Boxplots von Projektionen

H. P. Wolf

Version: 11.04.06, formatiert: November 3, 2011, file: sc.rev

1 Gegenstand

In diesem Papier wird die Funktion boxplot2D definiert. Mit dieser läßt sich in einen Scatterplot eines zweidimensionalen Datensatzes zu einer beliebigen Projektion der Daten ein Boxplots erstellen und geeignet im Scatterplot der Daten anbringen.

2 Definition von boxplot2D

Die Syntax der Funktion ergibt sich aus Kopfzeile wie aus den ersten Kommentarzeilen der Funktion:

```
\langle start \ 1 \rangle \equiv
 boxplot2D<-function(xy, add.to.plot=TRUE, box.size=10, box.shift=0, angle=0,
                  angle.type="0", tukey.style=TRUE, coef.out=1.5, coef.h.out=3, design="s1",
                 na.rm=FALSE, ...){
 # boxplot for scatterplots, pw 03/05
                2-col matrix
                                                                           #
 # xy:
 # add.to.plot: if TRUE => plot(xy,...)
 # box.size:
                height of box in mm
 # box.shift:
                shift of boxplot in mm
                direction of projection in units defined by angle.type
 # angle:
 # angle.type:
                "0"= angle , # angle in (0,2*pi)
"1"=2*pi*angle/12, # clock-like
                "0"=
                 "2"=2*pi*angle/360, \# angle in (0,360)
                 "3"=arctan(angle)
                                   # by fraction: delta.y/delta.x
 # tukey.style: if TRUE outliers are defined as described in Tukey (1977): EDA
 # coef.out=1.5 # outliers are defined outside coef.out*boxwidth
 # coef.h.out=3  # heavy outliers are defined outside coef.h.out*boxwidth
                if "sl" then parallelogram else box
 # design:
 if(na.rm){ xy<-xy[!apply(is.na(xy),1,any),,drop=FALSE]</pre>
     print("Warning: NAs elements have been removed!!")
    }else{
     xy.means<-colMeans(xy,na.rm=TRUE)</pre>
     for(j in 1:ncol(xy)) xy[is.na(xy[,j]),j]<-xy.means[j]</pre>
     print("Warning: NAs elements have been exchanged by mean values!!")
 }
  ⟨zeichne ggf. Scatterplot 3⟩
  \langle konstruiere\ Rotationsmatrix\ {\tt TM}\ mittels\ {\tt angle}\ und\ {\tt angle.type}\ 4 \rangle
  (ermittle Quantile der gedrehten Daten und retransformiere: xy.q 5)
  ⟨berechne für Box Vektor für Boxhöhe: real.step 6⟩
  ⟨realisiere gewünschte Verschiebung 9⟩
  ⟨erstelle Boxplot 10⟩
 } # end of boxplot2D
```

```
\langle definiere\ Hilfe\ von\ boxplot2D\ 2\rangle \equiv
  \name{boxplot2D}
  \alias{boxplot2D}
  \title{ Boxplot of projection of two dimensional data }
  \description{
    boxplot2D computes summary statistics of a one dimensional
    projection of a two dimensional data set and plots a sloped
    boxplot of the statistics into the scatterplot of the two
    dimensional data set.
  \usage{
      boxplot2D(xy, add.to.plot = TRUE, box.size = 10, box.shift = 0,
      angle = 0, angle.type = "0", tukey.style = TRUE, coef.out = 1.5,
      coef.h.out = 3, design = "sl", na.rm=FALSE, ...)
  \arguments{
    \item{xy}{ \code{(nx2)}-matrix, two dimensional data set }
    \item{add.to.plot}{ if \code{TRUE} the boxplot is added to
        the actual plot of the graphics device }
    \item{box.size}{ height of the box (of the boxplot) }
    \item{box.shift}{ shift of boxplot perpendicular to the
    projection direction }
    \item{angle}{ direction of projection in units defined by
    angle.type }
    \item{angle.type}{
      code{"0"}: angle in (0,2*pi),
      \code{"1"}: clock-like: angle.typ.0==2*pi*angle.typ.1/12,
      \color=2*pi*angle.typ.0==2*pi*angle.typ.2/360,
      \code{"3"}: by fraction: delta.y/delta.x
   }
    \item{tukey.style}{ if \code{TRUE} outliers are defined as described
      in Tukey (1977)
    \item{coef.out}{ outliers are values that are more than
       \code{coef.out*boxwidth} away from the box, default:
       \code{coef.out=1.5} }
    \item{coef.h.out}{ heavy outliers are values that are more
        than \code{coef.h.out*boxwidth} away from the box,
        default: \code{coef.h.out=3}
    \item{design}{ if \code{sl} then parallelogram else box }
    \item{na.rm}{ if TRUE 'NA' values are removed otherwise exchanged by mean}
    \item{\dots}{ additional graphical parameters }
  }
  \references{
      Tukey, J.
      \emph{Exploratory Data Analysis.}
      Addison-Wesley, 1977.
      }
  \author{Peter Wolf }
  \note{ version 08/2003 }
  \seealso{ \code{\link[graphics]{boxplot}}}
  \examples{
   xy < -cbind(1:100, (1:100) + rnorm(100, 5))
   plot(xy,xlim=c(-50,150),ylim=c(-50,150))
   boxplot2D(xy,box.shift=-30,angle=3,angle.typ=1)
   boxplot2D(xy,box.shift=20,angle=1,angle.typ=1)
   boxplot2D(xy,box.shift=50,angle=5,angle.typ=1)
  \keyword{misc}
Ohne Kommentar.
\langle zeichne\ qqf.\ Scatterplot\ 3 \rangle \equiv
```

3

if(!add.to.plot) plot(xy,...)

Als Standardposition wird der Rerotierte Median der rotierten y-Werte verwendet. Nach Tukey: Die Rolle der Quartile übernehmen die Angeln (hinges), ihr Abstand heißt Angelabstand (H-Spread).

Ein Schritt (step) ist das Produkt H-Spread * factor z.B. mit factor=coef.default==1.5

inner fence: [lower hinge - step, upper hinge +step]

Ausreißer: (upper hinge + step, upper hinge + 2step]= (upper hinge + 1.5*H-Spread, upper hinge + 3*H-Spread] =(fence, fence + 1.5*H-Spread] sowie entsprechend links.

heavy outliers: (fence+1.5H-Spread, unendlich) sowie entsprechend links.

5 ⟨ermittle Quantile der gedrehten Daten und retransformiere: xy.q 5⟩≡ xyt<- xy %*% TM

```
##ermittle empirsche Quantile##=
z <- xyt[,1]
if(tukey.style){
  z.stats1 <- boxplot.stats(z,coef=coef.out)</pre>
  z.stats2 <- boxplot.stats(z,coef=coef.h.out)</pre>
  z < -c(min(z), z.stats1$stats, max(z))
  names(z) <- c("min", "fence", "hinge", "median", "hinge", "fence", "max")</pre>
  outlier.heavy <- z.stats2$out
  outlier <- z.stats1$out
  outlier <- outlier[! outlier %in% outlier.heavy ]</pre>
}else{
             c(min(z), quantile(z, c(0.10, 0.25, 0.5, 0.75, 0.90)), max(z))
  names(z)<-c("min",</pre>
                                     ".1", ".25", ".5", ".75", ".9", "max")
xy.q <- cbind(z,median(xyt[,2])) %*% t(TM)</pre>
if(tukey.style){
  xy.out<-if(0<length(outlier)) cbind(outlier,median(xyt[,2])) %*% t(TM) else numeric(0)</pre>
  xy.out.heavy<-if(0<length(outlier.heavy))</pre>
                                        cbind(outlier.heavy,median(xyt[,2])) %*% t(TM) else numeric(0)
}
```

Die Ermittlung eines Höhenvektors für die Box ist gar nicht so einfach. Außerdem werden zwei Designs verfolgt. Soll sich das Erscheinungsbild der Box, wie auch immer die Weltkoordinaten sind und welche Größenverhältnisse der graphische Device aufweist, durch ein Rechteck auszeichnen? Dieses wird erreicht durch design!="s1". Angemessener für viele Probleme werden jedoch parallelogrammförmige Boxen sind, die auch bei einer Veränderung des Device sich entsprechend mitändern und im Weltkoordinatensystem immer Rechtecke sind. Das Parallelgramm soll dann mit jenem übereinstimmen, daß sich einstellt, wenn bei einem quadratischen Device und gleichen Bereichen für x und y der Device gestreckt wird. Für die Berechnung des Boxhöhenvektors sind auf jeden Fall erforderlich: Spannweiten der Wertebereiche der Weltkoordinaten d.xy, Spannweiten des Viewports in Weltkoordinaten d.usr und Maße der Viewports in mm d.pmm. d. für delta deutet auf Differenzen zwischen maximalen und minimalen Werten hin.

```
⟨berechne für Box Vektor für Boxhöhe: real.step 6⟩≡

# d. steht fuer delta.:
d.xy <-apply(xy.q[c(1,7),], 2,diff)
d.usr<-apply(matrix(par()$usr,2,2),2,diff)
d.pmm<-par()$pin*25.4
if(design=="sl"){
   ⟨ermittle Boxhöhenvektor real.step für schräges Design 7⟩
}else{
   ⟨ermittle Boxhöhenvektor real.step für Box-Design 8⟩
}
</pre>
```

In der schrägen Form wird im Weltkoordinatensystem ein Boxplot erstellt und in die geeignete Position gebracht, was in der Regel zu schrägen Erscheinungsbildern führen wird. Im Weltkoordinatensystem liegt jedoch ein Rechteck vor. Zu beachten ist, daß die gewünschte Boxhöhe in mm angegeben wird. Was ist zu tun?

Zunächst wird zu einem Vektor, der entlang des Boxplots zeigt, ein in Weltkoordinaten senkrechter Vektor d.xy.s.mm konstruiert und im mm-Koordinaten überführt. Dann wird ein Einheitsvektor senkrecht zu Verlauf des Boxplots in mm-Koordinaten d.xy.O.s erstellt. d.xy.s.mm zeigt in die gewünschte Richtung und muß proportional zu dem Wunsch box.size verlängert werden. Vorher ist jedoch d.xy.s.mm so zu strecken, daß seine Projektion auf d.xy.O.s einen Einheitsvektor ergibt, und deshalb durch die Länge der Projektion zu teilen: d.xy.s.mm.proj1. Zum Schluß ist eine Retransformation in Weltkoordinaten notwendig.

7 ⟨ermittle Boxhöhenvektor real.step für schräges Design 7⟩≡
 # d.xy.s.mm: bzgl. Welt-coor senkrechten Vektor in mm-coor
 d.xy.s.mm <- (c(-1,1)*rev(d.xy))/d.usr*d.pmm
 # d.xy.0.s: bzgl. mm-coor senkrechten Einheits-Vektor
 d.xy.mm.s <- c(-1,1)*rev(d.xy/d.usr*d.pmm)
 d.xy.0.s <- d.xy.mm.s/(d.xy.mm.s%*%d.xy.mm.s)^0.5
 # Streckung von d.xy.s.mm so, dass Projektion auf d.xy.0.s von Laenge 1
 d.xy.s.mm.proj1 <- d.xy.s.mm / (d.xy.s.mm %*% d.xy.0.s)
 # Boxsize: in mm
 real.step.mm <- box.size * d.xy.s.mm.proj1
Darstellung in Welt-coor</pre>

Die Idee für das Box-Design ist etwas einfacher. Nehme den Vektor, der längs des Boxplots zeigt (d.xy), transformiere diesen in mm-Koordinaten und ermittle den zugehörigen senkrechten Vektor. Verlängere diesen Boxhöhenvektor gemäß der gewünschten box.size. Retransformiere Höhenvektor in Weltkoordinaten.

8 ⟨ermittle Boxhöhenvektor real.step für Box-Design 8⟩≡
 # Einheitsvektor zu d.xy in mm-coor
 d.xy.mm <- d.xy/d.usr*d.pmm
 d.xy.mm.ev<- d.xy.mm/(d.xy.mm%*%d.xy.mm)^0.5
 # Konstruktion eines Boxhoehenvektors der Laenge box.size in mm
 mm.step <- box.size*c(-1,1)*rev(d.xy.mm.ev)
 # Darstellung in Welt-coor
 real.step <- mm.step/d.pmm*d.usr # real.step fuer Boxdickenvektor</pre>

real.step <- real.step.mm/d.pmm*d.usr

Der gewünschte Shift verhält sich zur gewünschten Boxdicke wie der realisierte Shift zur realisierten Boxdicke. Folglich ergibt sich der zu realisierende Shift durch Multiplikation der gewünschten Shiftes mit dem Quotienten aus realisiertem real.step und gewünschter Dicke.

Mit Hilfe der transformierten Quantile xy.q und des halben vertikalen Boxhöhen-Vektors hs – ermittelt aus real.step – ist die Erstellung der Boxplot kein großes Problem mehr. Die Extrema werden durch Punkte und nicht durch Striche dargestellt, da sie andernfalls aufgrund perspektivischer Verzerrungen eher zu Fehlinterpretationen verleiten würden. Der Code für Abschlußstriche ist jedoch in Kommentarzeilen vermerkt worden.

```
\langle erstelle\ Boxplot\ 10 \rangle \equiv
  # Boxplotkonstruktion
  hs<-real.step/2
  xyxy <-c(
            min: xy.q[1,1] - hs[1], xy.q[1,2] - hs[2], xy.q[1,1] + hs[1], xy.q[1,2] + hs[2],
                           ,xy.q[2,2]
                                           ,xy.q[3,1]
                                                           ,xy.q[3,2]
            xy.q[3,1]-hs[1],xy.q[3,2]-hs[2],xy.q[5,1]-hs[1],xy.q[5,2]-hs[2],
            {\tt xy.q[3,1]-hs[1],xy.q[3,2]-hs[2],xy.q[3,1]+hs[1],xy.q[3,2]+hs[2],}
            xy.q[4,1]-hs[1],xy.q[4,2]-hs[2],xy.q[4,1]+hs[1],xy.q[4,2]+hs[2],
            xy.q[5,1]-hs[1],xy.q[5,2]-hs[2],xy.q[5,1]+hs[1],xy.q[5,2]+hs[2],
            xy.q[6,1]
                           ,xy.q[6,2]
                                           xy.q[5,1]
                                                           ,xy.q[5,2]
            \max , xy.q[7,1]-hs[1], xy.q[7,2]-hs[2], xy.q[7,1]+hs[1], xy.q[7,2]+hs[2]
  xyxy<-matrix(xyxy,length(xyxy)/4,4,TRUE)</pre>
  segments(xyxy[,1],xyxy[,2],xyxy[,3],xyxy[,4])
  if(tukey.style){
    if(0<length(xy.out)) points(xy.out[,1],xy.out[,2],pch=1,cex=1.5)</pre>
    if(0<length(xy.out)) points(xy.out[,1],xy.out[,2],pch=18)</pre>
    if(0<length(xy.out.heavy)) points(xy.out.heavy[,1],xy.out.heavy[,2],pch=19,cex=1.5)
  }else{
    points(xy.q[c(1,7),1],xy.q[c(1,7),2],pch=19)
```

3 Einige Demo-Aufrufe

10

```
12 \langle demos \ 12 \rangle \equiv
```

```
data(co2)
plot(co2,xlim=c(1940,2030),ylim=c(300,400))
h<-lsfit(time(co2),co2)
abline(h)
boxplot2D(cbind(time(co2),co2),angle=h$coef[2],angle.type="3",
     box.shift=5,box.size=10,design=0)
cat("RETURN!\n");readline()
data(co2)
plot(co2,xlim=c(1940,2030),ylim=c(300,400))
h<-lsfit(time(co2),co2)
abline(h)
boxplot2D(cbind(time(co2),co2),angle=h$coef[2],angle.type="3",
     box.shift=10,box.size=10,design="sl")
cat("RETURN!\n");readline()
xx<-(1:50); yy<-10*xx+sort(rnorm(50,,30))
bs<-10;bsh<-20;ang<-9;at<-"3"
plot(xx,yy,xlim=c(-50,100),ylim=c(-200,700))
boxplot2D(cbind(xx,yy),angle=ang,angle.type=at,box.size=bs,design=0)
cat("RETURN!\n");readline()
boxplot2D(cbind(xx,yy),angle=ang,angle.type=at,box.size=bs,box.shift=bsh,design=0)
cat("RETURN!\n");readline()
boxplot2D(cbind(xx,yy),angle=-ang,angle.type=at,box.size=bs)
cat("RETURN!\n");readline()
boxplot2D(cbind(xx,yy),angle=-ang,angle.type=at,box.size=bs,box.shift=-bsh)
cat("RETURN!\n");readline()
xxx<-c(-80,-30,xx,95,140)
plot(xxx,xxx,xlim=c(-200,200),ylim=c(-200,200))
boxplot2D(cbind(xxx,xxx),angle=ang,angle.type=at,box.size=bs,box.shift=-bsh)
#boxplot2D(cbind(xx,yy),angle=60,angle.type=at,box.size=30)
#boxplot2D(cbind(xx,yy),angle=30,angle.type=at,box.shift=bsh,box.size=30)
```

