

# 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](http://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

# 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



Institut Pasteur



Revolutionizing science. Enhancing life.



University of California  
San Francisco



Memorial Sloan-Kettering  
Cancer Center



Agilent Technologies



## 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

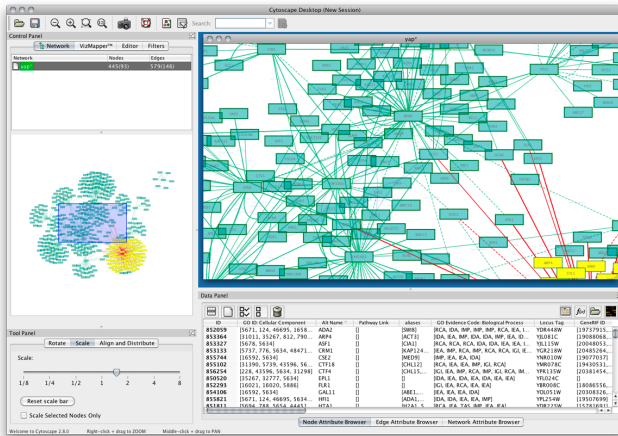
## 用途

- 可视化
- 分析
- 数据融合

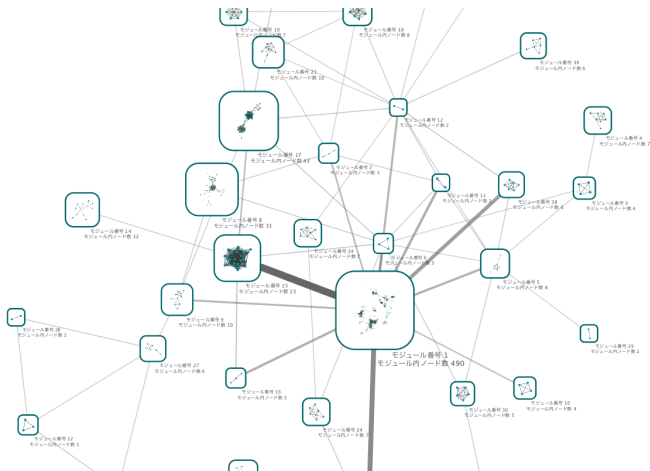
R在生物网络研究中的应用  
 什么是Cytoscape?  
 整合 Cytoscape 和 R  
 R与 Cytoscape 包的使用  
 R 与 Cytoscape Web  
 总结

Cytoscape 简介  
 Cytoscape 的用途

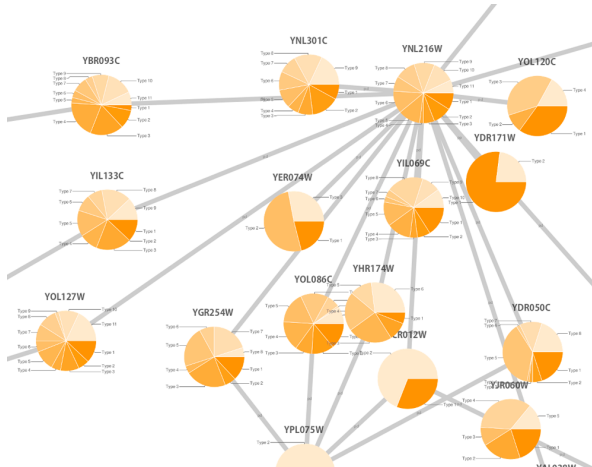
可视化



# 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

# 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