COMENIUS UNIVERSITY IN BRATISLAVA FACULTY OF MATHEMATICS, PHYSICS AND INFORMATICS



GRAPHLET STRUCTURE ANALYSIS OF THE REAL NETWORKS

Master's thesis

2020 Bc. Michal Puškel

COMENIUS UNIVERSITY IN BRATISLAVA FACULTY OF MATHEMATICS, PHYSICS AND INFORMATICS



GRAPHLET STRUCTURE ANALYSIS OF THE REAL NETWORKS

Master's thesis

Study programme: Applied Informatics

Field of study: 2511 Applied Informatics

Training center: Department of applied informatics

Supervisor: doc. RNDr. Mária Markošová, PhD.

Bratislava, 2020

Bc. Michal Puškel





Univerzita Komenského v Bratislave Fakulta matematiky, fyziky a informatiky

ZADANIE ZÁVEREČNEJ PRÁCE

Meno a priezvisko študenta: Bc. Michal Puškel

Študijný program: aplikovaná informatika (Jednoodborové štúdium,

magisterský II. st., denná forma)

Študijný odbor: aplikovaná informatika

Typ záverečnej práce: diplomová Jazyk záverečnej práce: anglický Sekundárny jazyk: slovenský

Názov: Graphlet structure analysis of the real networks

Analýza grafletovej štruktúry reálnych sietí

Anotácia: Študent vytvorí nový softvér alebo vylepší existujúci softvér na analýzu

grafletovej štruktúry komplexných sietí. S pomocou tohto softvéru zanalyzuje grafletovú štruktúru sietí, reálnych dát a vypočíta všetky miery s touto štruktúrou súvisiace. Zanalyzuje tiež grafletovú štruktúru umelo vytvorených

sietí a porovná s dátami.

Ciel: Analyzovať grafletovú štruktúru reálnych sietí pomocou vylepšeného alebo

vlastného softvéru.

Vedúci: doc. RNDr. Mária Markošová, PhD.

Konzultant: Mgr. Peter Náther, PhD. **Konzultant:** Mgr. Andrej Jursa

Katedra: FMFI.KAI - Katedra aplikovanej informatiky

Vedúci katedry: prof. Ing. Igor Farkaš, Dr.

Spôsob sprístupnenia elektronickej verzie práce:

prípustná pre vlastnú VŠ

Dátum zadania: 25.09.2017

Dátum schválenia: 09.10.2017 prof. RNDr. Roman Ďurikovič, PhD.

garant študijného programu

študent	vedúci práce

I hereby affirm that this Master's thesis represents my own written work and that I have used no sources and aids other than those indicated. All passages quoted from publications or paraphrased from these sources are properly cited and attributed.

.....

Bratislava, 2020

Bc. Michal Puškel

Acknowledgement

TODO podakovat strasne vela ludom

Abstract

TODO en abstrakt

 $\begin{tabular}{ll} Keywords: graphs, networks, degree distribution, graphlet degree distribution, or ca \end{tabular}$

Abstrakt

TODO sk abstrakt

Kľúčové slová: grafy, siete, distribúcia stupňa vrcholov, distribúcia orbít grafletov, orca

Contents

1	Inti	roduction	1
	1.1	Graph comparison using graphlet degree distribution	1
2	Goa	als of the thesis	3
3	Gra	aph theory	4
4	Solı	ution	5
	4.1	The brute force, but as good as even possible	5
	4.2	Orca	5
		4.2.1 Custom orca implementation	6
	4.3	Workflow	6
5	Res	ults	7
6	Cor	nclusion	8

Introduction

This thesis is a direct sequel to our former thesis [Pu7]. Let's briefly refresh the problem we solve in next section 1.1.

1.1 Graph comparison using graphlet degree distribution

In this thesis we strive for finishing our ultimate goal to find out, whether attribute of brain functional network "to suffer by Alzheimer's disease" is projected to its graph structure.

We obtained input dataset of examined brain functional networks from work of McCarthy and col. [MBF14]. Dataset consists of space standardized brain functional networks from 40 research participants. Participants were divided into 3 groups: young people, elder people with diagnosed tendency for Alzheimer's disease and elder people without this diagnosis.

Should we be able to distinguish between two subsets of input dataset according to diagnosed disease by usage a computer program comparing graph structure, we may assume that Alzheimer's disease is really projected to brain functional networks structure.

blab bla tymtoo stylom takmer 1:1 cely uvod prelozit podla starej prace - motivacia - jasne lahke priklady pre pochopenie na konci citovat [Pr7]

da sa to robit bruteforcom ako v minulej praci alebo: spomenut aj [HD14] ze existuje aj kombinatoricky princip

Goals of the thesis

TODO popisat ciel

- zmerat mozgy
- overit GDD metodu == zmerat umele siete ER GEO AB ????

Graph theory

TODO teoria grafov - iba to co potrebujem bude vychadzat z predoslej prace

- lepsie vysvetlit orbity / automorfizmy

+vysvetlit aj BA ER GEO - resp
 tie umele ake zmeram / co su bezskalove... nieco z komplexnyxh sieti - iba to co sa tyka mojej prace

Solution

bla bla kombinatorcke riesenie na kt som si najskor netrufol (orca) vs. chcel som svoje nieco spravit (brute force GDD konzolova aplikacia)

4.1 The brute force, but as good as even possible

TODO "STRUCNE!!!" iba popisat co som urobil zmeral v predoslej praci

- bol to distrib system
- vyhody nevyhody

4.2 Orca

TODO vysvetlit co je Orca -aj s obrazkami podrobnejsie 4node graflety

4.2.1 Custom orca implementation

TODO trochu popisat co som sparalalelizoval v orce - ci sa zrychlila...

4.3 Workflow

TODO popisat / zhrnut co sa spravilo experimenty

- distrib system meranie (este bak)
- preteceny integer (este bak)
- dalsie meranie cez letne prazdniny
- modul na GDD agreement
- implementacia s arbitrarnou presnostou (zavisi iba od RAM) vlastna odmocnina
- podozrive vysledky
- odhalena chyba v orbite [55] porovnane vsetky vysledky meranych grafov moje vs orca
- modul na spracovanie vysledkov z orcy mojim gdd agreementom konecny experiment
- overenie GDD agreementu s nejaky umelymi

Results

TODO -distribuovany system s kopec funkciami na meranie gdd bruteforce nie najlepsi, ale z hladiska memory resp ak mame viac slabsich PC a malo casu tak lepsie riesenie ako orca

- -vlastna implementacia orcy (dufam ze bude rychlejsia)
- -vykonany experiment s mozgami vysedky nedaju sa rozlisit
- -experiment s umelymi sietami GDD ich rozlisuje (dufam)

Conclusion

alzheimer sa pravdepodobne neprejavuje v strukru
e grafu sieti mozgu resp GDD agreement ich nerozlisi

future work 6 vrcholove graflety?

Bibliography

- [HD14] Tomaž Hočevar and Janez Demšar. A combinatorial approach to graphlet counting. *Bioinformatics*, 30(4):559–565, 12 2014.
- [MBF14] Paul McCarthy, Lubica Benusková, and Elizabeth A. Franz. The age-related posterior-anterior shift as revealed by voxelwise analysis of functional brain networks. In Front. Aging Neurosci., 2014.
 - [Pr7] Nataša Pržulj. Biological network comparison using graphlet degree distribution. *Bioinformatics*, 23(2):e177–e183, 01 2007.
 - [Pu7] Michal Puškel. Pravdepodobnostné porovnávanie funkčných sietí mozgu (Bakalárska práca). Univerzita Komenského v Bratislave, 2017.

List of Figures

Appendix

TODO popisat prilohy - sukromny repozitar gitlab