Introducción a la Línea de Comandos para Análisis Bioinformáticos

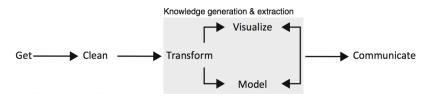
10 de Agosto, 2021

•00000

Que vamos a hacer?

Que vamos a hacer?

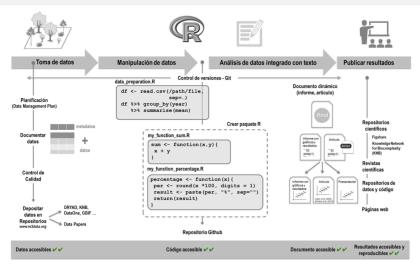
## Manejo de datos y análisis reproducible



Data Wrangling with R (Boehmke, 2016)

# Análisis reproducible en R

Que vamos a hacer?



Ciencia reproducible: qué, por qué, cómo (Rodríguez-Sánchez et

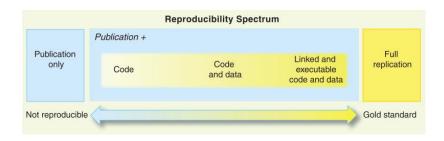
## Manejo de datos

Que vamos a hacer?

- Data wrangling: es el proceso mediante el cual modificamos datos iniciales con el fin de analizarlos.
- Incluye la edición, el filtrado, la obtención de nuevos valores y más.
- "In our experience, the tasks of exploratory data mining and data cleaning constitute 80% of the effort that determines 80% of the value of the ultimate data mining results. (...)".
   Dasu & Johnson. Exploratory Data Mining and Data Cleaning (2003).

# Análisis reproducible

Que vamos a hacer?



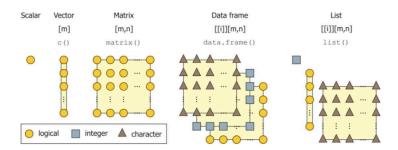
Reproducible Research in Computational Science (Peng, 2012)

 aca me falta una notita al pie con un warning message diciendo hasta donde vamos nosotros

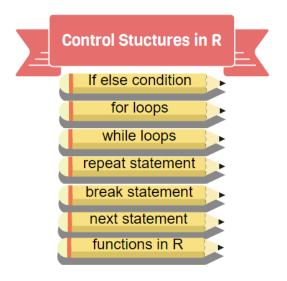
### Estructura de las clases

- Teórico/práctico.
- Práctico 11: repaso de loops y armado de funciones en R
  - accionar sobre los datos para transformarlos: funciones
  - realizar acciones repetitivas: loops
- Práctico 12: manejo de datos con paquetes de la librería tidyverse.
  - filtrado y edición de datos
  - visualización de los datos

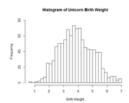
Breve repaso de R



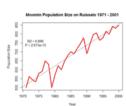
A practical guide to the R package Luminescence (Dietze et al., 2013)



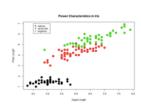




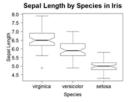
1. Basic Histogram



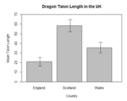
2. Line Graph with Regression



3. Scatterplot with Legend



4. Boxplot with reordered/ formatted axes



5. Boxplot with Error Bars

Funciones en R

- Qué es una función? -> Un conjunto de operaciones definidas que toman argumentos para dar un resultado.
- R Es un lenguaje de programación en base a funciones: casi todo lo que hacemos las utiliza.
  - Otros lenguajes operan de forma diferente.
- Ventajas
  - Le podemos dar nombre descriptivo
  - Nos ahorramos copiar y pegar codigo varias veces (y errar en el proceso)
  - Si hay que cambiar algo, es solo cambiar la funcion
- Las funciones en R salen de muchos lados:
  - R tiene funciones que vienen incorporadas por defecto
  - Utilizando librerías obtenemos nuevas funciones (como las de seginr, por ejemplo)
  - Nosotros podemos hacer nuestras propias funciones

- **nombre** de la funcion. Es lo que nos permite referenciarla. Lo asignamos cuando la definimos
- **cuerpo**: el código que define a la función
- formales: la lista de argumentos que controlan cómo se llama a la función
- ambiente: el "mapa" de la locación de las variables de la función

```
library(seqinr)
body(seqinr::GC)
## {
       if (length(seq) == 1 && is.na(seq))
##
           return(NA)
##
##
       if (nchar(seq[1]) > 1)
           stop("sequence is not a vector of chars")
##
```

# Componentes de una función

```
library(seqinr)
formals(seqinr::GC)
## $seq
##
##
## $forceToLower
   [1] TRUE
##
   $exact
   [1] FALSE
##
##
## $NA.GC
```

### Componentes de una función

El *ambiente* de una funcion controla el modo en que R encuentra el valor asociado a un nombre.

```
library(seqinr)
environment(seqinr::GC)
```

## <environment: namespace:seqinr>

- Podemos, además, distinguir tipos especiales de funciones:
  - Funciones primitivas: llaman directamente a C
    - No tienen cuerpo ni formales.
  - Funciones de alto rango: operan sobre funciones
    - Tienen cuerpo y formales, pero constituyen un caso interesante en sí

## Funciones primitivas

## NULL

```
sum
## function (..., na.rm = FALSE) .Primitive("sum")
body(sum)
## NULL
formals(sum)
## NULL
environment(sum)
```

```
## .Primitive("[")
`for`
## .Primitive("for")
## function (...) .Primitive("c")
```

# Definición de funciones

```
mi funcion = function(argumento 1, argumento 2, ...){
#<-> el indentado no es obligatorio, pero ayuda a leer
  # en este bloque suceden operaciones con argumento 1
  # en este bloque suceden operaciones con argumento_2
  # se devuelve algo como resultado de aplicar
  # la funcion a los argumentos
  return(una variable_nueva) # atencion: a veces una funci
} # una linea sola para este parentesis ayuda a leer
```

```
eleva_y_resta = function(x,y){
  resultado = x^2 - y^2
  return(resultado)
```

## [1] -5

```
eleva_y_resta = function(x,y){
  resultado = x^2 - y^2
  return(resultado)
}
eleva_y_resta(2,3)
```

```
eleva_y_resta = function(x,y){
  resultado = x^2 - y^2
  return(resultado)
eleva_y_resta(y = 2, x = 3)
```

## [1] 5

```
eleva_y_resta = function(x,y){
  resultado = x^2 - y^2
  return(resultado)
}
eleva_y_resta(y = 2)
```

## Error in eleva\_y\_resta(y = 2): argument "x" is missing,

### Definición de funciones

## [1] -3

```
eleva_y_resta = function(x = 1, y = 1){
  resultado = x^2 - y^2
  return(resultado)
eleva_y_resta(y = 2)
```

```
# ojo con el alcance de las variables!
x = 2
eleva_y_resta = function(x, y){
  resultado = x^2 - y^2
 return(resultado)
eleva_y_resta(y = 2) # nos juega una mala pasada el ambien
## [1] 0
```

### Evitando problemas: programación defensiva

• la función **stop()** permite salir de la función si algo esperable no sucede

```
eleva y resta = function(x = 1, y = 1){
  if(!is.numeric(x) || !is.numeric(y)){ # en condicionales como
    stop('Alguno de los argumentos dados no es un numero.')
  }
  resultado = x^2 - y^2
  return(resultado)
eleva y resta(x = 2, y = "2")
```

## Error in eleva\_y\_resta(x = 2, y = "2"): Alguno de los argumen

## [1] 0 8

```
# ojo con el alcance de las variables!
x = 2
eleva_resta_y_suma = function(x, y){
  resta = x^2 - y^2
  suma = x^2 + y^2
  return(c(resta, suma))
eleva_resta_y_suma(x = 2, y = 2)
```

### Salida de funciones

```
# ojo con el alcance de las variables!
x = 2
eleva_resta_y_suma = function(x, y){
  resta = x^2 - y^2
  suma = x^2 + y^2
  return(c(list(resta, suma)))
eleva_resta_y_suma(x = 2, y = 2)
  [[1]]
##
## [1] 0
##
## [[2]]
```

- Son funciones que toman a otras funciones como argumentos y devuelven una función o valor.
- Funciones como apply(), sapply(), lapply(), mapply()...

```
# definimos un vector
numeros = c(1,2,3,4)
# aplicamos una funcion anonima sobre este vector
numeros_cuadrado = sapply(X = numeros, FUN = function(x)(x^2))
numeros_cuadrado
```

## [1] 1 4 9 16

## lapply

```
# definimos un vector
numeros = c(1,2,3,4)
# aplicamos una funcion anonima sobre este vector
numeros_cuadrado = lapply(X = numeros, FUN = function(x)(x^2))
numeros cuadrado
## [[1]]
## [1] 1
##
## [[2]]
## [1] 4
```

## mapply

```
# creando una matriz de 4x4 con mapply
matriz = mapply(rep, 1:4, 4)
matriz
```

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

Loops en R

# For loop (abstracto)

```
# for loop
un_vector = ...
for (i in ____) {
  ... un_vector[i] ....
```

```
numeros = c(3,40,15,6)
numeros cuadrado = c()
for (i in 1:length(numeros)) {
  numeros cuadrado[i] = numeros[i]^2
```

# For loop (usando seq\_along())

```
numeros = c(3,40,15,6)
numeros cuadrado = c()
for (i in seq_along(numeros)) {
  numeros cuadrado[i] = numeros[i]^2
```

```
numeros = c(3,40,15,6)
numeros cuadrado = c()
for (i in seq_along(numeros)) {
  if(!numeros[i] \%\% 3 == 0){
    next
  else {
  numeros_cuadrado[i] = numeros[i]^2
  }
numeros cuadrado
```

# Operador break

```
numeros = c(3,40,15,6)
numeros_cuadrado = c()
for (i in seq_along(numeros)) {
  if(!numeros[i] %% 3 == 0){
    break
  }
  numeros cuadrado[i] = numeros[i]^2
numeros_cuadrado
```

## While loop

- Sigue la misma lógica que en Bash
- Se utiliza la función while() en vez de for()
- Se puede realizar combinando un for loop con un operador break

Comentarios, dudas existenciales?

## A programar se ha dicho :)

- 10 minutos de pausa y volvemos.
- El practico de hoy esta en este link (clickear).
- passwd: HfqsRNA2\_\_