

MASTER EN BIOINFORMÁTICA Y DIGITAL HEALTH (MBIOINDI)

TEMA 8: Introducción a la programación

Miguel Rodríguez PhD Ingeniero Bioinformático miguel@avatarcognition.com

CV PONENTE

EDUCACIÓN

- Grado en Genética (UAB)
- Master en Bioinformática (UAB)
- Doctorado en Biomedicina (UPF)

EXPERIENCIA LABORAL

- Centro de regulación Genómica (CRG)
- Wellcome Trust Sanger Institute
- Avatar Cognition (Posición Actual)

DOCENCIA

- Grado en Biología Humana (UPF)
- Master en análisis de datos ómicos (UVic)



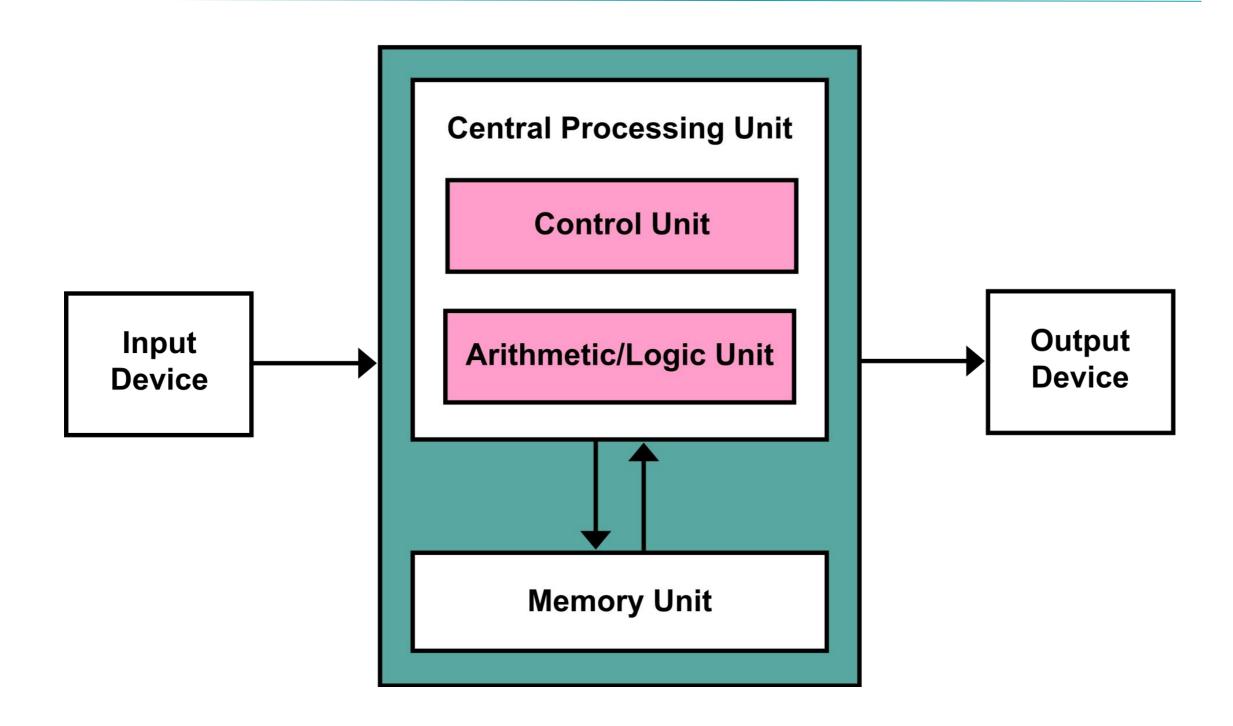


CONTENIDOS

- Introducción a conceptos básicos de programación
- Diferencias entre paradigmas de programación
- Conceptos esenciales de variables y tipos de datos
- Instalación y descripción de software
- Introducción a la visualización de datos













Tamales de salsa verde con pollo



Ingredientes

- 1 kg harina de maíz
- 250 g manteca de cerdo
- 1 tazas de caldo de agua de pollo
- 1 cucharadita de polvo para hornear
- 1 cucharadita de sal
- 1/2 kg de tomate verde hidratado
- 1 chile verde
- 1 diente de ajo
- 1/4 de cebolla
- 1/2 pechuga de pollo
- 1 taza de caldo de pollo
- 20 hojas de tamal hidratadas en aqua



Modo de preparación

- Batir la harina con la manteca, agua, polvo para hornear y sal, hasta tener una mezcla uniforme.
- Cocer la pechuga en agua y desmenuzar.
- Licuar el tomate con una taza de caldo de pollo, chile verde, ajo y cebolla; salpimentar.
- Hervir durante 5 minutos o hasta que reduzca un poco.
- Añadir el pollo con la salsa verde.
- Servir una cucharada de masa para tamales en la hoja, agregar el pollo sobre la masa; cerrar las hojas y cocer a baño María en una vaporera durante una hora o hasta que estén cocidos.





Problem

A string is simply an ordered collection of symbols selected from some alphabet and formed into a word; the length of a string is the number of symbols that it contains.

An example of a length 21 DNA string (whose alphabet contains the symbols 'A', 'C', 'G', and 'T') is "ATGCTTCAGAAAGGTCTTACG."

Given: A DNA string s of length at most 1000 nt.

Return: Four integers (separated by spaces) counting the respective number of times that the symbols 'A', 'C', 'G', and 'T' occur in s.

Sample Dataset

Sample Output

20 12 17 21







```
# Definimos una función para contar los nucleótidos en una cadena de ADN
def contar nucleotidos(secuencia):
   Cuenta la cantidad de nucleótidos A, C, G y T en una secuencia de ADN.
    Parámetros:
   secuencia (str): Una cadena de ADN que contiene los caracteres 'A', 'C', 'G' y 'T'.
   Retorno:
   tuple: Una tupla con cuatro valores enteros, que representan el conteo de 'A', 'C', 'G' y 'T' respectivamente.
   # Contamos cada nucleótido usando el método count() de las cadenas de texto
   conteo A = secuencia.count('A')
   conteo C = secuencia.count('C')
   conteo G = secuencia.count('G')
   conteo T = secuencia.count('T')
   # Devolvemos los conteos como una tupla de cuatro enteros
   return conteo A, conteo C, conteo G, conteo T
# Ejemplo de uso de la función con la cadena de muestra
resultado = contar nucleotidos(secuencia)
# Mostramos el resultado en el formato solicitado (con valores separados por espacios)
print(" ".join(map(str, resultado)))
```





Paradigma Orientado a Objetos (POO)

- La Programación Orientada a Objetos busca representar conceptos o elementos del mundo real (o de un problema específico) como objetos en el código.
- Estos **objetos** son "instancias" o ejemplos concretos de **clases**, que son estructuras generales que definen las características y el comportamiento de dichos objetos.
- Cada clase actúa como un molde que define las propiedades (atributos) y comportamientos (métodos) de los objetos.
- Este paradigma permite modelar problemas del mundo real, haciéndolo ideal para sistemas complejos.













```
class Secuencia:  # Definimos la clase Secuencia

def __init__(self, cadena):
    """Inicializa la clase Secuencia con una cadena de ADN y calcula los conteos como atributos."""
    self.cadena = cadena; self.reversa_complementaria = self.calcular_reversa_complementaria()
    self.conteo_A = self.cadena.count('A'); self.conteo_C = self.cadena.count('C')
    self.conteo_G = self.cadena.count('G'); self.conteo_T = self.cadena.count('T')

# def describir(self):

def calcular_reversa_complementaria(self):
    """Calcula y devuelve la reversa complementaria de la cadena de ADN."""
    complementos = {'A': 'T', 'T': 'A', 'C': 'G', 'G': 'C'} # Mapa de complementos
    complementaria = "".join(complementos[base] for base in self.cadena) # Genera la complementaria
    return complementaria[::-1] # Revierte la cadena complementaria
```

```
# Ejemplo de uso de la clase Secuencia
secuencia = Secuencia("AGCTTTTCATTCTGACTGCAACGGGCAATATGTCTCTGTGTGGATTAAAAAAAGAGTGTCTGATAGCAGC")
print(secuencia.calcular_reversa_complementaria())

v 0.0s

GCTGCTATCAGACACTCTTTTTTTAATCCACACAGAGACATATTGCCCGTTGCAGTCAGAATGAAAAGCT
```





```
# Definimos la clase Secuencia en R
     Secuencia <- function(cadena) { # Creamos una lista que actúa como clase
       obj <- list(cadena = cadena, n A = 0, n C = 0, n G = 0, n T = 0)
       calcular conteos <- function() { # Método para calcular los conteos de A, C, G y T
         obj$n A <<- sum(strsplit(obj$cadena, "")[[1]] == "A"); obj$n C <<- sum(strsplit(obj$cadena, "")[[1]] == "C")
         obj$n G <<- sum(strsplit(obj$cadena, "")[[1]] == "G"); obj$n T <<- sum(strsplit(obj$cadena, "")[[1]] == "T")}
       describir <- function() { # Método para describir la secuencia y mostrar los conteos
10
         paste0("Secuencia: ", objscadena, "\n", "Conteo de A: ", objsn_A, "\tConteo de C: ", objsn_C, "\n",
                                                 "Conteo de G: ", objsn G, "\tConteo de T: ", objsn T, "\n")}
11
12
13
       calcular conteos() # Inicializamos calculando los conteos al crear el objeto
14
15
       obj$calcular conteos <- calcular conteos; obj$describir <- describir # Agregamos los métodos a la lista
16
17
       return(obj) # Devolvemos el objeto
```





Otros paradigmas

- Procedural: estructura el comportamiento de un programa como una serie de procedimientos (funciones o subrutinas) que se llaman entre sí. El programa resultante se organiza como una jerarquía de llamadas entre estos procedimientos, donde cada uno realiza una tarea específica.
- 2. Funcional: los programas se describen como una composición de funciones más simples que transforman datos. El programa resultante mapea valores de entrada a otros valores.





```
# Paradigma Procedural
       entrada = list(range(10)); resultado = [] # Valores de entrada y la salida
       for x in entrada:
           if x % 2 == 0:
                                              # Si el valor es par
               resultado.append(x ** 2) # Aplicar cuadrado
       print(resultado)
[23]
     ✓ 0.0s
    [0, 4, 16, 36, 64]
       # Paradigma Funcional
       resultado = list(map(lambda x: x ** 2, # Generar cuadrado de los valores
                   filter(lambda x: x % 2 == 0, # Filtrar valores por modulo 2 (pares)
                                               # Para esta entrada de valores
                   range(10))))
       print(resultado)

√ 0.0s

[24]
    [0, 4, 16, 36, 64]
```





```
tripletes = ["ATG", "GCT", "AAC", "TGC", "AGC", "GTT", "ACA", "TAA", "CAA", "AAG"]
       # Enfoque procedural
       complementos = {'A': 'T', 'T': 'A', 'C': 'G', 'G': 'C'}; resultado = []
       for triplete in tripletes: # Recorrer los tripletes
           if triplete[0] == 'A': # Seleccionar tripletes que comienzan con A
               # Generar la secuencia rev comp
               complementario = "".join([complementos[base] for base in triplete])
               resultado.append(complementario)
       print(resultado)

√ 0.0s

[29]
    ['TAC', 'TTG', 'TCG', 'TGT', 'TTC']
       resultado = list(map(lambda triplete: # Mapeado de con la función lambda
           "".join([complementos[base] for base in triplete]), # Transformar a rev comp
           filter(lambda triplete: triplete[0] == 'A', tripletes))) # Filtrado de tripletes
       print(resultado)
[30]

√ 0.0s

    ['TAC', 'TTG', 'TCG', 'TGT', 'TTC']
```





Aspecto	Procedural	Funcional
Enfoque	Resolución de problemas a través de pasos secuenciales y uso de funciones para dividir tareas.	Transformación de datos mediante funciones puras.
Estado	El estado del programa puede cambiar constantemente mediante variables.	Predica la inmutabilidad; los datos no cambian directamente.
Efectos secundarios	Las funciones pueden modificar variables globales o de otros contextos.	Las funciones no tienen efectos secundarios.
Reutilización de código	Usa funciones para evitar duplicación de código, pero con menor modularidad.	Promueve la reutilización y composibilidad de funciones.
Ejecución	Secuencial, depende del flujo de control (bucles, condicionales).	Basada en la composición y transformación de funciones.





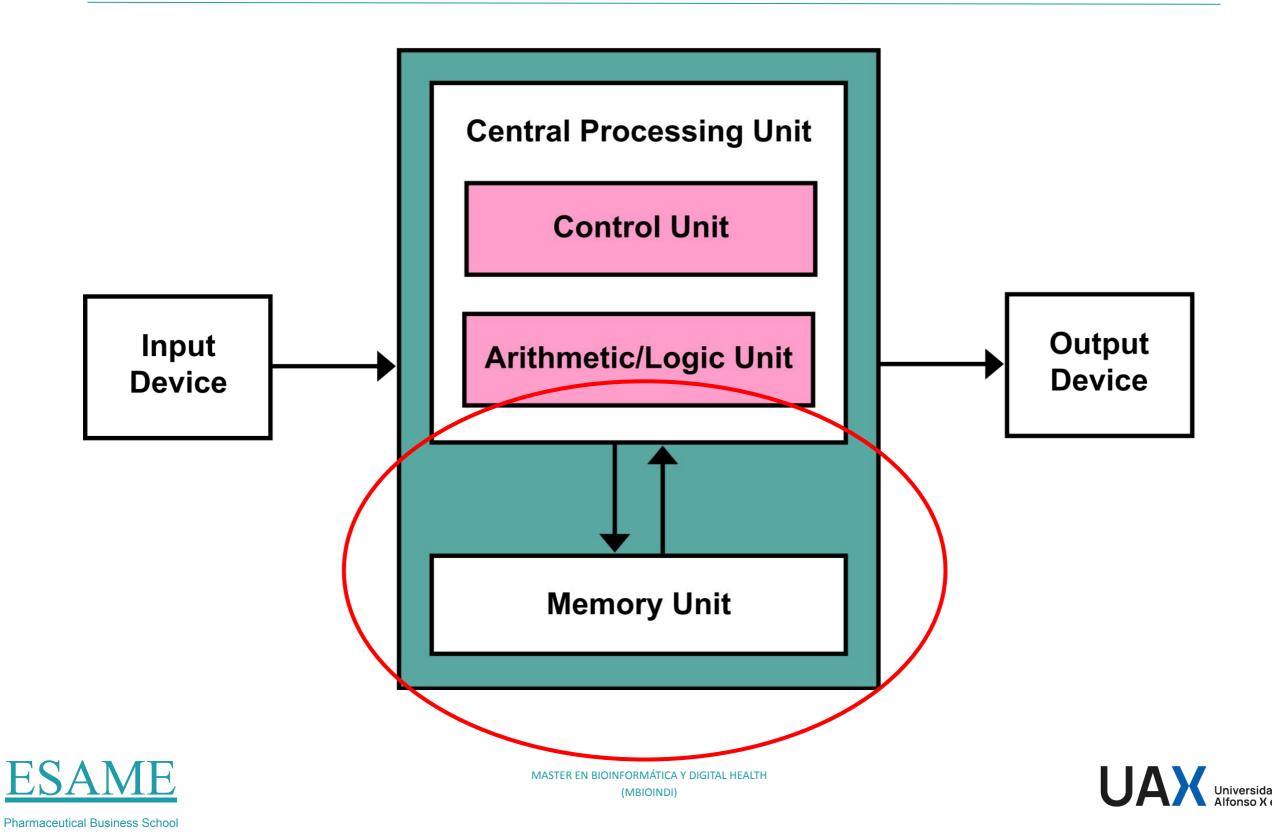
Aspecto	Programación Imperativa	Programación Declarativa
Enfoque	Cómo se debe hacer (paso a paso).	Qué se quiere lograr (resultado deseado).
Control de Flujo	El programador define explícitamente el orden de ejecución.	El sistema decide el orden, basado en el resultado.
Estado	Usa variables y estado mutable.	Favorece la inmutabilidad y evita efectos secundarios.
Ejecución	Secuencial y dependiente de instrucciones.	Evaluación basada en expresiones.

https://en.wikipedia.org/wiki/Comparison of multi-paradigm programming languages





Tipos de variables



Tipo de Variable	Descripción	
int	Números enteros, positivos o negativos, sin decimales.	
float	Números de punto flotante (decimales).	
str	Cadenas de texto.	
bool	Valores lógicos, True o False .	
list	Lista ordenada de elementos, que pueden ser de diferentes tipos.	
tuple	Tupla ordenada e inmutable de elementos.	
dict	Diccionario que almacena pares clave-valor.	
set	Conjunto no ordenado de elementos únicos.	

```
# Inicialización (con asignación); Asignación; Cambio de valor integer = 25; integer = 0; integer += 5; print(integer)

✓ 0.0s
5
```





```
from Bio import Entrez, SeqIO
   # Acceder a genbank, sequencia NC 045512.2
   raw record = Entrez.efetch(db="nucleotide", id="NC 045512.2", rettype="gb", retmode="text")
   registro = SeqIO.read(raw record, "genbank"); print(type(registro))
   # String - Descripción de la secuencia
   print(f"{type(registro.description)}\t{registro.description}")
   # Lista - Listar los identificadores de las características
   lista features = [str(feature.type) for feature in registro.features]
   print(f"{type(lista features)}\t{lista features}")
   # Integer - Longitud total de la secuencia
   print(f"{type(len(registro.seq))}\t{len(registro.seq)}")

√ 1.1s

<class 'Bio.SeqRecord.SeqRecord'>
<class 'str'> Severe acute respiratory syndrome coronavirus 2 isolate Wuhan-Hu-1, complete genome
<class 'list'> ['source', "5'UTR", 'gene', 'CDS', 'mat_peptide', 'mat_peptide', 'mat_peptide', 'mat
               29903
<class 'int'>
```

https://www.ncbi.nlm.nih.gov/nuccore/1798174254





https://www.ncbi.nlm.nih.gov/nuccore/1798174254





```
# Booleano - Verificar si hay un gen de interés en el archivo
   print(type("S" in genes y posiciones)); print("S" in genes y posiciones
   # Tupla - Acceder a la información del gen de interés
   print(type(genes y posiciones['S'])); print(genes y posiciones['S'])
   # Conjunto (set) - Conjunto de los nucleótidos únicos en la secuencia
   print(type(set(registro.seq))); print(set(registro.seq))
 ✓ 0.0s
<class 'bool'>
True
<class 'tuple'>
('[21562:25384](+)', 'spike glycoprotein', 'GU280_gp02')
<class 'set'>
{'T', 'G', 'C', 'A'}
```

https://www.ncbi.nlm.nih.gov/nuccore/1798174254





Tipo de Variable	Descripción	Características Principales	Paquete
DataFrame	Estructura de datos tabular bidimensional con etiquetas en filas y columnas.	 - Permite almacenar diferentes tipos de datos (numeros, texto, booleanos). - Tiene etiquetas para filas y columnas. - Funcionalidad avanzada como selección, filtrado, y operaciones por etiquetas. 	pandas
Array	Estructura de datos multidimensional que almacena elementos del mismo tipo.	The second secon	





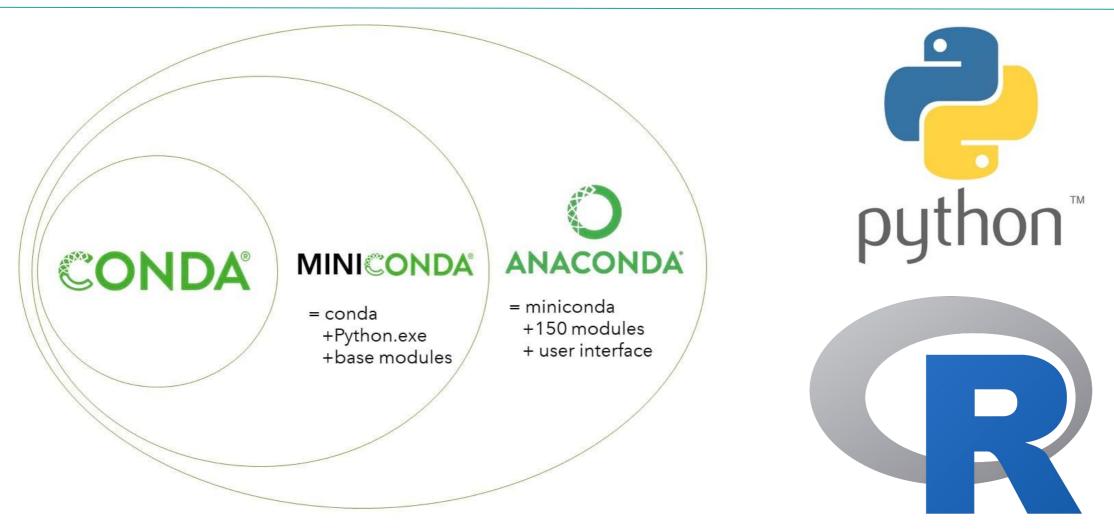
Tipos de variables: R

Tipo de Variable	Descripción	
numeric	Números reales, incluyendo decimales.	
integer	Números enteros. Se definen con la función as .integer() o el sufijo L .	
character	Cadenas de texto.	
logical	Valores lógicos: TRUE o FALSE .	
factor	Datos categóricos que toman un conjunto limitado de valores distintos.	
list	Colección heterogénea de elementos de diferentes tipos.	
vector	Colección homogénea de elementos (todos del mismo tipo).	
matrix	Arreglo bidimensional de elementos homogéneos.	
array	Arreglo multidimensional de elementos homogéneos.	
data.frame	Tabla de datos bidimensional donde las columnas pueden tener diferentes tipos.	





Instalación de Software: conda



Miniconda: https://docs.anaconda.com/miniconda/

Tutorial:

Windows: https://docs.conda.io/projects/conda/en/latest/user-guide/install/windows.html

macOS: https://docs.conda.io/projects/conda/en/latest/user-guide/install/macos.html

Linux: https://docs.conda.io/projects/conda/en/latest/user-guide/install/linux.html

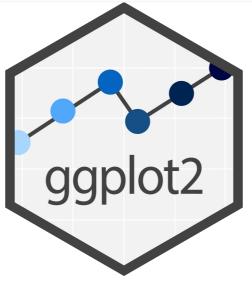




Ejemplos prácticos







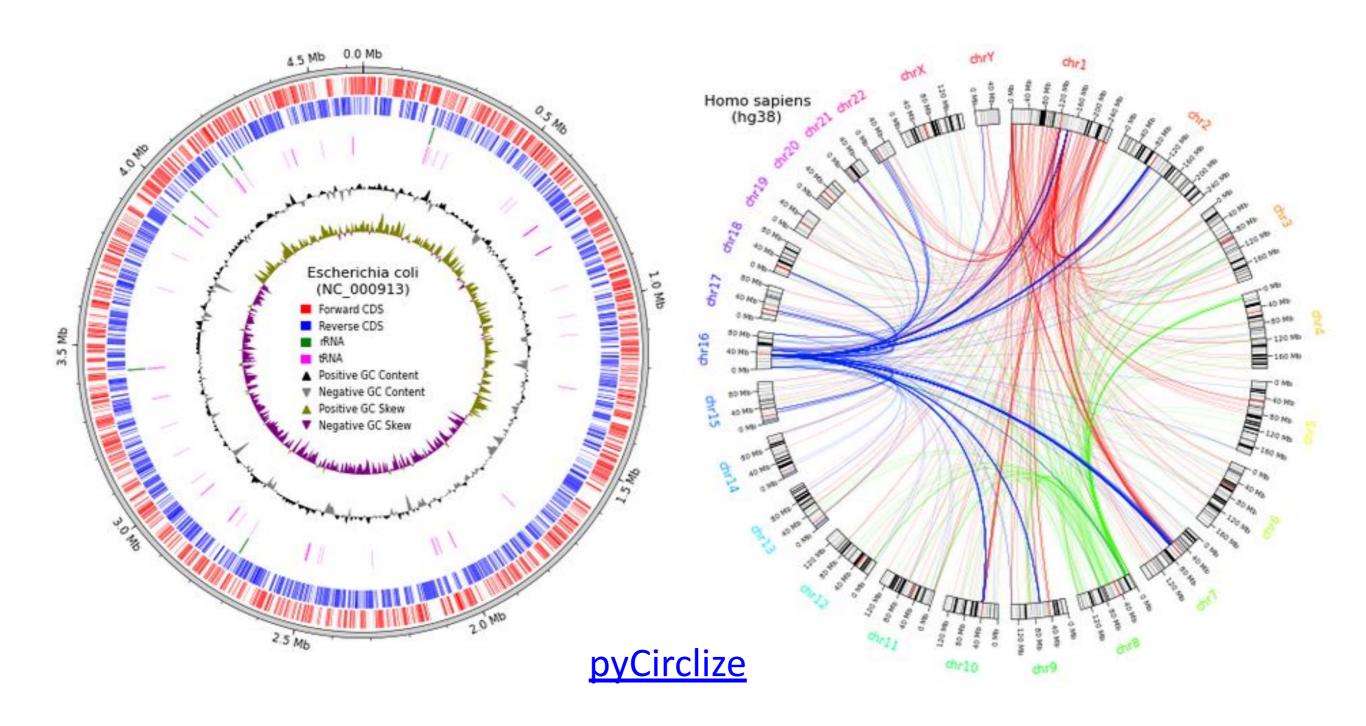


https://github.com/mirodriguezgal/MBIOINDI





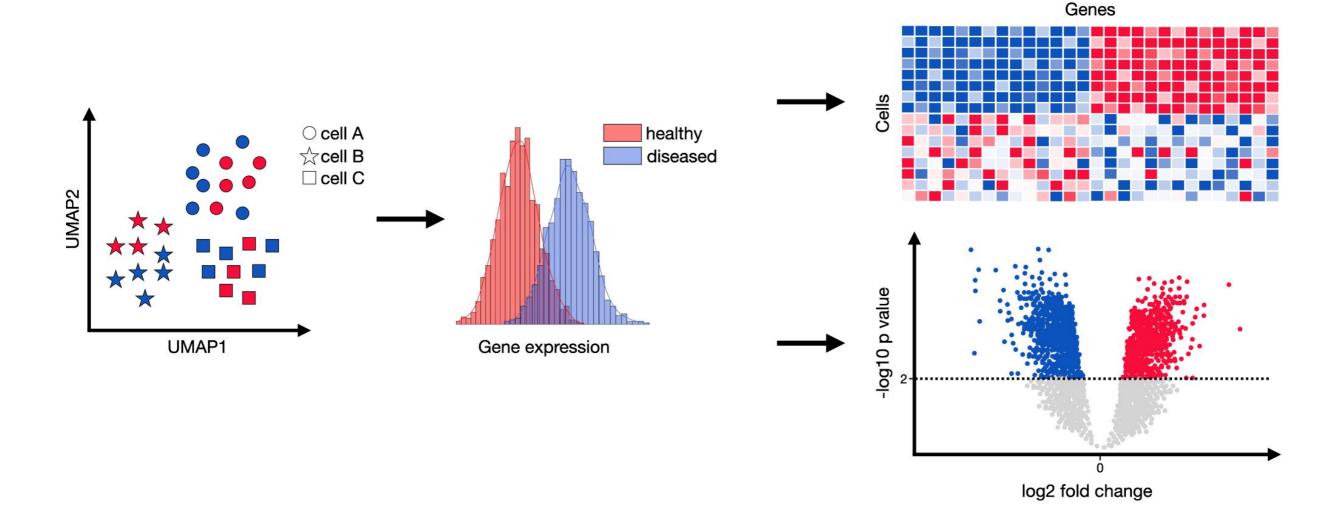
Introducción a la Visualización de Datos







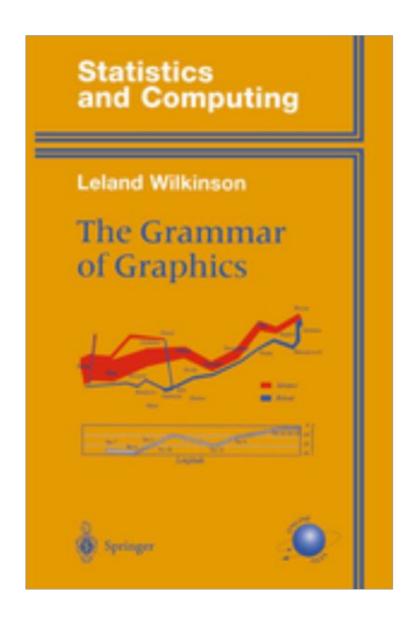
Introducción a la Visualización de Datos

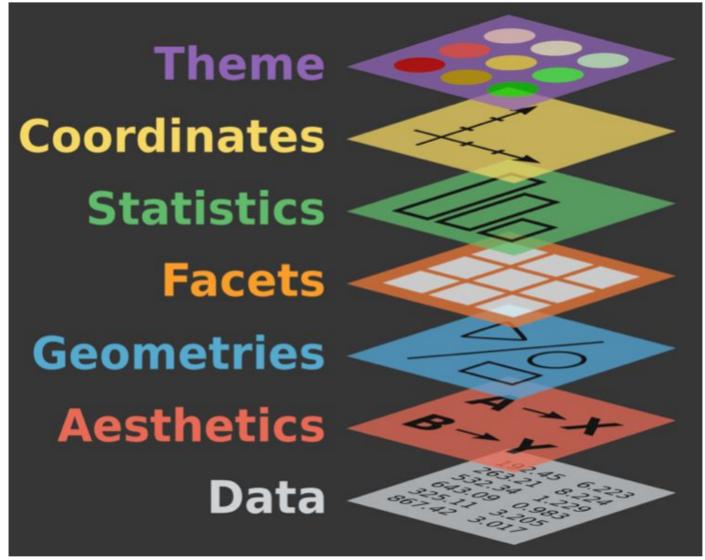






La gramática de los gráficos









La gramática de los gráficos

Describes all the non-data ink
Plotting space for the data
Statistical models & summaries
Rows and columns of sub-plots
Shapes used to represent the data
Scales onto which data is mapped
The actual variables to be plotted

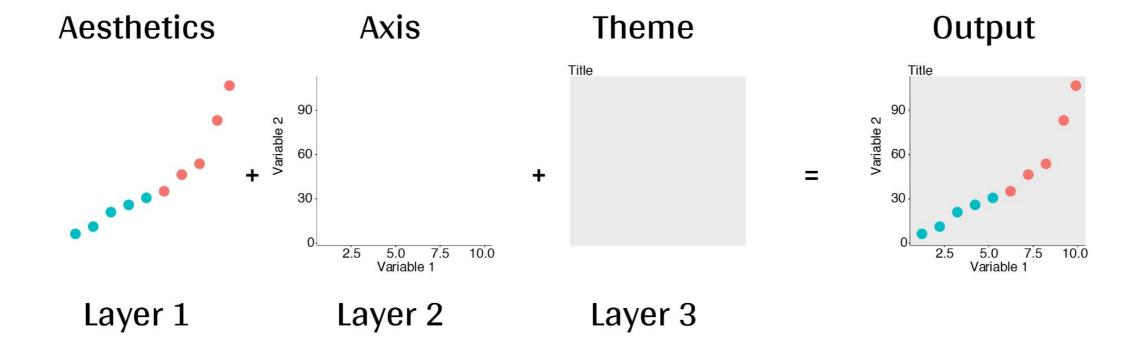
Theme
Coordinates
Statistics
Facets
Geometries
Aesthetics
Data







La gramática de los gráficos







Formatos de tablas de datos

site	species_a	species_b	species_c
site1	11	54	0
site2	23	17	10
site3	7	0	33

CORTO

site	species	count
site1	species_a	11
site1	species_b	54
site1	species_c	0
site2	species_a	23
site2	species_b	17
site2	species_c	10
site3	species_a	7
site3	species_b	0
site3	species_c	33

LARGO





ggplot2

Basics

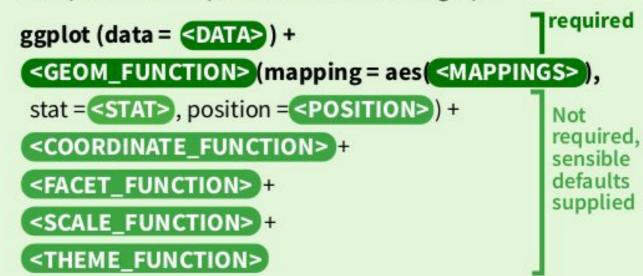
ggplot2 is based on the grammar of graphics, the idea that you can build every graph from the same components: a data set, a coordinate system, and geoms—visual marks that represent data points.



To display values, map variables in the data to visual properties of the geom (aesthetics) like size, color, and x and y locations.



Complete the template below to build a graph.



ggplot(data = mpg, **aes**(x = cty, y = hwy)) Begins a plot that you finish by adding layers to. Add one geom function per layer.

last_plot() Returns the last plot.

ggsave("plot.png", width = 5, height = 5) Saves last plot as 5' x 5' file named "plot.png" in working directory. Matches file type to file extension.





Geometrías comunes

Geometría	Uso	
<pre>geom_point()</pre>	Gráficos de dispersión (scatterplots).	
<pre>geom_line()</pre>	Líneas conectando puntos.	
geom_bar()	Diagramas de barras.	
geom_histogram()	Histogramas.	
geom_boxplot()	Diagramas de caja (boxplots).	
<pre>geom_density()</pre>	Curvas de densidad.	
geom_violin()	Diagramas de violín (variación de boxplot que muestra la densidad).	
geom_tile()	Heatmaps (gráficos de calor).	





Dataset Iris







Iris Setosa

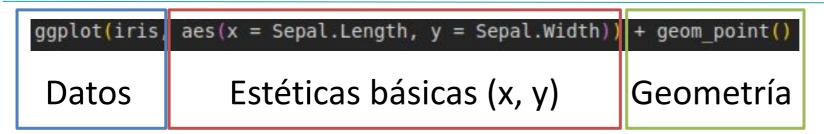


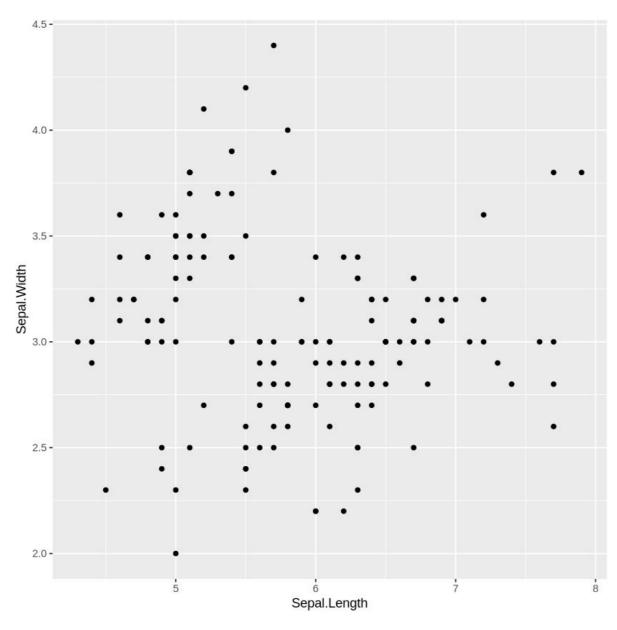
Iris Virginica





Gráfico de dispersión (scatterplot)



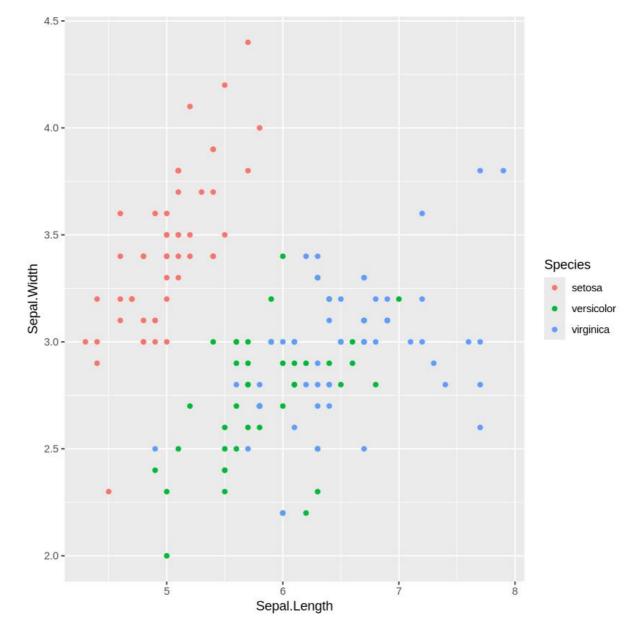






```
pgplot(iris aes(x = Sepal.Length, y = Sepal.Width, color = Species)) + geom_point()

Datos Estéticas (x, y, color) Geometría
```





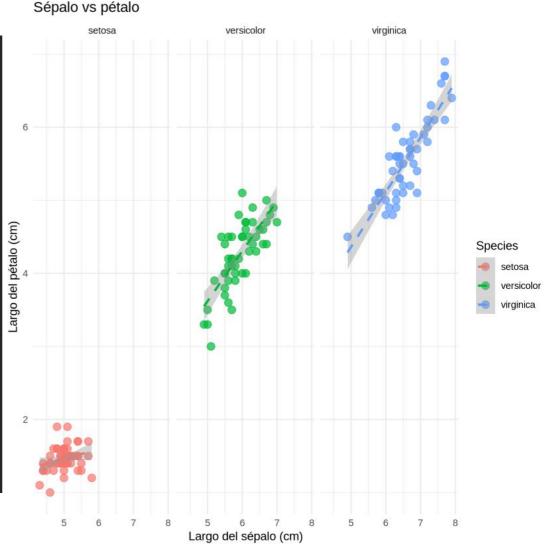


ggplot(iris,	Datos
<pre>aes(x = Sepal.Length, y = Petal.Length, color = Species)) +</pre>	Estéticas
<pre>geom_point(alpha = 0.7, size = 3) +</pre>	Geometría
<pre>geom_smooth(method = "lm", se = TRUE, linetype = "dashed") +</pre>	Estadísticas
facet_wrap(~Species) +	Facetas
labs(title = "Sépalo vs pétalo", x = "Largo del sépalo (cm)", y = "Largo del pétalo (cm)") + theme_minimal()	Temas





```
ggplot(iris,
aes(x = Sepal.Length, y = Petal.Length,
color = Species)) +
geom_point(alpha = 0.7, size = 3) +
geom_smooth(method = "lm", se = TRUE,
linetype = "dashed") +
facet_wrap(~Species) +
labs(title = "Sépalo vs pétalo",
    x = "Largo del sépalo (cm)",
    y = "Largo del pétalo (cm)") +
theme_minimal()
```







ggplot(DNase,	Datos
<pre>aes(x = conc, y = density, color = Run)) +</pre>	Estéticas
<pre>geom_point() +</pre>	Geometría
<pre>geom_smooth(method = "loess", se = TRUE) +</pre>	Estadísticas
scale_x_log10() +	Facetas
facet_wrap(~Run) +	Coordenadas
<pre>labs(y = "Densidad optica", x = "[S] (log10)", title = "[S] vs Densidad optica") + theme_minimal()</pre>	Temas





```
ggplot(DNase,
aes(x = conc, y = density,
color = Run)) +
geom point() +
geom smooth(method = "loess",
se = TRUE) +
scale x log10() +
facet wrap(~Run) +
labs(y = "Densidad óptica",
x = "[S] (log10)",
 title = "[S] vs Densidad óptica") +
theme minimal()
```

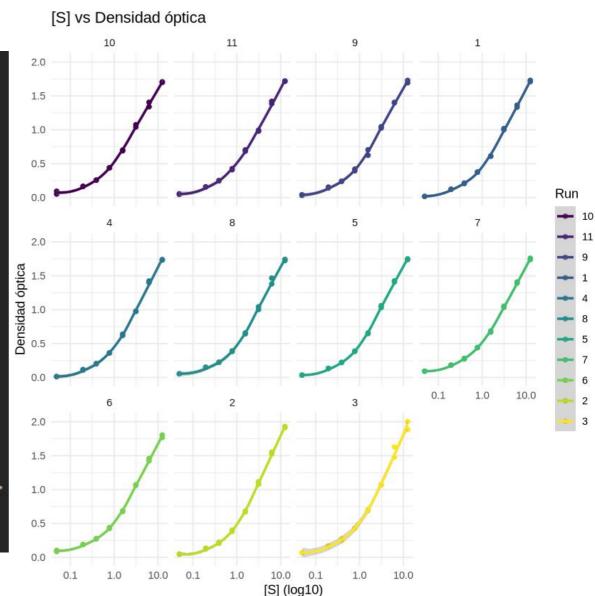
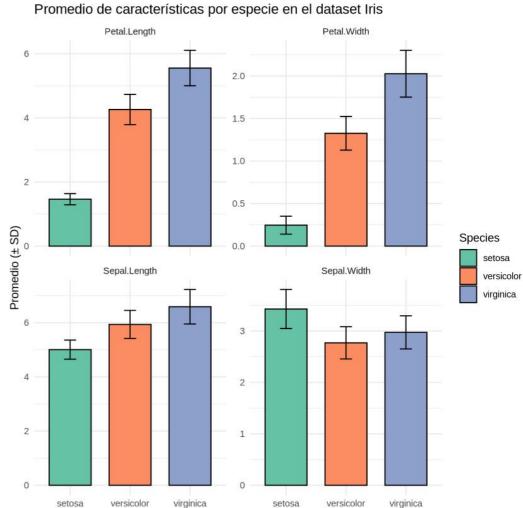






Gráfico de barras (Bar Plot)

```
ggplot(iris_summary,
aes(x = Species, y = mean_value, fill = Species)) +
geom_bar(stat = "identity", position = "dodge",
    color = "black", width = 0.7) +
geom_errorbar(aes(ymin = mean_value - sd_value,
    ymax = mean_value + sd_value),
    position = position_dodge(width = 0.7),
    width = 0.2,
    color = "black") +
facet_wrap(~ Feature, scales = "free_y") +
labs(title = "Promedios en Iris",
    x = "Especie",
    y = "Promedio (± SD)"
    ) + theme_minimal() +
    scale_fill_brewer(palette = "Set2")
```



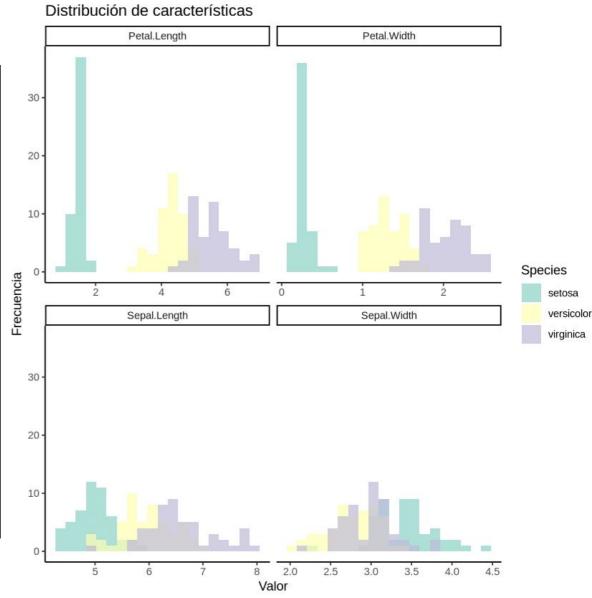
Especie





Distribuciones: histogramas

```
ggplot(iris_long,
aes(x = Value, fill = Species)) +
geom_histogram(
  position = "identity",
  alpha = 0.7, bins = 20) +
facet_wrap(~ Feature,
  scales = "free_x") +
labs(title = "Histogramas de Iris",
  x = "Valor", y = "Frecuencia") +
theme_classic() +
scale_fill_brewer(palette = "Set3")
```







Distribuciones: densidad

 $ggplot(iris_long, aes(x = Value, fill = Species)) + geom_density(alpha = 0.7) + facet_wrap(~ Feature, scales = "free") + labs(title = "Densidades", x = "Valor", y = "Densidad") + theme_minimal() + scale_fill_brewer(palette = "Set1")$

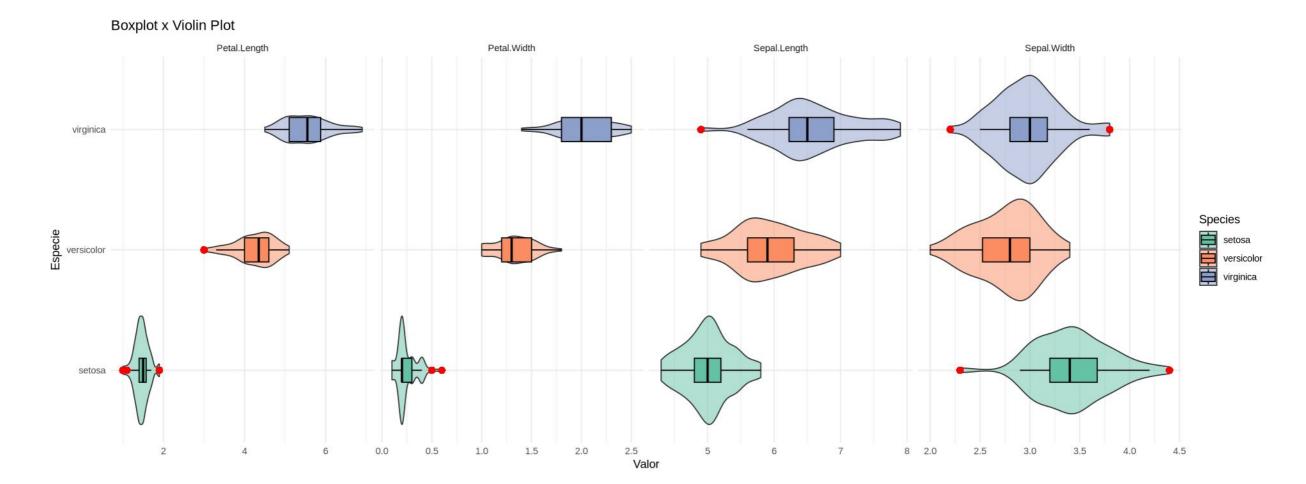
Densidades Petal.Length Petal.Width 2 Species Densidad 0.5 1.0 1.5 setosa Sepal.Width versicolor Sepal.Length virginica 1.2 1.0 0.8 0.5 0.4 2.0 2.5 3.0 3.5 4.0





Distribuciones: cajas y violines

```
ggplot(iris_long, aes(x = Species, y = Value, fill = Species)) +
    geom_violin(alpha = 0.5) + # Actua similar al de densidad
    geom_boxplot(width = 0.2, color = "black", outlier.shape = NA) +
    facet_wrap(~ Feature, scales = "free") +
    labs( title = "Boxplot x Violin Plot", x = "Especie", y = "Valor") +
    theme_minimal() + scale_fill_brewer(palette = "Set2")
```



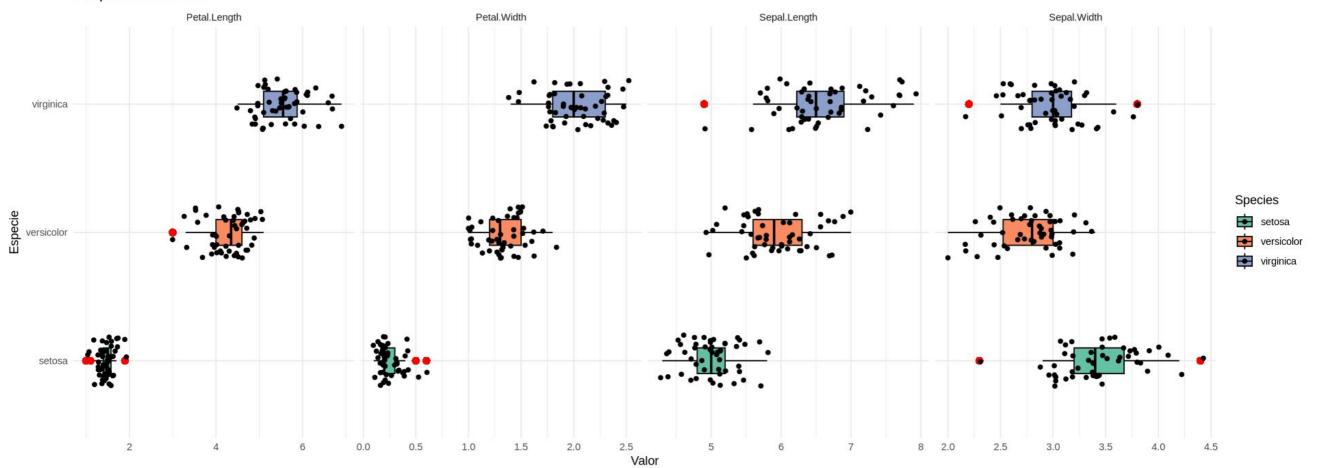




Distribuciones: cajas y 'jitter'

```
ggplot(iris_long, aes(x = Species, y = Value, fill = Species)) +
    geom_boxplot(width = 0.2, color = "black",
    outlier.shape = 16, outlier.colour = "red", outlier.size = 3) +
    geom_jitter(position = position_jitter(0.2)) +
    facet_wrap(~ Feature, scales = "free_x", ncol = 4) + coord_flip() +
    labs( title = "Boxplot x Jitter Plot", x = "Especie", y = "Valor") +
    theme_minimal() + scale_fill_brewer(palette = "Set2")
```

Boxplot x Jitter Plot



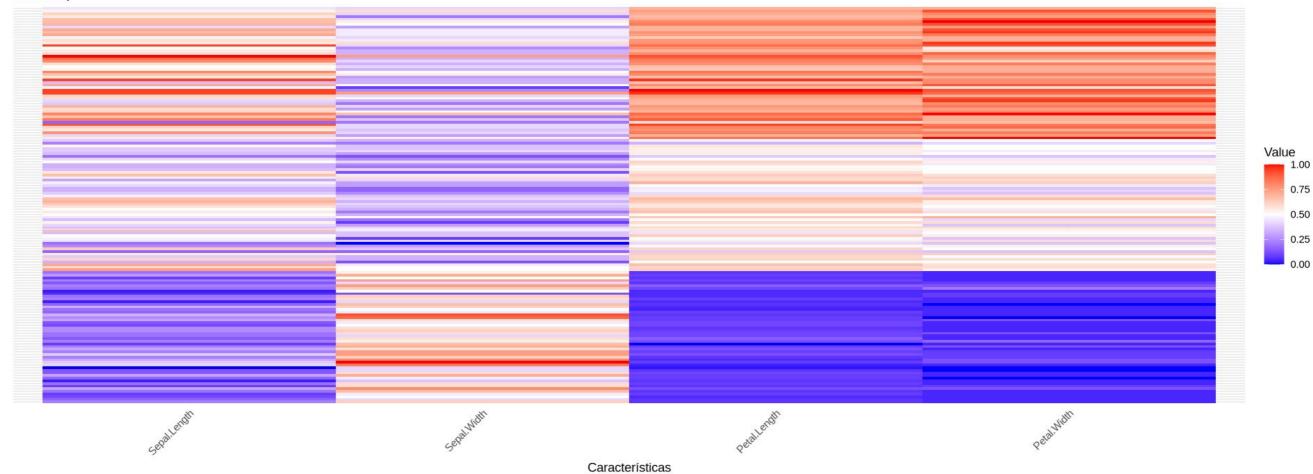




Mapas de calor (heatmap)

```
ggplot(ma_long, aes(x = Variable, y = Species, fill = Value)) + geom_tile() + scale_fill_gradient2(low = "blue",
    high = "red", mid = "white", midpoint = 0.5) + theme_minimal() + theme[axis.text.x = element_text(angle = 45,
    hjust = 1), axis.text.y = element_blank()[] + labs(title = "Heatmap", x = "Caracteristicas", y = "")
```

Heatmap







Ejemplos prácticos



https://github.com/mirodriguezgal/MBIOINDI



