

PAC3 Desenvolupament del treball - Fase 2

Vasyl Druchkiv

Estudiant del Màster de Bioestadística i Bioinformàtica

20 de Maig 2019

Índice

1	Descripció de l'avenç del projecte	1
1.1	Instal·lació de l'aplicació	1
1.2	Manual i les ajudes del programa	3
1.3	Memoria	7
2	Grau de compliment dels objectius.	7
	Biblilografia	8

1 Descripció de l'avenç del projecte

El comentari del professor després de la primera PAC incloïa els punts següents:

- Pensar en la memòria on he d'explicar els mètodes que utilitzo;
- Pensar en el manual i les ajudes del programa. És fonamental que sigui el més autoexplicatiu possible;
- Preparar un instal·lador de forma que no calgui entrar en el codi. De fet alguns paquets no s'instal·len com els altres i això fa que l'execució de l'app no sigui immediata.

Els punts són importants i van definir el full de ruta de la PAC actual. Explico punt per punt el que he pogut fer per realitzar aquests punts.

1.1 Instal·lació de l'aplicació

La solució més plausible i ràpida era empaquetar tota l'aplicació dins d'un paquet R i fer-la disponible d'aquesta manera en el GitHub. Hi havia també dues opcions més:

- Publicar l'aplicació a CRAN
- Publicar l'aplicació en un servidor Shiny

La primera opció, la publicació en CRAN, no l'he contemplat encara, perquè la solució no és immediata, sino és un procés que no és fàcil i pot tardar fins que el paquet estigui publicat amb èxit. Com comenta [Wickham, 2015] “submitting to CRAN is a lot more work than just providing a version on github, but the vast majority of R users do not install packages from github, because CRAN provides discoverability, ease of installation and a stamp of authenticity. The CRAN submission process can be frustrating, but it's worthwhile...”. Normalment els paquets han d'estar en perfectes condicions abans d'entregar-los i seran revisats manualment per un equip de voluntaris. D'aquesta manera l'aplicació no seria avaluable dins del marc temporal previst per al treball de màster. A més a més considero que podria millorar encara més l'aplicació abans d'entregar-lo.

La segona opció, la publicació via Shiny Server, és molt interessant, però implicaria un treball considerable per configurar el servidor. Com que ho faria per primera vegada, no puc assegurar que tot estaria preparat a temps. A més a més encara tinc pendants la redacció del manual (que explicaré més endavant) i de la memòria.

Per tant, el paquet **PathwayApp** es pot instal·lar des del repositori GitHub seguint els passos següents:

1. Instal·lar, si encara no està fet, la versió actual de R;
2. Instal·lar, si encara no està fet, el Bioconductor;
3. Instal·lar, si encara no està fet, el paquet **devtools**

```
install.packages( ' ' devtools ' ' )  
library( devtools )
```

4. Instal·lar el paquet **PathwayApp**

```
devtools :: install_github( "vdruchkiv/TFM/5_Packages/PathwayApp/PathwayApp" )
```

5. Iniciar l'aplicació

```
PathwayApp :: runPathwayApp( )
```

La funció **runPathwayApp()** iniciarà la comprovació dels paquets necessaris i començarà l'aplicació. Els paquets següents seran instal·lats, si no ho són encara:

Paquet	Font
clusterProfiler	Bioconductor
ReactomePA	Bioconductor
pathview	Bioconductor
pathviewPatched	GitHub vdruchkiv/TFM
dplyr	CRAN
ggplot2	CRAN
knitr	CRAN
kableExtra	CRAN
formattable	CRAN
shiny	CRAN
shinydashboard	CRAN
shinyhelper	CRAN
shinycssloaders	CRAN

1.2 Manual i les ajudes del programa

Per facilitar l'ús de l'aplicació he pensat com es podria fer de manera més intuïtiva possible. Primer cal destacar que com a llengua de manual he elegit l'anglès per poder fer l'ús de l'aplicació el més inclusiu possible. Segon, l'usuari pot accedir tant al manual com a l'ajuda, que es guarden en arxius .Md separats. Per accedir al manual l'usuari ha de clicar al símbol d'interrogació a prop del títol **Pathway analysis**:

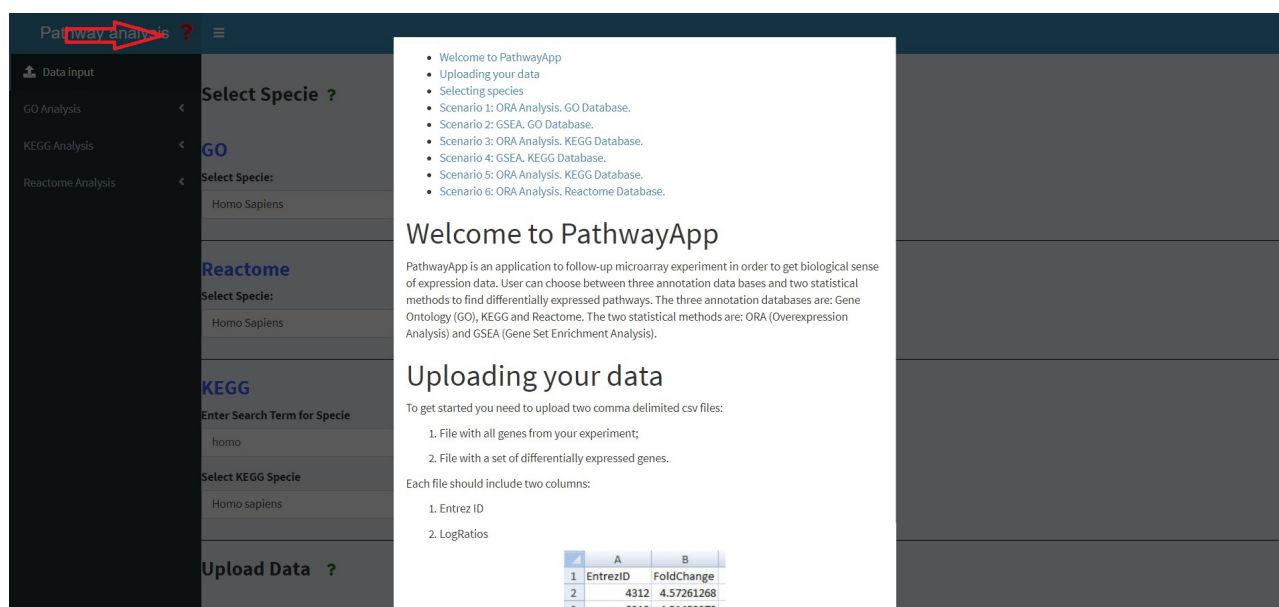


Figure 1: Manual per a aplicació

Com es veu hi ha apartats diferents. Depenent dels objectius de l'usuari, aquest pot seleccionar l'apartat que més l'interessi. Així, si l'usuari vol fer l'anàlisi ORA amb l'anotació KEGG pot navegar en la secció —textbfScenario 3: ORA Analysis. KEGG Database.

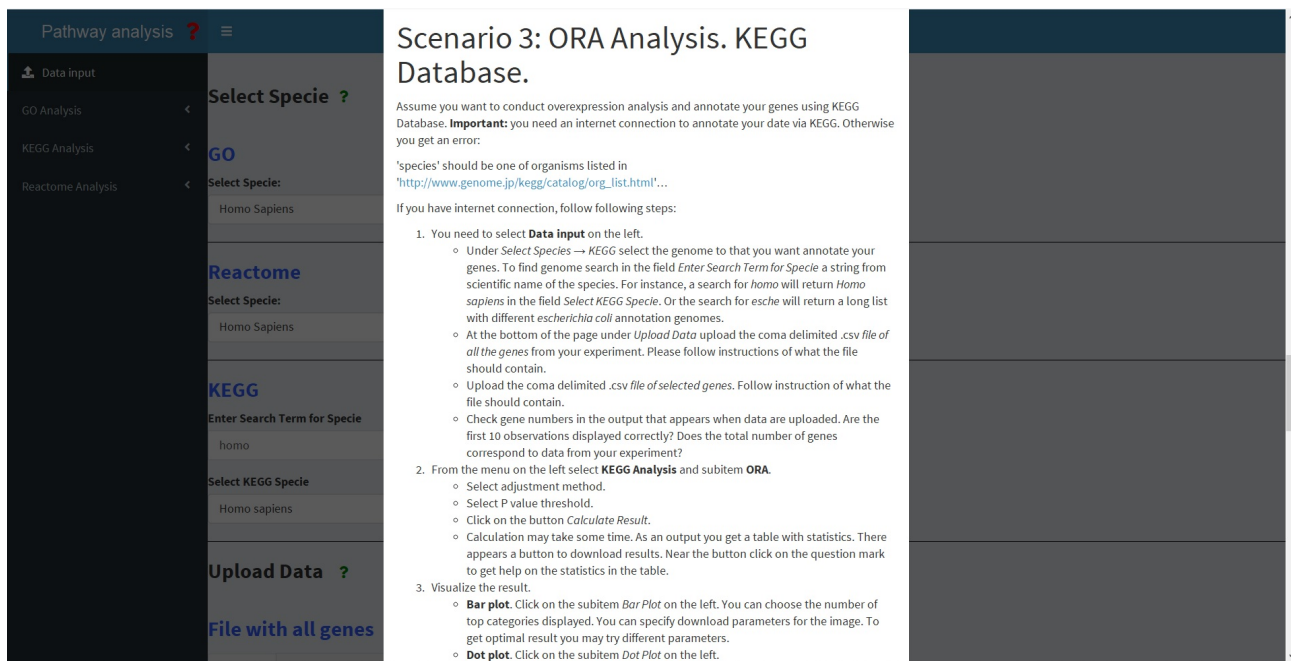


Figure 2: Manual per a l'anàlisi ORA amb l'anotació KEGG

També, l'usuari pot accedir a l'ajuda clicant als símbols d'interrogació distribuïts per l'aplicació en els llocs que penso que poden generar dubtes.

Per fer-ho possible s'utilitza el paquet **shinyhelper** que s'instal·la en executar la funció **runPathwayApp()**.

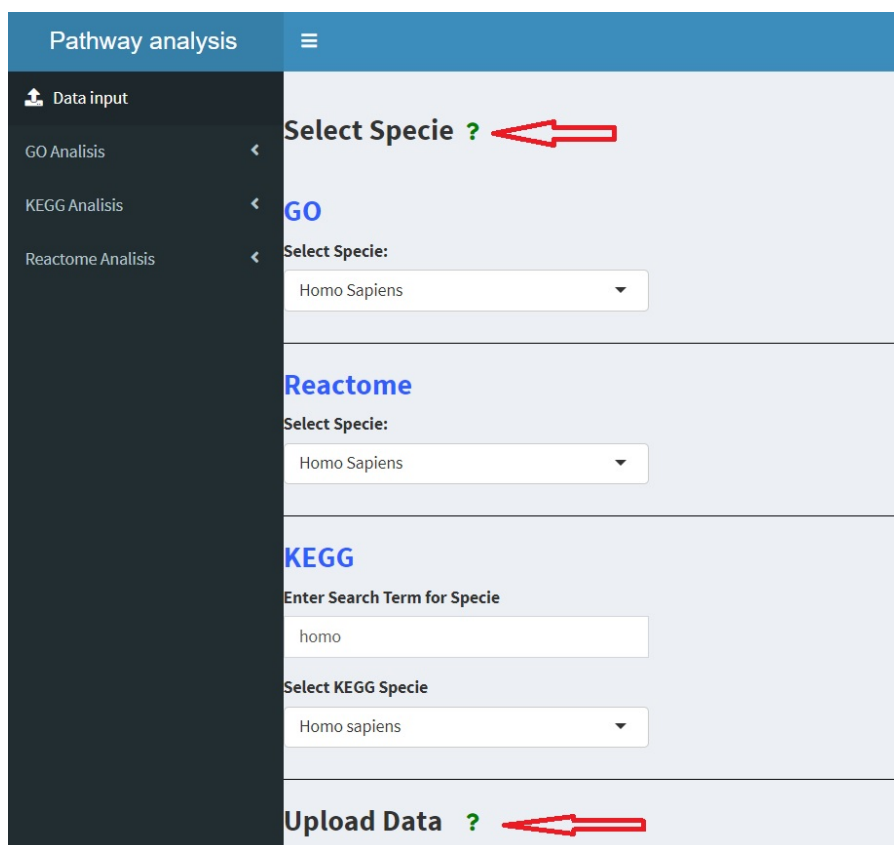


Figure 3: Senyals d'ajuda

El clic en aquests senyals fa que aparegui una finestreta amb la informació d'ajuda.

Aquí hi ha informació de l'apartat **Data Input**:

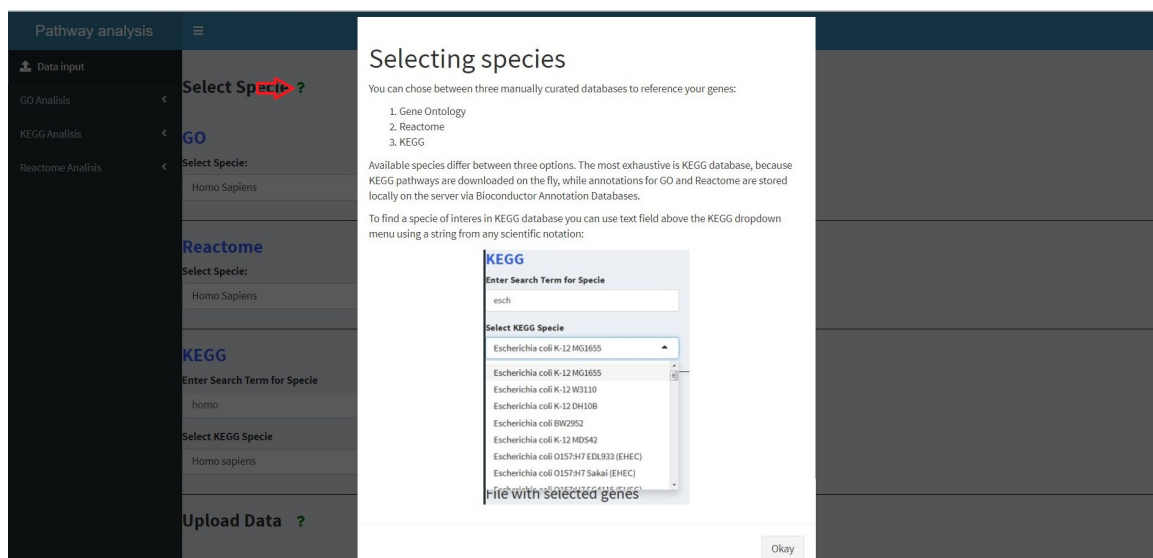


Figure 4: Ajuda per a l'elecció de l'espècie

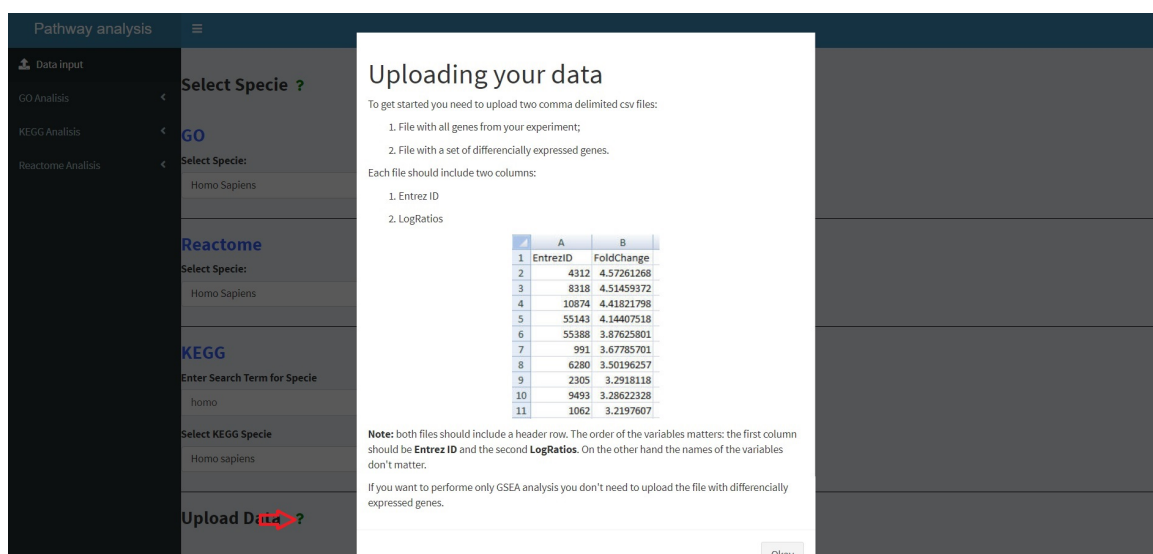


Figure 5: Ajuda per pujar les dades

Les informacions per a l'apartat ORA són les següents:

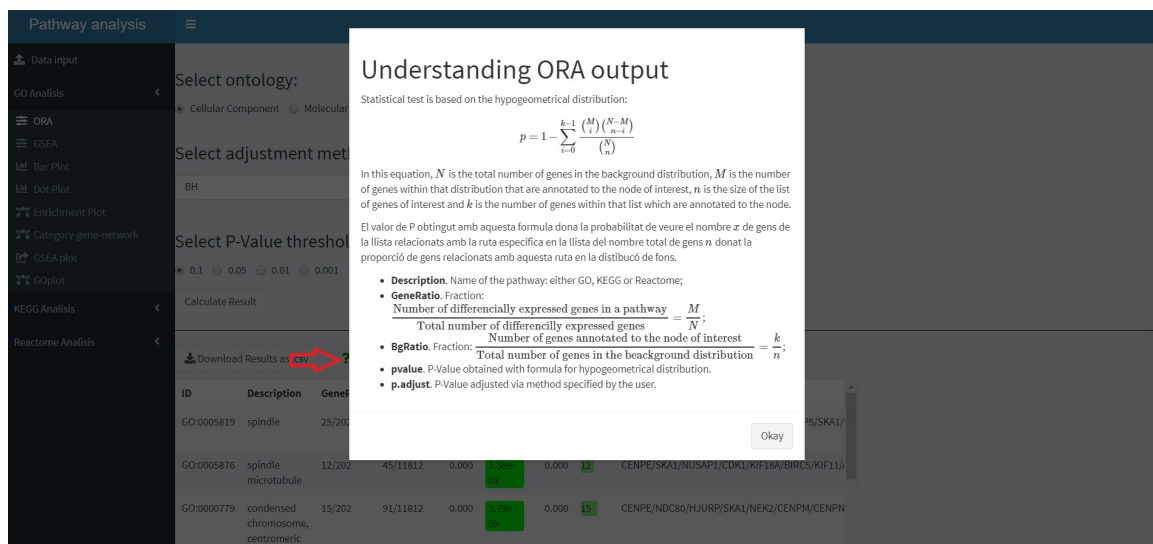


Figure 6: Informació per la interpretació d'anàlisi ORA

Aquí cal destacar que les fórmules, depenent de l'ordinador, no apareixen degudament en el RStudio Browser. Sí que apareixen bé quan l'aplicació s'obre via l'internet browser. L'usuari ha de tenir connexió amb internet perquè l'aplicació pugui descodificar la fórmula via MathJax. Encara no he trobat la causa per la qual el Rstudio Browser en alguns ordinadors no visualitza bé les fórmules. Pot ser un problema amb Java, que s'ha d'actualitzar? Ho estic investigant.

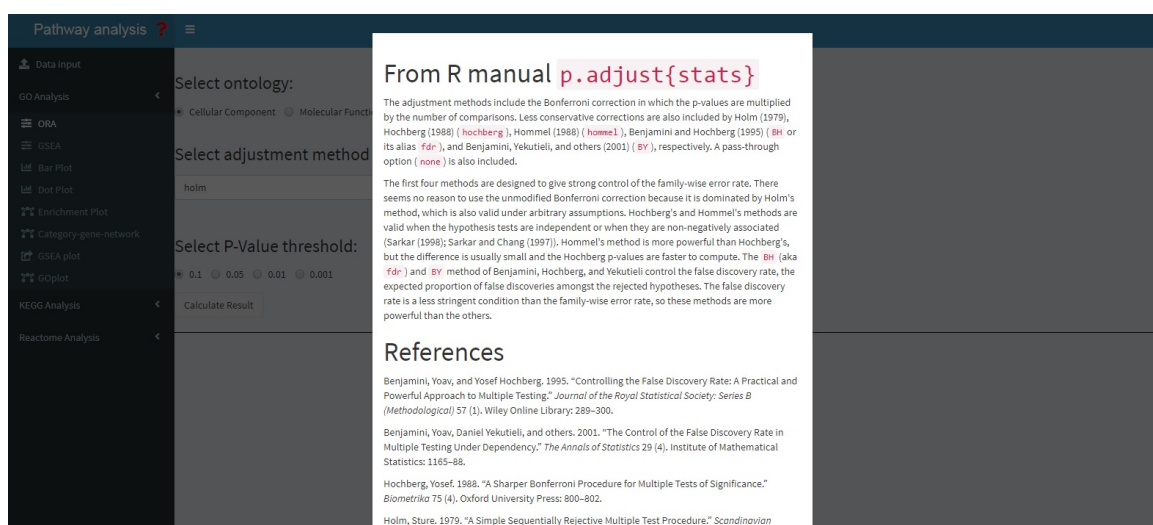


Figure 7: L'ajuda per a la selecció del mètode d'ajustament

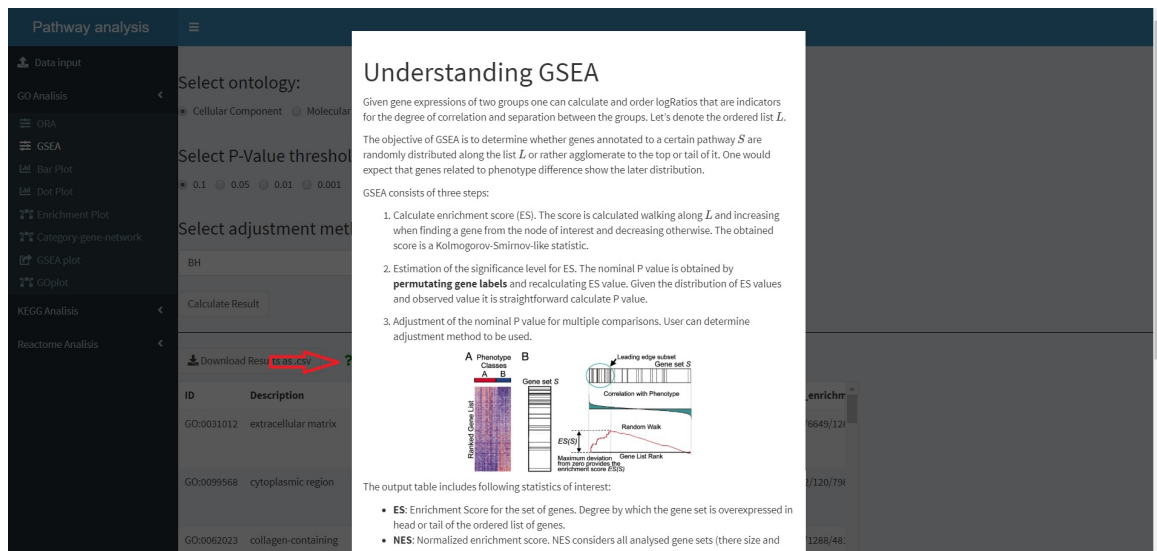


Figure 8: Ajuda per la interpretació de GSEA

1.3 Memòria

Ja he començat a descriure els mètodes per a la memòria. El draft de la memòria l'adjunto juntament amb aquesta PAC. Clarament hi escriuré més informació. Per ara, amb el temps disponible, m'he centrat en la descripció dels mètodes ORA i GSEA. A més a més encara no tinc disponible l'estructura predeterminada d'acord amb el pla docent. En les pròximes dues setmanes tindrè temps suficient per acabar-la.

2 Grau de compliment dels objectius.

Mirem el calendari previst per a aquesta PAC

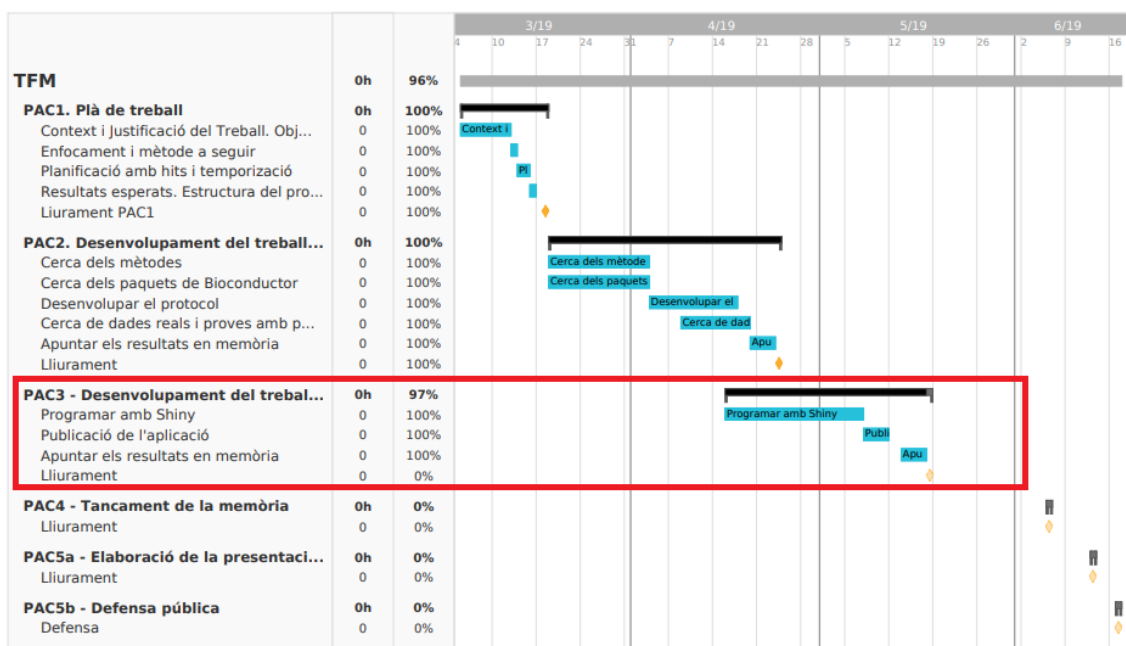


Figure 9: Calendar

Les activitats previstes eren:

1. **Programar amb Shiny;**

Crec que he pogut millorar l'aplicació afegint el manual i les ajudes. Temporalment m'ha costat trobar i implementar les ajudes però finalment ho he aconseguit i estic content amb el resultat. Les millores en aquesta direcció (afegir més informació o més apartats al manual) ja no trigaran gaire, perquè ja sé com fer-ho.

2. **Publicació de l'aplicació.**

Com he explicat en el primer apartat, l'opció de publicació elegida és la via GitHub. Les altres opcions són també possibles però al mateix temps impliquen una feina fora del límit temporal previst pel TFM.

3. **Apuntar els resultats en la memòria.**

Ja ho he començat a fer i estic segur que tenint l'aplicació acabada i rebent les instruccions determinades per part del professor acabaré la memòria ràpidament.

Biblilografia

[Wickham, 2015] Wickham, H. (2015). R packages.