Manipulación de datos en R tidyr y dplyr

Dr. Samuel D. Gamboa Tuz

Tidyverse

• El **tidyverse** es un "meta-paquete", una colección de paquetes de R para ciencia de datos que comparten cierta filosofía, gramática y estructura de datos: "tidydata" (https://www.tidyverse.org/). Los paquetes "core" son:

| Paquete | Descripción |
|---------|--|
| tibble | Alternativa al data frame. |
| readr | Funciones para importar datos. |
| ggplot2 | Creación de gráficos. |
| tidyr | Cambios en la estructura de los datos (tidy). |
| dplyr | Tranformación y manipulación de datos. |
| purrr | Iteración sobre listas. Alternativa a for loops y apply. |
| forcats | Funciones para trabajar con factores. |
| stringr | Funciones para trabajar con caracteres (strings). |

• Los paquetes **magrittr** y **readxl**, entre otros, también se encuentran incluidos al instalar el tidyverse.

2

• Se pueden cargar todos los paquetes del tidyverese con library(tidyverse).

```
library(tidyverse)
## — Attaching packages
                                                    – tidyverse 1.3.0 —
                       ✓ purrr 0.3.4
## ✓ ggplot2 3.3.2
## ✓ tibble 3.0.3
                      ✓ dplvr 1.0.2
## ✓ tidyr 1.1.2
                  ✓ stringr 1.4.0
## ✓ readr 1.3.1
                       ✓ forcats 0.5.0
## — Conflicts -
                                                tidyverse_conflicts() —
## x dplyr::filter() masks stats::filter()
## x dplyr::lag() masks stats::lag()
search()
  Γ1] ".GlobalEnv"
                           "package:forcats"
                                              "package:stringr"
##
                                              "package: readr"
## [4] "package:dplyr"
                           "package:purrr"
## [7] "package:tidyr"
                           "package:tibble"
                                              "package:ggplot2"
                                              "package:stats"
## [10] "package:tidyverse" "tools:rstudio"
                           "package:grDevices" "package:utils"
## [13] "package:graphics"
## [16] "package:datasets"
                           "package:methods"
                                              "Autoloads"
## [19] "package:base"
```

• También se puede instalar y cargar cada paquete de manera individual si así se requiere.

magrittr - piping en R

- El paquete magrittr instala unos operadores tipo pipe (como el "|" de la terminal de linux). Buena alternativa para escribir funciones anidadas.
- El pipe más popular de magrittr es %>%, su shortcut en Rsutdio es Ctrl + Shit + M.

```
x < - rep(1:3, 100)
 x %>%
  head() %>%
   unique() %>%
   as.character()
## [1] "1" "2" "3"
```

Ayuda considerablemente a la legibilidad del código.

tidyr

pivot_longer, pitov_wider, separate, unite

Tidydata

- Cada variable va en una columna.
- Cada observación va en una fila.
- Cada valor tiene su propia celda.

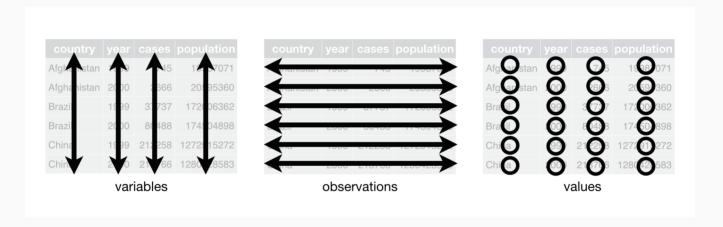


Figura tomada de https://r4ds.had.co.nz/

pivot_longer - Cambiar a formato largo

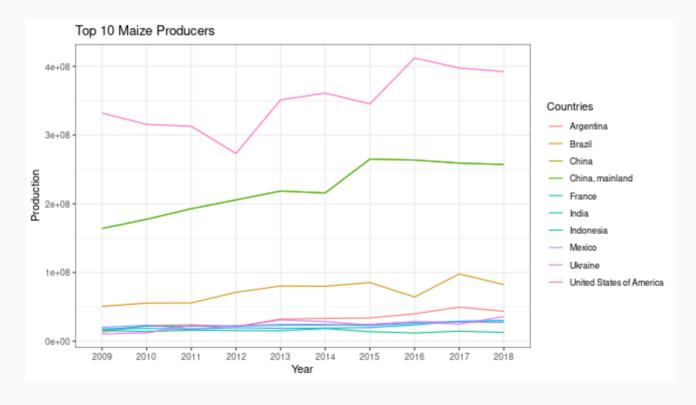
• Los valores de una sola variable pueden estar dispersas en varias columnas (formato ancho):

```
maize_data <- readxl::read_excel("datasets.xlsx", sheet = 1)</pre>
 maize_data
## # A tibble: 10 x 11
     Area `2009` `2010` `2011` `2012` `2013` `2014` `2015` `2016`
     <chr> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <</pre>
##
    1 Arge... 1.31e7 2.27e7 2.38e7 2.12e7 3.21e7 3.31e7 3.38e7 3.98e7
   2 Braz... 5.07e7 5.54e7 5.57e7 7.11e7 8.03e7 7.99e7 8.53e7 6.42e7
   3 China 1.64e8 1.78e8 1.93e8 2.06e8 2.19e8 2.16e8 2.65e8 2.64e8
   4 Chin... 1.64e8 1.77e8 1.93e8 2.06e8 2.18e8 2.16e8 2.65e8 2.64e8
##
   5 Fran... 1.55e7 1.40e7 1.59e7 1.54e7 1.50e7 1.83e7 1.37e7 1.18e7
##
   6 India 1.67e7 2.17e7 2.18e7 2.23e7 2.43e7 2.42e7 2.26e7 2.59e7
   7 Indo... 1.76e7 1.83e7 1.76e7 1.94e7 1.85e7 1.90e7 1.96e7 2.36e7
   8 Mexi... 2.01e7 2.33e7 1.76e7 2.21e7 2.27e7 2.33e7 2.47e7 2.83e7
   9 Ukra... 1.05e7 1.20e7 2.28e7 2.10e7 3.09e7 2.85e7 2.33e7 2.81e7
## 10 Unit... 3.32e8 3.16e8 3.13e8 2.73e8 3.51e8 3.61e8 3.45e8 4.12e8
## # ... with 2 more variables: `2017` <dbl>, `2018` <dbl>
```

• Con pivot_longer() las podemos transformar a formato largo para poder graficar con ggplot2 (antes era gather()).

```
## # A tibble: 100 x 3
##
    Area
          Year Production
   <chr> <fct>
                         <dbl>
##
   1 Argentina 2009
##
                      13121380
##
   2 Argentina 2010
                      22663095
   3 Argentina 2011
##
                      23799830
##
   4 Argentina 2012
                     21196637
##
   5 Argentina 2013
                     32119211
##
   6 Argentina 2014
                      33087165
   7 Argentina 2015
                     33817744
##
   8 Argentina 2016
                      39792854
##
##
   9 Argentina 2017
                     49475895
## 10 Argentina 2018
                     43462323
## # ... with 90 more rows
```

• Ahora ya podemos graficar con ggplot2:



pivot_wider() - cambiar a formato ancho

 Supongamos que queremos visualizar los datos anteriores como un heatmap agrupado, podemos regresar los datos al formato ancho con pivot_wider() (antes era spread()).

```
maize_data_wide <- maize_data_long %>%
   pivot_wider(names_from = "Year", values_from = "Production")
 maize_data_wide
## # A tibble: 10 x 11
##
     Area `2009` `2010` `2011` `2012` `2013` `2014` `2015` `2016`
     <chr> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <</pre>
   1 Arge... 1.31e7 2.27e7 2.38e7 2.12e7 3.21e7 3.31e7 3.38e7 3.98e7
   2 Braz... 5.07e7 5.54e7 5.57e7 7.11e7 8.03e7 7.99e7 8.53e7 6.42e7
##
    3 China 1.64e8 1.78e8 1.93e8 2.06e8 2.19e8 2.16e8 2.65e8 2.64e8
##
    4 Chin... 1.64e8 1.77e8 1.93e8 2.06e8 2.18e8 2.16e8 2.65e8 2.64e8
   5 Fran... 1.55e7 1.40e7 1.59e7 1.54e7 1.50e7 1.83e7 1.37e7 1.18e7
   6 India 1.67e7 2.17e7 2.18e7 2.23e7 2.43e7 2.42e7 2.26e7 2.59e7
   7 Indo... 1.76e7 1.83e7 1.76e7 1.94e7 1.85e7 1.90e7 1.96e7 2.36e7
##
##
   8 Mexi... 2.01e7 2.33e7 1.76e7 2.21e7 2.27e7 2.33e7 2.47e7 2.83e7
   9 Ukra... 1.05e7 1.20e7 2.28e7 2.10e7 3.09e7 2.85e7 2.33e7 2.81e7
## 10 Unit... 3.32e8 3.16e8 3.13e8 2.73e8 3.51e8 3.61e8 3.45e8 4.12e8
## # ... with 2 more variables: `2017` <dbl>, `2018` <dbl>
```

Paréntesis: covertir de tibble a matrix

- Por lo general, el input para un heatmap es una matriz, no un data frame o tibble.
- Para ello es necesario convertir con as.matrix(), pero no se puede hacer en un solo call desde un tibble porque no reconoce rownames:

```
maize_data_matrix <- as.matrix(maize_data_wide[,-1]) # Matriz
rownames(maize_data_matrix) <- maize_data_wide[[1]] # Nombres
maize_data_matrix %>% class()
```

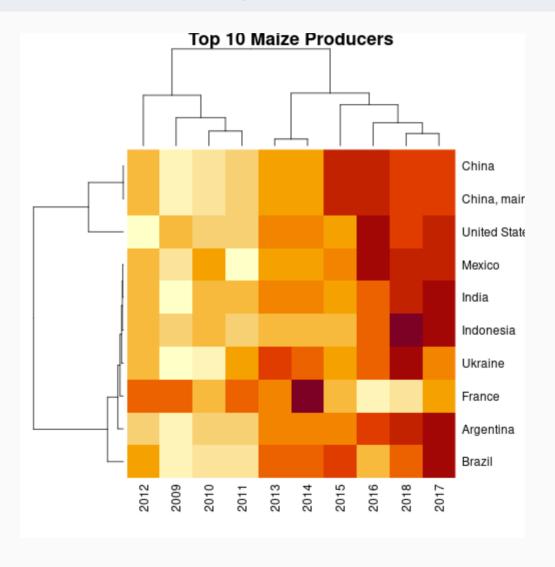
```
## [1] "matrix" "array"
```

```
maize_data_matrix %>% head(4)
```

```
##
                     2009
                              2010
                                       2011
                                                2012
## Argentina
                 13121380 22663095 23799830 21196637
## Brazil
                 50719822 55364271 55660235 71072810
## China
               164107560 177540788 192904232 205719284
## China, mainland 163974000 177425000 192781000 205614100
##
                     2013
                              2014
                                        2015
                                                2016
## Argentina
                 32119211 33087165 33817744 39792854
## Brazil 80273172 79881614 85283074 64188314
## China
                 218621905 215812100 265157307 263777750
## China, mainland 218489000 215646300 264992000 263613000
##
                     2017
                              2018
## Argentina 49475895 43462323
## Brazil
                  97910658 82288298
```

• Ejemplo de heatmap:

heatmap(maize_data_matrix, main = "Top 10 Maize Producers")



Separar columnas con separate()

• En el siguiente ejemplo, podemos separar la columna "species" en las columnas "genera" y "species" con separate():

```
plants <- readxl::read_excel("datasets.xlsx", sheet = 2)</pre>
plants %>% head(3)
## # A tibble: 3 x 4
## group group_color species
                                                  genome_size
  <chr> <chr> <chr>
                                                        <dbl>
##
## 1 Green algae #8f9a9b Chlamydomonas reinhardtii
                                                         110
## 2 Green algae #8f9a9b Volvox carteri
                                                         138
## 3 Bryophytes #008933
                      Physcomitrella patens
                                                         472
plants_separated <- plants %>%
  separate(species, c("genera", "species"), sep = " ", remove = TRUE)
plants_separated %>% head(3)
## # A tibble: 3 x 5
##
    group group_color genera
                                        species
                                                   genome_size
## <chr> <chr>
                          <chr>
                                      <chr>
                                                        <dbl>
## 1 Green algae #8f9a9b Chlamydomonas reinhardtii
                                                          110
## 2 Green algae #8f9a9b Volvox
                                        carteri
                                                         138
## 3 Bryophytes #008933
                         Physcomitrella patens
                                                          472
```

Unir columnas con unite()

Podermos unir las columnas de nuevo con unite():

```
plants_separated %>%
   unite("species", c("genera", "species"), sep = " ", remove = TRUE)
## # A tibble: 35 x 4
##
                      group_color species
                                                         genome_size
     group
   <chr>
                      <chr>
                                  <chr>
                                                               <dbl>
##
                     #8f9a9b
                                  Chlamydomonas reinhar...
   1 Green algae
                                                                 110
   2 Green algae
                    #8f9a9b
                                  Volvox carteri
                                                                 138
   3 Bryophytes
                                  Physcomitrella patens
##
                     #008933
                                                                 472
##
   4 Bryophytes
                      #008933
                                  Selaginella moellendo...
                                                                 100
   5 Basal Angiospe... #a52a2a
                                  Amborella trichopoda
                                                                 870
##
                                  Cinnamomum kanehirae
   6 Magnoliids
                      #ff8330
##
                                                                 823
   7 Monocots
                                  Zostera marina
##
                      #00d958
                                                                 202
   8 Monocots
                     #00d958
                                  Lemna minor
##
                                                                 481
##
   9 Monocots
                 #00d958
                                  Spirodela polyrhiza
                                                                 158
## 10 Monocots
                     #00d958
                                  Xerophyta viscosa
                                                                 295
## # ... with 25 more rows
```

dplyr

filter and select, arrange, mutate, group_by, summarise, join

Subset con filter() y select()

- dplyr tiene dos funciones que pueden ayudarte a filtrar filas y seleccionar columnas como si estuvieras haciendo un subset, pero de manera más clara y versátil.
- Carguemos los datos crudos del dataset de palmer penguins:

```
penguins_filename <- paste0("https://raw.githubusercontent.com/",</pre>
                              "rfordatascience/tidytuesday/master/data/",
                              "2020/2020-07-28/penguins_raw.csv")
 penguins_raw <- read_csv(penguins_filename)</pre>
 penguins_raw %>% head(5)
## # A tibble: 5 x 17
   studyName `Sample Number` Species Region Island Stage
     <chr>
                          <dbl> <chr> <chr> <chr> <chr>
##
## 1 PAL0708
                              1 Adelie... Anvers Torge... Adul...
                              2 Adelie... Anvers Torge... Adul...
## 2 PAL0708
                              3 Adelie... Anvers Torge... Adul...
## 3 PAL0708
                              4 Adelie... Anvers Torge... Adul...
## 4 PAL0708
                              5 Adelie... Anvers Torge... Adul...
## 5 PAL0708
## # ... with 11 more variables: `Individual ID` <chr>, `Clutch
       Completion` <chr>, `Date Egg` <date>, `Culmen Length
      (mm) ' <dbl>, 'Culmen Depth (mm) ' <dbl>, 'Flipper Length
## #
## # (mm) ' <dbl>, 'Body Mass (g) ' <dbl>, Sex <chr>, 'Delta 15 N
      (o/oo) <dbl>, 'Delta 13 C (o/oo) <dbl>, Comments <chr>
## #
```

- El dataset contiene varias columnas que no nos serían útil y en la columa "Sex" hay algunos valores con NA. Filtremos esos valores y seleccionemos solo las columnas que necesitamos.
- Con base R podría ser:

```
## # A tibble: 3 x 9
     `Sample Number` Species Island `Date Egg` `Culmen Length ...
##
               <dbl> <chr> <chr> <date>
##
                                                           <dbl>
## 1
                   1 Adelie... Torge... 2007-11-11
                                                           39.1
                   2 Adelie... Torge... 2007-11-11
## 2
                                                         39.5
                   3 Adelie... Torge... 2007-11-16
## 3
                                                          40.3
## # ... with 4 more variables: `Culmen Depth (mm)` <dbl>, `Flipper
      Length (mm) ' <dbl>, 'Body Mass (g)' <dbl>, Sex <chr>
## #
```

• Con dplyr podría ser:

```
penguins2 <- penguins_raw %>%
   filter(!is.na(Sex)) %>%
   select("Sample Number", "Species", "Island", "Date Egg",
          \mathsf{matches}("(\mm\\))|\\(g\\)"), "Sex") #tidyselect
 penguins2 %>% head(3)
## # A tibble: 3 x 9
   `Sample Number` Species Island `Date Egg` `Culmen Length ...
               <dbl> <chr> <dhr> <date>
##
                                                           <dbl>
                   1 Adelie... Torge... 2007-11-11
## 1
                                                           39.1
## 2
                   2 Adelie... Torge... 2007-11-11
                                                           39.5
## 3
                   3 Adelie... Torge... 2007-11-16
                                                            40.3
## # ... with 4 more variables: `Culmen Depth (mm)` <dbl>, `Flipper
```

Con dplyr también puede ser fácil renombrar:

Length (mm) ' <dbl>, 'Body Mass (g)' <dbl>, Sex <chr>

```
penguins <- penguins2 %>% rename(
   Sample = "Sample Number", Date = "Date Egg",
   Culm_len = "Culmen Length (mm)", Culm_dep = "Culmen Depth (mm)",
   Flip_len = "Flipper Length (mm)", Mass = "Body Mass (g)")
   names(penguins)

## [1] "Sample" "Species" "Island" "Date" "Culm_len"
## [6] "Culm_dep" "Flip_len" "Mass" "Sex"
```

Reordena las filas con arrange()

Podemos invertir el orden de las muestras con:

Podemos ordenar de acuerdo a varias variables con:

```
penguins_reordered <- penguins %>%
  arrange(Sex, Culm_len)
penguins_reordered %>% head(3)

## # A tibble: 3 x 9
```

```
## Sample Species Island Date Culm_len Culm_dep Flip_len
## <dbl> <chr> <chr> <date> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> <dbl> 143 Adelie... Dream 2009-11-16 32.1 15.5 188
## 2 99 Adelie... Dream 2008-11-10 33.1 16.1 178
## 3 71 Adelie... Torge... 2008-11-14 33.5 19 190
## # ... with 2 more variables: Mass <dbl>, Sex <chr>
```

Modifica o crea nuevas variables con mutate()

• mutate() puede utilizarse para modificar o crear varias variables a la vez:

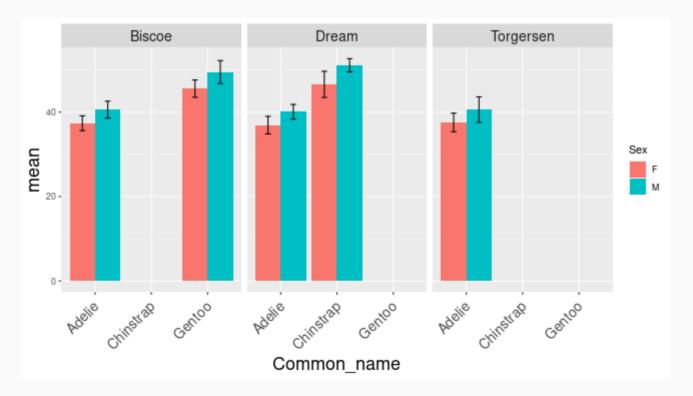
group_by y summarise()

Podermos crear resúmenes de nuestros datos (media, desviación estándar, etc.)
 por grupos combinando group_by() y summarise():

```
penguins_summary <- penguins %>%
  group_by(Island, Common_name, Sex) %>%
  summarise(
    mean = mean(Culm_len, na.rm = TRUE),
    sd = sd(Culm_len, na.rm = TRUE),
    n = n()
    ) %>%
  ungroup() # No olvidar ungroup()
penguins_summary %>% head(5)
```

```
## # A tibble: 5 x 6
##
  Island Common_name Sex
                                  sd
                           mean
  <chr> <chr> <chr> <chr> <dbl> <dbl> <int>
##
## 1 Biscoe "Adelie "
                           37.4 1.76
                                       22
## 2 Biscoe "Adelie " M
                          40.6 2.01
                                       22
## 3 Biscoe "Gentoo " F
                          45.6 2.05 58
## 4 Biscoe "Gentoo " M
                          49.5 2.72
                                     61
## 5 Dream "Adelie " F
                           36.9 2.09
                                       27
```

Ahora podemos graficar los datos fácilmente con ggplot2:



count()

- Si únicamente queremos contar los elmentos por grupo, podemos usar count().
- Es un shortcut de group_by() %>% summarise(n = n()) %>% ungroup():

```
penguins %>%
  count(Island, Common_name, Sex)
```

```
## # A tibble: 10 x 4
     Island
##
               Common_name
                           Sex
                                     n
     <chr>
               <chr> <chr> <int>
##
             "Adelie "
   1 Biscoe
                                    22
   2 Biscoe
              "Adelie "
                                    22
##
              "Gentoo "
   3 Biscoe
##
                                    58
   4 Biscoe
               "Gentoo "
##
                                    61
               "Adelie "
                                    27
##
   5 Dream
##
   6 Dream
               "Adelie "
                                    28
   7 Dream
               "Chinstrap "
##
                                    34
               "Chinstrap " M
## 8 Dream
                                    34
   9 Torgersen "Adelie "
                                    24
## 10 Torgersen "Adelie "
                                    23
```

Uniendo datasets con *_join()

 A veces tenemos dos datasets con diferente tipo de información pero relacionados por una o más variables. Por ejemplo, resultados de una búsqueda con ncbi-blast:

• ...y datos de las especies (en este caso plantas) de las secuencias:

```
species_data <- readxl::read_excel("datasets.xlsx", sheet = "PLANTS2")
head(species_data, 2)

## # A tibble: 2 x 4

## sp group group_color species

## <chr> <chr> <chr> <chr> ## 1 crei Green algae #8f9a9b Chlamydomonas reinhardtii

## 2 vcar Green algae #8f9a9b Volvox carteri
```

• Antes de unir, el resultado de blast necesita unas modificaciones:

1) Remover duplicados:

```
blast_output %>%
  count(subject) %>%
   arrange(desc(n)) %>% head(3)
## # A tibble: 3 x 2
  subject
##
                        n
   <chr>
##
                    <int>
## 1 spe_01g035900.1
## 2 ach_Achn067781
## 3 cchi_rna34811
 blast_output <- blast_output %>%
  group_by(subject) %>%
   slice_max(identity) %>%
  ungroup()
 head(blast_output, 3)
## # A tibble: 3 x 4
    subject
                         identity evalue score
##
    <chr>
                            <dbl> <dbl> <dbl>
##
## 1 aal_AALBA5B1011210P1 45.6 7.41e- 9 56.2
## 2 aal_AALBA5B1054303P1 46.9 1.66e-51 172
                             51.5 8.68e-32 118
## 3 aar_AA147G00007
```

```
blast_output %>%
  count(subject) %>%
  arrange(desc(n)) %>% head(3)
```

2) Crear un identificador único para unir con la columna "sp" de species_data:

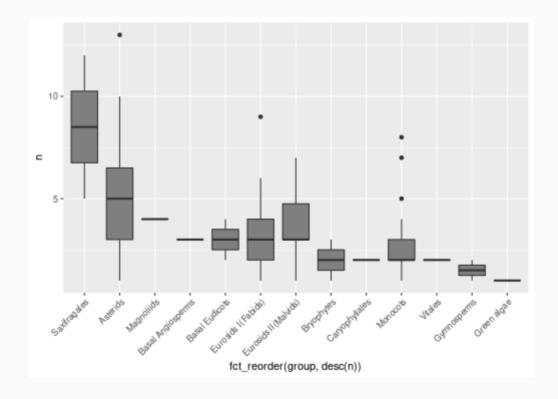
```
blast_output <- blast_output %>%
  mutate(id = str_extract(subject, "^....") %>% str_remove("_$")) %>%
  select(id, everything())
head(blast_output, 3)
```

 Ahora podemos añadir los datos de las especies a las secuencias que encontramos por blast:

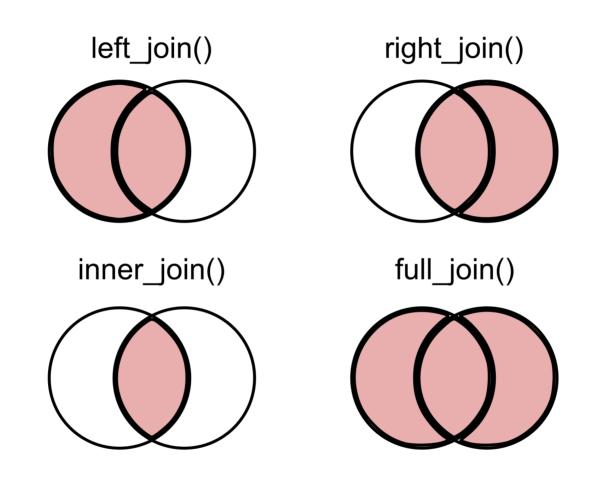
```
## # A tibble: 470 x 8
##
     id
           subject identity evalue score group group_color
   <chr> <chr> <dbl> <dbl> <dbl> <chr> <chr>
##
##
   1 aal
           aal_AA... 45.6 7.41e- 9 56.2 Gymn... #b5b35c
                                         Gymn... #b5b35c
##
   2 aal
           aal_AA... 46.9 1.66e-51 172
##
   3 aar
           aar_AA... 51.5 8.68e-32 118 Euro... #e80060
   4 aar
                    58.2 1.51e-63 202 Euro... #e80060
##
           aar_AA…
##
   5 aar
           aar_AA... 51.3 1.06e-52 176
                                         Euro... #e80060
##
   6 ach
           ach_Ac...
                    55.7 1.59e-22 100 Aste... #00ccb4
##
   7 ach
           ach_Ac...
                     48.1 6.64e-24 102 Aste... #00ccb4
##
   8 ach
           ach_Ac... 26.1 1.70e+ 0 35.8 Aste... #00ccb4
##
   9 ach
           ach_Ac... 57.6 4.94e-43 148 Aste... #00ccb4
                    58.2 6.97e-25 104 Aste... #00ccb4
## 10 ach
           ach_Ac...
## # ... with 460 more rows, and 1 more variable: species <chr>
```

• ... y podemos ver cuantas secucencias obtuvimos por especie o grupo:

```
joined_data %>%
  count(group, species) %>%
  ggplot(aes(fct_reorder(group, desc(n)), n)) +
  geom_boxplot(fill = "gray50") +
  theme(axis.text.x = element_text(angle = 45, hjust = 1))
```



Hay otros tipos de join

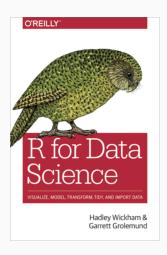


Actividades recomendadas

- ¿Cómo se utilizan las funciones complete() y fill() del paquete tidyr para lidiar con NAs?
- Investiga sobre grouped mutates.
- Investiga acerca tidyselect.
- Compara casen_when() (dplyr) con ifelse() (base).
- Investiga bind_rows() y bind_cols().
- Investiga sobre el paquete **stringr** y expresiones regulares en R para manipular datos de tipo *character*.
- Practica con los diferentes tipos de *join_().

Bibliografía recomendada

R for data Science - Hadley Wickham



Capítulos 5, 12 y 13

https://r4ds.had.co.nz/