικό δίκτυο δίνεται ως εξής:

install.packages("igraph")

library(igraph)

setwd("C:/")

#Graph 1

rm(list = ls())

ed\_list = read.table('C:/Users/user/Desktop/Παράδοση/ΚΟΚΚΙΝΟΥ ΠΑΝΑΓΙΩΤΑ/Εργασια1/molecular\_data.txt')

ed\_list = as.matrix(ed\_list)

vertex\_name = read.table('C:/Users/user/Desktop/Παράδοση/ΚΟΚΚΙΝΟΥ ΠΑΝΑΓΙΩΤΑ/Εργασια1/molecular\_names.txt')

vertex\_name = as.matrix(vertex\_name)

net = graph.edgelist(ed\_list,directed=TRUE)

plot(net,vertex.label.font = 2,

vertex.size = 5,

vertex.color = rainbow(10, 0.8, 0.8, alpha = 0.7),

vertex.label = vertex\_name,

vertex.label.color = "black",

vertex.frame.color = 'grey',

vertex.label.cex = 0.6,

vertex.label.degree = -pi/2,

edge.arrow.size = 0.25,

main='Steroid Hormone Biosynthesis for Mus Musculus (mmu00140)',

asp = 0, margin = -0.1)

##Degrees

degree\_net = as.data.frame(degree(net))

degree\_data\_net = cbind(vertex\_name, degree\_net)

colnames(degree\_data\_net) = c('Molecular Name', 'Degree')

degree\_data\_net

##Shortest path

new\_vertex\_name = as.data.frame(cbind(V(net),vertex\_name))

colnames(new\_vertex\_name) = c('ID','Molecular Name')

shortest\_path\_net = shortest.paths(net, as.character(new\_vertex\_name[2,1]),

as.character(new\_vertex\_name[7,1]))

colnames(shortest\_path\_net) = new\_vertex\_name[2,2]

rownames(shortest\_path\_net) = new\_vertex\_name[7,2]

shortest\_path\_net

#Metrics

##Betweenness

betweenness\_net = as.data.frame(betweenness(net))

betweenness\_net = cbind(vertex\_name, betweenness\_net)

colnames(betweenness\_net) = c('Molecular Name''Betweenness')

betweenness\_net[order(betweenness\_net$Betweenness,decreasing = T),]

##Closeness

closeness\_net = as.data.frame(closeness(net))

closeness\_net = cbind(vertex\_name, closeness\_net)

colnames(closeness\_net) = c('Molecular Name', 'Clossenness')

closeness\_net[order(closeness\_net$Clossenness,decreasing = T),]

##Alpha

alpha\_net = as.data.frame(alpha.centrality(net))

alpha\_net = cbind(vertex\_name, alpha\_net)

colnames(alpha\_net) = c('Molecular Name', 'Alpha')

alpha\_net[order(alpha\_net$Alpha,decreasing = T),]

##K authority

K\_authority\_net = as.data.frame(authority.score(net))

vertex\_name = as.data.frame(vertex\_name)

K\_authority\_net = cbind(vertex\_name, data.matrix(K\_authority\_net[,1]))

colnames(K\_authority\_net) = c('Molecular Name', "Kleinberg's authority")

K\_authority\_net[order(K\_authority\_net$`Kleinberg's authority`,decreasing = T),]

##K Hub

K\_hub\_net = as.data.frame(hub.score(net))

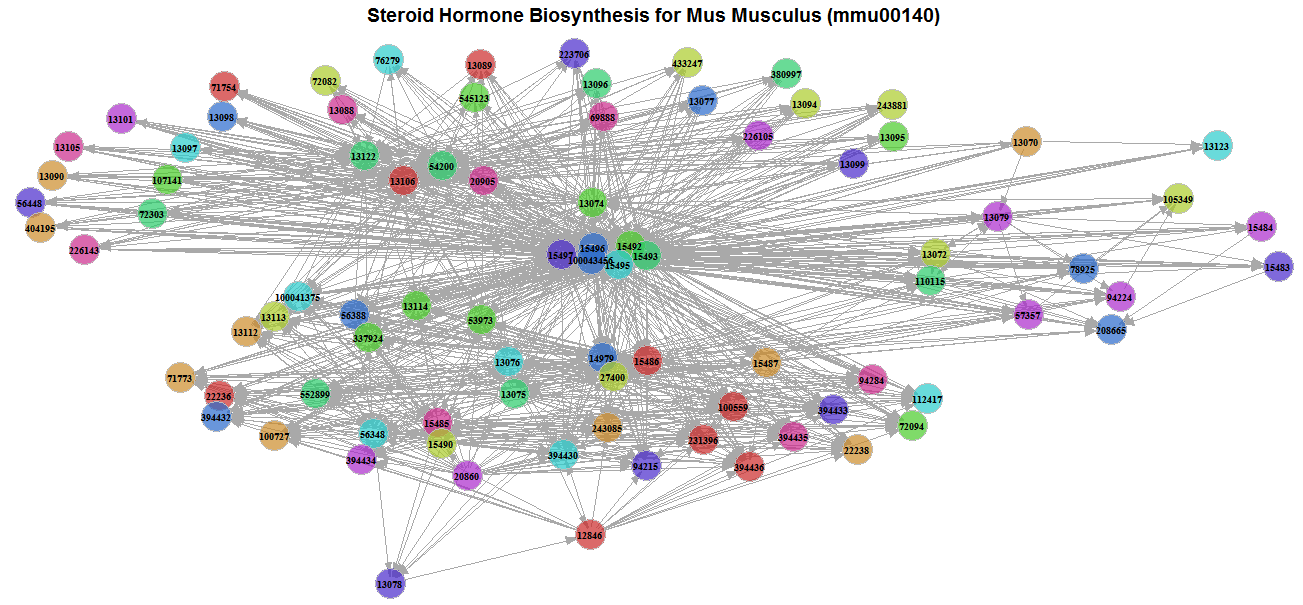
K\_hub\_net = cbind(vertex\_name, data.matrix(K\_hub\_net[,1]))

colnames(K\_hub\_net) = c('Molecular Name', "Kleinberg's hub")

K\_hub\_net[order(K\_hub\_net$`Kleinberg's hub`,decreasing = T),]

**Αποτελέσματα**

Τα αποτελέσματα του παραπάνω κώδικα είναι τα εξής:

1. Γράφος του 1ου βιολογικού δικτύου:
2. Βαθμοί κόμβων του 1ου βιολογικού δικτύου:

Molecular Name Degree

1 12846 20

2 13070 12

3 13072 24

4 13074 68

5 13075 44

6 13076 45

7 13077 12

8 13078 8

9 13079 24

10 13088 12

11 13089 12

12 13090 12

13 13094 12

14 13095 12

15 13096 12

16 13097 12

17 13098 12

18 13099 12

19 13101 12

20 13105 12

21 13106 78

22 13112 26

23 13113 26

24 13114 26

25 13122 37

26 13123 7

27 14979 53

28 15483 10

29 15484 10

30 15485 37

31 15486 53

32 15487 38

33 15490 37

34 15492 89

35 15493 89

36 15495 89

37 15496 89

38 15497 89

39 20860 32

40 20905 52

41 22236 17

42 22238 17

43 27400 53

44 53973 26

45 54200 45

46 56348 37

47 56388 26

48 56448 12

49 57357 13

50 69888 12

51 71754 12

52 71773 17

53 72082 12

54 72094 17

55 72303 12

56 76279 12

57 78925 13

58 94215 17

59 94224 13

60 94284 17

61 100559 17

62 100727 17

63 105349 10

64 107141 12

65 110115 24

66 112417 17

67 208665 15

68 223706 12

69 226105 12

70 226143 12

71 231396 17

72 243085 17

73 243881 12

74 337924 26

75 380997 12

76 394430 17

77 394432 17

78 394433 17

79 394434 17

80 394435 17

81 394436 17

82 404195 12

83 433247 12

84 545123 12

85 552899 17

86 100041375 26

87 100043456 89

1. Συντομότερη διαδρομή για τους κόμβους με αναγνωριστικά 2 και 7:

13070

13077 2

1. Τιμές της μετρικής betweenness των κόμβων του 1ου βιολογικού δικτύου:

Molecular Name Betweenness

21 13106 1.415624e+03

4 13074 3.406545e+02

34 15492 2.528652e+02

35 15493 2.528652e+02

36 15495 2.528652e+02

37 15496 2.528652e+02

38 15497 2.528652e+02

87 100043456 2.528652e+02

40 20905 1.996435e+02

6 13076 1.113870e+02

5 13075 8.635516e+01

27 14979 6.025817e+01

31 15486 6.025817e+01

43 27400 6.025817e+01

22 13112 5.480345e+01

23 13113 5.480345e+01

24 13114 5.480345e+01

44 53973 5.480345e+01

47 56388 5.480345e+01

74 337924 5.480345e+01

86 100041375 5.480345e+01

3 13072 3.904439e+01

65 110115 3.904439e+01

30 15485 2.141026e+01

33 15490 2.141026e+01

46 56348 2.141026e+01

1 12846 1.800000e+01

8 13078 9.630769e+00

45 54200 6.192227e+00

32 15487 2.100000e+00

9 13079 2.007937e+00

49 57357 1.538596e+00

57 78925 1.538596e+00

59 94224 1.538596e+00

2 13070 2.678571e-01

28 15483 9.090909e-02

29 15484 9.090909e-02

7 13077 5.296167e-02

10 13088 5.296167e-02

11 13089 5.296167e-02

12 13090 5.296167e-02

13 13094 5.296167e-02

14 13095 5.296167e-02

15 13096 5.296167e-02

16 13097 5.296167e-02

17 13098 5.296167e-02

18 13099 5.296167e-02

19 13101 5.296167e-02

20 13105 5.296167e-02

48 56448 5.296167e-02

50 69888 5.296167e-02

51 71754 5.296167e-02

53 72082 5.296167e-02

55 72303 5.296167e-02

56 76279 5.296167e-02

64 107141 5.296167e-02

68 223706 5.296167e-02

69 226105 5.296167e-02

70 226143 5.296167e-02

73 243881 5.296167e-02

75 380997 5.296167e-02

82 404195 5.296167e-02

83 433247 5.296167e-02

84 545123 5.296167e-02

25 13122 0.000000e+00

26 13123 0.000000e+00

39 20860 0.000000e+00

41 22236 0.000000e+00

42 22238 0.000000e+00

52 71773 0.000000e+00

54 72094 0.000000e+00

58 94215 0.000000e+00

60 94284 0.000000e+00

61 100559 0.000000e+00

62 100727 0.000000e+00

63 105349 0.000000e+00

66 112417 0.000000e+00

67 208665 0.000000e+00

71 231396 0.000000e+00

72 243085 0.000000e+00

76 394430 0.000000e+00

77 394432 0.000000e+00

78 394433 0.000000e+00

79 394434 0.000000e+00

80 394435 0.000000e+00

81 394436 0.000000e+00

85 552899 0.000000e+00

Τιμές της μετρικής closeness των κόμβων του 1ου βιολογικού δικτύου:

Molecular Name Clossenness

39 20860 0.0056818182

4 13074 0.0050251256

40 20905 0.0046511628

34 15492 0.0046296296

35 15493 0.0046296296

36 15495 0.0046296296

37 15496 0.0046296296

38 15497 0.0046296296

87 100043456 0.0046296296

21 13106 0.0045871560

6 13076 0.0044642857

22 13112 0.0040983607

23 13113 0.0040983607

24 13114 0.0040983607

44 53973 0.0040983607

47 56388 0.0040983607

74 337924 0.0040983607

86 100041375 0.0040983607

9 13079 0.0040322581

3 13072 0.0040000000

2 13070 0.0039840637

65 110115 0.0039840637

27 14979 0.0039682540

31 15486 0.0039682540

43 27400 0.0039682540

7 13077 0.0039370079

10 13088 0.0039370079

11 13089 0.0039370079

12 13090 0.0039370079

13 13094 0.0039370079

14 13095 0.0039370079

15 13096 0.0039370079

16 13097 0.0039370079

17 13098 0.0039370079

18 13099 0.0039370079

19 13101 0.0039370079

20 13105 0.0039370079

48 56448 0.0039370079

50 69888 0.0039370079

51 71754 0.0039370079

53 72082 0.0039370079

55 72303 0.0039370079

56 76279 0.0039370079

64 107141 0.0039370079

68 223706 0.0039370079

69 226105 0.0039370079

70 226143 0.0039370079

73 243881 0.0039370079

75 380997 0.0039370079

82 404195 0.0039370079

83 433247 0.0039370079

84 545123 0.0039370079

5 13075 0.0038461538

32 15487 0.0038022814

30 15485 0.0036496350

33 15490 0.0036496350

46 56348 0.0036496350

45 54200 0.0033444816

8 13078 0.0001704739

1 12846 0.0001685204

28 15483 0.0001352082

29 15484 0.0001352082

49 57357 0.0001352082

57 78925 0.0001352082

59 94224 0.0001352082

25 13122 0.0001336541

26 13123 0.0001336541

41 22236 0.0001336541

42 22238 0.0001336541

52 71773 0.0001336541

54 72094 0.0001336541

58 94215 0.0001336541

60 94284 0.0001336541

61 100559 0.0001336541

62 100727 0.0001336541

63 105349 0.0001336541

66 112417 0.0001336541

67 208665 0.0001336541

71 231396 0.0001336541

72 243085 0.0001336541

76 394430 0.0001336541

77 394432 0.0001336541

78 394433 0.0001336541

79 394434 0.0001336541

80 394435 0.0001336541

81 394436 0.0001336541

85 552899 0.0001336541

Τιμές της μετρικής alpha των κόμβων του 1ου βιολογικού δικτύου:

Molecular Name Alpha

2 13070 8.5505966

4 13074 7.5505966

9 13079 7.5505966

1 12846 4.1492571

30 15485 4.0684939

33 15490 4.0684939

46 56348 4.0684939

8 13078 1.9202217

6 13076 1.2290353

86 100041375 1.2290353

74 337924 1.2290353

47 56388 1.2290353

23 13113 1.2290353

22 13112 1.2290353

24 13114 1.2290353

44 53973 1.2290353

39 20860 1.0000000

26 13123 0.6395768

49 57357 -0.2131923

57 78925 -0.2131923

59 94224 -0.2131923

3 13072 -0.2131923

65 110115 -0.4263845

48 56448 -0.6911864

83 433247 -0.6911864

51 71754 -0.6911864

84 545123 -0.6911864

10 13088 -0.6911864

50 69888 -0.6911864

68 223706 -0.6911864

70 226143 -0.6911864

75 380997 -0.6911864

82 404195 -0.6911864

55 72303 -0.6911864

12 13090 -0.6911864

20 13105 -0.6911864

73 243881 -0.6911864

13 13094 -0.6911864

16 13097 -0.6911864

18 13099 -0.6911864

19 13101 -0.6911864

53 72082 -0.6911864

56 76279 -0.6911864

64 107141 -0.6911864

69 226105 -0.6911864

17 13098 -0.6911864

15 13096 -0.6911864

14 13095 -0.6911864

11 13089 -0.6911864

7 13077 -0.6911864

63 105349 -1.0000000

28 15483 -1.0000000

29 15484 -1.0000000

43 27400 -1.1738237

27 14979 -1.1738237

31 15486 -1.1738237

34 15492 -1.4851700

35 15493 -1.4851700

37 15496 -1.4851700

36 15495 -1.4851700

87 100043456 -1.4851700

38 15497 -1.4851700

32 15487 -3.8818944

40 20905 -4.4813147

41 22236 -4.4944000

42 22238 -4.4944000

52 71773 -4.4944000

54 72094 -4.4944000

58 94215 -4.4944000

60 94284 -4.4944000

61 100559 -4.4944000

62 100727 -4.4944000

66 112417 -4.4944000

71 231396 -4.4944000

72 243085 -4.4944000

76 394430 -4.4944000

77 394432 -4.4944000

78 394433 -4.4944000

79 394434 -4.4944000

80 394435 -4.4944000

81 394436 -4.4944000

85 552899 -4.4944000

25 13122 -4.7604683

21 13106 -4.7604683

45 54200 -5.1208915

5 13075 -7.7637888

67 208665 -10.4033656

Τιμές της μετρικής Kleinberg’ authority των κόμβων του 1ου βιολογικού δικτύου:

Molecular Name Kleinberg's authority

34 15492 1.000000e+00

35 15493 1.000000e+00

36 15495 1.000000e+00

37 15496 1.000000e+00

38 15497 1.000000e+00

87 100043456 1.000000e+00

45 54200 9.784159e-01

21 13106 6.761320e-01

25 13122 6.761320e-01

41 22236 6.263765e-01

42 22238 6.263765e-01

52 71773 6.263765e-01

54 72094 6.263765e-01

58 94215 6.263765e-01

60 94284 6.263765e-01

61 100559 6.263765e-01

62 100727 6.263765e-01

66 112417 6.263765e-01

71 231396 6.263765e-01

72 243085 6.263765e-01

76 394430 6.263765e-01

77 394432 6.263765e-01

78 394433 6.263765e-01

79 394434 6.263765e-01

80 394435 6.263765e-01

81 394436 6.263765e-01

85 552899 6.263765e-01

27 14979 6.046045e-01

31 15486 6.046045e-01

43 27400 6.046045e-01

65 110115 4.902617e-01

67 208665 4.892175e-01

49 57357 4.743661e-01

57 78925 4.743661e-01

59 94224 4.743661e-01

3 13072 4.743661e-01

5 13075 4.564993e-01

32 15487 4.253162e-01

9 13079 3.701518e-01

4 13074 3.510110e-01

28 15483 3.352415e-01

29 15484 3.352415e-01

22 13112 3.277457e-01

23 13113 3.277457e-01

24 13114 3.277457e-01

44 53973 3.277457e-01

47 56388 3.277457e-01

74 337924 3.277457e-01

86 100041375 3.277457e-01

6 13076 3.277457e-01

63 105349 3.253755e-01

40 20905 3.028590e-01

26 13123 3.022839e-01

30 15485 2.498993e-01

33 15490 2.498993e-01

46 56348 2.498993e-01

8 13078 2.138380e-01

7 13077 8.265203e-02

10 13088 8.265203e-02

11 13089 8.265203e-02

12 13090 8.265203e-02

13 13094 8.265203e-02

14 13095 8.265203e-02

15 13096 8.265203e-02

16 13097 8.265203e-02

17 13098 8.265203e-02

18 13099 8.265203e-02

19 13101 8.265203e-02

20 13105 8.265203e-02

48 56448 8.265203e-02

50 69888 8.265203e-02

51 71754 8.265203e-02

53 72082 8.265203e-02

55 72303 8.265203e-02

56 76279 8.265203e-02

64 107141 8.265203e-02

68 223706 8.265203e-02

69 226105 8.265203e-02

70 226143 8.265203e-02

73 243881 8.265203e-02

75 380997 8.265203e-02

82 404195 8.265203e-02

83 433247 8.265203e-02

84 545123 8.265203e-02

1 12846 4.225625e-02

2 13070 3.700757e-02

39 20860 6.183571e-17

Τιμές της μετρικής Kleinberg’ hub των κόμβων του 1ου βιολογικού δικτύου:

Molecular Name Kleinberg's hub

34 15492 1.000000000

35 15493 1.000000000

36 15495 1.000000000

37 15496 1.000000000

38 15497 1.000000000

87 100043456 1.000000000

6 13076 0.883222797

4 13074 0.774988549

27 14979 0.710569038

31 15486 0.710569038

43 27400 0.710569038

5 13075 0.663040378

39 20860 0.654537173

32 15487 0.653017320

30 15485 0.561103101

33 15490 0.561103101

46 56348 0.561103101

40 20905 0.524267823

1 12846 0.448338197

22 13112 0.433204292

23 13113 0.433204292

24 13114 0.433204292

44 53973 0.433204292

47 56388 0.433204292

74 337924 0.433204292

86 100041375 0.433204292

21 13106 0.431589027

9 13079 0.374154844

3 13072 0.332875299

7 13077 0.331267016

10 13088 0.331267016

11 13089 0.331267016

12 13090 0.331267016

13 13094 0.331267016

14 13095 0.331267016

15 13096 0.331267016

16 13097 0.331267016

17 13098 0.331267016

18 13099 0.331267016

19 13101 0.331267016

20 13105 0.331267016

48 56448 0.331267016

50 69888 0.331267016

51 71754 0.331267016

53 72082 0.331267016

55 72303 0.331267016

56 76279 0.331267016

64 107141 0.331267016

68 223706 0.331267016

69 226105 0.331267016

70 226143 0.331267016

73 243881 0.331267016

75 380997 0.331267016

82 404195 0.331267016

83 433247 0.331267016

84 545123 0.331267016

2 13070 0.330234794

65 110115 0.313380188

28 15483 0.019453588

29 15484 0.019453588

49 57357 0.012938462

57 78925 0.012938462

59 94224 0.012938462

45 54200 0.012043100

8 13078 0.001680307

25 13122 0.000000000

26 13123 0.000000000

41 22236 0.000000000

42 22238 0.000000000

52 71773 0.000000000

54 72094 0.000000000

58 94215 0.000000000

60 94284 0.000000000

61 100559 0.000000000

62 100727 0.000000000

63 105349 0.000000000

66 112417 0.000000000

67 208665 0.000000000

71 231396 0.000000000

72 243085 0.000000000

76 394430 0.000000000

77 394432 0.000000000

78 394433 0.000000000

79 394434 0.000000000

80 394435 0.000000000

81 394436 0.000000000

85 552899 0.000000000

1. Δεύτερος γράφος που αναπαριστά «Δίκτυο Τοπολογίας Εγκεφάλου» (Brain Topology Network) του οποίου τα δεδομένα συγκεντρώθηκαν κατά τη διάρκεια εκτέλεσης ενός task (Mental Rotation) το οποίο αφορά την οδήγηση μετά από πνευματική κούραση, για μια συγκεκριμένη χρονική στιγμή, και προέρχονται από καταγραφές ηλεκτροεγκεφαλογραφήματος με 62 αισθητήρες.

Για τον δεύτερο γράφο έχουμε αντιστοιχία με τον πρώτο εκτός από το 3ο και 4ο βήμα που αφορούν την εισαγωγή των δεδομένων των ακμών και των ονομάτων των κόμβων και την δημιουργία του γράφου. Οπότε θα σχολιάσουμε μόνο αυτά τα βήματα. Άρα θα έχουμε τα εξής:

3. Στα αρχεία brain\_data.txt και brain\_label.txt βρίσκονται ως δεδομένα ο πίνακας γειτνίασης των ακμών και τα ονόματα των κόμβων του γράφου αντίστοιχα. Για τη δημιουργία του γράφου θα χρειαστεί η εισαγωγή τους στο RStudio από τον φάκελο στον οποίο βρίσκονται. Αυτό επιτυγχάνεται με τη χρήση της συνάρτησης read.table(), όπου διαβάζει ένα αρχείο σε μορφή πίνακα και δημιουργεί ένα πλαίσιο δεδομένων από αυτό. Στην περίπτωσή μας η read.table('C:/…/brain\_data.txt’) δημιουργεί ένα πλαίσιο δεδομένων με διαστάσεις nxn, όπου n είναι το πλήθος των κόμβων του γραφήματος. Η read.table('C:/…/brain\_label.txt’) δημιουργεί ένα πλαίσιο δεδομένων με πλήθος γραμμών το πλήθος των κόμβων που έχει ο γράφος όπου σε κάθε γραμμή υπάρχει το όνομα του αντίστοιχου ηλεκτροδίου. Οι εκχωρήσεις των δεδομένων αυτών θα γίνουν σε δύο καινούριες μεταβλητές, τις e\_l και v\_n αντίστοιχα. Ωστόσο για μετέπειτα διευκόλυνση χρήσης των μεταβλητών αυτών θα τις μετατρέψουμε σε τύπο matrix με τη χρήση της συνάρτησης as.matrix() και θα τις εκχωρήσουμε στις adj\_matrix και v\_n αντίστοιχα. Επίσης, θα μετονομάσουμε τις στήλες του adj\_matrix, ώστε να έχουν ως όνομα/αναγνωριστικό των κόμβων τους αριθμούς 1 εώς το πλήθος των κόμβων. Τα παραπάνω γίνονται ως εξής:

e\_l = read.table('C:/Users/user/Desktop/Παράδοση/ΚΟΚΚΙΝΟΥ ΠΑΝΑΓΙΩΤΑ/Εργασια1/brain\_data.txt')

adj\_matrix = as.matrix(e\_l)

colnames(adj\_matrix) = c(1:ncol(adj\_matrix))

v\_n = read.table('C:/Users/user/Desktop/Παράδοση/ΚΟΚΚΙΝΟΥ ΠΑΝΑΓΙΩΤΑ/Εργασια1/brain\_label.txt')

v\_n = as.matrix(v\_n)

4. Για τη δημιουργία του κατευθυνόμενου γράφου που αναπαριστά το βιολογικό αυτό δίκτυο, αφού έχουμε τον πίνακα γειτνίασής του adj\_matrix θα χρησιμοποιήσουμε τη συνάρτηση graph.adjacency(adj\_matrix,mode = c("directed")) με τη παράμετρο mode να παίρνει τη τιμή directed, ώστε να έχουμε κατευθυνόμενο γράφημα. Στη συνέχεια τις τιμές της μεταβλητής αυτής θα τις εκχωρήσουμε στη μεταβλητή g. Για το σχεδιασμό του γράφου θα χρησιμοποιήσουμε τη συνάρτηση plot με ίδιες παραμέτρους όπως στο προηγούμενο γράφο. Οπότε θα έχουμε το εξής:

g = graph.adjacency(adj\_matrix,mode = c("directed"))

plot(g, vertex.label.font = 2,

vertex.size = 6,

vertex.color = rainbow(10, 0.8, 0.8, alpha=0.8),

vertex.label = v\_n,

vertex.label.color = "black",

vertex.frame.color='grey',

vertex.label.cex = 0.7,

vertex.label.degree = -pi/2,

edge.arrow.size = 0.25,

main='Brain Topology Network During Mental Rotation Task',

asp = 0, margin = 0)

**Πηγαίος κώδικας**

Ο πηγαίος κώδικας για το δεύτερο βιολογικό δίκτυο δίνεται ως εξής:

rm(list = ls())

e\_l = read.table('C:/Users/user/Desktop/Παράδοση/ΚΟΚΚΙΝΟΥ ΠΑΝΑΓΙΩΤΑ/Εργασια1/brain\_data.txt')

adj\_matrix = as.matrix(e\_l)

colnames(adj\_matrix) = c(1:ncol(adj\_matrix))

v\_n = read.table('C:/Users/user/Desktop/Παράδοση/ΚΟΚΚΙΝΟΥ ΠΑΝΑΓΙΩΤΑ/Εργασια1/brain\_label.txt')

v\_n = as.matrix(v\_n)

g = graph.adjacency(adj\_matrix,mode = c("directed"))

plot(g, vertex.label.font = 2,

vertex.size = 6,

vertex.color = rainbow(10, 0.8, 0.8, alpha=0.8),

vertex.label = v\_n,

vertex.label.color = "black",

vertex.frame.color='grey',

vertex.label.cex = 0.7,

vertex.label.degree = -pi/2,

edge.arrow.size = 0.25,

main='Brain Topology Network During Mental Rotation Task',

asp = 0, margin = 0)

##Degrees

degree\_g = as.data.frame(degree(g))

degree\_data\_g = cbind(v\_n, degree\_g)

colnames(degree\_data\_g) = c('Brain Label','Degree')

degree\_data\_g

##Shortest path

new\_v\_n = as.data.frame(cbind(V(g)$name,v\_n))

Shortest\_path\_g = shortest.paths(g, as.character(new\_v\_n[45,1]),

as.character(new\_v\_n[32,1]))

colnames(Shortest\_path\_g) = new\_v\_n[45,2]

rownames(Shortest\_path\_g) = new\_v\_n[32,2]

Shortest\_path\_g

#Metrics

##Betweenness

betweenness\_g = as.data.frame(betweenness(g))

betweenness\_g = cbind(v\_n, betweenness\_g)

colnames(betweenness\_g) = c('Brain Label', 'Betweenness')

betweenness\_g[order(betweenness\_g$Betweenness,decreasing = T),]

##Closeness

closeness\_g = as.data.frame(closeness(g))

closeness\_g = cbind(v\_n, closeness\_g)

colnames(closeness\_g) = c('Brain Label', 'Clossenness')

closeness\_g[order(closeness\_g$Clossenness,decreasing = T),]

##Alpha

alpha\_g = as.data.frame(alpha.centrality(g))

alpha\_g = cbind(v\_n,alpha\_g)

colnames(alpha\_g) = c('Brain Label','Alpha')

alpha\_g[order(alpha\_g$Alpha,decreasing = T),]

##K authority

K\_authority\_g = as.data.frame(authority.score(g))

K\_authority\_g = cbind.data.frame(v\_n, K\_authority\_g[,1])

colnames(K\_authority\_g) = c('Brain Label', "Kleinberg's authority")

K\_authority\_g[order(K\_authority\_g$`Kleinberg's authority`,decreasing = T),]

##K Hub

K\_hub\_g = as.data.frame(hub.score(g))

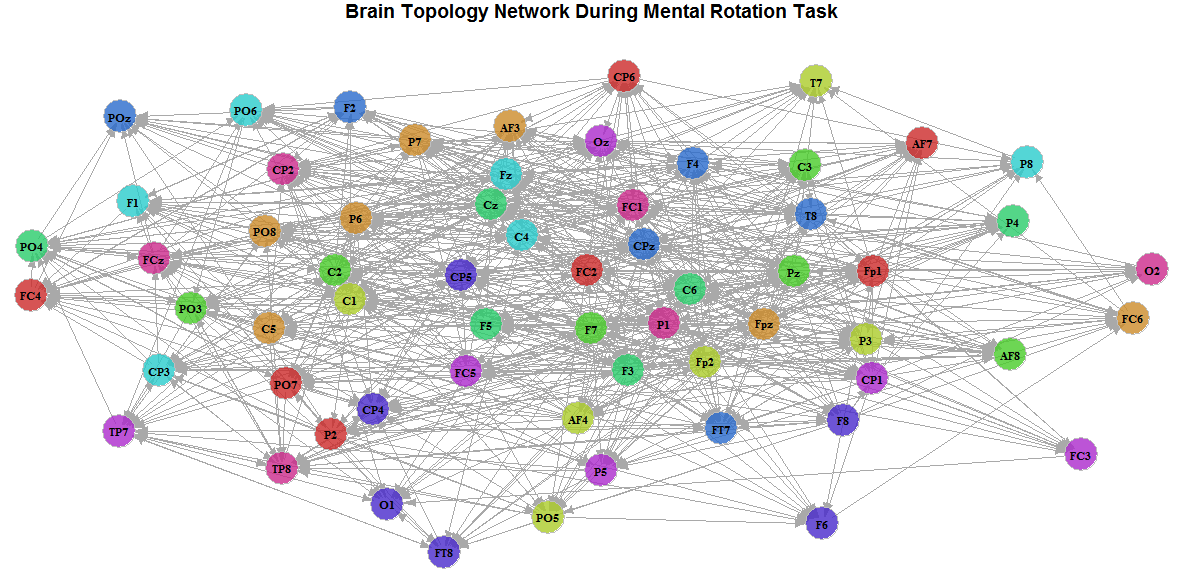
K\_hub\_g = cbind.data.frame(v\_n,K\_hub\_g[,1])

colnames(K\_hub\_g) = c('Brain Label', "Kleinberg's hub")

K\_hub\_g[order(K\_hub\_g$`Kleinberg's hub`,decreasing = T),]

**Αποτελέσματα**

Τα αποτελέσματα του παραπάνω κώδικα είναι τα εξής:

1. Γράφος του 2ου βιολογικού δικτύου:
2. Βαθμοί κόμβων του 2ου βιολογικού δικτύου:

Brain Label Degree

1 Fp1 37

2 Fpz 40

3 Fp2 29

4 F7 37

5 F3 39

6 Fz 36

7 F4 28

8 F8 26

9 FC5 27

10 FC1 39

11 FC2 41

12 FC6 15

13 T7 14

14 C3 17

15 Cz 42

16 C4 24

17 T8 32

18 CP5 26

19 CP1 27

20 CP2 20

21 CP6 23

22 P7 24

23 P3 23

24 Pz 36

25 P4 16

26 P8 13

27 POz 15

28 O1 12

29 Oz 24

30 O2 13

31 AF7 18

32 AF3 22

33 AF4 25

34 AF8 18

35 F5 25

36 F1 20

37 F2 21

38 F6 12

39 FC3 12

40 FCz 22

41 FC4 18

42 C5 20

43 C1 30

44 C2 26

45 C6 48

46 CP3 20

47 CPz 40

48 CP4 18

49 P5 18

50 P1 34

51 P2 20

52 P6 22

53 PO5 18

54 PO3 21

55 PO4 23

56 PO6 18

57 FT7 26

58 FT8 16

59 TP7 21

60 TP8 23

61 PO7 25

1. PO8 21
2. Συντομότερη διαδρομή για τους κόμβους με αναγνωριστικά 45 και 32:

C6

AF3 1

1. Τιμές της μετρικής betweenness των κόμβων του 2ου βιολογικού δικτύου:

Brain Label Betweenness

5 F3 237.754517

50 P1 160.273579

47 CPz 159.270460

45 C6 149.472477

18 CP5 145.855744

29 Oz 122.115565

17 T8 119.156146

7 F4 115.356584

24 Pz 110.093291

40 FCz 102.797139

16 C4 98.122634

44 C2 95.431514

59 TP7 89.718509

15 Cz 87.826030

48 CP4 87.762413

55 PO4 86.489521

43 C1 83.034643

1 Fp1 78.522706

23 P3 73.350780

10 FC1 73.255835

6 Fz 72.871544

12 FC6 70.886154

11 FC2 67.832611

9 FC5 62.417613

52 P6 60.058357

61 PO7 54.100254

57 FT7 52.343648

4 F7 51.211371

8 F8 48.688744

62 PO8 48.138674

2 Fpz 46.397541

46 CP3 45.935292

60 TP8 45.094344

14 C3 45.035342

37 F2 43.051431

22 P7 38.203712

35 F5 36.914676

51 P2 33.774346

19 CP1 33.449810

54 PO3 32.748605

21 CP6 32.549905

33 AF4 31.120824

32 AF3 29.706903

42 C5 26.117834

49 P5 25.751313

3 Fp2 25.662126

36 F1 22.014031

20 CP2 19.369287

41 FC4 18.911194

56 PO6 17.729605

27 POz 17.055264

31 AF7 14.452133

53 PO5 14.139125

38 F6 9.887066

58 FT8 8.558820

26 P8 8.159614

34 AF8 7.666175

25 P4 7.112631

30 O2 2.708503

39 FC3 2.513492

13 T7 0.000000

28 O1 0.000000

Τιμές της μετρικής closeness των κόμβων του 2ου βιολογικού δικτύου:

Brain Label Clossenness

11 FC2 0.0116279070

45 C6 0.0113636364

2 Fpz 0.0111111111

15 Cz 0.0108695652

4 F7 0.0107526882

47 CPz 0.0106382979

5 F3 0.0105263158

10 FC1 0.0104166667

1 Fp1 0.0102040816

3 Fp2 0.0101010101

6 Fz 0.0101010101

24 Pz 0.0101010101

50 P1 0.0101010101

17 T8 0.0098039216

8 F8 0.0096153846

33 AF4 0.0096153846

19 CP1 0.0095238095

43 C1 0.0095238095

9 FC5 0.0094339623

7 F4 0.0091743119

16 C4 0.0088495575

21 CP6 0.0088495575

51 P2 0.0088495575

18 CP5 0.0087719298

35 F5 0.0086206897

57 FT7 0.0086206897

23 P3 0.0085470085

52 P6 0.0085470085

22 P7 0.0084745763

44 C2 0.0084745763

62 PO8 0.0084745763

46 CP3 0.0084033613

55 PO4 0.0083333333

42 C5 0.0081300813

14 C3 0.0080645161

32 AF3 0.0080645161

37 F2 0.0080645161

29 Oz 0.0078740157

40 FCz 0.0078740157

12 FC6 0.0076923077

31 AF7 0.0076335878

36 F1 0.0075757576

59 TP7 0.0075757576

48 CP4 0.0075187970

61 PO7 0.0075187970

60 TP8 0.0071428571

25 P4 0.0070422535

30 O2 0.0069930070

54 PO3 0.0067114094

56 PO6 0.0067114094

53 PO5 0.0066666667

34 AF8 0.0065789474

49 P5 0.0065789474

26 P8 0.0064102564

41 FC4 0.0061728395

27 POz 0.0061349693

58 FT8 0.0058479532

20 CP2 0.0057803468

38 F6 0.0053191489

39 FC3 0.0002687450

13 T7 0.0002644104

28 O1 0.0002644104

Τιμές της μετρικής alpha των κόμβων του 2ου βιολογικού δικτύου:

Brain Label Alpha

25 P4 1.603594121

54 PO3 1.483907450

7 F4 1.047566811

32 AF3 0.921106889

15 Cz 0.576183238

33 AF4 0.513576491

11 FC2 0.511181026

30 O2 0.451097606

46 CP3 0.398177143

19 CP1 0.368747536

22 P7 0.347419497

48 CP4 0.340441484

58 FT8 0.292003826

16 C4 0.252354671

40 FCz 0.217663719

3 Fp2 0.198668705

8 F8 0.191134654

23 P3 0.156463328

59 TP7 0.095772439

60 TP8 0.087675149

35 F5 0.075190595

50 P1 0.047257722

10 FC1 0.011302646

42 C5 -0.002902849

62 PO8 -0.038514141

49 P5 -0.095688542

21 CP6 -0.097360479

14 C3 -0.135949483

47 CPz -0.158078311

17 T8 -0.161282824

4 F7 -0.167999924

55 PO4 -0.184290086

57 FT7 -0.189169990

2 Fpz -0.247739331

26 P8 -0.251678747

31 AF7 -0.256066531

6 Fz -0.277751895

45 C6 -0.279040622

36 F1 -0.296365976

9 FC5 -0.301530947

53 PO5 -0.301949052

34 AF8 -0.362861373

1 Fp1 -0.369981905

5 F3 -0.438754136

44 C2 -0.448461612

12 FC6 -0.479509291

39 FC3 -0.532943376

43 C1 -0.642412200

18 CP5 -0.658583417

52 P6 -0.799184768

29 Oz -0.829232973

41 FC4 -0.842298324

51 P2 -0.892521143

24 Pz -0.951794246

56 PO6 -0.984751550

27 POz -1.175123644

20 CP2 -1.315189787

61 PO7 -1.445920208

37 F2 -1.623314079

28 O1 -1.896809965

13 T7 -2.139029957

38 F6 -2.247240076

Τιμές της μετρικής Kleinberg’s authority των κόμβων του 2ου βιολογικού δικτύου:

Brain Label Kleinberg's authority

34 AF8 1.0000000

57 FT7 0.9171538

25 P4 0.8474449

31 AF7 0.8446061

45 C6 0.8346795

22 P7 0.8123817

35 F5 0.8088450

6 Fz 0.8023036

32 AF3 0.7981269

10 FC1 0.7915907

30 O2 0.7725787

1 Fp1 0.7612919

21 CP6 0.7250831

56 PO6 0.7172363

39 FC3 0.7124696

15 Cz 0.6882897

24 Pz 0.6833511

60 TP8 0.6806266

20 CP2 0.6756480

37 F2 0.6707296

53 PO5 0.6457021

14 C3 0.6430116

36 F1 0.6371177

49 P5 0.6294989

61 PO7 0.6258803

52 P6 0.6159497

13 T7 0.6055323

54 PO3 0.5940861

7 F4 0.5889820

58 FT8 0.5772389

62 PO8 0.5664318

19 CP1 0.5599136

42 C5 0.5553890

17 T8 0.5548823

29 Oz 0.5464411

44 C2 0.5453989

27 POz 0.5402993

46 CP3 0.5369060

38 F6 0.5290654

9 FC5 0.5256035

43 C1 0.5178688

47 CPz 0.5088025

18 CP5 0.4999909

5 F3 0.4750917

33 AF4 0.4665175

23 P3 0.4658430

50 P1 0.4523072

48 CP4 0.4508643

40 FCz 0.4460258

41 FC4 0.4373971

8 F8 0.4232085

2 Fpz 0.4203295

4 F7 0.4148467

28 O1 0.4078715

12 FC6 0.3957090

26 P8 0.3904486

16 C4 0.3830913

3 Fp2 0.3734629

55 PO4 0.3630176

59 TP7 0.3106278

51 P2 0.2371727

11 FC2 0.2110248

Τιμές της μετρικής Kleinberg’s hub των κόμβων του 2ου βιολογικού δικτύου:

Brain Label Kleinberg's hub

11 FC2 1.00000000

45 C6 0.95033637

2 Fpz 0.88221402

47 CPz 0.82786459

15 Cz 0.82033311

4 F7 0.79383106

5 F3 0.72826813

10 FC1 0.70966501

50 P1 0.67909403

24 Pz 0.66337579

1 Fp1 0.63504565

3 Fp2 0.58060134

6 Fz 0.55537296

17 T8 0.55510984

19 CP1 0.50499297

8 F8 0.46675424

9 FC5 0.43459788

33 AF4 0.40349895

43 C1 0.40097042

7 F4 0.39035505

16 C4 0.31472709

51 P2 0.31442846

44 C2 0.29951612

21 CP6 0.29228231

55 PO4 0.28903457

23 P3 0.27770228

18 CP5 0.26355792

35 F5 0.25845347

22 P7 0.25497696

52 P6 0.23999841

57 FT7 0.22125311

59 TP7 0.21632548

61 PO7 0.21507796

42 C5 0.19586495

37 F2 0.19246728

40 FCz 0.19030183

62 PO8 0.18337090

46 CP3 0.18274708

32 AF3 0.16453809

29 Oz 0.15859482

54 PO3 0.15461575

60 TP8 0.14950205

12 FC6 0.14780330

53 PO5 0.13136807

14 C3 0.12680447

36 F1 0.12190098

31 AF7 0.10628273

49 P5 0.10095358

48 CP4 0.08990868

26 P8 0.08908364

20 CP2 0.08537757

56 PO6 0.07788470

41 FC4 0.06683625

25 P4 0.06363859

34 AF8 0.06262272

58 FT8 0.04965284

27 POz 0.04853351

30 O2 0.04518208

39 FC3 0.01731880

38 F6 0.01680236

13 T7 0.00000000

1. O1 0.00000000

**Θέμα 5ο**

1. Για το πρώτο βιολογικό δίκτυο από τα παραπάνω αποτελέσματα έχουμε τα εξής:

Το γονίδιο με την μέγιστη τιμή της μετρικής betweenness είναι το γονίδιο 13106. Το επίσημο σύμβολο του συγκεκριμένου γονιδίου είναι Cyp2e1, όμως είναι γνωστό και ως Cyp2, Cyp2e, CYPIIE1. Επίσης, το επίσημο πλήρες όνομά του είναι cytochrome P450, family 2, subfamily e, polypeptide 1. Ο γονιδιακός του τύπος είναι η κωδικοποίηση πρωτεϊνών και έχει μεροληπτική έκφραση σε ιστό ήπατος ενήλικα, σε ιστό υποδόριου λίπους ενήλικα, σε ιστό μαστικού αδένα ενήλικα και σε ιστό γενετικού λίπους ενήλικα με βάση την κωδικοποίηση της γονιδιακής έκφρασης σε ποντίκι (Bult κ.ά., 2019).

Συγκεκριμένα, για το ένζυμο Cyp2e1 το οποίο ελέγχεται από το συγκεκριμένο γονίδιο μελέτες έχουν οδηγήσει στο συμπέρασμα ότι δημιουργεί εθισμό σε κατανάλωση αλκοόλ και εθισμό στην νικοτίνη (Zhou & Wu, 2014). Επίσης, το συγκεκριμένο γονίδιο προάγει την ηπατική ίνωση που προκαλείται από γρήγορο φαγητό (Abdelmegeed κ.ά., 2017).

Το γονίδιο με την μέγιστη τιμή της μετρικής closeness centrality είναι το γονίδιο 20860. Το επίσημο σύμβολο του συγκεκριμένου γονιδίου είναι Sult1e1, όμως είναι γνωστό και ως ES, St, EST, Ste, ST1E1. Επίσης, το επίσημο πλήρες όνομά του είναι sulfotransferasefamily 1E, member 1. Ο γονιδιακός του τύπος είναι η κωδικοποίηση πρωτεϊνών και έχει μεροληπτική έκφραση σε ιστό της ουροδόχου κύστης ενήλικα, σε ιστό λίπους γενετικών οργάνων ενήλικα, σε ιστό του πλακούντα ενήλικα και σε ιστό όρχι ενήλικα βασιζόμενοι σε στοιχεία της γονιδιακής έκφρασης σε ποντίκι (Bult κ.ά., 2019).

Συγκεκριμένα, η οιστρογόνος σουλφοτρανφεράση ρυθμίζει την ομοιόσταση του σωματικού λίπους και της γλυκόζης σε θηλυκά ποντίκια (Κhor κ.ά., 2010).

Το γονίδιο με την μέγιστη τιμή της μετρικής alpha είναι το γονίδιο 13070. Το επίσημο σύμβολο του συγκεκριμένου γονιδίου είναι Cyp11a1, όμως είναι γνωστό και ως Sc, Scc, csc, Cyp1, cscc, P450s, Cyp11a, Cypxia1, P450scc, D9Ertd411, D9Ertd411e. Το επίσημο πλήρες όνομά του είναι cytochrome P450, family 11, subfamily a, polypeptide 1. Το γονίδιο αυτό βρίσκεται στο μακρύ σκέλος του χρωμοσώματος 15 (15q23.24) και κωδικοποιεί την πρωτεΐνη Ρ450scc (Bult κ.ά., 2019).

Συγκεκριμένα, το στεροειδές ένζυμοCyp11a1 είναι απαραίτητο για την ανάπτυξης εντερικής αναφυλαξίας που προκαλείται από το φιστίκι (Wang κ.ά., 2013).

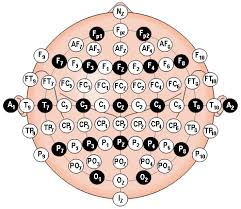
Το γονίδιο με την μέγιστη τιμή της μετρικής Kleinberg’s authority είναι το γονίδιο 15492. Το επίσημο σύμβολο του συγκεκριμένου γονιδίου είναι Hsd3b1, όμως είναι γνωστό και ως D3Ertd383, D3Ertd383e, 3-beta-HSD I. Το επίσημο πλήρες όνομά του είναι hydroxy-delta-5-steroid dehydrogenase, 3 beta- and steroiddelta-isomerase 1. Ο γονιδιακός του τύπος είναι η κωδικοποίηση πρωτεϊνών και έχει μεροληπτική έκφραση σε ιστό επινεφριδίων ενήλικα, σε ιστό ωοθήκης ενήλικα και σε ιστό ήπατος Ε18 ενήλικα με βάση την μελέτη γονιδιακής έκφρασης ποντικιού (Bult κ.ά., 2019).

Το γονίδιο με την μέγιστη τιμή της μετρικής Kleinberg’s hub είναι το γονίδιο 15493. Το επίσημο σύμβολο του συγκεκριμένου γονιδίου είναι Hsd3b2, επίσης όμως είναι γνωστό ως 3-beta-HSD II. Το επίσημο πλήρες όνομά του είναιhydroxy-delta-5-steroid dehydrogenase, 3 beta- and steroiddelta-isomerase 2 (Bult κ.ά., 2019).

Συγκεκριμένα, τo στεροειδικό ένζυμο Hsd3b2 μεσολαβεί στην μετατροπή της πρεγνενολόνης σε προγεστερόνη και δεϋδροεπιανδροστερόνης σε ανδροστενεδιόνη τόσο μέσω της δραστηριότητας της αφυδρογονάσης όσο και της ισομεράσης καθιστώντας απαραίτητο για την πρωτεΐνη να υποστεί μια αναστρέψιμη διαμορφωτική αλλαγή (Nordqvist & Töhönen, 1997).

1. Για το δεύτερο βιολογικό δίκτυο από τα παραπάνω αποτελέσματα έχουμε τα εξής:

Στην παρακάτω εικόνα φαίνονται οι θέσεις των ηλεκτροδίων στο κρανίο. Με μαύρο χρώμα σημειώνονται τα 21 βασικά ηλεκτρόδια και με άσπρο τα υπόλοιπα 54 ηλεκτρόδια (Sanei & Chambers, 2007).



Σχήμα 1. Θέσεις ηλεκτροδίων στο κρανίο.

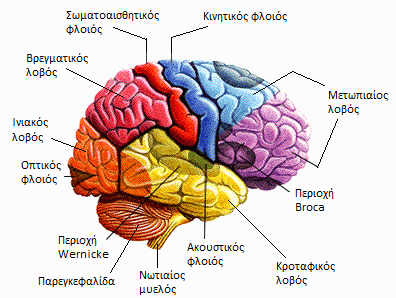
Το ηλεκτρόδιο F3 (frontal) με την μεγαλύτερη τιμή της μετρική betweenness βρίσκεται σε μετωπιαία περιοχή του εγκεφάλου στο αριστερό ημισφαίριο. Το αριστερό ημισφαίριο ελέγχει τις λειτουργίες της δεξιάς πλευράς του σώματος αισθητικά και κινητικά, ενώ σε αυτό γίνονται κυρίως οι λεκτικές, αναλυτικές και λογικές νοητικές διεργασίες. Είναι υπεύθυνο για την αντίληψη του χρόνου, την ομιλία, την γραφή, την αντίληψη του λόγου, τον συμβολισμό, την λεκτική μνήμη και την αναλυτική σκέψη.

To ηλεκτρόδιο FC2 (frontal-central) με την μεγαλύτερη τιμή της μετρικής clossenness βρίσκεται στην χωρική θέση μεταξύ μετωπιαίου και κεντρικού λοβού. Ο μετωπιαίος λοβός φαίνεται να σχετίζεται με την προσωπικότητα και την λήψη αποφάσεων. Επίσης, επεμβαίνει στον έλεγχο των παρορμήσεων και στη σεξουαλική και κοινωνική συμπεριφορά.

Το ηλεκτρόδιο P4 (parietal) με την καλύτερη τιμής της μετρικής alpha βρίσκεται στον βρεγματικό λοβό στο δεξί ημισφαίριο. Ο βρεγματικός λοβός είναι υπεύθυνος για την εκδήλωση ηθελημένων κινήσεων, για χρήση αντικειμένων και για την σύνθεση πληροφοριών που προέρχονται από διάφορες αισθήσεις. Επίσης στο βρεγματικό λοβό βρίσκεται η θέση ελέγχου για την οπτική περιοχή και για την αντίληψη της αφής.

Το ηλεκτρόδιο με την μεγαλύτερη τιμή στην μετρική Kleinberg’s authority είναι το AF8 το οποίο βρίσκεται στον μετωπιαίο λοβό στο δεξί ημισφαίριο κοντά στον λοβό των αυτιών. Το δεξί ημισφαίριο ελέγχει τις λειτουργίες της αριστερής πλευράς του σώματος, αισθητικά και νοητικά και είναι υπεύθυνο για την οπτική αντίληψη του χώρου, την κατανόηση των μεταφορικών εννοιών και του χιούμορ, την σύνθεση λεγομένων και την συναισθηματική φόρτιση.

Το ηλεκτρόδιο με την μεγαλύτερη τιμή στην μετρική Kleinberg’s hub είναι το C6(έπεται του FC2) το οποίο βρίσκεται στον κεντρικό λοβό στο δεξί ημισφαίριο. Τυπικά δεν ορίζεται κεντρικός λοβός (central) αλλά το συγκεκριμένο γράμμα χρησιμοποιείται για σκοπούς ανάγνωσης. Η Νήσος του Reil θεωρείται ως ο σημαντικότερος εγκεφαλικός φλοιός στην συλλογή πληροφοριών από όλο το σώμα και το περιβάλλον, την επεξεργασία τους και την εξέλιξη των σκέψεων και συναισθημάτων σε πράξεις και προθέσεις.



Σχήμα 2. Λοβοί του εγκεφάλου.

Βιβλιογραφικές αναφορές

Abdelmegeed, M. A., Choi, Y., Godlewski, G., Ha, S. K., Banerjee, A., Jang, S., & Song, B. J. (2017). Cytochrome P450-2E1 promotes fast food-mediated hepatic fibrosis. *Scientific reports, 7*(39764), 1–12. <https://doi.org/10.1038/srep39764>

Bult, C.J., Blake, J.A., Smith, C.L., Kadin, J.A., & Richardson, J.E. (2019). Mouse Genome Database Group. 2019. Mouse Genome Database (MGD). *Nucleic Acids Research*, *47*(D1), D801–D806. <https://doi.org/10.1093/nar/gky1056>

Csardi, G. (2019). R igraph manual pages. Ανακτήθηκε 20 Δεκεμβρίου, 2020, από <https://igraph.org/r/doc/igraph.pdf>

Khor, V. K., Dhir, R., Yin, X., Ahima, R. S., & Song, W. C. (2010). Estrogen sulfotransferase regulates body fat and glucose homeostasis in female mice. American Journal of Physiology-Endocrinology and Metabolism, 299(4), E657–E664. <https://doi.org/10.1152/ajpendo.00707.2009>

Nordqvist, K., & Tohonen, V. (2004). An mRNA differential display strategy for cloning genes expressed during mouse gonad development. International Journal of Developmental Biology, 41(4), 627–638.

Ognyanova, K. (2016) Network analysis with R and igraph: NetSci X Tutorial. Ανακτήθηκε 20 Δεκεμβρίου, 2020, από [www.kateto.net/networks-r-igraph](http://www.kateto.net/networks-r-igraph)

Pavlopoulos, G. A., Secrier, M., Moschopoulos, C. N., Soldatos, T. G., Kossida, S., Aerts, J., Schneider, R., & Bagos, P. G. (2011). Using graph theory to analyze biological networks. BioData Mining, 4(1), 10. https://doi.org/10.1186/1756-0381-4-10

R Core Team (2015). An Introduction to R (ver 3.2.2). Ανακτήθηκε 20 Δεκεμβρίου, 2020, από <http://cran.r-project.org/doc/manuals/r-release/R-intro.html>

Sanie, S., & Chambers, G. A. (2007). EEG Signal Processing. Στο S. Sanie & G. A. Chambers (2007). EEG Signal Processing (σελ. 1–34). Chichester: John Wiley & Sons Ltd. <https://doi.org/10.1002/9780470511923.ch1>

Wang, M., Ramirez, J., Han, J., Jia, Y., Domenico, J., Seibold, M. A., Hagman, J. R., & Gelfand, E. W. (2013). The steroidogenic enzyme Cyp11a1 is essential for development of peanut-induced intestinal anaphylaxis. Journal of Allergy and Clinical Immunology, 132(5), 1174–1183. <https://doi.org/10.1016/j.jaci.2013.05.027>

Zhou, R., Lin, J., & Wu, D. (2014). Sulforaphane induces Nrf2 and protects against CYP2E1-dependent binge alcohol-induced liver steatosis. Biochimica et Biophysica Acta (BBA)-General Subjects, 1840(1), 209–218. <https://doi.org/10.1016/j.bbagen.2013.09.018>