Harjoitus 4: Tutustuminen R:n ja regressioanalyysi (R)

MS-C2107 Sovelletun matematiikan tietokonetyöt

4. Harjoituskerta

Aiheet:

- R:n käyttö ja syntaksi vs. Matlab
- Datan käsittely R:llä
- Regressiomallien muodostaminen R:llä

Osaamistavoitteet:

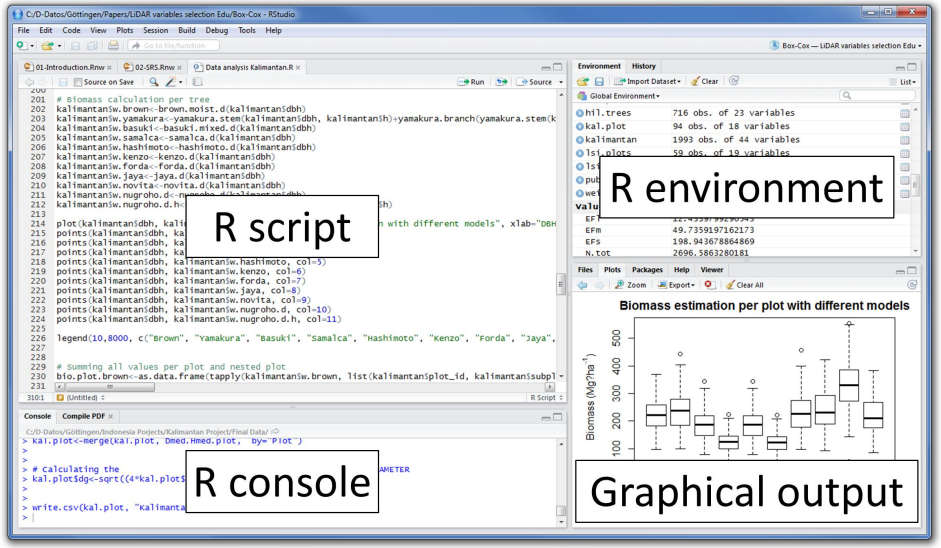
- Osaat R:n perussyntaksin ja erityispiirteet datan käsittelyssä
- Hallitset regressioanalyysin ja visualisoinnin R:llä

R ohjelmointiympäristönä

- Ilmainen ohjelmointiympäristö data-analytiikkaan, mallintamiseen sekä visualisointiin
- Pohjautuu vuonna 1967 julkaistuun S-kieleen
- Pitkälti samat toiminnallisuudet kuin matlabissa
- R on ns. ”skriptauskieli”, eli ajetaan rivi / osio kerrallaan
- Lukematon määrä paketteja (vrt. Matlabin toolboxit) eri toimintoihin ladattavissa
- R:ää käytetään enenevissä määrin esim. yritysmaailmassa

RStudio

- RStudio on graafinen ympäristö R:n ajamiseen. Kierroksen tehtävät suoritetaan käyttämällä RStudiota, joka on valmiiksi asennettu Aallon koneille.



Kuva 1: Lähde

- Konsoli: Käytä kuten Matlabin komentoikkunaa

```
> x=1
> x
[1] 1
```

- Skriptit (.r-tiedostot): Valitse haluamasi pätkä ja aja ctrl+enterillä

```
> polku=getwd()
> polku
[1] "C:/Users/StudentID/Documents"
> setwd(polku)
```

- Environment: Muuttujat ja funktiot (vrt. Matlabin workspace)
- Graafiset tulokset: Kuvaajat, Help jne.

```
> help("install.packages")
```

R:n syntaksi - muuttujat

Muuttujaan sijoittaminen tapahtuu = tai <- operaattoreilla

- Vektorit:
  - Vektorit voivat sisältää erityyppisiä muuttujia

```
> #Kokonaislukuvektori
> v1=c(1,2,3)
> #Logiikkavektori
> v2=c(TRUE,FALSE,TRUE)
> #Tekstivektorin pituus
> length(c("aa","bb","cc"))
[1] 3
```

  - Vektorien muokkaaminen

```
> v1[1]
```

```
[1] 1
> #Arvon muuttaminen
> v1[1]=2
> v1
[1] 2 2 3
> #Vektorien yhdistely:
> c(c(1,2,3),c("aa","bb"))
> #Huom! Numeroista tulee tekstimuuttujia
[1] "1"  "2"  "3"  "aa" "bb"
```

- Matemaattiset operaatiot ovat alkioittaisia vektoreille

```
> #Vektorien +,-,* ja /-laskut (alkoittaisia):
> c(1,2,3)+c(4,5,6)
[1] 5 7 9
> c(1,2,3)*c(4,5,6)
[1]  4 10 18
```

- R:n vektori ei lähtökohtaisesti ole matemaattinen vektori

- Matriisit:
  - Matriisien luominen

```
> #Luodaan matriisi, jossa on 2 riviä ja 3 saraketta:
> A <- matrix(c(1,2,3,4,5,6),nrow=2,ncol=3,byrow=TRUE)
> A
     [,1] [,2] [,3]
[1,]    1    2    3
[2,]    4    5    6
```

  - Huom! `as.matrix` muuttaa muita taulukoita matriisimuotoiksi
  - Alkioihiin viittaaminen

```
> #Alkioihin viittaaminen
> A[2,3] #yksittäinen alkio
[1] 6
> A[2,] #koko rivi
```

```
[1] 4 5 6
> A[,c(1,3)] #kaikki rivit, sarakkeet 1 ja 3
     [,1] [,2]
[1,]    1    3
[2,]    4    6
```

- Kertolasku:

```
> #Kertolasku:
> A*A #Alkioittainen
     [,1] [,2] [,3]
[1,]    1    4    9
[2,]   16   25   36
> t(A) %*% A #Matriisien kertolasku (t ottaa transpoosin)
     [,1] [,2] [,3]
[1,]   17   22   27
[2,]   22   29   36
[3,]   27   36   45
```

- Listat:
  - Tietorakenne, jonka sisällä muita objekteja

```
> l1=list(v1,v2)
> l1
[[1]]
[1] 2 2 3

[[2]]
[1]  TRUE FALSE  TRUE
```

  - Listaan viittaaminen

```
> #Useampaan alkioon viittaus:
> l1[c(1,2)]
[[1]]
[1] 2 2 3

[[2]]
```

```
[1]  TRUE FALSE  TRUE

> #Viimeiseen alkioon viittaus
> l1[-1]
[[1]]
[1]  TRUE FALSE  TRUE

> #Yksittäiseen elementtiin viittaus kaksilla hakasuluilla:
> l1[[2]]
[1]  TRUE FALSE  TRUE
> #Muokkaus:1
> l1[[1]][1]=100
```

- Nimetyt listan jäsenet:

```
> em=list(pituudet=c(175,169,181),painot=c(80,65,85))
> em
$pituudet
[1] 175 169 181
```

```
$painot
[1] 80 65 85

> em$pituudet
[1] 175 169 181
> em["painot"]
$painot
[1] 80 65 85
```

- Listoja ei käytetä säilömään vektoreja tai matriiseja matemaattisessa mielessä
- Useat funktioiden palautukset tulevat lista-tietorakenteina

- Data framet
  - Yleinen datan säilömismuoto: Sarakkeissa muuttujat, riveillä havainnot
  - Käytännössä lista saman pituisia vektoreita

```
> #Luo kolmen muuttujan havaintovektorit:
> weight=c(160,175,159)
> bloodtype=c("A+","A-","B+")
> female=c(TRUE,FALSE,TRUE)
> #Tallenna data frameen:
> df=data.frame(weight,bloodtype,female)
> df
  weight bloodtype female
1    160        A+   TRUE
2    175        A-  FALSE
3    159        B+   TRUE
```

  - Viittaus taulukon alkioihin (huom! Rivit ja sarakkeet voivat

olla nimettyjä)

```
> df[1,2] #Viittaus indeksien avulla
[1] A+
Levels: A- A+ B+
> df[1,"bloodtype"] # Viittaus nimen avulla
[1] A+
Levels: A- A+ B+
```

- Esikatselu ja taulukon tarkastelu

```
> head(df) # Taulukon alku
  weight bloodtype female
1    160        A+   TRUE
2    175        A-  FALSE
3    159        B+   TRUE
> #Avaa koko taulukko:
> View(df)
```

- Data framen käsittelyyn on olemassa monia tehokkaita paket-

teja (esim. reshape2, dplyr, data.table), jotka mahdollistavat datan hakemisen, ryhmittelyn ja muokkaamisen tietokannan tapaan

R:n syntaksi - Funktiot ja paketit

- Funktiot toimivat samoin kuin Matlabissa:
  - Voi tehdä omia funktioita samaan tapaan kuin pythonissa:

```
> oma_funktio=function(arg1,arg2)
+ {
+   palautus1=c(arg1,arg2)
+   palautus2=arg1*arg2
+   return(list(palautus1,palautus2))
+ }
> palautuslista=oma_funktio(1,100)
> palautuslista
[[1]]
[1]   1 100

[[2]]
[1] 100
```

- Paketit ovat ilmaisia lisäosia erilaisiin spesifeihin tarkoituksiin (tilastollinen analyysi, regressio, neuroverkot...)
  - Pakettien lataaminen ja käyttöönotto

    ```
    > install.packages("stats") # Kun lataat paketin ekan kerran
    > library(stats) # Kun otat jo ladatun paketin käyttöön
    ```

  - RStudio hoitaa pakettien lataamisen edellä mainittujen komentojen avulla
  - Paketteihin löytyy yleensä hyvät dokumentaatiot googlaamalla
  - Myös `help("paketin nimi")` toimii

Datan tuonti ja visualisointi

- Lähes kaikkien tiedostotyyppien tuonti R:n ja tallennus R:llä onnistuu (.xls,.txt,.csv,.json,.mat...)
- Komentoja esim. `read.table`, `read.csv`, `read.xlsx`... (osa vaatii paketin latauksen)
- Esimerkki: ladataan simuloitua dataa kuvitteellisen kurssin tenttipisteistä opiskeluun käytetyn ajan suhteen:

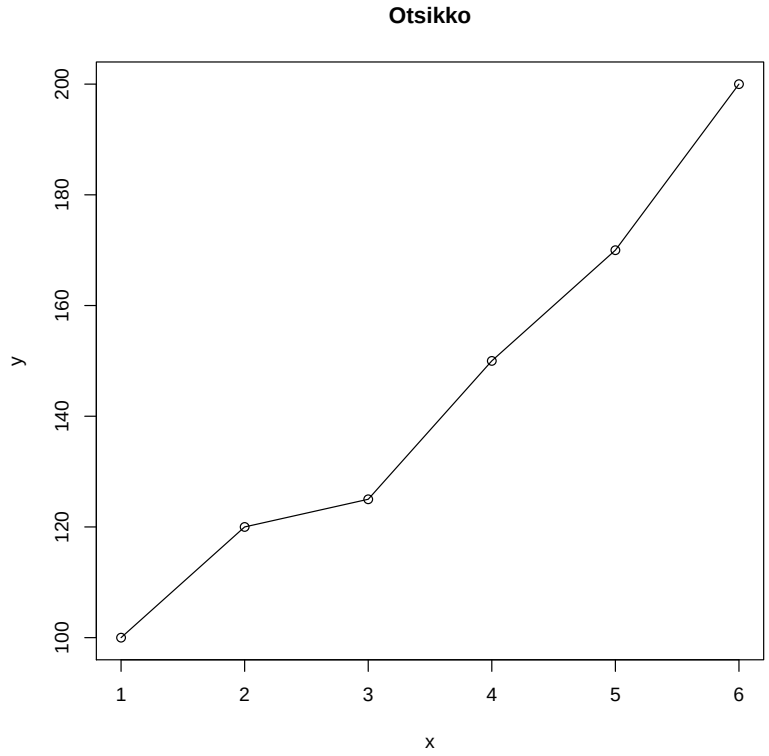
```
> opiskeludata=read.table("opiskeludata.txt",header=TRUE)
> head(opiskeludata) # Tutkitaan dataa
  opiskelutunnit tenttipisteet
1       2.477782        0.00000
2      21.587104       66.70898
3      29.884683       95.12357
4      10.636029       69.11182
5      29.137764      100.00000
6      10.393463       40.32418
```

```
> summary(opiskeludata) #Yhteenveto datasta
 opiskelutunnit    tenttipisteet
 Min.   : 0.2941   Min.   :  0.00
 1st Qu.: 6.3613   1st Qu.: 32.74
 Median :13.9828   Median : 53.95
 Mean   :14.5321   Mean   : 55.65
 3rd Qu.:22.7271   3rd Qu.: 82.30
 Max.   :29.8847   Max.   :100.00
```

- Taulukoita voi tallentaa esim. `write.table()`-komennolla
- R:n oma tiedostomuoto datan tallentamiseen .RData
- .RData-tiedostoja voi tallentaa ja ladata `save()` ja `load()`-komennoilla

- Visualisointiin on monia komentoja, esim. `plot()` toimii:

```
> x=c(1,2,3,4,5,6)
> y=c(100,120,125,150,170,200)
> plot(x,y,'o',xlab="x",ylab="y",main="Otsikko")
```



Demo : Lineaarinen regressiomalli

- Sovitetaan lineaarinen regressiomalli, jossa opiskelutunnit (x) on selittävä muuttuja ja tenttipisteet y on selitettävä muuttuja siten, että

$$y = \alpha x + \beta + \epsilon \tag{1}$$

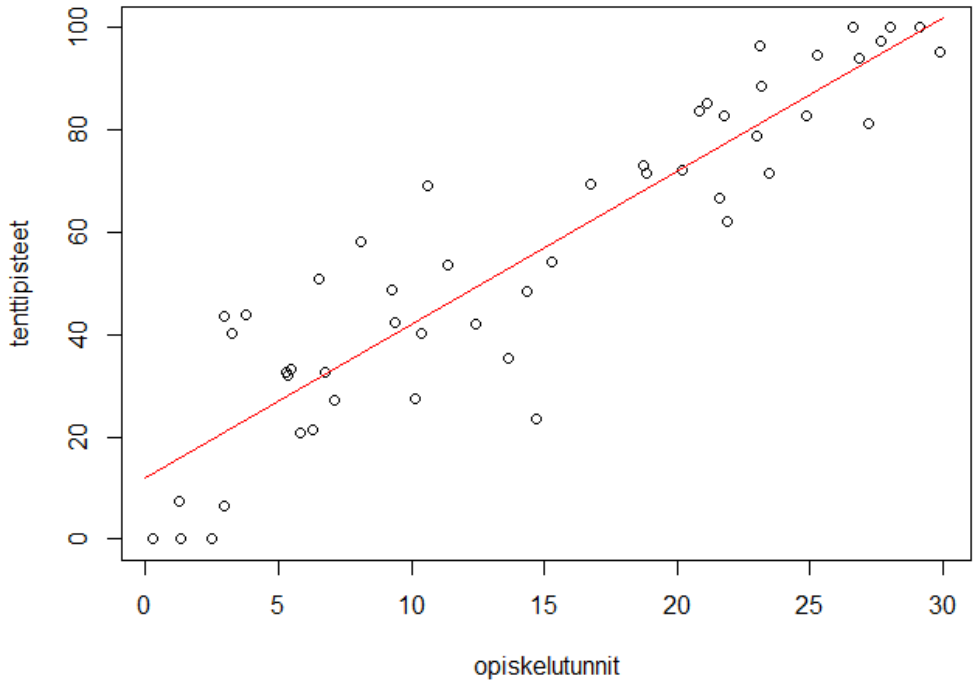
jossa α on regressiosuoran kulmakerroin, β vakiotermi ja ϵ mallin virhetermi.

```
> malli=lm(tenttipisteet~opiskelutunnit,data=opiskeludata)
> summary(malli)

Call:
lm(formula = tenttipisteet ~ opiskelutunnit, data = opiskeludata)

Residuals:
```

```
    Min      1Q  Median      3Q     Max
-32.479  -8.709   1.016   7.187  25.148

Coefficients:
              Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept)    12.0602     3.3225    3.63 0.000687 ***
opiskelutunnit  2.9995     0.1944   15.43  < 2e-16 ***
---
Signif. codes:  0 ‘***’ 0.001 ‘**’ 0.01 ‘*’ 0.05 ‘.’ 0.1 ‘ ’ 1

Residual standard error: 12.37 on 48 degrees of freedom
Multiple R-squared:  0.8322,Adjusted R-squared:  0.8287
F-statistic: 238.1 on 1 and 48 DF,  p-value: < 2.2e-16

> tunnit=data.frame(opiskelutunnit=c(0,30))
> ennustetut_pisteet=predict(malli,tunnit) # Ennustetaan uusia arvoja
> ennustetut_pisteet
       1        2
 12.06023 102.04662
```

- Visualisoidaan datapisteet ja tulokset:

```
> plot(opiskeludata)
> lines(tunnit$opiskelutunnit,ennustetut_pisteet,col="red")
```



Tehtävä A: tutustuminen R:n

- Tehtävässä harjoitellaan muuttujien luomista, eri datatyyppien käyttöä sekä R:n perusfunktioita. Saat apua funktioiden käyttöön kirjoittamalla konsoliin `help("funktion nimi")`.

1. Luo vektorit v=[1,2,3,4] ja s=["1","2","3","4"] sekä matriisit $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 9 & 10 \end{bmatrix}$ ja $B = \begin{bmatrix} 4 & 5 \\ 7 & 8 \end{bmatrix}$ ja kokeile matriisien kertolaskua ja yhteenlaskua. Luo myös lista l_1, joka koostuu vektorista v sekä loogisesta vektorista [TRUE,FALSE,FALSE,TRUE].

✍ Mitä tapahtuu, kun ajat komennon `as.numeric(s)`?

✍ Mikä on matriisien A ja B matriisitulo, ja miten saat sen laskettua?

✍ Millä syntaksilla voit muuttaa listan l_1 jälkimmäisen alilistan viimeisen alkion arvoksi FALSE?

✍ Millä kahdella tavalla voit luoda vektorin, jossa on luvut $1, 3, ..., 99$ (vinkki: `seq()`-funktio)?

2. Muuta luomasi lista l_1 data frameksi. Kokeile data framelle funktioita `head`, `names` ja `summary`.

✍ Mitä eroa on listalla ja data framella? Miten voit viitata listan ensimmäisen alilistan alkoihin? Entä data framen ensimmäiseen muuttujaan (sarakkeeseen)?

3. Luo satunnaisluvuista koostuva matriisi komennolla `dat <- matrix(rnorm(n = 15, mean = 100, sd = 30), nrow = 3, ncol = 5)`. Laske matriisin rivien keskiarvot käyttämällä `for`-silmukkaa sekä `apply`-funktiota.

   🖷 Liitä molempien toteutusten R-koodi sekä tulostukset vastaukseesi.

Tehtävä B: Useamman selittäjän lineaarinen regressio

- Tehtävänä on ennustaa talojen mediaanihintaa valittujen muuttujien perusteella käyttämällä lineaarista regressiota.
- Usean selittäjän lineaarinen regressiomalli on muotoa

$$y = w_0 + w_1 x_1 + w_2 x_2 + ... + w_n x_n + \epsilon \tag{2}$$

  jossa y on mallin selitettävä muuttuja, x_i ovat selittäviä muuttujia, w_i regressiokertoimet ja ϵ virhetermi.
- Käytössä on ns. Boston Housing-aineisto, jonka saa ladattua ottamalla käyttöön `MASS`-paketin. Tämän jälkeen datasetti löytyy Boston-muuttujasta.
- Jaetaan alkuperäinen aineisto opetus- ja testiaineistoihin (training & test set). Opetusaineistoa käytetään mallin rakentamiseen ja testiaineistoa mallin ennustuskyvyn arviointiin.

Tehtävä B: Useamman selittäjän lineaarinen regressio

1. Tutustu ensin aineiston muuttujiin selityksineen täällä: https://www.kaggle.com/c/boston-housing.

   ✍ Minkä muuttujien uskot parhaiten selittävän talojen mediaanihintoja?

2. Jaa aineisto opetus- ja testiaineistoihin siten, että opetusaineiston koko on n. 80% koko aineiston koosta. Voit käyttää apuna esim. `sample()`-komentoa.

3. Tutki aineistoa esimerkiksi names- ja summary-muuttujien avulla. Piirrä hajontamatriisi opetusaineistostasi (`plot(opetussetti)`), ja tutki, mitkä tekijät näyttävät sen perusteella korreloivan parhaiten talojen mediaanihinnan kanssa. Piirrä myös korrelaatiomatriisi opetusaineistosta `cor()`- ja `heatmap()`-komentojen avulla.

Liitä piirtämäsi korrelaatiokuva (heatmap) vastauksiisi. Mitkä muuttujat korreloivat talon mediaanihinnan kanssa parhaiten?

4. Valitse korrelaatioanalyysisi perusteella kolme talon hintaa parhaiten selittävää muuttujaa ja luo näiden avulla lineaarinen regressiomalli selittämään talojen mediaanihintoja käyttäen ainoastaan opetusaineistoa.

Mitä muuttujia käytit selittävinä muuttujina? Mitkä ovat luomasi mallin regressiokertoimet?

4. Tutkitaan mallin ennustuskykyä testiaineiston avulla. Laske mallin ennusteet y_{malli} testiaineistolle, ja vertaile mallin ennustamia hintoja opetusaineiston todellisiin hintoihin $y_{\text{todellinen}}$ laskemalla

keskineliövirhe (*mean squared error* (MSE)) seuraavasti:

$$\text{MSE} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(y_{\text{todellinen}} - y_{\text{malli}})^2 \tag{3}$$

- ✍ Mitä saat virheen arvoksi?
- ✍ Miten arvioisit mallin ennustuskykyä? Miten mallin tarkkuutta voitaisiin parantaa? Mainitse ainakin kaksi asiaa.

Kotitehtävä: Lineaarinen energiankulutusmalli R:llä

- Toteuta 3. kierroksen lineaarinen energiankulutusmalli (A-tehtävä) R:llä.
- Ohjeita:
  - Plotatessa voit piirtää datapisteet palloina ja luottamusvälit jatkuvana viivana. Muista liittää piirtämäsi kuva vastaukseen.
  - Katso demo 1:stä apua lineaarisen mallin luomiseen ja ennusteiden laskemiseen. Muista, että predict-komennolle annettavassa data framessa on oltava samanniminen sarake, kuin mallisi selittävä muuttuja on nimeltään.
  - Käytä luottamusvälien laskemiseen `predict`:in argumentteja `interval="prediction"` ja `level`. Googlaa tarvittaessa luottamusvälin laskeminen `predict`-komennolla R:llä.

Liitä vastauksiin kommentoitu lähdekoodi. Kiinnitä erityisesti huomiota koodin eroihin ja samankaltaisuuksiin Matlabin kanssa.