Další datové struktury a práce s nimi, matice, datové tabulky, seznamy

17VSADR – Skriptování a analýza dat v jazyce R

Lubomír Štěpánek^{1, 2}



 Oddělení biomedicínské statistiky Ústav biofyziky a informatiky
 lékařská fakulta
 Univerzita Karlova v Praze



²Katedra biomedicínské informatiky Fakulta biomedicínského inženýrství České vysoké učení technické v Praze

(2018) Lubomír Štěpánek, CC BY-NC-ND 3.0 (CZ)



Dílo lze dále svobodně šířit, ovšem s uvedením původního autora a s uvedením původní licence. Dílo není možné šířit komerčně ani s ním jakkoliv jinak nakládat pro účely komerčního zisku. Dílo nesmí být jakkoliv upravováno. Autor neručí za správnost informací uvedených kdekoliv v předložené práci, přesto vynaložil nezanedbatelné úsilí, aby byla uvedená fakta správná a aktuální, a práci sepsal podle svého nejlepšího vědomí a svých "nejlepších" znalostí problematiky.

Obsah

- Datové struktury
- 2 Matice a práce s nimi
- Pole
- 4 Datové tabulky a práce s nimi
- 5 Seznamy a práce s nimi
- 6 Literatura



3/31

Datové struktury

Datové struktury

- vektor (vector)
- faktor (factor)
- matice (matrix)
- pole (array)
- tabulka dat (data.frame)
- seznam (list)



Tvorba matic a základní příkazy

- matice (matrix) je dvojrozměrným polem, které obsahuje prvky stejného datového typu
- všechny sloupce matice mají shodnou délku, podobně všechny řádky matice mají shodnou délku
- ať je

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$$

ullet v R matici $oldsymbol{A}$ a $oldsymbol{B}$ získáme příkazy

```
A <- matrix(c(1, 2, 3, 4), nrow = 2,

ncol = 2)

B <- matrix(c(1, 3, 2, 4), nrow = 2,

ncol = 2)

B <- matrix(c(1, 2, 3, 4), nrow = 2,

ncol = 2, byrow = TRUE)

# vždy jeden z argumentů "nrow" či "ncol" je zbytný
```



5/31

Manipulace s maticemi

• ať je

$$C = \begin{pmatrix} a & b & c & d \\ e & f & g & h \\ i & j & k & l \end{pmatrix}$$

v R pak pomocí

```
1 | C <- matrix(letters[1:12], nrow = 3, byrow = T)
```

některé užitečné příkazy



Manipulace s maticemi

ať je

$$C = \begin{pmatrix} a & b & c & d \\ e & f & g & h \\ i & j & k & l \end{pmatrix}$$

další užitečné příkazy

```
colnames(C) <- c("c1", "c2", "c3", "c4")
         rownames(C) <- c("r1", "r2", "r3")
                     # přidá jmenovky sloupcům i řádkům
         C <- unname(C)
                     # zbaví sloupce i řádky jmenovek
6
7
8
         dimnames(C) <- list(
                             c("r1", "r2", "r3"),
                             c("c1", "c2", "c3", "c4")
                     # opět přidá jmenovky sloupcům i řádkům
```

Manipulace s maticemi

stále mějme

$$\boldsymbol{C} = \begin{pmatrix} a & b & c & d \\ e & f & g & h \\ i & j & k & l \end{pmatrix}$$

další užitečné příkazy

```
rbind(C, c("x", "x", "x", "x"))
1
2
3
4
5
6
7
                      # přidání řádku c("x", "x", "x". "x")
                      # k matici C
          cbind(C, c("x", "x", "x"))
                      # přidání sloupce c("x", "x", "x")
                      # k matici C
          C[-1,] # odebrání 1. řádku matici C
          C[, -2] # odebrání 2. sloupce matici C
```



Submatice, indexování, adresace

ať je

$$\boldsymbol{C} = \begin{pmatrix} a & b & c & d \\ e & f & g & h \\ i & j & k & l \end{pmatrix}$$

v R pomocí

```
C <- matrix(letters[1:12], nrow = 3,</pre>
             byrow = T, dimnames = list(
             c("r1", "r2", "r3"),
             c("c1", "c2", "c3", "c4")))
```

adresace

```
C[2, 3]
              # "q"; prvek 2. řádku, 3. sloupce
C["r2", "c3"] # "g"; prvek 2. řádku, 3. sloupce
C[1, ]
            # c("a", "b", "c", "d");
                # tedy vektor 1. řádku matice C
                # s popisky
```

9/31

Submatice, indexování, adresace

stále mějme

$$C = \begin{pmatrix} a & b & c & d \\ e & f & g & h \\ i & j & k & l \end{pmatrix}$$

adresace

```
C[, 3]
                            # c("c", "q", "k");
1
2
3
                             # tedy vektor 3. sloupce matice C
                             # s popisky
           C[c(1, 3), c(2, 4)]
                             # matrix(c("b", "j", "d", "l"), 2)
6
7
8
                             # submatice 1. a 3. řádku.
                             # 2. a 4. sloupce matice C
                             # s popisky
           C["r2", ]
                             # c("e", "f", "q", "h");
10
                             # tedy vektor 2. řádku matice C
                             # s popisky
```

Submatice, indexování, adresace

• stále mějme

$$C = \begin{pmatrix} a & b & c & d \\ e & f & g & h \\ i & j & k & l \end{pmatrix}$$

adresace

```
C[dim(C)[1], dim(C)[2]]

# "l"; obecná adresace prvku

# vpravo dole (např. neznáme-li

* číselné rozměry matice)

C[5] # "f"; major-column ordering

C[c(8, 9)] # c("g", "k")

C[13] # NA

diag(C) # c("a", "f", "k"); hlavní diagonála

diag(C[, dim(C)[2]:1])

# c("d", "g", "j"); vedlejší diagonála
```

Datové struktury

• mějme matici

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 9 & 6 \\ -5 & 0 & 1 & 2 \\ -8 & 4 & 7 & 3 \end{pmatrix}$$

- pomocí R
 - (i) založme matici X
 - (ii) najděme prvek třetího řádku druhého sloupce matice $oldsymbol{X}$
 - (iii) jaký řádkový a sloupcový index mají prvky $0,\,7$ matice $oldsymbol{X}$
 - (iv) najděme minimum matice $oldsymbol{X}$ a řádkový a sloupcový index této hodnoty
 - (v) najděme stopu matice X



mějme matici

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 9 & 6 \\ -5 & 0 & 1 & 2 \\ -8 & 4 & 7 & 3 \end{pmatrix}$$

řešení

7. října 2019

12/31

mějme matici

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 9 & 6 \\ -5 & 0 & 1 & 2 \\ -8 & 4 & 7 & 3 \end{pmatrix}$$

```
# (iii) lépe
1
2
3
4
5
             which (X == 0, ind.arr = TRUE)
             which (X == 7, ind.arr = TRUE)
                        # which(X == 1, ind.arr = TRUE)
                        # vrátí c(1, 2) i c(2, 3)
             # (iv)
78
             min(X); which (X == min(X), arr.ind = T)
                        # -8; c(3, 1)
             # (v)
10
             sum(diag(X))
                        # 8 := 1 + 0 + 7
```

Maticová algebra

buďte

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 5 & 7 \\ 6 & 8 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{b} = (1,0)^T$$

v R

• Hadamardův součin (*element-wise*, *pairwise*) $m{A} \circ m{B} = \begin{pmatrix} 5 & 21 \\ 12 & 32 \end{pmatrix}$

```
A * B  # matrix(c(5, 12, 21, 32), 2)
```

- ullet maticový součin $oldsymbol{A} \cdot oldsymbol{B} = egin{pmatrix} 23 & 31 \\ 34 & 46 \end{pmatrix}$
- 1 | A %*% B # matrix(c(23, 34, 31, 46), 2)

Maticová algebra

buďte

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 5 & 7 \\ 6 & 8 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{b} = (1,0)^T$$

- transpozice $A^T = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix}$
- 1 || t(A) # matrix(c(1, 3, 2, 4), 2)
 - ullet jednotková matice $oldsymbol{I}_2 = egin{pmatrix} 1 & 0 \ 0 & 1 \end{pmatrix}$
- 1 | diag(2) # matrix(c(1, 0, 0, 1), 2)
 - inverzní matice $A^{-1} = \begin{pmatrix} -2 & 3/2 \\ 1 & -1/2 \end{pmatrix}$
- 1 | solve(A) # matrix(c(-2, 1, 1.5, -0.5), 2)

14/31

Maticová algebra

buďte

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 5 & 7 \\ 6 & 8 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{b} = (1,0)^T$$

- vlastní čísla matice A jsou $\lambda = (\frac{1}{2}(5+\sqrt{33}), \frac{1}{2}(5-\sqrt{33}))^T$
- eigen(A)\$values
- vlastní vektory matice A jsou například $\mathbf{v} = \left[\left(\frac{1}{4} (-3 + \sqrt{33}), 1 \right)^T, \left(\frac{1}{4} (-3 - \sqrt{33}), 1 \right)^T \right]$
- eigen(A)\$vectors # R vrací ortonormální # vlastní vektory
 - ullet řešení $oldsymbol{x}$ ze soustavy $oldsymbol{A}oldsymbol{x}=oldsymbol{b}$ je $oldsymbol{x}=(-2,1)^T$
- solve(A, b) # c(-2, 1)

Datové struktury

 uvažujme markovský proces s počátečním stavovým vektorem $\mathbf{p}^0 = (1,0,0)^T$ a přechodovou maticí

$$S = \begin{pmatrix} 1/4 & 1/2 & 1/4 \\ 2/3 & 0 & 1/3 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix},$$

kde v i-tém řádku jsou vždy po řadě pravděpodobnosti přechodu z i-tého stavu do j-tého stavu pro $\forall i, j \in \{1, 2, 3\}$

- pomocí R
 - (i) ověřme, že matice S je stochastická
 - (ii) určeme pravděpodobnosti, s jakými proces dospěl po pěti krocích do prvního, druhého či třetího stavu
 - (iii) určeme, zda existuje dynamicky rovnovážný stav procesu



Datové struktury

 uvažujme markovský proces s počátečním stavovým vektorem $\mathbf{p}^0 = (1,0,0)^T$ a přechodovou maticí

$$S = \begin{pmatrix} 1/4 & 1/2 & 1/4 \\ 2/3 & 0 & 1/3 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix},$$

kde v i-tém řádku jsou vždy po řadě pravděpodobnosti přechodu z i-tého stavu do j-tého stavu pro $\forall i, j \in \{1, 2, 3\}$

```
S \leftarrow matrix(c(1/4, 1/2, 1/4,
               2/3, 0, 1/3,
               1/2, 1/2, 0), nrow = 3,
               byrow = TRUE)
p < -c(1.0.0)
```

Datové struktury

 uvažujme markovský proces s počátečním stavovým vektorem $\mathbf{p}^0 = (1,0,0)^T$ a přechodovou maticí

$$S = \begin{pmatrix} 1/4 & 1/2 & 1/4 \\ 2/3 & 0 & 1/3 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix},$$

kde v i-tém řádku jsou vždy po řadě pravděpodobnosti přechodu z i-tého stavu do j-tého stavu pro $\forall i, j \in \{1, 2, 3\}$



• uvažujme markovský proces s počátečním stavovým vektorem ${m p}^0=(1,0,0)^T$ a přechodovou maticí

$$S = \begin{pmatrix} 1/4 & 1/2 & 1/4 \\ 2/3 & 0 & 1/3 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix},$$

kde v i-tém řádku jsou vždy po řadě pravděpodobnosti přechodu z i-tého stavu do j-tého stavu pro $\forall i,j\in\{1,2,3\}$

```
# (ii)
install.packages("expm", dependency = T)
library("expm")
p %*% (S %^% 5) # c(0.437, 0.344, 0.219)
```



 uvažujme markovský proces s počátečním stavovým vektorem $\mathbf{p}^0 = (1,0,0)^T$ a přechodovou maticí

$$S = \begin{pmatrix} 1/4 & 1/2 & 1/4 \\ 2/3 & 0 & 1/3 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{pmatrix},$$

kde v i-tém řádku jsou vždy po řadě pravděpodobnosti přechodu z i-tého stavu do j-tého stavu pro $\forall i, j \in \{1, 2, 3\}$

```
# (iii)
  p %*% (S %^% 10) # c(0.444, 0.333, 0.222)
p %*% (S %^% 20) # c(0.444, 0.333, 0.222)
p %*% (S %^% 30) # c(0.444, 0.333, 0.222)
                         # c(0.444, 0.333, 0.222)
  p %*% (S %^% 40)
```

Tvorba polí a práce s nimi

- pole je objekt s vlastnostmi matice, ale libovolným počtem dimenzí
- např.

```
(X \leftarrow array(c(1:24), dim = c(4, 3, 2)))
               # , , 1
 3
               # [,1] [,2] [,3]
 4
               # [1,] 1 5 9
 5
               # [2,] 2 6 10
 6
               # [3,] 3 7 11
               # [4,] 4 8 12
 8
               # , , 2
 9
               # [,1] [,2] [,3]
10
               # [1,] 13 17 21
11
               # [2,] 14 18 22
12
               # [3,] 15 19 23
13
               # [4,] 16 20 24
```

Manipulace s poli

Datové struktury

navigace v poli

- pole se příliš nepoužívají, protože vstupem pro analytické funkce jazyka R je obvykle matice či datová tabulka
- pole libovolných rozměrů lze převést na dvourozměrnou matici pomocí dummy proměnné "vrstva"



Tvorba datových tabulek a základní příkazy

- datová tabulka (data.frame) je dvojrozměrným polem, které obsahuje v každém sloupci prvky stejného datového typu, ale jednotlivé sloupce se mohou datovým typem lišit
- všechny sloupce datové tabulky mají shodnou délku, podobně všechny řádky datové tabulky mají shodnou délku
- v R je řada vestavěných datových tabulek

```
mtcars
          str(mtcars)
          class(mtcars)
                                      # "data.frame"
                                      # "list"
          mode(mtcars)
5
          is.data.frame(mtcars) # TRUE
6
          str(iris)
               # 'data.frame': 150 obs. of 5 variables
8
               # . . .
9
          dim(iris)
                                      \# c(150, 5)
```



Manipulace s datovými tabulkami

užitečné příkazy

```
data <- mtcars
           colnames (data)
           colnames(data) <- paste("c",</pre>
                                        1: dim(data)[2],
 5
                                        sep = "_")
 6
           rownames(data) <- paste("r",
                                        1: dim(data)[1],
 8
                                        sep = "_")
 9
                            # změní jmenovky sloupcům i řádkům
10
           head (data)
                            # náhled na prvních 6 řádků
11
           head (data, 10)
12
                            # náhled na prvních 10 řádků
13
           tail(data)
                              náhled na posledních 6 řádků
14
           tail(data, 10)
15
                            # náhled na posledních 10 řádků
```

Manipulace s datovými tabulkami

další užitečné příkazy

```
rbind(data, rep(0, dim(data)[2]))
                          # přidání řádku c(0, 0, ..., 0)
                          # k data.frameu "data"
           cbind(data, rep(0, dim(data)[1]))
 5
                          # přidání sloupce c(0, 0, \ldots, 0)
 6
                          # k data.frameu "data"
           data.frame(data,
 8
                         "ahoj" = rep(0, dim(data)[1]))
                          # přidání sloupce c(0, 0, ..., 0)
10
                          # se jménem "ahoj" k data.frameu
11
                          # "data"
12
           data[-1,] # odebrání 1. řádku data.frameu
13
                          # "d.a.t.a."
14
           data[, -1] # odebrání 1. sloupce data.frameu
15
                          # "d.a.t.a."
```

Indexování, adresace

adresace

```
data[2, 3]
                             # 160; prvek 2. řádku, 3. sloupce
            data["r_2",
                          "c_3"]
                             # 160; prvek pod danými popisky
                             # c(21, 6, 160, 110, ...);
            data[1, ]
 5
                             # tedy vektor 1. řádku data.frameu
 6
                             # "data" s popisky
                             \# c(6, 6, 4, 6, \ldots);
            data[, 2]
 8
                             # tedy vektor 2. sloupce
 9
                             # data.frameu "data" s popisky
10
                             \# c(3.90, 3.90, 3.85, 3.08, ...);
            data$c_5
11
                             # tedy vektor 2. sloupce
12
                             # data.frameu "data" s popisky
13
            data$c_5[1]
                             # 3.9:
14
                             # tedy první prvek 2. sloupce
15
                             # data.frameu "data"
```

Indexování, adresace

adresace

```
data[dim(data)[1], dim(data)[2]]

# 2; obecná adresace prvku

# vpravo dole (např. neznáme-li

# číselné rozměry tabulky)

data[5] # 5. sloupec, nikoliv major-column

# ordering
```

Sloupcové přehledy

• může mít smysl znát agregovaný ukazatel nad všemi sloupci

```
colSums (data)
                        # součty všech sloupců
           apply(data, 2, sum)
 4
                        # totéž
 5
           colMeans (data)
 6
                        # průměry všech sloupců
           apply(data, 2, mean)
 8
                        # totéž
 9
           data <- rbind(data, rep(NA, dim(data)[2]))
10
                        # přidán řádek c(NA, NA, ...)
11
           colMeans (data)
12
                        # c(NA, NA, ...); pro získání průměrů
13
                        # nutné přidat argument na.rm = TRUE
14
           colMeans(data, na.rm = TRUE)
15
           apply(data, 2, mean, na.rm = TRUE)
16
                        # už funguje
```

Tvorba seznamů a základní příkazy

- seznam (list) je výčtem prvků, které mohou být různorodého datového typu, včetně listu
- délky jednotlivých prvků seznamu se mohou lišit

```
mv_list <- list("a" = c(1:10),
1
2
3
                            "b" = mtcars,
                            "c" = matrix(1:8, 2),
4
                            z" = ahoj"
5
          str(my_list)
6
          class(my_list)
                                    # "list"
         mode(my_list)
                                    # "list"
8
          is.list(my_list)
                                    # TRUE
```

Manipulace se seznamy

užitečné příkazy

```
names(my_list)
2
          names(my_list) <- LETTERS[</pre>
               1:length(my_list)
                        # přejmenovávám prvky listu
5
6
          my_list[[length(my_list) + 1]] < c(T, F)
          names(length(my_list)) <- "XY"</pre>
8
                        # přidání vektoru c(T, F)
9
                        # k listu "my_list" pod jménem
                        # "XY"
```

Indexování, adresace

adresace

```
my_list[[2]] # 2. prvek listu
           my_list[["B"]]
                            # prvek listu pod jmenovkou
                            # jde o původní datový typ
 5
                            # (data.frame)
 6
           my_list["B"]
                            # prvek listu pod jmenovkou
                            # jde (vždy) o list
 8
           my_list[c(2, 4)]
 9
                            # 2. a 4. prvek listu
10
                            # prvek listu pod jmenovkou
           my_list$C
11
           my_list[[1]][2]
12
                            # 2; 2. prvek 1. prvku listu
13
           my_list[[2]][3, 5]
14
                            # 3.85; z 2. prvku listu vybírám
15
                            # prvek o souřadnicích (3, 5)
```

Indexování, adresace pomocí funkce lapply()

adresace

```
set.seed(1)
          my_long_list <- lapply(
               sample(c(80:120), 100, TRUE),
               function(x) sample(
 5
                    c(50:150), x, replace = TRUE
6
               # list vektorů náhodné délky
8
               # generovaných z náhodných čísel
9
10
          lapply(my_long_list, "[[", 14)
11
               # z každého prvku listu (vektoru)
               # vybírám jen jeho 14. prvek
```

Prvkové přehledy

může mít smysl znát agregovaný ukazatel nad všemi prvky seznamu

```
lapply(my_long_list, mean)
2
               # pro každý prvek listu (vektor)
               # vracím jeho průměr
4
5
          lapply(my_long_list, length)
6
               # pro každý prvek listu (vektor)
               # vracím jeho délku
```

Literatura



Hadley Wickham. Advanced R. Boca Raton, FL: CRC Press, 2015. ISBN: 978-1466586963.

Děkuji za pozornost!

lubomir.stepanek@lf1.cuni.cz lubomir.stepanek@fbmi.cvut.cz



github.com/LStepanek/17VSADR Skriptovani a analyza dat v jazyce R