<분자 네트워크>

- 생물학적 분자 네트워크는 단백질-단백질 관계, 유전적 co-expression(서로 상관관계가 있으면 edge로 연결되어 있음), 기능적 유사성, 규제적 관계(서로의 활동에 대한 영향을 미치는 정도?), 생화학적 반응 등과 같은 분자들 사이의 관계를 묘사한다.

<표현형 유사성 네트워크와 온톨로지>

- 질병 표현형은 암 연구에 있어서 주요한 관심사이다. 다른 관련있는 질병의 내용물 안의 질병을 분석하는 것은 그 병의 유전적 유발자를 통찰하게 해준다. 표현형 유사성 네트워크는 mRNA expression이나 질병들의 개요, 유전적 유사성에 기반해 만들어질 수 있다. 유전적 표현형 연관성에 대하여 공부하기 위해 acyclic 방향 그래프인 온톨로지를 이용할 수 있다.

<약물-타겟, 약물-약물 네트워크>

-약물-타겟 연관성(association)은 그 약물들과 타겟에 대한 관계를 표현한 이분 그래프로 모델릴 될 수 있다.

-해당 약물-타겟 쌍들은 주로 FDA-approved나, 실험 약물과 다양한 약물 데이데이터베이스로부터 이용 가능한 그 실험 약물들의 인간 단백질 타겟에 의해 주로 유도된다.

-다양한 종류의 약물-약물 유사성 네트워크는 약물 재사용을 위해 유도되어 왔다.

- 약물-약물 관계는 분자 구조의 유사성, 화학적 부분구조, 약물 지표 관계 같은 표현형, 약물 결합의 co-membership 또는 질병의 co-morbidiry(사망률?) 등에 의해서 추론될 수 있다.

<<개인 유전 profile의 네트워크 기반 분석>>

- 개인 유전 profile에 네트워크 기반 분석을 적용하는 목표는 암 표현형의 예측성과 암 메커니즘의 정보성을 담은 틀에서 벗어난(aberrant) 네트워크 모듈을 식별하는 것이다. 이 방법들은 다양한 시나리오의 파이프라인 분석 디자인에 기반한 3개의 카테고리로 나뉘어 질 수 있다.

1. 모델-based 통합 (integration)

2. 전처리 통합

3. 사후 분석 통합

- 이 다양한 시나리오들에서 위에 설명한 특정 네트워크 모듈을 탐지하는 것은 다음 2가지를 가능하게 해준다.

=> 1. 암 표현형을 예측하게 해준다.

=> 2. 유발 유전자를 탐지하게 해준다.

- 각 파이프라인에서 네트워크 정보가 어떻게 처리되느냐에 따라 예측 모델과 네트워크 분석 방법에 적용되는 인풋과 아웃풋은 달라질 수 있다.

전체 유전 profile의 모델 기반 통합과 네트워크 기반 통합은 유전 profile을 네트워크와 통합시키기 위해 하나의 합쳐진 머신러닝 프레임워크를 형성한다. 중요 기술은 특징 변수들로부터 학습된 계수들이 밀도 높은 서브네트워크를 만들기 위해 네트워크 기반 조직화를 머신 러닝 모델 속에 넣는 것이다.(도입하는 것이다.) 가장 자주 사용되는 네트워크 기반 조직화는 그래프 라플라시안 regularizer이다. 그래프 라플라시안은 처음에 스펙트럼 그래프 분석을 위해 소개되었고, 그 후 머신러닝의 반 지도 학습에 사용되고 있다.

- 그래프 라플라시안 규제화(조직화)(regularization)은 해당 유전자와 유사한 계수들이나 그 네트워크에 연결된 다른 유전적 특성들을 고무하기(encourage)위한 해당 변수들의 평활도 항(smoothness term)의 합이다.