Nemlineáris Dinamikai Modellek a Biológiában

járványterjedés véletlen hálózatokon

8. gyakorlat

Juhász János (juhasz.janos@.itk.ppke.hu)
Schäffer Katalin (sch.katalin17@gmail.com)

Hálózatok

- Elemek (csúcsok) közti kapcsolatok (élek) -> hálózat, gráf
  - Pl: sejtautomata (szabályos rács hálózat), városokat összekötő úthálózat, social network, internet, tápláléklánc (irányított gráf), fa struktúrák (spec gráf), fehérje interakciós hálózatok,…
- A hálózatok különböző mérőszámokkal írhatók le, vizsgálhatók
  - Pl: csúcsok ,élek száma, csúcs fokszáma, átlagos fokszám, kapcsoltsági paraméterek,…
- Ha a mérőszámokat ismerjük, akkor generálható ezeknek megfelelő **véletlen hálózat, gráf**
  - Az azonos paraméterű véletlen hálózatok viselkedése hasonló (annak ellenére ,hogy a konkrét csúcs, él párok nem egyeznek)
  - Véletlen gráfok pl: **Erdős-Rényi gráfok, Barabási-Albert gráfok, Strogatz-Watts gráfok**
- A **hálózatokon terjedő folyamatokat** is leírhatunk (pl: információ/anyag áramlás, **járványterjedés**,…)

Hálózatokról és alkalmazásukról: http://networksciencebook.com/

Erdős-Rényi gráfok

- Generálása: minden él adott valószínűséggel egymástól függetlenül van behúzva
  - n csúcs,
  - k csúcs fokszáma, P(k) a fokszámok eloszlása
  - p minden lehetséges él behúzásának valószínűsége

$$P(\deg(v) = k) = \binom{n}{k} p^k (1-p)^{n-k}$$

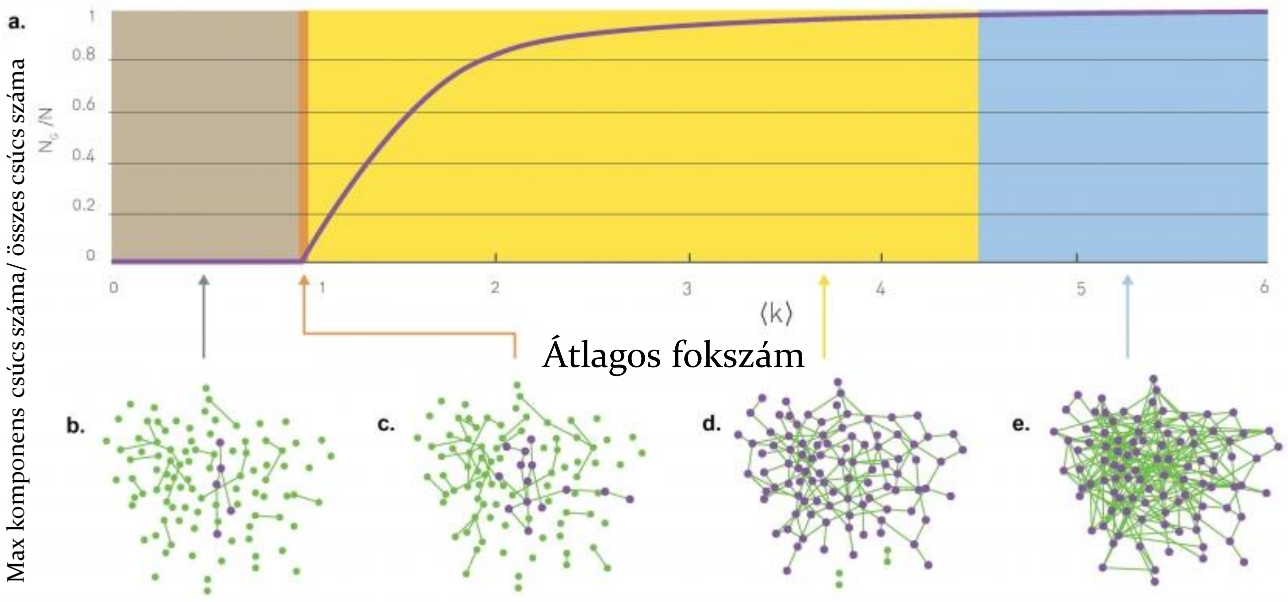
$$np = \lambda$$

$$P(\deg(v) = k) \approx e^{-\lambda} \frac{\lambda^k}{k!}$$

$$\lim_{n \to \infty} np$$

Erdős-Rényi gráfok

- $\lim_{n \to \infty} \frac{np}{\ln(n)} > 1$ –> létezik óriás komponens (összefüggő részgráf), összefüggő a gráf
- $\lim_{n \to \infty} \frac{np}{\ln(n)} < 1$ –> kisebb méretű (const*ln(n)) komponensek vannak, nem összefüggő a gráf



Barabási-Albert gráfok

- Csúcsok száma 1…n_o
- Gn_o kiindulási gráf
- Gn_{o+i+1} új csúcs
- Minden lépésben egy csúcsot és m élet ($m<n_o$) veszünk hozzá

$$P\Big(\big(n_0+i+1,j\big)\in E\big(G_{n_0+i+1}\big)\Big)\approx\frac{\deg(j)}{\sum_{1\le k\le n_0+i}\deg(k)}$$

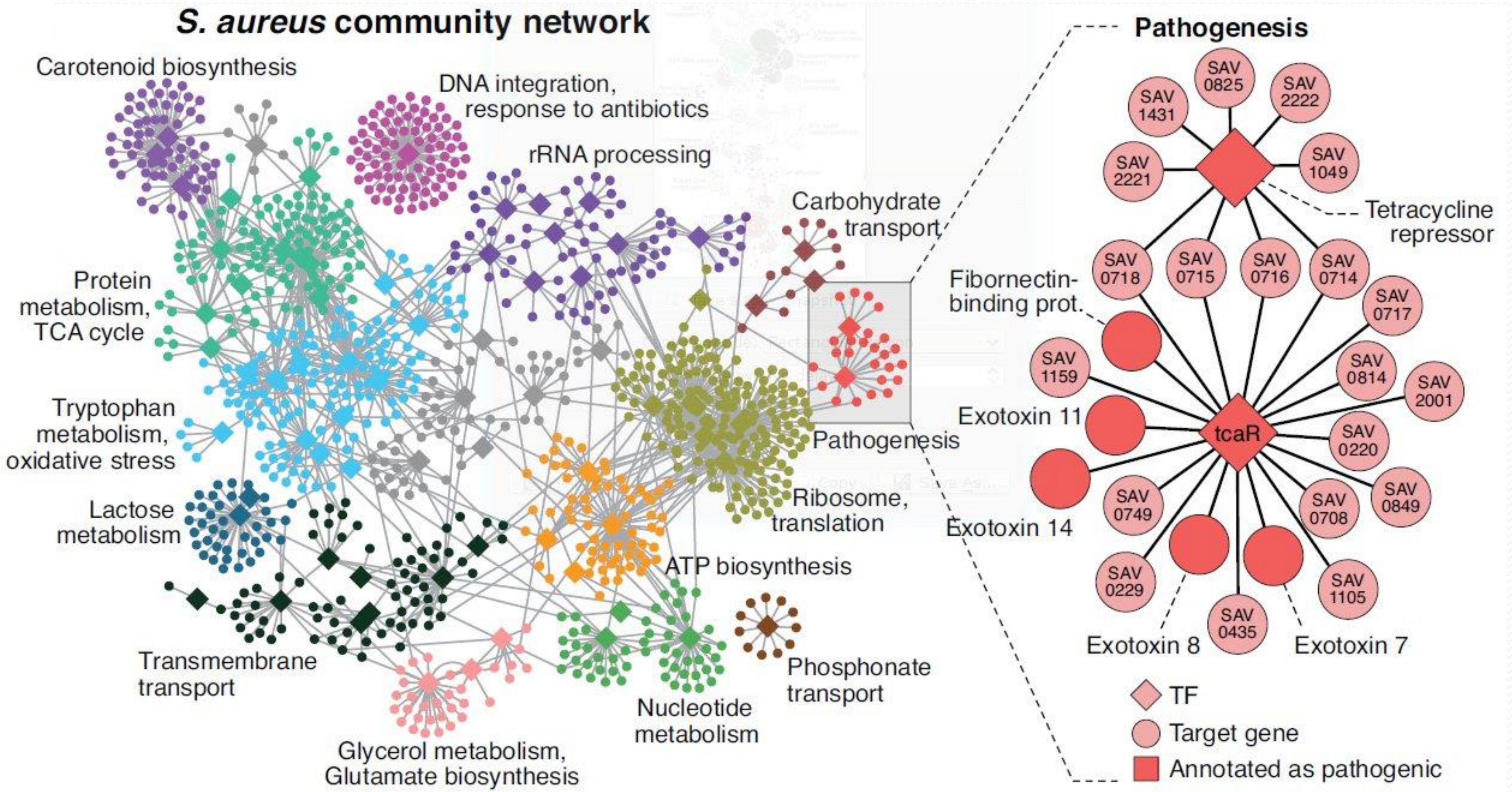
$$i\to\infty$$

$$P(\deg(v)=k)\approx\frac{\text{const}(\mathcal{G}_{n_0},m)}{k^3}\ ,\qquad k\gg n_0$$

- Nem egyenletesen húzza be az éleket, hanem preferencia alapon, nagyobb fokszámú csúcshoz nagyobb valószínűséggel
- Néhány nagy fokszámú csúcs lesz – **hub** (csomópont)
  - Pl: Budapest a magyar úthálózatban, egy népszerű ember a Facebookon, egy általános transzkripciós faktor a sejtben

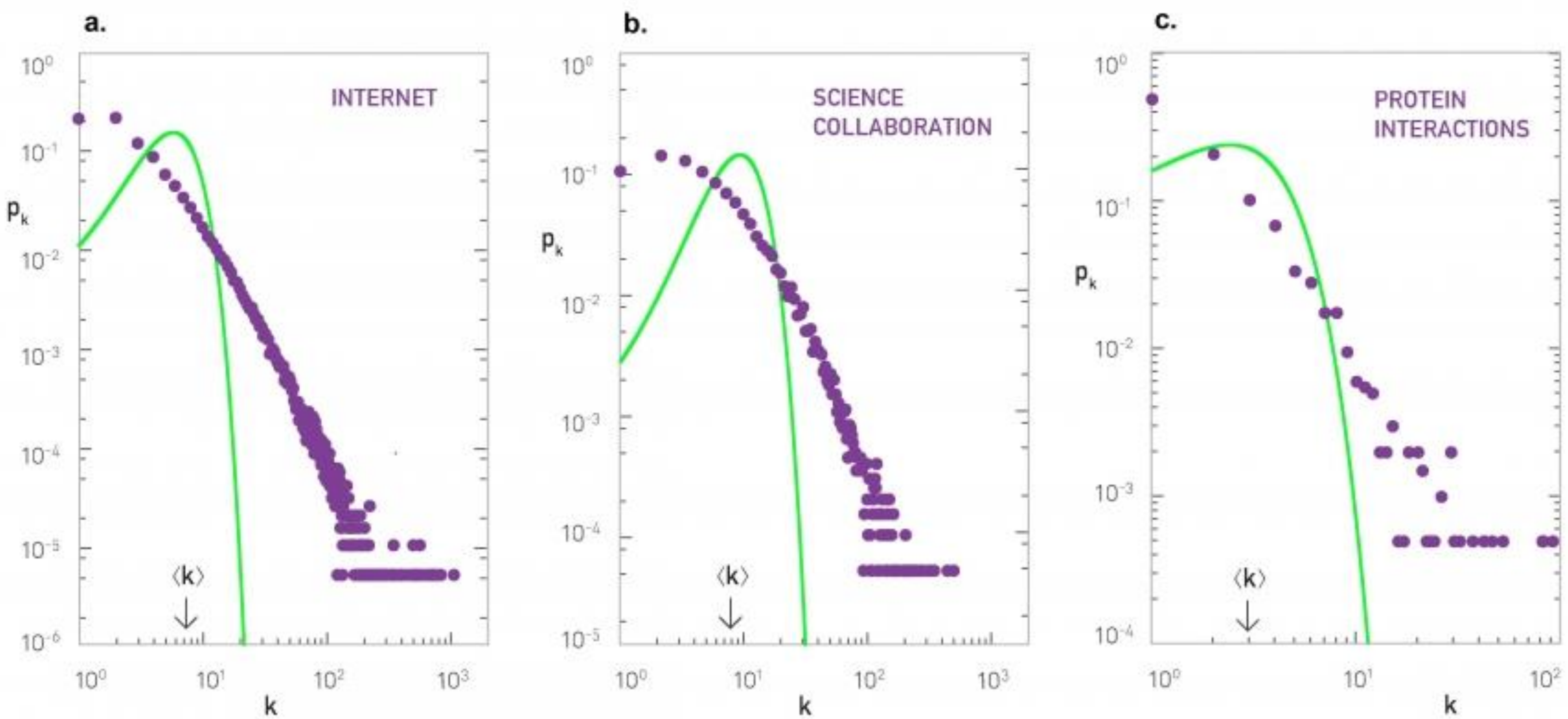
Barabási-Albert gráfok

- Sok valós hálózat ilyen, pl.: közlekedési, ismertségi, gén regulációs, sejt anyagcsere hálózatok, fehérje interakciók, stb…



Barabási-Albert gráfok

- A valóság nem véletlen:
  - Különböző gráfok fokszám eloszlása hasonló (sokszor Barabási-Albert gráfokéra jellemző)



Strogatz-Watts „small-world" gráfok

- Reguláris körgráf (d=2,4,6,...)
  - d=szomszédság: a körgráfban hány szomszéd van összekötve
- Végigmenve a csúcsokon minden él végpontját β valószínűséggel módosítjuk egyenletes eloszlás szerint
- 0< $\beta \ll 1$ → majdnem körgráf, néhány extra éllel
- $E(G) = \frac{nd}{2}$ small world gráf lesz
- β = 0 eredeti szabályos gráf
- β = 1 Erdős-Rényi gráf
- Élek száma: $p = \frac{nd}{2} / \binom{n}{2}$
- Interpolál véletlen és szabályos gráf között

Feladatok:

- Generáljatok különböző véletlen gráfokat! Figyeljétek meg a paraméterek megváltoztatásával hogyan változik a gráf!
  - Erdős-Rényi gráfok: **ERmodel.m**
  - Barabási-Albert gráfok: **BAmodel.m**
  - Strogatz-Watts gráfok: **RegularNetwork.m** (ez hívja a **WSmodel.m**-et)
  - Kirajzolás: **plotGraphBasic.m**
  - Használatukhoz, a paraméterek jelentéséhez lásd a fv-ek help-jét!
- Számítsátok ki és jelenítsétek meg a gráfok fokszám eloszlásait a **plotKPk[G].m** függvény megírásával!
- Milyen eloszlást mutatnak a fokszámok?
  - <u>Megjegyzések</u>:
  - A gráf leírása egy n*n-es (szimmetrikus) szomszédsági mátrixszal történik, ami $n_{i,j}$ pozíciójában akkor van egyes, ha az i és a j csúcsokat él köti össze (egyébként o-k az elemek)
  - A gráf maga kevés csúcs (kis gráf) esetén látszik jól, a fokszám eloszlás viszont nagy gráfoknál mutat jellegzetes eloszlást.

Gráf kapcsoltságának vizsgálata

- Csomózódási (klaszerezési) együttható (c_coeff):
  - Részgráfok c_coeff –jeinek átlagából számítható
  - **c_coeff=szomszédos csúcsok élszáma/teljes részgráf élszáma**

Feladat:

- Nézzük meg, hogyan alakul a c_coeff és a gráf 2 pontja közti átlagos legrövidebb út akkor, ha egy szabályos körgráfot WS gráffá, majd random (ER) gráffá alakítunk (**plot_WS_path_length_clastcoeff.m**)!
  - Egészítsétek ki a **ClusterCoefficient.m** függvényt, úgy, hogy a for ciklusban kiszámolja, minden egyes csúcs klaszerezési koefficensét!
  - Átlagos legrövidebb utat 2 pont közt a gráfban a beépített Graphallshortestpaths függvény számolja (Johnson algoritmus)

Járvány terjedése véletlen gráfon

- Véletlen gráfot generálunk
- Csúcsok: személyek, élek: kapcsolatban vannak-e
- Rajta pár beteg csúcsot adunk meg kezdetnek
- Az élek mentén terjed a járvány (mint a sejtautomatában a cellák közt, csak most nem szabályos a ráccsal dolgozunk)
- Az előző implementációkhoz hasonló a járvány lefutása a gráfon is
- A diffegyenetes megoldásnak az az eset felelne meg, ahol mindenki , mindenkivel össze van kötve (teljes gráf)

Járvány terjedése véletlen gráfon

Feladat:

- Egészítsétek ki a **sis_graf.m** kódot a járvány gráfon terjedésével!
- Vizsgáljuk meg különböző szerkezetű és méretű gráfok esetén a különböző paraméterű járványok terjedését!
- A gráf kapcsoltsága (és az átlagos úthossz a csúcsok közt) hogyan hat a járvány terjedésére?
- <u>Megjegyzés</u>: az alapértelmezetten beállított paraméterek a SIS modellt írják most le (ahol nincs immunitás).