# Datamining

Bioinformatik 5. Semester

Werner Backfrieder



# Data Mining

- Auswertung der DNA-Chips
  - Quantifizierte + normalisierte Spots
- Modellierung der Daten
  - Relation der Information aus Spots zu:
    - Biologischen Modellen
    - Genen
    - Genprodukten
    - Zellen
    - Gewebsanalysen
    - Kriminaltechnische Analysen

# Methoden

- Skalierung
- Scatter Plot
- Principle Components Analyse (PCA)
- Cluster Analyse
- Self Organizing Maps (SOF)

Backfrieder-Hagenberg

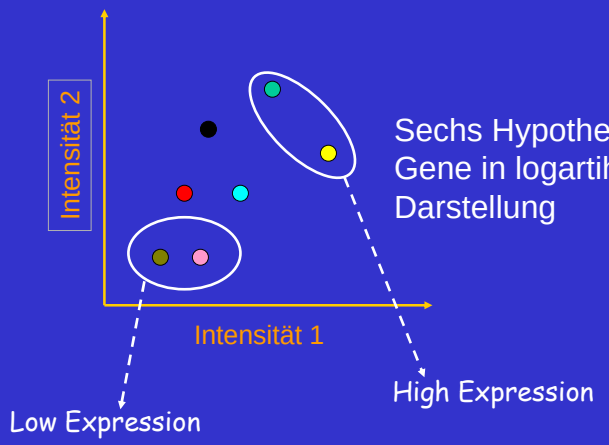
# Skalierung

- Datenwerte 16 Bit [0,65535]
- Transformation mit 10er Logarithmus
  - f(x)->y: $10^y=x$
  - [1,65535] → [0,4.8]
- Vorteile
  - Einheitliche Verteilung
  - Analyse Dynamischer Prozesse (expression)
    - Ratios [-5,+5] (Faktor 100000!!!)

Backfrieder-Hagenberg

# Scatter Plot

- Vergleich zweier Samples (Test vs. Referenz)




Sechs Hypothetische Gene in logartihmischer Darstellung

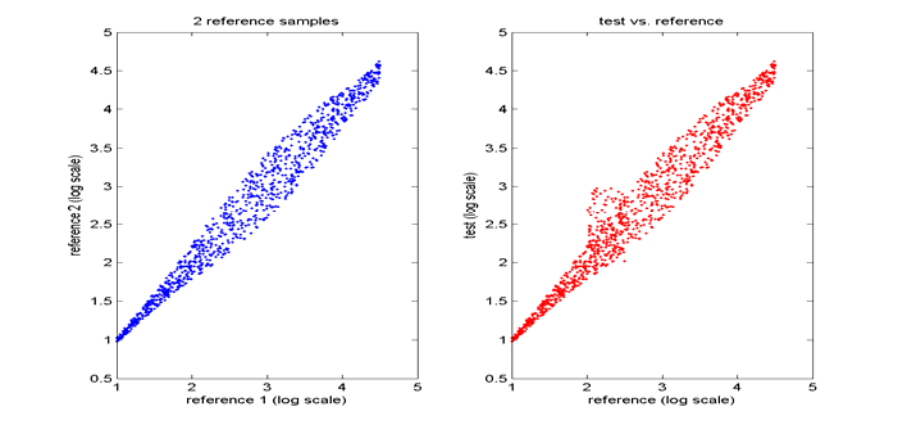
Backfrieder-Hagenberg

# Scatter Plot

- Intuitive Darstellung zum Vergleich zweier Datensätze
- Identische Expressionen entlang der ersten Mediane
- Dynamische Expression (starke Veränderung) => starke Abweichnung von erster Mediane
- Definierte Bedingungen: Vergleich zweier Chips mit gleicher Gen-Expressionen

Backfrieder-Hagenberg

# Beispiele



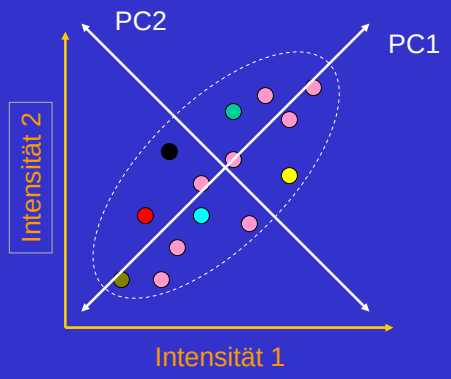

Backfrieder-Hagenberg

# Principal Components Analyse (PCA)

- Vergleich mehrerer Chip-Datensätze
  - Scatter-Plot ungeeignet, z.B. in realem Experiment Vergleich mehrerer hundert Samples = Anzahl der Dimensionen
- Darstellung unmöglich
- => PCA Reduktion der Dimensionen
- PCA erhält Relationen aus höheren Dimensionen
- Multivariate Methode
- Häufigst verwendete Methode zur Analyse von DNA-Chips

Backfrieder-Hagenberg

# PCA: Prinzipien




- Koordinaten-Trafo
- Ursprung im Mittelwert
- PC1 in Richtung größter Varianz
- Höhere Dimensionen normal auf alle anderen
- Unkorrelierte Variablen

Backfrieder-Hagenberg

# PCA: Berechnung

- $X_{ij}$=Chip i, Spot j
  - I=No. Chips, J=No. Spots
- Covarianz-Matrix C [IxI]
- Diagonalisierung C=U'VU
  - U,V = Eigenvektoren, -werte
- Dimensionsreduktion
  - Auswahl der N höchsten Eigenwerte
  - Eigenvektoren Hauptachsen
  - Z-Scores: $z_i=U'_i*(X-X_m)$

Backfrieder-Hagenberg

# Identitäten

## 1-dim

$$p(x) = (2\pi\sigma)^{-1/2} \exp(-0.5\frac{(x-\mu)^2}{\sigma^2})$$

$$\sigma^2 = \frac{\sum_i (x_i - \mu)^2}{n(n-1)}$$

$$z = \frac{(x-\mu)}{\sigma}$$

## Multivariat

$$p(\vec{x}) = |2\pi\boldsymbol{\sigma}|^{-N/2} \exp\left[(\vec{x}-\vec{\mu})'\boldsymbol{\sigma}^{-1}(\vec{x}-\vec{\mu})\right]$$

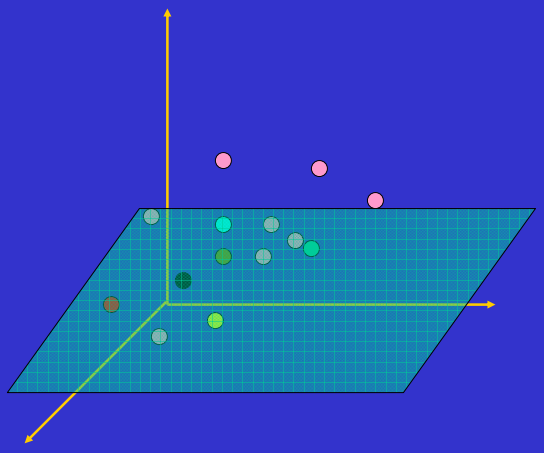
$$\boldsymbol{\sigma}_{ij} = \frac{\sum_k (x_{ik}-\mu_k)(x_{jk}-\mu_k)}{n(n-1)}$$

$$\boldsymbol{\sigma} = U'VU$$

$$z_i = U'_i(\vec{x}-\vec{\mu})$$

Backfrieder-Hagenberg

# Graphische Interpretation



PCs spannen Ebene mit minimalem Abstand zu Punkten auf.

Regression

Dimensionsreduktion

Backfrieder-Hagenberg