# Einführung mit Fokus auf Statistik

## **Etappen im Analyseablauf**

- 1. Definition der Arbeitsumgebung
- 2. Import der Daten
- 3. Transformationen der Daten
- 4. Exploration (allgemein/Extremwerte/Verteilung) (zurück auf 3?)
- 5. Klassifikation von Skalenniveaus / Verteilungen (basierend auf 3/4)
- 6. Beschreibende Statistik
- 7. Test / Modellierung (kann Schritt 6 beinhalten)
- 8. Reporterstellung

## Definition der Arbeitsumgebung

- Aktivierung benötigter Pakete: library() / pacman::p\_load()
- ggplot Themen: theme\_set() / theme\_update()
- flextable Einstellungen: set\_flextable\_defaults()
- knitr::opts\_chunk\$set()

```
1 set_flextable_defaults(
2    theme_fun = theme_zebra, font.size = 18, font.family = 'Roboto',
3    table.layout = 'autofit',
4    padding.bottom = .2, padding.top = .2, padding.left = 2, padding.right = 2)
5
6    knitr::opts_chunk$set(message = FALSE, warning = FALSE, comment = NA, echo = T
```

## **Import**

- read\_xlsx() / read\_csv() / read\_csv2()
- Optionen beziehen sich auf Trennzeichen, Zahlenformate, Bereiche etc.
- rename() / rename\_with()

3

#### Erster Blick auf die Daten: Problemsuche

```
1 head(rawdata, n = 15) |> flextable()|>
                theme zebra(even body = 'aquamarine', odd body = 'antiquewhite')
                                                          WEIGTH OF
                                                                       weight of
                                       ALMINIUM CAP +
                                       WEIGTH OF
                                                                                  weight of
                        WEIGHT OF
                                                                                             MOISTURE
                                                                         sample
CODE CODE OF
                                                                         before after drying (Wts+d)
                                                                                    sample
                            EMPTY CUP + SAMPLE
                                                      SAMPLE AFTER
                                                                                              CONTENT
OF CUP SAMPLE
                    ALUMINUM(wt)
                                                      DRYING (Wt-AL
                                          (Wt + s)
                                                               +s+d)
                                                                         5.1891
69
        D
                            4.1974
                                           9.3865
                                                              4.7000
                                                                                     4.6865
                                                                                               90.31431
                                                                         5.0770
                            4.1964
                                           9.2734
                                                              4.4670
                                                                                     4.8064
                                                                                               94.67008
                                                                         5.0545
        D
                                           9.2653
                            4.2108
                                                              4.6670
                                                                                     4.5983
                                                                                               90.97438
                                                                                               91.74508
91.58722
114
        D
                            4.2134
                                           9.3146
                                                              4.6345
                                                                         5.1012
                                                                                     4.6801
                                           9.3147
        D
                            4.1856
                                                              4.6171
M1
                                                                         5.1291
                                                                                     4.6976
                                                                                     4.7543
                                           9.3204
                                                              4.5661
a/17
        D
                            4.2090
                                                                         5.1114
                                                                                               93.01366
        D
                            4.1894
                                           9.2661
                                                              4.5778
                                                                         5.0767
                                                                                     4.6883
                                                                                               92.34936
                                                                         5.0912
33
                            4.1968
                                           9.2880
                                                                                               91.96849
        D
                                                              4.6057
                                                                                     4.6823
М
        D
                            4.1535
                                           9.2872
                                                              4.6350
                                                                         5.1337
                                                                                     4.6522
                                                                                               90.62080
E/18/1
                                           9.2476
                                                                                               90.25069
        D
                            4.2534
                                                              4.7403
                                                                         4.9942
                                                                                     4.5073
24/A2
                            4.2066
        D
                                           8.3463
                                                              4.5849
                                                                         4.1397
                                                                                     3.7614
                                                                                               90.86166
13
                            4.1554
                                           9.2384
                                                              4.7402
                                                                         5.0830
                                                                                     4.4982
                                                                                               88.49498
                                           9.2495
                            4.1893
Хp
        Α
                                                              4.7381
                                                                         5.0602
                                                                                     4.5114
                                                                                               89.15458
       Α
                                                                         5.1519
2p/029
                            4.0654
                                           9.2173
                                                              4.6940
                                                                                     4.5233
                                                                                               87.79868
                            4.0641
                                           9.2032
                                                              4.8124
                                                                         5.1391
                                                                                     4.3908
                                                                                               85.43908
```

## Umbenennen von Variablen

```
1 colnames(rawdata)
[1] "CODE OF CUP"
[2] "CODE OF SAMPLE"
[3] "WEIGHT OF EMPTY ALUMINUM (wt)"
[4] "WEIGTH OF ALMINIUM CUP + SAMPLE (Wt + s)"
[5] "WEIGTH OF ALUMINIUM CAP + SAMPLE AFTER DRYING (Wt-AL +s+d)"
[6] "weight of sample before drying (Wts)"
[7] "weight of sample after drying (Wts+d)"
[8] "MOISTURE CONTENT (%)"
          1 rawdata <- rawdata |>
              rename(Region=`CODE OF SAMPLE`) |>
              rename with (.fn = ~str replace all (
                c("GTH"="GHT", 'AL.+UM'= 'Cup',
                  'C[UA]P' = 'Cup','\\(\\w+.*\\)'='',
                  'Cup Cup'='Cup',' '=' ')) |>
                  str to title() |> str trim())
          9 cn()
[1] "Code Of Cup"
                                          "Region"
[3] "Weight Of Empty Cup"
                                          "Weight Of Cup + Sample"
[5] "Weight Of Cup + Sample After Drying" "Weight Of Sample Before Drying"
                                         "Moisture Content (%)"
[7] "Weight Of Sample After Drying"
```

### **Transformationen**

- Ändern oder Erzeugen von Spalten mit mutate() / mutate(across())
- z.B. für log-Transformation, Erzeugen von Faktoren, Text -Umkodierung

| Code Of<br>Cup | Region | Weight Of<br>Empty Cup | Weight Of<br>Cup +<br>Sample | + Sample After | Sample<br>Before Drying | Sample After<br>Drying | Moisture<br>Content (%) | Content<br>(%) |
|----------------|--------|------------------------|------------------------------|----------------|-------------------------|------------------------|-------------------------|----------------|
| 69             | D      | 4.1974                 | 9.3865                       | 4.7000         | 5.1891                  | 0.5026                 | 90.31431                | 9.685687       |
| sample<br>2    | D      | 4.1964                 | 9.2734                       | 4.4670         | 5.0770                  | 0.2706                 | 94.67008                | 5.329919       |
| Α              | D      | 4.2108                 | 9.2653                       | 4.6670         | 5.0545                  | 0.4562                 | 90.97438                | 9.025621       |
| 114            | D      | 4.2134                 | 9.3146                       | 4.6345         | 5.1012                  | 0.4211                 | 91.74508                | 8.254920       |
| M1             | D      | 4.1856                 | 9.3147                       | 4.6171         | 5.1291                  | 0.4315                 | 91.58722                | 8.412782       |

## **Exploration / Variablengruppierung**

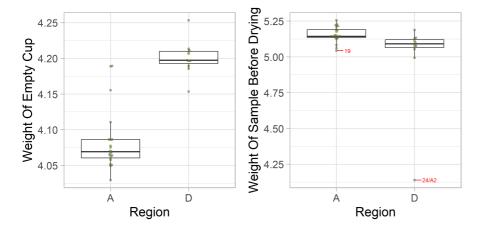
## Exploration (allgemein/Extremwerte/Verteilung)

- ggplot()+geom\_boxplot() / geom\_beeswarm() / geom\_density()
- ks.test() / ksnormal() / shapiro.test()

### Klassifikation nach Skalenniveau / Verteilung

- gaussvars / ordvars / factvars, possibly more...
- Speichern von Variablengruppen, z.B. ColSeeker()

## Exploration: Extremwerte



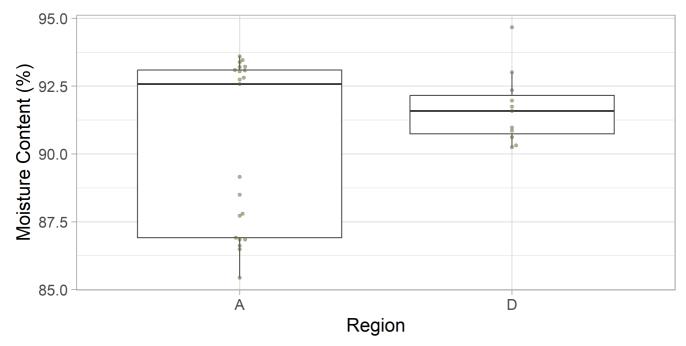
## Behandlung Extremwerte/Ausreißer?

Entfernen ist die schlechteste Option, Korrektur von Eingabefehlern, Ändern der Verteilung oder Winsorizierung...

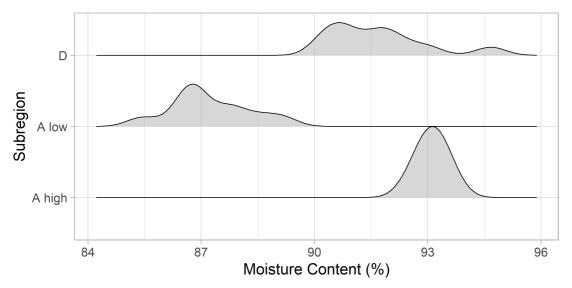


## **Exploration: Unerwartetes**

```
1 ggplot(data = rawdata,
2          aes(x = `Region`,
3          y = `Moisture Content (%)`))+
4          geom_boxplot(outlier.alpha = 0) +
5          geom_beeswarm(alpha=.5, color="darkolivegreen")
```



## **Transformation in Subregionen?**



## **Exploration: Normalverteilung 1**

- Gausssche Glockenkurve / Normalverteilung ist Voraussetzung vieler statistischen Verfahren
- Übliche Tests sind graphische Exploration, Shapiro-Wilk-Test Und Kolmogorov-Smirnov-Test

```
1 p_normal <-
2 shapiro.test(x = rawdata$`Moisture Content (%)`)
3 p_normal</pre>
```

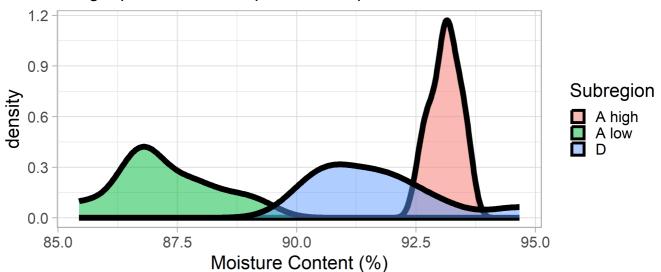
```
Shapiro-Wilk normality test

data: rawdata$`Moisture Content (%)`
W = 0.89133, p-value = 0.003752
```

13

#### p (Shapiro) global = 0.004

A high: p=0.923; A low: p=0.756; D: p=0.207



## **Exploration: Normalverteilung 2**

```
\# A tibble: 7 \times 4
                                     `A high`
                                               `A low`
 Variable
                                     <chr> <chr> <chr>
 <chr>
1 Weight Of Empty Cup
                                    0.989 n.s. 0.444 n.s. 0.697 n.s.
2 Weight Of Cup + Sample
                                   0.785 n.s. 0.980 n.s. 0.019 *
3 Weight Of Cup + Sample After Drying 0.900 n.s. 0.710 n.s. 0.969 n.s.
4 Weight Of Sample Before Drying 0.196 n.s. 0.999 n.s. 0.072 +
5 Weight Of Sample After Drying
                                   0.976 n.s. 0.555 n.s. 1.000 n.s.
6 Moisture Content (%)
                                   0.975 n.s. 0.733 n.s. 0.954 n.s.
7 Dry Content (%)
                                    0.975 n.s. 0.733 n.s. 0.954 n.s.
```

15

## Exploration: Gruppierung der Variablen nach Typ/Verteilung

Skalenniveau bestimmt angemessene Statistiken

Typische Skalenniveaus sind

## Type Entscheidung dokumentieren / reproduzierbar

```
1 gaussvars <- ColSeeker(data=rawdata,namepattern = c('Weight','Content'))</pre>
            gaussvars
$index
[1] 3 4 5 6 7 8 9
$names
[1] "Weight Of Empty Cup"
                                          "Weight Of Cup + Sample"
[3] "Weight Of Cup + Sample After Drying" "Weight Of Sample Before Drying"
                                      "Moisture Content (%)"
[5] "Weight Of Sample After Drying"
[7] "Dry Content (%)"
$bticked
[1] "`Weight Of Empty Cup`"
[2] "`Weight Of Cup + Sample`"
[3] "`Weight Of Cup + Sample After Drying`"
[4] "`Weight Of Sample Before Drying`
[5] "`Weight Of Sample After Drying`"
[C] U`Moiatuma Contant (0.) `U
          1 ordvars <- ColSeeker(namepattern='Weight.+Sample', exclude = 'After')</pre>
          2 ordvars$names
[1] "Weight Of Cup + Sample"
                                      "Weight Of Sample Before Drying"
          1 factvars <- ColSeeker(namepattern='region', casesensitive = FALSE)</pre>
          2 factvars$bticked
               "`Subregion`"
[1] "`Region`"
```

## Modellierung

#### Beschreibende Statistik

- mean() / sd() / meansd()
- median() / quantile() / median\_quart()
- table() / prop.table() / cat\_desc\_stats()

#### **Tests**

- t.test() / lm()+[Aa]nova() / compare2numvars()
- wilcox.test()
- fisher.test() / glm(family=binomial)

## Modellierung: Deskriptiv

Stichprobengröße n: pro Variable, wenn

fehlende Werte auftreten

Mittelwert: zentrale Tendenz, erwarteter

typischer Wert

$$\frac{\sum x}{n}$$

Varianz: Kennwert für

Variabiliät/Heterogenität der Daten

$$\frac{\sum (x - mean)^2}{n - 1}$$

Standardabweichung SD: typische gewichtete

Abweichung vom Mittelwert

$$\sqrt{Var}$$

Standardfehler des Mittelwerts: wie

zuverlässig ist die Mittelwertsschätzung, was wäre die zu erwartende SD der Mittelwerte aus wiederholten Experimenten?

$$\frac{SD}{\sqrt{n}}$$

Median: Trennung der unteren/oberen 50%

der Daten

Quartile: Trennung bei 25%/50%/75% der

Daten (allgemein: Quantile, z.B.Perzentile),

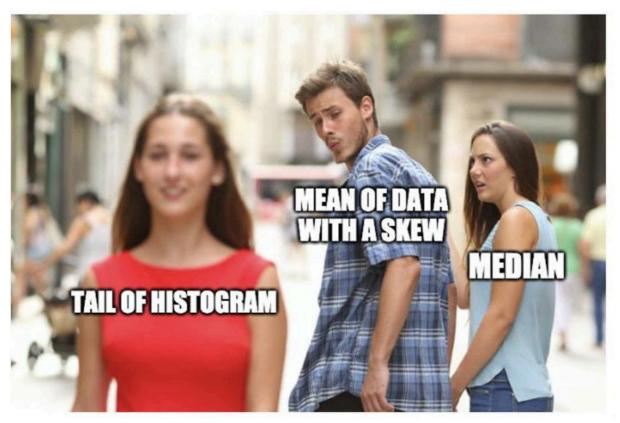
Grundlage des Boxplot

verschiedene

Berechnungsmethoden

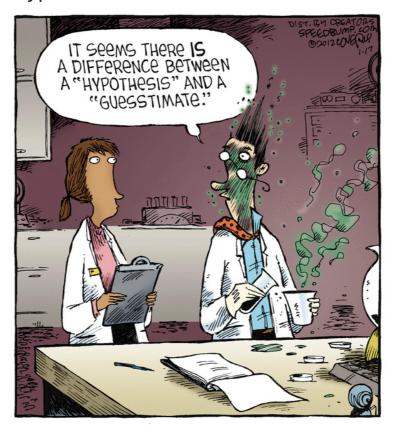
```
1 desc_gauss <- rawdata |>
         2 summarize(across(.cols = gaussvars$names,
             .fns = meansd))
         4 desc gauss
# A tibble: 1 × 7
  `Weight Of Empty Cup` `Weight Of Cup + Sample` Weight Of Cup + Sample After ...¹
                                               <chr>
                      9.2 \pm 0.2
1 \ 4.1 \pm 0.1
                                               4.6 \pm 0.1
# i abbreviated name: 1`Weight Of Cup + Sample After Drying`
# i 4 more variables: `Weight Of Sample Before Drying` <chr>,
    `Weight Of Sample After Drying` <chr>, `Moisture Content (%)` <chr>,
  `Dry Content (%) ` <chr>
          1 desc ord <- rawdata |>
         2 summarize(across(ordvars$names,.fns=~median quart(.x,roundDig = 3))) |>
            pivot longer(everything(),
                         names to = 'Measure', values to = 'Median[1Q/3Q]')
         5 desc ord
\# A tibble: 2 × 2
                                `Median[1Q/3Q]`
 Measure
                               <chr>
 <chr>
1 Weight Of Cup + Sample 9.25 (9.22/9.29)
2 Weight Of Sample Before Drying 5.14 (5.09/5.18)
```

## Deskriptive Statistik sollte zu Verteilung und Daten passen



## Modellierung: Tests

Tests benötigen Hypothesen



## Nullhypothese?

- Arbeitshypothese: Üblicherweise ein erwarteter Effekt!
   z.B. Behandlung senkt den Blutdruck stärker als ein Placebo, transgene Tiere werden adipös, Bioreaktor A ist effizienter als B, Konzentration einer Substanz ist korreliert mit der Reaktionsgeschwindigkeit ...
- Nullhypothese: Dies wird getestet!
   Kein Unterschied / Zusammenhang, Blutdruck unter Therapie = BD unter Placebo

---

## 4 Möglichkeiten:

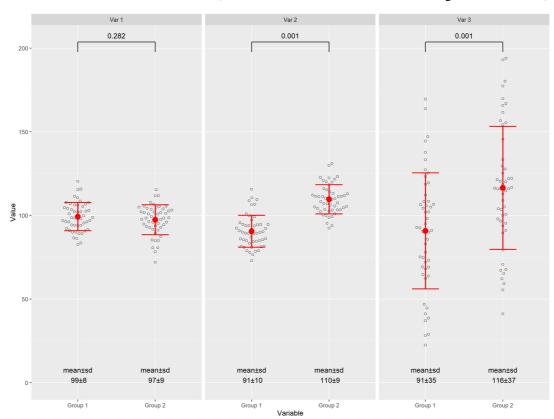
- Nullhypothese korrekt, Test falsch positiv (Fall A): alpha-Fehler
- Nullhypothese korrekt, Test korrekt negativ (Fall B)
- Nullhypothese falsch, Test falsch negativ (Fall C): beta-Fehler
- Nullhypothese falsch, Test korrekt positiv (Fall D)

**Signifikanz**: NICHT Wahrscheinlichkeit von Fall A, sondern Wahrscheinlichkeit der Daten/beobachteten Effekte unter Annahme der NULLhypothese, berechnet aus den Daten, üblicherweise<0.05

**Power**: Wahrscheinlichkeit von Fall D, falls Nullhyothese falsch ist; geschätzt aus Annahmen zu Effektstärke, Variabilitäten und Fallzahl, Berechnung würde Wissen um wahre Unterschiede voraussetzen, üblicherweise = 0.80; daraus leitet sich beta-Fehler-Wahrscheinlichkeit von 0.20 ab!

#### **Testfunktionen**

#### t-Test / Wilcoxon-Test (aka Mann-Whitney U-test)



#### t-Test

- Voraussetzung: Kontinuierliche Daten mit Normalverteilung
- 1 or 2 (unabhängige or abhängige) Stichproben mit/ohne gleiche Varianzen
- wie groß ist der Mittelwertsunterschied relativ zur Unsicherheit der Mittelwerte?

```
t = (mean_1 - mean_2)/SEM
```

• t folgt einer t-Verteilung, das erlaubt die Schätzung der Wahrscheinlichkeit von t unter der NULLhypothese

#### Wilcoxon-test

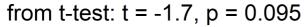
- nichtparametrisch, keine Vereilungsannahme
- basiert auf rang-transformierten Daten
- unempfindlich gegen Extremwerte

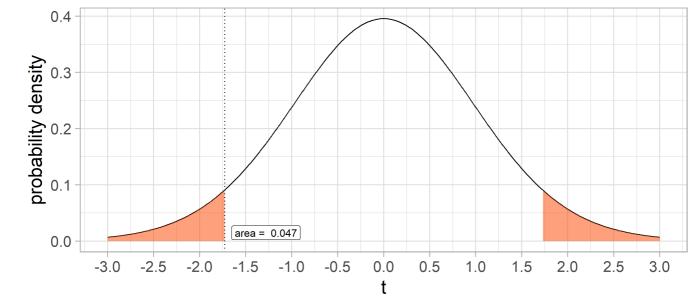
## Test Beispiele: einzelne Variablen

Welch Two Sample t-test

Wilcoxon rank sum exact test data: Moisture Content (%) by Region W = 107, p-value = 0.7547 alternative hypothesis: true location shift is not equal to 0

## Von t zu p





29

## Modellierung: Test 2 / mehrere Variablen

```
Variable
                                                     desc_all
                                                                     Region A
                                                                                      Region D
Weight Of Empty Cup
                                                     4.1 ± 0.1
                                                                     4.1 \pm 0.0
                                                                                      4.2 \pm 0.0
                                                                                                      0.00001
Weight Of Cup + Sample 9.2 \pm 0.2

Weight Of Cup + Sample After Drying 4.6 \pm 0.1

Weight Of Sample Before Drying 5.1 \pm 0.2

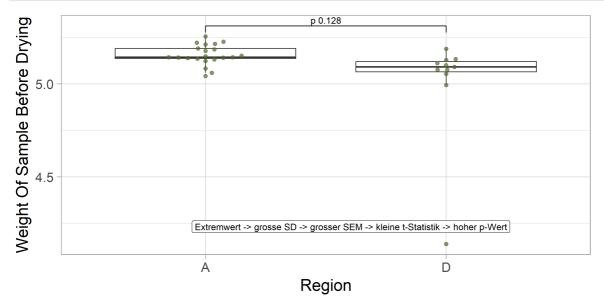
Weight Of Sample After Drying 0.47 \pm 0.
                                                                                      9.2 \pm 0.3
                                                                     9.2 \pm 0.0
                                                                                                      0.74227
                                                                                                      0.42213
                                                                     4.6 \pm 0.2
                                                                                      4.6 \pm 0.1
                                                                                      5.0 \pm 0.3
                                                                                                      0.12830
                                                                     5.2 \pm 0.1
                                                     0.47 ± 0.14 0.50 ± 0.16 0.42 ± 0.07 0.04937
                                                     91 ± 3
Moisture Content (%)
                                                                     90 ± 3
                                                                                      92 ± 1
                                                                                                      0.09465
                                                     9.2 ± 2.7
                                                                     9.7 ± 3.1
                                                                                      8.3 \pm 1.3
Dry Content (%)
```

 Variable
 desc\_all
 Region A
 Region D
 p

 Weight Of Cup + Sample
 9.25 (9.22/9.29) 9.24 (9.22/9.25) 9.29 (9.27/9.31) 0.003

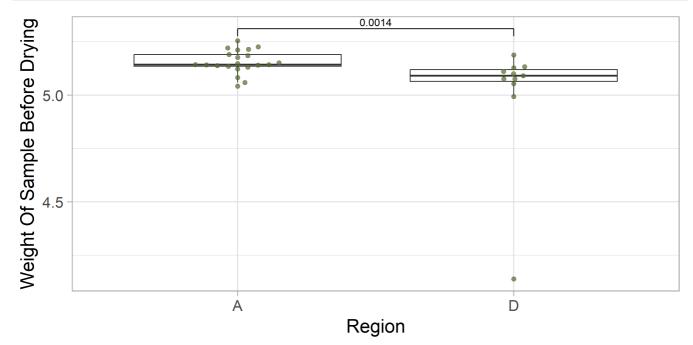
 Weight Of Sample Before Drying
 5.14 (5.09/5.18) 5.14 (5.13/5.20) 5.09 (5.06/5.13) 0.001

## Ergebnisdarstellung



## **Umentscheidung bei Testauswahl?**

```
1 ggplot(rawdata, aes(x = `Region`,y = `Weight Of Sample Before Drying`))+
2    geom_boxplot(outlier.alpha = 0)+
3    geom_beeswarm(alpha=.7, size=2,cex = 2, color="darkolivegreen")+
4    geom_signif(comparisons = list(c(1,2)),test = wilcox.test)
```

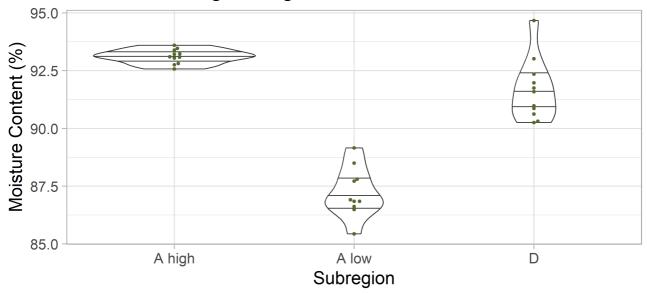


## Modellierung: lineare Modelle 1 / univariable

```
plottmp <- ggplot(rawdata,aes(Subregion,`Moisture Content (%)`))+
geom_violin(draw_quantiles = c(.25,.5,.75))+
geom_beeswarm(color="darkolivegreen")+

ggtitle('Sind alle Teilregionen gleich?')
print(plottmp)</pre>
```

#### Sind alle Teilregionen gleich?



## **ANOVA: Modellbildung**

```
1 rawdata |> group_by(Subregion) |>
2  summarize(MeanMoisture=mean(`Moisture Content (%)`) |> roundR(4)) |>
3  pivot_wider(names_from = Subregion, values_from = MeanMoisture) |>
4  rename_with(~paste('Mean moisture %\n',.x)) |> flextable()|>
5  theme_zebra(even_body = 'aquamarine',odd_body = 'antiquewhite')
```

Mean moisture % Mean moisture % Mean moisture % A high A low D 93.11 87.23 91.67

```
1 lm1<- lm(`Moisture Content (%)`~Subregion, data=rawdata)
2 lm1
```

35

## ANOVA: p-Werte

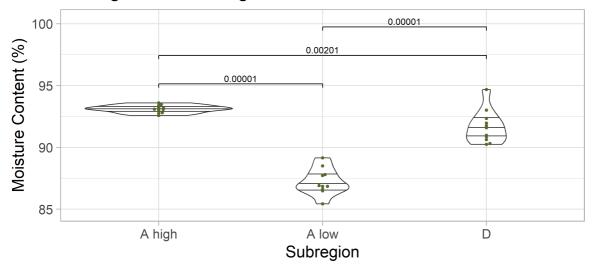
```
1 anova(lm1) |> broom::tidy() |> flextable()|>
2 theme_zebra(even_body = 'aquamarine',odd_body = 'antiquewhite')
```

**term df sumsq meansq statistic p.value** Subregion 2 194.34239 97.1711969 97.76477 0.00000000000001292127 Residuals 29 28.82393 0.9939285

```
A low "0.00001" " NA"
D "0.00201" "0.00001"
```

## Visualisierung ANOVA

#### Teilregionen sind ungleich

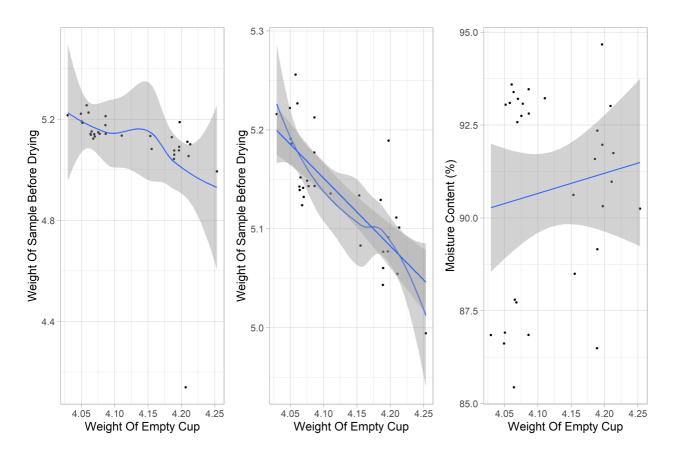


## Analyse von mehr als 1 Zielgröße

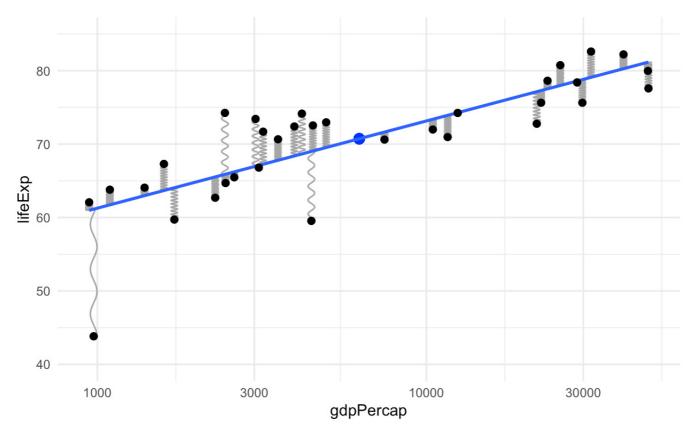
| Variable                           | Subregion A hig     | h Subregion A lo  | w Subregion D   | multivar_p |
|------------------------------------|---------------------|-------------------|-----------------|------------|
| Weight Of Empty Cup                | 4.1 ± 0.0 c         | 4.1 ± 0.1 c       | 4.2 ± 0.0       | 0.001      |
| Weight Of Cup + Sample             | 9.2 ± 0.0           | 9.2 ± 0.0         | 9.2 ± 0.3       | 0.894      |
| Weight Of Cup + Sample After Dryin | $g 4.4 \pm 0.0 bc$  | $4.8 \pm 0.1 c$   | 4.6 ± 0.1       | 0.001      |
| Weight Of Sample Before Drying     | 5.2 ± 0.0           | 5.1 ± 0.1         | $5.0 \pm 0.3$   | 0.095      |
| Weight Of Sample After Drying      | $0.36 \pm 0.02  bc$ | $0.66 \pm 0.06 c$ | $0.42 \pm 0.07$ | 0.001      |
| Moisture Content (%)               | 93 ± 0 bc           | 87 ± 1 c          | 92 ± 1          | 0.001      |
| Dry Content (%)                    | 7 ± 0 bc            | 13 ± 1 c          | 8 ± 1           | 0.001      |

b bedeutet Unterschied zu Gruppe 2, c Unterschied zu Gruppe 3

## **Regression: Scatterplot**



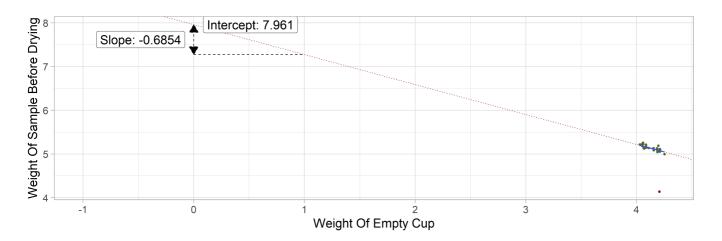
## Regression: Grundlegender Mechanismus



## **Regression: Statistik**

```
1 lm out0 <- lm(`Weight Of Sample Before Drying` ~ `Weight Of Empty Cup`,
                         data=rawdata)
          3 lm_out0
lm(formula = `Weight Of Sample Before Drying` ~ `Weight Of Empty Cup`,
   data = rawdata)
Coefficients:
          (Intercept) `Weight Of Empty Cup`
               10.169
                                      -1.228
          1 # filtering outlier
          2 lm_out <- lm(`Weight Of Sample Before Drying` ~ `Weight Of Empty Cup`,</pre>
                         data=rawdata |> filter(`Weight Of Sample Before Drying`>4.5))
          4 lm_out
lm(formula = `Weight Of Sample Before Drying` ~ `Weight Of Empty Cup`,
   data = filter(rawdata, `Weight Of Sample Before Drying` >
       4.5))
Coefficients:
          (Intercept) `Weight Of Empty Cup`
               7.9612
                                     -0.6854
```

## Regression: Visualisierung



## Regression: Signifikanz

#### 43

## Berichtserstellung

- RMarkdown und quarto sind m\u00e4chtige Werkzeuge f\u00fcr Berichte und Pr\u00e4sentationen
- Export von Abbildungen: ggsave() / png() / pdf()
- Export von Tabellen: write\_xlsx()
- Paket flextable bietet viele Möglichkeiten zur Tabellenformatierung

## Flextable Beispiel

```
1 test_ord |> select(-desc_all) |> rename_with(~str_remove(.,'Code Of ')) |>
2    flextable() |>
3    theme_zebra(even_body = 'aquamarine',odd_body = 'antiquewhite')|>
4    italic(~p<=0.05,j = 1) |> bg(~p<=0.05,j = 4,bg = 'yellow') |>
5    set_caption('Treatment effects, measures following a normal distribution') |
6    add_footer_lines('Significance level is set at 0.05') |>
7    fontsize(size = 12,part = 'footer')
```

 Variable
 Region A
 Region D
 p

 Weight Of Cup + Sample
 9.24 (9.22/9.25) 9.29 (9.27/9.31) 0.003

 Weight Of Sample Before Drying
 5.14 (5.13/5.20) 5.09 (5.06/5.13) 0.001

 Significance level is set at 0.05

45

## Nützliche Werkzeuge

- Auswahl Spalten / Zeilen: select() / pull() / filter() / slice()
- Umformatierung von Tabellen breit <-> lang (z.B. für wiederholte Messungen):

pivot\_longer()/pivot\_wider()

- Reguläre Ausdrücke: str\_replace() / str\_detect() / str\_...
- Zusammenfügen von Textelementen: paste() / str\_glue()
- Anwendung von Funktionen: purrr::map\_xxx