

Algorithmische Bioinformatik: Netzwerke, Graphen und Systeme (IN5021)

Title	Algorithmic Bioinformatics: Networks, Graphs and Systems	
Typ	Vorlesung mit Übungen	
Credits	9	
Lehrform/SWS	4V + 2Ü	
Sprache	Deutsch/Englisch	
Modulniveau	Master	
Arbeitsaufwand	Präsenzstunden	90 Stunden
	Eigenstudium	180 Stunden
	Gesamtaufwand	270 Stunden
Angestrebte Lernergebnisse	Nach der Teilnahme am Modul sind die Studierenden in der Lage, kombinatorische Methoden und Algorithmen auf Graphen (wie Wege, Pfade und Zyklen/Co-Zyklen in Graphen, Spannbäume, Schnitte und Flüsse, Zusammenhangskomponenten, Motife, isomorphe Subgraphen) zu analysieren und anzuwenden, Eigenschaften komplexer biologischer Netzwerke (wie z.B. Gradverteilungen, skalenfreie Netze, small-world Netze, komplexe Netzwerke, random graph Modelle, Konstruktion von evolvierenden Netzwerken) zu verstehen und zu beschreiben sowie einfache Petri-Netz Modelle zu entwickeln sowie ihre Eigenschaften (deadlock Freiheit, Invarianten, Erreichbarkeit, Lebendigkeit) zu analysieren.	
Intended Learning Outcomes	At the end of the module, students are able to analyze and apply combinatorial methods and algorithms on graphs (e.g., paths, cycles, co-cycles in graphs, spanning trees, cuts, flows, connected components, motifs, isomorphic subgraphs), to understand and describe properties of complex biological networks (e.g., degree distribution, scale-free networks, small-world networks, complex networks, random graph models, construction of evolving networks) and to create simple Petri net models as well as to analyze their properties (e.g., deadlocks, invariants, reachability, liveness).	
Inhalt	Das Modul befasst sich mit spezielleren Methoden der kombinatorischen Optimierung,	

	Graphalgorithmen und komplexen Netzwerken sowie deren Anwendungen auf aktuelle Bioinformatikprobleme. Dabei werden folgende Themen behandelt: • Graphen und Graph-Eigenschaften (Planare Graphen, Zyklen und Co-Zyklen, Bäume und Spannbäume) • Algorithmen auf Graphen (Tiefen- und Breitensuche, Topologische Sortierung, Minimale Spannbäume, Kürzeste Pfade, Flüsse in Graphen) • Komplexe biologische Netzwerke (Gradverteilungen, Random Graphs und Scale-free Netzwerke, Netzwerkeigenschaften, Perkolation, Wachstumsmodelle, Small-World Netzwerke) • Petri-Netze • Bayes'sche Netze
Contents	The module is focused on special methods of combinatorial optimization, graph algorithms, and complex networks as well as their application to current algorithmic bioinformatics problems. The following topics are covered: • Graphs and graph properties (planar graphs, cycles and co-cycles, trees and spanning trees) • Graph algorithms (depth and breadth first search, topological sorting, minimum spanning trees, shortest paths, flows in networks) • Complex biological networks (degree distributions, random graphs and scale-free networks, network properties, percolation, growth models, small-world networks) • Petri nets • Bayesian networks
Prüfung	Prüfungsleistung (benotet): -Klausur: 120 min Wiederholungsklausur zu Ende des Semesters. Details werden zu Beginn des Moduls bekannt gegeben. In der Klausur weisen die Studierenden nach, dass sie die Konzepte und Algorithmen der kombinatorischen Optimierung (z.B. Greedoide und Matroide, Greedy-, Simplex- und Schnittebenen-

	Algorithmen) und der wichtigsten Graphalgorithmen sowie die Eigenschaften komplexer biologischer Netzwerke verstehen können. Zudem wird geprüft, inwieweit sie für verwandte Probleme kombinatorische Methoden und Algorithmen auf Graphen, random graphs und komplexen Netzwerken exemplarisch und in begrenzter Zeit analysieren, anwenden und übertragen können. In der Klausur werden 4-7 Aufgaben bearbeitet, die eine eigenständige Anwendung der algorithmischen Konzepte und Modelle aus der Vorlesung zur Lösung einer anspruchsvollen Problemstellung erfordern (z.B. Modellierung und Reduktion eines Bioinformatikproblems auf ein Graphproblem, Konstruktion und Anwendung geeigneter Graphalgorithmen, Greedoide und Matroide, Vergleich von Eigenschaften komplexer Netzwerkmodelle (Barabasi/Dorogovtsev) mit random graph Modellen (Erdős-Renyi)), die Skizzierung einer Beweisidee (z.B. Nachweis von Grapheigenschaften wie Planarität oder Zyklenfreiheit der entsprechenden Graphen) oder die Modellierung oder Analyse eines Modells oder Algorithmus (z.B. Fluss und Wege-Algorithmen für Graphen, Motifsuche in zufälligen und komplexen Netzwerken).
Examination	Examination requirements (graded): - written exam: 120 min. A makeup exam will be offered at the end of the semester, details will be announces at the beginning of the course. Within the written exam, students demonstrate that they understand the presented models and algorithms, e.g., concepts and algorithms of combinatorial optimization (such as matroids, greedoids, Greedy, Simplex, and cutting plane methods), and the fundamental graph algorithms as well as the properties of complex biological networks. They can reproduce and apply them and they can transfer and extend the models and algorithms to similar graph, random graph and complex network problems (exemplarily and within limited time). The written exam contains 4 to 7 assignments, which require independent application of algorithmic concepts and models presented in the lecture to solve demanding problems (e.g., modeling

	and reduction of a bioinformatics problem to a graph/network problem, construction and application of appropriate graph algorithms, of greedoids and matroids, and the comparison of features of complex networks (Barabasi, Dorogovtsev) with random graph models (Erdős-Renyi)), the sketch of a proof (e.g., of characteristics of graphs such as planarity and cycle freeness) or the modeling and analysis of simple problems (e.g., flow and path algorithms for graphs, motif search in random and complex networks).
Literatur	Cormen, Leiserson, Rivest, Stein, Introduction to Algorithms, MIT Press, 2001 (3rd. ed. 2009) Claude Berge, Graphs and hypergraphs, Amsterdam, North-Holland Publ., 1973 Korte & Vygen, Combinatorial Optimization. Theory and Algorithms (Algorithms and Combinatorics) , Springer Verlag, 2000 Dieter Jungnickel, Graphs, Networks and Algorithms, (1998) Springer, 2005 R.Albert & A.-L.Barabasi, Statistical mechanics of complex networks, Reviews of modern physics, Vol 74, Jan. 2002 Newman, M., The structure and function of complex networks, SIAM Review, 2003, 45, 167- 256 Dorogovtsev, S. & Mendes, J., Evolution of networks , Adv. Phys, 2002, 51, 1079-1187 Fox Keller, E., Revisiting “scale-free” networks, Bioessays, 2005, 27, 1060-1068 T. Murata, Petri nets: Properties, Analysis, and Applications, Proceedings of the IEEE, 1989
Literature	Cormen, Leiserson, Rivest, Stein, Introduction to Algorithms, MIT Press, 2001 (3rd. ed. 2009) Claude Berge, Graphs and hypergraphs, Amsterdam, North-Holland Publ., 1973 Korte & Vygen, Combinatorial Optimization. Theory and Algorithms (Algorithms and Combinatorics) , Springer Verlag, 2000 Dieter Jungnickel, Graphs, Networks and Algorithms, (1998) Springer, 2005 R.Albert & A.-L.Barabasi, Statistical mechanics of complex networks, Reviews of modern physics, Vol 74, Jan. 2002 Newman, M., The structure and function of complex networks, SIAM Review, 2003, 45, 167- 256 Dorogovtsev, S. & Mendes, J., Evolution of networks , Adv. Phys, 2002, 51, 1079-1187

	Fox Keller, E., Revisiting “scale-free” networks, Bioessays, 2005, 27, 1060-1068 T. Murata, Petri nets: Properties, Analysis, and Applications, Proceedings of the IEEE, 1989
Medienformen	Folienpräsentation, Tafelanschrieb
Media	slide show, blackboard
Lehr- und Lernmethode	Vorlesung, Tutorübung, Aufgaben zum Selbststudium. Das Modul besteht aus einer Vorlesung sowie Übungen in kleinen Gruppen. In den Hausaufgaben, die freiwillig abzugeben sind, wird das Verständnis der Konzepte, Modelle und Algorithmen anhand konkreter Daten und Beispiele vertieft. Die Studierenden entwerfen mithilfe der in der Vorlesung vorgestellten Konzepte und Modelle neue Algorithmen für neue Probleme und wenden die vorgestellten Modelle auf verwandte Probleme an. In den Hausaufgaben werden selbständig anspruchsvolle Übungsaufgaben bearbeitet, die ähnlich wie die Klausuraufgaben sind (siehe oben) und deshalb zur Vorbereitung darauf dienen. In den Übungen werden mögliche Lösungsansätze der Aufgaben zum Selbststudium diskutiert.
Teaching and Learning Methods	Lecture, tutorial, assignments for individual study. The module consists of a lecture and exercises in small groups. Within the assignments (the submission is optional), concepts, models, and algorithms (presented in the lecture) will be practically applied to real data and examples to deepen the understanding. The students develop, transfer, and extend algorithms and models based on the presented concepts to related problems. The assignments consist of demanding problems similar to the assignments in the written exam (for details see above) and serve as preparation for the written exam. Within the tutorials possible approaches for solutions of the assignments will be discussed.
Häufigkeit	Sommersemester
Modulverantwortlicher	Prof. Dr. Ralf Zimmer
Dozenten	Prof. Dr. Ralf Zimmer Prof. Dr. Caroline Friedel