

R-ohjelmoinnin perusteet

Anton Klåvus (2020), converted to bookdown by Juho Kopra (2021)

11.08.2021

Contents

R-kurssi	7
Ohjeita verkkokirjan käyttöön	7
Luntilappu	7
Verkkolähteitä	7
Alkuvalmistelut	9
RStudio	9
R:n ja RStudion asentaminen omalle tietokoneelle	9
RStudion asennus yliopiston koneelle	9
RStudion käyttö	11
Rcourse-paketin asentaminen	13
1 Johdanto	17
1.1 Mikä R on ja mitä sillä tehdään?	17
2 Muuttujat ja vektorit	19
2.1 Muuttujat (variables)	19
2.2 Kommentit	20
2.3 Vektorit (Vectors)	20
2.4 Extra: Alkeistietotyypit ja erikoisarvot	25
3 Tietotyypit	31
3.1 Datakehikko (data.frame)	32
3.2 Matriisi	33
3.3 Tietotyyppien tarkastelu	39
3.4 Extra: Taulukko ja lista	41
4 Datan lukeminen	49
4.1 Tekstitiedostot	49
4.2 Datakehikon tarkastelu	52
4.3 Muut tiedostot	54
5 Datan muokkaaminen	55
5.1 Uuden muuttujan tai rivin luonti datakehikkoon	55

5.2	Osajoukkojen valinta	58
5.3	Faktorit	59
5.4	Extra: Lääketutkimusesimerkki	60
6	Tunnusluvut	63
6.1	Sijaintia kuvaavat tunnusluvut	63
6.2	Yhteen veto datasta (summary)	67
6.3	Varianssi ja keskihajonta	68
7	Todennäköisyysjakaumat R:ssä	71
7.1	Esimerkki: normaalijakauma	72
7.2	Muita jakaumia	73
8	Kuvaajien piirtäminen	75
8.1	Korkean tason piirtofunktiot	75
8.2	Alemman tason grafikkatoiminnot	80
8.3	Kuvaajien piirtäminen käytännössä	88
9	Tilastollinen testaaminen	89
9.1	Testaamisen periaatteita	89
9.2	t-testi	89
9.3	Khiin neliö -testi	92
9.4	Varianssianalyysi	93
9.5	Levenen testi	94
9.6	Shapiro-Wilk -testi	95
10	Lineaariset mallit	97
10.1	Teoria	97
10.2	Esimerkki	98
10.3	Tarkempia tietoja mallista	99
10.4	Ennustaminen	101
10.5	Korrelaatio	102
11	Funktiot	105
11.1	Funktion käsite	105
11.2	R-funktiot	106
11.3	Palautus (return)	110
12	Ehtorakenteet	113
12.1	Loogiset operaattorit	113
12.2	Ehtorakenteet	116
12.3	Alkioiden poimiminen vektorista tietyn ehdon perusteella	120
13	Toistorakenteet (loops)	123
13.1	For-silmukka	123
13.2	While-silmukat	127
13.3	Sisäkkäiset silmukat (nested loops)	128

13.4 Iterointiin puuttuminen: next ja break	129
13.5 Apply-funktiot	132
13.6 Vinkkejä tehtäviin	133
14 Numeeriset menetelmät	135
14.1 Optimointi	135
14.2 Funktion juurten etsintä	139
14.3 Numeerinen integrointi	139

R-kurssi

Täältä löydät suomenkielisen materiaalin, joka tukee JYU:n ja UEF:in yhteisen R-kurssin suorittamista.

Anton Klåvusin vuonna 2020 kirjoittamaa ansiokasta materiaalia on kehitetty lukukauden 2021-22 R-kielen kurssia ajatellen. Materiaalia on täydennetty tarvittavin osin. Samalla materiaali on muunnettu bookdown-verkkokirjamuotoon.

Ohjeita verkkokirjan käyttöön

Tämä opiskelumateriaali on luotu bookdown-verkkokirjaohjelman avulla. Kirjaa voi lukea verkkoselaimella ja se toimii myös puhelimella. Sivun ylälaidasta löydät asetuksia, joilla voit tehdä ainakin seuraavia asioita: piilottaa ja näyttää vasemman sivuvalikon, etsiä dokumentista hakusanalla, muuttaa fonttia, muuttaa fontin kokoa ja sivun väritystä sekä ladata monisteen pdf-muodossa.

Lunttilappu

Tämän materiaalin ohessa kannattaa käyttää apuna nk. Cheat Sheetiä eli "lunttilappua". Lunttilapusta on helppo tarkastaa miten jokin jo oppimasi asia tehdään R:ssä, jos et vielä muista kunnolla kyseistä asiaa. Internetistä löytyy Cheat Sheetejä useisiin R-paketteihin ja muihin kokonaisuuksiin, mutta tässä käytetään Base R Cheat Sheetiä. Lataa Base R Cheat Sheet itsellesi painamalla tästä. Suosittelen tulostamaan lunttilapun värillisenä kaksipuoleisena. Mikäli mahdollista niin A3-kokoisena tulosteena teksti näkyy parhaiten.

Verkkolähteitä

Tämä materiaali on tarkoitettu riittäväksi materiaaliksi kurssille. Tässä kuitenkin joitakin verkosta löytyviä lähteitä, joista voi olla apua.

- Tutorialspoint Soveltuu R:n opiskeluun englannin kielellä, jos osaa entuudestaan jo vähän ohjelmoida.

Alkuvalmistelut

RStudio

Nykyisin R-kielen kurssilla käytetään ensisijaisesti RStudiota, mutta muutkin ohjelmointiympäristöt toimivat. RStudio on ohjelmointiympäristö eli IDE (Integrated Development Environment), joka tekee koodaamisesta huomattavasti mukavampaa. RStudio on saatavilla useille käyttöjärjestelmille ja se on ilmainen ohjelma.

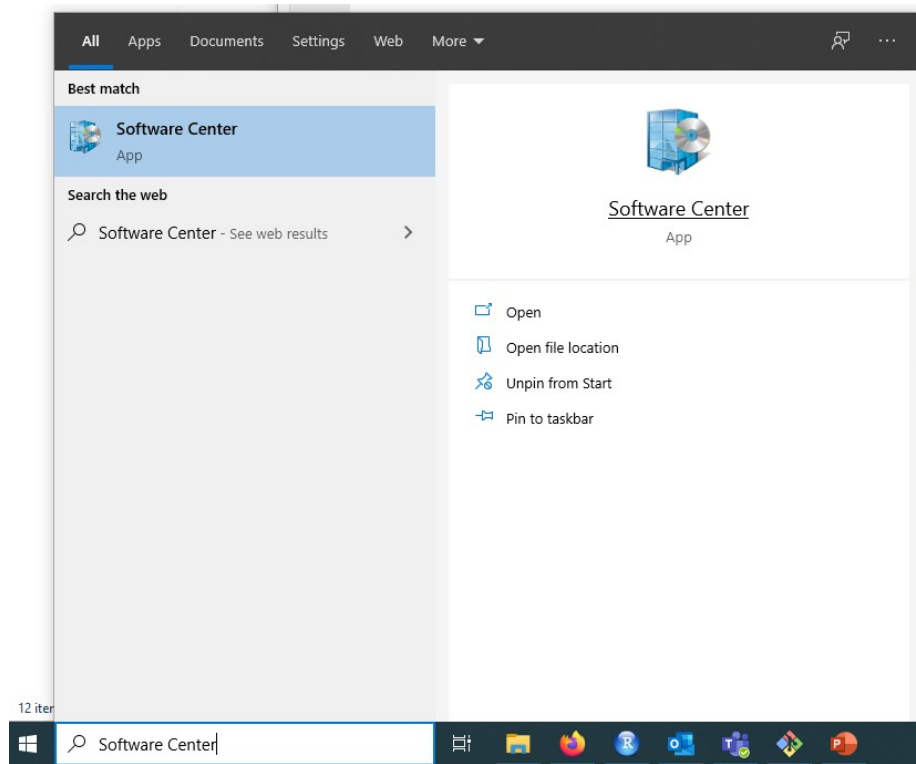
R:n ja RStudion asentaminen omalle tietokoneelle

Mene seuraavalle sivulle, josta asennat ensin R:n (1. vaihe) ja sitten RStudio Desktop omalle käyttöjärjestelmällesi. Ellet tiedä käyttöjärjestelmääsi, on se luultavimmin Windows 10.

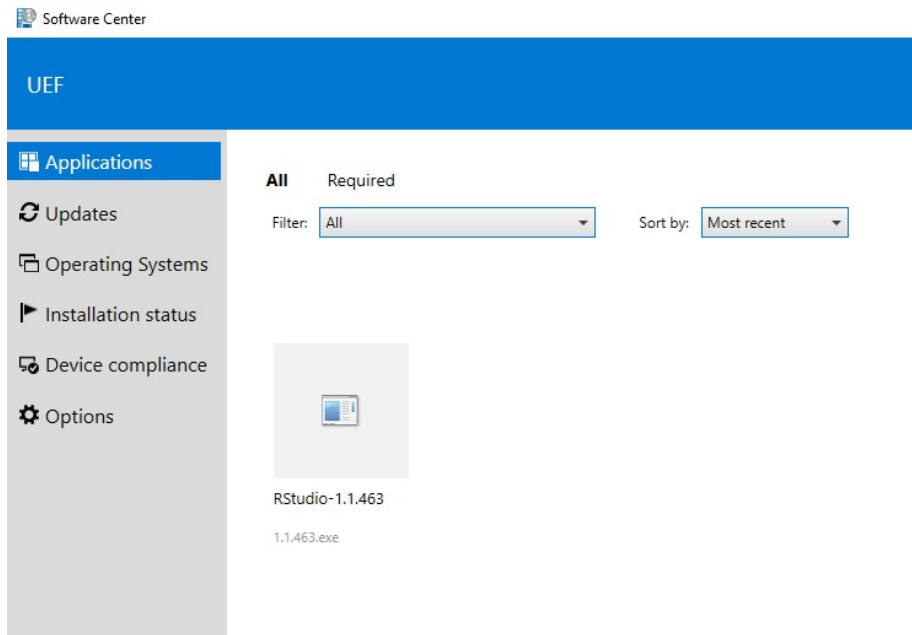
<https://www.rstudio.com/products/rstudio/download/#download> (avautuu uuteen ikkunaan)

RStudion asennus yliopiston koneelle

Mikäli et halua käyttää omaa tietokonettasi kurssin suorittamiseen, niin RStudio saa asennettua UEF:in koneilla Software Centerin kautta. Software Center löytyy Windowsin omalla haulla.

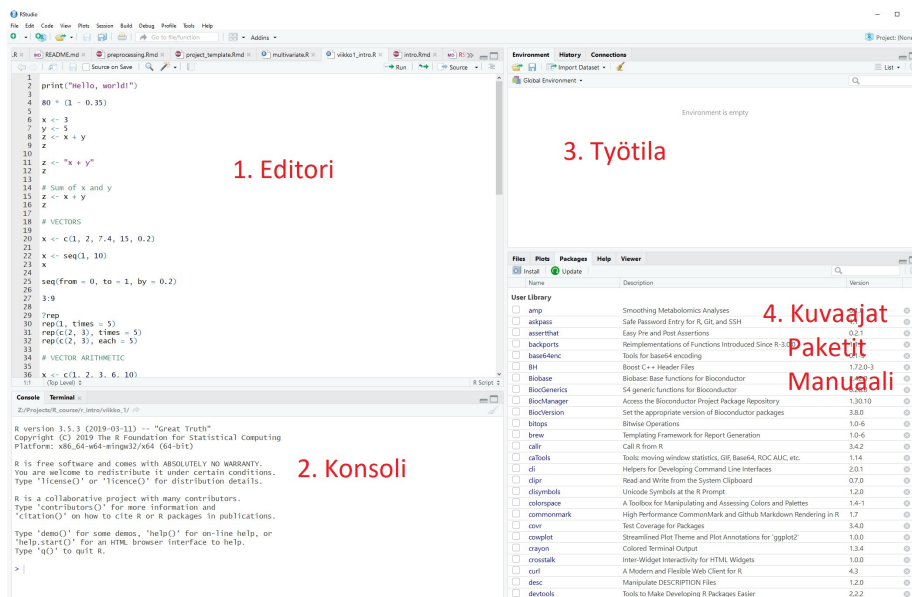


RStudio:n voi asentaa Software Centeristä, ja RStudios pitäisi sen jälkeen olla käytettävissä.



RStudio käyttö

RStudio näkymässä on neljä osaa:



1. Editori.

Editorilla kirjoitetaan R-koodia sisältäviä tiedostoja, eli R-skriptejä. Uuden skriptin saa auki painamalla File -> New File -> R Script (tai Ctrl + Shift + N). Skripteihin tutustutaan myöhemmin kurssilla, mutta ne ovat yksinkertaisuudessaan kokoelma R-komentoja, jotka yhdessä tekevät jotain, esimerkiksi analysoivat jonkin tutkimusprojektin datan tai piirtävät valmiista tuloksista kuvaajia.

Editoriin kirjoitettua koodia voi ajaa rivi kerrallaan painamalla rivin kohdalla Ctrl + Enter. Useamman rivin voi myös maalata ja suorittaa kerrallaan. Yläreunassa oleva "Source"-nappi ajaa kaiken nykyisen tiedoston koodin.

R-skriptejä voi tallentaa ihan kuin muitakin tiedostoja. R-skriptien tiedostopääte on .R

2. Konsoli.

Konsolissa "ajetaan" eli suoritetaan R-komentoja. Jos editoriin kirjoitettua koodia ajetaan, RStudio ajaa komennot automaattisesti konsolissa. Konsolissa pelkkä Enter riittää koodirivin suorittamiseen. Voit kokeilla kirjoittaa konsoliin jonkun laskutoimituksen, kuten $2 * 3$ ja painaa Enter, jolloin tuloksen pitäisi tulostua konsoliin. Voit myös kokeilla kirjoittaa laskuja editoriin, ja painaa Ctrl + Enter, jolloin pitäisi tapahtua sama asia.

Suurin ero konsolin ja editorin välillä on se, että **konsoliin kirjoitetut komennot eivät tallennu mihinkään tiedostoon**. Jos siis haluat säilyttää koodisi, se tulee kirjoittaa editoriin ja tallentaa .R-tiedostoon. Saman istunnon aikana tehtyjä komentoja voi konsolissa selata ylös- ja alas-nuolilla.

Moodlen ohjeissa ja videoissa käytetään R:ää puhtaasta R-konsolista. Voit siis kuvitella, että kurssin videoissa näkyy vain RStudion tämä osa, ja muut osat ovat vain helpottamassa työtäsi.

3. Työtila

Työtilassa näkyvät R-istunnon aikana luodut muuttujat. Näistä lisää ensimmäisen viikon materiaalissa.

4. Kuvaajat / Paketit / Manuaali

Tässä osassa on monta käytännöllistä välilehteä:

- Plots: tänne ilmestyvät R:llä piirretyt kuvaajat
- Packages: Täältä voi hallita asennettuja paketteja (alla ohjeet tällä kurssilla tarvittavien pakettien asennukseen)
- Help: Täällä voi selata R:n manuaalia, jossa on ohjeet jokaiselle R-komennolla. Voit kokeilla ajaa editorissa tai konsolissa komennon `?print`, joka avaa `print`-funktion ohjesivun.

Kun tehtävät tallentaa tällä tavalla, voi ensi kerralla vain yksinkertaisesti ajaa skriptin haluamaansa tehtävään asti.

Rcourse-paketin asentaminen

R-paketit

R-ohjelmoinnissa asennetaan usein R-paketteja. Paketit ovat kokonaisuuksia, jotka lisäävät R:ään ominaisuuksia. Esimerkiksi tälle kurssille tarvittava paketti sisältää harjoitustehtäviä kurssin aihepiireistä sekä loppukokeen, jonka perusteella kurssin suoritus arvioidaan.

Asentaminen

Rcourse-paketti asennetaan suorittamalla seuraava koodi R:ssä. Kopioi koodi joko R-skriptiin ja aja se tai kopioi se suoraan Console-ikkunaan ja paina Enter-näppäintä.

```
source(url("http://users.jyu.fi/~santikka/Rcourse/install.R"))
```

Tämän jälkeen paketti tulee ottaa käyttöön

```
library(Rcourse)
```

Komento `info()` tulostaa paketin ohjeet (ensimmäisellä käyttökerralla kieli on englanti). Voit vaihtaa kielen suomeksi näin:

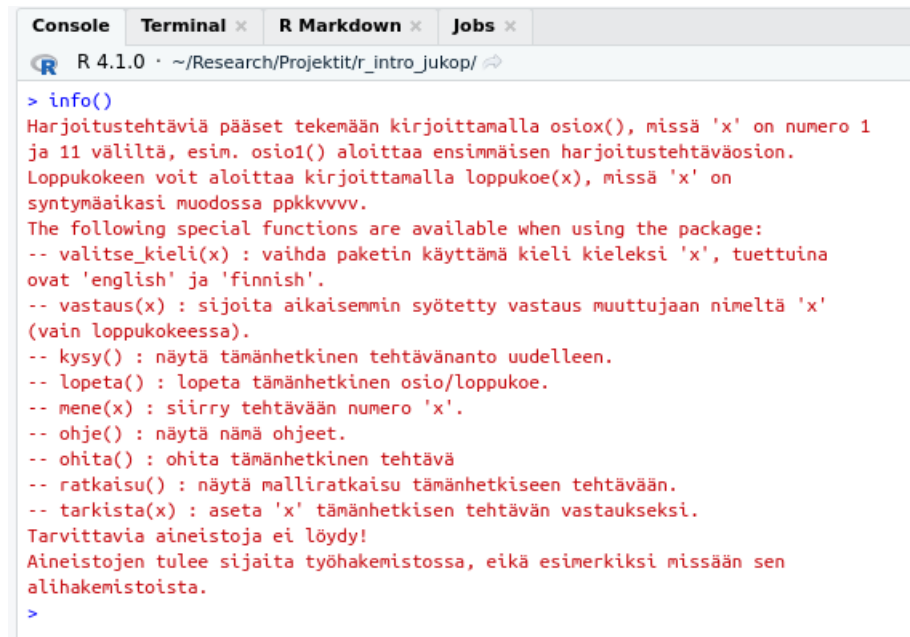
```
select_language("finnish")
```

Jos haluat, että kielivalinta säilyy R-istunnosta toiseen, tulee asettaa seuraava argumentti:

```
select_language("finnish", save_selection = TRUE)
```

Huomaa, että kielen vaihtuessa myös joidenkin pakettiin liittyvien funktioiden nimet vaihtuvat. Tarkastele vielä suomenkielisiä komentoja:

```
info()
```



```

R 4.1.0 · ~/Research/Projektit/r_intro_jukop/

> info()
Harjoitustehtäviä pääset tekemään kirjoittamalla osiox(), missä 'x' on numero 1
ja 11 väliltä, esim. osio1() aloittaa ensimmäisen harjoitustehtäväosion.
Loppukokeen voit aloittaa kirjoittamalla loppukoe(x), missä 'x' on
syntymäaikasi muodossa ppkkvvvv.
The following special functions are available when using the package:
-- valitse_kieli(x) : vaihda paketin käyttämä kieli kieleksi 'x', tuettuina
ovat 'english' ja 'finnish'.
-- vastaus(x) : sijoita aikaisemmin syötetty vastaus muuttujaan nimeltä 'x'
(vain loppukokeessa).
-- kysy() : näytä tämänhetkinen tehtävänanto uudelleen.
-- lopeta() : lopeta tämänhetkinen osio/loppukoe.
-- mene(x) : siirry tehtävään numero 'x'.
-- ohje() : näytä nämä ohjeet.
-- ohita() : ohita tämänhetkinen tehtävä
-- ratkaisu() : näytä malliratkaisu tämänhetkiseen tehtävään.
-- tarkista(x) : aseta 'x' tämänhetkisen tehtävän vastaukseksi.
Tarvittavia aineistoja ei löydy!
Aineistojen tulee sijaita työhakemistossa, eikä esimerkiksi missään sen
alihakemistoista.
>

```

Aloita sitten osion 1 harjoitustehtävien suorittaminen komennolla

```
osio1()
```

Kun olet suorittanut harjoitusosion 1, voit jatkaa seuraavaan osioon. Osiot 1-8 ovat pakollisia (tentit kysyvät näiden osioiden sisältöjä) ja osiot 9-11 ovat lisämateriaalia kiinnostuneille (ei kysytä tentissä).

Opiskelu ja tenttiminen Rcourse-paketin avulla

Kurssin harjoitustehtävät suoritetaan käyttäen Rcourse-pakettia, eli 1. osion voi aloittaa komennolla

```
osio1()
```

Lisäksi tenttiminen onnistuu vastaavasti funktiolla `loppukoe(x)`, mutta tällöin merkin `x` tilalle on annettava oma syntymäaika muodossa “dd/mm/yyyy”. Esim. henkilö joka on syntynyt 1. tammikuuta 1990 antaisi

```
loppukoe("01/01/1990")
```

Tehtävien tallentaminen skripteihin RStudiolla

Suurin osa kurssin tehtävistä on melko lyhyitä, joten ne voi tarvittaessa tehdä suoraan konsoliin. Suosittelen kuitenkin kirjoittamaan varsinkin pidemmät ja monimutkaisemmat tehtävät muistiin editoriin. Suosittelenkin tekemään

jokaista osiota varten erillisen R-skriptin, joka sisältää itse tehtävien tarvitseman koodin sekä palautuskomennot. Tällainen skripti näyttää jotakuinkin tältä:

```
# Teht 1
vast <- 1
tarkista(vast)

# Teht 2
vast <- c(1, 2, 3)
tarkista(vast)

# Teht 3
vast <- "jotain"
tarkista(vast)
```

Mikäli käytät nimen `vast` sijasta jotain muuta nimeä, niin sinun on käytettävä samaa nimeä myös `tarkista`-funktion argumenttina!

Chapter 1

Johdanto

1.1 Mikä R on ja mitä sillä tehdään?

Ohjelmoinnin tavoitteena on kirjoittaa eli koodata ohjelma, joka suorittaa jonkun halutun tehtävän. Ohjelma koostuu useista komennoista, joista jokainen tekee jotain hyvin yksinkertaista.

R on tehty ensisijaisesti tilastotiedettä ja data-analyysiä varten. R:llä kirjoitetaan yleensä lyhyitä ohjelmia, joita kutsutaan skripteiksi. R:llä ei siis ole tarkoitus kehittää esimerkiksi pelejä, tai muita ohjelmia joissa on graafinen käyttöliittymä, kuten vaikkapa Photoshop. R ei myöskään ole web-ohjelmointiin tarkoitettu kieli (vaikka oikeilla paketeilla R:lläkin pystyy tekemään web-sovelluksia).

R on korkean tason ohjelmointikieli. Tämä tarkoittaa sitä, että R:ssä on paljon valmiita komentoja, joiden “alta” löytyy paljon lisää koodia, johon R-ohjelmoijan ei kuitenkaan tarvitse itse koskea. Esimerkiksi tilastollinen t-testi vaatii useita matemaattisia välivaiheita, mutta R-ohjelmoija voi suorittaa testin yhdellä komennolla (`t.test`) joka antaa kaikki tarvittavat tiedot testistä.

R:n käyttöä ja ohjelmointia oppii parhaiten tekemällä. Tässä dokumentaatiossa on tekstin väliin upotettu R-koodia harmaissa laatikoissa, kuten alla olevassa esimerkissä. Kahdella ruudulla eli `##`-merkinnällä alkavat rivit eivät ole koodia vaan koodin ajamisen aiheuttamia tulosteita (output). Otetaan ensimmäiseksi esimerkiksi klassinen “Hello, world!”-komento:

```
print("Hello, world!")
```

```
## [1] "Hello, world!"
```

`print`-funktio tulostaa sille annetun tekstin konsoliin. `print` on kätevä funktio mm. ohjelman toiminnan testaamiseen ja pidemmän ohjelman etenemisen seurantaan. R:ää voi käyttää myös laskimen sijaan. Alla olevassa esimerkissä

lasketaan kuinka paljon jää hintaa 80 euron hintaiselle tuotteelle 35% alennuksen jälkeen.

```
80 * (1 - 0.35)
```

```
## [1] 52
```

Yksittäisten komentojen ajamisesta ei kuitenkaan ole yleensä hyötyä, ellei tuloksia voi tallentaa johonkin. Ohjelmointikielissä tietoja tallennetaan muuttujiin, joita käsitellään seuraavaksi.

Chapter 2

Muuttujat ja vektorit

2.1 Muuttujat (variables)

Muuttujat (variables) ovat yksi tärkeimmistä ohjelmointikielien rakenteista. Muuttujien tehtävä on säilyttää tietoa ja tuloksia edellisistä laskutoimituksista. Alla on yksinkertainen esimerkki muuttujien käytöstä R:ssä.

```
x <- 3
y <- 5
z <- x + y

z
```

```
## [1] 8
```

Edellisessä esimerkissä **sijoitetaan (assign)** eli tallennetaan muuttujaan x arvo 3 ja muuttujaan y arvo 4. Sen jälkeen muuttujien x ja y summa sijoitetaan muuttujaan z, jonka jälkeen tulostetaan muuttujan z arvo. <- on R:n **sijoitusoperaattori** (myös yhtä kuin-merkki = toimii melkein aina, mutta <- merkin käyttöä suositellaan vahvasti).

Mutta miten muuttujan z arvo tulostui konsoliin, vaikka koodissa ei käytetty funktiota **print**? R:n erikoisominaisuus moneen muuhun ohjelmointikieleen verrattuna on se, että print-käskyä ei tarvitse aina kirjoittaa, vaan pelkästään muuttujan (tai laskutoimituksen) kirjoittaminen tulostaa arvon konsoliin, kuten alla oleva koodi havainnollistaa:

```
z
print(z)

x + y
print(x + y)
```

```
3 + 5  
print(3 + 5)
```

Muuttujiin voi sijoittaa muutakin kuin yksittäisiä lukuja, kuten merkkijonoja (strings), vektoreita, tai paljon monimutkaisempiakin rakenteita.

```
x <- "Hello world"  
x
```

```
## [1] "Hello world"
```

2.2 Kommentit

Myöhemmin vastaan tulevassa koodissa käytetään kommentteja. Kommentit ovat koodin ohien kirjoitettua tekstiä, joka ei ole ohjelmointikieltä, ja joka ohitetaan koodia ajettaessa. Kommenttien tarkoitus on kuvailla koodin toimintaa. Oman koodin kommentointia on hyvä harjoitella alusta lähtien, vaikka ensimmäisten tehtävien koodi onkin hyvin yksinkertaista. R:ssä kommentit merkataan #-symbolilla. Edellinen esimerkki kommentoituna voisi näyttää jotakuinkin tältä:

```
# Assign arbitrary numbers to two variables  
x <- 3  
y <- 5  
# Sum of two variables  
z <- x + y  
# Print the results  
z
```

```
## [1] 8
```

2.3 Vektorit (Vectors)

Nyt kun muuttujat ovat tuttuja, voimme siirtyä käsittelemään vektoreita. R:n vektorit ovat yksinkertaisia järjestettyjä tietorakenteita, jotka koostuvat alkioista (elements), esimerkiksi desimaaliluvuista. Alla oleva esimerkki sijoittaa muuttujaan x vektorin, joka sisältää 5 lukua.

```
x <- c(1, 2, 7.4, 15, 0.2)  
x
```

```
## [1] 1.0 2.0 7.4 15.0 0.2
```

Yksinkertaisin tapa tehdä vektori R:ssä on käyttää c-funktiota, joka luo vektorin, jossa on sille annetut arvot annetussa järjestyksessä. Monet R-kielen komennot ja funktiot luovat vektoreita, alla muutama esimerkki:

```
# Regular sequences
seq(1, 10)

## [1] 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
seq(0, 1, by = 0.2)

## [1] 0.0 0.2 0.4 0.6 0.8 1.0
seq_len(6)

## [1] 1 2 3 4 5 6
3:9

## [1] 3 4 5 6 7 8 9
# Repeat values
rep(1, 5)

## [1] 1 1 1 1 1
rep(c(1, 2), 3) # Repeat vector c(1, 2) 3 times

## [1] 1 2 1 2 1 2
rep(c(1, 2, 3), 3) # Repeat all values in vector c(1, 2, 3) 3 times

## [1] 1 2 3 1 2 3 1 2 3
```

2.3.0.1 Vektorilaskentaa

Vektoreilla laskeminen on usein hyvin intuitiivista (lisää vaaranpaikoista myöhemmin). Kun vektoriin kohdistetaan laskutoimintoja, sama operaatio tehdään kaikille vektorin alkioille (engl. vectorization).

```
x <- c(1, 2, 3, 6, 10)
x * 2

## [1] 2 4 6 12 20
x / 2 + 1

## [1] 1.5 2.0 2.5 4.0 6.0
```

Entä jos vektoreita lisää toisiinsa, tai kertoo keskenään? Jos vektorit ovat samanpituisia, operaatio toteutetaan alkio kerrallaan. Jos vektorit ovat eripituisia, R yrittää kierrättää (recycle) lyhyempää vektoria niin, että siitä tulee yhtä pitkä kuin pidempi vektori. Tämän jälkeen operaatio suoritetaan alkio kerrallaan (itse asiassa näin tapahtui myös aiemmissa esimerkeissä, kun vektori kerrottiin yksittäisellä luvulla. R:ssä yksittäiset luvut ovat vektoreita, joiden pituus on 1). Jos kierrätys ei onnistu, eli pidemmän vektorin pituus ei ole jaollinen lyhyemmän pituudella, R antaa virheilmoituksen.

```
x <- c(1, 2, 3, 6, 10, 2)
y <- c(1, 1, 1, 3, 3, 3) # or rep(c(1, 3), each = 3)
z <- c(2, 4)
```

```
x + y # Element-wise sum
```

```
## [1] 2 3 4 9 13 5
```

```
x * y # Element-wise multiplication
```

```
## [1] 1 2 3 18 30 6
```

```
x + z
```

```
## [1] 3 6 5 10 12 6
```

R:ssä on myös paljon funktioita, joilla voi laskea vektoreista erilaisia tunnuslukuja, kuten keskiarvon, mediaanin, keskihajonnan jne.

```
x <- c(1, 2, 3, 6, 10, 2)
# Sample mean (average)
mean(x)
```

```
## [1] 4
```

```
# Standard deviation
sd(x)
```

```
## [1] 3.405877
```

```
# Sum
sum(x)
```

```
## [1] 24
```

2.3.1 Ei-numeeriset vektorit

2.3.1.1 Merkkijonovektorit

Vektorien ei ole pakko sisältää lukuja. Vektorit voivat sisältää esimerkiksi merkkijonoja, kuten alussa nähty "Hello, world!". Merkkijonotyyppin nimi R:ssä on `character`.

```
x <- c("Hello, world!", "R is the best", "I", "like", "programming", "!")
x
```

```
## [1] "Hello, world!" "R is the best" "I" "like"
## [5] "programming" "!"
```

Merkkijonovektoreiden muokkausta varten on omia funktiota, tärkeimpinä `paste` ja `paste0`, jotka yhdistävät merkkijonoja toisiinsa. Myös numeerisia vektoreita voi antaa näille funktioille, ja ne muutetaan merkkijonoiksi.

```
first_names <- c("Diana", "Peter", "Bruce")
last_names <- c("Prince", "Parker", "Wayne")
paste(first_names, last_names)

## [1] "Diana Prince" "Peter Parker" "Bruce Wayne"
students <- paste0("Student_", 1:5)
```

2.3.1.2 Loogiset vektorit

Kolmas yleinen vektorityyppi on looginen vektori, joka sisältää arvoja `TRUE` eli tosi tai `FALSE` eli epätosi. Loogisia vektoreita käytetään yleensä joko merkitsemään binäärisiä muuttuja (esimerkiksi paastosiko koehenkilö ennen näytteenottoa) tai vektorien ja matriisien indeksoinnissa (tästä lisää pian). Tällöin loogisia vektoreita syntyy erilaisten loogisten operaattorien avulla:

```
x <- c(1, 2, 3, 6, 10, 2)

x > 3 # Is the element of x greater than 3?

## [1] FALSE FALSE FALSE TRUE TRUE FALSE
x >= 3 # Greater or equal to three=

## [1] FALSE FALSE TRUE TRUE TRUE FALSE
x == 6 # Equal to 6?

## [1] FALSE FALSE FALSE TRUE FALSE FALSE
x != 2 # Not equal to 2?

## [1] TRUE FALSE TRUE TRUE TRUE FALSE
```

2.3.1.3 Loogiset vektorit ja matematiikka

Jos loogiselle vektorille tekee operaation, joka odottaa numeerista vektoria, R muuttaa automaattisesti arvot `TRUE` ykkösiksi ja arvot `FALSE` nolliksi. Tämä on erityisen hyödyllistä käytettäessä funktiota `sum`. Tällä tavalla saadaan helposti tietää esim. kuinka moni vektorin alkio täyttää tietyn ehdon:

```
x <- c(1, 3, 5, 2, 19)
above_3 <- x > 3

# Logical vector automatically converted to numeric
x + 1

## [1] 2 4 6 3 20
# how many elements of x are smaller than 10?
sum(x < 10)
```

```
## [1] 4
```

2.3.2 Vektorien indeksointi ja osajoukon valinta

Usein vektorista halutaan poimia vain tietyt arvot, esimerkiksi vain ensimmäiset 5 arvoa, tai vain arvot, jotka täyttävät tietyt ehdot. R:ssä vektorin indeksointiin käytetään hakasulkeita []. Yleisin indeksointitapa on antaa hakasulkeiden sisään vektori kokonaislukuja, jotka vastaavat niiden alkoiden järjestyslukuja, jotka vektorista halutaan poimia (HUOM R:ssä indeksointi alkaa ykkösestä, ei nollostasta!). Toinen vaihtoehto on käyttää loogista vektoria, jolloin vektorista poimitaan ne alkiot, joiden kohdalla loogisen vektorin arvo on TRUE. Tämä on yksinkertaisempaa kuin miltä se kuulostaa:

```
x <- c(1, 2, 3, 6, 10, 2)

# Picking exact elements
x[2:3] # Second and third values

## [1] 2 3

x[c(4, 5, 1)] # Note that the order does not have to be increasing

## [1] 6 10 1

# Using logical vector as condition
x[x > 3]

## [1] 6 10

# The condition can be based on another vector
characters <- c("Yoda", "C-3PO", "Rey", "R2-D2", "Anakin", "Baby Yoda")
heights <- c(66, 175, 170, 109, 183, 40.5)
# Only characters shorter than 120 cm
characters[heights < 120]

## [1] "Yoda"      "R2-D2"      "Baby Yoda"
```

2.3.3 Puuttuvat arvot

Monessa tutkimusprojektissa törmätään syystä tai toisesta jossain vaiheessa puuttuviin arvoihin. Hyvä esimerkki ovat seurantatutkimukset, jossa usein seurannan lopussa on jäljellä vähemmän koehenkilöitä kuin alussa.

Puuttuvia arvoja merkitään R:ssä symbolilla NA (not available). Puuttuvat arvot noudattavat yksinkertaista logiikkaa: mikä tahansa operaatio NA:lle antaa tulokseksi NA. Funktiot, jotka operoivat vektoreilla, kuten `sum` tai `mean` voidaan erikseen asettaa poistamaan puuttuvat arvot ennen summan, keskiarvon tms. laskemista.


```
missing <- c(1, 2, NA, 4, NA, 6)
full <- seq(1, 6)
```

```
# Addition with NA returns NA
missing + full
```

```
## [1]  2  4 NA  8 NA 12
```

```
# Sum of vector with NAs returns NA
sum(missing)
```

```
## [1] NA
```

```
# Removing NAs before summation
sum(missing, na.rm = TRUE)
```

```
## [1] 13
```

HUOM! Funktio `is.na` tarkistaa, onko jokin arvo puuttuva. Perinteinen yhtäsuuruuden testaaminen ei siis toimi.

```
# Just returns NA
NA == NA
```

```
## [1] NA
```

```
# Returns a logical value as expected
is.na(NA)
```

```
## [1] TRUE
```

```
is.na(1)
```

```
## [1] FALSE
```

```
# is.na operates element-wise on a vector
missing <- c(1, 2, NA, 4, NA, 6)
is.na(missing)
```

```
## [1] FALSE FALSE  TRUE FALSE  TRUE FALSE
```

```
# complete.cases gives the data elements which do not have missing data.
# It can be used with data frames also.
complete.cases(missing)
```

```
## [1]  TRUE  TRUE FALSE  TRUE FALSE  TRUE
```

2.4 Extra: Alkeistietotyypit ja erikoisarvot

Tässä lisätieto-osiossa käsitellään asioita, joita et välttämättä tarvitse kurssista suoriutuaksesi. Mikäli käytät R:ää enemmän, niin vastaan tulee enemmän tai

myöhemmin ongelmia, joissa tarvitsee näitä taitoja. Voit palata näihin myöhemmin koska tahansa, kun haluat syventää ymmärrystäsi R:stä.

R on rakennettu sisäisesti siten, että vektorin kukin elementti on jotain alkeistietotyyppiä. R:ssä on valmiina neljä alkeistietotyyppiä:

- numeerinen (eli reaaliluku)
- kokonaisluku (integer)
- merkkijono (character)
- kompleksiluku (complex)

Näistä tarpeellisimpia ovat numeerinen ja merkkijono. Kompleksilukua tarvitsee vain joissain erityistapauksissa ja kokonaisluvut ovat nykyään lähes aina tallennettu numeerisina.

```
# Integers are usually stored as reals
x <- c(1, 2, 3)
class(x)
```

```
## [1] "numeric"
```

```
# You can create integers by adding capital L behind the number
x_int <- c(1L, 2L, 3L)
class(x_int)
```

```
## [1] "integer"
```

```
# Character strings (or just strings)
x_char <- c("I", "have", "a", "cat.")
class(x_char)
```

```
## [1] "character"
```

```
# Complex numbers
x_comp <- c(0i, 2 + 1i, 1 - 3i)
class(x_comp)
```

```
## [1] "complex"
```

Joskus vektorin tiedot ovat väärässä muodossa, esim. merkkijonoina, mutta niitä haluttaisiin käsitellä numeroarvoina. Näihin operaatioihin on omat funktionsa. Tällöin voi kuitenkin tulla ongelmia, jos muutettava vektori ei ole helposti muutettavissa haluttuun muotoon.

```
# Character string to numeric
class(as.numeric(x_char))
```

```
## Warning: NAs introduced by coercion
```

```
## [1] "numeric"
```

```
# If character contains only values it is easy
x_char2 <- c("0", "5", "6.5")
as.numeric(x_char2)
```

```
## [1] 0.0 5.0 6.5
```

```
# Integer to numeric
x_int_to_num <- as.numeric(x_int)
x_int_to_num
```

```
## [1] 1 2 3
```

```
class(x_int_to_num)
```

```
## [1] "numeric"
```

```
# Numeric to integer
x_num_to_int <- as.integer(x)
x_num_to_int
```

```
## [1] 1 2 3
```

```
class(x_num_to_int)
```

```
## [1] "integer"
```

Vielä pari lisähuomiota puuttuvista arvoista (näitä ei tarvitse usein) koskien niiden tietotyyppejä. Puuttuvalla arvolla on myös alkeistietotyyppi. Mikäli NA-arvon tietotyyppi tulee määritellä, niin sen voi tehdä seuraavasti. Jos luodaan muuttuja tai vektori, jossa on vain yksi arvo, joka on NA, niin se oletusarvoisesti looginen.

```
# Specify a numeric NA value
NA_real_
```

```
## [1] NA
```

```
# Specify a complex number NA value
NA_complex_
```

```
## [1] NA
```

```
# Specify a integer number NA value
NA_integer_
```

```
## [1] NA
```

```
# Specify a character NA value
NA_character_
```

```
## [1] NA
```

```
# NA gives a logical type when evaluated alone
class(NA)
```

```
## [1] "logical"
# NA_real_ is numeric
class(NA_real_)
```

```
## [1] "numeric"
```

2.4.1 Ääretön ja miinus ääretön

R:ssä on myös ääretön ja miinus ääretön. Ne on toteutettu samaan tapaan kuin puuttuva arvo, mutta niiden tarkasteluun on omat funktionsa. Ääretön ja miinus ääretön arvot syntyvät esimerkiksi silloin, kun nollasta poikkeavia lukuja jaetaan nolllalla.

```
# You can type in infinity or minus infinity if needed
x <- c(1, 2, Inf, 5, -Inf)
# Use is.finite to determine if numbers are finite or not
is.finite(x)
```

```
## [1] TRUE TRUE FALSE TRUE FALSE
# Division by zero makes Inf or -Inf (unless 0/0)
x_div_zero <- c(1, 2, -3) / c(3, 0, 0)
x_div_zero
```

```
## [1] 0.3333333      Inf      -Inf
is.finite(x_div_zero)
```

```
## [1] TRUE FALSE FALSE
```

2.4.2 Ei-numero

Mikäli R:ssä sattuu tekemään jonkin matemaattisen toimenpiteen, joka ei ole sallittu, esimerkiksi nollan jaon nolllalla tai luvun -1 logaritmin, niin tämä tuottaa R:ssä tietotyyppin, joka on NaN (lyhenne sanoista Not a Number). Mikäli NaN-arvoa tutkii funktiolla `is.finite` tai `is.na`, niin huomaa että NaN ei ole äärellinen ja NaN tulkitaan NA:ksi.

```
x_div_zero_by_zero <- 0/0
# Tests for NaN
is.nan(x_div_zero_by_zero)
```

```
## [1] TRUE
```

```
# Tests if it is finite  
is.finite(x_div_zero_by_zero)
```

```
## [1] FALSE
```

```
# Tests if it is NA (missing)  
is.na(x_div_zero_by_zero)
```

```
## [1] TRUE
```


Chapter 3

Tietotyypit

Tässä osassa tutustutaan neljään uuteen tietorakenteeseen:

- datakehikko (`data.frame`)
- matriisi (`matrix`)
- taulukko (`array`)
- lista (`list`)

Datakehikko on R:n objekti, jossa voidaan säilyttää aineistoa. Muuttujat ovat kehikon sarakkeita ja muuttujilla tulee aina olla nimi.

Matriisi voi olla joillekin tuttu käsite myös tilastotieteen tai matematiikan kursseilta, ja R:n matriisi vastaakin matemaattista matriisia. Tästä syystä matriisi on hyvin yleinen tietorakenne, johon ei voi olla törmäämättä jos käyttää R:ää tutkimuksessa. Matriisilla tehdään yleensä kuitenkin matemaattisia operaatioita, eikä se ensisijaisesti ole aineiston säilytyspaikka.

Taulukko on juuri sitä miltä se kuulostaa: vektorintapainen tietorakenne, johon tallennetaan alkioita (elements), joilla on kaikilla sama luokka (class), eli esimerkiksi lukuja. Ero vektoriin on se, että taulukolla on useampi ulottuvuus. Matriisi on erikoistapaus taulukosta, sillä matriisi on kaksiulotteinen taulukko. Matriisi vastaa siis oikeastaan paremmin sitä mielikuvaa, joka monelle tulee mieleen suomen kielen sanasta taulukko, ja matriisit ovatkin paljon yleisempiä kuin moniulotteiset taulukot.

Lista on järjestetty kokoelma alkioita, jotka voivat olla eri tyyppisiä objekteja.

Koska datakehikko on kaikista tärkein ja eniten käytetty tietotyyppi, niin aloitetaan siitä.

3.1 Datakehikko (data.frame)

Datakehikko on erittäin yleinen tietorakenne tiedon tallentamiseen R:ssä. Datakehikko on kaksiulotteinen tietorakenne, eli sillä on rivejä ja sarakkeita. Datakehikon sarakkeet muodostuvat vektoreista. Sarakevektorit voivat olla eri luokan vektoreita, mutta datakehikko asettaa lisärajoitteen: vektoreiden on oltava yhtä pitkiä. Yhden rivin sarakkeilla olevien arvojen ajatellaan koskevan yhtä havaintoa.

Luodaan datakehikko, jossa on kaksi muuttujaa, height ja weight, ja sijoitetaan niihin kahdeksan mittauksen tiedot. Huomionarvoista on se, että komennon `data.frame` sulkujen sisällä on käytettävä yhtäsuuruusmerkkiä (`=`) eikä sijoitusoperaattoria (`<-`). Tämä johtuu siitä, että teknisesti ottaen komento `data.frame` on funktio (funktioista lisää myöhemmin).

```
study_data <- data.frame(ID = 1:8,
                          height = c(189.8, 184.0, 173.8, 175.9, 169.0, 183.7, 181.8, 16.9),
                          gender = c("male", "female", "male", "male", "female", "male", "male", "female"))
study_data
```

```
##   ID height gender
## 1  1  189.8   male
## 2  2  184.0 female
## 3  3  173.8   male
## 4  4  175.9   male
## 5  5  169.0 female
## 6  6  183.7   male
## 7  7  181.8   male
## 8  8   16.9 female
```

Huomaa, että jos sarakkeita ei itse nimeä, niin `data.frame` nimeää ne automaattisesti, mutta näin luodut nimet eivät välttämättä ole ollenkaan kuvaavia.

```
no_names_data <- data.frame(1:8,
                             c(189.8, 184.0, 173.8, 175.9, 169.0, 183.7, 181.8, 16.9),
                             c("male", "female", "male", "male", "female", "male", "male", "female"))
no_names_data
```

```
##   X1.8 c.189.8..184..173.8..175.9..169..183.7..181.8..16.9.
## 1     1
## 2     2
## 3     3
## 4     4
## 5     5
## 6     6
## 7     7
## 8     8
##  c..male....female....male....male....female....male....male...
```



```
## 1 male
## 2 female
## 3 male
## 4 male
## 5 female
## 6 male
## 7 male
## 8 female
```

3.2 Matriisi

3.2.1 Matriisin luominen

Matriisin luominen on yksinkertaista ja se tapahtuu funktiolla `matrix`.

```
matrix(1:9, nrow = 3, ncol = 3)
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    1    4    7
## [2,]    2    5    8
## [3,]    3    6    9
```

Funktiolle annetaan siis matriisiin tallennettavat luvut vektorina, sekä matriisin rivien ja sarakkeiden määrä (argumentit `ncol` ja `nrow`). Matriisi voi koostua myös kokonaan tietystä arvosta:

```
matrix(0, nrow = 2, ncol = 5)
```

```
##      [,1] [,2] [,3] [,4] [,5]
## [1,]    0    0    0    0    0
## [2,]    0    0    0    0    0
```

Jos matriisiin tallennettavat luvut annetaan vektorina, niin tällöin riittää antaa vain joko rivien tai sarakkein lukumäärä, ja R osaa päätellä puuttuvan dimension annetun vektorin perusteella.

```
matrix(1:9, nrow = 3)
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    1    4    7
## [2,]    2    5    8
## [3,]    3    6    9
```

Useimmiten matriisien data luetaan R:ään jostain tiedostosta, joka on tuotettu Excelillä tai jollain muulla ohjelmalla (tutkimustulosten kirjaus suoraan R:ään on raskasta). Matriisien luonti käsin on kuitenkin hyvä osata, sillä pienillä matriiseilla on kätevää testata omaa koodia. Myös yllä olevan kaltaisia, esim. nollalla täytettyjä matriiseja on joskus kätevää käyttää ”alustana”, kun laskeaan omasta datasta tuloksia rivi tai sarake kerrallaan. Tämä johtuu siitä, että

olemassa olevan matriisin rivin arvojen muuttaminen on nopeampi operaatio kuin rivin lisääminen matriisiin.

3.2.2 Matriisin koko

Joskus voi törmätä matriiseihin, joiden kokoa ei tiedetä, tai ei haluta olettaa. Tällöin tarvitaan funktioita, jotka kertovat matriisin koosta. Esimerkiksi, kun luetaan dataa R:ään tiedostoista, on hyvä tarkistaa, että kaikki rivit ja sarakkeet ovat mukana. Funktiot `nrow` ja `ncol` palauttavat rivien ja sarakkeiden määrän, `dim` palauttaa matriisin rivien ja sarakkeiden määrän vektorina, jossa rivien määrä on ensimmäinen alkio.

```
X <- matrix(1:12, ncol = 4)
# Number of rows
nrow(X)
```

```
## [1] 3
# Number of columns
ncol(X)
```

```
## [1] 4
# Dimensions
dim(X)
```

```
## [1] 3 4
```

3.2.3 Matriisin indeksointi

Matriisin indeksointi on hyvin samantapainen operaatio kuin vektorin indeksointi, eli matriisin perään laitetaan hakasulkeet ja niihin määritellään halutut indeksit. Matriisin indeksoinnissa pitää kuitenkin antaa erikseen indeksit riveille ja sarakkeille, pilkulla erotettuna. Jos hakasulkeisiin antaa vain yhden luvun ilman pilkkua, niin R käsittelee matriisia vektorina, jolloin indeksointi tapahtuu kuten vektoreiden tapauksessa.

```
# Only nrow is enough, since the number of columns must be 3
X <- matrix(1:9, nrow = 3)
X
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    1    4    7
## [2,]    2    5    8
## [3,]    3    6    9
```

```
# Element on second row, third column
X[2, 3]
```

```
## [1] 8
```

```
# The complete first row
X[1, ]
```

```
## [1] 1 4 7
```

```
# The second and third values of the second column
X[2:3, 3]
```

```
## [1] 8 9
```

```
# Get rows where the values of the first column are > 1
X[X[, 1] > 1, ]
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    2    5    8
## [2,]    3    6    9
```

HUOM: jos matriisia indeksoidessa tuloksessa sarakkeiden tai rivien määrä on tasan yksi, kuten yllä olevissa esimerkeissä viimeistä lukuun ottamatta, tuloksena on vektori, ei matriisi. Jos haluaa tuloksen olevan matriisi, tulee hakusulkeisiin lisätä argumentti `drop = FALSE`

```
# The complete first row
X[1, ,drop = FALSE]
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    1    4    7
```

```
# The second and third values of the second column
X[2:3, 3, drop = FALSE]
```

```
##      [,1]
## [1,]    8
## [2,]    9
```

Matriiseja voi myös muokata sijoittamalla haluttuihin paikkoihin uusia arvoja:

```
# Copy of X
X_new <- X
# Replace first row with new values
X_new[1, ] <- c(10, 13, 15)
X_new
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]   10   13   15
## [2,]    2    5    8
## [3,]    3    6    9
```

```
# Replacement can also be a single value, and will be recycled
X_new[2:3, 1] <- 0
X_new
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]   10   13   15
## [2,]    0    5    8
## [3,]    0    6    9
```

Rivejä tai sarakkeita voi myös poistaa. Tämä tapahtuu antamalla indeksi miinusmerkkisenä:

```
# Without first row
X[-1, ]
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    2    5    8
## [2,]    3    6    9
```

```
# Without second column
X[, -2]
```

```
##      [,1] [,2]
## [1,]    1    7
## [2,]    2    8
## [3,]    3    9
```

Huomaa kuitenkin, että positiivisia ja negatiivisia indeksejä ei voi käyttää samanaikaisesti tietyssä dimensiossa:

```
# Trying to mix positive and negative indices
X[c(-1, 1),]
```

```
## Error in X[c(-1, 1), ]: only 0's may be mixed with negative subscripts
```

3.2.3.1 Indeksimatriisi (index matrix)

Jos halutaan poimia useampi yksittäinen arvo matriisista, tulee käyttää indeksimatriisia (index matrix).

Esimerkiksi, jos haluttaisiin poimia äskeisestä X-matriisista arvot indekseissä [1, 2], [1, 3] ja [2, 2], niin seuraava koodi ei toimi:

```
X[c(1, 1, 2), c(2, 3, 2)]
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    4    7    4
## [2,]    4    7    4
## [3,]    5    8    5
```

vaan tulee käyttää indeksimatriisia, jonka jokainen rivi antaa yhden halutun alkion rivi- ja sarakeindeksin tässä järjestyksessä. Indeksimatriiseja tehdessä kannattaa asettaa argumentti `byrow = TRUE`, jolloin alkiot laitetaan matriisiin rivi kerrallaan, ei sarake kerrallaan kuten oletusarvoisesti tehtäisiin.

```
i <- matrix(c(1, 2, 1, 3, 2, 2), nrow = 3, byrow = TRUE)
i

##      [,1] [,2]
## [1,]    1    2
## [2,]    1    3
## [3,]    2    2
X[i]

## [1] 4 7 5
```

3.2.4 Matriisien rakentaminen vektoreista

Matriisi koostuu usein useammasta muuttujasta ja havainnoista. Yleensä jokainen rivi vastaa yhtä havaintoa, ja sarake muuttujaa. Tämän takia on hyvä tietää, miten yksittäisistä vektoreista saa koottua matriiseja. Alla olevassa esimerkissä on koottu yhteen matriisiin Star Wars -hahmojen pituuksia ja painoja. Tämä tapahtuu `cbind` funktiolla (column bind), joka nimensä mukaisesti yhdistää vektorit matriisin sarakkeiksi. `cbind` voi yhdistää myös valmiita matriiseja yhteen, niin että matriisit ovat “vierekkäin” eli yhdistetyssä matriisissa on kummankin matriisin sarakkeet (rivien määrän tulee olla sama). Vastaavasti `rbind` (row bind) yhdistää matriiseja “allekkain” (sarakkeiden määrän tulee olla sama).

```
heights <- c(172, 167, 96, 202, 150, 178)
masses <- c(77, 75, 32, 136, 49, 120)

starwars <- cbind(heights, masses)
starwars

##      heights masses
## [1,]    172     77
## [2,]    167     75
## [3,]     96     32
## [4,]    202    136
## [5,]    150     49
## [6,]    178    120
```

3.2.5 Rivien ja sarakkeiden nimeäminen

Matriisien rivit ja sarakkeet voi nimetä, ja usein tässä onkin järkeä. Yllä olevassa esimerkissä `starwars`-matriisin sarakkeet on nimetty alkuperäisten vektorien mukaan. Alla olevassa esimerkissä on lisää tapoja nimetä rivejä ja sarakkeita

```
# Set column names by naming arguments while building matrix from vectors
cbind(Height = heights, Mass = masses)
```

```
##      Height Mass
## [1,]    172   77
## [2,]    167   75
## [3,]     96   32
## [4,]    202  136
## [5,]    150   49
## [6,]    178  120
```

```
# Set column and row names explicitly
colnames(starwars) <- c("Height", "Mass")
rownames(starwars) <- c("Luke Skywalker", "C-3PO", "R2-D2", "Darth Vader", "Leia Organa", "Owen Lars")
starwars
```

```
##      Height Mass
## Luke Skywalker    172   77
## C-3PO             167   75
## R2-D2              96   32
## Darth Vader       202  136
## Leia Organa       150   49
## Owen Lars         178  120
```

Nimettyjä matriiseja voi indeksoida myös nimien perusteella:

```
starwars[c("Luke Skywalker", "R2-D2"), ]
```

```
##      Height Mass
## Luke Skywalker    172   77
## R2-D2              96   32
```

Matriisiin voi myös lisätä uusia sarakkeita `cbind` funktiolla. Alla lisätään matriisiin `starwars` uusi sarake, jossa on hahmojen BMI:

```
# Create a vector for BMI and add to matrix with cbind
bmi <- starwars[, "Mass"] / (starwars[, "Height"] / 100)^2
cbind(starwars, "BMI" = bmi)
```

```
##      Height Mass      BMI
## Luke Skywalker    172   77 26.02758
## C-3PO             167   75 26.89232
## R2-D2              96   32 34.72222
## Darth Vader       202  136 33.33007
## Leia Organa       150   49 21.77778
## Owen Lars         178  120 37.87401
```

3.2.6 Matriiseilla laskeminen

Matriiseilla laskeminen on hyvin samankaltaista kuin vektoreilla laskeminen. Matriisin ja yksittäisen luvun välisessä operaatiossa matriisin alkiot käsitellään yksitellen. Samoin samankokoiset matriisit voi esim. lisätä yhteen, jolloin lisäys

tapahtuu alkio kerrallaan.

```
X <- matrix(1:9, nrow = 3)
Y <- matrix(3:11, nrow = 3, ncol = 3)
# Element-wise multiplication
X * 2
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    2    8   14
## [2,]    4   10   16
## [3,]    6   12   18
```

```
# Element-wise sum
X + Y
```

```
##      [,1] [,2] [,3]
## [1,]    4   10   16
## [2,]    6   12   18
## [3,]    8   14   20
```

Matriiseille on lisäksi määritelty paljon matriisien omia laskutoimituksia, niistä voi lukea lisää oppikirjasta. Matriisilaskentaa opiskelleille huomio: R:ssä oletuksena kertolasku tehdään alkioittain, matriisitulo tapahtuu operaattorilla `%*%` ja matriisin transpoosin voi määrittää funktiolla `t`.

3.3 Tietotyyppien tarkastelu

Kaikkia objekteja voi tulostaa Console-ikkunassa kutsumalla objektin nimen. Joskus tarvitaan kuitenkin apufunktioita.

3.3.1 View()

Mikäli käytät RStudiota, niin tarkempaa tarkastelua varten kannattaa kuitenkin käyttää `View`-funktioita. `View` avaa ikkunan, jossa voi selata data frameä tai matriisin rivejä ja sarakkeita, sekä järjestää arvoja halutun sarakkeen mukaan (tämä järjestys säilyy vain `View`-näkyvässä, itse muuttujan rakenne ei muutu). Mikäli aineistossasi on satoja tuhansia tai miljoonia rivejä, niin `View` saattaa olla liian hidas.

3.3.2 str()

Perineinen tapa tarkastella objekteja R:ssä on funktio `str`, joka toimii kaikissa R-ympäristöissä. `str` tulostaa tiivistetyssä muodossa kaiken, mitä sille annettu objekti sisältää. Esimerkiksi datakehikon tapauksessa sen avulla saadaan sekä muuttujien nimet, niitä vastaavien vektoreiden tyypit että ruudulle mahtuvan osan vektoreiden alkioista.

```
# Examine the structure of data frame
str(study_data)
```

```
## 'data.frame':    8 obs. of  3 variables:
## $ ID      : int  1 2 3 4 5 6 7 8
## $ height: num  190 184 174 176 169 ...
## $ gender: chr  "male" "female" "male" "male" ...
```

3.3.3 head()

Jos aineistossa on todella paljon rivejä, on sen tulostaminen Console-ikkunaan ikävää. Ladataan esimerkiksi iris-data, jossa on 150 havaintoa. Tulostettaessa rivejä on niin monta, että muuttujien nimet eivät näy, mikä on epämiellyttävää. Parempi tapa saada käsitys aineistosta on kutsua sitä head-funktion avulla.

```
# Load data for this example
data(iris)
```

```
# Try to print iris-data directly
iris
```

Console	Terminal ×	R Markdown ×	Jobs ×	
R 4.1.0 · ~/Research/Projektit/r_intro_jukop/ ↗				
138	6.4	3.1	5.5	1.8 virginica
139	6.0	3.0	4.8	1.8 virginica
140	6.9	3.1	5.4	2.1 virginica
141	6.7	3.1	5.6	2.4 virginica
142	6.9	3.1	5.1	2.3 virginica
143	5.8	2.7	5.1	1.9 virginica
144	6.8	3.2	5.9	2.3 virginica
145	6.7	3.3	5.7	2.5 virginica
146	6.7	3.0	5.2	2.3 virginica
147	6.3	2.5	5.0	1.9 virginica
148	6.5	3.0	5.2	2.0 virginica
149	6.2	3.4	5.4	2.3 virginica
150	5.9	3.0	5.1	1.8 virginica
>				

```
# Print 6 first rows of iris data
head(iris)
```


Console	Terminal x	R Markdown x	Jobs x	
R 4.1.0 · ~/Research/Projektit/r_intro_jukop/ ↗				
146	6.7	3.0	5.2	2.3 virginica
147	6.3	2.5	5.0	1.9 virginica
148	6.5	3.0	5.2	2.0 virginica
149	6.2	3.4	5.4	2.3 virginica
150	5.9	3.0	5.1	1.8 virginica
> head(iris)				
	Sepal.Length	Sepal.Width	Petal.Length	Petal.Width Species
1	5.1	3.5	1.4	0.2 setosa
2	4.9	3.0	1.4	0.2 setosa
3	4.7	3.2	1.3	0.2 setosa
4	4.6	3.1	1.5	0.2 setosa
5	5.0	3.6	1.4	0.2 setosa
6	5.4	3.9	1.7	0.4 setosa
>				

You can also define the number of rows to print
 head(iris,2)

Console	Terminal x	R Markdown x	Jobs x	
R 4.1.0 · ~/Research/Projektit/r_intro_jukop/ ↗				
150	5.9	3.0	5.1	1.8 virginica
> head(iris)				
	Sepal.Length	Sepal.Width	Petal.Length	Petal.Width Species
1	5.1	3.5	1.4	0.2 setosa
2	4.9	3.0	1.4	0.2 setosa
3	4.7	3.2	1.3	0.2 setosa
4	4.6	3.1	1.5	0.2 setosa
5	5.0	3.6	1.4	0.2 setosa
6	5.4	3.9	1.7	0.4 setosa
> head(iris,2)				
	Sepal.Length	Sepal.Width	Petal.Length	Petal.Width Species
1	5.1	3.5	1.4	0.2 setosa
2	4.9	3.0	1.4	0.2 setosa
>				

3.4 Extra: Taulukko ja lista

Taulukoita ja listoja ei perus data-analyysiä toteutettaessa yleensä tarvita. Lue kuitenkin seuraava, jotta saat yleiskäsityksen mihin niitä tarvitaan. Voit myös

palata perehtymään taulukoihin ja listoihin myöhemmin koska tahansa.

3.4.1 Taulukko

Kuten alussa todettiin, taulukot (array) ovat hyvin harvinaisia, joten niihin ei kannata tällä kurssilla keskittyä. Niitä kuitenkin tarvitaan joidenkin tehtävien tekemiseen, joten tässä on hyvin lyhyt oppimäärä taulukoista.

Taulukot ovat matriisien kaltaisia, mutta taulukossa voi olla yli kaksi ulottuvuutta. Oikeastaan matriisit ovat kaksiulotteisia taulukoita. Alla on esimerkki 3-ulotteisesta taulukosta, jota voi ajatella “peräkkäin” olevina matriiseina. Alla on kuva 1-ulotteisesta taulukosta eli vektorista, 2-ulotteisesta taulukosta eli matriisista ja 3-ulotteisesta taulukosta.

3
5
5
9
2
6

Vektori

3	1	4	1
5	9	2	6
5	3	5	8
9	7	9	3
2	3	8	4
6	2	6	4

Matriisi

3-ulotteinen taulukko

Taulukkoja luodaan matriisien tapaan funktiolla `array`. Toisin kuin matriisien tapauksessa, `array`-funktiolle pitää luetella sen kaikki ulottuvuudet vektorina. Alla oleva esimerkki luo 3-ulotteisen taulukon, jonka voi ajatella koostuvan kolmesta 4 x 2 matriisista.

```
my_array <- array(1:24, dim = c(4, 2, 3))
```

```
my_array
```

```
## , , 1
##
##      [,1] [,2]
## [1,]    1    5
## [2,]    2    6
## [3,]    3    7
## [4,]    4    8
##
## , , 2
```

```
##
##      [,1] [,2]
## [1,]    9  13
## [2,]   10  14
## [3,]   11  15
## [4,]   12  16
##
## , , 3
##
##      [,1] [,2]
## [1,]   17  21
## [2,]   18  22
## [3,]   19  23
## [4,]   20  24
```

Taulukoita indeksoidaan aivan kuten matriiseja, mutta jokaiselle ulottuvuudelle on annettava oma indeksi:

```
# The first 2 rows of each "layer"
my_array[1:2, , ]
```

```
## , , 1
##
##      [,1] [,2]
## [1,]    1    5
## [2,]    2    6
##
## , , 2
##
##      [,1] [,2]
## [1,]    9   13
## [2,]   10   14
##
## , , 3
##
##      [,1] [,2]
## [1,]   17   21
## [2,]   18   22
```

```
# Second column from last two layers
my_array[, 2, 2:3]
```

```
##      [,1] [,2]
## [1,]   13  21
## [2,]   14  22
## [3,]   15  23
## [4,]   16  24
```

3.4.2 Lista

Listat ovat tärkeitä erityisesti silloin, kun aletaan toteuttamaan uusia toimintoja R-kieleen omien funktioiden avulla. Niin kauan kun valmiit R-funktiot riittävät, ei listoilla ole juuri käyttöä.

Lista (list) on vektorinkaltainen tietorakenne, jossa on järjestyksessä alkioita, jotka on mahdollisesti nimetty. Tärkeä ero vektoriin verrattuna on, että listan alkiot voivat olla erityyppisiä. Listoja luodaan `list`-funktiolla:

```
example_list <- list(c(1, 2, 3),
                    matrix(0, nrow = 3, ncol = 4),
                    "list can include anything")
example_list
```

```
## [[1]]
## [1] 1 2 3
##
## [[2]]
##      [,1] [,2] [,3] [,4]
## [1,]    0    0    0    0
## [2,]    0    0    0    0
## [3,]    0    0    0    0
##
## [[3]]
## [1] "list can include anything"
```

```
subject_ids <- c("ANKL", "PEPA", "DIPR")
measurements <- matrix(c(1, 2.5, 3,
                        3.5, 5, 3,
                        2.3, 3, 1.6),
                      nrow = 3)
colnames(measurements) <- c("CRP", "HDL", "LDL")
rownames(measurements) <- subject_ids
# List names can be given with or without quotes
study <- list(Subject_ID = subject_ids,
              "Measurements" = measurements,
              Study_name = "Blood tests")
study
```

```
## $Subject_ID
## [1] "ANKL" "PEPA" "DIPR"
##
## $Measurements
##      CRP HDL LDL
## ANKL 1.0 3.5 2.3
## PEPA 2.5 5.0 3.0
## DIPR 3.0 3.0 1.6
```

```
##
## $Study_name
## [1] "Blood tests"
```

Listoja ja niiden kaltaisia olioita käytetään R:ssä paljon. Listoihin on kätevä tallentaa erityyppistä tietoa, joka kuitenkin halutaan säilyttää yhtenä kokonaisuutena. Esimerkiksi yksinkertaisetkin tilastolliset mallit tuottavat paljon erilaista tietoa, joka tallennetaan listaan (tarkemmin listan kaltaiseen oloon, tästä lisää myöhemmin).

3.4.2.1 Listojen alkioden käsittely

Listan alkioihin pääsee käsiksi kahdella eri tavalla: kaksoishakasulkeilla `[]` tai, jos lista on nimetty, dollarimerkillä `$`:

```
# By position
study[[2]]
```

```
##      CRP HDL LDL
## ANKL 1.0 3.5 2.3
## PEPA 2.5 5.0 3.0
## DIPR 3.0 3.0 1.6
```

```
# By name
study[["Subject_ID"]]
```

```
## [1] "ANKL" "PEPA" "DIPR"
```

```
# Using dollar sign
study$Study_name
```

```
## [1] "Blood tests"
```

Listaa voi indeksoida myös yksinkertaisilla hakasulkeilla. Tällöin palautetaan aina lista, eikä yksittäistä alkiota kuten aiemmin. Palautetaan ensiksi mieleen funktio `class`, joka palauttaa argumenttinsa luokan (`class`). Vektorin luokka vaihtelee vektorin sisällön mukaan: `numeric` = lukuja, `character` = merkkijonoja, `logical` = loogisia arvoja, jne. Listojen luokka on luonnollisesti `list`. R:ssä kaikki muuttujiin tallennettavat tiedot ovat olioita (`object`). R-olioilla on aina luokka, joka määrittää sen ominaisuudet. Esimerkiksi `print` ja `plot`-komennot toimivat eri tavalla riippuen niiden argumentin luokasta.

Tarkastellaan alla, mikä ero yksinkertaisilla ja kaksinkertaisilla hakasulkeilla on listan indeksoinnissa:

```
# Returns a list of length one with the matrix as the only element
study[2]
```

```
## $Measurements
##      CRP HDL LDL
## ANKL 1.0 3.5 2.3
```



```

                                age = 45)
study

## $Subject_ID
## [1] "ANKL" "PEPA" "DIPR"
##
## $Measurements
##      CRP HDL LDL
## ANKL 1.0 3.5 2.3
## PEPA 2.5 5.0 3.0
## DIPR 3.0 3.0 1.6
##
## $Study_name
## [1] "Blood tests"
##
## [[4]]
##      [,1] [,2]
## [1,] "CPR" "C-reactive protein"
## [2,] "HDL" "High-density lipoprotein"
## [3,] "LDL" "Low-density lipoprotein"
##
## $professional
## $professional$name
## [1] "John H. Watson"
##
## $professional$position
## [1] "Medical doctor"
##
## $professional$age
## [1] 45

# Note that the fourth element has no name
names(study)

## [1] "Subject_ID" "Measurements" "Study_name" "" "professional"

```

Listoja voi yhdistää vektorien tapaan c-funktiolla:

```

# Concatenate two vectors
vector1 <- c(3, 6, 5)
vector2 <- c(1, 2, 3)
c(vector1, vector2)

## [1] 3 6 5 1 2 3

list1 <- list(vector = vector1,
              name = "list1")
list2 <- study[1:2]

```

```
# Concatenate three lists, names stay the same
c(list1, list2, list(first_element = "A", second = "B"))

## $vector
## [1] 3 6 5
##
## $name
## [1] "list1"
##
## $Subject_ID
## [1] "ANKL" "PEPA" "DIPR"
##
## $Measurements
##      CRP HDL LDL
## ANKL 1.0 3.5 2.3
## PEPA 2.5 5.0 3.0
## DIPR 3.0 3.0 1.6
##
## $first_element
## [1] "A"
##
## $second
## [1] "B"
```


Chapter 4

Datan lukeminen

Tässä osiossa tutustutaan datan sisään lukemiseen ja sisäänluetun datan tarkistamiseen. Tähän mennessä kaikki kurssilla käsitelty data on luotu R:ssä. Useimmiten R:llä käsiteltävä data on kuitenkin tallennettu tiedostoon, joka on luotu jollain ohjelmalla tai kirjattu esim. Excelissä.

Tässä esitellyt funktiot lukevat erilaisia tiedostoja, mutta kaikki palauttavat datakehikon. Datakehikko sopii aineiston käsittelyyn hyvin, sillä siihen voi tallentaa niin numeerisia kuin tekstimuotoisia muuttujia. Voit tarvittaessa kerrata datakehikon toimintaa datakehikko-kappaleesta.

Lopussa käydään myös läpi tapoja lukea taulukkolaskenta- (Excel), SPSS- ja SAS-tiedostoja. Näitä tiedostoja ei käsitellä kurssin tehtävissä, mutta on hyvä tietää, että niitä voi lukea R:ään suoraan muuttamatta niitä ensin johonkin toiseen muotoon.

4.1 Tekstitiedostot

Tekstitiedosto tarkoittaa tässä tapauksessa tiedostoa, joka ei sisällä tekstin lisäksi mitään muuta, kuten erilaisia muotoilutietoja. Tekstitiedostojen yleisimmät tiedostopäätteet ovat .txt ja .csv (comma separated value). Esim. Excelin .xlsx-tiedostot tai Wordin .docx-tiedostot eivät ole tekstitiedostoja, koska niissä on paljon muutakin tietoa tekstin lisäksi.

4.1.1 read.table

Kun dataa tallennetaan tekstitiedostoon, tiedoston ensimmäisellä rivillä ovat usein sarakkeiden nimet, ja seuraavilla riveillä mahdollisesti rivin nimi, ja sitten sarakkeiden arvot. Jokaisen kentän tulee olla erotettu samalla merkillä (field separator character). Yleisiä erotinmerkkejä ovat sarkain eli tab, välilyönti ja pilkku. Alla olevassa esimerkissä on neljältä kuvitteelliselta koehenkilöltä

mitattu puna-vihervärisokeuteen liitettyjen geenien OPN1LW ja OPN1MW ilmentymistasot (lukuarvot ovat allekirjoittaneen hihasta). Tässä eri arvot on erotettu sarkaimella.

Subject_ID	OPN1LW	OPN1MW
ANKL	11264	12365
DIPR	10636	12725
PEPA	5630	13248
BRWA	8294	13060

Tämä data löytyy myös oheisesta tiedostosta `gene_data.txt`. Tekstitiedostot voi lukea sisään funktiolla `read.table`, jolla on tiedoston polun (file path) lisäksi monta muutakin argumenttia, joista tärkeimmät ovat:

- **header**: looginen arvo (TRUE/FALSE), jolla kerrotaan funktiolle, onko ensimmäisellä rivillä sarakkeiden nimet vai ei
- **sep**: erotinmerkki, jolla muuttujien arvot on eroteltu
- **dec**: desimaalierotin eli desimaalilukujen merkki, jolla desimaalit on eroteltu. Tämä on tärkeä lähinnä suomalaisille, koska Suomessa desimaalierotin on jostain syystä pilkku, eikä piste kuten useimmissa muissa maissa.

Luetaan edellisen esimerkin data R:ään data frameksi:

```
gene_data <- read.table("gene_data.txt", header = TRUE)
gene_data
```

```
## Subject_ID OPN1LW OPN1MW
## 1      ANKL  11264  12365
## 2      DIPR  10636  12725
## 3      PEPA   5630  13248
## 4      BRWA   8294  13060
```

Yllä olevassa esimerkissä ei määritelty erikseen erotinmerkkiä, jolloin erotinmerkiksi tulkitaan kaikki tyhjä tila (white space) eli välilyönnit, sarkaimet jne. Halutessaan erotinmerkin voi myös asettaa. Jos erotinmerkki on sarkain, tulee asettaa `sep = "\t"`

```
gene_data <- read.table("gene_data.txt", sep = "\t", header = TRUE)
gene_data
```

```
## Subject_ID OPN1LW OPN1MW
## 1      ANKL  11264  12365
## 2      DIPR  10636  12725
## 3      PEPA   5630  13248
## 4      BRWA   8294  13060
```

Kuten yllä huomattiin, sarkain erotinmerkkinä merkataan `"\t"`, eikä lainausmerkeillä, joiden sisään laitettaisiin tyhjää tilaa sarkainnäppäimellä. Tämä on yksi esimerkki koodinvaihtomerkin (escape character) `\` käytöstä. R:ssä ja

ohjelmointikielissä ylipäättään kenoviiva toimii koodinvaihtomerkinä, eli sitä ei käsitellä kuin muita merkkejä, vaan se muuttaa seuraavan merkin toimintaa. Usein tämä tarkoittaa sitä, että kenoviivan avulla merkataan sarkainta, rivinvaihtoa (newline, `\n`) ja muita erikoismerkkejä. Koodinvaihtomerkin käyttöä ei tarvitse osata tämän enempää, mutta se esitellään tässä, koska se aiheuttaa ongelmia Windowsin käyttäjille.

Windowsin tiedostopoluissa kansioden välissä on kenoviiva, kun taas Mac- ja Linux-järjestelmissä käytetään kauttaviivaa `/`. Koska R:ssä kenoviiva on koodinvaihtomerkki, niin helpoin tapa on käyttää tiedostopoluissa Macin ja Linuxien tyyliä. Jos taas halutaan lukea tiedosto R:ään käyttäen Windowsin tapaisia tiedostopolkuja, kenoviivat `\` pitää kirjoittaa kahteen kertaan eli `\\`, jotta R tulkitsee polun oikein. Tällöin ensimmäinen kenoviiva kertoo, että toinen kenoviiva on aito kenoviiva, eikä koodinvaihtomerkki.

Luetaan seuraavaksi sisään data-hakemistossa oleva tiedosto `tooth_growth.csv`, joka sisältää dataa tutkimuksesta c-vitamiinin vaikutuksesta hampaiden kasvuun marsuilla. `.csv`-tiedostopääte tulee sanoista comma separated value, eli tiedostossa arvot ovat eroteltu pilkulla. Asetetaan siis `sep`-argumentiksi `","`. Tämä tiedosto sisältää myös rivien nimet ensimmäisessä sarakkeessa. Tämä voidaan kertoa `read.table`-funktiolle argumentilla `row.names`, jonka arvoksi voi asettaa sarakkeen numeron, josta rivien nimet napataan.

```
tooth <- read.table("data/tooth_growth.csv", header = TRUE, sep = ",", row.names = 1)
tooth
```

```
##      len supp dose
## 34  9.7   OJ  0.5
## 16 17.3   VC  1.0
## 55 24.8   OJ  2.0
## 44 26.4   OJ  1.0
## 58 27.3   OJ  2.0
## 26 32.5   VC  2.0
## 14 17.3   VC  1.0
## 60 23.0   OJ  2.0
## 15 22.5   VC  1.0
##  9  5.2   VC  0.5
```

Tutkimuksessa marsuille annettiin C-vitamiinia eri annoksina (dose, mitattu milligrammoina), joko appelsiinimehussa (OJ) tai askorbiinihappona (VC), ja mitattiin odontoblastien (hammasluun emosolu) pituus (len).

4.1.2 read.csv

`.csv`-tiedostot ovat niin yleisiä, että niiden lukemiseen on oma funktio: `read.csv`, joka on käytännössä sama funktio kuin `read.table`, mutta parametrien oletusarvot ovat erilaiset, niin että `read.csv(file) ~ read.table(file, header = TRUE, sep = ",")`.

```
tooth <- read.csv("data/tooth_growth.csv", row.names = 1)
tooth
```

```
##      len supp dose
## 34  9.7   OJ  0.5
## 16 17.3   VC  1.0
## 55 24.8   OJ  2.0
## 44 26.4   OJ  1.0
## 58 27.3   OJ  2.0
## 26 32.5   VC  2.0
## 14 17.3   VC  1.0
## 60 23.0   OJ  2.0
## 15 22.5   VC  1.0
##  9  5.2   VC  0.5
```

4.1.2.1 read.csv2

HUOM: Koska Suomessa pilkkua käytetään desimaalierottimena, kenttien rajaaminen pilkulla ei toimi. Käytännössä tämä näkyy siten, että suomenkielinen Excel tallentaa .csv-tiedosto oletuksena muodossa, jossa desimaalierottimena on pilkku ja kenttien välissä puolipilkku “;”. Jos siis olet tallentanut Excelistä taulukon .csv-muotoon ja sen lukeminen R:ään aiheuttaa hankaluuksia, kyse on todennäköisesti erotinmerkistä. Onneksi R:ssä on valmiina funktio `read.csv2`, joka osaa lukea puolipilkulliset .csv-tiedostot oikein.

4.2 Datakehikon tarkastelu

Kun data on luettu sisään R:ään, kannattaa aina tarkistaa, että kaikki data on luettu oikein. Tässä muutama vinkki datakehikon tutkimiseen, joista osaa käsiteltiin jo datakehikko-kappaleessa:

`dim` antaa data framen dimensiot, eli rivien ja sarakkeiden määrän.

`View` avaa data framen erilliseen ikkunaan, jossa sitä voi tarkastella. Suositellaan vain pienemmille data frameille `str` kertoo rivien ja sarakkeiden määrät sekä kaikkien sarakkeiden luokat. Kätevä tapa tarkistaa mm. että lukuja sisältävät sarakkeet eivät ole vahingossa muuttuneet merkkijonoiksi. `table` on kätevä kategoristen sarakkeiden tutkimiseen. Se kertoo, kuinka monta havaintoa muuttujan arvoilla on. `table` voi ottaa vastaan myös kaksi kategorista muuttujaa, ja laskee jokaiselle muuttujien arvojen yhdistelmälle havaintojen lukumäärän.

Katsotaan, mitä `str` kertoo juuri lukemastamme tooth-datasta.

```
str(tooth)
```

```
## 'data.frame':    10 obs. of  3 variables:
## $ len : num  9.7 17.3 24.8 26.4 27.3 32.5 17.3 23 22.5 5.2
```

```
## $ supp: chr  "OJ" "VC" "OJ" "OJ" ...
## $ dose: num  0.5 1 2 1 2 2 1 2 1 0.5
```

Kuten näimme aiemmin, mukana on 10 havaintoa ja 3 muuttujaa. `len` ja `dose` ovat luokkaa `numeric` eli desimaalilukuja, ja `supp` on luokkaa `factor`. `Factor`-tietotyyppiä käsitellään enemmän lineaaristen mallien yhteydessä, mutta sillä merkitään usein kategorisia muuttujia.

Lasketaan seuraavaksi, kuinka monelle marsulle annettiin appelsiinimehua ja kuinka monelle askorbiinihappoa.

```
table(tooth$supp)
```

```
##
## OJ VC
## 5 5
```

Kumpaakin annostelutapaa käytettiin siis viisi kertaa. Voimme myös selvittää, miten eri annokset jakautuvat annostelutavan suhteen:

```
table(tooth$supp, tooth$dose)
```

```
##
##      0.5 1 2
## OJ    1 1 3
## VC    1 3 1
```

Appelsiinimehuna annettiin siis 0.5 mg ja 1 mg annoksia kumpaakin 1 kappaletta, ja 2 mg annoksia 3 kappaletta.

4.2.1 R:n sisäänrakennetut datasetit

R:ssä on monta sisäänrakennettua (built-in) datasettiä. Näitä on kätevää käyttää nopeaan testaamiseen, ja ne vilahtelevatkin usein R-oppaissa. Esimerkiksi aikaisempi odontoblastien pituuksia sisältävä datasettimme on oikeastaan pieni otos R:n sisäisestä datasetistä `ToothGrowth`.

R:n sisäiset datasetit ovat koko ajan käytettävissä, vaikka ne eivät näy RStudio ympäristössä (Environment). Voimme esimerkiksi katsoa, millainen rakenne kokonaisella `ToothGrowth`-datasetillä on:

```
str(ToothGrowth)
```

```
## 'data.frame': 60 obs. of 3 variables:
## $ len : num  4.2 11.5 7.3 5.8 6.4 10 11.2 11.2 5.2 7 ...
## $ supp: Factor w/ 2 levels "OJ","VC": 2 2 2 2 2 2 2 2 2 ...
## $ dose: num  0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 0.5 ...
```

R:n datasettejä voi käyttää moneen eri tarkoitukseen, kuten datan visualisoinnin tai tilastollisten toimenpiteiden testaamiseen. Listan kaikista R:n dataseteistä

saa komennolla `data()`. Tarkempia tietoja datasetistä saa help-sivulta kuten funktioiden tapauksessa, esimerkiksi `?ToothGrowth`

4.3 Muut tiedostot

4.3.1 Excel

Excelin käyttämiä .xlsx-tiedostoja voi lukea suoraan R:ään, vaikka jossain netissä olevissa ohjeissa suositellaan niiden muuntamista ensin .csv-muotoon. Tätä varten pitää asentaa **readxl**-paketti, minkä voi tehdä RStudio:n Packages-valikoksta tai suoraan komennolla `install.packages("readxl")`. Paketin funktiolla `read_xlsx()` voi lukea sisään .xlsx-tiedostoja, tai yksikkäitisä taulukon sivuja. Excel-tiedostojen kirjoittamiseen löytyy myös vastaava paketti **writexl**.

Vaihtoehtoinen paketti Excel-tiedostojen lukemiseen on **openxlsx**, jolla voi sekä lukea että kirjoittaa .xlsx-tiedostoja, mutta se on tyypillisesti hitaampi *readxl* ja *writexl* paketteihin verattuna.

4.3.2 SPSS

Eri tutkimusryhmissä dataa säilytetään usein SPSS-tiedostoissa (.sav). SPSS-tiedostojen käsittelyyn voi käyttää **haven**-paketin funktioita `read_sav` ja `write_sav`. **haven**-paketti sisältää myös funktiot Stata- ja SAS-tiedostoille.

SPSS-tiedostoja voi lukea myös **foreign**-paketin avulla, mutta ainakin minulla on parempia kokemuksia haven-paketista. **haven** on myös osa tidyverse-pakettikokoelmaa, joten oletan sen pysyvän hyvin ajan tasalla jatkossakin.

Chapter 5

Datan muokkaaminen

Aineisto ei tyypillisesti ole valmiiksi oikeassa muodossa. Voi olla että halutaan esimerkiksi käyttää vain jotain osajoukkoa aineistosta. Tällöin tarvitaan komentoja aineiston muokkaamiseksi.

Yleinen käytännön vinkki Aineiston muokkaaminen (data wrangling) on isojen tutkimusaineistojen kohdalla todella työlästä. Tällöin saatetaan joutua yhdistelemään aineistoja useista lähteistä, etsimään virheellisiä arvoja, muokkaamaan tekstimuotoisia (character) muuttujia eri muotoon ym. Mikäli halutaan muokata tekstimuotoisia vektoreita eri muotoon, niin ne kannattaa muuttaa faktoriksi vasta lopuksi, sillä muuttujan ei ole yleensä tarpeellista olla faktorimuodossa aineistoja muokatessa. Faktorit ovat tyypillisesti tarpeen vasta kun aineistoa aletaan todella analysoida.

5.1 Uuden muuttujan tai rivin luonti datakehikkoon

Uusi muuttuja voidaan luoda R:ssä joko perustuen aineiston muihin muuttujiin, tai muuttujan arvot voidaan syöttää vektorina aineistoon. Mikäli uusi muuttuja syötetään lukuina R-koodiin, tulee varmistua siitä, että havaintoja on sama määrä kuin aineistossa on rivejä. Muutoin aineisto tulee syötettyä virheellisesti ja tulokset eivät pidä paikkaansa.

Uuden sarakkeen luonti tapahtuu samalla tavalla kuin jo olemassa olevan sarakkeen muokkaaminen eli dollarisymbolilla, jossa dollarin jälkeen annetaan ensin uuden sarakkeen nimi ja tähän sijoitetaan halutut uuden muuttujan arvot.

```
# evaluate the number of rows and columns  
dim(study_data)
```

```
## [1] 8 3
```

```
# there are 8 rows

# initiate a new variable called weight (imput data) with correct number of rows
study_data$weight <- c(78.2, 65.8, 49.2, 71.2, 58.3, 54.1, 74.2, 62.8)

# calculate a new variable based on existing variables
study_data$height_m <- study_data$height / 100 # height as metres
study_data$BMI <- study_data$weight / (study_data$height_m^2)
study_data
```

```
##   ID height gender weight height_m      BMI
## 1  1  189.8   male   78.2     1.898  21.70773
## 2  2  184.0 female   65.8     1.840  19.43526
## 3  3  173.8   male   49.2     1.738  16.28792
## 4  4  175.9   male   71.2     1.759  23.01168
## 5  5  169.0 female   58.3     1.690  20.41245
## 6  6  183.7   male   54.1     1.837  16.03168
## 7  7  181.8   male   74.2     1.818  22.44999
## 8  8   16.9 female   62.8     0.169 2198.80256
```

5.1.1 Datakehikon käsittely

```
# Subscripting with variable names
study_data[, c("height", "gender")]
```

```
##   height gender
## 1  189.8   male
## 2  184.0 female
## 3  173.8   male
## 4  175.9   male
## 5  169.0 female
## 6  183.7   male
## 7  181.8   male
## 8   16.9 female
```

```
# Subscripting with brackets - as matrix (but I do not recommend this style!)
study_data[, 1:2]
```

```
##   ID height
## 1  1  189.8
## 2  2  184.0
## 3  3  173.8
## 4  4  175.9
## 5  5  169.0
## 6  6  183.7
## 7  7  181.8
```



```
## 8 8 16.9
```

```
# Rownames and colnames
```

```
colnames(study_data)
```

```
## [1] "ID"      "height"  "gender"  "weight"  "height_m" "BMI"
names(study_data)
```

```
## [1] "ID"      "height"  "gender"  "weight"  "height_m" "BMI"
```

```
# Individual columns can be accessed and added with dollar sign
```

```
# Let's say that we find out that the ID number 8 was typed in incorrectly. We can fix the entire
```

```
study_data$height <- c(189.8, 184.0, 173.8, 175.9, 169.0, 183.7, NA, 160.9)
study_data
```

```
##   ID height gender weight height_m      BMI
## 1  1  189.8   male   78.2    1.898  21.70773
## 2  2  184.0 female   65.8    1.840  19.43526
## 3  3  173.8   male   49.2    1.738  16.28792
## 4  4  175.9   male   71.2    1.759  23.01168
## 5  5  169.0 female   58.3    1.690  20.41245
## 6  6  183.7   male   54.1    1.837  16.03168
## 7  7    NA   male   74.2    1.818  22.44999
## 8  8  160.9 female   62.8    0.169 2198.80256
```

```
# It would have been possible to change value of only one cell e.g. like this
```

```
study_data$height[8] <- 161.9
study_data
```

```
##   ID height gender weight height_m      BMI
## 1  1  189.8   male   78.2    1.898  21.70773
## 2  2  184.0 female   65.8    1.840  19.43526
## 3  3  173.8   male   49.2    1.738  16.28792
## 4  4  175.9   male   71.2    1.759  23.01168
## 5  5  169.0 female   58.3    1.690  20.41245
## 6  6  183.7   male   54.1    1.837  16.03168
## 7  7    NA   male   74.2    1.818  22.44999
## 8  8  161.9 female   62.8    0.169 2198.80256
```

Uuden rivin lisäys datakehikkoon on hieman monimutkaisempaa kuin uuden rivin lisääminen matriisiin, sillä ensin pitää tehdä uusi datakehikko, jolla on samat sarakkeet kuin alkuperäisellä (samassa järjestyksessä), ja vasta sitten liittää se komennolla `rbind`. Käyttäjän tulee myös huolehtia siitä, että sarakkeet ovat samaa tyyppiä kuin alkuperäisessä datakehikossa.

```
new_row <- data.frame(ID = 11, height = 182, gender = "male",
                      weight = 81.2, height_m = 1.82, BMI = 81.2 / 1.82^2)
rbind(study_data, new_row)
```

```
##   ID height gender weight height_m      BMI
## 1  1  189.8   male   78.2     1.898  21.70773
## 2  2  184.0 female   65.8     1.840  19.43526
## 3  3  173.8   male   49.2     1.738  16.28792
## 4  4  175.9   male   71.2     1.759  23.01168
## 5  5  169.0 female   58.3     1.690  20.41245
## 6  6  183.7   male   54.1     1.837  16.03168
## 7  7      NA   male   74.2     1.818  22.44999
## 8  8  161.9 female   62.8     0.169 2198.80256
## 9 11  182.0   male   81.2     1.820  24.51395
```

5.2 Osajoukkojen valinta

Aineistosta voi poimia osajoukon hakasulkujen avulla indeksoimalla. Osajoukon poimintaan tarvitaan usein vertailuoperattoreita, ja jos kriteerejä on useita, niin tarvitaan myös useita loogisia operaattoreita. Tarkemmin operaattoreita käsitellään luvussa Loogiset operaattorit. Voit käyttää kyseisen osion taulukkoa apuna jo tässä osiossa.

```
# Filter only females
study_data[study_data$gender == "female", ]
```

```
##   ID height gender weight height_m      BMI
## 2  2  184.0 female   65.8     1.840  19.43526
## 5  5  169.0 female   58.3     1.690  20.41245
## 8  8  161.9 female   62.8     0.169 2198.80256
```

```
# Filter individuals whose height is less than or equal to 175
study_data[study_data$height <= 175, ]
```

```
##   ID height gender weight height_m      BMI
## 3  3  173.8   male   49.2     1.738  16.28792
## 5  5  169.0 female   58.3     1.690  20.41245
## NA NA      NA   <NA>      NA      NA      NA
## 8  8  161.9 female   62.8     0.169 2198.80256
```

```
# Filter individuals whose height is not missing and is less than or equal to 175
study_data[!is.na(study_data$height) & study_data$height <= 175, ]
```

```
##   ID height gender weight height_m      BMI
## 3  3  173.8   male   49.2     1.738  16.28792
## 5  5  169.0 female   58.3     1.690  20.41245
## 8  8  161.9 female   62.8     0.169 2198.80256
```

```
# Use multiple filter criteria
study_data[study_data$height <= 175 & study_data$gender == "female", ]
```

```
##   ID height gender weight height_m      BMI
```

```
## 5 5 169.0 female 58.3 1.690 20.41245
## 8 8 161.9 female 62.8 0.169 2198.80256
```

5.3 Faktorit

R:n numeeriset vektorit ovat lähtökohtaisesti jatkuva-asteikollisia. Olet ehkä ihmetellytkin, miten kategorinen muuttuja määritellään. Kategorista muuttujaa sanotaan R:ssä faktoriksi. Numeerisen tai tekstimuotoisen muuttujan tai vektorin voi muuttaa faktori-muotoiseksi muuttujaksi **factor** -funktiolla.

```
# Let's change gender from character string to a factor and rename it as fgender
study_data$fgender <- factor(study_data$gender)

# Let's now compare the printing of gender and fgender
study_data$gender
```

```
## [1] "male" "female" "male" "male" "female" "male" "male" "female"
study_data$fgender
```

```
## [1] male female male male female male male female
## Levels: female male
```

Huomataan, että faktori tulostaa faktorin tasot eli kaikkien mahdollisten luokkien nimet faktorin perässä: **Levels: female male**.

Usein vastaan tulee myös tilanne, jossa faktorin eri tasoja vastaavat kokonaisluokuarvot, kuten tässä esimerkissä luvut 1, 2 ja 3. Tällaisessa tilanteessa faktorin tasojen merkitys on usein annettu jossain dokumenttitiedostossa. Tällöin faktorin tasot ja niiden kuvaukset (labels) tulee määrittää käsin.

```
# Create a data for this example
wall_dat <- data.frame(building_ID = c(1, 2, 3, 4, 5, 6), building_material = c(1, 1, 2, 2, 3, 3))

# Name is 'building_material' very long, I want to rename it
names(wall_dat) <- c("building_ID", "build_mat")

# We know from some kind of documentation that 1 stands for "wood", 2 is "steel" and 3 is "brick"
wall_dat$fbuild_mat <- factor(wall_dat$build_mat, levels = c(1, 2, 3), labels = c("wood", "steel", "brick"))

str(wall_dat)
```

```
## 'data.frame': 6 obs. of 3 variables:
## $ building_ID: num 1 2 3 4 5 6
## $ build_mat : num 1 1 2 2 3 3
## $ fbuild_mat : Factor w/ 3 levels "wood","steel",...: 1 1 2 2 3 3
```

5.4 Extra: Lääketutkimusesimerkki

R:ssä on aiemmin nähtyjen numeric, character ja logical-vektorien lisäksi muitakin vektoriluokkia, tärkeimpänä näistä factor. Factor-vektoreihin tallennetaan kategorisia muuttujia, kuten tutkimuksessa määrättyjä ryhmiä, aikapisteitä tms. Luodaan esimerkiksi factor-vektori, jossa on kuvitteellisen lääketutkimuksen osallistujien ryhmätiedot:

```
groups <- as.factor(c("drug1", "drug2", "control", "drug1", "control",
                      "drug2", "drug2", "control", "control", "drug1"))
groups

## [1] drug1 drug2 control drug1 control drug2 drug2 control control
## [10] drug1
## Levels: control drug1 drug2
```

Factoreita voi luoda muista vektoreista funktioilla `factor` tai `as.factor`. `as.factor` muuntaa vektorin automaattisesti ja nopeasti factoriksi, ja säilyttää myös jo valmiiksi factor-luokan vektorien tasojen järjestyksen (tästä lisää pian).

Kuten tulosteesta nähdään, factor-vektorin tulostus tulostaa factorin alkiot (HUOM: ei lainausmerkkejä) sekä factorin tasot. Factorit ovat pinnan alla kokonaisluku- eli integer-vektoreita, joissa on päällä "kerros", joka määrittää factorin tasot. Edellä nähty vektori `groups` näyttää siis tältä:

Levels	drug1	drug2	control	drug1	control	drug2	drug2	control	control	drug1
Integers	2	3	1	2	1	3	3	1	1	2

Factorien tasoille annetaan siis lukuarvot ykkösestä eteenpäin. Oletuksena ensimmäinen taso eli taso 1 on aakkosissa ensimmäinen arvo, tai pienin lukuarvo jos factori tehdään numeerisista muuttujista. Lukuarvot saa näkyville muuntamalla factorin numeeriseksi vektoriksi:

```
as.numeric(groups)

## [1] 2 3 1 2 1 3 3 1 1 2
```

Tasojen järjestyksen voi myös päättää itse. Tämä on tärkeää, sillä kuten pian nähdään, factorin ensimmäinen taso on monissa tilastollisissa testeissä ns. referenssitaso, johon muita tasoja verrataan. Usein esiintyvä tapaus ovat tutkimukset, joissa on ryhmät nimeltä case ja control. Koska case on aakkosissa ennen controllia, R käyttää oletuksen case-ryhmää referenssitasona, ja testaa miten control-ryhmä poikkeaa tästä tasosta, vaikka haluaisimme päinvastaisen tuloksen. Tasot voi itse määrittää näin:

```
study_groups <- factor(c("case", "control", "control", "case", "case"),
                      levels = c("control", "case"))
```

```
study_groups
```

```
## [1] case    control control case    case  
## Levels: control case
```

Nyt tasot ovat oikeassa järjestyksessä!

Kuten aiemmin mainittiin, factoreita voi tehdä myös numeerisista vektoreista. HUOM: muista, että `as.numeric()` palauttaa factorin kokonaislukuarvot, ei alkuperäisiä lukuja. Alkuperäiset luvut saa käyttämällä ensin `as.character-` funktiota, joka muuttaa factorin tasot merkkijonovektoriksi.

```
time_points <- as.factor(c(0, 0, 1, 1, 5, 5, 1, 0, 5))  
time_points
```

```
## [1] 0 0 1 1 5 5 1 0 5  
## Levels: 0 1 5
```

```
# Probably not what you expect  
as.numeric(time_points)
```

```
## [1] 1 1 2 2 3 3 2 1 3  
# First to character, then to numeric  
as.numeric(as.character(time_points))
```

```
## [1] 0 0 1 1 5 5 1 0 5
```


Chapter 6

Tunnusluvut

Tunnusluvut (engl. statistics) ovat keskeinen osa tilastotiedettä. Tunnuslukujen avulla voidaan tiivistää ja tarkastella aineistoa. Tässä harjoittelempa tyypillisimpien tunnuslukujen laskemista aineistosta. Näitä tunnuslukuja voi sanoa myös empiirisiksi, koska ne on laskettu aineistosta.

6.1 Sijaintia kuvaavat tunnusluvut

6.1.1 Minimi ja maksimi

Minimi tarkoittaa aineiston pienintä arvoa kyseiselle muuttujalle. Maksimi on vastaavasti suurin arvo. Minimi ja maksimi ovat periaatteessa helppo laskea funktioiden `min` ja `max` avulla, mutta niihinkin liittyy pari pientä sudenkuoppaa. Funktiot `min` ja `max` hyväksyvät argumenteikseen vain numeerisia vektoreita.

```
dat_for_loc <- c(-1.25, -4.1, 1.16, -3.05, 4.17, 0.73, -3.14, 3.39, -2.55, 0.4)
min(dat_for_loc)
```

```
## [1] -4.1
```

```
max(dat_for_loc)
```

```
## [1] 4.17
```

Joskus minimiä ja maksimia tarvitaan tilanteessa, jossa halutaan vaikkapa muuttaa kaikki negatiiviset arvot nolliksi (tai positiiviset, jos maksimi). Tämä onnistuu helpoiten funktioiden `pmin` ja `pmax` avulla. Samalla tapaa, jos halutaan kaikki lukua 1 pienemmät luvut muutettua luvuksi 1, niin tämä onnistuu vaihtamalla luku 0 lukuun 1.

```
# We want to get rid of all values below 0 and make them 0
pmin(dat_for_loc, 0)
```

```
## [1] -1.25 -4.10  0.00 -3.05  0.00  0.00 -3.14  0.00 -2.55  0.00
# Similar, but get rid of all values over 0
pmax(dat_for_loc, 0)
```

```
## [1] 0.00 0.00 1.16 0.00 4.17 0.73 0.00 3.39 0.00 0.40
# We can do similar things to any limit, e.g. 1
pmin(dat_for_loc, 1)
```

```
## [1] -1.25 -4.10  1.00 -3.05  1.00  0.73 -3.14  1.00 -2.55  0.40
```

Funktiota `pmin` ja `pmax` voi käyttää vieläkin yleisemmässä muodossa antamalla yksittäisen lukuarvon sijasta vektorin. Näitä emme käsittele tässä, mutta kiinnostuneet voivat kokeilla lisää itse.

6.1.2 Keskiarvo

Keskiarvo saadaan laskemalla muuttujan kaikki havainnot yhteen ja jakamalla summa havaintojen määrällä. Esimerkiksi aineiston 1, 2, 3, 4 keskiarvo on $(1 + 2 + 3 + 4)/4 = 2.5$. Keskiarvoa satunnaismuuttujan X havainnoille voidaan merkitä matemaattisesti seuraavasti

$$\bar{x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i = \frac{x_1 + x_2 + \dots + x_n}{n},$$

missä merkintä \bar{x} tarkoittaa itse keskiarvoa, x_1, \dots, x_n ovat havaintoja ja n on havaintojen määrä.

Keskiarvo voidaan laskea helposti funktiolla `mean`.

```
tooth_length <- ToothGrowth$len
mean(tooth_length)
```

```
## [1] 18.81333
```

Mikäli muuttujassa on puuttuvia arvoja (NA) niin keskiarvoksi tulee oletusarvoisesti NA. Puuttuvat arvot voi jättää pois keskiarvon laskemisessa antamalla funktiolle lisäargumentiksi `na.rm = TRUE`.

```
# Create some data
dat_for_mean <- c(1, 2, NA, 4)
# Data with NA results mean with NA
mean(dat_for_mean)
```

```
## [1] NA
```

```
# Leave NA-values out and calculate mean from the remaining ones
mean(dat_for_mean, na.rm = TRUE)
```

```
## [1] 2.333333
```


6.1.3 Mediaani

Mediaani ilmaisee aineiston keskimmäisen havainnon. Toisin sanoen puolet havainnoista on mediaania suurempia ja puolet mediaania pienempiä. Esimerkiksi aineiston 1, 1, 2, 3, 5 mediaani on 2. Jos aineistossa on parillinen määrä lukuja, otetaan kaksi keskimmäistä ja lasketaan ne yhteen ja jaetaan kahdella (keskiarvo). Aineiston 3, 3, 5, 6, 7, 17 mediaani on $(5 + 6)/2 = 5.5$. Mediaani on helppoa laskea funktiolla `median`.

```
# Let's think about median
dat_for_median <- c(7, 2, 3, 4, 1, 7, 0, 4, 3, 3, 2, 6)
dat_for_median

## [1] 7 2 3 4 1 7 0 4 3 3 2 6
sort(dat_for_median) # Median would be the middle value in the arranged data, thus 3

## [1] 0 1 2 2 3 3 3 4 4 6 7 7
# Getting median in R
median(dat_for_median)

## [1] 3
```

6.1.4 Kvantiilit

Mediaani siis kertoi kohdan, jossa 50 % aineistosta on pienempiä kuin kyseinen arvo. Entä jos haluamme luvun, jota pienempiä ovat vaikkapa 10 % aineiston havainnoista tai mikä tahansa muu osuus? Tällainen yleistys on nimeltään kvantiili. Joillakin kvantiileilla on erityisnimet. Ne ovat

- mediaani (50 % aineistosta on tätä pienempiä)
- alakvantiili (25 %)
- yläkvantiili (75 %)
- desiilit (10% välein)
 - 10 %:n desiili, 20 %:n desiili jne.

Haluamansa kvantiilin voi laskea funktiolla `quantile`. Jos haluat laskea 30 %:n kvantiilin, niin anna argumentille `probs` tätä vastaava suhteellinen osuus eli 0.30.

```
quantile(dat_for_median, probs = 0.30)

## 30%
## 2.3
```

`quantile`-funktioille voi antaa useita kvantiileita laskettavaksi kerralla. Tällöin argumentille `probs` on annettava vektori. Esimerkiksi kvantiilit ja mediaanin voi laskea samanaikaisesti näin:

```
quantile(dat_for_median, probs = c(0.25, 0.5, 0.75))
```

```
## 25% 50% 75%
## 2.0 3.0 4.5
```

Eräs jännä seikka on se, että laskemalla 0 %:n ja 100 %:n kvantiilit saa tulokseksi minimin ja maksimin. Samaan lopputulokseen pääsee myös funktiolla `range`. Kokeillaan tätä

```
# 0 % and 100 % quantile gives a range of the data
quantile(dat_for_median, probs = c(0.00, 1.00))
```

```
## 0% 100%
## 0 7
```

```
# Let's compare with min and max
min(dat_for_median)
```

```
## [1] 0
```

```
max(dat_for_median)
```

```
## [1] 7
```

```
# There is also function called range
range(dat_for_median)
```

```
## [1] 0 7
```

Esimerkiksi viiksilaatikko-kuvaa vastaavat lukuarvot eli minimin, alakvartiilin, mediaanin, yläkvartiilin ja maksimin saa kätevästi `quantile`-funktiolla antamalla `probs`-argumentille vektorin `c(0, 0.25, 0.5, 0.75, 1)`. Tätä sanotaan joskus viiden numeron yhteenvedoksi.

```
quantile(dat_for_median, probs = c(0, 0.25, 0.5, 0.75, 1))
```

```
## 0% 25% 50% 75% 100%
## 0.0 2.0 3.0 4.5 7.0
```

6.1.5 Moodi

Moodi ilmaisee muuttujan yleisimmän arvon. Valitettavasti R:ssä ei ole valmista funktiota moodin laskemiseen. Sen sijaan funktio nimeltään `mode` antaa objektin tyyppin, eikä laske moodia. Jos moodin haluaa laskea R:ssä, on ensin muodostettava aineistosta frekvenssitaulukko ja sitten etsittävä taulokosta se arvo, josta on eniten havaintoja, eli suurin frekvenssi

```
# Find out the mode
```

```
dat_for_mode <- c(7, 2, 3, 4, 1, 7, 0, 4, 3, 3, 2, 6, 1, 3, 3, 1, 6, 0, 1, 3,
                  0, 6, 4, 2, 3, 2, 2, 7, 3, 1, 5, 3, 4, 3, 3, 2, 2, 4, 2, 1,
                  5, 3, 2, 2, 2, 3, 4, 2, 5, 3, 4, 2, 1, 4, 2, 3, 1, 1, 4, 3,
```

```

2, 3, 5, 4, 4, 4, 1, 3, 1, 3, 5, 2, 3, 1, 4, 2, 4, 2, 1, 0,
3, 3, 3, 3, 4, 4, 4, 3, 4, 4, 2, 1, 2, 4, 4, 4, 6, 2, 3, 2)
tab <- table(dat_for_mode)
# Let's see how is tab
tab

## dat_for_mode
##  0  1  2  3  4  5  6  7
##  4 14 22 26 22  5  4  3

# Let's pick up the largest frequency using which.max function
tab[which.max(tab)]

##  3
## 26

# Mode is 3 and the frequency is 26

# Let's pick up only the value 3
names(tab)[which.max(tab)]

## [1] "3"

# That is character so let's convert it to numeric
as.numeric(names(tab)[which.max(tab)])

## [1] 3

```

Ylläoleva käy itse asiassa hyvästä esimerkistä tilanteesta, jossa seuraavaksi tekisin viimeisen rivin funktioksi ja jatkossa käyttäisin kyseistä funktiota työssäni. Funktiohin palataan osiossa Funktiot. En malta olla tekemättä funktiota, joten olkoon alla esimerkki moodi-funktiosta ilman suurempia selityksiä.

```

# Write a function for mode
moodi <- function(x) {
  tab <- table(x)
  as.numeric(names(tab)[which.max(tab)])
}

# Use that function
moodi(dat_for_mode)

## [1] 3

```

6.2 Yhteenveto datasta (summary)

Kätevä tapa saada nopea yhteenveto datakehikon kaikista muuttujista on soveltaa `summary`-funktioita datakehikkoon.

```
# Calculate summary for ToothGrowth data
summary(ToothGrowth)
```

```
##      len      supp      dose
## Min.   : 4.20   OJ:30   Min.   :0.500
## 1st Qu.:13.07   VC:30   1st Qu.:0.500
## Median :19.25             Median :1.000
## Mean   :18.81             Mean   :1.167
## 3rd Qu.:25.27             3rd Qu.:2.000
## Max.   :33.90             Max.   :2.000
```

‘summary’ huolii myös yksittäisen vektorin, jolloin yhteenvedo tulostuu vaakasuuntaisena.

```
tooth_length <- ToothGrowth$len
summary(tooth_length)
```

```
##      Min. 1st Qu.  Median    Mean 3rd Qu.    Max.
##      4.20   13.07   19.25   18.81   25.27   33.90
```

6.3 Varianssi ja keskihajonta

Yksittäiselle numeeriselle muuttujalle voidaan laskea varianssi funktiolla `var`. Varianssia tulkittaessa kannattaa muistaa, että varianssin mittayksikkö ei ole sama kuin alkuperäisen muuttujan, vaan mittayksikkö tulee korottaa toiseen potenssiin. Esim. jos pituuden yksikkö on cm, niin pituuden varianssin yksikkö on cm^2 . Käytännössä tulkintaa kannattaa yrittää keskihajonnan avulla.

```
# pull the variable from data frame and use it directly in function var
var(ToothGrowth$len)
```

```
## [1] 58.51202
```

```
# calculate the variance-covariance matrix for entire data frame
# (gives NA to any pairs with categorical variables)
# variances are obtained from the diagonal (58.51, NA, 0.3954)
var(ToothGrowth)
```

```
## Warning in var(ToothGrowth): NAs introduced by coercion
```

```
##      len supp      dose
## len 58.512023 NA 3.8612994
## supp      NA  NA      NA
## dose 3.861299 NA 0.3954802
```

Keskihajonta (engl. standard deviation) saadaan vastaavasti funktiolla `sd`. Keskihajonta on varianssin neliöjuuri.

```
# standard deviation  
sd(ToothGrowth$len)
```

```
## [1] 7.649315
```

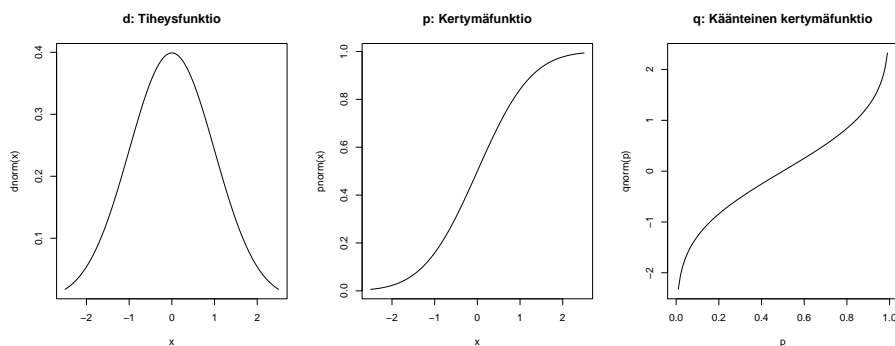

Chapter 7

Todennäköisyysjakaumat R:ssä

Monille yleisimmistä tilastollisista jakaumista eli todennäköisyysjakaumista on valmiita funktiota R:ssä. Funktioita on neljää eri tyyppiä, jotka merkitään funktion nimen ensimmäisellä kirjaimella.

- d: Tiheysfunktio: mikä on tiheysfunktion arvo pisteessä x ?
- p: Kertymäfunktio: millä todennäköisyydellä jakaumasta poimittu arvo on pienempi/suurempi kuin q ?
- q: Käänteinen kertymäfunktio (eli kvantiilifunktio): mille arvolle kertymäfunktio palauttaa todennäköisyyden p ?
- r: satunnaislukugeneraattori: arvo eli simuloi satunnaisia havaintoja jakaumasta.

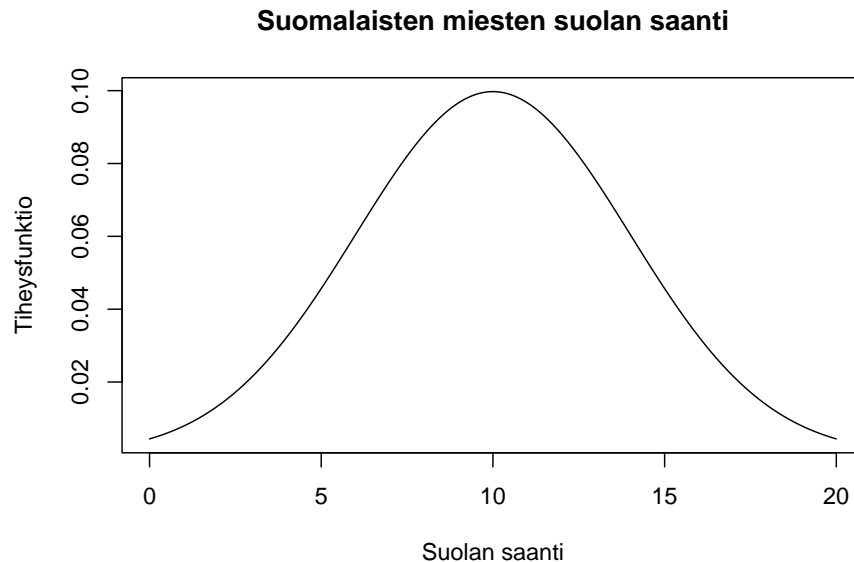
Alla ovat kuvaajat ensimmäisestä kolmesta funktiosta standardinormaalijakau-
malle (pääte `norm`):



7.1 Esimerkki: normaalijakauma

Otetaan muutama käytännön esimerkki. Oletetaan, että suomalaisten miesten suolan saanti on normaalijakautunut odotusarvolla 10 grammaa päivässä ja keskihajonta on 4 grammaa päivässä (odotusarvo on totta, keskihajonta allekirjoittaneen hihasta). Piirretään ensin kuva jakaumasta välillä $[0, 20]$ grammaa päivässä. Jakauman muoto saadaan funktiolla `dnorm`, eli yllä olevan ohjeen mukaan d-alkuinen funktio antaa tiheysfunktion, ja norm-pääte viittaa normaalijakaumaan. Normaalijakauman funktiolle tulee kertoa jakauman odotusarvo (`mean`) ja keskihajonta (`sd`).

```
# Sequential vector of salt consumption
salt <- seq(0, 20, by = 0.1)
# Density function
density <- dnorm(salt, mean = 10, sd = 4)
# Line plot
plot(salt, density, type = "l",
     xlab = "Suolan saanti", ylab = "Tiheysfunktio",
     main = "Suomalaisten miesten suolan saanti")
```



Aikuisten saantisuositus on enintään 5 grammaa suolaa päivässä. Kuinka moni suomalainen mies syö tämän jakauman mukaan sopivasti suolaa? Vastaus saadaan kertymäfunktioista ($P(X \leq 5)$) `pnorm`-funktion avulla.

```
pnorm(5, mean = 10, sd = 4)
```

```
## [1] 0.1056498
```


Tämän jakauman mukaan vain noin 11 % suomalaisista miehistä syö suolaa sopivasti!

Suomalaisten naiset syövät keskimäärin 7 grammaa suolaa päivässä. Kuinka moni mies syö tätä enemmän suolaa? `pnorm` antaa oletuksena arvon $P(X \leq 7)$. Nyt halutaan kuitenkin tietää $P(X > 7)$, joka saadaan asettamalla `lower.tail = FALSE`:

```
pnorm(7, mean = 10, sd = 4, lower.tail = FALSE)
```

```
## [1] 0.7733726
```

Noin 77 % miehistä syö suolaa keskimääräistä naista enemmän.

Entä jos halutaan tietää, kuinka paljon suolaa eniten syövä 10 % vähintään saa? Tähän voidaan vastata funktiolla `qnorm`, joka on jakauman käänteinen kertymäfunktio, eli funktion `pnorm` käänteisfunktio. Samoin kuin `pnorm`, `qnorm`-funktion oletus on, että todennäköisyydet lasketaan jakauman vasemmasta hännästä alkaen. Vastaus tähän kysymykseen selviää siis näillä kahdella tavalla:

```
qnorm(0.1, mean = 10, sd = 4, lower.tail = FALSE)
```

```
## [1] 15.12621
```

```
# OR
```

```
qnorm(0.9, mean = 10, sd = 4)
```

```
## [1] 15.12621
```

Eli tämän jakauman mukaan eniten suolaa saava 10 % miehistä syö yli kolminkertaisen määrän suolaa suositukseen verrattuna.

7.2 Muita jakaumia

Vastaavat funktiot löytyvät myös muille jakaumille, kuten:

- Khiin neliö: `chisq`
- Eksponentiaalinen: `exp`
- Studentin t : `t`
- Tasajakauma: `unif`

ja niin edelleen.

Chapter 8

Kuvaajien piirtäminen

Tässä kappaleessa tutustutaan kuvaajien piirtämiseen.

R:n piirtokomennot voidaan jakaa kolmeen ryhmään:

- Korkean tason grafiikkatoiminnot piirtävät aina uuden kuvan
- Alemman tason grafiikkatoiminnot lisäävät olemassa olevaan kuvaan uusia osia
- Interaktiiviset grafiikkatoiminnot mahdollistavat vuorovaikutuksen kuvan kanssa. (Näiden käyttö on helpompaa opettaa videolla, joten niitä ei käsitellä tässä)

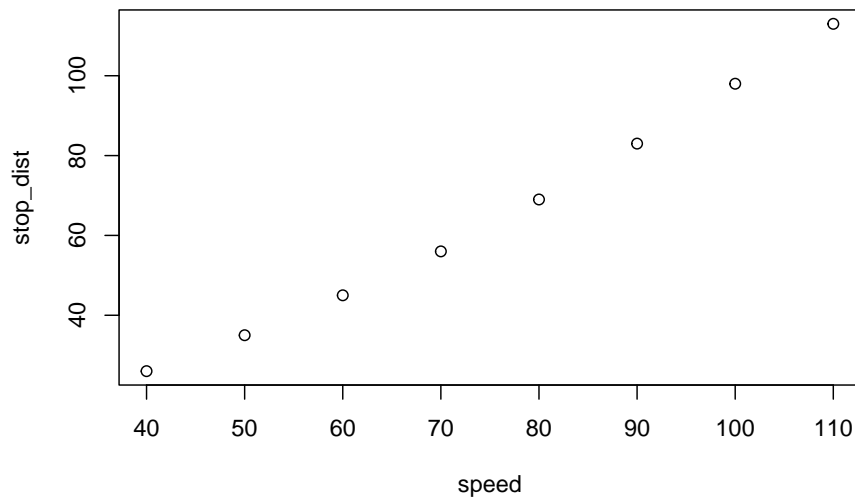
8.1 Korkean tason piirtofunktiot

8.1.1 plot

Korkean tason piirtofunktioista ylivoimaisesti yleisin on `plot`. `plot`-funktio on hyvin monipuolinen, mutta sen yleisin käyttötarkoitus on piirtää hajontakuvio (scatter plot) yhdestä tai kahdesta vektorista. Alla on hajontakuvio auton jarrutusmatkoista eri nopeuksilla:

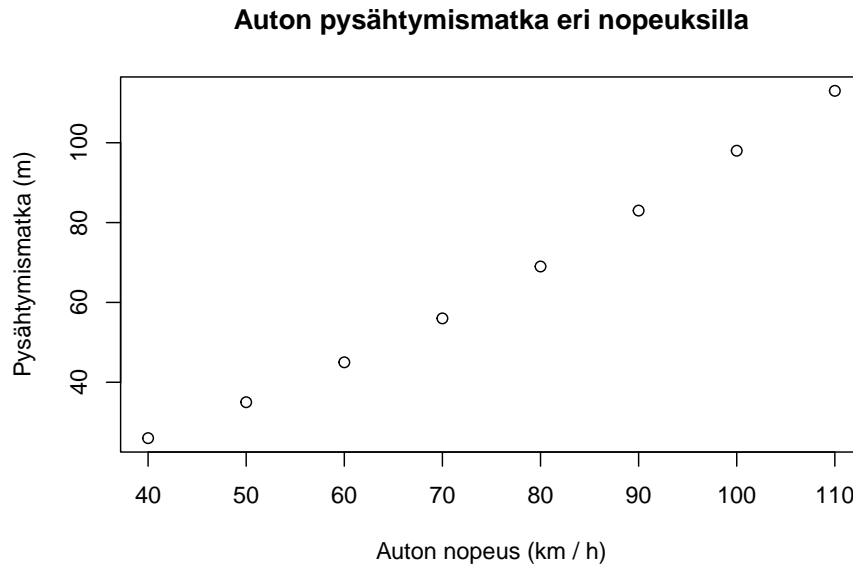
```
# Car speeds (km/h)
speed <- seq(40, 110, by = 10)
# Stopping distances (m)
stop_dist <- c(26, 35, 45, 56, 69, 83, 98, 113)

plot(x = speed, y = stop_dist)
```



`plot`-funktiolle annetaan siis kaksi yhtä pitkää vektoria, joissa ovat pisteiden x - ja y -koordinaatit. Halutessaan kuvalle voi antaa otsikon (title) ja nimetä uudestaan kuvan akselit (axis labels). Tämä onkin usein hyvä idea, sillä R:n muuttujien nimissä ei saa olla välilyöntejä tai erikoismerkkejä, mutta usein näiden käyttö akselien nimissä on hyvin informatiivista.

```
plot(x = speed, y = stop_dist,  
     main = "Auton pysähtymismatka eri nopeuksilla",  
     xlab = "Auton nopeus (km / h)", ylab = "Pysähtymismatka (m)")
```



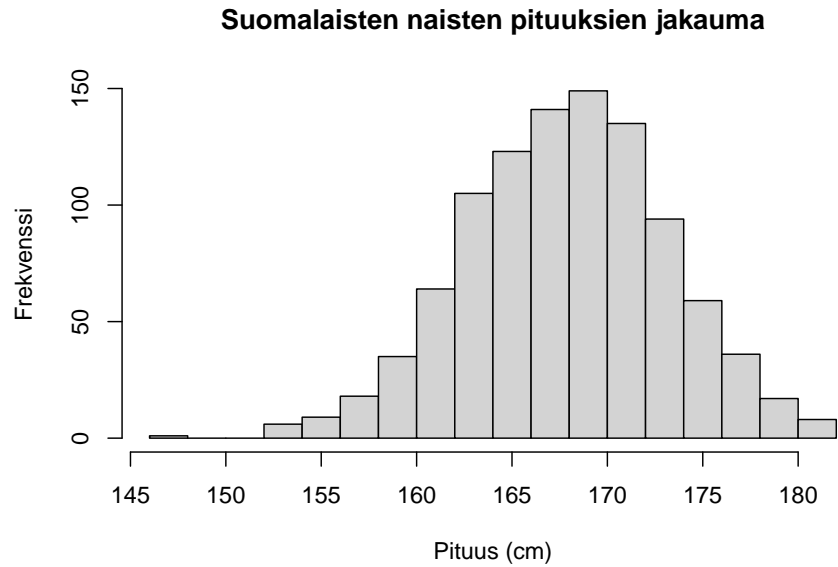
`plot`-funktiolle voi antaa muitakin argumentteja, jotka säätelevät mm. pisteiden väriä, kokoa ja muotoa, akselien rajoja jne. Yleisiä kuvaajien parametreja voi säätää funktiolla `'par'` (graphical parameters).

8.1.2 Muut korkean tason funktiot

Tässä on esimerkkejä muutamista muista yleisistä korkean tason funktioista:

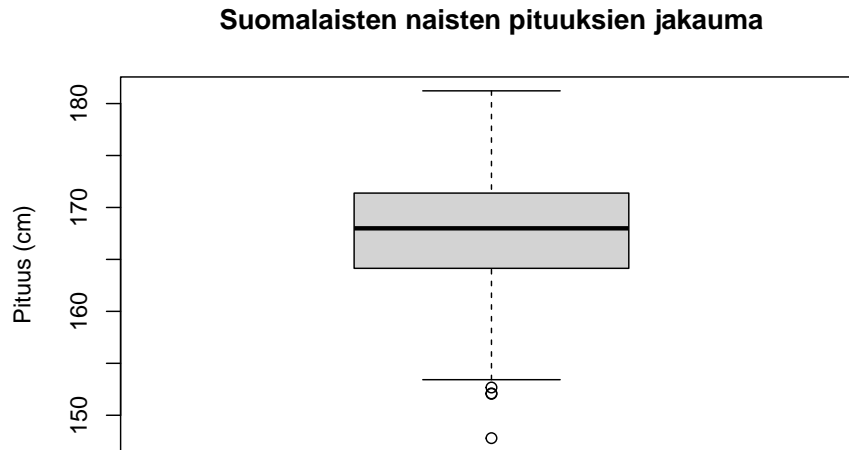
`hist` piirtää histogrammeja. Histogrammit kuvaavat jatkuvan muuttujan jakaumaa.

```
# A vector of 1000 observations from a normal distribution of heights of Finnish women
heights <- rnorm(n = 1000, mean = 168, sd = 5.4)
hist(heights, breaks = 20,
      main = "Suomalaisten naisten pituuksien jakauma",
      xlab = "Pituus (cm)", ylab = "Frekvenssi")
```



Toinen tapa kuvata jatkuvan muuttujan jakaumaa on viiksilaatikko (joskus myös laatikko-viikset -kuvaaja), joita piirretään `boxplot`-funktioilla:

```
boxplot(heights, breaks = 20,  
        main = "Suomalaisten naisten pituuksien jakauma",  
        ylab = "Pituus (cm)")
```

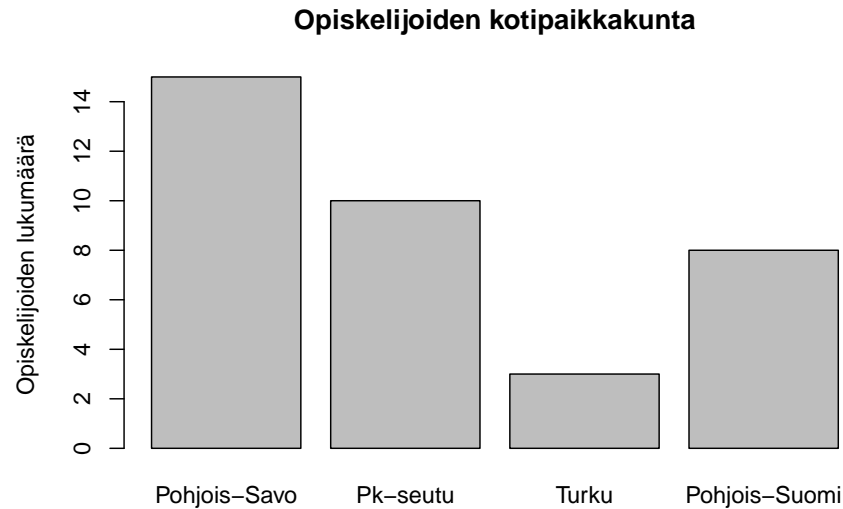


Vastaavasti diskreetin muuttujan jakaumaa voi kuvata pylväsdiagrammilla käyttäen `barplot`-funktioita. Alla on esimerkki opiskelijoiden kotipaikkakuntien jakaumasta. Tässä tulee myös tutuksi uusi vektorien ominaisuus: nimeäminen. Nimettyjen vektorien (named vectors) alkioilla on järjestyslukujen lisäksi nimet. Nimet annetaan olla olevaan tyyliin `nimi = alkio`. Nimetyt vektori käyttäytyvät aivan kuin tavalliset vektorit, mutta niitä voi indeksoida myös nimien avulla, ja jotkut funktiot, kuten `barplot`, käyttävät hyödyksi alkioden nimiä. Nimettyjen vektorien käyttö ei ole kurssin ydinasioita, mutta on joskus hyvin kätevä temppu osata.

```
origin <- c("Pohjois-Savo" = 15, "Pk-seutu" = 10, "Turku" = 3,
            "Pohjois-Suomi" = 8)
origin
```

```
## Pohjois-Savo      Pk-seutu      Turku Pohjois-Suomi
##              15              10              3              8
origin["Turku"]
```

```
## Turku
##      3
barplot(origin,
        main = "Opiskelijoiden kotipaikkakunta",
        ylab = "Opiskelijoiden lukumäärä")
```

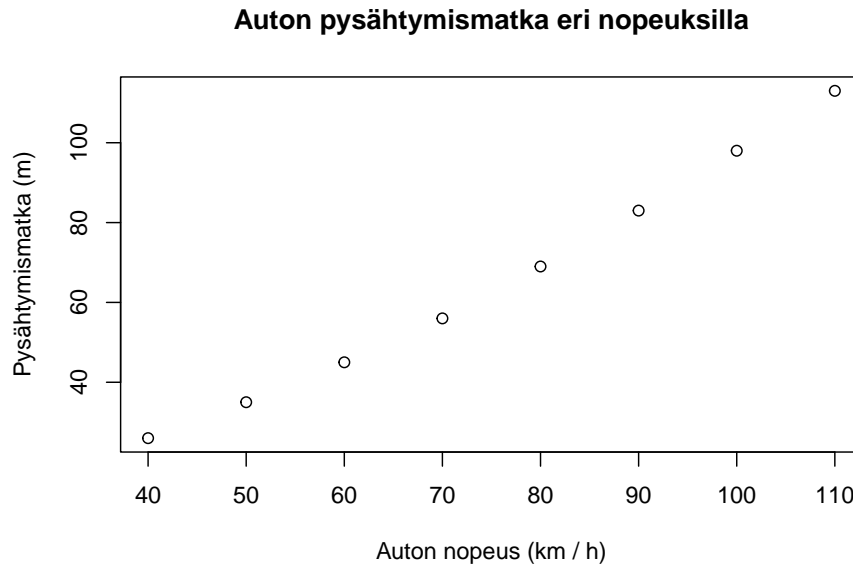


8.2 Alemman tason grafiikkatoiminnot

Alemman tason grafiikkatoiminnoilla voi lisätä olemassa olevaan kuvaan lisää osia, kuten tekstiä, pisteitä tai selitteen (legend).

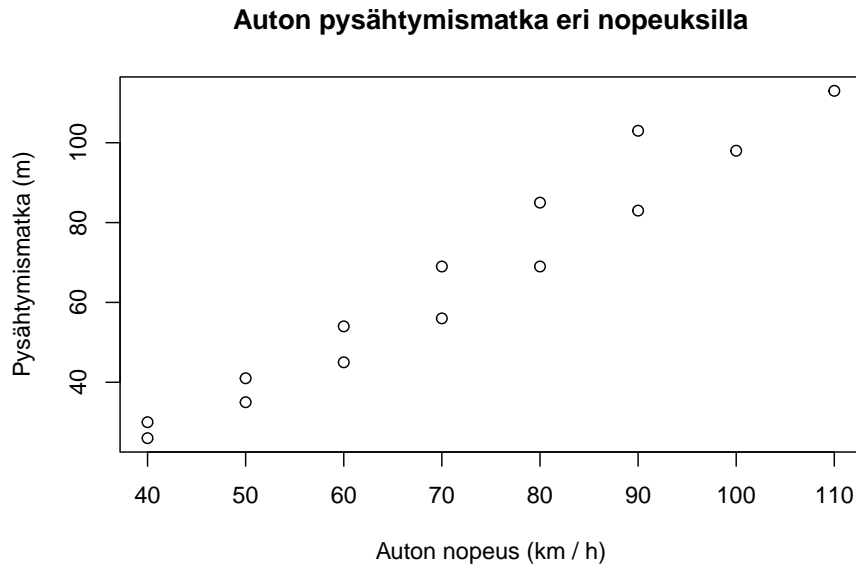
Otetaan esimerkiksi alussa nähty kuvaaja autojen pysähtymismatkoista ja lisätään siihen uusia osia. Tässä vielä alkuperäinen kuva:

```
plot(x = speed, y = stop_dist,  
     main = "Auton pysähtymismatka eri nopeuksilla",  
     xlab = "Auton nopeus (km / h)", ylab = "Pysähtymismatka (m)")
```

Lisätään kuvaajan jarrutusmatkat liukkaalla kelillä. Uusia pisteitä voi piirtää `points`-funktiolla, jolle annetaan x- ja y-koordinaatit vektoreina ihan kuin `plot`-funktiollekin.

```
stop_dist_wet <- c(30, 41, 54, 69, 85, 103, 122, 143)
plot(x = speed, y = stop_dist,
     main = "Auton pysähtymismatka eri nopeuksilla",
     xlab = "Auton nopeus (km / h)", ylab = "Pysähtymismatka (m)")
points(x = speed, y = stop_dist_wet)
```

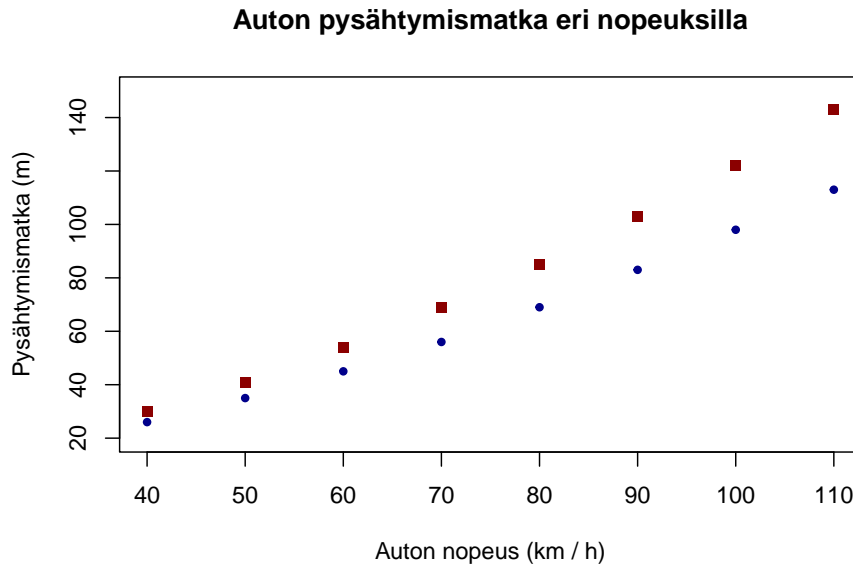


Ylläolevassa kuvaajassa on kaksi ongelmaa: ylimmät pisteet eivät näy, koska kuvaajan y -akseli loppuu kesken. y -akseli on piirretty alkuperäisten jarrutusmatkojen pohjalta, ja koska liukkaalla kelillä jarrutus kestää pidempään, uudet pisteet eivät mahdu kuvaajaan. Toinen ongelma on se, että pisteitä ei voi erottaa toisistaan.

Ensimmäinen ongelma ratkeaa säätämällä käsin y -akselin rajat. Tämä tapahtuu argumentilla `ylim`, jolle annetaan vektorissa ylä- ja alaraja (vastaavasti `xlim` säätää x -akselin rajat).

Lisäksi piirretään selvyys vuoksi pisteet eri värisinä ja eri kuvioilla. Argumentti `col` säätää pisteiden värin ja `pch` pisteiden muodon. Eri väri- ja muoto- vaihtoehdot löytyvät googlaamalla.

```
plot(x = speed, y = stop_dist,
     col = "darkblue", pch = 20,
     ylim = c(20, 150),
     main = "Auton pysähtymismatka eri nopeuksilla",
     xlab = "Auton nopeus (km / h)", ylab = "Pysähtymismatka (m)")
points(x = speed, y = stop_dist_wet, pch = 15, col = "darkred")
```

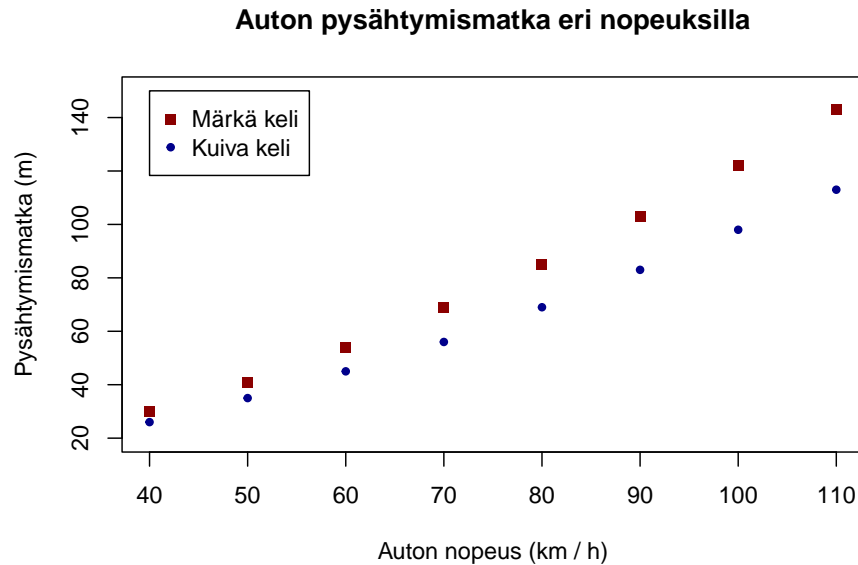


Nyt kuvaaja alkaa jo näyttää paremmalta, mutta kuvaajasta ei vielä voi päätellä, mitä eri väriset pisteet tarkoittavat. Lisätään siis kuvaajaan selite `legend`-komennolla. Selitteelle määritetään paikka kuvaajassa `x` ja `y` argumenteilla (vasemman yläkulman koordinaatit). Sen jälkeen annetaan selitetekstit (`legend`), sekä selitteen muodot ja värit (`pch` ja `col`, kuten aiemmin). HUOM! Selitteen symbolit ja värit on itse osattava laittaa oikeaan järjestykseen. Selitteen tekstit annetaan järjestyksessä ylhäältä alas, ja piirtomerkit tulee antaa samassa järjestyksessä.

```
plot(x = speed, y = stop_dist,
     col = "darkblue", pch = 20,
     ylim = c(20, 150),
     main = "Auton pysähtymismatka eri nopeuksilla",
     xlab = "Auton nopeus (km / h)", ylab = "Pysähtymismatka (m)")

points(x = speed, y = stop_dist_wet, pch = 15, col = "darkred")

legend(x = 40, y = 150,
       legend = c("Märkä keli", "Kuiva keli"),
       pch = c(15, 20), col = c("darkred", "darkblue"))
```



Tuunataan kuvaajaa vielä hiukan, ja lisätään siihen käyrä kuvaamaan jarrutusmatkan ennustetta `lines`-funktioilla.

Alla olevassa koodissa lasketaan ensin `lm`-funktion avulla sopivat parametrit käyrälle. Lineaarisia malleja käsitellään vasta kappaleessa lineaariset mallit, joten tässä vaiheessa niistä ei tarvitse vielä ymmärtää muuta kuin se, että `lm`-funktio sovittaa lineaarisen mallin (tässä tapauksessa muotoa $\text{matka} = a + b \cdot \text{nopeus} + c \cdot \text{nopeus}^2$), jonka perusteella voidaan ennustaa pysähtymismatkaa myös muille kuin mitatuille nopeuksille.

```
# Create vector of squared speeds to fit second order polynomial
speed_squared <- speed^2

# Model for dry weather
model_dry <- lm(stop_dist ~ speed + speed_squared)
prediction_dry <- model_dry$fitted.values

# Model for rainy weather
model_wet <- lm(stop_dist_wet ~ speed + speed_squared)
prediction_wet <- model_wet$fitted.values
```

`lines` tarvitsee `x` ja `y` argumentit kuten `points`, mutta piirtää viivan, ei pisteitä. Käytetään äsken laskettuja mallien antamia `prediction`-vektoreita `y`-koordinaatteina. Tehdään viivoista katkoviivoja argumentilla `lty = "dashed"` (`lty = line type`).

```

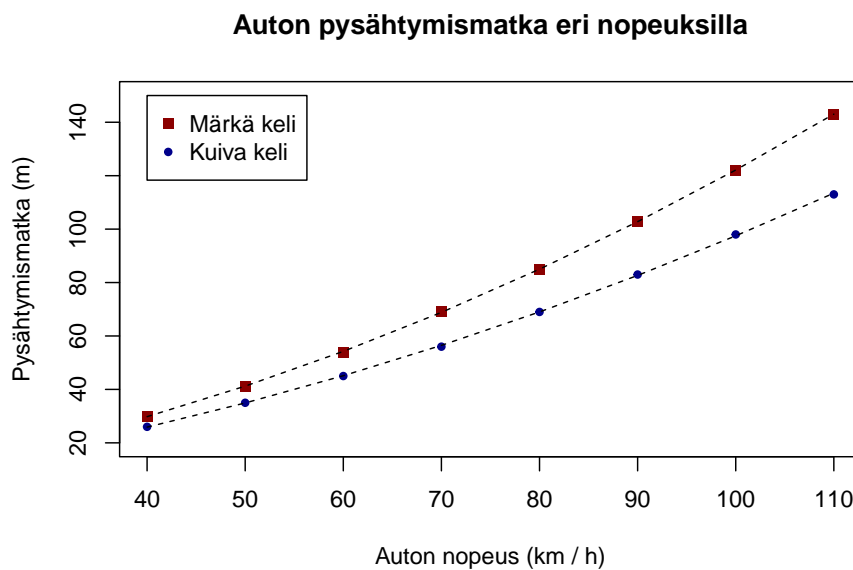
plot(x = speed, y = stop_dist,
     col = "darkblue", pch = 20,
     ylim = c(20, 150),
     main = "Auton pysähtymismatka eri nopeuksilla",
     xlab = "Auton nopeus (km / h)", ylab = "Pysähtymismatka (m)")

points(x = speed, y = stop_dist_wet, pch = 15, col = "darkred")

legend(x = 40, y = 150,
       legend = c("Märkä keli", "Kuiva keli"),
       pch = c(15, 20), col = c("darkred", "darkblue"))

lines(speed, prediction_dry, lty = "dashed")
lines(speed, prediction_wet, lty = "dashed")

```



Seuraavaksi voidaan värittää käyrät samoilla väreillä kuin pisteet, ja lisätä niille omat selitteet. Tässä vaiheessa selitteen tekemisestä tulee jo melko monimutkaista, sillä selitteessä on mukana pisteitä ja käyriä. Tästä syystä selitteen argumentteihin pitää laittaa puuttuvia arvoja `pch` ja `lty`-argumenteille, koska selitteen ensimmäiset rivit eivät viittaa mihinkään käyrään, vaan pelkästään pisteisiin ja vastaavasti kaksi alinta riviä viittaavat vain käyriin.

```

plot(x = speed, y = stop_dist,
     col = "darkblue", pch = 20,
     ylim = c(20, 150),

```

```

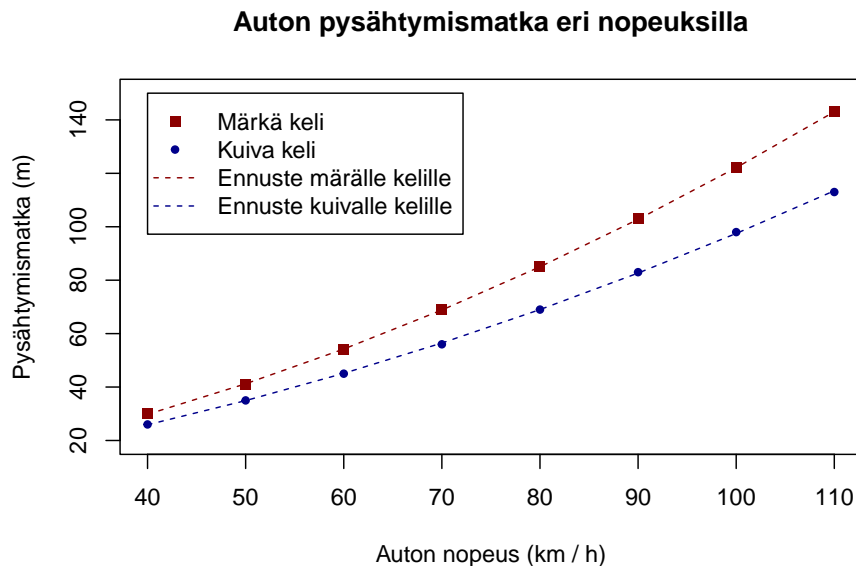
main = "Auton pysähtymismatka eri nopeuksilla",
xlab = "Auton nopeus (km / h)", ylab = "Pysähtymismatka (m)")

points(x = speed, y = stop_dist_wet, pch = 15, col = "darkred")

legend(x = 40, y = 150,
      legend = c("Märkä keli", "Kuiva keli",
                  "Ennuste märälle kelille",
                  "Ennuste kuivalle kelille"),
      pch = c(15, 20, NA, NA),
      lty = c(NA, NA, "dashed", "dashed"),
      col = c("darkred", "darkblue", "darkred", "darkblue"))

lines(speed, prediction_dry, lty = "dashed", col = "darkblue")
lines(speed, prediction_wet, lty = "dashed", col = "darkred")

```



Kuvaajamme on melkein valmis iltapäivälehteen muistuttamaan liukkaiden kelin vaaroista, mutta jotta siitä tulisi oikein säväyttävä, siinä pitää toki olla tekstiä! Lisätään siis vielä pieni tekstin pätkä, joka korostaa eroa liukkaan ja kuivan kelin välillä. Tekstiä voi lisätä `text`-funktioilla, jolle annetaan tuttuun tapaan `x` ja `y`-argumentit, joilla määritetään tekstin paikka ja `labels` määrittää itse tekstin (kaikki argumentit voivat olla myös pidempiä vektoreita, jolloin tulee useampi teksti eri paikkoihin). Lisäksi parametrilla `adj` (adjust) voi hienosäätää tekstin paikkaa. `adj` on vektori, jossa on hienosäätöarvot x - ja y -suunnissa.

```

plot(x = speed, y = stop_dist,
     col = "darkblue", pch = 20,
     ylim = c(20, 150),
     main = "Auton pysähtymismatka eri nopeuksilla",
     xlab = "Auton nopeus (km / h)", ylab = "Pysähtymismatka (m)")

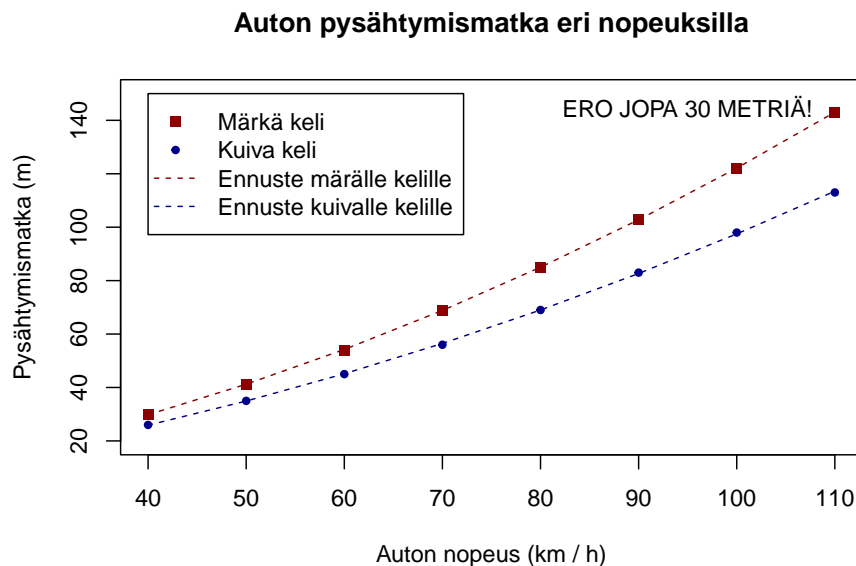
points(x = speed, y = stop_dist_wet, pch = 15, col = "darkred")

legend(x = 40, y = 150,
      legend = c("Märkä keli", "Kuiva keli",
                 "Ennuste märälle kelille",
                 "Ennuste kuivalle kelille"),
      pch = c(15, 20, NA, NA),
      lty = c(NA, NA, "dashed", "dashed"),
      col = c("darkred", "darkblue", "darkred", "darkblue"))

lines(speed, prediction_dry, lty = "dashed", col = "darkblue")
lines(speed, prediction_wet, lty = "dashed", col = "darkred")

text(x = 95, y = 145, labels = "ERO JOPA 30 METRIÄ!")

```



Kuvaajamme on nyt valmis!

8.3 Kuvaajien piirtäminen käytännössä

Jos äskeisen esimerkin aikana tuntui siltä, että näimme paljon työtä ja saimme lopputulokseksi kuvaajan, joka ei oikeastaan edes näytä kovin hyvältä, olet aivan oikeassa. Kuvaajien rakentaminen itse R:n peruskomennoilla on raskasta, ja usein perusgrafiikkatoimintoja käytetään lähinnä omaan käyttöön tulevien kuvaajien piirtämiseen nopeasti. Peruskomennot on kuitenkin hyvä hallita, sillä niitä saattaa tarvita valmiilla työkaluilla tehtyjen kuvaajien muokkaamiseen. Varsinkin tekstin lisääminen, sekä akselien nimeäminen ja otsikon muuttaminen ovat hyviä taitoja osata.

R tarjoaa paljon valmiita työkaluja erilaisten kuvaajien piirtämiseen. Valitettavasti tällä kurssilla ei ole aikaa sukeltaa näiden työkalujen käyttöön, sillä ennen niiden käyttöä pitää ymmärtää enemmän R:n monimutkaisemmista tietorakenteista, joita käsitellään seuraavilla viikoilla. Inspiraatiota ja motivaatiota voi kuitenkin hakea esimerkiksi R Graph Gallery-sivulta tai ggpubr-paketin ohjeista.

Chapter 9

Tilastollinen testaaminen

9.1 Testaamisen periaatteita

Tilastollisilla testeillä pyritään arvioimaan perusjoukkoa koskevien väitteiden paikkansapitävyyttä todennäköisyyslaskennan keinoin. Lähtökohtana on niin sanottu **nollahypoteesi** (H_0), joka yleensä vastaa tilannetta, jossa mahdolliset väitettä tukevat haivainnot ovat vain sattuman seurausta. Esimerkiksi jos tutkitaan onko jokin lääkeaine tehokas hoitokeino, voisi nollahypoteesi olla muotoa “ei vaikutusta”. Nollahypoteesiin liittyy aina **vastahypoteesi** (H_1), joka yleensä nollahypoteesin vastakohta, ja vastaa mielenkiinnon kohteena olevaa väitettä (esim. “on vaikutusta”).

Tilastolliset testit oletetaan nollahypoteesin olevan totta, jolloin epäuskottavat tulokset antavat aiheutta epäillä nollahypoteesin mielekkyyttä. Testiin liittyy yleensä **testisuure**, joka on jokin aineistosta laskettu tunnusluku. Testisuureen jakauman perusteella voidaan arvioida todennäköisyyttä, että havaittu tulos olisi vain sattuman seurausta. Tätä todennäköisyyttä kutsutaan **p-arvoksi**. Perinteisesti tilastotieteessä asetetaan etukäteen jokin riskitaso (α), ja jos saatu p-arvo on riskitasoa pienempi niin nollahypoteesi hylätään (yleensä $\alpha = 0.05$). Jos p-arvo on riskitasoa pienempi, niin havaintoa kutsutaan tilastollisesti merkittäväksi.

9.2 t-testi

Studentin t-testi on yksi tunnetuimmista tilastollisista testeistä. Se testaa muuttujien odotusarvoja.

Tarkastellaan R:n sisäistä dataa **sleep**, joka sisältää muutoksia oppilaiden unen määrässä (muuttuja **extra**, muutos unen määrässä tunneissa) kahdella eri lääkkeellä (muuttuja **group**). Jokainen oppilas kokeili kumpaakin lääkettä, muut-

tuja ID yksilöi oppilaat.

9.2.1 Yhden otoksen t-testi

Testaamme aluksi hypoteesia, että muutos unen määrässä lääkkeen käytön jälkeen on 0 ($H_0 : \mu = 0$). Funktiota `t.test` voi käyttää monella tapaa. Tässä esimerkissä annamme funktiolle kaavan `extra ~ 1`, eli ns. `formula`-objektin ensimmäisenä argumenttina, joka on osa R:n syntaksia tilastollisten mallien ja riippuvuusrakenteiden määrittelyyn. Kaava määrittelee, että `~`-merkin vasen puoli on vastemuuttuja, ja oikea puoli sisältää selittävät muuttujat. Koska emme tee testiä minkään toisen muuttujan suhteen, niin kaavan oikean puoli on vain luku 1, joka R:n syntaksissa tarkoittaa, että se on vakio. Tämä ei siis tarkoita esimerkiksi sitä, että nollahypoteesimme olisi, että muutos unen määrässä olisi 1 tunti. Nollahypoteesin mukainen odotusarvo määritellään argumentilla `mu`, joka yhden otoksen testissä saa oletusarvon 0.

```
# One sample test
tt1 <- t.test(extra ~ 1, data = sleep)
tt1

##
##  One Sample t-test
##
## data:  extra
## t = 3.413, df = 19, p-value = 0.002918
## alternative hypothesis: true mean is not equal to 0
## 95 percent confidence interval:
##  0.5955845 2.4844155
## sample estimates:
## mean of x
##      1.54
```

Tuloksena saamme t-testisuureen arvon, vapausasteet sekä testin p-arvon. Koska p-arvo on pieni (perinteisesti rajana käytetään lukua 0.05, mutta tämä vaihtelee tieteenalasta riippuen) niin nollahypoteesi hylätään, eli testin mukaan muutos unen määrässä poikkeaa tilastollisesti merkitsevästi nolasta kumpaa tahansa lääkettä käytettäessä.

Testiin liittyvät tunnusluvut saamme eriteltyä tulosoikeasta `tt1` seuraavasti:

```
# Test statistic
tt1$statistic

##      t
## 3.412965

# Degrees of freedom
tt1$parameter
```

```
## df
## 19
# p-value
tt1$p.value
```

```
## [1] 0.00291762
```

9.2.2 Kahden otoksen t-testi

Entäpä jos haluammekin testata hypoteesia, että kumpikin lääke vaikuttaa samalla tavalla unen määrään ($H_0 : \mu_1 = \mu_2$)? Voimme tässäkin tapauksessa käyttää formula-syntaksia hyödyksi. Vakion 1 sijaan sijoitamme nyt lääkettä vastaavan muuttujan `group` kaavassa `~`-merkin oikealle puolelle.

```
tt2 <- t.test(extra ~ group, data = sleep)
tt2
```

```
##
## Welch Two Sample t-test
##
## data: extra by group
## t = -1.8608, df = 17.776, p-value = 0.07939
## alternative hypothesis: true difference in means between group 1 and group 2 is not equal to 0
## 95 percent confidence interval:
## -3.3654832 0.2054832
## sample estimates:
## mean in group 1 mean in group 2
## 0.75 2.33
```

Testiobjektin sisältö vastaa yhden otoksen testiä suurimmilta osin. Näämme, että testin tulos ei tällä kertaa ollut tilastollisesti merkitsevä (merkitsevyystasolla 0.05) eli testin mukaan ei ole näyttöä siitä, että lääkkeet vaikuttaisivat eri tavalla unen määrään, jolloin nollahypoteesia ei hylätä.

Tarkkasilmäinen lukija saattoi kuitenkin huomata, että tämä testi ei aivan vastaa tarkoitusta, sillä `sleep`-aineistossa jokainen koehenkilö kokeili kumpaakin lääkettä, jolloin oikea tapa olisi testata lääkkeiden vaikutuksen erotusta, mikä tehdäänkin seuraavaksi.

9.2.3 Parittaisten otosten t-testi

Jotta mittausparit tulevat otettua huomioon testissä, on `t.test`-funktiolle annettava argumentti `paired = TRUE`. Tässä testissä nollahypoteesi on, että lääkkeiden vaikutuksen erotuksen odotusarvo on 0 ($H_0 : \mu_d = 0$).

```
tt3 <- t.test(extra ~ group, data = sleep, paired = TRUE)
tt3
```

```
##
## Paired t-test
##
## data: extra by group
## t = -4.0621, df = 9, p-value = 0.002833
## alternative hypothesis: true difference in means is not equal to 0
## 95 percent confidence interval:
## -2.4598858 -0.7001142
## sample estimates:
## mean of the differences
## -1.58
```

Tällä kertaa tulos on taas tilastollisesti merkitsevä, eli lääkkeiden vaikutuksessa unen määrään on tilastollisesti merkitsevä ero, jolloin nollahypoteesi hylätään.

9.3 Khiin neliö -testi

Kahden kategorisen muuttujan riippuvuuden tutkimiseen voidaan käyttää khiin neliö -testiä. Tyypillisesti halutaan verrata jotain ryhmien välisiä eroja, kuten puoluekannatusta alueittain tai sukupuolten suhteen. Testin ideana on verrata havaittua ristiintaulukkoa nollahypoteesin mukaiseen ristiintaulukkoon, jossa muuttujien välillä ei ole lainkaan riippuvuutta. Khiin neliö -testin testisuure perustuu näiden kahden taulukon eroihin.

Tarkastellaan Yhdysvaltalaista kyselytutkimusaineistoa, joka sisältää tiedon henkilön puoluekannatuksesta ja sukupuolesta. Tutkitaan khiin neliö -testin avulla, riippuuko puoluekannatus sukupuolesta. R:ssä tämä voidaan tehdä funktiolla `chisq.test`.

```
## From Agresti(2007) p.39
M <- as.table(rbind(c(762, 327, 468), c(484, 239, 477)))
dimnames(M) <- list(gender = c("F", "M"),
                    party = c("Democrat", "Independent", "Republican"))
(Xsq <- chisq.test(M)) # Prints test summary

##
## Pearson's Chi-squared test
##
## data: M
## X-squared = 30.07, df = 2, p-value = 2.954e-07
Xsq$observed # observed counts (same as M)

##      party
## gender Democrat Independent Republican
##      F      762      327      468
##      M      484      239      477
```

```
Xsq$expected # expected counts under the null
```

```
##      party
## gender Democrat Independent Republican
##      F 703.6714    319.6453    533.6834
##      M 542.3286    246.3547    411.3166
```

```
Xsq$residuals # Pearson residuals
```

```
##      party
## gender  Democrat Independent Republican
##      F  2.1988558    0.4113702 -2.8432397
##      M -2.5046695   -0.4685829  3.2386734
```

```
Xsq$stdres # standardized residuals
```

```
##      party
## gender  Democrat Independent Republican
##      F  4.5020535    0.6994517 -5.3159455
##      M -4.5020535   -0.6994517  5.3159455
```

Koska testin p-arvo on pieni, niin nollahypoteesi hylätään ja todetaan, että puoluekannatus riippuu tilastollisesti merkitsevästi sukupuolesta. Testin luotettavuuden kannalta on kuitenkin hyvä huomioida, että testiin liittyy oletuksia, jotka koskevat odotettuja frekvenssejä (eli nollahypoteesin mukaisen risiintaulukon frekvenssejä). Tyypillisesti vaaditaan, että odotetun frekvenssin on oltava vähintään 5 vähintään 80%:ssa taulukon soluista, eikä yhdenkään solun odotettu frekvenssi ole alle 1. Tarkistetaan oletukset edellisen esimerkin tapauksessa:

```
all(Xsq$expected >= 1)
```

```
## [1] TRUE
```

```
mean(Xsq$expected >= 5) >= 0.80
```

```
## [1] TRUE
```

Oletukset ovat tältä osin kunnossa. Edellä funktio `all` ottaa syötteenään logisen vektorin ja palauttaa `TRUE` jos syötteen kaikki alkiot ovat `TRUE`. Muutoin funktio palauttaa `FALSE`.

9.4 Varianssianalyysi

Varianssianalyysin voidaan ajatella olevan t-testin yleistys, jossa yhden tai kahden odotusarvon sijaan verrataan kerralla useamman ryhmän odotusarvoja keskenään. Menetelmä saa nimensä siitä, että sen testisuure perustuu kiinnostuksen kohteena olevan muuttujan kokonaisvaihtelun jakamiseen verrattavien

ryhmien sisäiseen vaihteluun ja niiden väliseen vaihteluun. Koska harjoitusaineistossa `study_data` ei vielä ole kategorista muuttujaa, jossa on vähintään kolme kategoriaa, niin luodaan sellainen.

```
# create a new categorical variable called age_group
#3,5,6 => ryhmä 1
#2,4,8 => ryhmä 2
#1,7  => ryhmä 3
# vaste: weight
study_data$age_group <- c("3", "2", "1", "2", "1", "1", "3", "2")
study_data$fage_group <- factor(study_data$age_group)
```

Hypoteesit ovat: - H_0 : Ryhmien odotusarvot ovat samat tarkasteltavan muuttujan suhteen ($\mu_1 = \mu_2 = \dots = \mu_n$), - H_1 : Ryhmien odotusarvoissa on eroa tarkasteltavan muuttujan suhteen ($\mu_i \neq \mu_j$ ainakin joillekin $i \neq j$).

```
# conduct Analysis of Variance (ANOVA) for study_data
# we test if averages of height differ between age groups
summary(aov(height ~ fage_group, data = study_data))
```

```
##              Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
## fage_group    2  198.7   99.34   1.097  0.417
## Residuals     4  362.4   90.60
## 1 observation deleted due to missingness
```

```
summary(aov(height ~ fage_group, data = study_data[rep(1:8,3),])) # the same data three times
```

```
##              Df Sum Sq Mean Sq F value Pr(>F)
## fage_group    2  596.1   298.0   4.934 0.0196 *
## Residuals    18 1087.2    60.4
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
## 3 observations deleted due to missingness
```

9.5 Levenen testi

Levenen testillä tutkitaan ovatko jonkin muuttujan varianssit samat kahdessa tai useammassa ryhmässä. Testiä ei ole toteutettu perus R:ssä, mutta se on saatavilla Rcourse-paketin kautta funktiossa `leveneTest`. Testin nollahypoteesi on, että muuttujan varianssit ovat samat joka ryhmässä.

Selvitetään onko harjoitusaineiston `study_data` muuttujan `height` varianssissa eroa eri ikäryhmien välillä (`fage_group`) Levenen testillä.

```
leveneTest(height ~ fage_group, data = study_data)
```

```
## Levene's Test for Homogeneity of Variance (center = median)
##              Df F value Pr(>F)
```

```
## group 2 0.5597 0.6105
##      4
```

Testin p-arvo löytyy sarakkeesta `Pr(>F)`, ja se on noin 0.61. Testin mukaan muuttujan varianssit ovat siis samat joka ryhmässä, ja nollahypoteesi jää voimaan.

9.6 Shapiro-Wilk -testi

Shapiro-Wilk -testillä tutkitaan onko jokin muuttuja normaalijakautunut. Testi löytyy funktiosta `shapiro.test`, ja se ottaa argumenttinaan yhden muuttujan havainnot vektorina. Funktiolla ei voi siis suoraan testata esimerkiksi sitä, onko muuttuja normaalijakautunut joissakin osaryhmissä, vaan aineisto on ensin jaettava sopiviin osiin. Testin nollahypoteesi on, että muuttuja on normaalijakautunut.

Tarkastellaan jälleen harjoitusaineistoa `study_data` ja testataan muuttujan `height` normaalisuutta.

```
shapiro.test(study_data$height)
```

```
##
## Shapiro-Wilk normality test
##
## data: study_data$height
## W = 0.96985, p-value = 0.8973
```

Testin p-arvon voi lukea kohdasta `p-value` ja se on aineistolle noin 0.90, eli `height`-muuttuja on testin mukaan normaalijakautunut, ja nollahypoteesi jää voimaan.

Chapter 10

Lineaariset mallit

Lineaarisessa mallissa eli lineaarisessa regressiossa tavoite on arvioida vaste-muuttujan lineaarista riippuvuutta selittävistä muuttujista. Käytetään esimerkkinä R:n sisäistä datasettiä cars, joka sisältää 50 auton nopeudet ja pysähtymismatkat. Tavoitteena on tutkia, miten auton pysähtymismatka riippuu auton nopeudesta.

10.1 Teoria

Yksinkertaisin mahdollinen lineaarinen regressiomalli on:

$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \epsilon$$

- y on **vastemuuttuja**, eli tässä auton pysähtymismatka
- β_0 on ns. **vakiotermi** eli käyrän y -akselin leikkauskohta
- β_1 on selittävän muuttujan eli auton nopeuden **regressiokerroin**
- x_1 on selittävä muuttuja eli auton nopeus
- ϵ on **residuaali** (jäännösvirhe)

Mallissa siis oletetaan, että auton pysähtymismatka nopeudella 0 km/h on β_0 ja kasvaa β_1 verran, kun nopeus kasvaa 1 km/h. Lisäksi mukana on virhetermi ϵ , joka selittää satunnaisten vaihtelun tuloksissa lineaarisen käyrän ympärillä.

Jos malliin halutaan lisätä selittäviä muuttujia, kuten auton jarrujen kunto (x_2) tai sääolosuhteet (x_3), malli näyttää tältä:

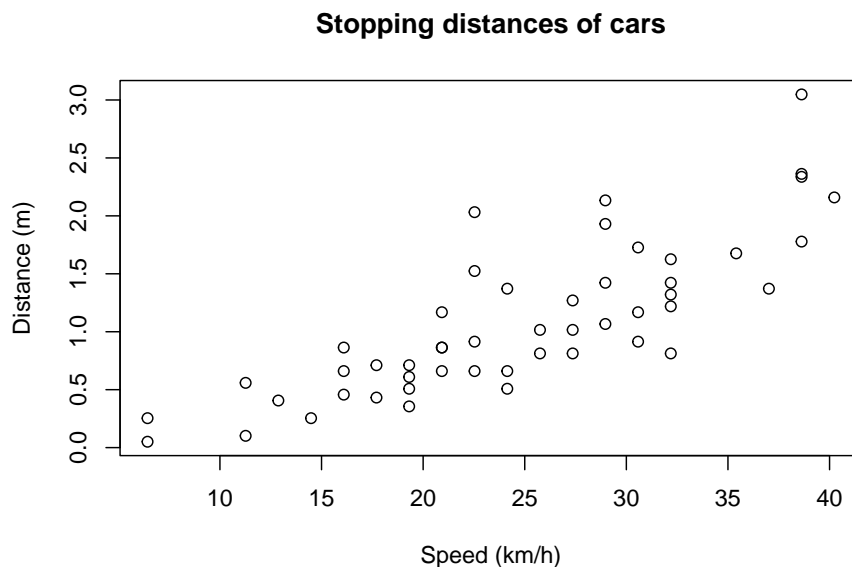
$$y = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_3 x_3 + \dots + \epsilon$$

Eli jokaiselle selittävälle muuttujalle annetaan oma regressiokerroin.

10.2 Esimerkki

Muutetaan ensin cars-datasetin muuttujat meille tuttuihin yksiköihin, ja piirretään hajontakuvi havainnoista:

```
# Change to SI units
cars$speed <- cars$speed * 1.60934
cars$dist <- cars$dist * 0.0254
# Scatter plot
plot(cars$speed, cars$dist,
     xlab = "Speed (km/h)", ylab = "Distance (m)",
     main = "Stopping distances of cars")
```



Autojen välillä on eroja, mutta kuten voi odottaa, suuremmilla nopeuksilla auton pysähtymismatka kasvaa. Käytetään seuraavaksi R:n funktiota `lm`, jolla voidaan sovittaa dataan lineaarinen malli:

```
model <- lm(dist ~ speed, data = cars)
model$coefficients
```

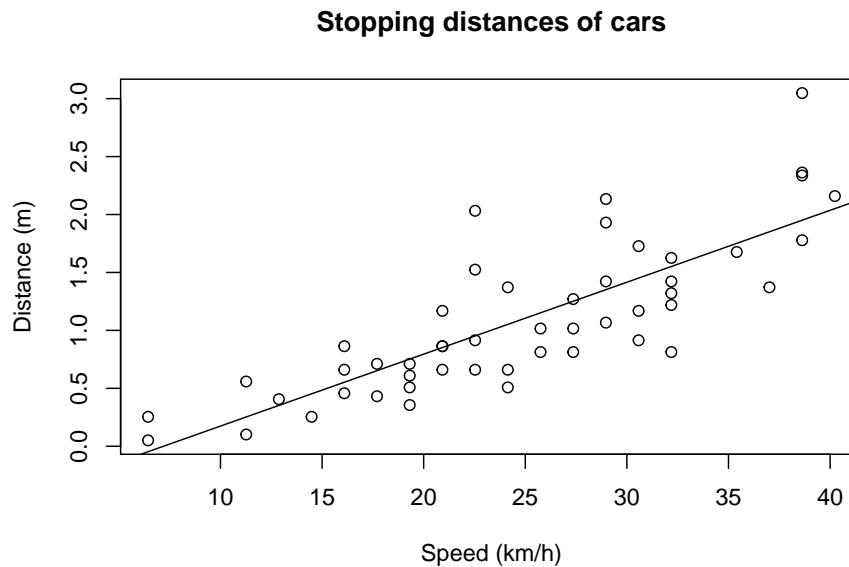
```
## (Intercept)      speed
## -0.44650901  0.06206469
```

`lm`-funktiolle annetaan ensimmäiseksi argumentiksi lineaarisen mallin kaava, jossa `~` korvaa yllä nähdyn yhtäkuin-merkin. HUOM: vakiotermin on automaattisesti mukana, eli sitä ei tarvitse kirjoittaa erikseen. Lisäksi täytyy antaa argumentti `data`, jonka tulee olla datakehikko, josta kaavassa olevat muuttujat

löytyvät.

Lineaarista mallista saadaan irti paljon tietoa, tärkeimpinä mallin regressiokertoimet (coefficients). Yllä olevista kertoimista voidaan päätellä, että kun auton nopeus nousee 1 km/h niin sen pysähtymismatka kasvaa noin 0.06 m, ja odotettu kasvukäyrä leikkaa y-akselin -0.4 m kohdalla. Voimme piirtää tämän käyrän kuvaajaan `abline`-funktion avulla, antamalla sille mallin kertoimet:

```
plot(cars$speed, cars$dist,
     xlab = "Speed (km/h)", ylab = "Distance (m)",
     main = "Stopping distances of cars")
abline(a = model$coefficients[1], b = model$coefficients[2])
```



10.3 Tarkempia tietoja mallista

Muihin mallin tietoihin pääsee käsiksi `summary`-funktion avulla, joko tulostamalla tuloksen konsoliin, tai sijoittamalla sen muuttujaan, josta voi etsiä mallin tietoja.

```
# Print summary information
summary(model)
```

```
##
## Call:
## lm(formula = dist ~ speed, data = cars)
##
```

```
## Residuals:
##      Min       1Q   Median       3Q      Max
## -0.73835 -0.24194 -0.05771  0.23405  1.09731
##
## Coefficients:
##              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
## (Intercept) -0.446509   0.171664  -2.601   0.0123 *
## speed       0.062065   0.006558   9.464 1.49e-12 ***
## ---
## Signif. codes:  0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
##
## Residual standard error: 0.3906 on 48 degrees of freedom
## Multiple R-squared:  0.6511, Adjusted R-squared:  0.6438
## F-statistic: 89.57 on 1 and 48 DF,  p-value: 1.49e-12

# Save summary and access specific information
s <- summary(model)
s$r.squared

## [1] 0.6510794
```

`summary` kertoo mm. kertoimien arvojen lisäksi niiden saamat p-arvot kohdassa ($\text{Pr} > |t|$), sekä mallin selitysasteen (merkintätapa johtuu siitä, että p-arvot tulevat t-testeistä). Tässä tapauksessa muuttujan `speed` p-arvo on hyvin pieni, joten voimme todeta suurella varmuudella, että autojen pysähtymismatka riippuu (lineaarisesti) auton nopeudesta. R^2 eli R-squared kertoo, kuinka suuren osuuden pysähtymismatkojen varianssista auton nopeus selittää.

Mallin regressiokerrointen estimoitu kovarianssimatriisi saadaan funktiolla `vcov` (variance-covariance matrix). Kertoimien keskivirheet saadaan tästä edelleen helposti matriisin diagonaalien neliöjuurina (funktiot `diag` ja `sqrt`):

```
# Covariance matrix of the regression coefficients
vcov(model)

##              (Intercept)          speed
## (Intercept)  0.029468659 -1.065882e-03
## speed       -0.001065882  4.300714e-05

# Standard errors only
sqrt(diag(vcov(model)))

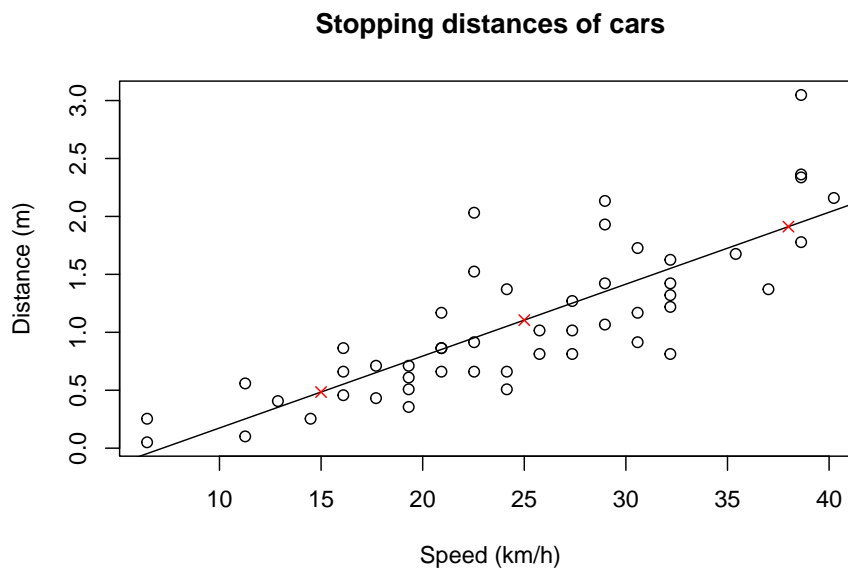
## (Intercept)          speed
## 0.171664380 0.006557983
```

10.4 Ennustaminen

Kun lineaarinen malli on estimoitu, sen perusteella voidaan myös ennustaa arvoja uusille havainnoille. Tämä tapahtuu `predict`-funktioilla, jolle annetaan malli, sekä datakehikko, joka sisältää ne selittäjien arvot, joille halutaan laskea ennusteet. Tämä datakehikko voi sisältää useita rivejä, jolloin ennuste lasketaan joka riville. Ennustetaan edellisen mallin perusteella pysähtymismatka autolle kolmella uudella nopeudella ja lisätään ne edelliseen kuvaajaan punaisilla rukoilla:

```
# Create data frame with new speed values
new_data <- data.frame(speed = c(25, 15, 38))
# Create dist column by predicting from linear model
new_data$dist <- predict(model, newdata = new_data)

# Add points to previous plot
plot(cars$speed, cars$dist,
     xlab = "Speed (km/h)", ylab = "Distance (m)",
     main = "Stopping distances of cars")
abline(a = model$coefficients[1], b = model$coefficients[2])
points(new_data$speed, new_data$dist, pch = 4, col = "red")
```



Kuten huomataan, ennustetut arvot ovat täsmälleen käyrän päällä.

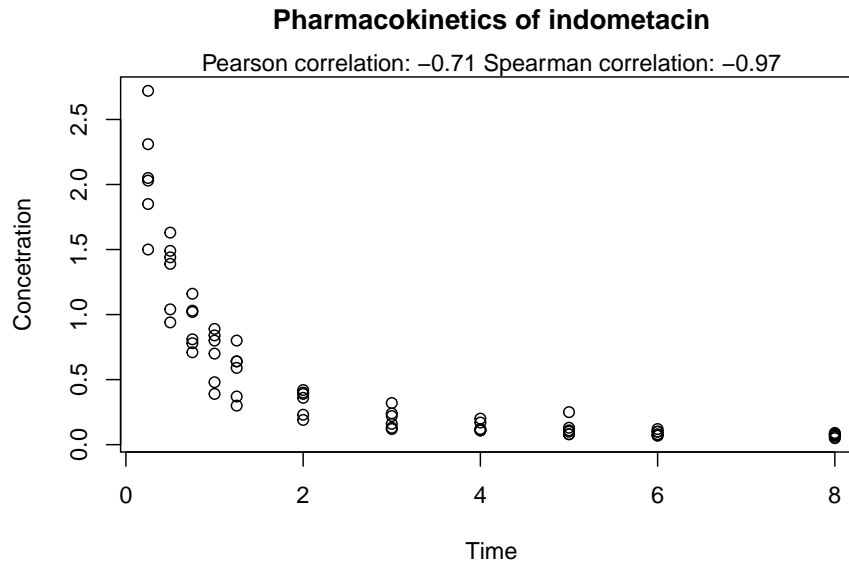
10.5 Korrelaatio

Korrelaatio on lineaarisen regression ohella tapa mitata kahden muuttujan välistä riippuvuutta. Korrelaatiolle on monia erilaisia mittareita, joista yleisimmät ovat Pearsonin korrelaatiokerroin, joka mittaa kahden muuttujan välistä lineaarista riippuvuutta ja Spearmanin järjestyskorrelaatiokerroin, joka mittaa kahden muuttujan välistä riippuvuutta ilman lineaarisuusoletusta, mutta olettaa kuitenkin monotonisen riippuvuuden. HUOM: korrelaatio ei ota kantaa siihen, kuinka vahva riippuvuus on (käyrän jyrkkyys), vaan pelkästään siihen, kuinka systemaattinen riippuvuus on. Kummatkin korrelaatiokertoimet saavat arvoja väliltä $[-1, 1]$, jossa -1 on täydellinen negatiivinen korrelaatio (toisen muuttujan kasvaessa toinen aina pienenee) ja 1 on täydellinen positiivinen korrelaatio.

Korrelaation kahden vektorin välillä voi R:ssä laskea funktiolla `cor`. Otetaan esimerkiksi R:n sisäinen datasetti `Indometh`, jossa on mitattu indometasiinin farmakokinetiikkaa, ja selvitetään ajan ja indometasiinin konsentraation väliselle riippuvuudelle Pearsonin ja Spearmanin korrelaatiokertoimet. Piirretään sen jälkeen hajontakuviio mittaustuloksista ja lisätään kuvaajaan alaotsikoksi korrelaatiokertoimet. Tutustumme samalla funktioon `round`, jolla voi pyöristää lukuja halutulle desimaalitarkkuudelle. Huomaa, että `round`-funktio pyöristää aina lähimpään parilliseen lukuun, esim. luku 0.5 pyöristyy lukuun 0 , mutta 1.5 pyöristyy lukuun 2 .

```
# Pearson correlation
pearson <- cor(Indometh$time, Indometh$conc, method = "pearson")
# Spearman correlation
spearman <- cor(Indometh$time, Indometh$conc, method = "spearman")
# Scatter plot
plot(Indometh$time, Indometh$conc,
     xlab = "Time", ylab = "Concentration",
     main = "Pharmacokinetics of indometacin")

# Paste concatenates strings
subtitle <- paste("Pearson correlation:", round(pearson, digits = 2),
                  "Spearman correlation:", round(spearman, digits = 2))
# Add subtitle to plot
mtext(subtitle)
```



Tässä esimerkissä nähdään hyvin Pearsonin ja Spearmanin korrelaatiokerroimien ero. Koska Indometasiinin konsentraatio laskee eksponentiaalisesti, ei lineaarisesti, Pearsonin korrelaatiokerroin on “vain” -0.7 , kun taas Spearmanin korrelaatiokerroin -0.97 vastaa lähes täydellistä negatiivista korrelaatiota.

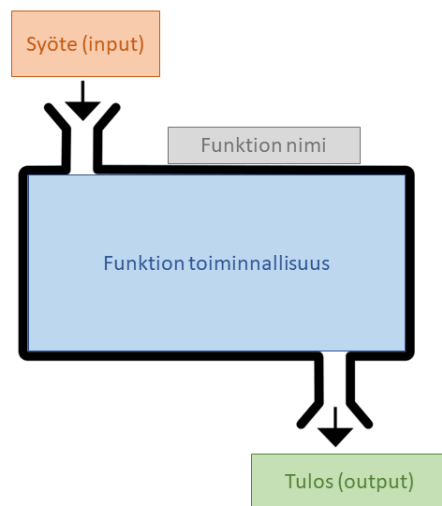
Chapter 11

Funktiot

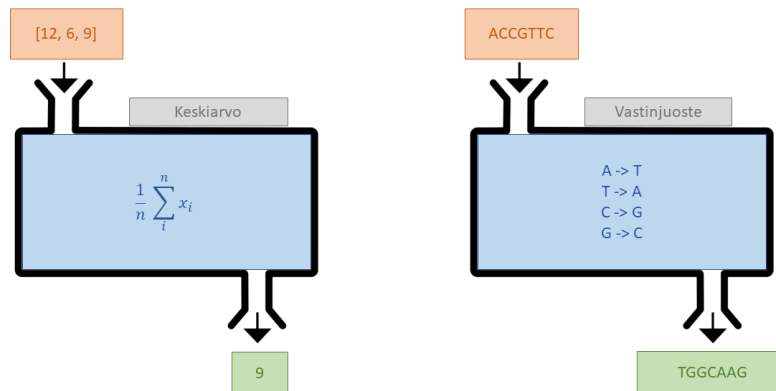
Tässä kappaleessa tutustutaan omien funktioiden kirjoittamiseen ja pureudutaan sitä kautta syvemmälle R-funktioiden toimintaan.

11.1 Funktion käsite

Funktio on nimetty kokonaisuus järjestettyä ja uudelleenkäytettävää koodia, jonka tarkoitus on suorittaa yksi tarkkaan määrätty tehtävä. Funktioilla on syöte (input) ja tulos (output). Funktion tehtävä on palauttaa (return) syöteen perusteella laskettu tulos. Alla olevassa kuvassa näkyvät funktion neljä osaa: nimi, syöte, toiminnallisuus ja tulos.



Otetaan esimerkiksi kaksi funktiota: “Keskiarvo” ottaa syötteenä halutun määrän lukuja, ja laskee niiden keskiarvon. “Vastinjuoste” ottaa syötteenä DNA-juosteen ja palauttaa sen vastinjuosteen.



Funktioilla voi olla myös erityyppisiä syötteitä. Voitaisiin esimerkiksi määritellä funktio, jolle annettaisiin syötteenä henkilön ikä, pituus, paino, sekä elintapatoja, ja funktio laskisi näiden pohjalta eliniänodotteen. Yksittäisestä funktion syötteestä käytetään tavallisesti nimitystä “argumentti”.

11.2 R-funktiot

11.2.1 Funktioiden määrittely

Tähän mennessä olemme jo käyttäneet monia R-funktioita, eikä meidän ole tarvinnut miettiä niiden toimintaa kovin syvällisesti. Mahdolliset virhetilanteet on kuitenkin paljon helpompi ratkaista, kun ymmärtää miten funktiot toimivat R:ssä.

R-funktioita luodaan `function`-komennolla. Funktion luominen näyttää tältä:

```

funktion nimi <- function( argumentit ){
  funktion toiminnallisuus
  return( tulos )
}

```

R-funktiot siis koostuvat samoista osista kuin yllä esiteltyt funktiot. - Funktion nimi nimeää muuttujan, johon funktio tallennetaan. - Funktion syöte koostuu argumenteista - Funktion toiminnallisuus on R-koodia - Funktion tulos palautetaan komennolla `return`

Tehdään esimerkiksi funktio BMI:n laskemiseen:

```

# Define function name and arguments
bmi <- function(height, mass) {
  # Compute BMI
  value <- mass / height^2
  rounded <- round(value, digits = 1)
  # Return computed value
  return(rounded)
}

```

Ensimmäisellä rivillä määritellään muuttuja, johon funktio tallennetaan, eli funktion nimi `bmi`. Lisäksi määritetään funktion argumentit, tässä tapauksessa `height` ja `mass`. Itse funktion koodi tulee aaltosulkeiden sisään seuraaville riveille. Ensimmäinen koodirivi laskee BMI:n ja toinen pyöristää tuloksen yhden desimaalin tarkkuuteen. Kolmas rivi palauttaa sen.

Voimme nyt kutsua (call) funktiotamme aivan kuin muitakin R-funktioita:

```

# Example
my_bmi <- bmi(height = 1.79, mass = 74)

my_bmi

```

```
## [1] 23.1
```

HUOM: palautettava arvo on ainoa asia, joka välittyy funktion ulkopuolelle.

Koska funktiomme palauttaa pyöristetyn arvon, alkuperäiseen arvoon ei pääse funktion ulkopuolelta käsiksi.

```
my_bmi <- bmi(height = 1.90, mass = 95)
# Throws error
value
```

Funktioiden sisällä luodut muuttujat ovat siis olemassa vain sen sisällä ja lakkaavat olemasta, kun funktion suoritus lakkaa.

11.2.2 Argumentit ja funktion kutsuminen

R:ssä funktioiden argumentteja voi määritellä eri tavoilla, mutta yleisimmässä tapauksessa funktiolla on tietty määrä nimettyjä argumentteja. Edellisen esimerkin `bmi`-funktiolla on kaksi argumenttia, `height` ja `mass`. R-kunktioita voi kutsua monella eri tavalla, ja tutustutaan tähän lisää tämän yksinkertaisen funktion avulla.

Yksi tapa on kutsua funktiota antamalla argumenttien arvot ilman niiden nimiä. HUOM: jos argumentteja ei nimeä, niiden tulee olla oikeassa järjestyksessä. Alla olevan esimerkin toisessa kohdassa argumentit menevät sekaisin.

```
# Call without argument names
bmi(1.65, 62)
```

```
## [1] 22.8
```

```
# Arguments in wrong order -> weird results / error
bmi(62, 1.65)
```

```
## [1] 0
```

Argumentit voi myös nimetä, kuten edellisissä esimerkeissä tehtiin. Tällöin järjestyksellä ei ole väliä, koska funktiolle on selvää, mitä argumenttia tarkoitetaan.

```
bmi(height = 1.65, mass = 62)
```

```
## [1] 22.8
```

```
bmi(mass = 62, height = 1.65)
```

```
## [1] 22.8
```

On myös mahdollista nimetä vain osa argumenteista. Tällöin nimeämättömät argumentit asetetaan argumenteiksi “tyhjiin kohtiin” vasemmalta oikealle.

```
bmi(1.65, mass = 62)
```

```
## [1] 22.8
```

```
bmi(62, height = 1.65)
```

```
## [1] 22.8
```

Jos funktioille yritetään antaa argumentteja, joita ei ole määritelty, seuraa virhe:

```
# Causes error
```

```
bmi(height = 1.65, weight = 62)
```

```
## Error in bmi(height = 1.65, weight = 62): unused argument (weight = 62)
```

Samoin jos jokin argumentti puuttuu, seuraa virhe:

```
# Causes error
```

```
bmi(height = 1.65)
```

```
## Error in bmi(height = 1.65): argument "mass" is missing, with no default
```

HUOM: vaikka argumentit saa antaa haluamassaan järjestyksessä ja nimettynä tai nimeämättömänä, kannattaa kuitenkin olla johdonmukainen. Yleisohjeena argumentit kannattaa aina nimetä ja pyrkiä antamaan siinä järjestyksessä, kuin ne on funktiossa määritelty. Näin koodin lukeminen ja ylläpito on paljon helpompaa. Poikkeuksena sääntöön ovat funktiot, joiden toiminta on yksinkertaista, tai joiden ensimmäiset argumentit ovat niin tunnettuja, että niitä ei ole syytä nimetä.

Otetaan esimerkiksi funktio `seq`. Jos avaat funktion help-sivun komennolla `?seq`, näet, että ensimmäiset argumentit ovat nimeltään `from` ja `to`. Koska `seq` on hyvin yleinen ja tunnettu, sitä kutsutaan yleensä niin, että `from` ja `to` jätetään nimeämättä. Muut argumentit, kuten `by` ja `length.out` yleensä nimetään, koska niitä ei aina käytetä, eikä voida olettaa koodin lukijan muistavan, mitä argumenttia tarkoitetaan, vaikka `seq` toimisi ilman nimiä, jos annettaisiin peräkkäin `from`, `to` ja `by`. Vastaavasti `plot`-komennon tapauksessa ei aina kirjoiteta nimiä `x` ja `y`-argumenteille, mutta väriä yms. ohjaavat argumentit nimetään.

11.2.2.1 Oletusarvot (default values)

Monilla R-funktioilla on paljon argumentteja, joista kaikkia ei kuitenkaan tarvitse määrittää erikseen, vaan niillä on oletusarvoja (default values). Esimerkiksi `seq` tekee oletuksena vektorin, joka sisältää kaikki kokonaisluvut `from`-argumentista `to`-argumenttiin. Tätä käyttäytymistä voi kuitenkin muuttaa `by`- ja `length.out`-argumentteja säätämällä.

Tehdään nyt omaan `bmi`-funktioomme uusi argumentti `height_multiplier`, joka saa oletuksena arvon 1. Jos halutaan antaa pituus senttimetreissä metrien sijaan, voidaan asettaa pituuden kertoimeksi 0.01.

```
bmi <- function(height, mass, height_multiplier = 1) {  
  # Compute BMI
```

```

    value <- mass / (height * height_multiplier)^2
    rounded <- round(value, digits = 1)
    # Return computed value
    return(rounded)
}
bmi(height = 1.65, mass = 62)

```

```
## [1] 22.8
```

```
bmi(height = 165, mass = 62, height_multiplier = 0.01)
```

```
## [1] 22.8
```

Argumentin oletusarvo merkitään siis funktion määrittelyssä `=`-merkillä, kuten funktion argumenttien anto yleensä. Monilla valmiiden funktioiden argumenteilla on oletusarvona tyhjä arvo eli `NULL`. Tämä tarkoittaa usein, että argumentin voi jättää tyhjäksi, mutta oletusarvon valinta on niin monimutkainen prosessi, että sitä ei voi kirjoittaa funktion määrittelyssä yhdelle riville. Usein tämä tarkoittaa sitä, että oletusarvo riippuu muista argumenteista. HUOM: `NULL` on eri asia kuin `NA`, ja käyttäytyy eri tavoin. Aiheesta lisää täällä.

11.2.3 Funktio ilman argumentteja

Joillain funktioilla ei ole ollenkaan argumentteja. Esimerkiksi R:n sisäiset funktiot `Sys.time` ja `Sys.Date` palauttavat tämänhetkisen ajan ja päivämäärän, eivätkä tarvitse argumentteja.

```
Sys.time()
```

```
## [1] "2021-08-11 12:05:10 EEST"
```

Itse tehdyt funktiot voivat myös toimia ilman argumentteja. Niitä käytetään usein R-istunnon tilan, koodia ajavan tietokoneen ominaisuuksien tai ajan selvittämiseen. Tämä melko hyödytön esimerkkifunktio palauttaa tämän dokumentin kirjoittajan nimen:

```

author <- function() {
  return("Anton Klåvus")
}
author()

```

```
## [1] "Anton Klåvus"
```

11.3 Palautus (return)

Tutkitaan `return`-käskyä, eli palautusta R-funktiosta hieman tarkemmin.

11.3.1 Usean arvon palautus

R-funktiot palauttavat aina yhden objektin. Palautukseen käytetään funktiota `return`, kuten aiemmin on nähty. Jos funktiosta halutaan ulos useampi objekti, on muodostettava esimerkiksi lista, joka sisältää halutut objektit. Jos siis `bmi`-funktioista haluttaisiin palauttaa sekä pyöristetty, että alkuperäinen BMI:n arvo, voidaan ne palauttaa listassa:

```
bmi_list <- function(height, mass, height_multiplier = 1) {
  # Compute BMI
  value <- mass / (height * height_multiplier)^2
  rounded <- round(value, digits = 1)
  # Return computed value
  values <- list(original = value,
                 rounded = rounded)
  return(values)
}
result <- bmi_list(1.65, 62)
result
```

```
## $original
## [1] 22.77319
##
## $rounded
## [1] 22.8
```

```
result$rounded
```

```
## [1] 22.8
```

11.3.2 Palautus ilman return-käskyä

R on siitä erikoinen ohjelmointikieli, että R-funktiot voivat palauttaa arvoja myös ilman eksplisiittistä `return`-käskyä. Jos R-funktiossa ei ole `return`-käskyä, ja viimeinen rivi on vain muuttuja, tai sijoitus muuttujaan, tämän muuttujan arvo palautetaan automaattisesti. `bmi`-funktion voisi siis kirjoittaa myös näin:

```
bmi <- function(height, mass, height_multiplier = 1) {
  # Compute BMI
  value <- mass / (height * height_multiplier)^2
  rounded <- round(value, digits = 1)
  # Return computed value
  rounded
}
bmi(1.65, 62)
```

```
## [1] 22.8
```

Alussa on kuitenkin hyvä käyttää `return`-käskyä, niin pysyy paremmin perässä

siitä, mitä koodi tekee, eikä sen kirjoittaminen ole kokeneellekaan ohjelmoijalle huono tapa.

11.3.3 Funktio ilman tulosta

Funktion tarkoitus ei ole aina palauttaa jotain. Yleisiä esimerkkejä ovat `cat` ja `plot`, jotka tulostavat ja piirtävät asioita. Jos näiden funktion paluuarvon yrittää sijoittaa muuttujaan, on tuloksena `NULL`, eli tyhjä arvo.

```
cat_return <- cat("What does cat return?\n")
```

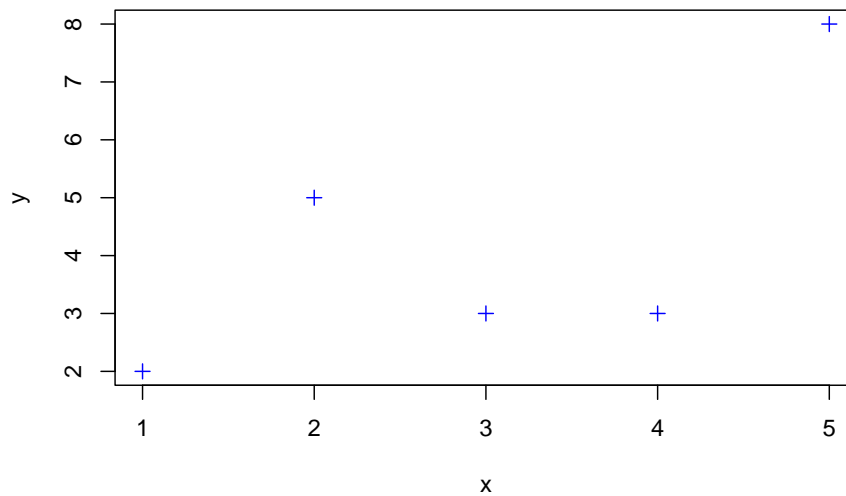
```
## What does cat return?
```

```
cat_return
```

```
## NULL
```

Itse tehty funktio palauttaa `NULL`, jos viimeinen komento palauttaa `NULL`:

```
# Function for plotting blue squares  
blue_squares <- function(x, y) {  
  plot(x, y, pch = 3, col = "blue")  
}  
value <- blue_squares(1:5, c(2, 5, 3, 3, 8))
```



```
value
```

```
## NULL
```


Chapter 12

Ehtorakenteet

Funktiot kappaleen funktiot suorittavat aina samat komennot riippumatta syötteestä. Entä jos funktion toiminnassa pitäisi ottaa huomioon erilaisia tapauksia, eli suorittaa tiettyjä komentoja vain joissain tilanteissa? Tätä varten ohjelmointikielissä on ehtorakenteita, eli ns. if/else-rakenteita, jotka ohjaavat ohjelman toimintaa.

Tutustutaan ensin tarkemmin loogisiin operaattoreihin.

12.1 Loogiset operaattorit

Tässä on lyhyt lista loogisista operaattoreista:

Operaattori	Toiminto
<	pienempi kuin
<=	pienempi tai yhtä suuri kuin
>	suurempi kuin
>=	suurempi tai yhtä suuri kuin
==	yhtä kuin
!=	ei yhtä kuin
!a	ei a (negaation)
a b	a TAI b alkioittain
a b	a TAI b yksittäisille arvoille
a & b	a JA b alkioittain
a && b	a JA b yksittäisille arvoille
a %in% b	mitkä a:n alkiot ovat myös b:n alkioita

Kaikki loogiset operaattorit palauttavat joko arvon TRUE, FALSE tai NA. Vertailuoperaattorien käyttö on jo tullut tutuksi aikaisemmissa kappaleissa, mutta

tutustutaan vähän tarkemmin viimeisten rivien operaattoreihin.

12.1.0.1 Negaatio

Looginen negaatio palauttaa loogisen lauseen vastakohdan, eli muuttaa arvon TRUE arvoksi FALSE ja arvon FALSE arvoksi TRUE.

```
10 > 12

## [1] FALSE
!(10 > 12)

## [1] TRUE
# Also works without parentheses
!10 > 12

## [1] TRUE
!is.na(NA)

## [1] FALSE
```

12.1.0.2 Looginen TAI (disjunktio)

Loogiselle TAI operaattorille annetaan kaksi loogista lausetta, ja TAI operaattori palauttaa TRUE, jos vähintään toinen lauseista on TRUE. R:ssä TAI merkitään pystyviivalla | tai kahdella pystyviivalla ||. | käy läpi vektoreita alkioittain, || vertaa kahta loogista lausetta, ja toista lausetta ei edes ajeta, jos ensimmäinen on TRUE (koska || palauttaa TRUE riippumatta toisen lauseen arvosta). Jos tämä tuntui monimutkaiselta, niin riittää muistaa, että ehtorakenteissa kannattaa käyttää muotoa “||”.

```
10 > 12 || "a" < "b"

## [1] TRUE
2 > 1 || 4 > 2

## [1] TRUE
"a" > "c" || 1 > 10

## [1] FALSE
```

12.1.0.3 Looginen JA (konjunktio)

Loogiselle JA operaattorille annetaan kaksi lausetta. JA palauttaa TRUE, jos kummatkin lauseet ovat TRUE. R:ssä JA-operaattorit ovat & ja &&, jotka käyttäytyvät kuten | ja ||.

```
10 > 12 && "a" < "b"
```

```
## [1] FALSE
```

```
2 > 1 && 4 > 2
```

```
## [1] TRUE
```

```
"a" > "c" && 1 > 10
```

```
## [1] FALSE
```

12.1.0.4 Osajoukko

`%in%`-operaattorilla voi tarkistaa, kuuluuko jokin arvo suurempaan joukkoon. Tämä voitaisiin toteuttaa myös usealla TAI-operaattorilla, mutta `%in%` on usein paljon kätevämpi.

```
dna_bases <- c("A", "C", "G", "T")
```

```
rna_bases <- c("A", "C", "G", "U")
```

```
"T" %in% dna_bases
```

```
## [1] TRUE
```

```
"T" %in% rna_bases
```

```
## [1] FALSE
```

```
# With negation
```

```
!"A" %in% dna_bases
```

```
## [1] FALSE
```

Operaattoria voi soveltaa myös vektoreihin, jolloin operaattori palauttaa loogisen vektorin, jonka alkio jokainen alkio kertoo, kuuluiko vastaava operaation vasemman puolen alkio operaation oikeaan puoleen.

```
dna_bases %in% rna_bases
```

```
## [1] TRUE TRUE TRUE FALSE
```

12.1.0.5 Monimutkaisemmat lauseet

Operaattoreita voidaan myös yhdistellä monimutkaisemmiksi lauseiksi. Tällöin lauseiden evaluointijärjestys määritetään tarvittaessa suluilla.

```
dog <- list(breed = "golden retriever",
           height = 45,
           weight = 27)
```

```
dog$breed == "golden retriever" && dog$weight < 25 || dog$height < 50
```

```
## [1] TRUE
```

12.1.0.6 $a < x < b$

usein tulee vastaan tilanteita, joissa halutaan tarkistaa, onko jokin luku halutulla välillä. Tämä kirjoitetaan matemaattisesti esim. näin: $a < x < b$, jossa tarkastetaan, onko x välillä (a, b) . Tämä ei kuitenkaan valitettavasti toimi R:ssä, vaan tarkistus pitää jakaa kahteen osaan:

```
# Are x and y between 0 and 1?
x <- 3
y <- 0.3
0 <= x && x <= 1
```

```
## [1] FALSE
```

```
0 <= y && y <= 1
```

```
## [1] TRUE
```

12.2 Ehtorakenteet

Aloitetaan esimerkistä: tehtävänä on kirjoittaa funktio, jolle annetaan syötteenä potilaan hemoglobiiniarvo. Funktio on tarkoitus hälyttää, jos hemoglobiini laskee alle viitearvojen alarajan 117. Kyseinen funktio voisi näyttää vaikka tältä:

```
hb_alert <- function(hb) {
  if (hb < 117) {
    return("Hemoglobin is low!")
  }
}
```

Funktiolla on siis yksi argumentti, `hb` eli hemoglobiiniarvo. Funktio sisällä on if-rakenne. If-rakenteessa on kaksi osaa: ehto, ja rakenteen sisäinen koodi. Rakenteen sisäinen koodi ajetaan vain, jos ehto täyttyy. Ehto merkitään if-komennon jälkeen sulkeisiin, ja rakenteen sisäinen koodi kirjoitetaan sulkeiden jälkeen aaltosulkeiden sisään. (Jos aaltosulkeiden sisään tulisi vain yksi rivi koodia, aaltosulkeet voi jättää pois, mutta näissä esimerkeissä käytetään aina aaltosulkeita).

Kokeillaan, miten funktio toimii eri hemoglobiiniarvoilla:

```
# Nothing happens
hb_alert(130)
# returns alert
hb_alert(110)
```

```
## [1] "Hemoglobin is low!"
```

Funktio siis toimii oletetusti, eli se hälyttää vain, jos hemoglobiinitaso on alle 117. Käyttäjän kannalta olisi kuitenkin kätevää saada jonkinlainen palaute myös silloin, kun hemoglobiinitaso on tarpeeksi korkea. Tätä varten voidaan käyttää else-komentoa:

```
hb_alert <- function(hb) {  
  if (hb < 117) {  
    return("Hemoglobin is low!")  
  } else {  
    return("Hemoglobin OK")  
  }  
}  
  
hb_alert(130)
```

```
## [1] "Hemoglobin OK"
```

Else-komennon jälkeinen koodi siis ajetaan, jos ehto `hb < 117` ei täyty.

Tällä hetkellä funktiomme toimii vain naispotilaille, sillä miehillä hemoglobiiniarvojen alaraja on 134. Lisätään siis funktioomme argumentti `sex` sukupuolta varten ja muokataan funktion toimintaa niin, että se osaa ottaa huomioon sukupuolen. Nyt if-rakenteen ehdosta tulee jo hieman monimutkaisempi:

```
hb_alert <- function(hb, sex) {  
  if (sex == "female" && hb < 117 || sex == "male" && hb < 134) {  
    return("Hemoglobin is low!")  
  } else {  
    return("Hemoglobin OK")  
  }  
}  
  
hb_alert(hb = 120, sex = "female")
```

```
## [1] "Hemoglobin OK"
```

```
hb_alert(hb = 120, sex = "male")
```

```
## [1] "Hemoglobin is low!"
```

Entä jos haluaisimme tulostaa eri varoituksen mies- ja naispotilaille? Tähän tarvitaan "else if"-rakennetta:

```
hb_alert <- function(hb, sex) {  
  if (sex == "female" && hb < 117) {  
    return("Hemoglobin is low for a female!")  
  } else if (sex == "male" && hb < 134) {  
    return("Hemoglobin is low for a male!")  
  } else {  
    return("Hemoglobin OK")  
  }  
}
```

```

    }
  }

  hb_alert(hb = 110, sex = "female")

## [1] "Hemoglobin is low for a female!"
  hb_alert(hb = 120, sex = "male")

```

```
## [1] "Hemoglobin is low for a male!"
```

Nyt funktio tarkistaa ensin, onko potilas nainen ja onko hänen hemoglobiininsa alle 117. Jos ei, siirrytään eteenpäin ja tarkistetaan, onko potilas mies ja onko hänen hemoglobiininsa alle 130. Jos ei, siirrytään viimeiseen kohtaan, ja tulostetaan "Hemoglobin ok".

Else-if rakenteita voi olla rajoittamaton määrä ensimmäisen if-rakenteen jälkeen. Lisätään funktioon hälytys kriittisestä hemoglobiinin määrästä ($hb < 50$) riippumatta sukupuolesta:

```

hb_alert <- function(hb, sex) {
  if (sex == "female" && hb < 117) {
    return("Hemoglobin is low for a female!")
  } else if (sex == "male" && hb < 134) {
    return("Hemoglobin is low for a male!")
  } else if (hb < 50) {
    return("Hemoglobin is critical")
  } else {
    return("Hemoglobin OK")
  }
}

hb_alert(hb = 32, sex = "female")

```

```
## [1] "Hemoglobin is low for a female!"
```

Kuten huomataan, yllä oleva koodi ei toimikaan, kuten piti. Näin alhaisella hemoglobiinilla pitäisi tulla varoitus kriittisestä tilasta. Koodi suoritus ei kuitenkaan ikinä etene kriittisen tilan varoitukseen asti, sillä ensimmäinen ehto täyttyy. Korjataan tilanne siirtämällä kriittisen tilan ehto ensimmäiseksi:

```

hb_alert <- function(hb, sex) {
  if (hb < 50) {
    return("Hemoglobin is critical")
  } else if (sex == "male" && hb < 134) {
    return("Hemoglobin is low for a male!")
  } else if (sex == "female" && hb < 117) {
    return("Hemoglobin is low for a female!")
  } else {

```

```

    return("Hemoglobin OK")
  }
}

hb_alert(hb = 32, sex = "female")

```

```

## [1] "Hemoglobin is critical"
hb_alert(hb = 120, sex = "female")

```

```

## [1] "Hemoglobin OK"
hb_alert(hb = 120, sex = "male")

```

```

## [1] "Hemoglobin is low for a male!"

```

Nyt funktio toimii haluamallamme tavalla!

Funktioissa voi myös olla useampi ehtorakenne. Ehtorakenteita käytetään usein tarkistamaan argumenttien arvoja. Lisätään ehtorakenteet argumenttien tarkistamiseksi:

```

hb_alert <- function(hb, sex) {
  # Hemoglobin should be numeric and positive
  if (!is.numeric(hb) || hb < 0) {
    return("Hemoglobin should be numeric and positive")
  }
  if (!sex %in% c("female", "male")) {
    return("This function can only deal with binary sex: female or male")
  }

  if (hb < 50) {
    return("Hemoglobin is critical")
  } else if (sex == "male" && hb < 134) {
    return("Hemoglobin is low for a male!")
  } else if (sex == "female" && hb < 117) {
    return("Hemoglobin is low for a female!")
  } else {
    return("Hemoglobin OK")
  }
}

```

```

hb_alert(hb = "120", sex = "female")

```

```

## [1] "Hemoglobin should be numeric and positive"
hb_alert(hb = 120, sex = "FEMALE")

```

```

## [1] "This function can only deal with binary sex: female or male"

```

12.3 Alkioiden poimiminen vektorista tietyn ehdon perusteella

Seuraava tilanne on melko tyypillinen: on käytävä läpi vektorin arvot, ja säilytettävä niistä ne, jotka täyttivät tietyn ehdon. Tätä ongelmaa voi lähestyä esimerkiksi seuraavalla tavalla:

- Luo apufunktio, joka ottaa syötteen yhden arvon, ja tarkistaa täyttykö ehto. Tämän funktion tulee palauttaa `TRUE`, jos ehto täyttyy ja `FALSE`, jos ehto ei täyty.
- Käytä funktiota `Vectorize`, jolla voit muuttaa funktion vektoroiduksi funktioksi. Vektorointi tarkoittaa tässä yhteydessä sitä, että yhden alkion sijaan vektoroitua funktiota voidaan kutsua vektoriargumentilla, ja jokaiselle argumentin alkiolle suoritetaan alkuperäisen funktion määrittelemä operaatio.
- Käytä vektoroitua apufunktiota vektorin indeksointiin.

Tässä on esimerkki, jossa käydään läpi vektori DNA:n emäksiä, joista poimitaan vain sytosiinit ja guaniinit.

```
# Helper function
is_cg <- function(base) {
  if (base %in% c("C", "G")) {
    return(TRUE)
  } else {
    return(FALSE)
  }
}

# Vectorize
is_cg_vector <- Vectorize(is_cg)

# Main function
pick_cg <- function(bases) {
  only_cg <- bases[is_cg_vector(bases)]
  return(only_cg)
}

# NOTE: this only checks the first value of the vector
my_bases <- c("A", "C", "C", "T", "G", "T")
is_cg(my_bases)
```

```
## Warning in if (base %in% c("C", "G")) {: the condition has length > 1 and only
## the first element will be used
```

```
## [1] FALSE
```


12.3. ALKIOIDEN POIMIMINEN VEKTORISTA TIETYN EHDON PERUSTEELLA121

```
# This works as expected  
is_cg_vector(my_bases)
```

```
##      A      C      C      T      G      T  
## FALSE  TRUE  TRUE FALSE  TRUE FALSE
```

```
# Pick only C and G  
pick_cg(my_bases)
```

```
## [1] "C" "C" "G"
```


Chapter 13

Toistorakenteet (loops)

Toistorakenne toistaa annettua koodia. Toistorakenteet ovat ehtorakenteiden ohella ohjelmoinnin perusrakennuspalikoita. Tässä osiossa tutustutaan kahteen yleisimpään tapaukseen eli `for` ja `while` -silmukoihin. Mukana on myös maininta silmukoiden korvaamisesta R:n `apply`-funktioilla. Lopusta löytyy lisäksi vinkkejä tämän viikon tehtäviin.

Lisäksi tällä viikolla puhutaan R-paketeista.

13.1 For-silmukka

For-silmukka toistaa koodia ennalta määrättyjen iteraatioiden verran. For-silmukalla voi esimerkiksi käydä läpi data framen tai matriisin sarakkeita tai rivejä, tai vektorin arvoja. For-silmukka iteroi aina jonkin järjestetyn rakenteen yli, esimerkiksi vektorin. For-silmukalle annetaan tyypillisesti vektori arvoja, ja `ns` iteraatiomuuttuja, johon tallennetaan vuorotellen yksi alkio annetusta vektorista. Käytännössä tämä näyttää tältä:

```
for (i in seq(3, 7)) {  
  print(i)  
}
```

for-silmukassa määritetään siis ensin iteraatiomuuttuja eli `i` ja sen saamat arvot eli `seq(3, 7)` komennolla `in`. Sen jälkeen hakasulkeiden sisältämä koodi toistetaan jokaiselle `i`:n arvolle. Tässä tapauksessa yksinkertaisesti tulostetaan muuttujan `i` arvo. Huomaa, että for-silmukan `in` ei ole sama asia kuin looginen operaattori `%in%`.

Usein halutaan kuitenkin käydä läpi jonkin vektorin tai matriisin arvoja. Alla oleva koodi laskee matriisin `X` rivien summan (tähän voisi myös käyttää valmista funktiota `rowSums()`). Aluksi alustetaan tyhjä vektori, johon rivien summat tal-

lennetaan. Sen jälkeen käydään läpi matriisin rivit ja tallennetaan rivin summa alussa alustettuun vektoriin.

```
# Create matrix X
X <- matrix(1:12, nrow = 4)
X

# Initialize vector for row sums
row_sums <- rep(0, nrow(X))
# Iterate over rows of X
for (i in seq(1, nrow(X))) {
  # Assign sum of the current row to the vector
  row_sums[i] <- sum(X[i, ])
}

# Compare results with the result from base R function
row_sums
rowSums(X)
```

For-silmukalla voi myös toteuttaa viime kerralla tehdyn funktion, joka poimii DNA:n emäksistä vain sytosiinit ja guaniinit. Tällä kertaa apufunktiota `is_cg()` ei tarvitse vektorisoida, koska for-silmukka käy läpi kaikki emäkset. Tämä silmukka voidaan toteuttaa kahdella tavalla. Ensimmäinen tapa on käyttää iteraatiomuuttujana `i:tä`, joka käy läpi iteraation ykkösestä emäsvektroin pituuteen:

```
# Helper function
is_cg <- function(base) {
  if (base %in% c("C", "G")) {
    return(TRUE)
  } else {
    return(FALSE)
  }
}

# Main function
pick_cg1 <- function(bases) {
  # Initialize empty vector
  only_cg <- c()
  for (i in seq(1, length(bases))) {
    # If the current base is C or G, add it to only_cg
    if (is_cg(bases[i])) {
      only_cg <- c(only_cg, bases[i])
    }
  }

  return(only_cg)
```

```
}  
  
my_bases <- c("A", "C", "C", "T", "G", "T")  
pick_cg1(my_bases)
```

Toinen vaihtoehto on iteroida suoraan vektorin bases yli, jolloin iteraatiomuuttujaan tallentuu suoraan kyseinen emäs:

```
pick_cg2 <- function(bases) {  
  # Initialize empty vector  
  only_cg <- c()  
  for (base in bases) {  
    # If the current base is C or G, add it to only_cg  
    if (is_cg(base)) {  
      only_cg <- c(only_cg, base)  
    }  
  }  
  
  return(only_cg)  
}  
  
my_bases <- c("A", "C", "C", "T", "G", "T")  
pick_cg2(my_bases)
```

Iteraatiomuuttujan voi siis nimetä haluamallaan tavalla, sen ei aina tarvitse olla i. Jos kuitenkin iteraatiomuuttujaan tallennetaan vain yksi luku, suosittelen vahvasti käyttämään i:tä. Tämä on hyvin vakiintunut tapa ohjelmointikielestä ja ohjelmoijasta riippumatta, vaikka muutoin muuttujien nimeämiseen on erilaisia koulukuntia riippuen ohjelmoijan taustasta. Jos taas iteroidaan vektorin nimeltä bases yli, on luonnollinen valinta iteraatiomuuttujan nimeksi base.

My brain when choosing a variable name:



My brain when choosing an iterable name:



13.2 While-slimukat

While-silmukkaa käytetään, kun iteraatioiden määrä ei ole ennalta tiedossa, vaan while-silmukkaa toistetaan niin kauan, kuin tietty ehto on voimassa. Hyvä esimerkki while-silmukasta on proteiinisynteesi (yksinkertaistettuna): alla oleva funktio käy läpi RNA-molekyylin kodoneita, kunnes löytää aloituskodonin AUG. Sen jälkeen funktio rakentaa aminohappoketjua kodonien perusteella, kunnes vastaan tulee jokin lopetuskodoneista. Oikean proteiinin löytämiseen käytetään Biostrings-paketista löytyvää geneettistä koodia, joka on nimetty vektori, jossa on kodoneita vastaavien aminohappojen kirjainlyhenne, tai lopetuskodonien tapauksessa merkki "*":

```
rna_code <- Biostrings::RNA_GENETIC_CODE
rna_code

prot_synth <- function(codons) {
  # Initialize iterable as the first codon
  i <- 1
  # Initialize empty amino acid chain
  protein <- c()
  # Find starting codon
  while (codons[i] != "AUG") {
    i <- i + 1
  }
  # After starting codon, build protein until one of the stop codons is met
  while (rna_code[codons[i]] != "*") {
    protein <- c(protein, rna_code[codons[i]])
    i <- i + 1
  }
  return(protein)
}

prot_synth(codons = c("UUG", "GAA", "AUG", "UGU", "AGU", "AGA", "UCG", "UCG", "UGA", "GCA"))
```

While-silmukalle annetaan siis ensin ehto, joka tarkistetaan ennen jokaista iteraatiota. Jos ehto täyttyy, suoritetaan yksi iteraatio, ja tarkistetaan ehto uudestaan. HUOM: while-silmukkaa koodatessa tulee huolehtia siitä, että silmukan ehdon on mahdollista olla lopulta epätosi, muuten silmukka saattaa jäädä pyörimään ikuisesti!

Käytännössä kaikki for-silmukat voisi korvata while-silmukoilla, mutta for-silmukoiden käyttö on kätevämpää, sillä niissä iteraatiomuuttujaa ei tarvitse kasvattaa erikseen.

```
# A simple for loop
for (i in seq(1, 4)) {
  print(i * 2)
}
```

```
# The same as above
i <- 1
while (i <= 4) {
  print(i * 2)
  i <- i + 1
}
```

13.3 Sisäkkäiset silmukat (nested loops)

Silmukoita voi myös olla useampi sisäkkäin. Alla olevassa esimerkissä on taulukko tutkimuksesta, jossa on mitattu eri eliöiden β -globiinin geenin ensimmäisen eksonin samankaltaisuutta. Pienempi luku tarkoittaa enemmän samankaltaista geeniä.

	Human	Goat	Opossum	Lemur	Mouse	Rabbit	Gorilla
Human	0.0	4.7	4.6	2.7	3.2	3.2	1.6
Goat	4.7	0.0	7.2	5.9	7.8	3.7	5.5
Opossum	4.6	7.2	0.0	5.3	5.3	6.3	5.7
Lemur	2.7	5.9	5.3	0.0	4.3	2.7	3.2
Mouse	3.2	7.8	5.3	4.3	0.0	6.0	2.9
Rabbit	3.2	3.7	6.3	2.7	6.0	0.0	3.8
Gorilla	1.6	5.5	5.7	3.2	2.9	3.8	0.0

Tämä data on tiedostossa exons.csv, joten luetaan se R:ään:

```
exons <- read.csv("exons.csv", row.names = 1)
```

Etsitään seuravaksi kaikki eliöparit, joiden geenien etäisyys on alle 4 ja lisätään parit data frameen, jossa on kaksi saraketta, ja jokainen rivi edustaa yhtä eliöparia. Käytetään tähän kahta sisäkkäistä for-silmukkaa. Toisen silmukan iteraatiomuuttujan nimi on yleensä j, seuraavan k ja niin edelleen. Käydään exons läpi niin, että i on rivin numero, ja j sarakkeen numero, ja etsitään sopivat parit.

```
# Initialize empty data frame for the pairs
close_pairs <- data.frame()

# Iterate over rows and columns
for (i in seq(1, nrow(exons))) {
  for (j in seq(1, ncol(exons))) {
    # Check if dissimilarity is below 4
    if (exons[i, j] < 4) {
      # Add the pair as a new row to close_pairs
      new_row <- data.frame(Species_1 = rownames(exons)[i],
                           Species_2 = colnames(exons)[j])
      close_pairs <- rbind(close_pairs,
                           new_row)
    }
  }
}
```



```

    }
  }
}

close_pairs

```

Koodimme toimii jo ihan hyvin, mutta tuloksessa on hieman turhaa tavaraa: exons on symmetrinen, joten monet parit on esitetty tuloksessa kahdesti. Tämä voidaan ratkaista muuttamalla toista for-silmukkaa:

```

# Initialize empty data frame for the pairs
close_pairs <- data.frame()

# Iterate over rows and columns
for (i in seq(1, nrow(exons))) {
  # Only check upper diagonal
  for (j in seq(i, ncol(exons))) {
    # Check if dissimilarity is below 4
    if (exons[i, j] < 4) {
      # Add the pair as a new row to close_pairs
      new_row <- data.frame(Species_1 = rownames(exons)[i],
                           Species_2 = colnames(exons)[j])
      close_pairs <- rbind(close_pairs,
                           new_row)
    }
  }
}

close_pairs

```

Nyt toisen silmukan läpi käymät `j:n` arvot riippuvat `i:n` arvosta. Tämä koodi käy läpi taulukon ylemmän diagonaalin, eli “yläpuolen”. Ensimmäisellä kierroksella `j` käy läpi arvot 1-7, seuraavalla kierroksella 2-7, sitten 3-7 jne. Vastaavasti voitaisiin myös käydä läpi alempi diagonaali komennolla `for(j in seq(1, i))`.

Emme kuitenkaan voi olla vieläkin tyytyväisiä tulokseen, sillä mukana ovat “parit”, joissa kumpikin laji on sama. Näistä emme luonnollisesti ole kiinnostuneita. Nämä parit voidaan poistaa esimerkiksi ‘`next`’-komennolla.

13.4 Iterointiin puuttuminen: next ja break

Joskus silmukan toimintaan on hyvä puuttua kesken suorituksen. Joskus yksi iteraatio halutaan sivuuttaa kokonaan, toisinaan taas halutaan keskeyttää koko silmukka. Näihin tarkoituksiin R:ssä on komennot `next` ja `break`.

Lisätään edelliseen esimerkkiin toiminto, joka ohittaa diagonaalilla olevat rivit,

eli hyppää iteraaation yli, jos *i* ja *j* ovat yhtä suuret. Käytetään tähän `next`-komentoa, joka ohjaa ohjelman suoraan seuraavaan iteratioon:

```
# Initialize empty data frame for the pairs
close_pairs <- data.frame()

# Iterate over rows and columns
for (i in seq(1, nrow(exons))) {
  # Only check upper diagonal
  for (j in seq(i, ncol(exons))) {
    if (i == j) {
      next
    }
    # Check if dissimilarity is below 4
    if (exons[i, j] < 4) {
      # Add the pair as a new row to close_pairs
      new_row <- data.frame(Species_1 = rownames(exons)[i],
                           Species_2 = colnames(exons)[j])
      close_pairs <- rbind(close_pairs,
                           new_row)
    }
  }
}

close_pairs
```

Nyt pääsimme eroon kaikista turhista pareista!

Jos haluaisimme kaikkien parien sijaan etsiä vain ensimmäisen parin, jonka geenien etäisyys on alle 3, voisimme käyttää komentoa `break`, joka keskeyttää silmukan turhan suorittamisen haluamamme parin löydyttyä.

```
close_pair <- c()

# Iterate over rows and columns
for (i in seq(1, nrow(exons))) {
  # Only check upper diagonal
  for (j in seq(i, ncol(exons))) {
    if (i == j) {
      next
    }
    # Check if dissimilarity is below 3
    if (exons[i, j] < 3) {
      # Assign pair to close_pair and stop search
      close_pair <- c(Species_1 = rownames(exons)[i],
                      Species_2 = colnames(exons)[j])
      break
    }
  }
}
```

```

    }
  }
}

close_pair

```

HUOM: Tämä ei kuitenkaan ole oikea pari: Jos exons data framea käydään läpi rivi kerrallaan, ensimmäinen pari, jonka arvo on alle 3 on Human ja Lemur, ei Mouse ja Gorilla. Mikä siis meni väärin? Kun kyse on näin pienestä aineistosta, voidaan mahdollisia ongelmia tutkia lisäämällä silmukoiden sisään `print()`-komentoja, jotka kertovat meille silmukan etenemisestä. Lisätään siis edelliseen silmukkaan rivi, joka tulostaa iteraatiomuuttujat `i` ja `j` jokaisella iteraatiolla, sekä rivi, joka tulostaa uuden parin, kun sellainen löytyy:

```

close_pair <- c()

# Iterate over rows and columns
for (i in seq(1, nrow(exons))) {
  # Only check upper diagonal
  for (j in seq(i, ncol(exons))) {
    # Monitor loop
    print(c(i, j))
    if (i == j) {
      next
    }
    # Check if dissimilarity is below 3
    if (exons[i, j] < 3) {
      # Assign pair to close_pair and stop search
      close_pair <- c(Species_1 = rownames(exons)[i],
                     Species_2 = colnames(exons)[j])

      print(close_pair)
      break
    }
  }
}

close_pair

```

Nyt huomataan, että iteraatio etenee rivillä yksi neljänteen sarakkeeseen asti, ja löytää parin Human-Lemur, aivan kuten pitikin. Jostain syystä ohjelma siirtyy kuitenkin sen jälkeen toiselle riville. Tämä johtuu siitä, että `break`-komento katkaisee vain yhden for-silmukan kerrallaan. Jos haluamme katkaista myös ulomman silmukan, meidän tulee lisätä ulomman silmukan loppuun tarkastus, joka tarkastaa, onko pari jo löytynyt. Tämä voidaan testata esimerkiksi vektorin `close_pairs` pituuden avulla. Jos if-rakenteelle antaa pelkän luvun, luku tulkitaan arvoksi `TRUE`, jos se ei ole nolla.

```

close_pair <- c()

# Iterate over rows and columns
for (i in seq(1, nrow(exons))) {
  # Only check upper diagonal
  for (j in seq(i, ncol(exons))) {
    if (i == j) {
      next
    }
    # Check if dissimilarity is below 3
    if (exons[i, j] < 3) {
      # Assign pair to close_pair and stop search
      close_pair <- c(Species_1 = rownames(exons)[i],
                     Species_2 = colnames(exons)[j])

      break
    }
  }
  # Stop iterating if the pair has been found
  if (length(close_pair)) {
    break
  }
}

close_pair

```

Nyt koodimme toimii, kuten pitääkin!

13.5 Apply-funktiot

R:ssä käytetään silmukoiden lisäksi `apply()`-funktioihin funktioita, joilla voi käydä läpi data frameja, matriiseja tai vektoreita ilman silmukoita. Joissain tapauksissa `apply`-funktiot ovat myös nopeampia kuin silmukat. Tästä syystä niitä näkee käytettävän paljon, ja varsinkin kokeneemmat R-ohjelmoijat käyttävät niitä usein silmukoiden sijaan. Tällä kurssilla näitä funktioita ei kuitenkaan tarvita. Tässä on annettu muutamia esimerkkejä, voit lukea lisää esimerkiksi DataCampin tutoriaalista

`apply()` käy läpi matriisin/data framen rivit tai sarakkeet, ja ajaa jonkin funktion jokaiselle riville tai sarakkeelle. Alla oleva esimerkki normalisoi kaikki R:n sisäisen datan `trees` sarakkeet autoscaling-menetelmällä, jossa sarakkeen arvoista vähennetään sarakkeen keskiarvo ja tulos jaetaan sarakkeen keskihajonnalla. Normalisoinnin tarkoitus on, että kaikkien sarakkeiden keskiarvoksi saadaan 0, ja kaikilla on sama varianssi (ja keskihajonta) 1.

```
head(trees)
```

```
scaler <- function(x) {  
  scaled <- (x - mean(x)) / sd(x)  
  scaled  
}  
  
scaled_trees <- apply(X = trees, MARGIN = 2, FUN = scaler)  
scaled_trees <- as.data.frame(scaled_trees)  
head(scaled_trees)
```

MARGIN-argumentilla määritetään, käydäänkö läpi rivit vai sarakkeet (1 = rivit, 2 = sarakkeet). HUOM: `apply` palauttaa aina matriisin tai vektorin. Jos tulos halutaan muuntaa takaisin data frameksi, täytyy se tehdä erikseen.

Tarkistetaan tulos laskemalla sarakkeiden keskiarvot ja varianssit. Tämä voidaan tehdä `apply`-funktioilla, tai käyttää `sapply`-funktioita, joka käy automaattisesti data framen sarakkeet, ja ajaa saman funktion sarakkeille kuten `apply`.

```
apply(scaled_trees, 2, mean)  
sapply(scaled_trees, var)
```

Huomaa, että sarakkeiden keskiarvot eivät ole täsmälleen 0. Tämä johtuu R:n rajallisesta numeerisesta tarkkuudesta. Käytännössä itseisarvoltaan tätä luokkaa olevat arvot ovat nollia.

13.6 Vinkkejä tehtäviin

Tämän viikon tehtävissä pitää muokata funktioita, jotka ovat erillisissä tiedostoissa. Jotta tehtävän palautus onnistuu, funktio pitää muokata tässä tiedostossa. Funktio kannattaa kuitenkin kopioida talteen toiseen tiedostoon, sillä tehtävän palauttaminen pyyhkii tiedoston.

Chapter 14

Numeeriset menetelmät

Monilla käytännön matemaattisilla ongelmilla ei ole suljetussa muodossa esitettävissä olevaa ratkaisua. Tällöin joudutaan tyypillisesti turvautumaan numeerisiin menetelmiin, joiden avulla pyritään tuottamaan likiarvoinen ratkaisu ongelmaan. R:stä löytyy useita valmiita funktioita erilaisiin numeerista laskentaa vaativiin ongelmiin. Tyypillisimpiä tapauksia ovat jonkin funktion minimin tai maksimin etsiminen, funktion juurten etsintä ja integrointi.

14.1 Optimointi

14.1.1 Yksi parametri

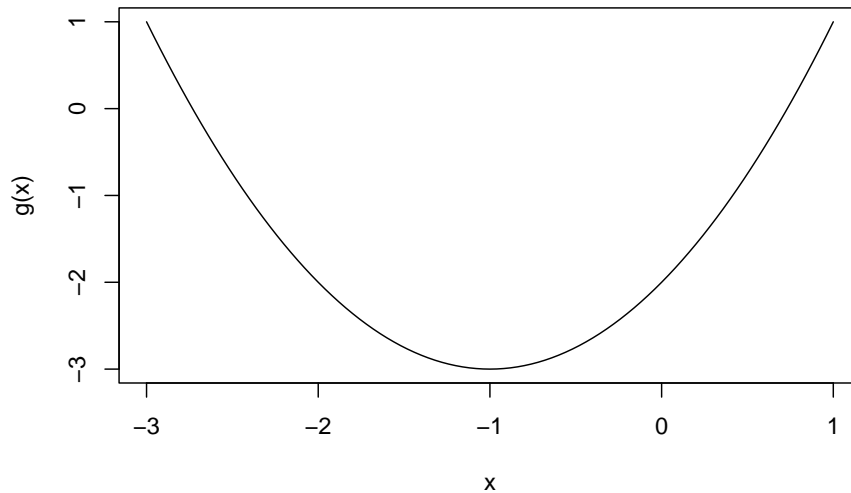
Aloitetaan yksinkertaisesta tapauksesta, jossa haluamme löytää funktion minimin yhden parametrin suhteen. Tällöin voidaan käyttää funktiota `optimize`.

```
optimize(f, interval, ..., lower = min(interval), upper = max(interval),
        maximum = FALSE,
        tol = .Machine$double.eps^0.25)
```

Ensimmäinen argumentti `f` on funktio, jota minimoidaan sen ensimmäisen argumentin suhteen (jos funktiolla on muita argumentteja, joita tarvitaan, tulee ne antaa mukana `optimize` funktiokutsussa). Välin, jolta minimipistettä haetaan, voi ilmoittaa joku argumentilla `interval`, joka on vektori sisältäen välin päätepisteet. Vaihtoehtoisesti välin ylä- ja alaraja voidaan ilmoittaa erikseen argumenteilla `lower` ja `upper`, vastaavasti. Mikäli etsittäisiinkin minimin sijaan maksimia, tulisi asettaa myös argumentti `maximum = TRUE`.

Etsitään nyt funktion $g(x) = x^2 + 2x + 2$ minimi. Hakuvälin `interval` valitsemiseksi voimme esimerkiksi piirtää ensin funktion kuvaajan, jotta saamme suurin piirtein selville, missä minimi mahdollisesti sijaitsee:

```
g <- function(x) x^2 + 2*x -2  
curve(g, xlim = c(-3, 1))
```



Kuvan perusteella minimiarvo saavutetaan pisteessä $x = -1$. Käytetään nyt `optimize` funktiota:

```
optimize(g, interval = c(-3, 1))
```

```
## $minimum  
## [1] -1  
##  
## $objective  
## [1] -3
```

Funktion palauttussa listassa alkio `minimum` ilmoittaa pisteen, jossa minimi saavutetaan. Alkio `objective` antaa tavoitefunktion (eli funktion `f`) arvon kyseisessä pisteessä.

14.1.2 Useampi parametri

Mikäli funktiota halutaan minimoida useamman kuin yhden parametrin suhteen, voidaan käyttää funktiota `optim`.

```
optim(par, fn, gr = NULL, ...,  
      method = c("Nelder-Mead", "BFGS", "CG", "L-BFGS-B", "SANN",  
                  "Brent"),
```



```
lower = -Inf, upper = Inf,
control = list(), hessian = FALSE)
```

Ensimmäinen argumentti `par` on vektori, joka antaa alkuarvot jokaiselle parametrille, jonka suhteen minimointia halutaan tehdä. Seuraava argumentti `fn` on minimoitava funktio, jonka ensimmäisen argumentin tulee vastata argumenttia `par` (vektori, jossa on yhtä monta alkiota). Vastaavasti kuten `optimize`-funktiossa, argumentit `lower` ja `upper` määrittävä alueen, jolta minimiä etsitään. Huomaa kuitenkin, että koska funktiolla `fn` on nyt useampi parametri, ovat `lower` ja `upper` myös vektoreita jotka ilmoittavat rajat jokaiselle parametrille erikseen. Alkuarvojen `par` on myös toteutettava mahdolliset rajoitteet. Argumentti `method` valitsee käytettävän optimointimenetelmän. Metelmistä riittää tietää tässä vaiheessa se, että jos optimointia halutaan tehdä käyttäen rajoitteita (`lower` ja `upper`), voidaan menetelmäksi valita ”L-BFGS-B”, muuten voidaan käyttää oletusarvoa. Muista `optim`-funktion argumenteista ei tämän kurssin puitteissa tarvitse välittää.

Etsitään funktion $f(x, y) = y^2 \exp(-0.5(y^2 + x^2))$ lokaali maksimi joukossa $-1 < x < 3$, $-1 < y < 3$. Annetaan alkuarvoiksi $x = 0.5$ ja $y = 0.5$. `optim`-funktio etsii oletusarvoisesti funktion minimiä, joten vaihtamalla funktion merkki etsitäänkin maksimia. Huomaa, että funktiolla `f` on vain yksi argumentti `x`, vaikka funktiolla f on kaksi argumenttia, x ja y . Tämä johtuu siitä, että `optim`-funktion tapauksessa parametrien `par` on esiinnyttävä funktion argumenteissa vektorina. Vektorin `x` ensimmäinen alkio `x[1]` vastaa siis muuttujaa x ja toinen alkio `x[2]` vastaa muuttujaa y . Tämä yleistyy useamman kuin kahden muuttujan funktioille, kun vektorin `x` pituutta kasvatetaan vastaavasti (esim. kolmas muuttuja z olisi `x[3]` jne.).

```
f <- function(x) -x[2]^2 * exp(-0.5 * (x[2]^2 + x[1]^2))
optim(c(0.5, 0.5), f, lower = c(-1, -1), upper = c(3, 3), method = "L-BFGS-B")
```

```
## $par
## [1] -7.582426e-10  1.414214e+00
##
## $value
## [1] -0.7357589
##
## $counts
## function gradient
##      8      8
##
## $convergence
## [1] 0
##
## $message
## [1] "CONVERGENCE: REL_REDUCTION_OF_F <= FACTR*EPSMCH"
```

Funktion palauttamassa tulosteessa `par` kertoo maksimipisteen koordinaatit. Ensimmäinen alkio kertoo maksimipisteen x -koordinaatin, ja toinen sen y -koordinaatin (huomioi erityisesti 1. alkion merkintätapa `-7.582426e-10` joka tarkoittaa samaa kuin $-7.582426 \cdot 10^{-10}$, eli noin 0.00000000076, eli x koordinaatti on siis käytännössä 0). `value` ilmoittaa löydettyä maksimipistettä vastaavan funktion arvon. Koska funktion merkki vaihdettiin maksimin etsimiseksi, on todellinen maksimiarvo siis löydetyn optimin vastaluku, eli ≈ 0.7357589 . Muut tulostukset ovat optimoinnin konvergenssiin liittyviä lisätietoja. Vaihtoehtoisesti maksimia voi etsiä suoraankin vaihtamalla funktion merkkiä antamalla `optim`-funktiolle lisäargumentti `control = list(fnscale = -1)`.

Etsitään vielä kolmen muuttujan funktion $h(x, y, z) = \exp(-x^2 - 3x - 7y^2 + 3y + z^3 - 2z - 3)$ lokaali maksimi joukossa $-2 < x < 2$, $-3 < y < 3$, $-3 < z < 0$.

```
h <- function(x) exp(-x[1]^2 - 3*x[1] - 7*x[2]^2 + 3*x[2] + x[3]^3 - 2*x[3] - 3)
optim(c(0.5, 0.5, -0.5), h, lower = c(-2, -3, -3), upper = c(2, 3, 0),
      method = "L-BFGS-B", control = list(fnscale = -1))
```

```
## $par
## [1] -1.5000009 0.2142866 -0.8164968
##
## $value
## [1] 1.934968
##
## $counts
## function gradient
##      22      22
##
## $convergence
## [1] 0
##
## $message
## [1] "CONVERGENCE: REL_REDUCTION_OF_F <= FACTR*EPSMCH"
```

Kuten edellä, `par` ilmoittaa maksimipisteen koordinaatit. Maksimi saavutetaan siis pisteessä $(x, y, z) \approx (-1.5000009, 0.2142866, -0.8164968)$ jolloin funktio h saa kohdan `value` ilmoittaman arvon ≈ 1.934968 . Nyt koska käytettiin argumenttia `control = list(fnscale = -1)`, ei tuloksen merkkiä tarvitse vaihtaa.

Alkuarvot funktioille `optim` ja `optimize` tulee valita siten, että rajoitteet ovat voimassa. Alkuarvojen valintaan on vaikea antaa yleispätevää ohjetta, ja usein onkin hyvä kokeilla eri arvoja ja verrata niillä saatuja tuloksia. Yhden ja kahden muuttujan tapauksissa löydettyjen optimipisteiden mielekkyyttä voi tarkastella esimerkiksi piirtämällä funktion kuvaajan annetussa joukossa.

14.2 Funktion juurten etsintä

Funktion juuria voidaan etsiä funktiolla `uniroot`.

```
uniroot(f, interval, ...,
        lower = min(interval), upper = max(interval),
        f.lower = f(lower, ...), f.upper = f(upper, ...),
        extendInt = c("no", "yes", "downX", "upX"), check.conv = FALSE,
        tol = .Machine$double.eps^0.25, maxiter = 1000, trace = 0)
```

Funktion `f` juuria etsitään annetulta väliltä `interval`, sen ensimmäisen argumentin suhteen (jonka tulee olla skalaari). Halutun välin voi määrittää myös sen päätepisteinä käyttäen argumentteja `lower` ja `upper`. Muut `uniroot`-funktion argumentit eivät ole tämän kurssin kannalta oleellisia.

Etsitään funktion $w(x) = x^3 - 2x - 5$ juurta väliltä $(-5, 5)$.

```
w <- function(x) { x^3 - 2*x - 5 }
uniroot(w, interval = c(-5, 5))
```

```
## $root
## [1] 2.094528
##
## $f.root
## [1] -0.0002653143
##
## $iter
## [1] 9
##
## $init.it
## [1] NA
##
## $estim.prec
## [1] 6.103516e-05
```

Funktion palauttamassa tulosteessa kohta `root` ilmoittaa löydetyn juuren. Mikäli juurta ei löydy annetulta väliltä, funktio antaa varoituksen. Kohta `froot` ilmoittaa funktion arvon löydetyssä pisteessä (funktion arvon ja nollan ero riippuu laskennan tarkkuudesta ja käytetystä menetelmästä).

14.3 Numeerinen integrointi

R:n optimointityökaluihin kuuluu myös funktio `integrate`, jolla voi laskea useimpien funktioiden määrättyjä integraaleja.

```
integrate(f, lower, upper, ..., subdivisions = 100L,
          rel.tol = .Machine$double.eps^0.25, abs.tol = rel.tol,
          stop.on.error = TRUE, keep.xy = FALSE, aux = NULL)
```

Ensimmäinen argumentti `f` on funktio, jota halutaan integroida. Argumentit `lower` ja `upper` määräävät integrointivälin, jonka päätepisteet voivat olla myös äärettömiä. Tällöin voidaan asettaa `lower = -Inf` tai vastaavasti `upper = Inf`.

Integroidaan funktiota $f(x) = x^2 + 3x - 2$ välin $[-2, 3]$ yli.

```
poly <- function(x) { x^2 + 3*x - 2 }  
integrate(poly, -2, 3)
```

```
## 9.166667 with absolute error < 2.8e-13
```

Integraalin arvo on siis noin 9.17.