eda_2

October 11, 2022

1 Explorative Datenanalyse Part 2

[6]:
```
from rnaloops.data_explorer.import_helper import *
df = get_prepared_df()
```

1.1 Übersicht der Daten

Laut website sind für die Loop Types folgende Anzahl an Strukturen vorhanden - 3-way junction 33657 - 4-way junction 22518 - 5-way junction 12381 - 6-way junction 3679 - 7-way junction 4460 - 8-way junction 3131 - 9-way junction 1758 - 10-way junction 269 - 11-way junction 1836 - 12-way junction 147 - 13-way junction 52 - 14-way junction 373

Wir können das überprüfen:

[2]:
```
our = df.groupby(['loop_type'])['loop_type'].count()
web = [33657, 22518, 12381, 3679, 4460, 3131, 1758, 269, 1836, 147, 52, 373]
print('Percentage of structures of different loop types that we can access:')
{key: x/y*100 for key, x, y in zip(our.index, our.values, web)}
```

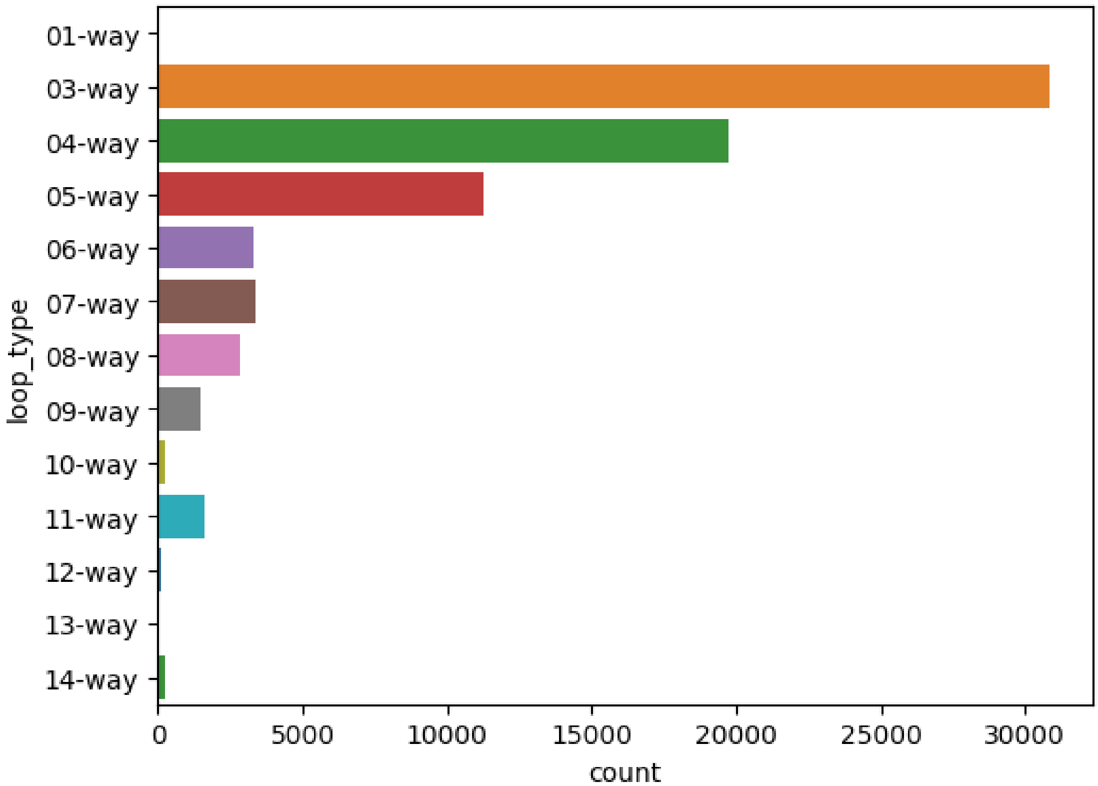
```
Percentage of structures of different loop types that we can access:
```

[2]:
```
{'03-way': 91.54410672371274,
 '04-way': 87.80975219824141,
 '05-way': 91.24464905904208,
 '06-way': 90.75835824952433,
 '07-way': 76.2780269058296,
 '08-way': 90.80166081124241,
 '09-way': 85.60864618885097,
 '10-way': 78.06691449814126,
 '11-way': 88.61655773420479,
 '12-way': 91.15646258503402,
 '13-way': 75.0,
 '14-way': 64.6112600536193}
```

Die meisten Strukturen (>90%) haben 8 oder weniger Stems.
In diesem Bereich haben wir i.d.R. auch 90% der laut Autoren zur Verfügung stehenden Strukturen in unseren Daten.
Nur bei 7-way junctions ist der Anteil deutlich kleiner (~76%), das sollten wir im vielleicht im Kopf behalten…

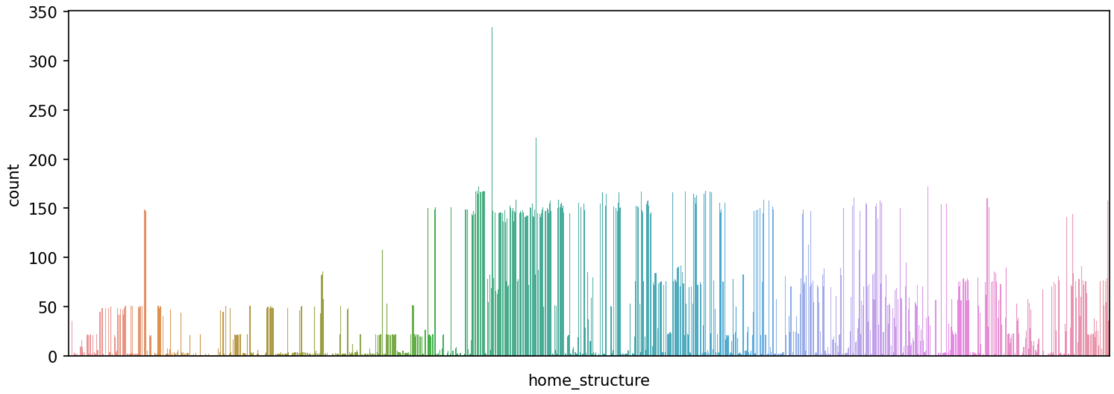
Für die Analyse sind way-3 bis way-8 Strukturen also vermutlich am sinnvollsten, hier haben wir ausreichend Daten:

[7]:
```
_ = sns.countplot(data=df, y='loop_type', orient='v', palette="tab10")
```



Wir können auch die Verteilung auf die home_structure anschauen, aber hier gibt es zu viele um wirklich was zu erkennen:

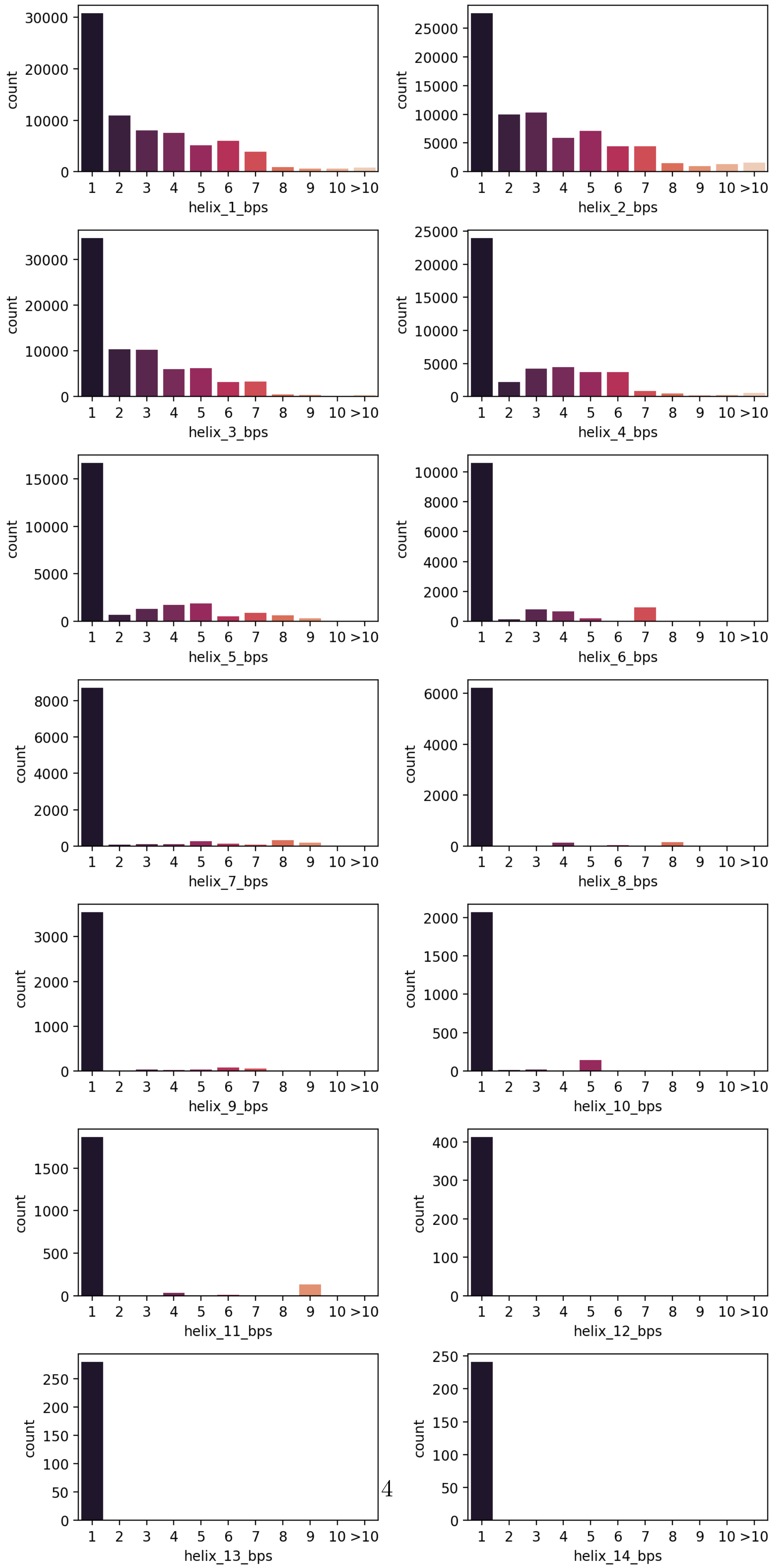
[13]:
```
fig, ax = plt.subplots(figsize=(12, 4), dpi=150)
sns.countplot(data=df, x='home_structure', orient='h', ax=ax)
ax.set_xticklabels('')
_ = plt.tick_params(bottom = False)
```



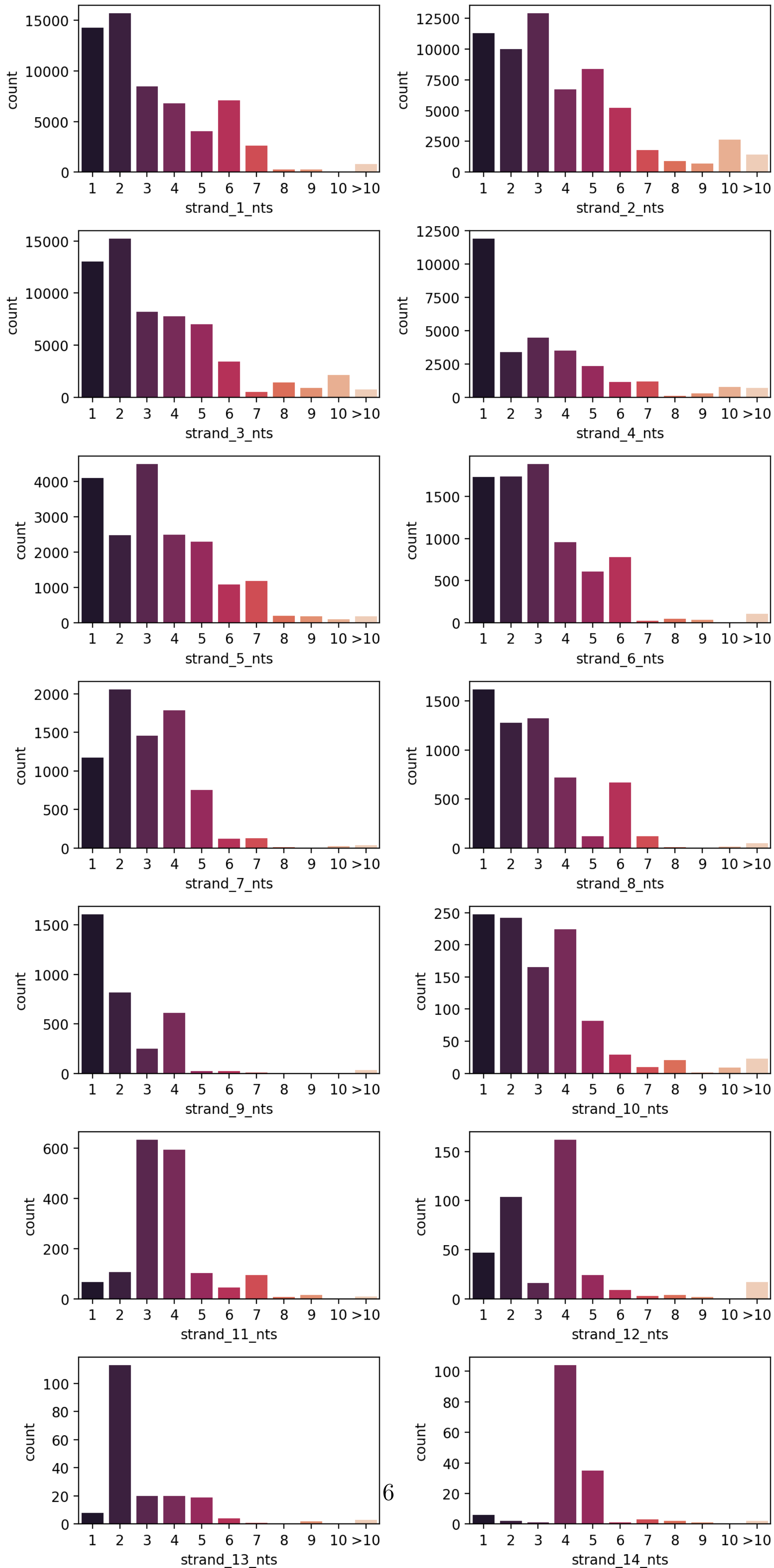
1.2 Verteilung einzelner Feature

Jetzt könnte z.B. die Verteilung der Längen von (1) connection Helix und (2) verbindende Strands, sowie die Verteilungen der Euler und Planaren Winkel (3) dargestellt werden:

[10]:
```python
# (1) Verteilung der Helixlängen nach laufender Helixnummer:

fig, ax = plt.subplots(7, 2, figsize=(8, 16), dpi=200)

for idx, a in enumerate(ax.ravel()[:14]):

    key = f'helix_{idx+1}_bps'
    data = df[df[key]>0]
    data.loc[data[key]>10, key] = '>10'

    sns.countplot(data=data, x=key, ax=a, palette='rocket',
                  order=list(range(1, 11)) + ['>10'])

plt.tight_layout()
```


count
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 >10
helix_1_bps
helix_2_bps
helix_3_bps
helix_4_bps
helix_5_bps
helix_6_bps
helix_7_bps
helix_8_bps
helix_9_bps
helix_10_bps
helix_11_bps
helix_12_bps
helix_13_bps
helix_14_bps

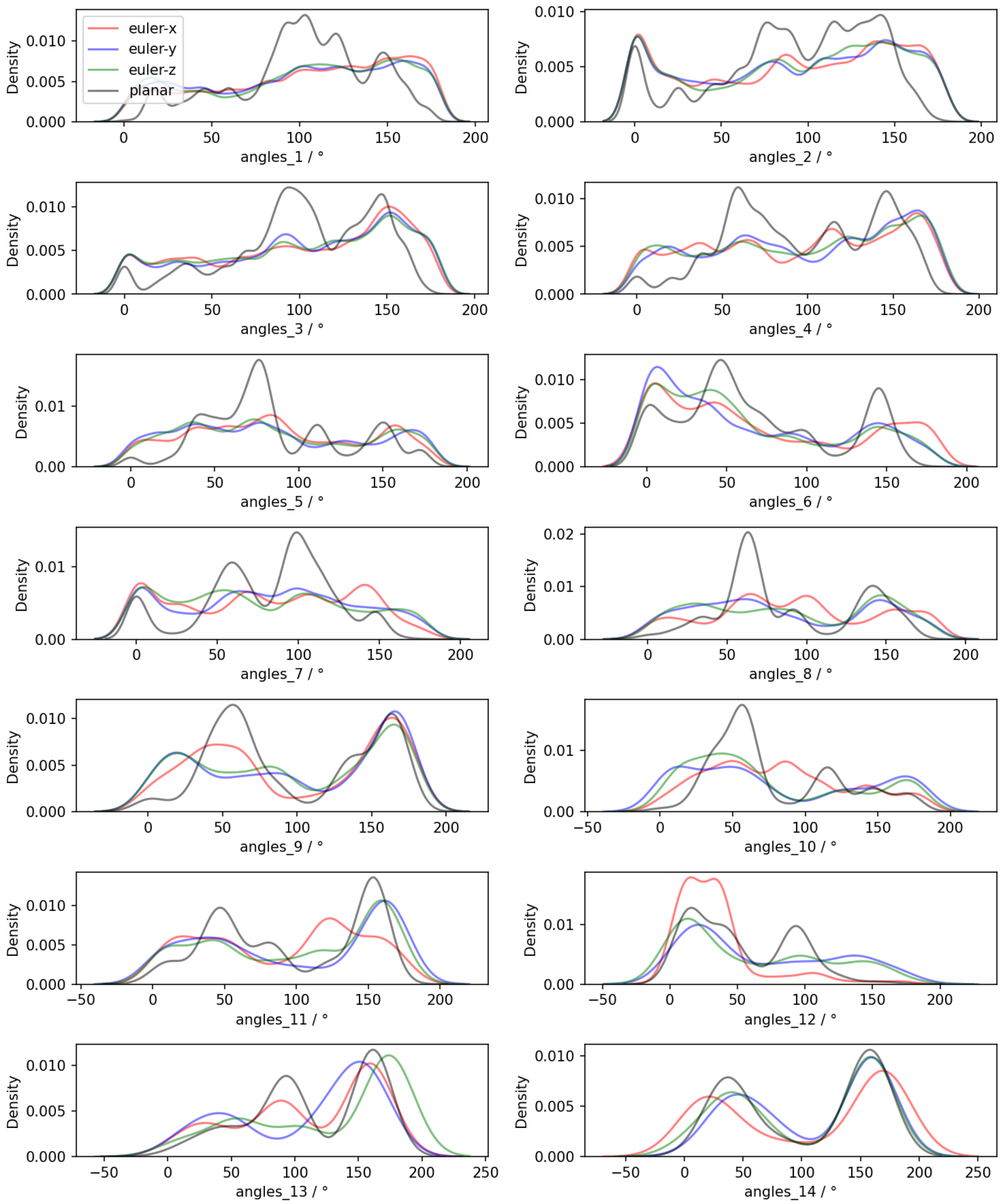
[11]:
```
# (2) Verteilung der Strandlängen nach laufender Strandnummer:

fig, ax = plt.subplots(7, 2, figsize=(8, 16), dpi=200)

for idx, a in enumerate(ax.ravel()[:14]):

    key = f'strand_{idx+1}_nts'
    data = df[df[key]>0]
    data.loc[data[key]>10, key] = '>10'

    sns.countplot(data=data, x=key, ax=a, palette='rocket',
                  order=list(range(1, 11)) + ['>10'])

plt.tight_layout()
```



count
1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 >10
strand_1_nts
strand_2_nts
strand_3_nts
strand_4_nts
strand_5_nts
strand_6_nts
strand_7_nts
strand_8_nts
strand_9_nts
strand_10_nts
strand_11_nts
strand_12_nts
strand_13_nts
strand_14_nts

[22]:

```python
# (3) Verteilung der Euler- und planaren Winkel:

fig, ax = plt.subplots(7, 2, figsize=(10, 12), dpi=150)

for idx, a in enumerate(ax.ravel()[:14]):

    x = sns.kdeplot(data=df, x=f'euler_x_{idx+1}', ax=a, alpha=0.5, color='r')
    y = sns.kdeplot(data=df, x=f'euler_y_{idx+1}', ax=a, alpha=0.5, color='b')
    z = sns.kdeplot(data=df, x=f'euler_z_{idx+1}', ax=a, alpha=0.5, color='g')
    p = sns.kdeplot(data=df, x=f'planar_{idx+1}', ax=a, alpha=0.5, color='k')

    if idx == 0:
        a.legend(['euler-x', 'euler-y', 'euler-z', 'planar'])

    a.set_xlabel(f'angles_{idx+1} / °')

plt.tight_layout()
```



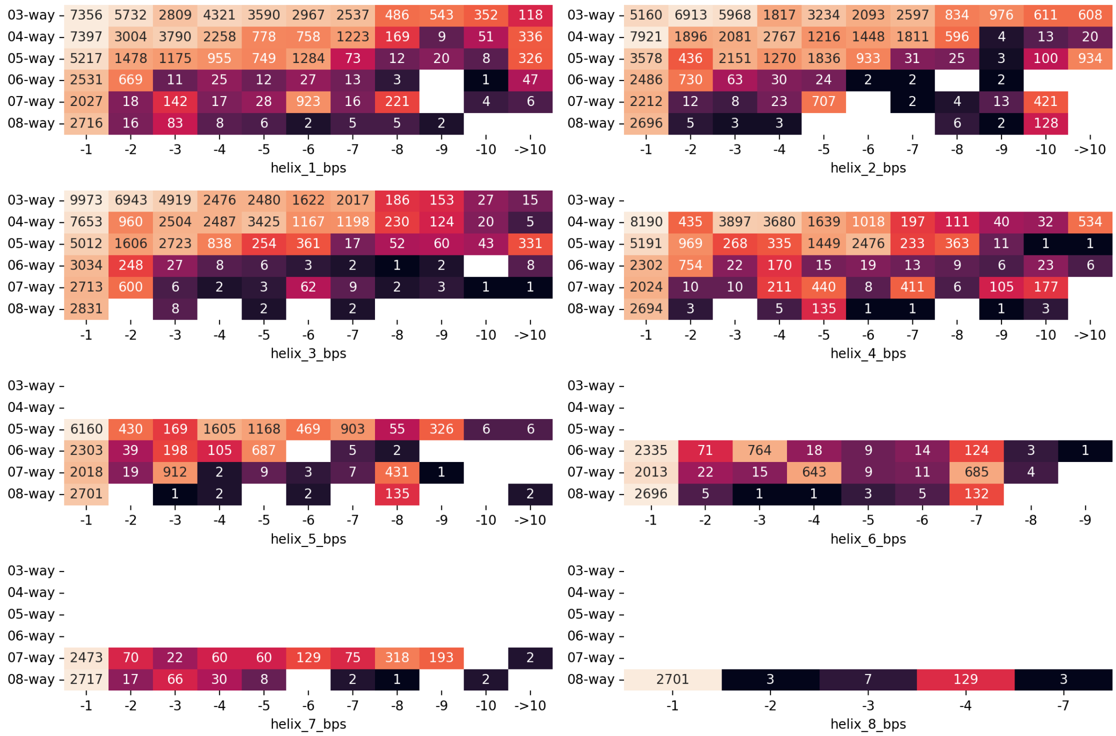
Man sieht schon ein paar Auffälligkeiten, die man diskutieren könnte.
Interessant wäre noch zu sehen, wie die Verteilungen je nach loop-type aussehen, den haben wir in den Plots oben gar nicht berücksichtigt.
Wir konzentrieren uns auf way-3 bis way-8, wobei noch zu diskutieren ist, ob wir den Rest wirklich komplett ignorieren:

[225]:
```
df = df[df.loop_type.isin([f'{i:02}-way' for i in range(3, 9)])]
df.loop_type = df.loop_type.cat.remove_categories([f'{i:02}-way'
                                                   for i in range(9, 15)])
df = df.drop([col for col in df.columns if any(str(x) in col
                                               for x in range(9, 15))], axis=1)
```

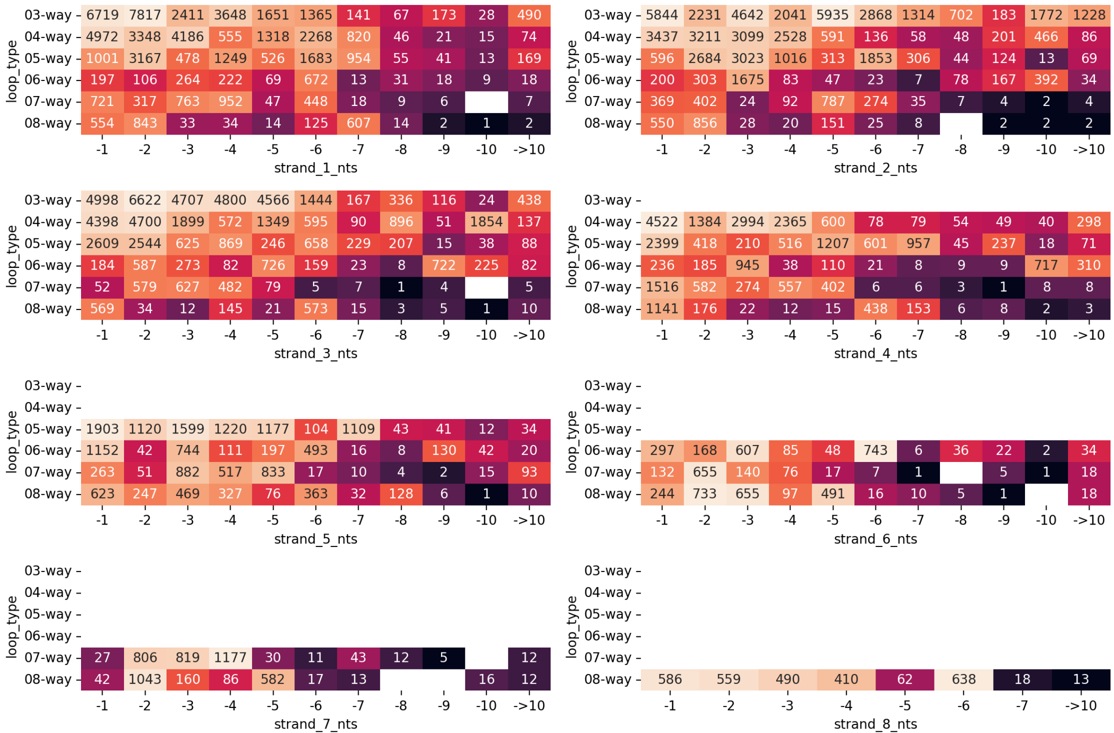
1.3 Verteilung von Featuren nach Loop-Typ

Wir können jetzt die einzelnen Helixlängen nach Loop Typen gruppieren und jeweils einen 2D Plot (Heatmap) erzeugen:

[177]:
```
# (1) Verteilung der Helixlängen nach Looptyp:

fig, ax = plt.subplots(4, 2, figsize=(12, 8), dpi=200)

for idx, a in enumerate(ax.ravel()[:8]):

    key = f'helix_{idx+1}_bps'
    data = df[df[key]>0]
    data.loc[data[key]>10, key] = '>10'

    grouped = data.groupby(['loop_type', key]).count()
    matrix = grouped[['db_notation']].unstack(level=1)
    matrix = matrix.rename(columns={'db_notation': ''})

    sns.heatmap(matrix, norm=LogNorm(), annot=True, fmt='d', ax=a, cbar=False)
    a.set_xlabel(key)
    a.set(ylabel=None)

plt.tight_layout()
```



[178]:
```python
# (2) Verteilung der Strandlängen nach Looptyp:

fig, ax = plt.subplots(4, 2, figsize=(12, 8), dpi=200)

for idx, a in enumerate(ax.ravel()[:8]):

    key = f'strand_{idx+1}_nts'
    data = df[df[key]>0]
    data.loc[data[key]>10, key] = '>10'

    grouped = data.groupby(['loop_type', key]).count()
    matrix = grouped[['db_notation']].unstack(level=1)
    matrix = matrix.rename(columns={'db_notation': ''})

    sns.heatmap(matrix, norm=LogNorm(), annot=True, fmt='d', ax=a, cbar=False)
    _ = a.set_xlabel(key)
    a.set(ylabel=None)

plt.tight_layout()
```

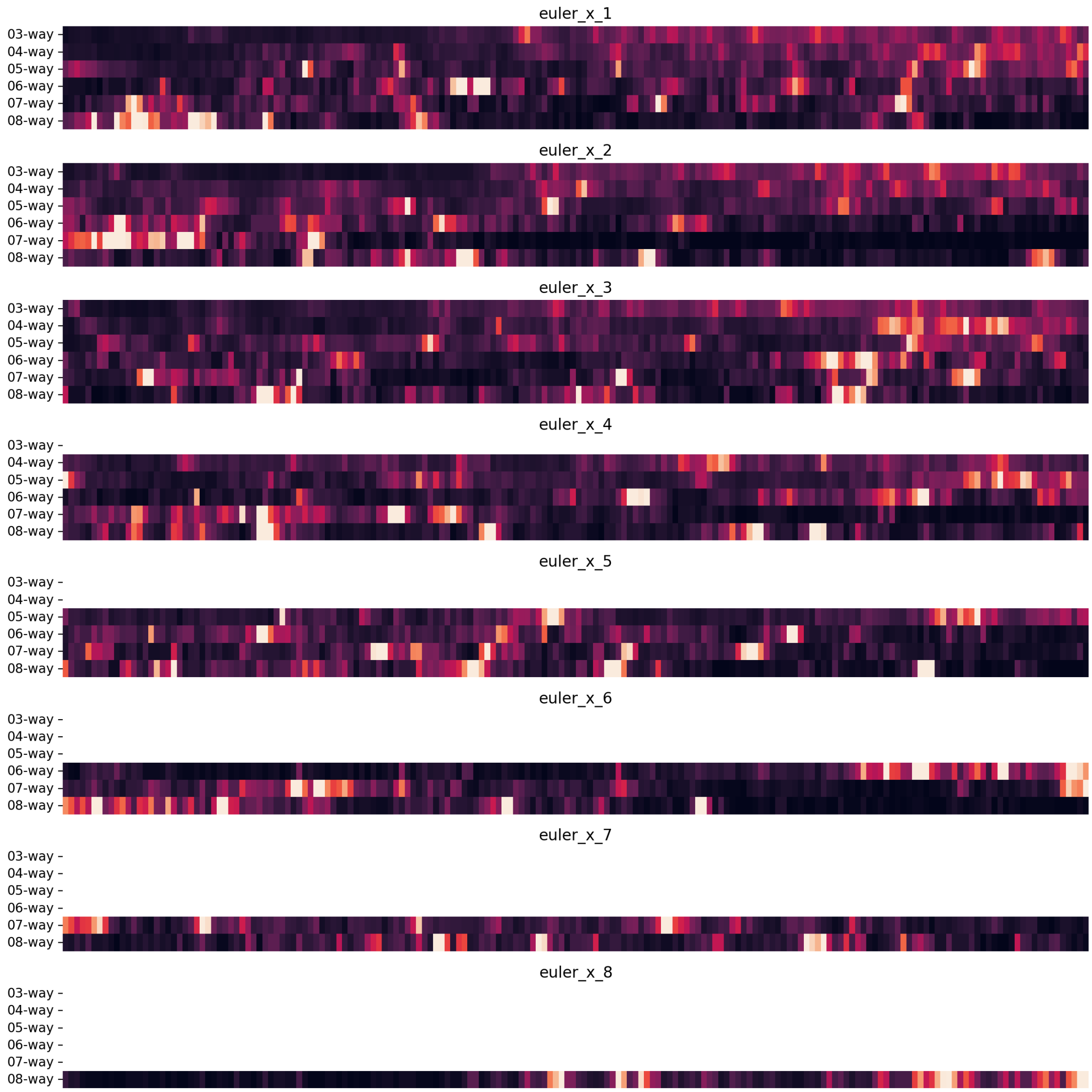


[216]:

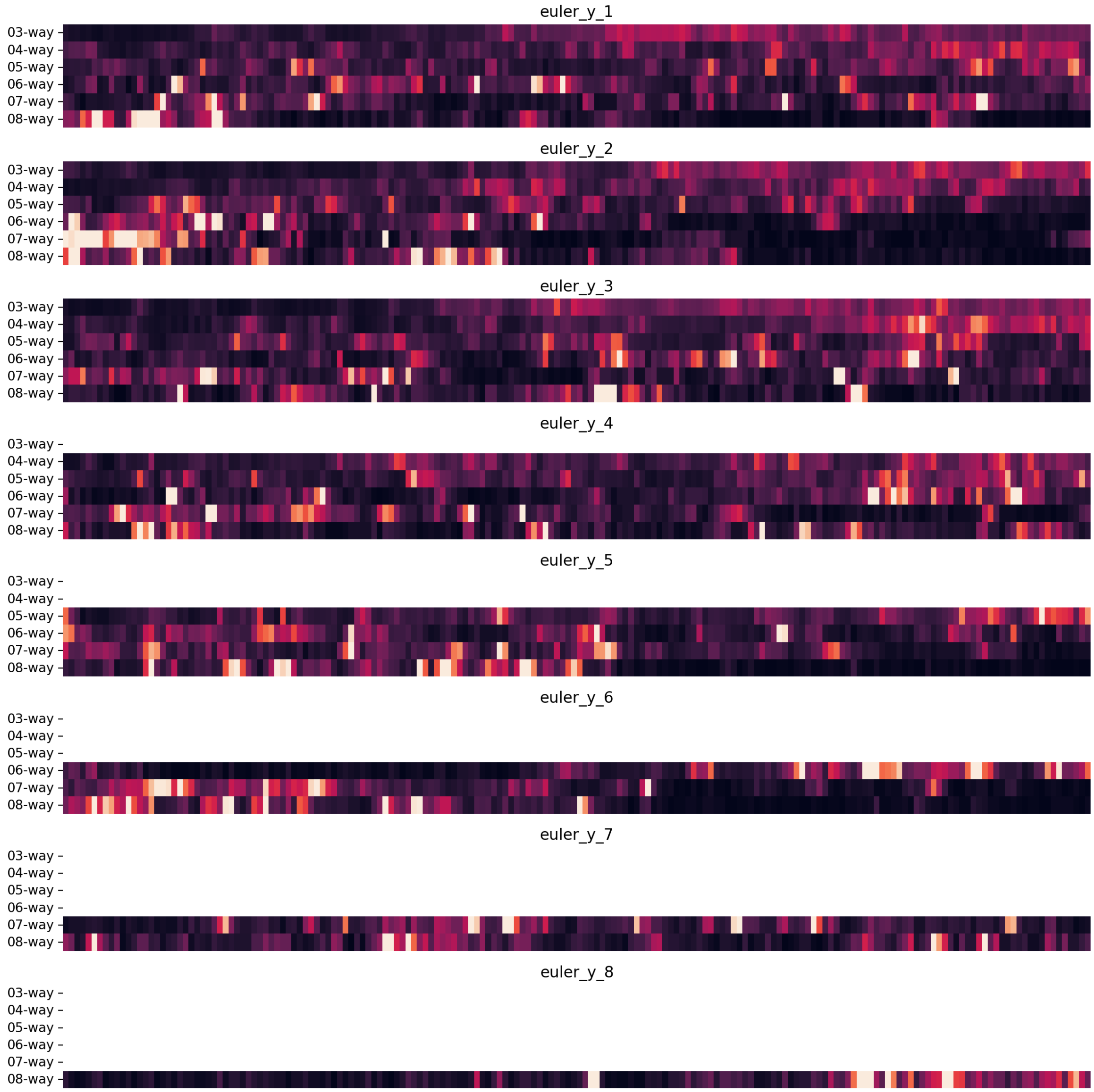
```python
# Funktion für Verteilung der Winkel, diskretisiere die Gradzahlen in 1°
# Schritten um analoge Plots zu den Heatmaps oben erzeugen zu können:

def angle_distribution(angle):

    fig, ax = plt.subplots(8, 1, figsize=(12, 12), dpi=200)

    for idx, a in enumerate(ax.ravel()[:8]):

        key = f'{angle}_{idx+1}'

        cutter = pd.cut(df[key], np.arange(0, 181, 1))
        grouped = df.groupby(['loop_type', cutter]).count()

        matrix = grouped[['db_notation']].unstack(level=1)
        matrix = matrix.rename(columns={'db_notation': ''})
        matrix = matrix.div(matrix.sum(axis=1), axis='rows')

        sns.heatmap(matrix, annot=False, fmt='d', ax=a, cbar=False,
                    vmin=0, vmax=0.025)

        a.set(ylabel=None)
        a.set_title(key)
```

```
        a.axes.get_xaxis().set_visible(False)

    plt.tight_layout()
```

[217]:
```
# (3.1) Verteilung der x Eulerwinkel nach Looptyp:
angle_distribution('euler_x')
```

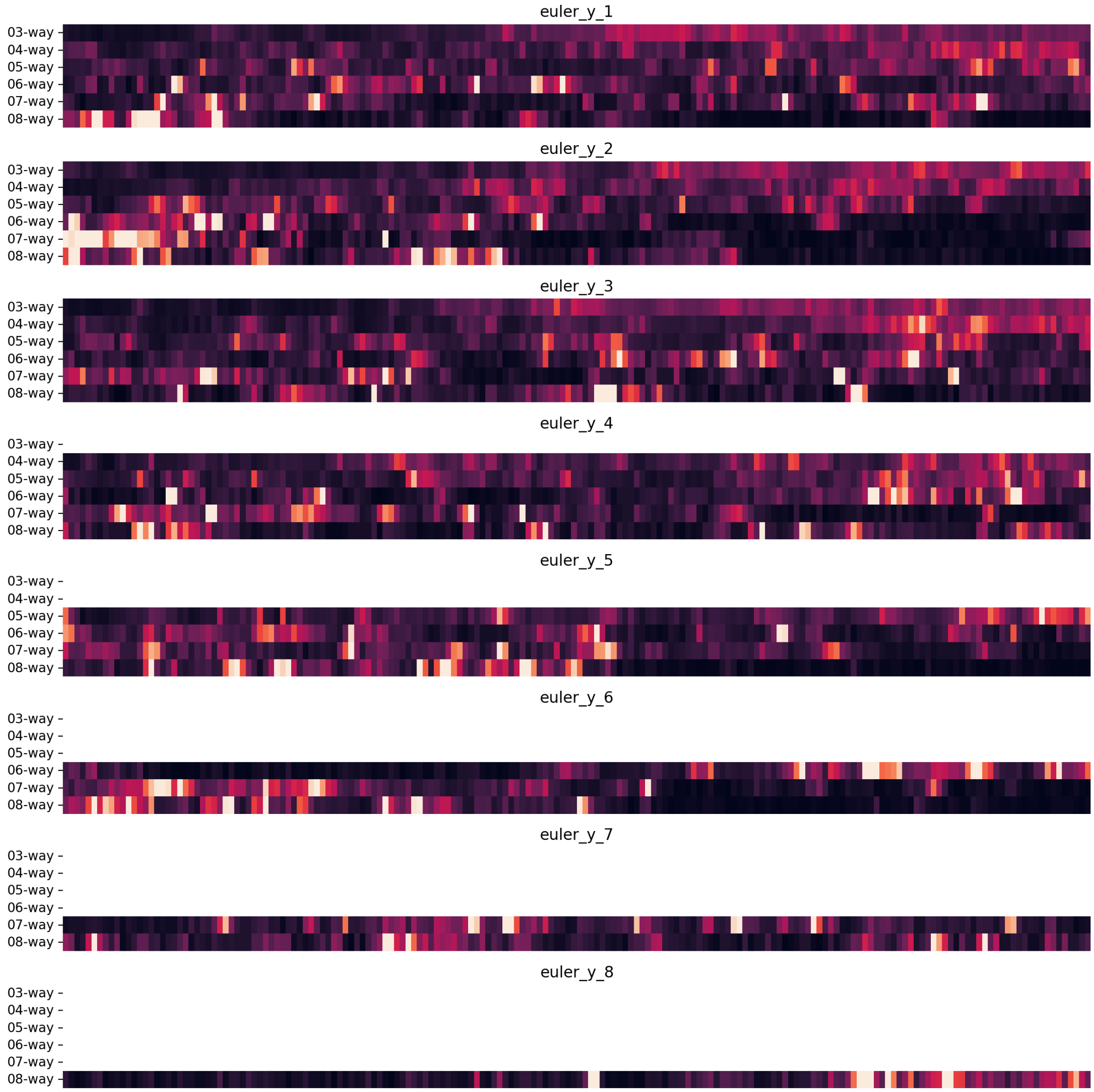


[218]:
```
# (3.2) Verteilung der y Eulerwinkel nach Looptyp:
angle_distribution('euler_y')
```



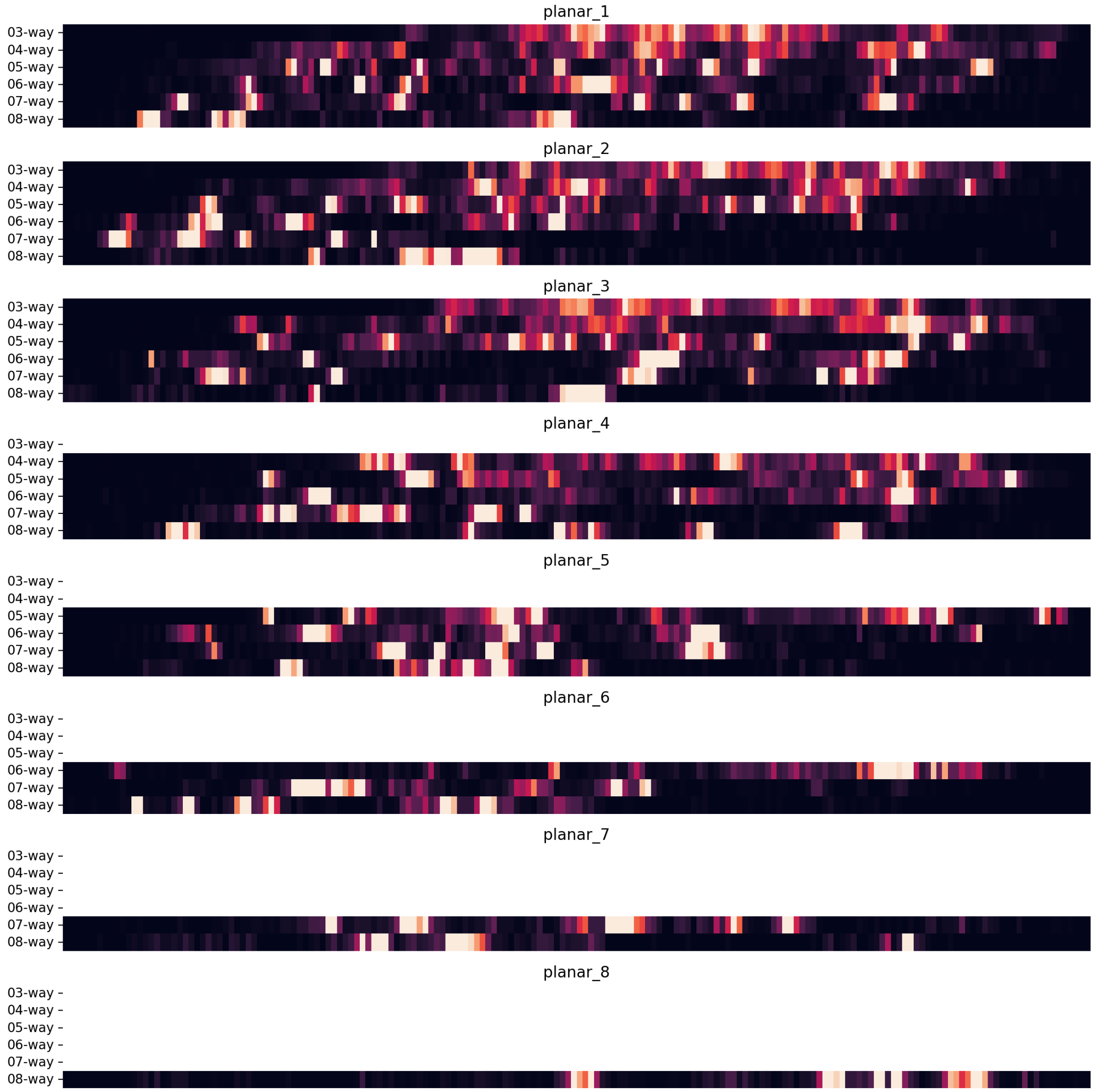
[219]:

```
# (3.3) Verteilung der z Eulerwinkel nach Looptyp:
angle_distribution('euler_y')
```



[220]:

```
# (4) Verteilung der Planarwinkel nach Looptyp:
angle_distribution('planar')
```

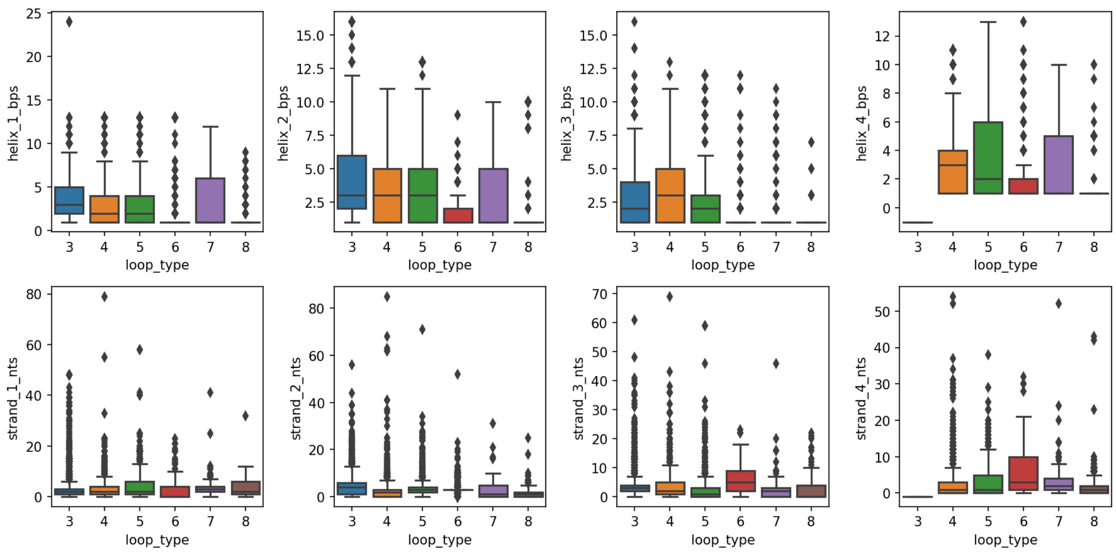


Man kann in den Plots schon ein paar Muster erkennen, vielleicht kann irgendetwas davon noch interessant sein.

Wir können auch noch zusammenfassende Darstellungen erzeugen.
Wir nutzen dafür die Funktion get_loop_types() aus explore_fcts.py, die nur relevante Spalten und Zeilen eines oder mehrerer Loop-Typen zurückgibt.
Mit Hilfe davon erhält df beim Laden die Attribute df.way1 bis df.way14 mit den Teil-DataFrames für diese Loop-Typen, außerdem df.upto8 mit allen Loop-Typen bis 8:

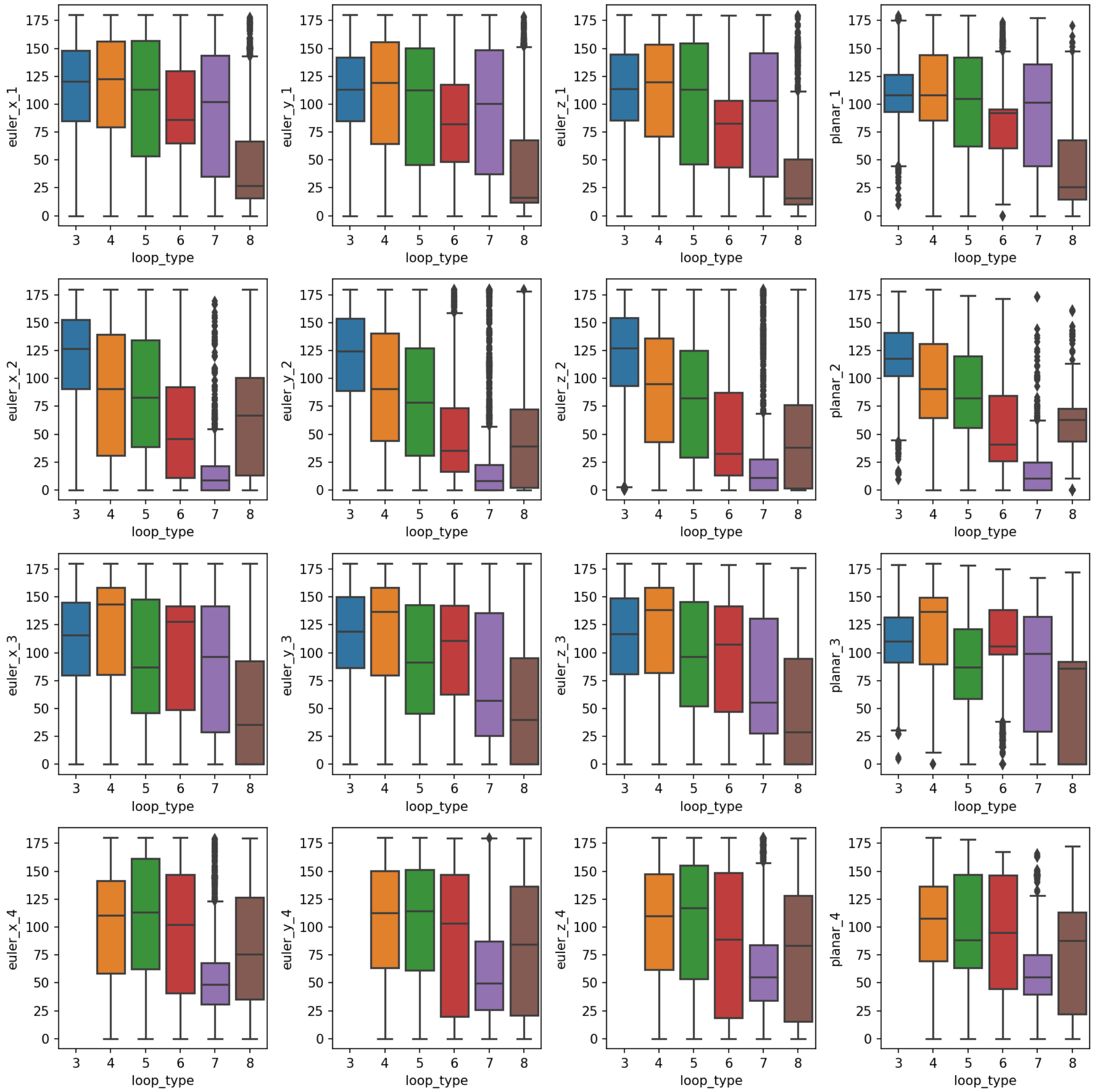
[12]:
```
# Helix und Strand Längen:

fig, ax = plt.subplots(2, 4, figsize=(12, 6), dpi=150)
for i in range(1, 5):
    for j, label in enumerate([f'helix_{i}_bps', f'strand_{i}_nts']):
```

```
        sns.boxplot(data=df.upto8, y=label, x='loop_type', ax=ax[j, i-1])
        ax[j, i-1].set_xticklabels(range(3, 9))
plt.tight_layout()
```



[13]:

```
# Winkel:

fig, ax = plt.subplots(4, 4, figsize=(12, 12), dpi=150)
for i in range(1, 5):
    for j, angle in enumerate(['euler_x', 'euler_y', 'euler_z', 'planar']):
        sns.boxplot(data=df.upto8, y=angle+f'_{i}', x='loop_type',
                    ax=ax[i-1, j])
        ax[i-1, j].set_xticklabels(range(3, 9))
plt.tight_layout()
```



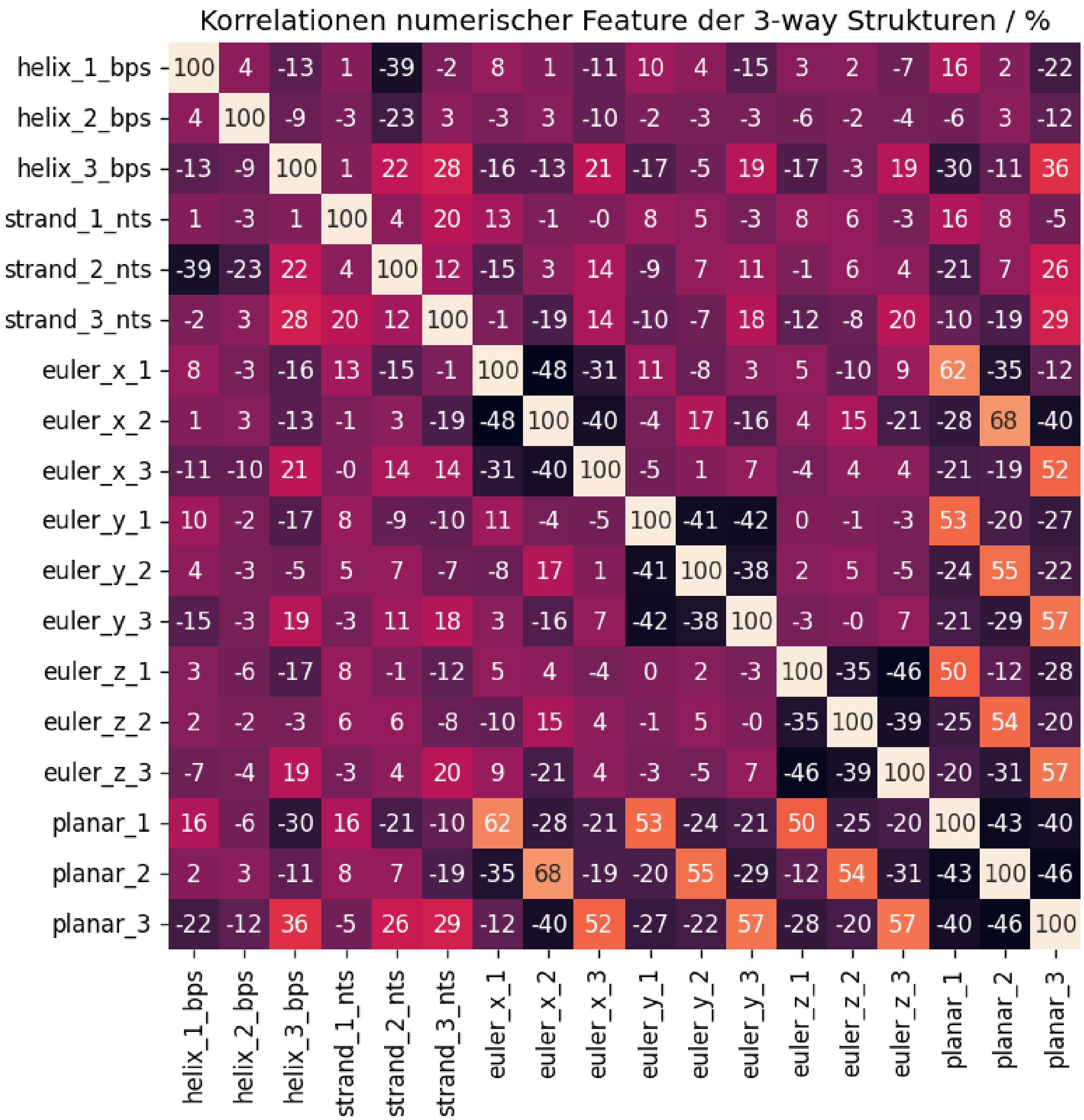
Jetzt stellt sich die Frage, welche Gruppen und welche Feature weiter betrachtet werden sollen.

1.4 Beziehungen der Feature in den Loop-Typ Gruppen

Wir können jetzt die Loop-Typen separat untersuchen. Wir müssen noch entscheiden welche wir dazu berücksichtigen.
Wir können dann Beziehungen und Verteilungen der numerischen Feature weiter untersuchen um zu entscheiden welche relevant sind.
Wir können auch die kategorischen und string Feature berücksichtigen, müssten diese aber erst transformieren, daher sollte vorher klar sein welche davon sinnvoll sind.

Ein nächster Schritt könnte z.B. sein, Korrelationen zu betrachten:

```
[16]: fig, ax = plt.subplots(figsize=(7, 7), dpi=120)
sns.heatmap(df.way3.corr(), annot=df.way3.corr()*100, cbar=False, fmt='.0f')
_ = ax.set_title('Korrelationen numerischer Feature der 3-way Strukturen / %')
```



Offensichtlich sind nicht alle Winkel unabhängig, wir sollten das berücksichtigen.

Weitere Untersuchungen der Feature aber dann in eda_3.ipynb, dieses Notebook ist schon voll genug...

```
[1]: test = 'blas'
print(test)
```

```
blas
```