R per l'analisi statistica multivariata

Unità D: analisi descrittiva dei dati DDE

Tommaso Rigon

Università Milano-Bicocca

Unità D

Argomenti affrontati

- Frequenze assolute, relative
- La funzione di ripartizione
- Rappresentazioni grafiche (boxplot, istogrammi)
- Indici di posizione (media, mediana, quantili)

- Esercizi **R** associati: `https://tommasorigon.github.io/introR/exe/es_2.html`

Il problema epidemiologico

- Il **DDT** è estremamente efficace contro le zanzare da malaria ed è pertanto largamente usato in zone in cui la malaria è endemica.
- Al tempo stesso, il DDT potrebbe costituire un **rischio per la salute**, specialmente nel caso di **donne in gravidanza**.
- Per un campione di $n = 2312$ donne in gravidanza, viene misurato il `dde`, ovvero una sostanza connessa al DDT, presente nel siero materno durante il terzo trimestre della gravidanza.
- La variabile `GAD` (Gestational Age at Delivery) misura invece a quale giorno della gravidanza è avvenuto il parto.
- **Domanda di ricerca**: la quantità di DDE è maggiore tra donne che hanno partorito prematuramente?

I dati grezzi (editor di testo)

```
"DDE","GAD"
24.56,292
15.56,289
54.8,252
15,285
33.54,281
22.68,283
25.02,277
31.85,284
37.45,293
32.27,277
31.43,280
27.37,255
15.23,261
31.23,289
54.39,296
18.11,260
79.7,297
15.68,270
```

Importazione dei dati dde

- Per poter procedere con i prossimi comandi, è necessario scaricare il file `dde.csv` e salvarlo nel proprio computer.

- **Link al file**: `https://tommasorigon.github.io/introR/data/dde.csv`.

- In alternativa, possiamo semplice ottenerli usando il link:

```
dde <- read.table("https://tommasorigon.github.io/introR/data/dde.csv", header = TRUE,
                  sep = ",") # Scarica il file da internet
str(dde)
# 'data.frame':        2312 obs. of  2 variables:
# $ DDE: num  24.6 15.6 54.8 15 33.5 ...
# $ GAD: int  292 289 252 285 281 283 277 284 293 277 ...
```

- Si noti la presenza di una nuova **tipologia di variabile**, ovvero `integer`, ovvero **numeri interi**.

Operazioni preliminari

- Un totale di 361 donne hanno **partorito prematuramente**, ovvero prima della conclusione della 37a settimana.

- Per verificare questo, dividiamo la variabile `DDE` in due gruppi.

```
dde_preterm <- dde$DDE[dde$GAD < 37 * 7] # Gruppo parto prematuro
dde_non_preterm <- dde$DDE[dde$GAD >= 37 * 7] # Gruppo parto non prematuro

length(dde_preterm) # Numerosità campionaria gruppo 1
# [1] 361
length(dde_non_preterm) # Numerosità campionaria gruppo 2
# [1] 1951
```

- Il primo gruppo (variabile `dde_preterm`) fa riferimento ai parti prematuri e comprende 361 osservazioni.

- Il secondo gruppo (variabile `dde_non_preterm`) considera i parti non prematuri e comprende le restanti 1951 osservazioni.

Suddivisione in intervalli

- Per sintetizzare i dati tramite **frequenze**, possiamo suddividere l'intervallo che contiene tutti i valori osservati (ovvero $(0, 180]$) in un certo numero di **sotto-intervalli**.

- In primo luogo, definiamo i 10 sotto-intervalli di lunghezza 18, chiusi a destra tramite il comando `cut`:

```r
breaks <- 18 * (0:10) # Definizione degli intervalli. Usiamo 10 intervalli di lunghezza 18.

dde_preterm_class <- cut(dde_preterm, breaks = breaks)
dde_non_preterm_class <- cut(dde_non_preterm, breaks = breaks)

head(dde_preterm_class)
# [1] (54,72] (18,36] (18,36] (0,18]  (0,18]  (18,36]
# 10 Levels: (0,18] (18,36] (36,54] (54,72] (72,90] (90,108] (108,126] ... (162,180]
```

- In questo modo, abbiamo trasformato una variabile `numeric` in una variabile `factor`.

Frequenze assolute

- Le **frequenze assolute** $n_1 \ldots, n_k$ si ottengono quindi tramite il comando `table`, il quale ha senso di essere applicato su variabili di tipo `factor`.

- La funzione `table` **conteggia** quante volte una determinata modalità compare nel vettore.

- Eseguiamo questa operazione per entrambi i gruppi di dati:

```
freq_abs_preterm <- table(dde_preterm_class)
freq_abs_preterm
# dde_preterm_class
#    (0,18]   (18,36]   (36,54]   (54,72]   (72,90]  (90,108] (108,126]
#        68       164        65        34        14        10         3
# (126,144] (144,162] (162,180]
#         1         1         1

freq_abs_non_preterm <- table(dde_non_preterm_class)
freq_abs_non_preterm
# dde_non_preterm_class
#    (0,18]   (18,36]   (36,54]   (54,72]   (72,90]  (90,108] (108,126]
#       573       906       308        91        40        19         6
# (126,144] (144,162] (162,180]
#         5         2         1
```

Frequenze relative

- Una volta ottenute le frequenze assolute, è possibile calcolare le **frequenze relative**.
- Sebbene sia possibile usare comando `prop.table` (lo re-incontreremo in seguito), qui seguiamo una via più diretta.
- Si ricordi infatti che $n = n_1 + \cdots + n_k$, pertanto possiamo ottenere le frequenze relative $f_j = n_j/n$ come segue:

```
freq_rel_preterm <- freq_abs_preterm / sum(freq_abs_preterm)
round(freq_rel_preterm, digits = 3)
# dde_preterm_class
#    (0,18]    (18,36]    (36,54]    (54,72]    (72,90]   (90,108] (108,126]
#     0.188      0.454      0.180      0.094      0.039      0.028      0.008
# (126,144] (144,162] (162,180]
#     0.003      0.003      0.003

freq_rel_non_preterm <- freq_abs_non_preterm / sum(freq_abs_non_preterm)
round(freq_rel_non_preterm, digits = 3)
# dde_non_preterm_class
#    (0,18]    (18,36]    (36,54]    (54,72]    (72,90]   (90,108] (108,126]
#     0.294      0.464      0.158      0.047      0.021      0.010      0.003
# (126,144] (144,162] (162,180]
#     0.003      0.001      0.001
```

Organizzazione dei risultati

- Raccogliamo quindi i risultati appena ottenuti all'interno di una matrice, per poterli visualizzare meglio.

```
tab_summary <- cbind(freq_abs_preterm, freq_abs_non_preterm,
                     freq_rel_preterm, freq_rel_non_preterm)
colnames(tab_summary) <- c(
  "n_j prematura",
  "n_j non prematura",
  "f_j prematura",
  "f_j non prematura"
)

round(tab_summary, 3) # Visualizzazione dei risultati
#            n_j prematura n_j non prematura f_j prematura f_j non prematura
# (0,18]                68               573         0.188             0.294
# (18,36]              164               906         0.454             0.464
# (36,54]               65               308         0.180             0.158
# (54,72]               34                91         0.094             0.047
# (72,90]               14                40         0.039             0.021
# (90,108]              10                19         0.028             0.010
# (108,126]              3                 6         0.008             0.003
# (126,144]              1                 5         0.003             0.003
# (144,162]              1                 2         0.003             0.001
# (162,180]              1                 1         0.003             0.001
```

Gli istogrammi I

- L'**istogramma** consente di rappresentare graficamente una distribuzione di frequenza. Per rinfrescare la memoria, si ricordi che nella sua versione più semplice si pone:

$$\begin{aligned}\text{(base rettangoli)} &= \text{(lunghezza intervalli)}\\ \text{(altezza rettangoli)} &= \text{(frequenze assolute)}\end{aligned}$$

- Questa definizione **non è appropriata** se gli **intervalli** hanno **dimensioni diverse**.

- In tal caso, è le altezze dei rettangoli devono essere **proporzionali** alla **densità** delle osservazioni nelle singole classi.

- Ricapitolando, costruiremo gli istogrammi ponendo

$$\begin{aligned}\text{(base rettangoli)} &= \text{(lunghezza intervalli)}\\ \text{(altezza rettangoli)} &= \lambda \times \text{(densità)} = \lambda \times \frac{\text{(frequenze assolute)}}{\text{(lunghezza intervalli)}}\end{aligned}$$

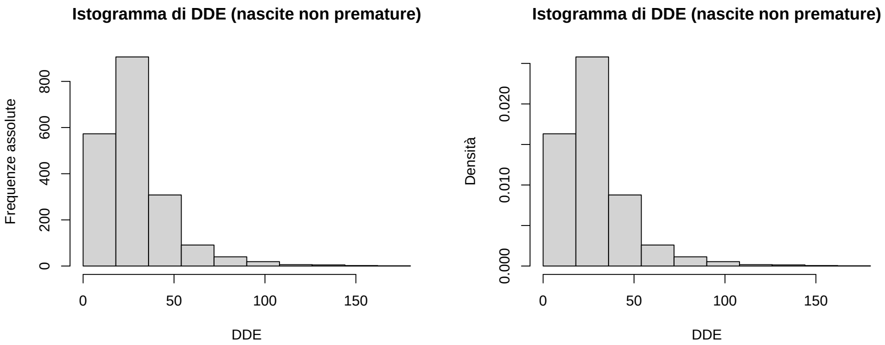
dove tipicamente si pone $\lambda = 1/n$.

Gli istogrammi II

- Concentriamoci inizialmente solo sul gruppo di **nascite non premature**, per capire il funzionamento della sintassi di **R**.

```
par(mfrow = c(1, 2)) # Divide il grafico in due parti

# Primo grafico, frequenze assolute
hist(dde_non_preterm,
     freq = TRUE,
     breaks = 10, # Utilizzo 10 sotto-intervalli
     # Da qui in poi stiamo solo aggiungendo dettagli estetici
     main = "Istogramma di DDE (nascite non premature)",
     xlab = "DDE",
     ylab = "Frequenze assolute"
)

# Secondo grafico, densità
hist(dde_non_preterm,
     freq = FALSE, # NON vengono usate le frequenze
     breaks = 10, # Utilizzo 10 sotto-intervalli
     # Da qui in poi stiamo solo aggiungendo dettagli estetici
     main = "Istogramma di DDE (nascite non premature)",
     xlab = "DDE",
     ylab = "Densità"
)
```

Gli istogrammi II



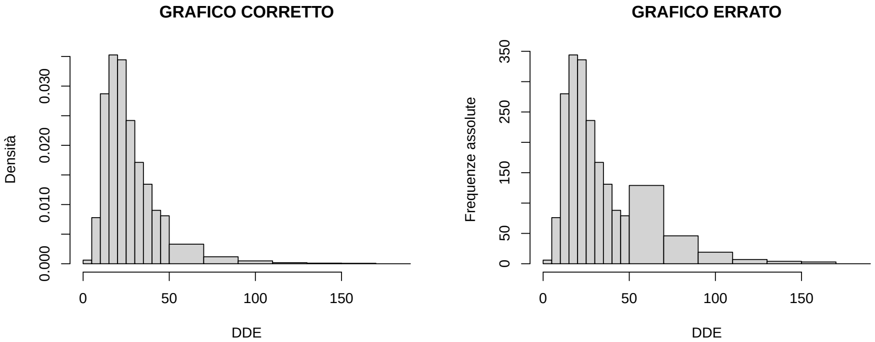
- Istogramma basato sulle **frequenze assolute** (sinistra) e sulla **densità** (destra), solamente per il gruppo di nascite non premature.

Gli istogrammi III

- **Nota**. Nel caso di intervalli **non equispaziati**, è obbligatorio utilizzare l'opzione `freq = FALSE`, altrimenti il grafico prodotto risulta privo di senso.

```r
# Definizione di intervalli NON equispaziati
breaks <- c(5 * 0:10, 70, 90, 110, 130, 150, 170, 190)

# GRAFICO CORRETTO
hist(dde_non_preterm,
     freq = FALSE,
     breaks = breaks,
     # Da qui in poi stiamo solo aggiungendo dettagli estetici
     main = "GRAFICO CORRETTO", xlab = "DDE", ylab = "Densità"
)

# GRAFICO ERRATO
hist(dde_non_preterm,
     freq = TRUE, # NON vengono usate le frequenze
     breaks = breaks,
     # Da qui in poi stiamo solo aggiungendo dettagli estetici
     main = "GRAFICO ERRATO", xlab = "DDE", ylab = "Frequenze assolute"
)
# Warning message:
# In plot.histogram(r, freq = freq1, col = col, border = border, angle = angle,  :
#   the AREAS in the plot are wrong -- rather use 'freq = FALSE'
```

Gli istogrammi III



- Il grafico di sinistra è corretto e fa uso della nozione di **densità** spiegata in precedenza. Il grafico di destra è **errato**.
- Fortunatamente **R** ci avvisa tramite un "**warning**" che questa procedura è scorretta.

Il numero di intervalli

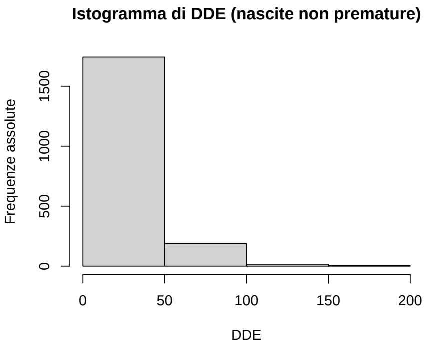
- Un numero **troppo basso** di intervalli comporta una **perdita di informazione**.
- Viceversa, un numero **troppo alto** di intervalli comporta una **perdita di sintesi**.
- Si tenga presente che il **numero degli intervalli** deve dipendere dal **numero dei dati**.
- Sono state proposte varie formule per identificare il "numero ottimale" di intervalli. Vanno però prese come dei suggerimenti e non usate in maniera automatica.
- **Sturges**. Il numero di intervalli, approssimato all'intero più vicino, è

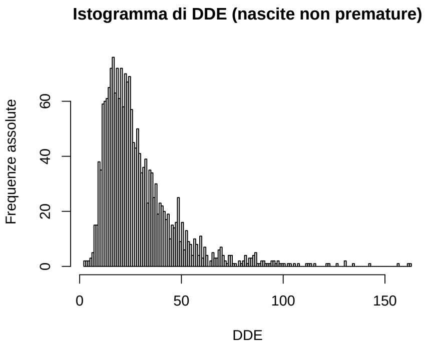
$$(\text{numero di intervalli}) = 1 + \log_2 n.$$

- **Freedman & Diaconis**. Il numero di intervalli, approssimato all'intero più vicino, è

$$(\text{numero di intervalli}) = \frac{x_{(n)} - x_{(1)}}{2(\mathcal{Q}_{0.75} - \mathcal{Q}_{0.25})} n^{1/3}.$$

Il numero di intervalli





- A sinistra viene mostrato un istogramma con troppi pochi intervalli (=4), a destra invece un istogrammi con troppi intervalli (=180).

- **Esercizio**. Si ottenga il grafico riportato in questa slide.

Il numero di intervalli II

- Il numero “ottimale” di intervalli si può ottenere tramite i comandi seguenti:

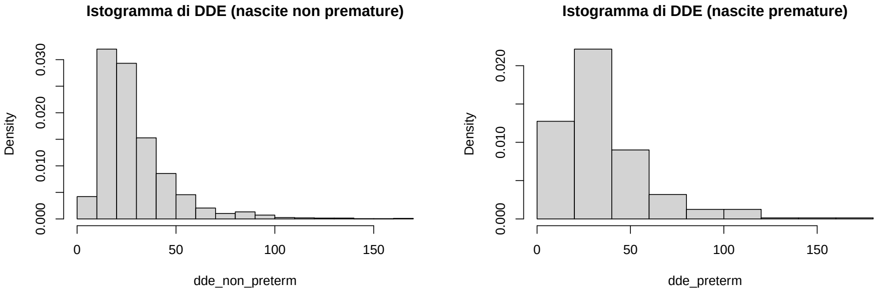
```
nclass.Sturges(dde_non_preterm) # Regola di Sturges
# [1] 12
nclass.FD(dde_non_preterm) # Regola di Freedman e Diaconis
# [1] 54
```

- Il comando `hist` **R**, se non viene specificato diversamente tramite l’opzione `breaks`, seleziona in automatico intervalli **equispaziati** tramite la regola di **Sturges**.

```
hist(dde_non_preterm, # Gruppo nascite non-premature
     freq = FALSE,
     main = "Istogramma di DDE (nascite non premature)"
)

hist(dde_preterm, # Gruppo nascite premature
     freq = FALSE,
     main = "Istogramma di DDE (nascite premature)"
)
```

- Eventualmente, è possibile selezionare una regola diversa ponendo `breaks = "FD"`.

Confronto tra le due distribuzioni



- Questo grafico conclusivo consente finalmente di confrontare le due distribuzioni.
- La distribuzione di "nascite premature" risulta più spostata a destra.

La funzione di ripartizione empirica I

- Una seconda rappresentazione grafica di uso frequente è la cosiddetta **funzione di ripartizione empirica** $F(x)$.

- Siano $x_1, \dots, x_n$ una collezione di dati, allora definiamo

$$F(x) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbb{1}(x_i \leq x),$$

dove $\mathbb{1}(x_i \leq x)$ è la **funzione indicatrice** e vale 1 se $x_i \leq x$ e 0 se $x_i > x$.

- In **R**, si usa il comando `ecdf` (empirical cumulative distribution function), ad esempio:

```
ecdf(dde_non_preterm)
# Empirical CDF
# Call: ecdf(dde_non_preterm)
#  x[1:1585] =    2.5,   2.95,   3.14,  ..., 161.11, 162.29
```

La funzione di ripartizione empirica II

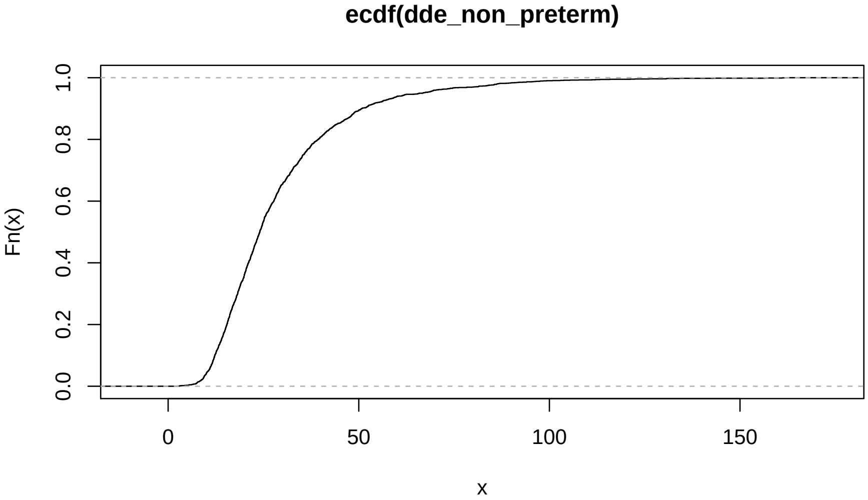
- Il comando `ecdf` restituisce come oggetto una vera e propria **funzione**. Infatti:

```
F_non_preterm <- ecdf(dde_non_preterm)

F_non_preterm(40) # Calcola la funzione di ripartizione empirica in 40
# [1] 0.8077909

sum(dde_non_preterm <= 40) / length(dde_non_preterm) # Comando "manuale" alternativo
# [1] 0.8077909
```

- Per farne un grafico, è inoltre sufficiente usare il comando `plot`:

```
par(mfrow=c(1,1))
plot(ecdf(dde_non_preterm))
```

La funzione di ripartizione empirica II



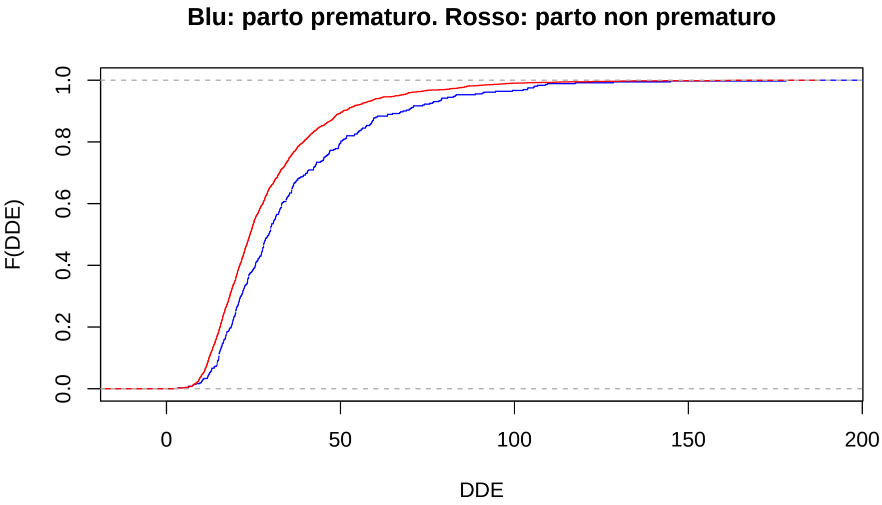
La funzione di ripartizione empirica III

- Per poter confrontare le funzioni di ripartizione dei due gruppi, la sintassi è leggermente più elaborata:

```
plot(ecdf(dde_preterm), do.points = FALSE, col = "blue",
     main = "Blu: parto prematuro. Rosso: parto non prematuro",
     xlab = "DDE",
     ylab = "F(DDE)"
)

plot(ecdf(dde_non_preterm), col = "red", add = TRUE) # Aggiungo un secondo gruppo
```

- L'opzione `do.points = FALSE` omette i "pallini" nel grafico ed è stato aggiunta per ragioni esclusivamente **estetiche**.

La funzione di ripartizione empirica III



Indici di posizione: la media

- Per quantificare la differenza tra le due distribuzioni, vogliamo trovare le **medie aritmetiche** delle variabili `dde_preterm` e `dde_non_preterm`.

- In **R** ovviamente esiste un comando apposito:

```
mean(dde_preterm) # Media aritmetica di DDE per donne con parto prematuro
# [1] 36.20299
mean(dde_non_preterm) # Media aritmetica di DDE per donne con parto regolare
# [1] 29.14199
```

- Come ormai ampiamente rilevato, notiamo che il DDE è presente in quantità maggiore tra le donne che hanno partorito prematuramente.

- La media aritmetica poteva essere ottenuta anche a partire dai comandi che abbiamo incontrato nelle unità precedenti:

```
n <- length(dde_preterm) # Numerosità campionaria di dde_preterm (=361)
sum(dde_preterm) / n # Media aritmetica della variabile dde_preterm
# [1] 36.20299
```

Indici di posizione: la mediana I

- La mediana (Me) di una variabile è il **valore centrale** della distribuzione, ovvero:

$$\text{Me} = \begin{cases} x_{\left(\frac{n+1}{2}\right)}, & \text{se } n \text{ è dispari}, \\ \left(x_{(n/2)} + x_{(n/2+1)}\right)/2, & \text{se } n \text{ è pari}, \end{cases}$$

dove $x_{(1)}, \dots, x_{(n)}$ rappresenta il campione ordinato.

- In **R** esiste un comando apposito:

```
median(dde_preterm) # Mediana di DDE per donne con parto prematuro
# [1] 29.46
median(dde_non_preterm) # Mediana di DDE per donne con parto regolare
# [1] 24.04
```

- Si noti (come mai?) che la funzione di ripartizione empirica, valutata nella mediana, è circa pari a `0.5`.

```
F_non_preterm(median(dde_non_preterm))
# [1] 0.5002563
```

Indici di posizione: la mediana II

- La mediana di una variabile numerica si può anche ottenere "manualmente".

```r
x <- c(10, 20, 25, 3.5, 28, 62)
n <- length(x) # Numerosità campionaria
n # Si noti che n = 6 è pari
# [1] 6

x_sort <- sort(x) # Vettore ordinato dei valori di x
x_sort
# [1]  3.5 10.0 20.0 25.0 28.0 62.0

pos_med_1 <- n / 2 # Elemento in posizione n/2
pos_med_2 <- n / 2 + 1 # Elemento in posizione n/2+1

(x_sort[pos_med_1] + x_sort[pos_med_2]) / 2 # Mediana di x
# [1] 22.5

median(x) # Ovviamente, il risultato deve coincidere con:
# [1] 22.5
```

- **Esercizio**. Si ottenga la mediana "manualmente" nel caso in cui il vettore `x` ha un numero dispari di elementi.

Indici di posizione: i quantili I

- Siano $x_1, \dots, x_n$ un insieme di dati, sia $p \in (0,1)$ e sia $F(x)$ la funzione di ripartizione empirica. Il **quantile-p** è quindi pari a

$$\mathcal{Q}_p = \inf\{x : F(x) \geq p\}.$$

- In **R** considerando $p = (0.1, 0.25, 0.75, 0.9)$, ovvero il primo decile, il primo quartile, il terzo quartile ed il nono decile, possiamo usare il comando `quantile`

```r
quantile(dde_preterm, probs = c(0.1, 0.25, 0.75, 0.9), type = 1)
#   10%   25%   75%   90%
# 15.07 19.94 45.30 68.01
quantile(dde_non_preterm, probs = c(0.1, 0.25, 0.75, 0.9), type = 1)
#   10%   25%   75%   90%
# 12.23 16.73 35.45 50.72
```

- **Esercizio**. Lo studente si convinca che l'implementazione "manuale" del comando `quantile` è la seguente:

```r
min(dde_non_preterm[F_non_preterm(dde_non_preterm) >= 0.25])
# [1] 16.73
min(dde_non_preterm[F_non_preterm(dde_non_preterm) >= 0.75])
# [1] 35.45
```

Indici di posizione: i quantili II

- **Nota**. La definizione di quantile che abbiamo fornito coincide con quella descritta nel corso Statistica I, ma non è l'unica possibile (Come mai? Si riveda Statistica I...).

- Tale definizione si ottiene con l'opzione `type = 1`, che tuttavia **non è il default**. Il valore predefinito è invece `type = 7`.

- Se siete curiosi rispetto alle convenzioni che sono state usate, vi ricordo che la **documentazione** consultabile tramite il comando `? quantile` ve le spiega.

- **Esercizio**. Un difetto del quantile `type = 1` è che la mediana non sempre coincide con il quantile $\mathcal{Q}_{0.5}$. Si trovi un esempio in questo accade e si verifichi che invece il problema viene risolto nel caso `type = 7`.

Indici di posizione: i quantili III

- In **R** esistono in totale ben **9 modi** per calcolare i quantili.
- Fortunatamente, per numerosità campionarie elevate le **differenze** tendono ad essere **trascurabili**.
- Elenchiamo qui di seguito alcuni esempi per la variabile `dde_preterm`:

```
tab <- rbind(
  quantile(dde_preterm, probs = c(0.1, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9), type = 1),
  quantile(dde_preterm, probs = c(0.1, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9), type = 6),
  quantile(dde_preterm, probs = c(0.1, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9), type = 7),
  quantile(dde_preterm, probs = c(0.1, 0.25, 0.5, 0.75, 0.9), type = 9)
)
rownames(tab) <- c(1, 6, 7, 9) # Cambia i nomi alle righe della tabella
tab
#      10%   25%   50%      75%    90%
# 1 15.070 19.94 29.46 45.30000 68.010
# 6 15.054 19.94 29.46 45.49000 68.738
# 7 15.070 19.94 29.46 45.30000 68.010
# 9 15.060 19.94 29.46 45.41875 68.465
```

- **Suggerimento**. Cosa fa `rbind`? Lo abbiamo incontrato nell'unità A.

Il comando `summary`

- Per ottenere rapidamente le **principali statistiche descrittive** di una distribuzione (minimo, massimo, media, mediana e quartili), si usa spesso il comando `summary`:

```
summary(dde_preterm)
#    Min. 1st Qu.  Median    Mean 3rd Qu.    Max.
#    3.17   19.94   29.46   36.20   45.30  178.06
summary(dde_non_preterm)
#    Min. 1st Qu.  Median    Mean 3rd Qu.    Max.
#    2.50   16.73   24.04   29.14   35.40  162.29
```

- Il comando `summary` può anche essere usato direttamente su un oggetto di tipo `data.frame` producendo il seguente output:

```
summary(dde)
#       DDE              GAD
#  Min.   :  2.50   Min.   :194.0
#  1st Qu.: 17.13   1st Qu.:267.0
#  Median : 24.68   Median :277.0
#  Mean   : 30.24   Mean   :274.9
#  3rd Qu.: 36.52   3rd Qu.:286.0
#  Max.   :178.06   Max.   :315.0
```

I boxplot I

- Una rappresentazione grafica alternativa agli istogrammi sono i **boxplot**.

- Le **statistiche descrittive** su cui si basano i boxplot si possono ottenere tramite il comando `boxplot.stats`, ovvero:

```
boxplot.stats(dde_preterm)
# $stats
# [1]  3.17 19.94 29.46 45.30 83.25
#
# $n
# [1] 361
#
# $conf
# [1] 27.35112 31.56888
#
# $out
#  [1]  94.60  99.42 144.86 105.83  90.73 128.47  91.23 102.50 178.06  88.72 117.54
# [12] 108.90 106.70 105.48 109.55 103.88 103.77
```

- ```
  boxplot(dde_preterm, dde_non_preterm) # Produce il grafico
  ```
  ```

I boxplot II