R编程与进化分析 第一部分 R编程

张金龙

jinlongzhang01@gmail.com

2016年5月9日北京

目录

- ① R开发平台
- ② 编写函数
- ③ 程序包
- 4 面向对象编程 S3 和 S4 Methods
- 5 Rcpp与Fortran混合编程
- ⑥ 编写程序包
- ⑦ 文本处理与正则表达式

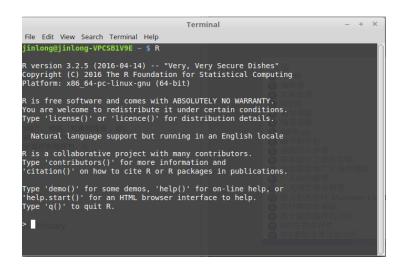
目录

- ① R开发平台
- ② 编写函数
- 3 程序包
- 4 面向对象编程 S3 和 S4 Methods
- 5 Rcpp与Fortran混合编程
- 6 编写程序包
- 🕡 文本处理与正则表达式

善其事, 利其器

- R
- Rtools
- MikTeX/TexLive
- Editors(Notepad++, Geany)
- Rstutio
- Console/Terminal/Rcmd/Rscript

R in Console/Terminal



R代码编辑器的基本要求

作为一个好的脚本编辑器,需要满足以下要求:

- 1. 代码的高亮显示
- 2. 括号匹配
- 3. 不能随便更改大小写
- 4. 方便查找和替换
- 5. 以列的方式批量进行输入, 特别是列
- 6. 等宽字体,便于对函数结构进行缩进,如Courier New, Consolas

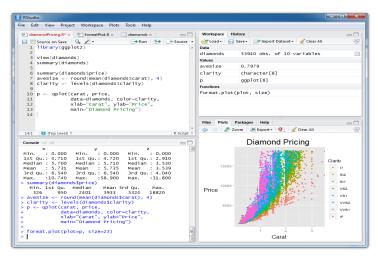
Notepad ++ 对R代码的高亮显示

```
data2mat <-
function (data = data)
  if (!any(colnames(data) == "abundance"))
  stop ("A column named \"abundance\" must be speciefied.")
  if (!any(is.integer(data$abundance)))
  stop ("Number of individuals must be integer!")
  col <- which (colnames (data) == "abundance")
  data1 <- data[.-col]
  abundance <- as.numeric(data[,col])
  result1 <- data.frame(rep(NA, sum(abundance)))
  colnames (result1) <- "plots"
  for (i in 1:(ncol(data)-1))
    result1[, i] <- rep(as.character(data[, i]), abundance)
  result <- table (result1)
  return (result)
```

关键词显示为不同颜色,可以找到匹配的括号。

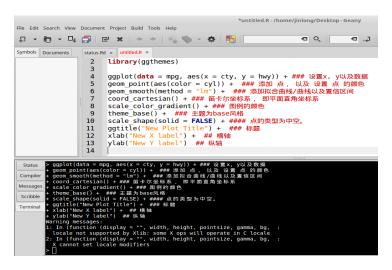
推荐的开发环境

1. Rstudio Integrated Development Environment (IDE)



Rstudio, available on Linux, Windows, MacOS

2. Notepad++ 或 geany



编辑代码十分灵活,批量运行代码

R脚本的主要内容

- 1. 设定工作路径
- 2. 导入所需要的程序包
- 3. 定义所需要的部分函数
- 4. 数据的读取
- 5. 数据的操作和绘图等
 - 一般在最开始时,还需要加上标题,日期,作者等。便于查阅

编写R脚本的注意事项

- 1. 打开高亮显示, 括号配对
- 2. 缩进,因此一定要用等宽字体(如Consolas Courier New等),并 且用空格缩进,少用tab缩进
- 3. 变量名要长,意义要清晰,最好看到变量名,就知道该变量的意义
- 4. 少用., 多用_
- 5. 括号成对书写
- 6. 有详细的注释#

编程习惯:编写好的R脚本I

好的R脚本:目标明确,结构清晰,容易阅读,容易理解,容易维护。 理想情况是,不看注释,只看变量名,也能读懂代码的结构和含义。

- 所有的R脚本, 以应R作为扩展名,以便打开后默认为R的高亮显示.
- R脚本建议开头写标题, 作者, 日期, 联系方式.
- 按照顺序安排(1) setwd(), 指定工作目录,工作目录最好不要有中文,(2) 加载程序包,(3) 定义新的函数
- 变量的名称要具体,并且只用英文字母以及数字编写,不能用中文。
- 不用Tab, 只用英文空格。在赋值符号前后 <- 都要增加一个空格。

编程习惯:编写好的R脚本II

- 变量名要有具体的意义,最好用英文,除了循环变量 i, j, n, k, 必须避免A,X等单个字母的变量名。尽量不要大小写混搭,不同部分 用下划线分隔。
- 算法的关键部分, 要注释, 特别容易出错的地方也要注释。
- 缩写的函数要简单明确, 以方便维护.
- 脚本可以从开始直接运行到结束,而无需手动输入数值,或者手动保存文件

更多请参考 Google R编程指南

演示以及问题: 编程习惯

你在编写R脚本时有什么好的或者坏的习惯?

目录

- ① R开发平台
- ② 编写函数
- 3 程序包
- 🐠 面向对象编程 S3 和 S4 Methods
- 5 Rcpp与Fortran混合编程
- ⑥ 编写程序包
- ② 文本处理与正则表达式

代码的重用: 为什么要编写函数

mat是输入的群落数据矩阵

计算shanon生态位宽度的R代码

```
Bi < - c()
for (i in 1:ncol(mat)) {
nij < - mat[, i]
nij < - nij[nij > 0]
pij < - nij/sum(nij)
Bi[i] < - -sum(pij * log(pij))
} Bi < - as.data.frame(t(Bi))
colnames(Bi) < - colnames(mat)</pre>
```

Bi是计算结果。

问题:每次计算shannon生态位宽度,都要拷贝这段代码? 代码的重复拷贝,不但浪费了大量的时间和精力,而且非常容易产生错误,并且难以纠正。

编写R函数

- 1. 函数名称, 即要编写的函数名称, 这一名称就作为将来调用R函数的依据。
- 2. 函数声明,包括 <- function,即声明该对象的类型为函数。
- 3. 函数参数,定义函数时输入的数据,只是一种形式,定义函数时并不运行函数本身,所有参数只是形式上存在,即形式参数,简称形参。函数体内部的语句进行数据处理,就是对参数的值进行处理,这种处理只在调用函数的时候才会发生。所以,实际输入的参数,称为实际参数,简称实参。R帮助文件对每个R函数的参数都进行了说明。
- 4. 函数体:进行参数检查,数据处理,以及定义返回值。

编写R函数:函数体

- (1). 异常处理:对输入的参数进行检查,包括类型,值域
- (2). 算法: R是向量语言,应该尽量减少用for循环
- (3). 返回值,只允许有一个返回值

R函数

编写R函数是减少代码重复拷贝,提高程序效率的重要手段。 R可以方便地编写函数,用户编写的函数可以直接调用。 R编写函数时,无需声明变量的类型,这与C,C++等语言不同。

R函数基本结构

```
函数名 < - function(数据,参数1= 默认值,参数2= 默认值,···){
异常处理;
表达式(循环/判别);
return(返回值);
}
```

R函数: 时分秒转换成十进制

函数举例

```
deg2dec < - function (h, m, s) {
if(any(!is.numeric(c(h,m,s)))){
stop("None numeric value find, can not calculate")
}
if (h < 0) {
s = -s
res = h + m/60 + s/3600
return(res)
```

deg2dec(23,56,04) deg2dec(23,56,"Test")

for循环和while循环

for是循环中最重要的函数之一,在for循环下,只要条件满足,即执行后面花括号{}内的语句,如果是只有一行语句,则花括号可以省略。for(变量 in 向量)表达式

for的用法

```
\begin{array}{l} \text{dat} < - \text{ rpois}(20,19) \\ \text{for}(\text{i in 1:20}) \; \{ \\ \text{print}(\text{dat}[\text{i}]) \\ \} \end{array}
```

while循环是满足条件下,执行某些语句的控制函数。

while的用法

```
\label{eq:continuity} \begin{split} & i < -1 \\ & \text{while}(i{<}10) \{ \\ & \text{print}(i); \\ & i < -i+1 \\ \} \end{split}
```

流程控制if

if是在条件为真的情况下,执行后面程序的条件控制语句。决定程序的 分支和走向

if的用法

```
if(条件) {表达式}
if(条件) {表达式1} else {表达式2}
```

if举例

```
\begin{array}{l} p < -\ 0.03\ \{\\ \text{if}(p <= 0.05)\ \{\\ \text{print}("p <= 0.05")\\ \} \ \text{else}\ \{\\ \text{print}("p > 0.05")\\ \} \end{array}
```

用warning和stop处理异常

若数据格式等不能满足要求,或者参数设定错误,函数处理往往会给出错误的结果,此时,必须发出警告或及时终止程序,以提高程序的稳健性。

警告的写法

```
if(any(is.na(inputdata)))
inputdata < - na.omit(inputdata)
cat("NAs found in the input data, and have been removed.")</pre>
```

终止的写法

```
if(any(is.na(xx))) stop("NAs are not allowed!")
```

```
missing() 判断某个参数是否缺失,返回值为TRUE或者FALSE stopifnot() 如果不满足某条件,则中止。
```

参数的匹配

match.arg的使用

```
center < - function(x, type = c("mean", "median",
"trimmed"))
{
  type < - match.arg(type)
  switch(type,
  mean = mean(x),
  median = median(x),
  trimmed = mean(x, trim = .1))
}</pre>
```

type参数在经过match.arg函数处理后,无需输入全称,即可判断。如果输入的参数和type预设的名称不符,则触发错误。R给出相应的提示。

变量的作用域

输入一个字符串,如 "ABCDE",返回 "EDCBA"

```
函数举例
reverse < - function (x)
{
splitstr < - substring(x, 1:nchar(x), 1:nchar(x))
result < - paste(splitstr[length(splitstr):1], collapse =
"")
return(result)
}
```

x为形参,实际参数是输入的结果,而x的值,仅在函数的花括号内部生效,在调用的过程中创建,其他函数不能直接访问x。随着该函数运行结束.x的值从内存中清除.这就是x的作用域。

返回值

- 1. 返回值表示函数输出的结果。
- 2. 返回值必须是一个对象。如果函数的结果需要返回多个值,可以 创建一个list(),并返回该list。
- 3. R默认将最后一行作为返回值。
- 4. 一个函数内部,可能出现若干个return()。如果执行中遇到任意 一个return(),函数都将结束,返回return内部的对象。

Debugging:检查函数的错误

一般容易出错地方:

- 1. 检查拼写, 括号和运算符等的中英文切换
- 2. 参数不匹配
- 3. 向量或者矩阵等下标出界
- 4. 逻辑错误(最难发现的错误!)

undebug函数和debug函数

debug和undebug一定要配合使用。 debug内部放函数名称,之后再运行该函数时,函数会一步一步执行,执行每一步,都需要按回车,中间过程的变量也都可访问,因此方便检查错误。修改完错误后,一定要用undebug取消debuging.

Debug和Undebug的用法

Debug示例

```
print.mat2 < - function(x){
Ncol < - ncol(x); Nrow < - nrow(x)
temp < - c()
k = 1
for(i in 1:Nrow) {
for(j in 1:Ncol){
temp[k] < -x[i,j]
k = k + 1
return(temp)
}
debug(print.mat2)
x1 < - matrix(1:20, 4, 5)
print.mat2(x1)
```

演示以及问题:编写函数进行摄氏度以及华氏度的转换

摄氏度到华氏度公式 $[^{\circ}F] = [^{\circ}C] \times 9/5 + 32$ 华氏度到摄氏度公式 $[^{\circ}C] = ([^{\circ}F] \square 32) \times 5/9$

目录

- ① R开发平台
- ② 编写函数
- ③ 程序包
- 4 面向对象编程 S3 和 S4 Methods
- 5 Rcpp与Fortran混合编程
- 6 编写程序包
- ② 文本处理与正则表达式

R 程序包

R程序包是一系列R函数的组合,大部分函数都有详细的说明文件。对于R程序包的源代码来说,要包括以下几个文件

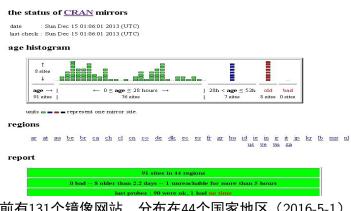
DESCRIPTION和NAMESPACE 两个文本文件,以及如下文件夹:

- R: 用于存放R的函数,每个函数一个文本文件,以.R作为扩展名
- src:用于存放C, CPP或者FORTRAN等的源代码。
- data:扩展名为.rda的二进制文件,常用于函数的Example中。
- man: 存放R函数以及数据的说明文件,文件格式为扩展的Latex。
- vignettes,用来存放Latex编写的程序包说明,还包括用到的图形等。

程序包可以放在 CRAN以及R forge, bioconductor 和github上等。

CRAN: The Comprehensive R Archive Network

CRAN是R的网络镜像网站, 类似的 PERL:CPAN; TeX: CTAN; S+: CSAN



目前有131个镜像网站,分布在44个国家地区(2016-5-1) 每个镜像上,都可以下载到R的源代码, MacOS, Windows和部 分Linux版本的可执行安装文件,以及程序包。

CRAN Task Views

安装某一类程序包:

R code

install.packages("ctv") #安装ctv程序包 library("ctv")#导入ctv程序包 install.views("Phylogenetics")#安装系统发育相关的所有程序包 install.views("Environmetrics")#安装生态学相关的所有程序包

- Phylogenetics
- Multivariate
- Bayesian statistics

系统进化常用程序包

CRAN上,目前保存了8348个程序包(截至2016年5月1日)

按照功能的不同,在CRAN Task View上,将程序包的功能按照33个领域分别介绍,如生态学、空间分析、经济学、社会学、贝叶斯统计、系统发育比较分析等,各领域有专人负责更新。

例如系统发育比较分析常用的程序包,在Phylogenetics这个领域下:

adephylo 系统发育比较分析

ape (core) 系统发育与进化分析

BAMMtools 贝叶斯方法进行分化速率分析

BioGeoBEARS 祖先分布区推断

caper 用R进行系统发育比较分析

diversitree 分化速率分析 geiger 分化速率分析

系统进化常用程序包II

ggplot2 图层化绘图

ggtree 图层化绘制进化树

ouch 性状进化的Ornstein-Ulenbeck模型参数估计

phangorn 进化树推断等 phyloclim 气候适应性变化

PHYLOGR 系统发育相关的统计分析 phytools 系统发育比较分析程序包

picante 群落系统发育程序包

Rphylip Phylip的R界面

taxize 物种的分类位置查询

TESS 分化速率推断

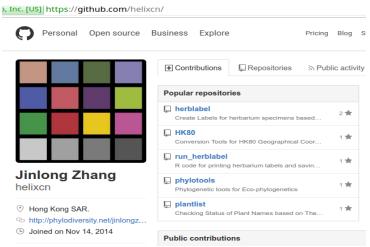
vegan 群落生态学数据分析

R forge

https://r-forge.r-project.org/ 部分程序包依靠Rforge保存源代码。 R的程序员可以在自己的计算机上开发R程序包,并且用SVN软件 (如Tortoise SVN)同步到Rforge上。 Rforge保存最新版本,以及更改历史, R程序包经检查无误后可以提交到CRAN上。

Github

https://www.github.com github是发布程序源代码,以及保存版本历史的网站。github能够 与git很好的兼容。 github上的程序包可以通过devtools程序包安装。



版本控制工具Git

git是版本控制工具,能够追踪对文件所做的任何修改。 因为程序的开发是不断发现错误之后修订错误的过程,因此版本的控制 显得十分重要。 git具有分支开发功能,每个人可以对各自的分支进行 修改,然后合并到master分支上。

```
Terminal
File Edit View Search Terminal Help
iinlong@jinlong-VPCSB1V9E ~/Documents/github packages/plantlist $ git status
On branch master
Your branch is up-to-date with 'origin/master'.
Changes not staged for commit:
  (use "git add <file>..." to update what will be committed)
  (use "git checkout -- <file>..." to discard changes in working directory)
Untracked files:
  (use "git add <file>..." to include in what will be committed)
no changes added to commit (use "git add" and/or "git commit -a")
jinlong@jinlong-VPCSB1V9E ~/Documents/github packages/plantlist $
```

git: 克隆github上的程序包, 并推送更改

- git clone https://www.github.com/helixcn/phylotools
- git status
- Some changes
- git status
- git commit -m "This is an test"
- git push
- git pull

目录

- ① R开发平台
- ② 编写函数
- 3 程序包
- 4 面向对象编程 S3 和 S4 Methods
- 5 Rcpp与Fortran混合编程
- 6 编写程序包
- 7 文本处理与正则表达式

面向对象编程 Object Oriented Programming

什么是面向对象?

根据数据的结构不同,计算机自动选择对应的数据处理方法。对象的属性同时能够传递,以便更方便得处理,这种编程思想称为面向对象编程绘图时,有些数据R会绘制散点图,有些会绘制boxplot,有些会绘制成进化树,就是根据数据的结构不同,分别用不同的函数处理。但是在调用的时候,都是用plot函数,这里的plot函数,称为泛型函数 generic function

而真正执行任务的是,是诸如

plot.default
plot.density
plot.lm

plot.phylo

等函数。这些函数称为子函数。这种面向对象的处理方式称为S3 Method。

S3 Method

S3类型变量的创建与继承

```
x <- 10

class(x) \# "numeric"

oldClass(x) \# NULL

inherits(x, "a") \#FALSE

class(x) <- c("a", "b")

inherits(x, "a") \#TRUE
```

更多信息请参考

?Classes

?Methods

?UseMethod

S3 Method是一种较为松散自由的面向对象编程, S3的对象中,对象的类型可以通过class函数随意指定,这就增加了出错的风险。同时, S3 Method缺少更为稳健和严格的查错机制。为此, Chambers等人研发了更为严格的S4 Method

S4 Method

S4 Method对象的创建以及访问

```
S4 Method
### 创建S4类型的对象,以及访问内部的数据
setClass("Person",slots=list(name="character",age="numeric"))
father <- new("Person",name="F",age=44)
father
father name
father age
### 创建S4泛型函数
setGeneric("work",function(object) standardGeneric("work"))
setMethod("work", signature(object = "Person"), function(object)
cat(object@name, "is working"))
showMethods()
```

Bioconductor网站要求所有提交的R程序包都要遵循S4 Method。更多参见 http://blog.fens.me/r-class-s4/

目录

- ① R开发平台
- ② 编写函数
- 3 程序包
- ④ 面向对象编程 S3 和 S4 Methods
- ⑤ Rcpp与Fortran混合编程
- 6 编写程序包
- ② 文本处理与正则表达式

通过Rcpp调用C语言和C++函数

- 1 安装Rcpp程序包,install.packages("Rcpp")
- 2 安装Rtools,并配制好启动路径。电脑>属性>高级系统设置>高级>环境变量>系统变量>路径
- 3 在R console 中运行 library(Rcpp) ,之后调用 Rcpp.package.skeleton函数,

Rcpp.package.skeleton

Rcpp.package.skeleton("test")

在生成的R包 skeleton中,可以找到rcpp_hello_world.cpp文件,可以尝试添加几个函数,修改成下页中的样式(注意以下代码为C++文件,扩展名为cpp)

Rcpp举例调用时C++文件举例

Rcpp文件编辑

```
#include "rcpp_hello_world.h"
#include <Rcpp.h>
using namespace Rcpp;
using namespace std;
// 注意 #include <Rcpp.h> 是调用Rcpp的必要条件
RcppExport SEXP intVec1a(SEXP vec) {
Rcpp::NumericVector vec2(vec);
int prod = 1:
for (int i=0; i<vec2.size(); i++) {
prod *= vec2[i]:
return (wrap(prod));
```

inline程序包调用fortran代码

Inline程序包,可以直接编译C,FORTRAN编写的源代码,克服R的计算 瓶颈。

```
library(inline)
fcode <- "
integer::i
do i = 2, n(1)
res(1) = res(1) * i
end do
fcodefun <- cfunction(signature(n="integer", res = "integer"),
fcode,convention=".Fortran")
fcodefun(n = as.integer(5), res = as.integer(1))
```

目录

- ① R开发平台
- ② 编写函数
- 3 程序包
- 🐠 面向对象编程 S3 和 S4 Methods
- 5 Rcpp与Fortran混合编程
- 6 编写程序包
- ② 文本处理与正则表达式

编写程序包的需要

- 随着个人编写R函数的积累,零散的R脚本文件,很快不能满足函数调用的需要,人们迫切需要为R函数编写帮助文件。同时也在帮助文件中,可以更好的描述算法,参数特征,等其他注意事项。
- R程序包可以用来分享数据和函数等。
- 正如能够编写R函数,是数量掌握R基本操作的标志,能开发R程序 包,是个人运用R语言的能力到达一个新的阶段的标志。

编写程序包主要步骤

- 1. R函数编写
- 2. R, Rtools和MikTeX(或CTeX)的安装与配置:添加到启动路径
- 3. R包框架的生成
- 4. 填写帮助文件以及编辑Description文件
- 5. 程序包创建

需要的工具

```
Rtools + MikTeX 可以分别在以下网址下载 (1)Rtools: http://cran.r-project.org/bin/windows/Rtools/ Rtools 中有生成R程序包以及检查的重要工具,另有gcc等编译器,用来编译其他计算机语言所写的函数 (2)MikTeX: http://miktex.org/ 用来编译帮助文件Rd files. 中文版本的LaTeX则可以考虑用CTeX
```

(http://www.ctex.org/CTeXDownload/)

生成R包的框架

```
package.skeleton
package.skeleton(name = "mypackage", list = ls())
(1)Read-and-delete-me
包括如何创建R包的指南,看完之后需要删除
(2)DESCRIPTION
对R包的简要介绍。
(3)r文件夹
存放的是.r文件,即各函数的源代码。
```

存放的是Rd文件,也就是R帮助的源代码. Rd 文件,需要用TEX文件写成

(4)man 文件夹

DESCRIPTION

DESCRIPTION文件

Package: mypackage

Type: Package

Title: A package skeleton for testing

Version: 1.0 Date: 2016-5-9

Author: Jinlong Zhang

 ${\tt Maintainer:} \quad {\tt Jinlong \ Zhang < jinlongzhang01@gmail.com} >$

Description: My package helps to you understand R

programming

License: GPL-2 LazyLoad: yes Depends: vegan Suggests: ade4 Rd文件: R的帮助文件

- (1).rd文件是帮助文件的源代码, 是用LaTeX语言书写的。填写Rd files需要对LaTeX有基本的了解。
- (2)对于函数、数据,都已经生成了对应的.rd文件

注意: 其中title是必须填写的内容。而有些项是可以删除的。同时要注意: 在Rd文件中,不要出现非ASCII码字符,否则在Rcmd check中将不能通过。

Rd文件需要填写的内容

```
title{ }
              标题
              函数功能
description{ }
arguments{ }
              函数使用方法
details{ }
              处理细节
value{ }
              返回值
references{}
              参考文献
author{ }
              作者
              运行实例
examples{ }
```

R程序包的编译和检查

开始>运行>cmd>

1编译成.tar.gz源程序包,该程序包用于检查和提交到CRAN

创建Linux source code包

Rcmd build mypackage

2 检查程序包

检查

Rcmd check mypackage

3 编译成二进制的zip包,供Windows使用

生成Windows程序包

Rcmd INSTALL --build mypackage

演示以及问题:编译HK80程序包

编译和检查HK80程序包

目录

- ① R开发平台
- ② 编写函数
- 3 程序包
- 🐠 面向对象编程 S3 和 S4 Methods
- 5 Rcpp与Fortran混合编程
- 6 编写程序包
- ⑦ 文本处理与正则表达式

正则表达式:字符处理

```
        gsub()
        文本替换

        grep()
        字符串的匹配,返回值为字符的位置

        grep1()
        类似 grep(),返回是否能匹配的逻辑向量

        agrep()
        类似 grep(),近似匹配

        regexpr()
        类似 grep(),但是仅返回第一个匹配字符的位置

        regexp()
        文本匹配
```

正则表达式:字符处理

参见?regex 正则表达式在Perl, Python, R, Javascript, PHP等多种计算机语言中扮演者十分重要的角色。正则表达式的一些细节,如特殊字符处理,数字匹配,字母匹配,匹配位置的设定,非ASCII码文字的匹配等,在生物信息学,大数据处理等多方面有重要作用。

演示以及问题:正则表达式

在fasta文件种寻找名字满足要求的DNA序列