Modelización estadística avanzada y análisis multivariante de datos biomédicos con R

Creación de librerías con R

Juan R González

Instituto de Salud Global Barcelona (ISGlobal)

Departamento de Matemáticas, Universidad Autónoma de Barcelona (UAB)

<u>juanr.gonzalez@isglobal.org</u> http://brge.isglobal.org

https://github.com/isglobal-brge

4, 5, 6 y 7 de Junio de 2018 Instituto Aragonés de Ciencias de la Salud (IACS)

Guión

- 1. Introducción
 - Motivación
 - Paquetes en Windows: Preparación e instalación de software requerido
- 2. Programación en R
 - Definición de nuevos operadores binarios
 - Creación de nuevas funciones
 - Cómo organizar una función
 - Nombres de argumentos y valores por defecto
 - Control de los argumentos
 - Uso de 'formula'

Guión (Cont)

- 3. Métodos y clases en R
 - Programación orientada a objetos
 - Creación de Métodos
 - Creación de Clases
- 4. Creación de librerías en R
 - Estructura
 - El NAMESPACE
 - Creación de documentación
 - Vignettes
 - Envío a CRAN
- 5. Utilidades de Rstudio + roxygen y devtools

Sesión 1 – Introducción y preliminares

- Introducción
- Paquetes en Windows (preliminares instalación y requerimientos)

Investigación

- •Desarrollan un método/modelo estadístico (matemático, físico, ...) para resolver un problema real (datos complejos, nuevo tipo de datos, ...)
- Desarrollan un algoritmo de estimación que puede llegar a ser muy complejo
- •Quieren que otros investigadores (biólogos, médicos, ...) utilicen este nuevo método de forma rutinaria y fácil
- •Crear una colección de funciones que sean fácil de usar, así como otras aplicaciones que faciliten el análisis y/o interpretación de datos (gráficos, resumenes, ...)
- CREAR UN PAQUETE EN R

Metodología

- Modelo de regresión lineal (método estimación basado en descomposición QR) [TEORIA] (adaptado de *Creating R Packages: A Tutorial. Friedrich Leisch, 2008*)
 - Incluye poner unos datos de ejemplo
 - Manual, vignette, ...
- **Ejercicio:** Crear una función "compareGroups" que compare dos grupos de poblaciones (test paramétrico, no paramétrico, datos apareados, ...) [PRACTICA]

Tipos de paquetes

Base packages: Part of the R source tree, maintained by R Core.

Recommended packages: Part of every R installation, but not necessarily maintained by R Core.

Contributed packages: All the rest. This does not mean that these packages are necessarily of lesser quality than the above, e.g., many contributed packages on CRAN are written and maintained by R Core members. We simply try to keep the base distribution as lean as possible.

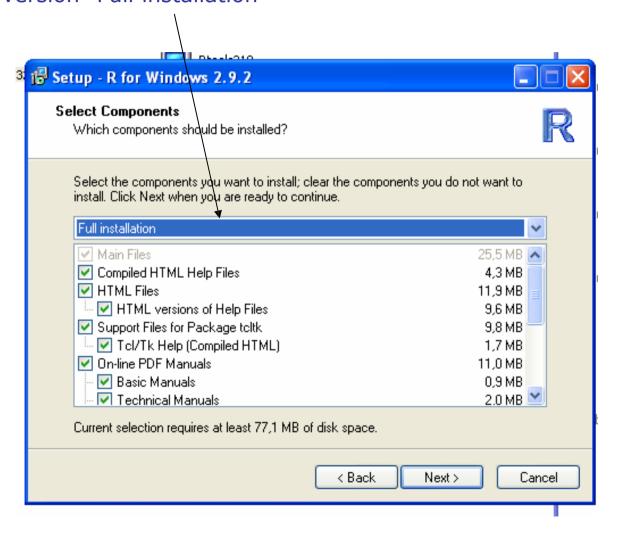
Otros repositorios

Bioconductor: Omic-related

Neuroconductor: Neuroimaging-related

Instalación y requerimientos

Installar R en version "Full installation"



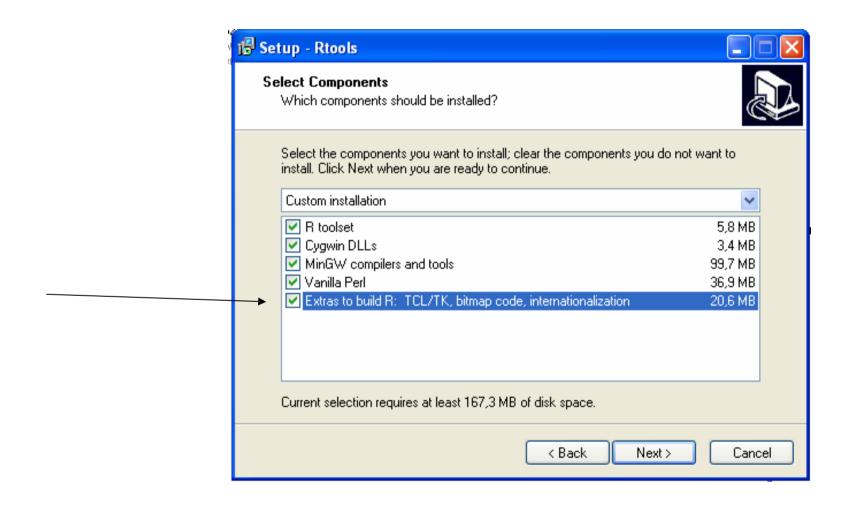
Instalación y requerimientos

- Se puede mirar en "Windows toolset appendix" y en "R Administration manual"
- Windows: descargar Rtools de: https://cran.r-project.org/bin/windows/Rtools/
- Linux y Mac no es necesario estas tools (Rtools emula Linux con Cygwin)

Instala las siguientes "tools"

- unas cuantas herramientas ejecutables mediante lineas de comandos
- Perl
- El compilador MinGW
- También es neceario para las vignettes:
 - Microsoft's HTML Help Workshop
 - MikTeX o LaTeX

Instalación y requerimientos



Instalación y requerimientos

Hay que añadir las Rtools y el MinGW al path del ordenador. Desde R se puede con

```
rtools <- "C:\\Rtools\\bin"
gcc <- "C:\\Rtools\\min_gw_64\\bin"
path <- strsplit(Sys.getenv("PATH"), ";")[[1]]
new_path <- c(rtools, gcc, path)
new_path <- new_path[!duplicated(tolower(new_path))]
Sys.setenv(PATH = paste(new_path, collapse = ";"))</pre>
```

Código compilado -> system("R CMD SHLIB -o prueba.dll prueba.f")

Sesión 2 – Programación en R

- Definición de nuevos operadores binarios
- Creación de nuevas funciones
 - Cómo organizar una función
 - Nombres de argumentos y valores por defecto
 - Control de los argumentos
 - •Uso de 'formula'
 - •Resultado de unafunción

Creación de nuevasfunciones

El lenguaje R suele utilizarse como un conjunto de expresiones "sueltas". Muchas veces nos interesará agruparlas bajo un determinado nombre (función) y parametrizarlas (argumentos), para mas tarde crear un grupo de funciones (libreria o paquete). Como en la mayoría de los otros lenguajes de programación, las asignaciones dentro de funciones son temporales y se pierden cuando acaba su ejecución.

- Crear funciones en R permite añadir nuevas funcionalidades
- Las funciones que escribe un usuario tiene el mismo status que aquellas que estan escritas en R
- •Leer/estudiar las funciones que estan escritas en R es una buena forma de aprender cómo escribir funciones
- Otros usuarios pueden modificar las funciones y adaptarlas a sus necesidades (open source)

Las funciones se definen siguiendo el siguiente patrón:

expr suele ser una expresión agrupada que usa los argumentos arg_i para calcular un valor. El valor de la expresión es el valor retornado por la función.

Las llamadas a funciones suelen tener el siguiente aspecto:

Un ejemplo de función simple.

Vamos a crear una función que, dados los tres coeficientes (a, b, c) de una ecuación de segundo grado, $ax^2 + bx + c = 0$, nos devuelva las dos soluciones, si existen en el conjunto de los reales. Recordemos que la fórmula para encontrar las dos soluciones es:

$$x = (-b \pm \sqrt{(b^2 - 4ac)}) / 2a$$

```
# Cabecera de la función: le damos un nombre y definimos los tres parámetros
# Como vamos a utilizar más de una instrucción para programar la función, ya añadimos con la llave el inicio
# del grupo de instrucciones
ec_grado2 <- function(a, b, c)
{

# Calculamos el discriminante (b^2 - 4ac)
disc <- (b^2)-(4*a*c)
# Primera solución
sol1 <- (-b + sqrt(disc))/(2*a)
# Segunda solución
sol2 <- (-b - sqrt(disc))/(2*a)
# Devolvemos un vector con las dos soluciones y cerramos la llave para indicar el final del grupo de
# instrucciones que forman la función
ans <- c(sol1,sol2)
ans
}
```

Definición de nuevos operadores binarios.

Para funciones que tengan exclusivamente dos parámetros, R permite definirlas de manera que después se puedan llamar con <u>notación infija</u>, es decir, poniendo el nombre de la función entre los dos argumentos. Un ejemplo de una función típicamente infija es la suma (escribimos 3+7 y no +(3,7) o suma(3,7)).

Para crear una función con notación infija simplemente tenemos que añadir el carácter % delante y detrás del nombre de la función. R ya interpretará de esta manera que tipo de función estamos creando.

```
# Vamos a crear una función que reciba dos numeros y devuelva la división del primero entre la suma de los # dos multiplicado por 100. Nótese que es obligatorio que el nombre de la función vaya entre comillas. > "%porcentaje%" <- function(a,b) (a/(a+b))*100 # Ejecutamos la función > 4 %porcentaje% 6 [1] 40
```

Algunos ejemplos de este tipo de funciones son el producto matricial %*%, o la inclusión en listas %in%.

Nombres de argumentos y valores por defecto.

Al contrario que la gran mayoría de lenguajes de programación, R permite colocar los argumentos de una llamada a una función en el orden que nosotros queramos. Para poder hacer esto tenemos que especificar para cada valor en la llamada a qué argumento corresponde. En caso que no lo hagamos entonces R sí entenderá que los argumentos de la llamada están en el mismo orden en que han sido especificados en la declaración de las funciones.

```
# Vamos a estudiar los argumentos de la función rnorm
> args(rnorm)
function (n, mean = 0, sd = 1)

# La llamamos sin poner los nombres de los argumentos
> rnorm(10,1,2)
# Ahora ponemos los nombres de los argumentos: podemos cambiar su orden
> rnorm(sd=2,n=10,mean=1)
```

Vemos que los parámetros *mean* y *sd* tienen asociados valores por defecto (0 y 1 respectivamente). En este caso, si aceptamos estos valores por defecto como los deseados para ejecutar la función, podemos obviarlos. Una vez prescindamos de un parámetro, sin embargo, deberemos escribir el nombre de todos los que vengan detrás de él.

```
# Prescindimos de cambiar mean, pero tenemos que especificar que el siguiente es sd. > rnorm(10,sd=3)
```

Partes importantes de una función

```
t.test < -function (x, y = NULL, alternative = c("two.sided", "less", "greater"), mu = 0, paired = FALSE, var.equal = FALSE, conf.level
= 0.95, ...)
                                                                                           Parámetros o argumentos
  alternative <- match.arg(alternative)</pre>
  if (!missing(mu) && (length(mu) != 1 || is.na(mu)))
     stop("'mu' must be a single number")
  if (!missing(conf.level) && (length(conf.level) != 1 || !is.finite(conf.level) ||
     conf.level < 0 || conf.level > 1))
     stop("'conf.level' must be a single number between 0 and 1")
  if (!is.null(y)) {
     dname <- paste(deparse(substitute(x)), "and", deparse(substitute(y)))</pre>
     if (paired)
        xok <- yok <- complete.cases(x, y)</pre>
                                                                                         Control de argumentos
     else {
        yok <-!is.na(y)
        xok <- !is.na(x)
     y < -y[yok]
   else {
  if (is.null(y)) {
     df <- nx - 1
     stderr <- sqrt(vx/nx)
     if (stderr < 10 * .Machine$double.eps * abs(mx))
        stop("data are essentially constant")
                                                                                                        Cálculo
     tstat <- (mx - mu)/stderr
                                                                           t test caso univariante
     method <- ifelse(paired, "Paired t-test", "One Sample t-test")
     names(estimate) <- ifelse(paired, "mean of the differences",
        "mean of x")
```

Partes importantes de una función

```
...... Viene de otro if en el que hacía el caso univariante
else {
      Two sample ny <- length(y)
                                                 t test caso dos muestras
      Controlar varianzas iguales o no
  if (alternative == "less") {
     pval <- pt(tstat, df)</pre>
     cint <- c(-Inf, tstat + qt(conf.level, df))
  else if (alternative == "greater") {
     pval <- pt(tstat, df, lower = FALSE)</pre>
     cint <- c(tstat - qt(conf.level, df), Inf)
                                                                                  Cálculo
                                                  P valor e IC
  else {
     pval <- 2 * pt(-abs(tstat), df)</pre>
     alpha <- 1 - conf.level
     cint <- qt(1 - alpha/2, df)
     cint <- tstat + c(-cint, cint)</pre>
  cint <- mu + cint * stderr
  names(tstat) <- "t"
  names(df) <- "df"
  names(mu) <- if (paired || !is.null(y))</pre>
     "difference in means"
  else "mean"
  attr(cint, "conf.level") <- conf.level
  rval <- list(statistic = tstat, parameter = df, p.value = pval,
     conf.int = cint, estimate = estimate, null.value = mu,
                                                                                Resultado de la función
     alternative = alternative, method = method, data.name = dname)
  class(rval) <- "htest"
  return(rval)
```

Ejemplo regresión lineal

El investigador propone un método para analizar Y (vector) en función de X (respuesta)

$$y = x'\beta + \epsilon, \qquad \epsilon \sim N(0, \sigma^2)$$

No vamos ha hacer lo mismo que la función Im() sino estimar mediante OLS (e.g., el algoritmo propuesto por el investigador). El estimador viene dado por

$$\hat{\beta} = (X'X)^{-1}X'y$$

Con matriz de covarianza

$$var(\hat{\beta}) = \sigma^2 (X'X)^{-1}$$

Por motivos numéricos el investigador propone utilizar la descomposición QR para resolver el sistema de ecuaciones

Ejemplo regresión lineal

```
> lmEst <- function(x, y)
+ {
+ ## calcula la descomposicion QR de x
+ qx < - qr(x)
+ ## calcula (x'x)^{(-1)} x'y
+ coef <- solve.qr(qx, y)
+
+ ## grados de libertad y desviacion estandard de los residuales
+ df <- nrow(x) -ncol(x)
+ sigma2 <- sum((y - x%**coef)^2)/df
+
+ ## calcula sigma^2 * (x'x)^{-1}
+ vcov <- sigma2 * chol2inv(qx$qr)
+ colnames(vcov) <- rownames(vcov) <- colnames(x)
+ # resultado
+ list(coefficients = coef, vcov = vcov, sigma = sgrt(sigma2), df = df)
+ }
```

Ejemplo regresión lineal

> head(bass)

```
Lake Alkalinity pH Calcium Chlorophyll Mercury
    Alligator
                   5.9
                        low
                               3.0
                                          0.7
                                                1.23
1
       Annie
                               1.9
                   3.5 low
                                          3.2
                                                1.33
3
                 116.0 high
                              44.1
                                        128.3
                                                0.04
       Apopka
 Blue Cypress
                  39.4 high 16.4
                                          3.5 0.44
                 2.5 low
                               2.9
5
       Brick
                                         1.8
                                                1.20
                               4.5
                                                0.27
6
       Bryant
                  19.6 high
                                         44.1
```

```
Ejemplo regresión lineal
       > lmEst(cbind(1, bass$Alkalinity), bass$Mercury)
       $coefficients
       [1] 0.726139976 -0.005301603
       $vcov
                     [,1] \qquad [,2]
       [1,] 2.872843e-03 -3.795770e-05
       [2,] -3.795770e-05 1.011391e-06
       $sigma
       [1] 0.2770542
       $df
       [1] 51
       > lm(Mercury~Alkalinity, data=bass)
       Call:
       lm(formula = Mercury ~ Alkalinity, data = bass)
       Coefficients:
       (Intercept) Alkalinity
          0.726140 - 0.005302
```

Ejemplo regresión lineal

Los resultados numéricos son exactamente iguales, pero:

- •Formato de los resultados son mejores con Im
- •Existen utilidades para la estimación de un modelo "summary" que da otras medidas de interés como significación estaística o intervalos de confianza
- Tratar los predictores categóricos
- Utilizar formulas para especificar el modelo (e.g., intercept, interacción, ...)
- •La programación orientada a objetos ayuda con los puntos 1 y 2 y las 'formulas con los puntos 3 y 4.

Control de argumentos

```
t.test < -function (x, y = NULL, alternative = c("two.sided", "less", "greater"), mu = 0,
paired = FALSE, var.equal = FALSE, conf.level = 0.95, ...)
  alternative <- match.arg(alternative)
  if (!missing(mu) \&\& (length(mu) != 1 || is.na(mu)))
     stop("'mu' must be a single number")
  if (!missing(conf.level) && (length(conf.level) != 1 || !is.finite(conf.level) ||
     conf.level < 0 \mid | conf.level > 1))
     stop("conf.level' must be a single number between 0 and 1")
  if (!is.null(y)) {
     dname <- paste(deparse(substitute(x)), "and", deparse(substitute(y)))</pre>
     if (paired)
        xok <- yok <- complete.cases(x, y)</pre>
     else {
        vok <- !is.na(y)</pre>
        xok <- !is.na(x)
     y < -y[yok]
  else {
```

Control de argumentos (method=c("OLS", "Im")) Aproximación sencilla A ImEst<-function

```
ImEst<-function(x, y, method=NULL)</pre>
ImEst<-function(x, y, method)</pre>
                                                  if (is.null(method))
  if (is.missing(method))
                                                    stop("method should be 'OLS' or 'lm'")
   stop("method should be 'OLS' or 'lm'")
Valores por defecto en los argumentos
          method.type<-c("OLS", "Im")
          m<-charmatch(method, method.type, nomatch=0)</pre>
          if (m==0)
Posibilidad 1:
                  stop("method should be 'OLS' or 'lm')
                  warning(paste("method=", method, "is not supported. Using 'OLS'"))
Posibilidad 2:
                  method<-1
Despues: if (method==1) { llama lmEst }
          if (method==2) { Ilama lm}
```

```
> lmEst1 <- function(x, y, method="OLS")</pre>
+ {
+ #control errores
+ method.tvpe<-c("OLS", "lm")
+ m<-charmatch (method, method.type, nomatch=0)
+ if (m==0)
+ stop("method should be 'OLS' or 'lm'")
+ if (m==1) {
   ... Hace lo de antes
+ # resultado
+ list(coefficients = coef, vcov = vcov, sigma = sgrt(sigma2), df = df)
+ }
+ if (m==2) {
  ans <-lm(x \sim y)
+ }
  ans
+ }
> lmEst1(cbind(1, bass$Alkalinity), bass$Mercury, method="qr")
Error en lmEst1(cbind(1, bass$Alkalinity), bass$Mercury, method = "qr") :
 method should be 'OLS' or 'lm'
```

```
> lmEst2(cbind(1, bass$Alkalinity), bass$Mercury, method="qr")
Scoefficients
[1] 0.726139976 -0.005301603
$vcov
              [,1] [,2]
[1,1 2.872843e-03 -3.795770e-05
[2,] -3.795770e-05 1.011391e-06
$sigma
[1] 0.2770542
$df
[1] 51
Warning message:
In lmEst2(cbind(1, bass$Alkalinity), bass$Mercury, method = "qr") :
 method= qr is not supported. Using 'OLS'
```

```
> lmEst3 <- function(x, y, method="OLS")</pre>
+ {
+ #control errores
+ method.type<-c("OLS", "lm")
+ m<-charmatch (method, method.type, nomatch=0)
+ if (m==0)
+ warning(paste("method=", method, "is not supported. Using 'OLS'"))
+ method < -1
+ if (missing(x) | missing(y))
+ stop("x and y arguments are required")
+ if (nrow(x)!=length(y))
  stop ("x and y should have the same length")
+
+ if (any(is.na(x)) | any(is.na(y)))
+ {
   warning("There are missing values. Only complete cases have been
analyzed")
  o < -complete.cases(x,y)
+ x < -x[0,]
+ y<-y[o]
  }
```

```
> lmEst3(cbind(1, bass$Alkalinity))
Error en lmEst3(cbind(1, bass$Alkalinity)) :
  x and y arguments are required
> lmEst3(cbind(1, bass$Alkalinity), bass$Mercury[-1])
Error en lmEst3(cbind(1, bass$Alkalinity), bass$Mercury[-1]) :
  x and y should have the same length
> lmEst3(cbind(1, bass$Alkalinity), bass$Mercury)
Scoefficients
[1] 0.707061260 -0.005071191
$vcov
              [,1] [,2]
[1,] 2.797887e-03 -3.686621e-05
[2,] -3.686621e-05 9.666413e-07
$sigma
[1] 0.2690298
$df
[1] 50
Warning message:
In lmEst3(cbind(1, bass$Alkalinity), y) :
  There are missing values. Only complete cases have been analyzed
```

```
Uso de \...'
```

Se utiliza para no poner todos los argumentos de otras funciones pero que podamos cambiarlos si fuera necesario. Por ejemplo descomposición QR

```
qr.solve(a, b, tol = 1e-7)
```

Se podria intentar cambiar este argumento:

```
> lmEst(cbind(1, bass$Alkalinity), bass$Mercury, tol=1e-8)
Error en lmEst(cbind(1, bass$Alkalinity), bass$Mercury, tol
= 1e-08) :
  unused argument(s) (tol = 1e-08)
```

SOLUCION: en la función ImEst poner

```
# calcula (x'x)^{-1} x'y
coef <- solve.qr(qx, y, ...)
```

RECOMENDACION: En nuestra función añadir este argumento si se cree que se va a llamar desde otra función

```
ImEst <- function(x, y, ...)</pre>
```

Ejercicio

Crear una función (compareGroups) que:

- 1. Tenga como argumentos: 1) 'X' un data.frame con muchos variables resultados (distintos tipos: continuas normales, continuas discretas, categóricas, ..) y 2) un vector 'y' que defina dos grupos de individuos
- 2. La función debe empezar por comprobar que:
 - 1. Las dimensiones cuadran: número de filas de 'X' igual al tamaño de 'y'
 - 2. 'y' es factor
 - 3. El número de niveles de 'y' es 2 como máximo
- 3. Para cada variable de X haga:
 - 1. La media y desviación típica para cada grupo de 'y' para las variables continuas en 'X' y el número de casos y % para cada grupo de 'y' para las variables categóricas
 - 2. Calcule el p-valor usando el test adecuado
- 4. Pensar qué debería devolver la función ...

Uso de 'formula'

Elegante en cuanto a formulación ya que es similar a como escribiríamos el modelo incluyendo covariables o interacciones

Hace que tu función sea fácil de usar ya que utiliza la sintaxis similar a otra funciones que hay por defecto en R (lm, glm, coxph, rpart, ...)

Evita tener que especificar el vector o matriz de datos, ya que los toma del argumento 'data'

Útil para analizar datos completos sin tener que controlarlo

dentro de la función Su formulación es la siguiente:

ImEst<-function(formula, data, contrasts=NULL,...)</pre>

```
Uso de 'formula'
cl <- match.call()
match.call se usa para:
• quardar una llamada y usarla despues
> lm(Mercury~Alkalinity, data=bass)
Call:
lm(formula = Mercury ~ Alkalinity, data = bass)
Coefficients:
(Intercept)
                Alkalinity
   0.726140
                 -0.005302
•El objeto más importante es "model.frame" que es un 'data frame' con sólo las
variables que aparecen en la formula y que tiene un atributo que se llama 'terms' que
nos dice cuál es la variable dependiente, el intercept, ...
mf <- model.frame(formula=formula, data=data)
mt <- attr(mf, "terms")
x <- model.matrix(mt, data=mf)
y <- model.response(mf)</pre>
Hay mas cosas pero esto es suficiente en la mayoría de ocasiones
```

```
> unclass (mf.copia)
$Mercury
 [1] 1.23 1.33 0.04 0.44
$Alkalinity
 [1] 5.9 3.5 116.0
39.4 ...
attr(,"terms")
Mercury ~ Alkalinity
attr(,"variables")
list(Mercury, Alkalinity)
attr(,"factors")
           Alkalinity
Mercury
Alkalinity
attr(,"term.labels")
[1] "Alkalinity"
attr(,"order")
[1] 1
attr(,"intercept")
[1] 1
attr(,"response")
[1] 1
```

```
attr(,".Environment")
<environment: R GlobalEnv>
attr(,"predvars")
list(Mercury, Alkalinity)
attr(,"dataClasses")
  Mercury Alkalinity
"numeric" "numeric"
attr(,"row.names")
 [1] 1 2 3 4 5 6 7
10 11 12 13 14 15 16 17 18 19 20
21 22 23 24
[25] 25 26 27 28 29 30 31 32 33
34 35 36 37 38 39 40 41 42 43 44
45 46 47 48
[49] 49 50 51 52 53
```

Controla los datos completos. Interesante para comparar modelos.

Uso de 'formula'

```
> lmEst4(Mercury~Alkalinity, bass)
Error en qr(x) : objeto 'x' no encontrado
```

Ahora debemos recuperar los datos que nos interesan (x, y) match.call se usa para:

```
y <- model.response(mf)
x <- model.matrix(mt, mf, contrasts)</pre>
```

Existen otras para otros argumentos que hay útiles cuando se usa 'formula' model.weights, model.offset, model.frame, ...

model.extract(frame, component) -> component: "weigths", "offset"

```
Uso de 'formula'
                                            1ª ventaja !!!
 > lmEst4(Mercury~Alkalinity, bass)
 $coefficients
  (Intercept) Alkalinity*
  0.726139976 - 0.005301603
 $vcov
                (Intercept) Alkalinity
 (Intercept) 2.872843e-03 -3.795770e-05
 Alkalinity -3.795770e-05 1.011391e-06
 $sigma
 [1] 0.2770542
 $df
 [1] 51
```

Uso de 'formula' > lmEst4(Mercury~Alkalinity-1, bass) \$coefficients Alkalinity 0.004292588 \$vcov Alkalinity Alkalinity 2.299709e-06 \$sigma [1] 0.5883974 \$df

[1] 52

Uso de 'formula' - variable factor

```
> lmEst4(Mercury~pH, bass)
$coefficients
(Intercept) pHlow
 0.3800000 0.3545455
$vcov
            (Intercept) pHlow
(Intercept) 0.002802243 -0.002802243
pHlow -0.002802243 0.006750857
$sigma
[1] 0.2947364
$df
[1] 51
```

Uso de 'formula' - argumentos especiales (strata en survival)

Uso de 'formula' - control del término interacción

Uso de 'formula' - inclusion de todas las variables en data

Uso de 'formula' - inclusion de todas las variables en data

Podemos hacer que el modelo incluya todas las variables que hay en el argumento 'data' usando ~.

```
> lmEst4(Mercurv~., bass[,-1])
Scoefficients
              Alkalinity
 (Intercept)
                               pHlow
                                          Calcium
                                                   Chlorophyll
0.644868568 - 0.005606862  0.131985790  0.004529969 - 0.002709375
Svcov
             (Intercept) Alkalinity
                                              pHlow
                                                          Calcium
(Intercept) 8.077564e-03 -6.889535e-05 -7.119053e-03 -2.226835e-05
Alkalinity -6.889535e-05 3.569650e-06 6.285224e-05 -3.601438e-06
pHlow
        -7.119053e-03 6.285224e-05 9.423046e-03 1.405910e-05
Calcium -2.226835e-05 -3.601438e-06 1.405910e-05 6.884240e-06
Chlorophyll -3.283876e-05 -4.847165e-07 2.321261e-05 -5.398429e-08
             Chlorophyll
(Intercept) -3.283876e-05
Alkalinity -4.847165e-07
wolHq
      2.321261e-05
Calcium
        -5.398429e-08
Chlorophyll 1.842515e-06
$sigma
[11 0.2607964
$df
[11 48]
```

Resultado de una función

La función devuelve lo último que se ejecuta si no se asigna ningún objeto

```
list(coefficients = coef, vcov = vcov, sigma =
sqrt(sigma2), df = df)
```

Si se asigna algún objeto luego hay que llamarlo o usar 'return'

```
ans<-list(coefficients = coef, vcov = vcov, sigma =
sqrt(sigma2), df = df)
ans</pre>
```

Ó

```
ans<-list(coefficients = coef, vcov = vcov, sigma =
sqrt(sigma2), df = df)
return(ans)</pre>
```

Resultado de una función

El resultado puede ser

Un número

Veremos que se puede definir una clase al resultado para luego usar algunos métodos (print, summary, plot, anova, ...)

```
Un vector
        Una lista (vectores, matrices, números, ...)
> mod<-lm(Mercury~Alkalinity, bass)</pre>
> names (mod)
 [1] "coefficients" "residuals"
                                      "effects"
                                                      "rank"
                                                      "df.residual"
 [5] "fitted.values" "assign"
                                      "ar"
 [9] "xlevels"
                                      "terms"
                                                      "model"
                     "call"
> mod$coef
 (Intercept) Alkalinity
 0.726139976 -0.005301603
> mod$residuals[1:10]
 0.53513948 0.62241564 -0.07115402 -0.07725681 0.48711403 -0.35222856
-0.21857164 -0.15760551 0.24382235 0.10930772
> mod$call
lm(formula = Mercury ~ Alkalinity, data = bass)
```

Resultado de una función

Pero puede tener atributos

```
> attributes (mod)
Snames
 [1] "coefficients" "residuals"
                                       "effects"
                                                        "rank"
 [5] "fitted.values" "assign"
                                       "ar"
                                                        "df.residual"
 [9] "xlevels"
                      "call"
                                       "terms"
                                                        "model"
$class
[1] "lm"
En una funcion se hace
ans<-list(coefficients = coef, vcov = vcov, sigma = sgrt(sigma2), df = df)</pre>
attr(ans, "contrasts") <- contrasts</pre>
ans
```

La utilidad es para luego hacer cosas con ese objeto (print, summary, ...) en función de los valores del atributo

Resultado de una función

Otra forma es guardar el valor de una variable en el Workspace (variable global??)

No muy recomendable (también funciona xx << - x+y), sólo útil para 'debugging'

Curso de Ravanzado

Ejercicio

Mejorar la función compareGroups:

- 1. Que el argumento de entrada sea una fórmula
- 2. Ya no es necesario que tenga 'X' e 'y' ya que 'y' puede estar en el mismo data.frame (argumento 'data')
- Extrae 'X' e 'y' del argumento 'formula' y 'data'
- 4. El resto sigue igual

Sesión 3 - Métodos y clases en R

- Introducción
- Orientación a objetos
 - Clases
 - Objetos
 - Métodos
 - Ejemplos

Introducción

Preguntas:

- •Cuando tenemos un objeto en el que hemos estimado un modelo de regresión lineal ¿qué parámetros estamos interesados en conocer?
- •Despues podemos estar interesados en otra información (parámetros) ¿por ejemplo?
- ¿Finalmente qué hacemos para validar un modelo?
- ¿sabéis cómo se consigue esta información y qué tipo de información nos da? print, summary, plot
- •Y lo más importante. Si el objeto que quiero inspeccionar es por ejemplo un modelo de supervivencia, ¿obtenemos la misma información?
- Esto es lo que permite hacer la Programación Orientada a Objetos

```
> mod<-lm(uptake~conc, data=CO2)</pre>
> mod
Call:
lm(formula = uptake ~ conc, data = CO2)
Coefficients:
(Intercept)
                   conc
  19.50029 0.01773
> summary (mod)
Call:
lm(formula = uptake ~ conc, data = CO2)
Residuals:
            10 Median
    Min
                             30
                                   Max
-22.831 -7.729 1.483 7.748 16.394
Coefficients:
            Estimate Std. Error t value Pr(>|t|)
(Intercept) 19.500290 1.853080 10.523 < 2e-16 ***
            0.017731 0.003529 5.024 2.91e-06 ***
conc
Signif. codes: 0 '***' 0.001 '**' 0.01 '*' 0.05 '.' 0.1 ' ' 1
Residual standard error: 9.514 on 82 degrees of freedom
Multiple R-Squared: 0.2354, Adjusted R-squared: 0.2261
F-statistic: 25.25 on 1 and 82 DF, p-value: 2.906e-06
```

```
> mod<-lm(uptake~conc, data=CO2)</pre>
> mod
Call:
lm(formula = uptake ~ conc, data = CO2)
Coefficients:
(Intercept) conc
  19.50029 0.01773
> mod2<-coxph(Surv(time, status) ~nodes, data=colon)</pre>
> mod2
Call:
coxph(formula = Surv(time, status) ~ nodes, data = colon)
        coef exp(coef) se(coef) z p
nodes 0.0868 1.09 0.00626 13.9 0
Likelihood ratio test=133 on 1 df, p=0 n=1822
```

Ejemplo: la función summary

```
> names(CO2)
[1] "Plant"
                "Type"
                            "Treatment" "conc"
                                                     "uptake"
> summary (CO2$uptake)
                                                  > class(CO2$uptake)
  Min. 1st Qu. Median Mean 3rd Qu.
                                            Max.
                                                  [1] "numeric"
  7.70 17.90 28.30
                          27.21 37.12
                                           45.50
                                                  print.summary.numeric
> summary (CO2$Plant)
                                                  > class(CO2$Plant)
Qn1 Qn2 Qn3 Qc1 Qc3 Qc2 Mn3 Mn2 Mn1 Mc2 Mc3 Mc1
                                                  [1] "factor"
             7
                  7
                      7
                          7
                            7
                                  7
                                                  print.summary.factor
> summary(CO2)
     Plant
                                                           uptake
                     Type
                                 Treatment
                                               conc
    : 7
                      :42 nonchilled:42 Min. : 95
On1
            Ouebec
                                                       Min. : 7.70
Qn2
    : 7
            Mississippi:42
                          chilled :42 1st Qu.: 175
                                                       1st Qu.:17.90
                                          Median: 350
                                                       Median :28.30
On3
    : 7
Qc1
    : 7
                                          Mean : 435
                                                       Mean :27.21
Oc3 : 7
                                          3rd Ou.: 675
                                                       3rd Ou.:37.13
Oc2
      : 7
                                                 1000
                                                       Max. :45.50
                                          Max.
 (Other):42
```

Orientación a objetos

- •Es un sistema para abstraer datos en programas
- La forma de implementar este sistema puede ser muy distinto entre lenguajes
- •Lenguajes que soportan programación orientada a objetos pueden ser: Java, C++, Python, Lisp, Perl
- •R tiene implementados dos sistemas de orientación a objetos "S3" y "S4" classes and methods
- •S3 y S4 son sistemas independientes y funcionan de forma separada (S4 esta implementada en la librería métodos, es muy usada en Bioconductor)
- Una clase es una descripción de una "cosa"
 - ej., modelo lineal, data frame, matriz, proceso puntual, anova, ...
- Un objeto es una instancia de una clase

```
ej., x<-matrix(1:9, nrow=3,
ncol=3) y<-matrix(5, nrow=4,
ncol=2)
x e y son dos objetos de clase "matrix"
```

- ¿cómo definir la clase de un objeto? Mediante la función class
 - ej., En una función al final al objeto que devuelva le damos un nombre miFuncion<-function(x) { ans<-x[length(x)]-x[1] class(ans)<-"range" ans

Orientación a objetos

- Una función genérica permite una "interface" para un cálculo particular
 - •El cálculo es "genérico" ya que puede tener diferentes significados para diferentes clases
 - ej. print, summary, confidence intervals, prediction, mean
- Un método implementa un cálculo para una clase particular
- La idea básica es:
 - •Si pepe() es una función genérica, entonces si llamamos a pepe() con un objeto x puede producir una salida completamente diferente a la salida obtenida llamando a la misma función con un objeto y, siempre y cuando x e y sean de classes diferentes
 - ej. En el ejemplo de "lm" y "coxph" la función print() daba cosas distintas
- ¿cómo identificamos funciones genéricas?

```
> print
function (x, ...)
UseMethod("print")
<environment: namespace:base>
> summary
function (object, ...)
UseMethod("summary")
<environment: namespace:base>
> deviance
function (object, ...)
UseMethod("deviance")
<environment: namespace:stats>
```

Orientación a objetos

- Funciones útiles
 - •methods() muestra los métodos existentes para una función genérica o para una clase dada
 - ej. > methods(deviance)
 - [1] deviance.default* deviance.glm* deviance.lm* deviance.mlm*
 - [5] deviance.nls* (probar methods(summary))

Non-visible functions are asterisked

- getAnywhere() busca en cualquier lugar una función deseada
- Búsqueda de métodos
 - •Cuando una función genérica ff es llamada por un objeto de clase car, R busca la función ff.car()
 - Cuando el método apropiado no se encuentra, entonces R busca la función ff.default()
 - Si no se encuentra ningún método por defecto, entonces aparece un error
- Hay otros requerimientos que se hacen por convención (se "chequean"):
 - •Un método debe tener todos los argumentos que el genérico, incluyendo "..."
 - •Si un genérico tiene argumentos por defecto, todos los métodos deben tener esos mismos argumentos (e.g. si hacemos print.myFunction debe tener x , `...') (investigar deviance)
 - Un método debe tener todos los argumentos exactamente en el mismo orden que el generico

Orientación a objetos

- •IDEA: Si creamos una función que devuelva un objeto de una clase nueva (p.e. myFunction) que hemos creado, entonces estaría bien crear "como mínimo" las funciones print. myFunction, summary. myFunction, plot.myFunction que son las más usuales
- •NOTA sobre summary(): los métodos para summary() no deberían "printan" nada. Se utiliza para calcular mas cosas (ver summary.lm). Debemos crear una función print.summary.myFunction()

```
Orientación a objetos (ejemplo)
myrange<-function(x)</pre>
  x<-sort(x)
  ans<-x[length(x)]-x[1]
  out<-list(x=x, rango=ans)</pre>
  class(out)<-"myrange"</pre>
  out
                                                          out
                                                          $x
print.myrange<-function(x)</pre>
                                                          [1] 1 2 3 5 6 9 19
                                                          $rango
   cat("El rango de tus valores es: \n")
                                                          [1] 18
   cat(x$rango)
   cat("\n")
> myrange(c(1,5,6,9,2,19,3))
El rango de tus valores es:
 18
```

Definición de tus propias clases y métodos

Supongamos que nos "inventamos" un nuevo test para evaluar asociación entre dos variables categóricas (y que lo tenemos implementado en una función que se llama "fisher.test")

Los datos a los que podemos pasar este test podrían ser:

- Dos vectores
- Una tabla
- Una matriz

Simplemente aplicando 'myTest' a: dos vectores, una tabla o una matriz, debería hacer el cálculo

```
myTest<-function(x,...)
UseMethod("myTest")
myTest.default<-function(x, y, ...)
   ... algunos controles
  xx<-table(x,y)
  myTest.table(xx, ...)
myTest.table<-function(x,...) {</pre>
# ... algunos controles
myTest.matrix(x, ...)
myTest.matrix<-function(x, ...) {</pre>
# ...programa con todos los cálculos
# implementa la teoría ...
ans<-fisher.test(x, ...)
class(ans)<-"myTest"
ans
print.myTest<-function(x,...)</pre>
 cat("Results for my new test \n")
 cat(" p-value of 'new test':",
x$p.value)
 cat("\n")
```

```
> set.seed(123456)
> casco<-sample(c("ca","co"), 200, replace=TRUE)</pre>
> fuma<-sample(c("si","no"), 200, replace=TRUE)</pre>
> tt<-table(casco, fuma)</pre>
> tt
     fuma
casco no si
   ca 52 46
   co 43 59
> myTest(casco, fuma)
Results for my new test
  p-value of 'new test': 0.1565684
> myTest(tt)
Results for my new test
  p-value of 'new test': 0.1565684
> mm<-matrix(tt, nrow=2, ncol=2)</pre>
> myTest(mm)
Results for my new test
  p-value of 'new test': 0.1565684
```

Las funciones genéricas también deberían tener controles (o si no NAMESPACE ...)

```
print.myTest<-function(x,...)
{
  if(!inherits(x, "myTest"))
    stop("x should be of class 'myTest')

  cat("Results for my new test \n")
  cat(" p-value of 'new test':", x$p.value)
  cat("\n")
}</pre>
```

Volvemos al ejemplo de regresión lineal # definimos un método nuevo ImMod <- function(x, ...) UseMethod("ImMod")</pre> # añadimos un metodo por defecto 'lmMod.default' ImMod.default <- function(x, y, ...)</pre> # controles !!! x <- as.matrix(x)y <- as.numeric(y)</pre> ans <- ImEst(x, y) # mas cálculos utiles ans\$fitted.values <- as.vector(x %*% est\$coefficients)</pre> ans\$residuals <- y - ans\$fitted.values ans\$call <- match.call() # definimos la clase class(ans) <- "ImMod"</pre> ans # devuelve una lista!!!

Volvemos al ejemplo de regresión lineal

```
# definimos 'print'
 print.lmMod <- function(x, ...)</pre>
  cat("Call:\n")
  print(x$call)
  cat("\nCoefficients:\n")
  print(x$coefficients) ←
> lmMod(cbind(1, bass$Alkalinity), bass$Mercury)
Call:
lmMod.default(x = cbind(1, bass$Alkalinity), y = bass$Mercury)
Coefficients:
     0.726139976 -0.005301603
> lmMod(cbind(Const=1, Alk=bass$Alkalinity), bass$Mercury)
Call:
lmMod.default(x = cbind(Const = 1, Alk = bass$Alkalinity), y = bass$Mercury)
Coefficients:
       Const
                       A1k
 0.726139976 - 0.005301603
```

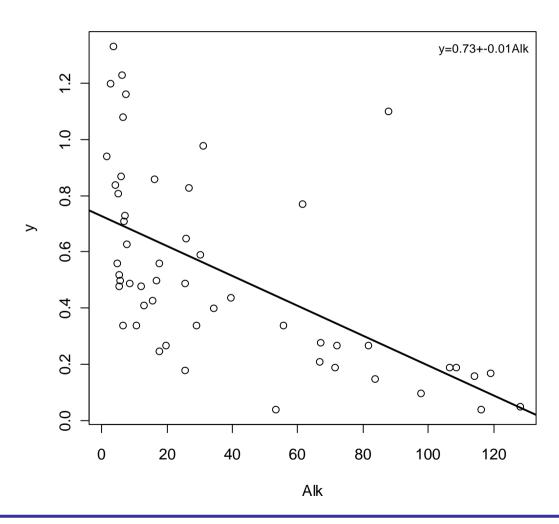
Otras ventajas de usar métodos/classes

Se pueden usar otras funciones genéricas si se adaptan al 'default'

Otras ventajas de usar métodos/classes Se pueden usar otras funciones genéricas si se adaptan al 'default' > getAnywhere(coef.default) A single object matching 'coef.default' was found It was found in the following places registered S3 method for coef from namespace stats namespace:stats with value function (object, ...) object\$coefficients <environment: namespace:stats>

```
Summary y print.summary
summary.lmMod <- function(object, ...)</pre>
{
se <- sqrt(diag(object$vcov))</pre>
tval <- coef(object) / se
TAB <- cbind(Estimate = coef(object),
StdErr = se,
t.value = tval,
p.value = 2*pt(-abs(tval), df=object$df))
res <- list(call=object$call,
coefficients=TAB)
class(res) <- "summary.lmMod"</pre>
res
print.summary.lmMod <- function(x, ...)</pre>
                                                           Función útil (Ver ayuda)
cat("Call:\n")
print(x$call)
cat("\n")
printCoefmat(x$coefficients, P.value=TRUE, has.Pvalue=TRUE)
```

plot



```
plot
> names (mod)
[1] "coefficients" "vcov" "sigma"
                                                      "df"
"fitted.values" "residuals" "call"
lmMod.default <- function(x, y, ...)</pre>
x <- as.matrix(x)
y <- as.numeric(y)</pre>
ans <-lmEst(x, y)
ans$fitted.values <- as.vector(x %*% ans$coefficients)</pre>
ans$residuals <- y - ans$fitted.values</pre>
ans$call <- match.call()</pre>
ans$data <- cbind(y, x)</pre>
class(ans) <- "lmMod"</pre>
ans
```

```
plot
> names (mod)
 [1] "coefficients" "vcov"
                                           "sigma"
                                                              "df"
 [5] "fitted.values" "residuals"
                                           "call"
                                                              "data"
plot.lmMod <- function(x, ...)</pre>
  data <- x$data
  coefs <- coef(x)</pre>
  lab <- colnames(data)</pre>
  plot(data[,3], data[,1], xlab=lab[3], ylab=lab[1], ...)
  abline(coefs[1], coefs[2], lwd=2)
  ff <- paste(lab[1], "=", round(coefs[1],2) , "+",</pre>
              round(coefs[2],2), lab[3], sep="")
  legend("topright", ff, bty="n", cex=0.8)
```

Y si mas de una variable? Y el + -? Y la posición de la etiqueta? ...

Clases y métodos S4

•La implementación S4 de clases y métodos se pueden encontrar en el paquete "method" (e.g. via library (methods))

Referencia:

Programming with Data by J. Chambers (1998), the "green book"

S4 classes/methods se utilizan muy a menudo en Bioconductor

Curso de Ravanzado

Ejercicio

Al resultado de la función 'compareMean' asígnale una clase y:

- 1. Crea una función para el método 'print'
- 2. Crea una función para el método 'summary' (y su 'print')
- 3. ¿Se te ocurre alguna visualización gráfica?

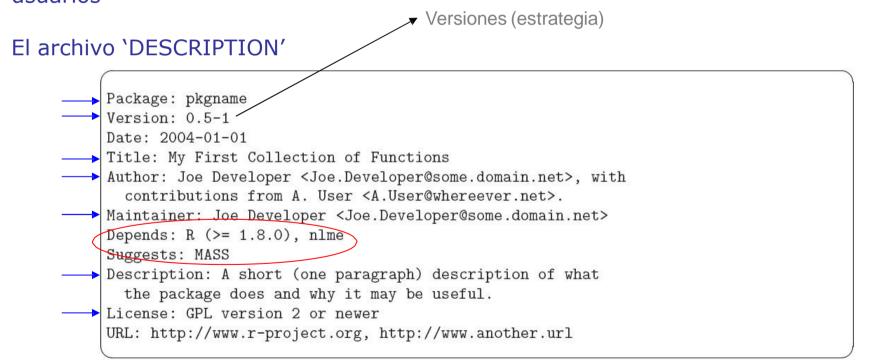
NOTA: Antes debes pensar qué quieres mostrar

Sesión 5 – Creación de librerías en R basado en *Writting R Extensions v2.5.0*

- Cómo crear un paquete en R
 - El archivo 'DESCRIPTION'
 - El archivo 'INDEX'
 - El archivo 'NAMESPACE'
 - Subdirectorios de la librería
 - Documentación
 - Vignette
- Chequeo de la librería
- Creación de la librería
- Envío a CRAN

Cómo crear un paquete en R

- •Un paquete en R consiste en un subdirectorio con los archivos `DESCRIPTION' y los subdirectorios 'R', 'data', 'demo', 'exec', 'inst', 'man', 'po', 'src', y 'tests' (algunos de los cuales pueden omitirse)
- •El subdirectorio del paquete también puede incluir los archivos 'INDEX', 'NAMESPACE', 'configure', 'cleanup', y 'COPYING'. Otros archivos como 'README', 'NEWS' o 'ChangeLog' son omitidos por R pero pueden ser muy útiles para otros usuarios



Cómo crear un paquete en R

El archivo 'INDEX' (opcional) contiene una línea para cada uno de los objetos que son suficientemente interesantes en el paquete, junto a su nombre y su descripción.

Normalmente este archivo no se crea y la información correspondiente se genera automáticamente de los códigos fuente de la documentación cuando se instala el paquete o bien cuando se crea el mismo

En vez de editar este archivo, es preferible poner una información sobre el paquete como un 'overview' y/o una viñeta.

INDEX del paquete Hmisc

```
ols
            Ordinary least squares linear model
1rm
            Binary and ordinal logistic regression model
            Accelerated failure time parametric survival model
psm
cph
            Cox proportional hazards regression
bj
            Buckley-James censored least squares linear model
            Detailed specifications of fit
specs
            Robust covariance matrix estimates
robcov
            Bootstrap covariance matrix estimates
bootcov
            Summary of effects of predictors
summarv
plot.summary
            Plot continuously shaded confidence
             bars for results of summary
            Wald tests of most meaningful hypotheses
anova
```

Cómo crear un paquete en R

El archivo 'NAMESPACE' (opcional) se usa para manejar los nombres de variables/funciones entre paquetes. Permite especificar qué variables/funciones en el paquete deberían *exportarse* para que las pudiera usar otro usuario, y cuales deberían ser *importadas* de otros paquetes (ventaja open source)

- •Usar export(f, g) para exportar en el archivo NAMESPACE (aquí f y g)
- Si el paquete tiene muchas funciones exportPattern
 - exportPattern("^[^\\.]") exporta todas las funciones que no empiezan con [
- •Usar import(pkg1, pkg2) para importar funciones de un paquete (aquí pkg1 y pkg2)
 - importFrom(pgk1, f, g) para importar funciones f y g del paquete pgk1
- Mediante pgk1:::f se puede acceder a objetos no exportados
- Usar S3method(print, f) para Registrar métodos S3 (aquí print.f)
- Cargar "hooks"

useDynLib(pkg1) registra el objeto pkg1 para que sea cargado con library.dynam

Ejemplo NAMESPACE

Funciones paquete 1 (pgk1)

```
x <- 1
f <- function(y) c(x,y)
foo <- function(x) .Call("pgk1", x, PACKAGE="pgk1")
print.foo <- function(x, ...) cat("<a foo>\n")
```

NAMESPACE

```
useDynLib(foo)
export(f, foo)
S3method(print, foo)
```

Funciones paquete 2 (pgk2)

```
c <- function(...) sum(...)
g <- function(y) f(c(y, 7))
h <- function(y) y+9</pre>
```

NAMESPACE

import(pgk1)
export(g, h)

Archivo LICENCE (library MASS)

Software and datasets to support 'Modern Applied Statistics with S', fourth edition, by W. N. Venables and B. D. Ripley. Springer, 2002.

From the text (pp. 464):

These datasets and software are provided in good faith, but none of the authors, publishers nor distributors warrant their accuracy nor can be held responsible for the consequences of their use.

This file is intended to clarify ownership and copyright: where possible individual files also carry brief copyright notices.

Copyrights

========

File MASS/R/profiles.R copyright (C) 1996 D. M. Bates and W. N. Venables. port to R by B. D. Ripley copyright (C) 1998 corrections copyright (C) 2000,3,6 B. D. Ripley

Our understanding is that the dataset files MASS/data/*.rda are not copyright.

. . . .

Archivo CITATION

```
citHeader("To cite the MASS package in publications use:")
citEntry(entry="Book",
     title = "Modern Applied Statistics with S",
     author = personList(as.person("W. N. Venables"),
                 as.person("B. D. Ripley")),
            publisher = "Springer",
     edition = "Fourth",
                 = "New York",
     address
           =2002.
     year
     note = "ISBN 0-387-95457-0",
             = "http://www.stats.ox.ac.uk/pub/MASS4",
     url
     textVersion =
     paste("Venables, W. N. & Ripley, B. D. (2002)",
         "Modern Applied Statistics with S.",
         "Fourth Edition. Springer, New York. ISBN 0-387-95457-0")
```

Archivo CITATION

```
> citation("MASS")
To cite the MASS package in publications use:
  Venables, W. N. & Ripley, B. D. (2002) Modern Applied Statistics with
  S. Fourth Edition. Springer, New York. ISBN 0-387-95457-0
A BibTeX entry for LaTeX users is
  @Book{,
    title = {Modern Applied Statistics with S},
    author = {W. N. Venables and B. D. Ripley},
    publisher = {Springer},
    edition = {Fourth},
    address = {New York},
    year = \{2002\},
    note = \{ISBN 0-387-95457-0\},
    url = {http://www.stats.ox.ac.uk/pub/MASS4},
```

El subdirectorio R

- •Contiene archivos con el código R.
- •Debe empezar con una letra (mayúscula o minúscula) o un dígito y debe tener las extensiones `.R', `.S', `.q', `.r' ó `.s' (recomendado `.R')
- Debe ser posible leer los archivos utilizando la función source(). Esto significa que los objetos deben ser creados mediante asignación

- •Se pueden usar varias funciones de R para inicializar y borrar. Para paquetes sin "name space" estas son .First.lib y .Last.lib.
- Normalmente se definen estas funciones en un archivo que se llama 'zzz.R'

El subdirectorio man

- •Debería contener sólo archivos de documentación para los objetos que se han creado en el paquete en el formato *R documentation* (Rd) que veremos más adelante
- •Debe empezar con una letra (mayúscula o minúscula) o un dígito y debe tener las extensiones `.Rd' (por defecto) ó `.rd' (recomendado `.R')

El subdirectorio src

- •Contiene el fuente y las cabeceras para el cógido compilado, y opcionalmente el archivo 'Makevars' o 'Makefile'.
- •Cuando un paquete se instala con R CMD INSTALL, Make se utiliza como control de compilación.
- •Las reglas y variables generales están definidas en 'R_HOME/etc/Makeconf' y dan soporte para C, C++, FORTRAN 77, Fortran 9x, Objective C y Objective C++ con las extensiones '.c', '.cc' ó '.cpp' ó '.C', '.f', '.f90' ó '.f95', '.m', y '.mm' ó '.M', respectivamente.
- Es recomendable utilizar '.h' para las cabeceras

El subdirectorio data

- •Se usa para incluir archivos de datos adicionales que serán cargados con la función data()
- Actualmente, los archivos de datos pueden ser de tres tipos
 - plain R code ('.R' ó '.r')
 - tablas ('.tab', '.txt', ó '.csv')
 - imágenes save() ('.Rdata' ó '.rda') (se recomienda usar save(, compress=TRUE)

El subdirectorio demo

- Es para R scripts (que se ejecutan via demo()) que demuestran la funcionalidad del paquete
- •Debe empezar con una letra (mayúscula o minúscula) o un dígito y debe tener las extensiones `.R' ó `.r'
- •Si existe dicho archivo, el subdirectorio debe tener otro archivo '00Index' con una linea para cada demo dando su nombre y una descripción separada por un espacio (NOTA: no es posible generar este fichero de forma automática)

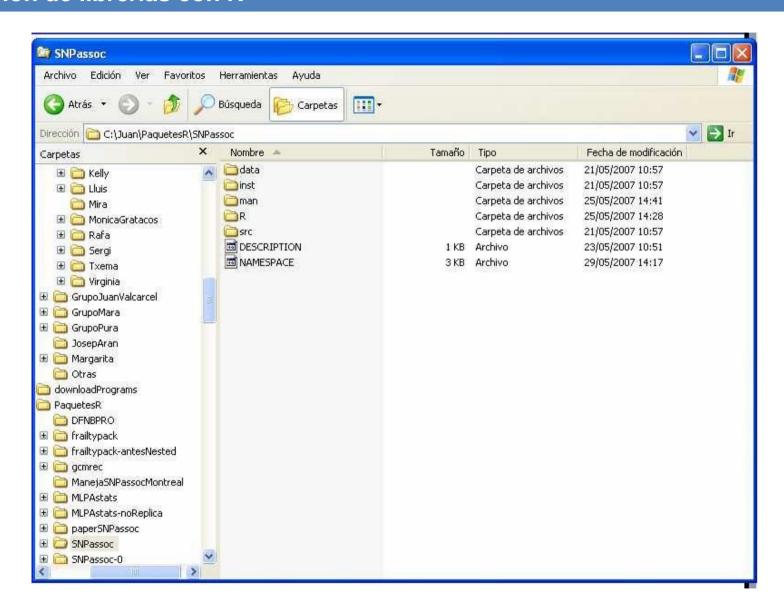
Los subdirectorios inst, tests, exec y po

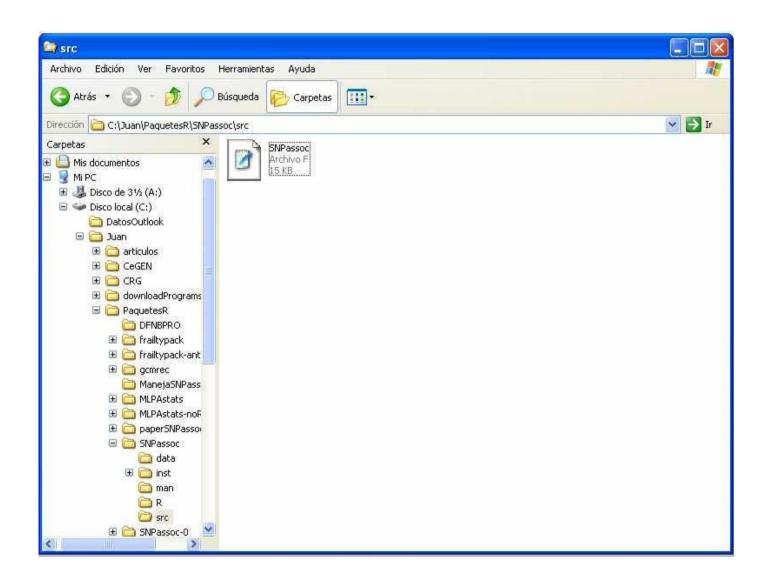
El subdirectorio exec

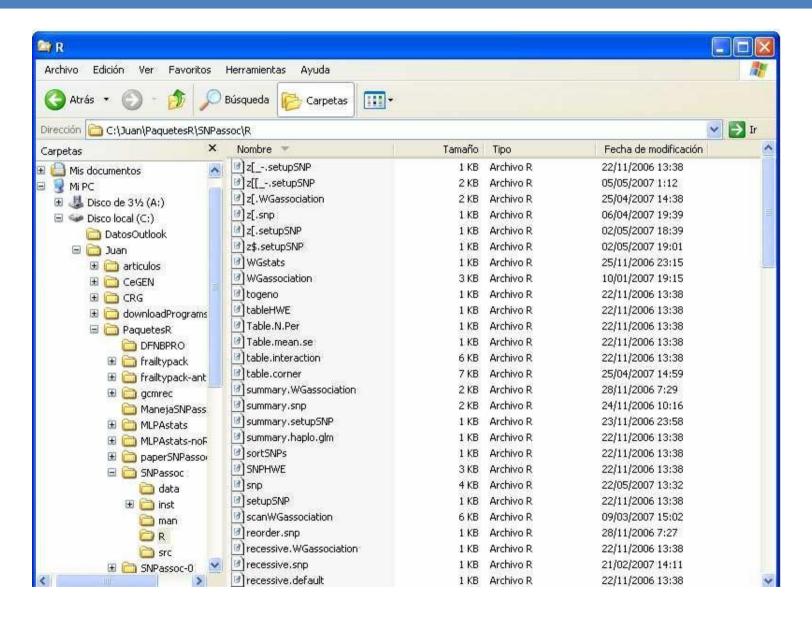
- •Desde R se pueden llamar programas ejecutables (.exe, Perl, .sh, ...) como si se hiciera desde la consola usando la función system()
 - por ejemplo, system("prog.exe")
- •PROBLEMA: cada usuario debería poner el archivo "prog.exe" en el directorio de trabajo
- SOLUCIÓN: ff<-system.file("exec/prog.exe", package="myPackage") sytem(ff)

NOTAs:

- Se podría pensar en hacer un programa a la "vieja usanza" y usar system()
 - •Ejemplo: Crear un ejecutable en Fortran que lea un fichero (en formato muy rígido) y devolver otro fichero que luego se lea con R
 - PROBLEMAS:
 - No reproducibilidad del código (open source)
 - No poder usar la función en otro paquete
 - ...
 - SOLUCIÓN: Crear dll
- Cuando usarlo: Cuando sea mejor que R (ejemplo partir un archivo -> Perl)

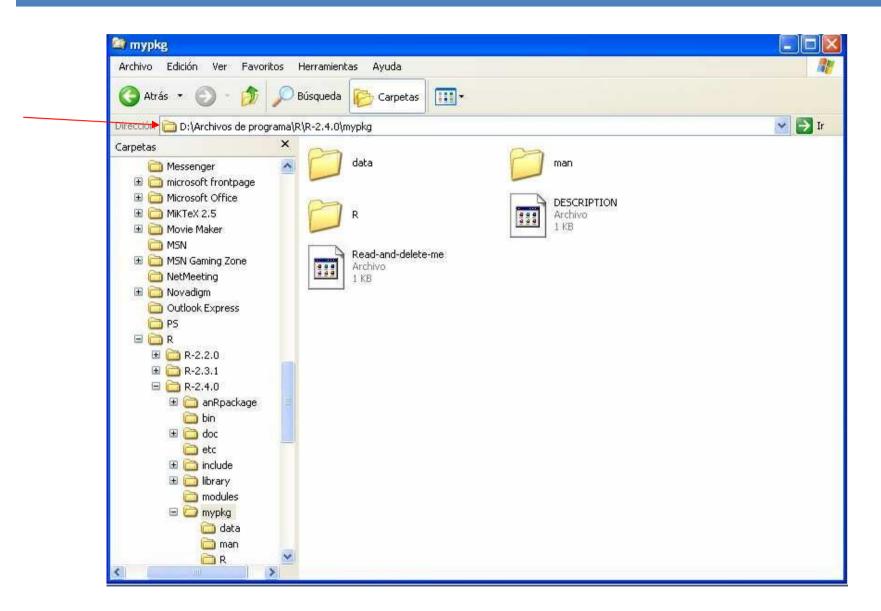






La función package.skeleton()

Further steps are described in './mypkg/Read-and-delete-me'.



La función package.skeleton()

Further steps are described in './mypkg/Read-and-delete-me'.

- *Edit the help file skeletons in 'man', possibly combining help files for multiple functions.
- * Put any C/C++/Fortran code in 'src'.
- *If you have compiled code, add a .First.lib() function in 'R' to load the shared library.
- * Run R CMD build to build the package tarball.
- * Run R CMD check to check the package tarball.

Read "Writing R Extensions" for more information.

Cómo escribir la documentacion (capítulo 2 Writting R Extensions v2.5.0)

- package.skeleton() crea directamente los archivos .Rd
- Si añadimos otro objeto podemos usar la función prompt() para crear su manual

```
\name{load}
\alias{load}
\title{Reload Saved Datasets}
\description{
 Reload the datasets written to a file with the function
 \code{save}.
\usage{
load(file, envir = parent.frame())
\arguments{
 \item{file}{a connection or a character string giving the
   name of the file to load.}
 \item{envir}{the environment where the data should be
   loaded.}
\seealso{
 \code{\link{save}}.
\examples{
## save all data
save(list = ls(), file= "all.Rdata")
## restore the saved values to the current environment
load("all.Rdata")
## restore the saved values to the workspace
load("all.Rdata", .GlobalEnv)
\keyword{file}
```

documentación de una función

Cómo escribir la documentacion (capítulo 2 Writting R Extensions v2.5.0)

documentación de un dataset

```
\name{rivers}
\docType{data}
\alias{rivers}
\title{Lengths of Major North American Rivers}
\description{
   This data set gives the lengths (in miles) of 141 \dQuote{major}
    rivers in North America, as compiled by the US Geological
    Survey.
}
\usage{rivers}
\format{A vector containing 141 observations.}
\source{World Almanac and Book of Facts, 1975, page 406.}
\references{
   McNeil, D. R. (1977) \emph{Interactive Data Analysis}.
   New York: Wiley.
}
\keyword{datasets}
```

Guidelines for Rd files (en CRAN Manuals)

- •\title sections should be capitalized and not end in a period.
- •Argument lists need to cover all the arguments in all the functions covered, including '...'.
- Do provide text alternatives for all but the very simplest \eqn and \deqn commands.
- In \source and \references sections
 - •Use separate paragraphs (separated by a blank line) for each reference.
 - •Write authors' names in the form Author, A. B. and separate them by a comma or and (but not both).
 - •Give a date immediately after the author(s), and do not put a period after the date.
 - •Enclose titles of books and journals (but *not* articles) in \emph{...}.
 - •Enclose volume numbers for journals in \bold{...} and follow them by a comma.
 - •Use -- for page ranges.
 - •If you give an address for a publisher (probably unnecessary) use the form New York: Springer-Verlag.
- •In \usage and \examples sections
 - Watch the line length: 65 characters is a reasonable limit.
 - •Use TRUE and FALSE rather than T and F.
 - •Readability is greatly enhanced by adding spaces around binary operators and after commas in argument lists. In particular, <- needs spaces around it.
- •Always use <- rather than = for assignments.

Guidelines for Rd files (en CRAN Manuals)

- •Follow the 'R core' indentation guidelines for example code (which basically means an indentation level of 4 spaces and aligning continuation lines suitably but copy the code into a .R Emacs buffer and reformat it there).
- •Either ensure that the \usage section exactly matches the function definition, or include a \synopsis section with the actual definition.
- •Not only make sure that examples are directly executable, also make sure that they are system-independent (do not use system) and do not require special facilities (for example Internet access or write permission to specific directories).
- •Use quotation marks sparingly: quotation marks are used for R objects in text rendition. If you must use them, make them double (\dQuote{a quotation}), and use \sQuote and \dQuote<>
- •Do not use tabs to indent (as these do not render correctly on all possible pagers).
- Please put two spaces after the end of a sentence in sections with running text (\description, \details, ...).
- •For consistency, aim to use British (rather than American) spelling. (NB: British spelling often uses -ize as in 'capitalize'. The view of spell -b of British spelling is a flawed American one. There are English/Scottish differences too.)
- •Do not use & except where quoting (for example, the publisher that has been called Chapman & Hall fairly recently).

Cómo escribir la documentación – Funciones internas

archivo myPackage-internal.Rd

```
\name{myPackage-inl}
\alias{myPackage-internal}
\alias{fun1}
\alias{fun2}
\alias{fun3}
\title{Internal myPackage functions}
\description{Internal myPackage functions}
\usage{
fun1(x, y)
fun2(object, y, ...)
fun3(x, y, data, method, ...)
\details{These are not to be called by the user}
\keyword{internal}
```

Cómo escribir la documentación – Descripción del paquete

archivo myPackage-package.Rd

```
\name{lmPackage-package}
\alias{lmPackage-package}
\alias{lmPackage}
\docType{package}
\title{
What the package does (short line)
   ~ package title ~~
}
\description{
More about what it does (maybe more than one line)
   ~ A concise (1-5 lines) description of the package ~~
}
...
```

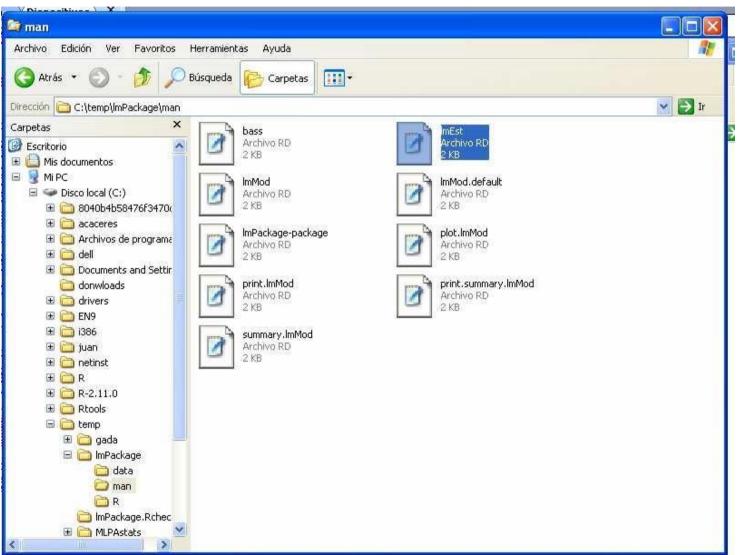
Ver ejemplo samplesize.pdf con todo lo que hace según el tipo de .Rd

Ejemplo – modelo regresión lineal con descomposición QR > ls() "lmEst" "lmMod" [1] "bass" [4] "lmMod.default" "plot.lmMod" "print.lmMod" [7] "print.summary.lmMod" "summary.lmMod" > package.skeleton("lmPackage", path="c:/temp/") Creating directories ... Creating DESCRIPTION ... Creating Read-and-delete-me ... Saving functions and data ... Making help files ... Done.

Further steps are described in 'c:/temp//lmPackage/Read-and-

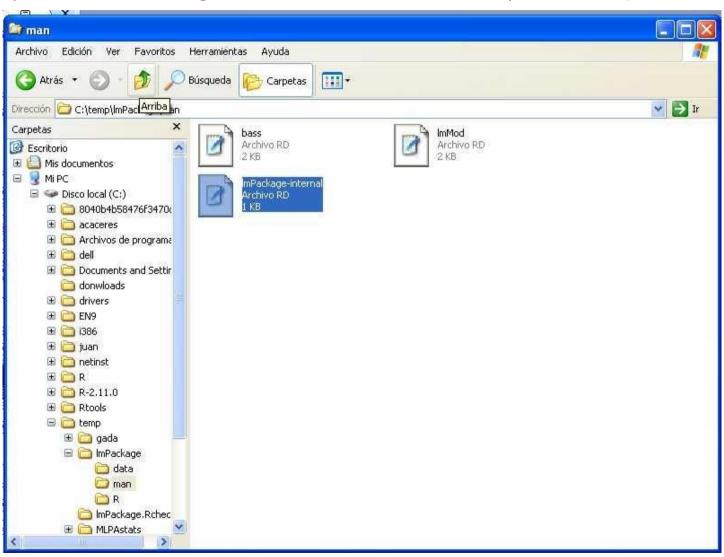
delete-me'.

Ejemplo – modelo regresión lineal con descomposición QR



Sesión 5 - Creación de librerías en R

Ejemplo – modelo regresión lineal con descomposición QR



Archivo ImPackage-internal.Rd

```
\name{lmPackage-internal}
\alias{lmPackage-internal}
\alias{lmEst}

\title{Internal lmPackage functions}
\description{Internal lmPackage functions}
\usage{
lmEst(x, y)
}

\details{These are not to be called by the user}
\keyword{internal}
```

Archivo ImMod.Rd

```
\name{lmMod}
\alias{lmMod}
\alias{lmMod.default}
\alias{print.lmMod}
\alias{summary.lmMod}
\alias{print.summary.lmMod}
\alias{plot.lmMod}
\title{ Linear regresion using QR decomposition }
\description{ This package performs ... }
\usage{
  lmMod(x, ...)
  \method{lmMod}{default}(x, y, ...)
  \method{print} {lmMod} (x, ...)
  \method{summary}{lmMod}(object, ...)
  \method{print} { summary.lmMod} (x, ...)
  \method{plot} {lmMod} (x, ...)
\arguments{
  \item{x}{model matrix}
  \item{y}{dependent variable}
  \item{object}{object of class 'lmMod'}
  \item{\dots}{other arguments to be passed to print, plot, summary}
```

Archivo ImPackage-internal.Rd (cont.)

```
\details{ To be supplied }
\value{ %% ~Describe the value returned
%% If it is a LIST, use
%% \item{comp1 }{Description of 'comp1'}
%% \item{comp2 }{Description of 'comp2'} %% ...}
\references{ %% ~put references to the literature/web site here ~ }
\author{ %% ~~who you are~~ }
\note{ %% ~~further notes~~ }
%% ~Make other sections like Warning with \section{Warning } {....} ~
\seealso{ %% ~~objects to See Also as \code{\link{help}}}, ~~~ }
\examples{
 data(bass)
mod<-lmMod(cbind(Const=1, Alk=bass$Alkalinity), bass$Mercury)</pre>
 coef (mod)
 fitted (mod)
 resid (mod)
 summary (mod)
plot (mod)
% Add one or more standard keywords, see file 'KEYWORDS' in the R documentation directory.
\keyword{ ~kwd1 }
\keyword{ ~kwd2 }
```

5. Utilidades de Rstudio (roxygen y devtools)

Creación de ayuda con la librería devtools y roxygen2

1. Creamos una libería vacía

library(devtools)
library(roxygen2)
create("lmPackage")

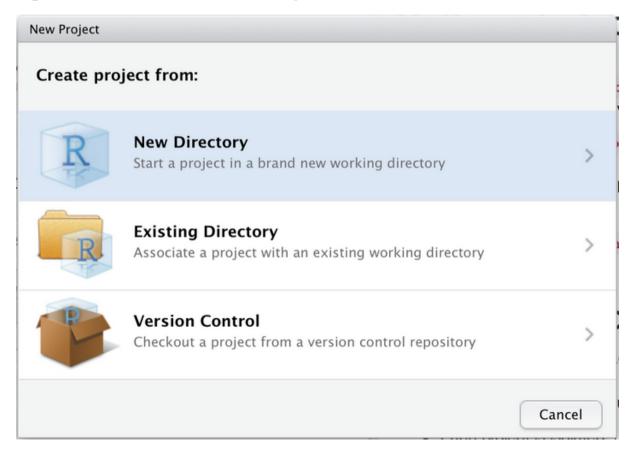
Crea: Carpeta R, DESCRIPTION y NAMESPACE

- 2. Movemos los ficheros .R a la carpeta R (e.g., fichero lmModFinal.R) (NOTA: ver cabecera de la función)
- 3. Creamos el .Rd (carpeta man) con
 setwd("ImPackage")
 document()

NOTA: a veces hay que ejecutar esto dos veces

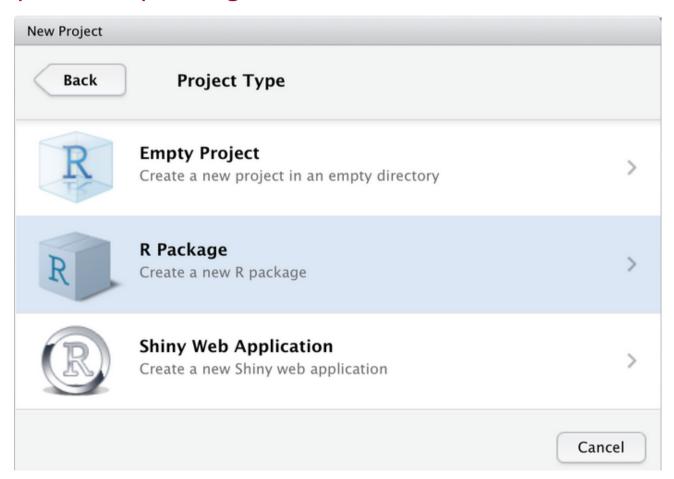
Con RStudio

- 1. Pinchar en File | New project
- 2. Escoger "New Directory"

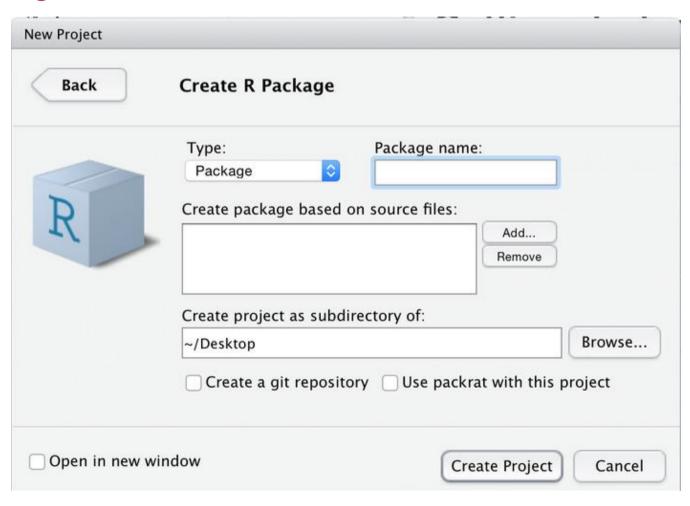


Con RStudio

3. Despues "R package"



4. Despues pon un nombre al paquete y pincha "Create R package"



Escribir un vignette para la librería

- Además de la ayuda en formato .Rd, los paquetes de R permiten la inclusión de otros documentos en otros formatos
- ANTES debían estar en la carpeta 'inst/doc' del código fuente. AHORA en la carpeta 'vignettes'
- Pueden estar en cualquier formato pero se recomienda tenerlo en formato PDF o HTML para que los usuarios puedan leerlos desde cualquier plataforma
- Normalmente se ponen 'technical reports' o se suelen hacer un manual específico
- VIGNETTE: Compilado con Sweave / Knitr / Markdown -> Garantiza reproducibilidad

Escribir un vignette para la librería

Knitr: Ver material en

Markdown: Ver material en

Ejercicio (Después de ver el código siguiente):

- 1. Crea la libería 'ImPackage' [vacía] como hemos visto anteriormente
- 2. Añade el fichero 'lmModFinal.R' a la carpeta 'R' de la librería
- 3. Añade los datos 'bass.txt' a la carpeta 'extdata'
- 4. Crea la documentación
- 5. Añade el fichero 'ImPackage.Rnw' a una carpeta 'vignettes'
- 6. Compila la librería
- 7. Abre el fichero ImPackage.Rnw y crea la vignette

Una posible vignette para nuestro ejemplo

```
\documentclass[11pt]{article}
\begin{document}
\title{\bf Ejemplo creaci\'on de una vignette: modelo lineal}
\vspace{1cm}
\author{Juan R Gonz\'alez}
\maketitle
\begin{center}
Instituto de Salud Global Barcelona (ISGlobal)
\vspace{1cm}
{\tt juan.rgonzalez@isglobal.org}
{\tt http://www.creal.cat/jrgonzalez/software.htm}
\end{center}
\tableofcontents
\section{Introduction}
Este documento da una visi\'on general del paquete {\tt ImPackage} que est\'a
accesible en CRAN. Mediante esta librer\'ia se puede llevar a cabo ...
\section{Getting started}
\noindent El paquete {\tt ImPackage} utiliza la librer\'a {\tt survival}. Empezamos cargando las librer\'ias necesarias.
```

```
<<load_library>>=
library(survival)
@
\noindent Despues, la librer\'ia puede cargarse ejecutando

<<load_library2>>=
library(ImPackage)
@
\section{The data}
\noindent Los datos pueden importarse usando la funci\'on {\tt read.delim} de forma usual. El paquete tiene unos datos (sobre unos lagos) que pueden usarse como ejemplo. Se cargan usando la funci\'on data

<<load_data>>=
bass <- read.delim("../extdata/bass.txt")
@</pre>
```

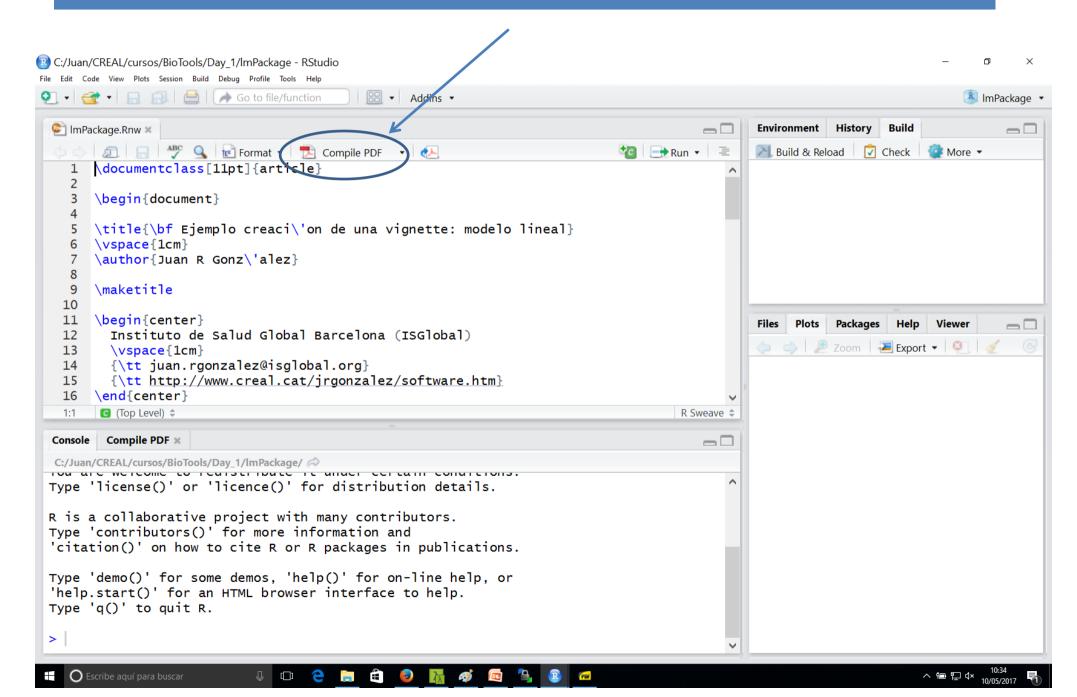
```
\section{Model parameter estimates}
\noindent EI modelo se puede estimar usando la funci\'on {\tt ImMod}

<<fiit_model>>=
mod <- ImModFinal(Mercury ~ Alkalinity, data=bass)
names(mod)
@

\noindent Se puede crear una figura con el modelo mediante la siguiente instrucci\'on:

<<fiig_mod, fig.cap='Modelo de regresion lineal estimado mediante descomposicion QR'>>=
plot(mod$data[,2], mod$data[,3], ylab="Mercury", xlab="Alkalinity")
abline(mod)
@

\end{document}
```



Ejemplo creación de una vignette: modelo lineal

Juan R González

May 10, 2017

Instituto de Salud Global Barcelona (ISGlobal) juan.rgonzalez@isglobal.org

http://www.creal.cat/jrgonzalez/software.htm

Contents

1	Introduction	
2	Getting started	
3	The data	:
1	Model parameter estimates	

1 Introduction

Este documento da una visión general del paquete lmPackage que está accesible en CRAN. Mediante esta librería se puede llevar a cabo ...

2 Getting started

El paquete 1mPackage utiliza la librerá survival. Empezamos cargando las librerías necesarias.

```
library(survival)
```

Despues, la librería puede cargarse ejecutando

```
library(lmPackage)
```

3 The data

Los datos pueden importarse usando la función read.delim de forma usual. El paquete tiene unos datos (sobre unos lagos) que pueden usarse como ejemplo. Se cargan usando la función data

```
bass <- read.delim("../extdata/bass.txt")</pre>
```

4 Model parameter estimates

El modelo se puede estimar usando la función 1mMod

```
mod <- lmModFinal(Mercury ~ Alkalinity, data=bass)
names(mod)

## [1] "coefficients" "vcov" "sigma" "df"
## [5] "data"</pre>
```

Se puede crear una figura con el modelo mediante la siguiente instrucción:

```
plot(mod$data[,2], mod$data[,3], ylab="Mercury", xlab="Alkalinity")
abline(mod)
```

Chequear la librería

Ver algunos errores

- que no cuadre el .Rd con .R
- que haya una función sin .Rd
- Consistencia funciones genéricas (el primer argumento de 'summary' es x y no 'object')
- métodos en .Rd
- petar ejemplos

Ver ImPackage.Rcheck

Crear una librería (.tar.gz) desde la consola

R CMD build

```
Símbolo del sistema
C:\temp>R CMD build 1mPackage2
* checking for file 'lmPackage2/DESCRIPTION' ... OK

* preparing 'lmPackage2':

* checking DESCRIPTION meta-information ... WARNING
Non-standard license specification:

What license is it under?
Standardizable: FALSE
installing the package to re-build vignettesinstalling *source* package 'lmPackage' ...
** data
** inst
** preparing package for lazy loading
*** installing help indices

** building package indices ...
** MD5 sums
** testing if installed package can be loaded
* DONE (1mPackage)
* creating vignettes ... OK
  removing junk files
checking for LF line-endings in source and make files
* checking for empty or unneeded directories
* building 'lmPackage_1.0.tar.gz'
C:\temp>_
```

Ejecutar: R CMD build ImModFinal

Curso de R avanzado

Crear una librería para Windows (.zip) desde la consola

R CMD build -binary

```
_ 🗆 ×
Símbolo del sistema
C:\temp>R CMD build -binary lmPackage2
* checking for file 'lmPackage2/DESCRIPTION' ... OK
* preparing 'lmPackage2':
* checking DESCRIPTION meta-information ... WARNING Non-standard license specification:
 What license is it under?
Standardizable: FALSE

    installing the package to re-build vignettes

 finstalling *source* package 'lmPackage' ...
₩ data
⇔ inst
   preparing package for lazy loading
 ** installing help indices
🕶 building package indices ...
↔ MD5 sums
** testing if installed package can be loaded
  DONE (1mPackage)
 creating vignettes ... OK
* removing junk files
* checking for LF line—endings in source and make files
* checking for empty or unneeded directories
* building binary distribution
VARNING: some HTML links may not be found
* installing *source* package 'lmPackage' ...
** R
** data
** inst
** preparing package for lazy loading
** help
*** installing help indices
** building package indices ...
** MD5 sums
** testing if installed package can be loaded packaged installation of 'lmPackage' as lmPackage_1.0.zip
 • DONE (1mPackage)
C:\temp>_
```

Ejecutar: R CMD build -binary ImModFinal

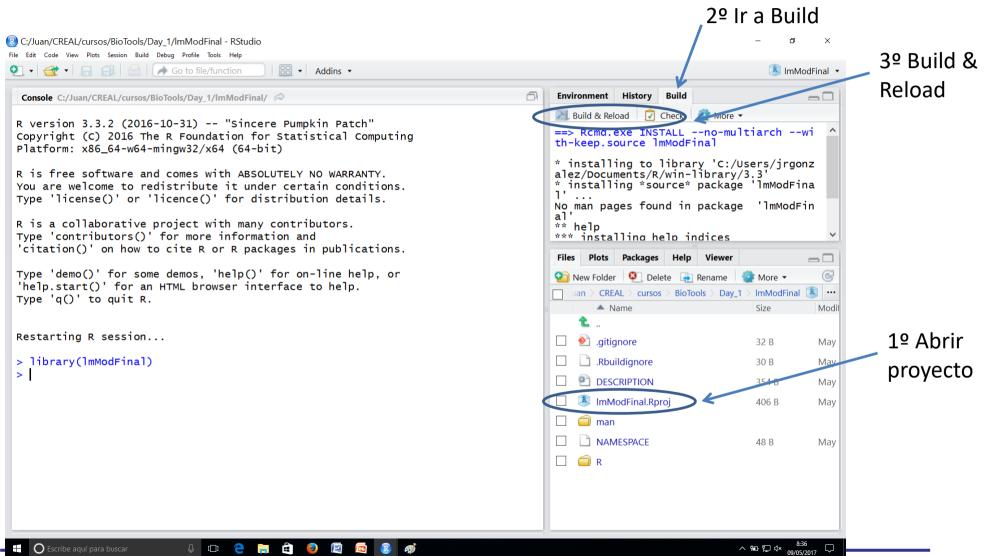
Curso de R avanzado

Testar (check) una librería desde RStudio

2º Ir a Build C:/Juan/CREAL/cursos/BioTools/Day 1/ImPackage - RStudio File Edit Code View Plots Session Build Debug Profile Tools Help ⊞ ▼ Addins ▼ ImPackage ▼ 3º check Environment History Build Console C:/Juan/CREAL/cursos/BioTools/Day_1/ImPackage/ Build & Reload Check R version 3.3.2 (2016-10-31) -- "Sincere Pumpkin Patch" Copyright (C) 2016 The R Foundation for Statistical Computing Platform: x86_64-w64-mingw32/x64 (64-bit) Updating ImPackage documentation Loading 1mPackage R is free software and comes with ABSOLUTELY NO WARRANTY. Setting env vars ---You are welcome to redistribute it under certain conditions. Type 'license()' or 'licence()' for distribution details. CFLAGS : -Wall -pedantic CXXFLAGS: -Wall -pedantic R is a collaborative project with many contributors. Building lmPackage -----Type 'contributors()' for more information and 'citation()' on how to cite R or R packages in publications. Files Plots Packages Help Viewer Type 'demo()' for some demos, 'help()' for on-line help, or New Folder Delete 🕒 Rename 🌼 More 🕶 'help.start()' for an HTML browser interface to help. CREAL > cursos > BioTools > Day_1 > ImPacka Type 'a()' to quit R. Name gitignore 32 B .Rbuildianore 1º Abrir DESCRIPTION 353 B proyecto ImPackage.Rproj man man □ NAMESPACE 48 B C Escribe aquí para buscar

Curso de R avanzado

Compilar/Cargar una librería desde RStudio



Envío a CRAN

- •CRAN es una red de sitios WWW que contienen el código distribuido y sus distribuciones, especialmente los paquetes de R
- •Antes de someter un paquete ejecuta R CMD check para verificar que el paquete se instalará y que los ejemplos funcionan, así como que la documentación está completa y puede ser procesada
- Crea el archivo `.tar.gz' mediante R CMD build
- •Asegúrate que se puede ejecutar todo el proceso sólo con warnings que entiendes y ten razones para no corregirlos

y envía un mensaje a <u>cran@r-project.org</u> sobre él. Los 'mantainers' de CRAN (principalmente Kurt Hornik) ejecutarán estos tests antes de ponerlo en el repositorio principal

Ejercicio: Hacer una vignette de la librería 'lmMod' (ver fichero lmMod.Rnw) usando Markdown