

R 与 Cytoscape 配合在生物网络研究中的应用

2010 年 ChinaR 会议 上海

陈钢

chengangcs@gmail.com
www.gossipcoder.com

中南大学

November 14, 2010

提纲

- 1 R在生物网络研究中的应用
- 2 什么是Cytoscape?
 - Cytoscape 简介
 - Cytoscape 的用途
- 3 整合 Cytoscape 和 R
 - 整合方法
- 4 RCytoscape 包的使用
 - 原理
 - 功能
 - 实例
- 5 R 与 Cytoscape Web
- 6 总结

Contents

- 1 R在生物网络研究中的应用
- 2 什么是Cytoscape?
 - Cytoscape 简介
 - Cytoscape 的用途
- 3 整合 Cytoscape 和 R
 - 整合方法
- 4 RCytoscape 包的使用
 - 原理
 - 功能
 - 实例
- 5 R 与 Cytoscape Web
- 6 总结

生物网络?

生物网络

- 蛋白质相互作用网络 (DIP、BioGRID、SGD)
- 基因调控网络
- 代谢路径 (KEGG)
- ...

Bioconductor 项目中有关的软件包

GraphsAndNetworks BiocView

- Bioconductor → Software → Infrastructure → GraphsAndNetworks
- 37 个软件包: biocGraph, KEGGraph, rsbml, hypergraph. . .
- 详见我的个人网页 (www.gossipcoder.com)

社会网络分析包

社会网络分析包

从复杂网络本身来说，生物网络跟社会网络并没有本质的区别，所以大量的社会网络分析软件也可以用于生物网络的研究：

- Statnet 项目
- SNA: Social Network Analysis
- network
- nettheory
- igraph
- graphviz

R在生物网络研究中的应用
什么是Cytoscape?
整合 Cytoscape 和 R
RCytoscape 包的使用
R 与 Cytoscape Web
总结

小结

小结

R 在生物网络研究中有很广泛的用途

Contents

- 1 R在生物网络研究中的应用
- 2 什么是Cytoscape?
 - Cytoscape 简介
 - Cytoscape 的用途
- 3 整合 Cytoscape 和 R
 - 整合方法
- 4 RCytoscape 包的使用
 - 原理
 - 功能
 - 实例
- 5 R 与 Cytoscape Web
- 6 总结

Cytoscape项目

Cytoscape

- An Open Source Platform for Complex-Network Analysis and Visualization.

Cytoscape项目

Cytoscape

- An Open Source Platform for Complex-Network Analysis and Visualization.
- Cytoscape is an open source bioinformatics software platform for visualizing **molecular interaction networks** and **integrating these interactions with gene expression profiles and other state data.**

R在生物网络研究中的应用
什么是Cytoscape?
整合 Cytoscape 和 R
RCytoscape 包的使用
R 与 Cytoscape Web
总结

Cytoscape 简介
Cytoscape 的用途

Cytoscape 项目的赞助组织



Cytoscape 有关论文

- Integration of biological networks and gene expression data using Cytoscape Nature Protocols 2, 2366 - 2382 (2007)
- Cytoscape: a software environment for integrated models of biomolecular interaction networks. Genome Research 2003 Nov; 13(11):2498-504
- pubmed, 102篇，其中标题含有“Cytoscape”的33篇，
- Google Scholar, 搜索结果： 3,370条
- ISMB 2010

Cytoscape 的用途

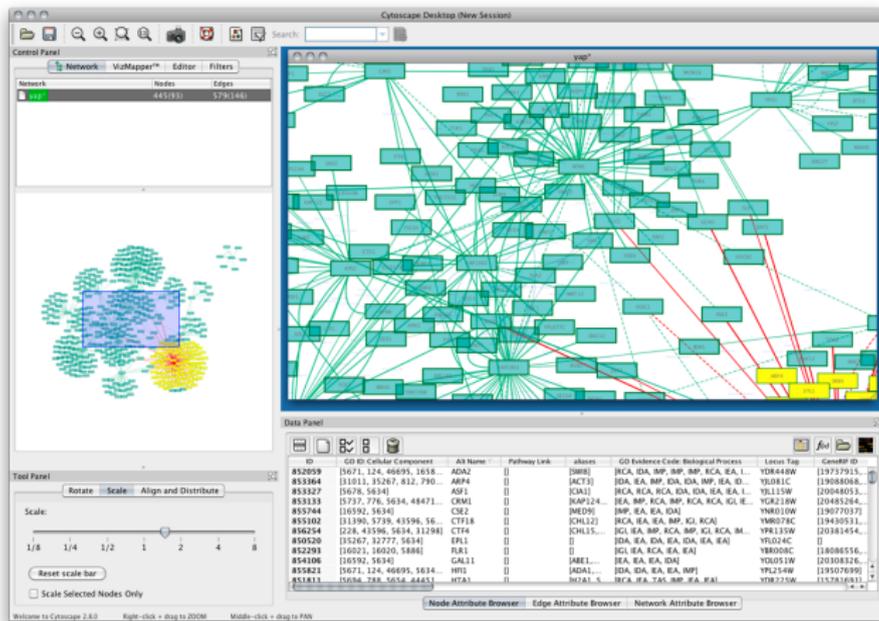
用途

- 可视化
- 分析
- 数据融合

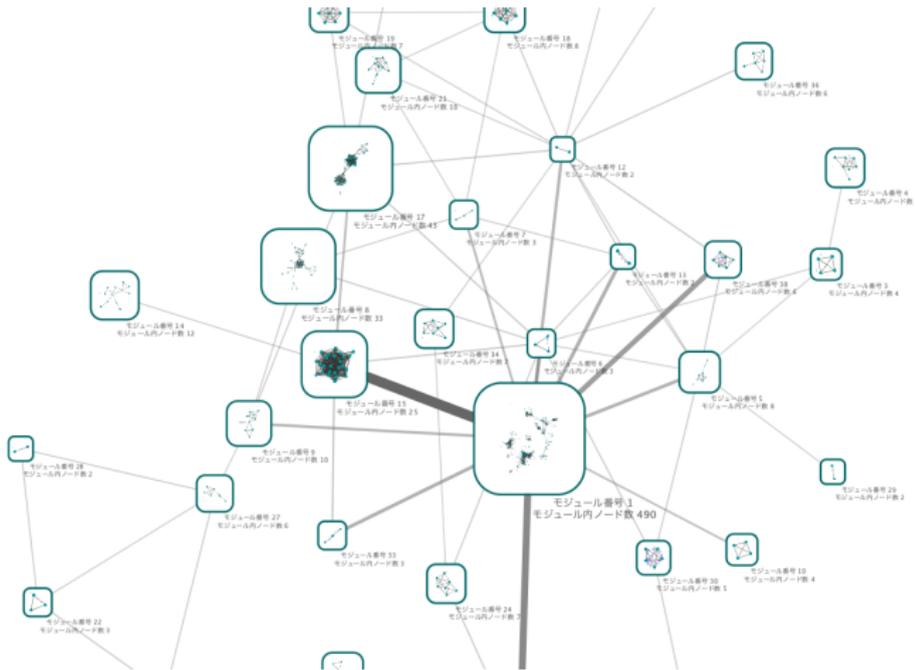
在生物网络研究中的应用
什么是Cytoscape?
整合 Cytoscape 和 R
Cytoscape 包的使用
R 与 Cytoscape Web
总结

Cytoscape 简介
Cytoscape 的用途

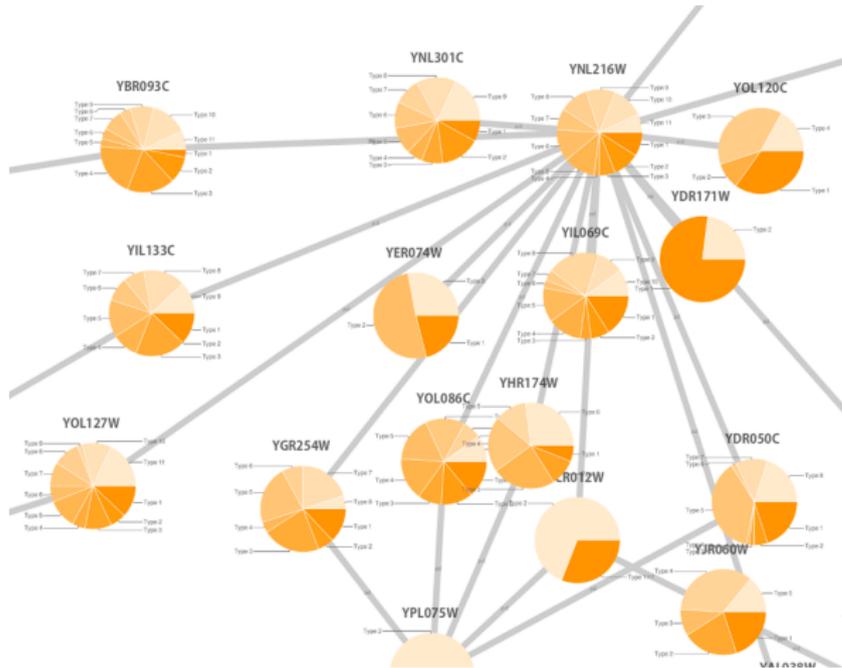
可视化



分析



数据融合



Contents

- 1 R在生物网络研究中的应用
- 2 什么是Cytoscape?
 - Cytoscape 简介
 - Cytoscape 的用途
- 3 整合 Cytoscape 和 R
 - 整合方法
- 4 RCytoscape 包的使用
 - 原理
 - 功能
 - 实例
- 5 R 与 Cytoscape Web
- 6 总结

Cytoscape 的优缺点

优点

- 操作方便
- 可视化
- 数据融合

缺点

- 时间效率差
- 不适合大规模网络的分析
- 新的分析算法不足
- 使用方法不够灵活

R 的优缺点

优点

- 效率相对较高
- 分析方法丰富
- 适合处理大规模数据
- 强大的编程语言

缺点

- 可视化操作不方便
- 数据整合相对麻烦
- 缺少一些 Cytoscape 独有的功能

整合方法

- 手动

整合方法

- 手动 **too ungelivable**

整合方法

- 手动 **too ungelivable**
- rJava

整合方法

- 手动 **too ungelivable**
- rJava 不稳定

整合方法

- 手动 **too ungelivable**
- rJava 不稳定
- RPC→XMLRPC

Contents

- 1 R在生物网络研究中的应用
- 2 什么是Cytoscape?
 - Cytoscape 简介
 - Cytoscape 的用途
- 3 整合 Cytoscape 和 R
 - 整合方法
- 4 RCytoscape 包的使用
 - 原理
 - 功能
 - 实例
- 5 R 与 Cytoscape Web
- 6 总结

要求

软件要求

- 操作系统: Linux, Windows, MacOS
- R: 2.12.0 或以上
- Cytoscape: 2.7.0 或以上

RPC 和 XMLRPC

什么是 RPC?

Remote Procedure Call: 远程过程调用, 该协议允许程序方便地调用其它计算机上的子程序。

什么是 XMLRPC?

将RPC的请求和返回编码成XML格式, 通过http协议传输数据一种RPC协议。

R 的 XMLRPC 包

XMLRPC 包

- 用于访问 RPC 服务器所提供的服务
- 基于 XML、Rcurl 等包
- 可以返回R对象，也可以返回字符串
- 已经进入了 Bioconductor 项目，自动安装 0.2-2版

Cytoscape 的 CytoscapeRPC 插件

CytoscapeRPC

- 以RPC服务的形式提供 Cytoscape 各种功能
- 支持 XMLRPC 和 SOAP-RPC
- 直接在 Cytoscape 的插件管理器中安装 1.2 版

RCytoscape

原理

利用 XMLRPC 包访问 Cytoscape 的 RPC 插件所提供的 RPC 服务，实现 R 对 Cytoscape 的访问和控制。



Hello World!

初始化

- 1 启动 Cytoscape, 启动 CytoscapeRPC 插件
- 2 启动 R, 加载 RCytoscape 包
- 3 最简单的例子

```
library(RCytoscape)
g <- new("graphNEL", edgemode = "directed")
g <- graph::addNode("A", g)
g <- graph::addNode("B", g)
g <- graph::addNode("C", g)
cw <- CytoscapeWindow("vignette", graph = g)
displayGraph(cw)
```

将网络数据传送给 Cytoscape 并显示

CytoscapeWindowClass

最主要的用于访问 Cytoscape 的类，构造函数：

```
CytoscapeWindow(title = "default", graph = new("graphNEL",
```

参数

- title: 窗口名称
- graph: 要显示的网络
- host 和 rpcPort: 主机地址和 RPC 服务端口
- create.window: 是否创建一个窗口

设置网络在 Cytoscape 中的布局

layout

```
layout(obj, layout.name='jgraph-spring')
```

现在支持的布局算法

```
getLayoutNames(obj)
```

```
[1] "jgraph-circle"           "attribute-circle"       "jgrap  
[4] "jgraph-radial-tree"     "Kamada-Kawai-Noweight" "Fruch  
[7] "Kamada-Kawai"          "jgraph-gem"            "hiera  
[10] "circular"               "isom"                  "jgrap  
[13] "jgraph-sugiyama"        "attributes-layout"     "grid"  
[16] "jgraph-tree"           "force-directed"        "degre  
[19] "jgraph-spring"
```

设置网络中边和节点的属性

初始化节点和边的属性

- `initNodeAttribute`: 初始化节点的属性
- `initEdgeAttribute`: 初始化边的属性

设置节点和边的属性

- `nodeData`函数
- `edgeData`函数

控制Cytoscape的VizMap

函数

- setDefaultNodeShape
- setDefaultNodeSize
- setDefaultNodeColor
- setDefaultNodeFontSize

显示和隐藏Cytoscape的面板

函数

- hidePanel
- dockPanel
- floatPanel

向 R 返回在 Cytoscape 中选中的节点

```
getSelectedNodes
```

```
getSelectedNodes(obj)
```

- obj: CytoscapeWindowClass 对象

R在生物网络研究中的应用
什么是Cytoscape?
整合 Cytoscape 和 R
RCytoscape 包的使用
R 与 Cytoscape Web
总结

原理
功能
实例

蛋白质相互作用网络聚类分析和可视化

Contents

- 1 R在生物网络研究中的应用
- 2 什么是Cytoscape?
 - Cytoscape 简介
 - Cytoscape 的用途
- 3 整合 Cytoscape 和 R
 - 整合方法
- 4 RCytoscape 包的使用
 - 原理
 - 功能
 - 实例
- 5 R 与 Cytoscape Web
- 6 总结

R在生物网络研究中的应用
什么是Cytoscape?
整合 Cytoscape 和 R
RCytoscape 包的使用
R 与 Cytoscape Web
总结

Cytoscape Web 项目

R在生物网络研究中的应用
什么是Cytoscape?
整合 Cytoscape 和 R
RCytoscape 包的使用
R 与 Cytoscape Web
总结

R 与 Cytoscape Web

Contents

- 1 R在生物网络研究中的应用
- 2 什么是Cytoscape?
 - Cytoscape 简介
 - Cytoscape 的用途
- 3 整合 Cytoscape 和 R
 - 整合方法
- 4 RCytoscape 包的使用
 - 原理
 - 功能
 - 实例
- 5 R 与 Cytoscape Web
- 6 总结

R在生物网络研究中的应用
什么是Cytoscape?
整合 Cytoscape 和 R
RCytoscape 包的使用
R 与 Cytoscape Web
总结

总结

Cytoscape, Cytoscape Web 和 R, Bioconductor

参考资料

参考资料

- RCytoscape 项目网
站:<http://db.systemsbiology.net:8080/cytoscape/RCytoscape/>
- Bioconductor 项目中有关生物网络的软件包介绍: <http://www.gossipcoder.com>

致谢

致谢

- Paul Shannon
- 张翔