(1) Seleccionar un dataset de metabolómica:

- 1. Realizamos la descarga de datos, para lo que accedemos al repositorio de github, y en CODE descargamos en DownloadZip.
- 2. Desde el escritorio, elegimos la base 2018-MetabotypingPaper. Abrimos RStudio > File > New File > Markdown File.
- 3. Instalamos Bioconductor (copiando el link de la página web de Bioconductor). Como trabajo una versión antigua de R, no indico versión de Bioconductor.
- 4. También instalo BiocManager::install("SummarizedExperiment") porque sabemos que en el paso 2 lo necesitaremos.
- 5. En RStudio > ImportDataset > Escogemos las dos bases: DataValues_S013 donde tenemos los datos, y DataInfo_S013 donde están los metadatos. Al principio lo hemos importado dando a import y funcionaba. Después nos da error así que en la pantalla antes de dar a import cogemos el link con la ruta y pegamos. Lo hemos importado de las dos formas.
- 6. Las nombramos como data values y data info respectivamente.
- 7. En el siguiente paso fijamos una semilla para generar números aleatorios en la muestra. Lo hacemos para practicar lo que hicimos en la tarea 1.1. Pero para seguir trabajando lo haremos con la base de datos

(2) Crear un contenedor SummarizedExperiment

- 8. Conseguimos crear el dataframe para las columnas (colData) y el datafram para las líneas (rowData).
- 9. Durante muchos intentos anteriores, nos daba problemas la longitud de las columnas de datos al intentar crear el SummarizedExperiment. Por eso escogemos una columna y una función en colData.
- 10. Ejecutamos la función Summarized Experiment.
- 11. Mostramos Summarized Experiment. Ha sido posible crear la matriz pero los nombres de las filas y columnas no aparecen, aparecen como 1,2,3,4 y 5. A pesar de que en rowData y colData aparecían bien. He intentado solucionarlo pero no he podido.

Para solucionar los problemas citados anteriormente, ya que con el tutorial no era suficiente, he consultado esta bibliografía:

https://www.youtube.com/watch?v=D8IVRmbMjyc

https://www.bioconductor.org/help/course-

materials/2019/BSS2019/04 Practical CoreApproachesInBioconductor.html

(3) Realizar exploración de Dataset.

12. Para realizar la exploración de dataset hemos visualizado y repasado los contenidos de la actividad 1.3. Y creamos un análisis específico para nuestro caso, siguiendo la línea de preguntas propuesta en la actividad resuelta.

Pregunta Biológica: La pregunta clave del estudio es cómo cambian los valores metabólicos en pacientes con sobrepeso u obesidad después de someterse a bypass gástrico o gastrectomía tubular. El objetivo es ver si estas cirugías afectan (o afectan diferente) sobre el metabolismo de los pacientes, lo que puede ayudarnos a entender mejor cuál es mejor o tiene menos efectos secundarios a largo plazo.

Diseño Experimental: Los pacientes son seleccionados según el tipo de cirugía que se les realiza. Se evalúan muchos parámetros metabólicos indicando el método utilizado (bypass gástrico o gastrectomía tubular). Es importante tener en cuenta que las diferencias en las características de los pacientes podrían influir en los resultados.

Obtención de Datos Crudos: En este estudio se utilizan técnicas de cromatografía líquidaespectrometría de masas y de espectrometría de masas en tándem para medir los análisis. Estas técnicas permite obtener multitud de datos de análisis. Esta información la sacamos del documento de AA_Information_S006. Es importante que las muestras sean tomadas correctamente, ya que si no, los resultados podrían no proporciona información del todo verdadera.

Control de Calidad, Preprocesado y Normalización: Un problema común con los datos es que pueden variar mucho entre los pacientes. Por ejemplo, algunas personas podrían tener mediciones muy altas o bajas por razones que no tienen que ver directamente con la cirugía. Para evitarlo, se pueden usar técnicas de normalización que ajusten los resultados para que las diferencias entre los pacientes no afecten tanto.

Análisis Estadístico y Genes Diferencialmente Expresados: Se deben realizar análisis estadísticos para comparar los resultados después de la cirugía. Algunas posibles pruebas para este caso son el t-test, ANOVA o Kruskal-Wallis Test.

Análisis de Significación Biológica: Se interpretan los datos evaluando la variación de los valores del análisis mediante diversas herramientas bioinformáticas.

Respuesta a la Pregunta Biológica: Los descubrimientos de este estudio nos permite saber si hay diferencias en el metabolismo entre las dos cirugías, lo que podría ayudarnos a escoger la mejor opción para los pacientes. Estos resultados ayudan a entender mejor cómo afectan estas cirugías al cuerpo a nivel metabólico, lo que puede ser útil para mejorar los tratamientos en el futuro. Además, entender cómo cambia el metabolismo podría tener implicaciones también para la salud.

Repositorio de GitHub: https://github.com/AnaJuan7/Juan-Nicolas-Ana-PEC1.git

Contiene:

- Contenedor de datos (.Rda)
- Código R.
- Metadatos en Markdown.
- No he adjuntado documento con datos de texto. NOTA: Al seleccionar knirt no puede crearse, inicialmente me daba solamente error en la función assay porque debe ser solamente números y he incluido variable con letras. Intentando corregirlo estoy creando otros problemas que no soy capaz de solucionar. Por si sirviera, he capturado los datos de texto en R y los he adjuntado en un documento PDF con los resultados que me daba.