

# PEC1

Eduard Rodríguez Pérez

2024-11-04

## Contenidos

<b>Introducción</b>	<b>1</b>
<b>Objetivos del Estudio</b>	<b>2</b>
<b>Materiales y métodos</b>	<b>2</b>
Preprocesado de los datos . . . . .	2
Exploración de los datos . . . . .	4
<b>Resultados</b>	<b>5</b>
Preprocesado de los datos . . . . .	5
Exploración de los datos . . . . .	9
Creación del repositorio de github . . . . .	11
<b>Discusión y limitaciones y conclusiones del estudio</b>	<b>12</b>

## Introducción

Este informe tratará de analizar en poca profundidad un conjunto de datos de metabolómica de un estudio en humanos.

Se parte del *dataset* “cachexia” disponible en: [https://rest.xialab.ca/api/download/metaboanalyst/human\\_cachexia.csv](https://rest.xialab.ca/api/download/metaboanalyst/human_cachexia.csv) Dicho dataset proviene del estudio de Eisner et al. (2010) *Learning to predict cancer-associated skeletal muscle wasting from 1h-nmr profiles of urinary metabolites Metabolomics* 7:25-34

En el mencionado estudio se comparan las concentraciones de distintas moléculas presentes en la orina de 47 pacientes de cáncer de colon o pulmón, así como de 30 individuos sanos, con el objetivo de predecir la cachexia o pérdida de masa muscular debida al cáncer. Con dichos datos, los investigadores efectúan un análisis de aquellos marcadores con mayor capacidad de predicción de pérdida muscular mediante la creación de modelos predictivos. Para llegar a estos modelos usan métodos estadísticos estándar así como herramientas de inteligencia artificial tipo *machine learning*.

Los datos de metabolómica cuantitativos se obtuvieron a partir de espectros de resonancia magnética nuclear de muestras de orina, usando métodos en paralelo para corroborar la extrapolación cuantitativa a partir de las concentraciones de creatinina y de varios aminoácidos.

Adicionalmente, se realizaron métodos estadísticos para la normalización de los datos teniendo en cuenta que las muestras no se habían recogido en condiciones semejantes y por tanto podía haber dilución de la orina en función de la ingesta de agua horas antes del muestreo. En ese sentido, se usó tanto una normalización respecto a la concentración de creatinina, respecto al área total de picos de cada muestra (asumiendo que el área bajo el espectro de RMN es una función lineal de la concentración de los metabolitos detectables), así como una normalización respecto al cociente de probabilidad que estima el factor de dilución más probable a partir de las amplitudes del espectro a partir de un espectro de referencia.

Finalmente, se realizó una clasificación de los individuos bajo estudio en función de si presentaban cachexia o no, a través del análisis de imágenes de tomografía axial computerizada de la superficie de tejido muscular en el corte a la altura de la tercera vértebra lumbar. El porcentaje de diferencia en masa muscular se usó como la variable para dividir en sendos grupos.

## Objetivos del Estudio

- Describir el conjunto de datos.
- Organizar los datos en un objeto `SummarizedExperiment` y/o `ExpressionSet` según convenga.
- Explorar el *dataset* para obtener una visión general relativa al contenido trabajado en la asignatura hasta el momento.

Entre los objetivos del trabajo se incluye la creación del repositorio de `github` RODRIGUEZ-Perez-Eduard-PEC1 que no forma parte del informe en sí pero que se referencia en el mismo, en el apartado de Resultados.

## Materiales y métodos

### Preprocesado de los datos

El *dataset* bajo estudio se ha procesado mediante distintos paquetes de lenguaje R usando el software RStudio. El objetivo es preparar los datos presentes en el dataset `human_chachexia.csv`, si bien estos ya parecen presentar un preprocesado medio (normalización) según el estudio, cosa que tratamos de confirmar más adelante en este informe. ### Implementación de Bioconductor: `SummarizedExperiment` y `ExpressionSet` Con tal de implementar las herramientas bioinformáticas presentadas en la asignatura, en este trabajo se hace uso de los objetos `SummarizedExperiment` y `ExpressionSet` del paquete Bioconductor para análisis de datos ómicos.

Si bien se aplica `SummarizedExperiment` a forma de ejercicio práctico y como requerimiento del presente informe, éste tipo de objeto suele implementarse en experimentos con secuencias genéticas, donde las filas representan genes, transcritos o exones, entre otros (Figura 1).

Mientras que nuestro *dataset* se corresponde más con un objeto del tipo `ExpressionSet` para experimentos tipo array, de expresión génica y datos ómicos de similar estructura. En este objeto, las filas se corresponden a los genes u otros caracteres a medir, como metabolitos en nuestro caso, mientras que las columnas se corresponden a las muestras con su respectivo fenotipo (ver Figura 2).

Para ambos casos, tendremos que trasponer la tabla inicial `human_cachexia.csv` antes de transformarla a sendos objetos.

## What is a SummarizedExperiment ?

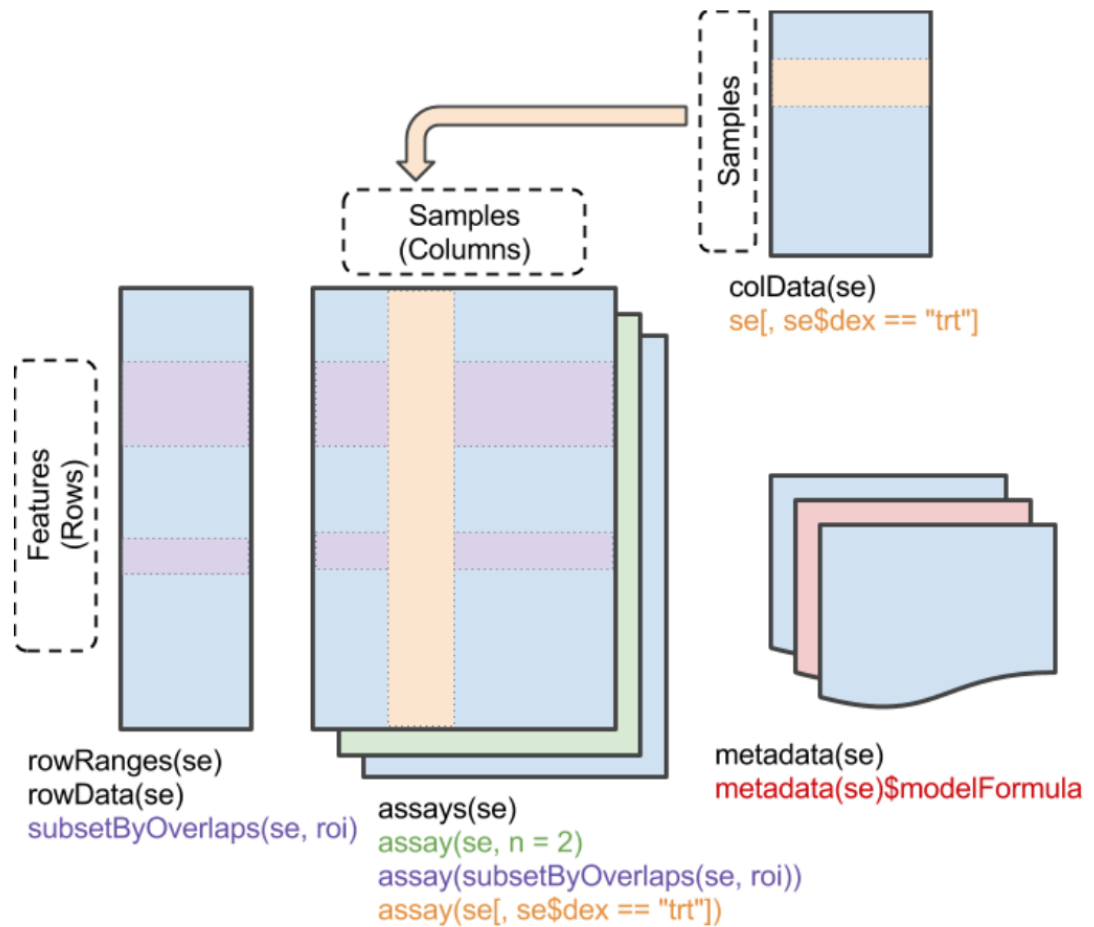


Figure 1: Fuente: <https://montilab.github.io/BS831/articles/docs/ExpressionSet.html#the-summarized-experiment-object>

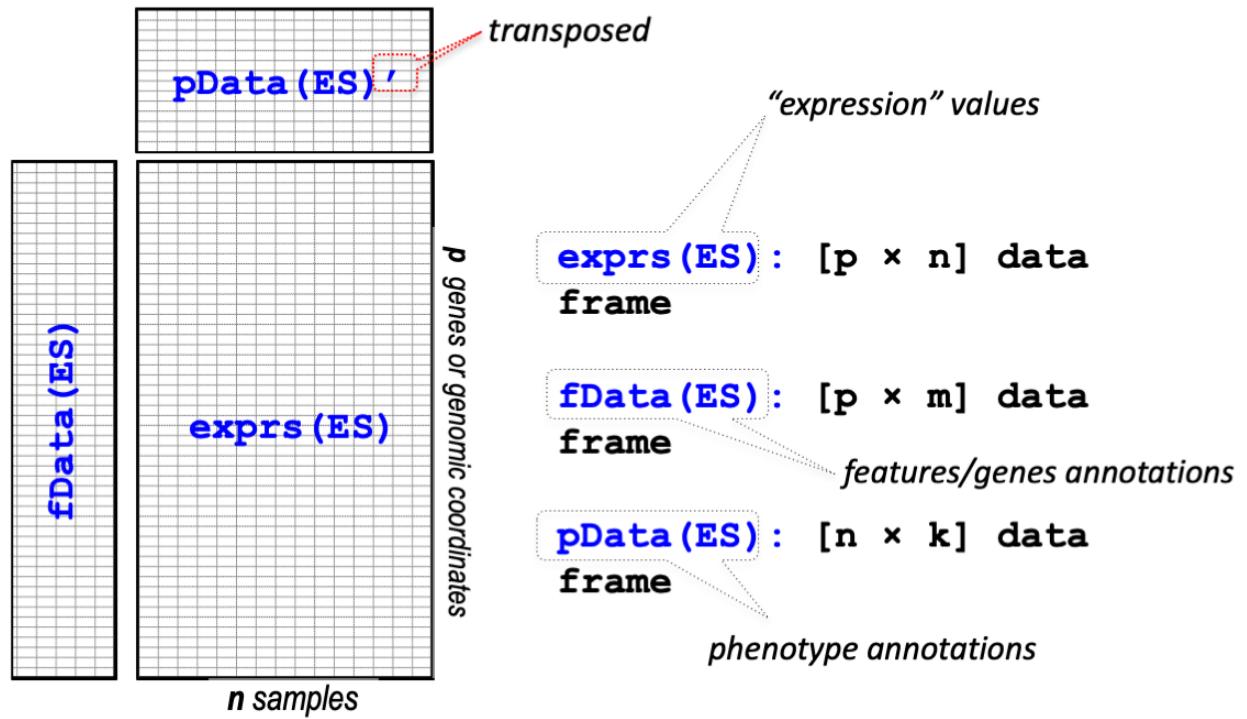


Figure 2: Fuente: <https://montilab.github.io/BS831/articles/docs/ExpressionSet.html#the-expressionset-object>

## Exploración de los datos

# Resultados

## Preprocesado de los datos

Importamos los datos *cachexia* de nuestra carpeta de trabajo:

```
tabla_datos <- read.csv("human_cachexia.csv", row.names = 1)
tabla_datos$Muscle.loss <- as.factor(tabla_datos$Muscle.loss)
str(tabla_datos)
## 'data.frame': 77 obs. of 64 variables:
## $ Muscle.loss : Factor w/ 2 levels "cachexic","control": 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 ...
## $ X1.6.Anhydro.beta.D.glucose: num 40.9 62.2 270.4 154.5 22.2 ...
## $ X1.Methylnicotinamide : num 65.4 340.4 64.7 53 73.7 ...
## $ X2.Aminobutyrate : num 18.7 24.3 12.2 172.4 15.6 ...
## $ X2.Hydroxyisobutyrate : num 26.1 41.7 65.4 74.4 83.9 ...
## $ X2.Oxoglutarate : num 71.5 67.4 23.8 1199.9 33.1 ...
## $ X3.Aminoisobutyrate : num 1480.3 116.8 14.3 555.6 29.7 ...
## $ X3.Hydroxybutyrate : num 56.83 43.82 5.64 175.91 76.71 ...
## $ X3.Hydroxyisovalerate : num 10.1 79.8 23.3 25 69.4 ...
## $ X3.Indoxylsulfate : num 567 369 665 412 166 ...
## $ X4.Hydroxyphenylacetate : num 120.3 432.7 292.9 214.9 97.5 ...
## $ Acetate : num 126.5 212.7 314.2 37.3 407.5 ...
## $ Acetone : num 9.49 11.82 4.44 206.44 44.26 ...
## $ Adipate : num 38.1 327 131.6 144 15 ...
## $ Alanine : num 314 871 464 590 1119 ...
## $ Asparagine : num 159.2 157.6 89.1 273.1 42.5 ...
## $ Betaine : num 110 245 117 279 392 ...
## $ Carnitine : num 265.1 120.3 25 200.3 84.8 ...
## $ Citrate : num 3714 2618 863 13630 854 ...
## $ Creatine : num 196.4 212.7 221.4 85.6 105.6 ...
## $ Creatinine : num 16482 15835 24588 20952 6768 ...
## $ Dimethylamine : num 633 608 735 1064 242 ...
## $ Ethanolamine : num 645 488 407 821 365 ...
## $ Formate : num 441 252 250 469 114 ...
## $ Fucose : num 337 198.3 186.8 407.5 26.1 ...
## $ Fumarate : num 7.69 18.92 7.1 96.54 19.69 ...
## $ Glucose : num 395 8691 1353 863 6836 ...
## $ Glutamine : num 871 602 302 1686 433 ...
## $ Glycine : num 2039 1108 620 5064 395 ...
## $ Glycolate : num 685.4 652 141.2 70.8 26.6 ...
## $ Guanidoacetate : num 154 110 183 103 53 ...
## $ Hippurate : num 4582 1737 4316 757 1153 ...
## $ Histidine : num 925 846 284 1043 327 ...
## $ Hypoxanthine : num 97.5 82.3 114.4 223.6 66.7 ...
## $ Isoleucine : num 5.58 8.17 9.3 37.71 40.04 ...
## $ Lactate : num 107 369 750 369 3641 ...
## $ Leucine : num 42.1 77.5 31.5 103.5 101.5 ...
## $ Lysine : num 146.9 284.3 97.5 290 122.7 ...
## $ Methylamine : num 52.5 23.6 18.7 48.9 27.9 ...
## $ Methylguanidine : num 9.97 7.69 4.66 141.17 5.31 ...
## $ N.N.Dimethylglycine : num 23.3 87.4 24.5 40 46.1 ...
## $ O.Acetylcarnitine : num 52.98 50.4 5.58 254.68 45.6 ...
## $ Pantothenate : num 25.8 186.8 145.5 42.5 74.4 ...
## $ Pyroglutamate : num 437 437 713 567 185 ...
## $ Pyruvate : num 21.1 37 29.4 64.1 12.3 ...
```

```
## $ Quinolate : num 165.7 73 192.5 86.5 38.1 ...
## $ Serine : num 284 392 296 1249 206 ...
## $ Succinate : num 154.5 244.7 142.6 144 68.7 ...
## $ Sucrose : num 45.1 459.4 160.8 111 75.2 ...
## $ Tartrate : num 97.51 32.79 16.28 837.15 4.53 ...
## $ Taurine : num 1920 1261 4273 1525 469 ...
## $ Threonine : num 184.9 198.3 110 376.1 64.1 ...
## $ Trigonelline : num 943.9 208.5 192.5 992.3 86.5 ...
## $ Trimethylamine.N.oxide : num 2122 639 1153 1451 172 ...
## $ Tryptophan : num 259.8 83.1 82.3 235.1 103.5 ...
## $ Tyrosine : num 290 167.3 60.3 323.8 142.6 ...
## $ Uracil : num 111 47 31.5 30.6 44.3 ...
## $ Valine : num 86.5 110 59.1 102.5 160.8 ...
## $ Xylose : num 72.2 192.5 2164.6 125.2 186.8 ...
## $ cis.Aconitate : num 237 334 330 1863 101 ...
## $ myo.Inositol : num 135.6 376.1 86.5 247.2 750 ...
## $ trans.Aconitate : num 51.9 217 58.6 75.9 98.5 ...
## $ pi.Methylhistidine : num 157.6 308 145.5 249.6 84.8 ...
## $ tau.Methylhistidine : num 160.8 130.3 83.9 254.7 79.8 ...
```

```
datos_tr <- t(tabla_datos)
```

## Implementación de SummarizedExperiment

Instalamos los paquetes necesarios para ejecutar SummarizedExperiment.

```
# Instalamos los paquetes necesarios
if (!require("BiocManager", quietly = TRUE))
  install.packages("BiocManager")

BiocManager::install("SummarizedExperiment")
## Warning: package(s) not installed when version(s) same as or greater than current; use
## `force = TRUE` to re-install: 'SummarizedExperiment'

library(SummarizedExperiment)

datos_se <- SummarizedExperiment(assays = list(counts=datos_tr))
```

Vemos qué tal se muestra el objeto:

```
# Visualizamos el formato SummarizedExperiment resultante
datos_se
## class: SummarizedExperiment
## dim: 64 77
## metadata(0):
## assays(1): counts
## rownames(64): Muscle.loss X1.6.Anhydro.beta.D.glucose ...
## pi.Methylhistidine tau.Methylhistidine
## rowData names(0):
## colnames(77): PIF_178 PIF_087 ... NETL_003_V1 NETL_003_V2
## colData names(0):
```

## Implementación de ExpressionSet

```
BiocManager::install("Biobase")
## Bioconductor version 3.20 (BiocManager 1.30.25), R 4.4.1 (2024-06-14 ucrt)
## Warning: package(s) not installed when version(s) same as or greater than current; use
## `force = TRUE` to re-install: 'Biobase'
## Installation paths not writeable, unable to update packages
## path: C:/Program Files/R/R-4.4.1/library
## packages:
## boot, foreign, MASS, Matrix, nlme, survival
## Old packages: 'curl'
datos_es<-ExpressionSet(datos_tr)
class(datos_es)
## [1] "ExpressionSet"
## attr(,"package")
## [1] "Biobase"
datos_es
## ExpressionSet (storageMode: lockedEnvironment)
## assayData: 64 features, 77 samples
## element names: exprs
## protocolData: none
## phenoData: none
## featureData: none
## experimentData: use 'experimentData(object)'
## Annotation:
```

```
columnDesc <- data.frame(labelDescription=rownames(datos_tr))
datos_tr <- as.data.frame(datos_tr)
str(columnDesc)
## 'data.frame': 64 obs. of 1 variable:
## $ labelDescription: chr "Muscle.loss" "X1.6.Anhydro.beta.D.glucose" "X1.Methylnicotinamide" "X2.Am
str(datos_tr)
## 'data.frame': 64 obs. of 77 variables:
## $ PIF_178 : chr "cachexic" " 40.85" " 65.37" " 18.73" ...
## $ PIF_087 : chr "cachexic" " 62.18" " 340.36" " 24.29" ...
## $ PIF_090 : chr "cachexic" "270.43" " 64.72" " 12.18" ...
## $ NETL_005_V1 : chr "cachexic" "154.47" " 52.98" "172.43" ...
## $ PIF_115 : chr "cachexic" " 22.20" " 73.70" " 15.64" ...
## $ PIF_110 : chr "cachexic" "212.72" " 31.82" " 18.36" ...
## $ NETL_019_V1 : chr "cachexic" "151.41" " 36.60" " 8.67" ...
## $ NETCR_014_V1: chr "cachexic" " 31.50" " 6.82" " 4.18" ...
## $ NETCR_014_V2: chr "cachexic" " 51.42" " 30.27" " 7.54" ...
## $ PIF_154 : chr "cachexic" "117.92" " 52.46" " 19.49" ...
## $ NETL_022_V1 : chr "cachexic" " 20.70" " 221.41" " 15.18" ...
## $ NETL_022_V2 : chr "cachexic" "127.74" " 177.68" " 12.68" ...
## $ NETL_008_V1 : chr "cachexic" " 59.74" " 50.91" " 6.82" ...
## $ PIF_146 : chr "cachexic" " 89.12" " 32.79" " 10.38" ...
## $ PIF_119 : chr "cachexic" " 23.57" " 6.89" " 2.12" ...
## $ PIF_099 : chr "cachexic" " 41.26" " 8.67" " 2.56" ...
## $ PIF_162 : chr "cachexic" "589.93" " 21.98" " 15.18" ...
## $ PIF_160 : chr "cachexic" "112.17" " 25.28" " 15.49" ...
## $ PIF_113 : chr "cachexic" "167.34" " 19.89" " 13.46" ...
## $ PIF_143 : chr "cachexic" "183.09" " 90.92" " 8.94" ...
## $ NETCR_007_V1: chr "cachexic" "208.51" " 53.52" " 5.26" ...
```

```

## $ NETCR_007_V2: chr "cachexic" " 34.81" " 95.58" " 23.57" ...
## $ PIF_137 : chr "cachexic" "333.62" " 35.87" " 7.92" ...
## $ PIF_100 : chr "cachexic" " 32.46" " 9.68" " 3.90" ...
## $ NETL_004_V1 : chr "cachexic" " 4.71" " 11.13" " 43.38" ...
## $ PIF_094 : chr "cachexic" " 68.72" " 13.87" " 12.18" ...
## $ PIF_132 : chr "cachexic" "214.86" " 127.74" " 31.50" ...
## $ PIF_163 : chr "cachexic" "304.90" " 25.79" " 27.11" ...
## $ NETCR_003_V1: chr "cachexic" " 37.71" " 10.80" " 5.00" ...
## $ NETL_028_V1 : chr "cachexic" " 45.60" " 473.43" " 16.28" ...
## $ NETL_028_V2 : chr "cachexic" " 34.12" " 92.76" " 8.25" ...
## $ NETCR_013_V1: chr "cachexic" "107.77" " 16.61" " 26.84" ...
## $ NETL_020_V1 : chr "cachexic" " 13.33" " 50.91" " 2.92" ...
## $ NETL_020_V2 : chr "cachexic" " 27.94" " 80.64" " 15.80" ...
## $ PIF_192 : chr "cachexic" "141.17" " 68.03" " 40.85" ...
## $ NETCR_012_V1: chr "cachexic" " 14.01" " 46.06" " 29.08" ...
## $ NETCR_012_V2: chr "cachexic" "244.69" " 116.75" " 40.04" ...
## $ PIF_089 : chr "cachexic" "123.97" " 81.45" " 55.15" ...
## $ NETCR_002_V1: chr "cachexic" "141.17" " 28.50" " 20.29" ...
## $ PIF_179 : chr "cachexic" " 35.16" " 26.58" " 5.21" ...
## $ PIF_114 : chr "cachexic" "685.40" " 36.23" " 32.46" ...
## $ NETCR_006_V1: chr "cachexic" "278.66" " 40.45" " 55.15" ...
## $ PIF_141 : chr "cachexic" " 15.80" " 23.57" " 17.99" ...
## $ NETCR_025_V1: chr "cachexic" " 29.96" " 96.54" " 6.55" ...
## $ NETCR_025_V2: chr "cachexic" " 16.95" " 114.43" " 2.53" ...
## $ NETCR_016_V1: chr "cachexic" "292.95" " 57.97" "167.34" ...
## $ PIF_116 : chr "cachexic" " 29.67" " 70.11" " 5.58" ...
## $ PIF_191 : chr "control" " 18.92" " 24.53" " 3.29" ...
## $ PIF_164 : chr "control" "127.74" "1032.77" " 8.58" ...
## $ NETL_013_V1 : chr "control" " 34.81" " 12.30" " 5.87" ...
## $ PIF_188 : chr "control" " 65.37" " 24.05" " 4.71" ...
## $ PIF_195 : chr "control" " 15.18" " 94.63" " 11.36" ...
## $ NETCR_015_V1: chr "control" " 70.81" " 75.94" " 22.65" ...
## $ PIF_102 : chr "control" " 25.28" " 101.49" " 8.33" ...
## $ NETL_010_V1 : chr "control" " 34.47" " 12.81" " 3.78" ...
## $ NETL_010_V2 : chr "control" " 18.54" " 8.41" " 3.78" ...
## $ NETL_001_V1 : chr "control" " 37.34" " 55.15" " 7.39" ...
## $ NETCR_015_V2: chr "control" " 33.78" " 53.52" " 18.17" ...
## $ NETCR_005_V1: chr "control" " 22.42" " 55.15" " 20.70" ...
## $ PIF_111 : chr "control" "146.94" " 10.07" " 6.30" ...
## $ PIF_171 : chr "control" " 64.07" " 6.42" " 28.79" ...
## $ NETCR_008_V1: chr "control" " 32.46" " 14.01" " 2.97" ...
## $ NETCR_008_V2: chr "control" "113.30" " 43.38" " 4.66" ...
## $ NETL_017_V1 : chr "control" " 22.20" " 20.70" " 7.85" ...
## $ NETL_017_V2 : chr "control" " 46.53" " 9.78" " 3.10" ...
## $ NETL_002_V1 : chr "control" "192.48" " 108.85" " 7.77" ...
## $ NETL_002_V2 : chr "control" "528.48" " 225.88" " 13.46" ...
## $ PIF_190 : chr "control" " 28.79" " 9.21" " 5.53" ...
## $ NETCR_009_V1: chr "control" "181.27" " 48.42" " 8.94" ...
## $ NETCR_009_V2: chr "control" " 47.47" " 7.69" " 4.06" ...
## $ NETL_007_V1 : chr "control" " 15.96" " 16.12" " 1.93" ...
## $ PIF_112 : chr "control" " 22.87" " 10.38" " 1.28" ...
## $ NETCR_019_V2: chr "control" " 35.16" " 52.46" " 13.87" ...
## $ NETL_012_V1 : chr "control" " 16.95" " 15.80" " 10.49" ...

```



```
## $ NETL_012_V2 : chr "control" " 9.39" " 14.01" " 5.16" ...
## $ NETL_003_V1 : chr "control" " 37.71" " 18.17" " 26.05" ...
## $ NETL_003_V2 : chr "control" " 38.47" " 12.55" " 15.03" ...
View(datos_tr)
myAnnotDF <- new("AnnotatedDataFrame", data=tabla_datos, varMetadata= columnDesc)
show(myAnnotDF)
## An object of class 'AnnotatedDataFrame'
## rowNames: PIF_178 PIF_087 ... NETL_003_V2 (77 total)
## varLabels: Muscle.loss X1.6.Anhydro.beta.D.glucose ...
## tau.Methylhistidine (64 total)
## varMetadata: labelDescription

phenoData(datos_es) <- myAnnotDF
show(datos_es)
## ExpressionSet (storageMode: lockedEnvironment)
## assayData: 64 features, 77 samples
## element names: exprs
## protocolData: none
## phenoData
## rowNames: PIF_178 PIF_087 ... NETL_003_V2 (77 total)
## varLabels: Muscle.loss X1.6.Anhydro.beta.D.glucose ...
## tau.Methylhistidine (64 total)
## varMetadata: labelDescription
## featureData: none
## experimentData: use 'experimentData(object)'
## Annotation:
```

## Exploración de los datos

Realizamos un breve análisis estadístico de los datos.

Tenemos 77 muestras, 47 de cachexia y 30 controles, así como 64 marcadores distintos en orina.

```
summary(tabla_datos)
## Muscle.loss X1.6.Anhydro.beta.D.glucose X1.Methylnicotinamide
## cachexic:47 Min. : 4.71 Min. : 6.42
## control :30 1st Qu.: 28.79 1st Qu.: 15.80
## Median : 45.60 Median : 36.60
## Mean :105.63 Mean : 71.57
## 3rd Qu.:141.17 3rd Qu.: 73.70
## Max. :685.40 Max. :1032.77
## X2.Aminobutyrate X2.Hydroxyisobutyrate X2.Oxoglutarate X3.Aminoisobutyrate
## Min. : 1.28 Min. : 4.85 Min. : 5.53 Min. : 2.61
## 1st Qu.: 5.26 1st Qu.:15.80 1st Qu.: 22.42 1st Qu.: 11.70
## Median : 10.49 Median :32.46 Median : 55.15 Median : 22.65
## Mean : 18.16 Mean :37.25 Mean : 145.09 Mean : 76.76
## 3rd Qu.: 19.49 3rd Qu.:54.60 3rd Qu.: 92.76 3rd Qu.: 56.26
## Max. :172.43 Max. :93.69 Max. :2465.13 Max. :1480.30
## X3.Hydroxybutyrate X3.Hydroxyisovalerate X3.Indoxylsulfate
## Min. : 1.70 Min. : 0.92 Min. : 27.66
## 1st Qu.: 5.99 1st Qu.: 5.26 1st Qu.: 82.27
## Median : 11.70 Median :12.55 Median : 144.03
## Mean : 21.72 Mean : 21.65 Mean : 218.88
## 3rd Qu.: 29.96 3rd Qu.:30.27 3rd Qu.: 333.62
## Max. :175.91 Max. :164.02 Max. :1043.15
```

##	X4.Hydroxyphenylacetate	Acetate	Acetone	Adipate
##	Min. : 15.49	Min. : 3.49	Min. : 2.29	Min. : 1.55
##	1st Qu.: 41.68	1st Qu.: 16.28	1st Qu.: 4.95	1st Qu.: 6.11
##	Median : 70.11	Median : 39.65	Median : 7.10	Median : 10.18
##	Mean : 112.02	Mean : 66.14	Mean : 11.43	Mean : 24.76
##	3rd Qu.: 145.47	3rd Qu.: 86.49	3rd Qu.: 10.49	3rd Qu.: 19.11
##	Max. : 796.32	Max. : 411.58	Max. : 206.44	Max. : 327.01
##	Alanine	Asparagine	Betaine	Carnitine
##	Min. : 16.78	Min. : 6.69	Min. : 2.29	Min. : 2.18
##	1st Qu.: 78.26	1st Qu.: 20.49	1st Qu.: 28.79	1st Qu.: 14.44
##	Median : 194.42	Median : 42.10	Median : 64.72	Median : 23.81
##	Mean : 273.56	Mean : 62.28	Mean : 90.32	Mean : 52.09
##	3rd Qu.: 399.41	3rd Qu.: 89.12	3rd Qu.: 127.74	3rd Qu.: 60.95
##	Max. : 1312.91	Max. : 273.14	Max. : 391.51	Max. : 487.85
##	Citrate	Creatine	Creatinine	Dimethylamine
##	Min. : 59.74	Min. : 2.75	Min. : 1002	Min. : 41.26
##	1st Qu.: 788.40	1st Qu.: 17.64	1st Qu.: 3498	1st Qu.: 142.59
##	Median : 1790.05	Median : 44.26	Median : 7631	Median : 304.90
##	Mean : 2235.35	Mean : 126.83	Mean : 8734	Mean : 358.17
##	3rd Qu.: 3071.74	3rd Qu.: 117.92	3rd Qu.: 12333	3rd Qu.: 454.86
##	Max. : 13629.61	Max. : 1863.11	Max. : 33860	Max. : 1556.20
##	Ethanolamine	Formate	Fucose	Fumarate
##	Min. : 16.12	Min. : 6.42	Min. : 5.70	Min. : 0.79
##	1st Qu.: 86.49	1st Qu.: 53.52	1st Qu.: 29.37	1st Qu.: 2.23
##	Median : 204.38	Median : 95.58	Median : 61.56	Median : 4.10
##	Mean : 276.26	Mean : 147.40	Mean : 88.67	Mean : 8.44
##	3rd Qu.: 407.48	3rd Qu.: 167.34	3rd Qu.: 123.97	3rd Qu.: 7.85
##	Max. : 1436.55	Max. : 1480.30	Max. : 407.48	Max. : 96.54
##	Glucose	Glutamine	Glycine	Glycolate
##	Min. : 26.84	Min. : 23.34	Min. : 38.09	Min. : 5.42
##	1st Qu.: 80.64	1st Qu.: 113.30	1st Qu.: 262.43	1st Qu.: 50.91
##	Median : 210.61	Median : 225.88	Median : 528.48	Median : 130.32
##	Mean : 559.85	Mean : 306.87	Mean : 880.72	Mean : 187.99
##	3rd Qu.: 407.48	3rd Qu.: 445.86	3rd Qu.: 1096.63	3rd Qu.: 267.74
##	Max. : 8690.62	Max. : 1685.81	Max. : 5064.45	Max. : 720.54
##	Guanidoacetate	Hippurate	Histidine	Hypoxanthine
##	Min. : 7.03	Min. : 92.76	Min. : 14.15	Min. : 3.78
##	1st Qu.: 33.78	1st Qu.: 492.75	1st Qu.: 66.69	1st Qu.: 20.70
##	Median : 64.72	Median : 1224.15	Median : 174.16	Median : 40.04
##	Mean : 86.37	Mean : 2286.84	Mean : 292.64	Mean : 61.10
##	3rd Qu.: 108.85	3rd Qu.: 2921.93	3rd Qu.: 419.89	3rd Qu.: 83.93
##	Max. : 561.16	Max. : 19341.34	Max. : 1863.11	Max. : 265.07
##	Isoleucine	Lactate	Leucine	Lysine
##	Min. : 1.790	Min. : 7.32	Min. : 2.51	Min. : 10.49
##	1st Qu.: 3.900	1st Qu.: 35.52	1st Qu.: 9.12	1st Qu.: 30.27
##	Median : 7.170	Median : 81.45	Median : 19.11	Median : 69.41
##	Mean : 8.709	Mean : 158.46	Mean : 24.36	Mean : 108.79
##	3rd Qu.: 11.250	3rd Qu.: 139.77	3rd Qu.: 31.19	3rd Qu.: 121.51
##	Max. : 40.040	Max. : 3640.95	Max. : 103.54	Max. : 788.40
##	Methylamine	Methylguanidine	N.N.Dimethylglycine	O.Acetylcarnitine
##	Min. : 1.51	Min. : 1.70	Min. : 0.79	Min. : 1.23
##	1st Qu.: 5.26	1st Qu.: 4.26	1st Qu.: 7.03	1st Qu.: 3.94
##	Median : 14.73	Median : 7.85	Median : 21.98	Median : 11.47

```
## Mean :17.38 Mean : 15.32 Mean : 26.35 Mean : 19.73
## 3rd Qu.:24.05 3rd Qu.: 19.30 3rd Qu.: 40.04 3rd Qu.: 20.91
## Max. :52.46 Max. :141.17 Max. :120.30 Max. :254.68
## Pantothenate Pyroglutamate Pyruvate Quinolinate
## Min. : 2.59 Min. : 21.33 Min. : 0.90 Min. : 5.21
## 1st Qu.: 11.13 1st Qu.: 68.72 1st Qu.: 4.85 1st Qu.: 26.58
## Median : 22.65 Median : 157.59 Median : 13.46 Median : 51.42
## Mean : 44.88 Mean : 211.45 Mean : 21.29 Mean : 66.44
## 3rd Qu.: 41.26 3rd Qu.: 301.87 3rd Qu.: 29.08 3rd Qu.: 87.36
## Max. :692.29 Max. :1064.22 Max. :184.93 Max. :259.82
## Serine Succinate Sucrose Tartrate
## Min. : 16.12 Min. : 1.72 Min. : 6.49 Min. : 2.20
## 1st Qu.: 83.10 1st Qu.: 8.58 1st Qu.: 19.30 1st Qu.: 6.89
## Median : 142.59 Median : 30.88 Median : 40.85 Median : 12.94
## Mean : 197.69 Mean : 60.23 Mean : 113.23 Mean : 40.00
## 3rd Qu.: 270.43 3rd Qu.: 74.44 3rd Qu.: 94.63 3rd Qu.: 25.79
## Max. :1248.88 Max. :589.93 Max. :2079.74 Max. :837.15
## Taurine Threonine Trigonelline Trimethylamine.N.oxide
## Min. : 17.81 Min. : 8.25 Min. : 10.07 Min. : 55.7
## 1st Qu.: 99.48 1st Qu.: 31.82 1st Qu.: 53.52 1st Qu.: 175.9
## Median : 249.64 Median : 64.07 Median : 114.43 Median : 383.8
## Mean : 525.12 Mean : 95.36 Mean : 270.44 Mean : 652.2
## 3rd Qu.: 665.14 3rd Qu.:137.00 3rd Qu.: 340.36 3rd Qu.: 735.1
## Max. :4272.69 Max. :450.34 Max. :2252.96 Max. :5486.2
## Tryptophan Tyrosine Uracil Valine
## Min. : 8.67 Min. : 4.22 Min. : 3.10 Min. : 4.10
## 1st Qu.: 21.33 1st Qu.: 23.57 1st Qu.: 11.94 1st Qu.: 12.18
## Median : 46.99 Median : 60.34 Median : 27.39 Median : 33.12
## Mean : 66.24 Mean : 81.76 Mean : 35.56 Mean : 35.67
## 3rd Qu.: 96.54 3rd Qu.:113.30 3rd Qu.: 44.26 3rd Qu.: 50.40
## Max. :259.82 Max. :539.15 Max. :179.47 Max. :160.77
## Xylose cis.Aconitate myo.Inositol trans.Aconitate
## Min. : 10.07 Min. : 12.94 Min. : 11.59 Min. : 4.90
## 1st Qu.: 29.96 1st Qu.: 36.23 1st Qu.: 30.27 1st Qu.: 12.43
## Median : 50.40 Median : 129.02 Median : 78.26 Median : 26.84
## Mean : 100.93 Mean : 204.22 Mean :135.40 Mean : 40.63
## 3rd Qu.: 89.12 3rd Qu.: 254.68 3rd Qu.:167.34 3rd Qu.: 57.40
## Max. :2164.62 Max. :1863.11 Max. :854.06 Max. :217.02
## pi.Methylhistidine tau.Methylhistidine
## Min. : 11.36 Min. : 8.00
## 1st Qu.: 67.36 1st Qu.: 27.39
## Median : 162.39 Median : 68.72
## Mean : 370.29 Mean : 89.69
## 3rd Qu.: 387.61 3rd Qu.:130.32
## Max. :2697.28 Max. :317.35
```

## Creación del repositorio de github

```
# Creamos la versión en texto de los datos.
write.table(tabla_datos, "human_cachexia.txt",
            row.names = TRUE,
            quote = TRUE,
            col.names = TRUE)
```

- Enlace a github: <https://github.com/EduardRP/RODRIGUEZ-Perez-Eduard-PEC1.git>

## Discusión y limitaciones y conclusiones del estudio

Este estudio ha resultado ser muy limitado debido a la falta de práctica con los objetos SummarizedExperiment y ExpressionSet. De haberle dedicado más tiempo, habría sido interesante realizar un estudio adecuado de las variables entre ambos grupos, si bien no he sabido analizarlos o bien he tenido problemas al intentarlo debido al excesivo número de variables.