PROBA

Gabriel Regueira Huguet

2025-03-22

Se ha descubierto que el dataset de cachexia ya esta en un paquete llamado specmine.dataset:

```
library(specmine.datasets)
data("cachexia")
```

```
class(cachexia)
```

```
## [1] "list"
```

Com podem observar, cachexia és una llista personalitzada utilitzada per el paquet specmine.datasets. Al executar View(cachecia) no surt una taula de dades convencional, sinó una vista estructurada dels components del dataset *cachexia*.

Observem en el dataset de *cachexia* que aquest té diferents elements:

- data: matriu 63 x 77 (metabolites x mostres)
- metadata: data.frame amb informació sobre cada mostra (grup)
- description: petita descripció sobre les dades

Ara procedim a crear el *SummarizedExperiment*:

```
library(SummarizedExperiment)
```

```
## Cargando paquete requerido: MatrixGenerics
```

```
## Cargando paquete requerido: matrixStats
```

```
##
## Adjuntando el paquete: 'MatrixGenerics'
```

```
## The following objects are masked from 'package:matrixStats':
##
##     colAlls, colAnyNAs, colAnys, colAvgsPerRowSet, colCollapse,
##     colCounts, colCummaxs, colCummins, colCumprods, colCumsums,
##     colDiffs, colIQRDiffs, colIQRs, colLogSumExps, colMadDiffs,
##     colMads, colMaxs, colMeans2, colMedians, colMins, colOrderStats,
##     colProds, colQuantiles, colRanges, colRanks, colSdDiffs, colSds,
##     colSums2, colTabulates, colVarDiffs, colVars, colWeightedMads,
```

```
##     colWeightedMeans, colWeightedMedians, colWeightedSds,
##     colWeightedVars, rowAlls, rowAnyNAs, rowAnys, rowAvgsPerColSet,
##     rowCollapse, rowCounts, rowCummaxs, rowCummins, rowCumprods,
##     rowCumsums, rowDiffs, rowIQRDiffs, rowIQRs, rowLogSumExps,
##     rowMadDiffs, rowMads, rowMaxs, rowMeans2, rowMedians, rowMins,
##     rowOrderStats, rowProds, rowQuantiles, rowRanges, rowRanks,
##     rowSdDiffs, rowSds, rowSums2, rowTabulates, rowVarDiffs, rowVars,
##     rowWeightedMads, rowWeightedMeans, rowWeightedMedians,
##     rowWeightedSds, rowWeightedVars

## Cargando paquete requerido: GenomicRanges

## Cargando paquete requerido: stats4

## Cargando paquete requerido: BiocGenerics

##
## Adjuntando el paquete: 'BiocGenerics'

## The following objects are masked from 'package:stats':
##
##     IQR, mad, sd, var, xtabs

## The following objects are masked from 'package:base':
##
##     anyDuplicated, aperm, append, as.data.frame, basename, cbind,
##     colnames, dirname, do.call, duplicated, eval, evalq, Filter, Find,
##     get, grep, grepl, intersect, is.unsorted, lapply, Map, mapply,
##     match, mget, order, paste, pmax, pmax.int, pmin, pmin.int,
##     Position, rank, rbind, Reduce, rownames, sapply, saveRDS, setdiff,
##     table, tapply, union, unique, unsplit, which.max, which.min

## Cargando paquete requerido: S4Vectors

##
## Adjuntando el paquete: 'S4Vectors'

## The following object is masked from 'package:utils':
##
##     findMatches

## The following objects are masked from 'package:base':
##
##     expand.grid, I, unname

## Cargando paquete requerido: IRanges

##
## Adjuntando el paquete: 'IRanges'
```

```
## The following object is masked from 'package:grDevices':
##
##     windows

## Cargando paquete requerido: GenomeInfoDb

## Cargando paquete requerido: Biobase

## Welcome to Bioconductor
##
##     Vignettes contain introductory material; view with
##     'browseVignettes()'. To cite Bioconductor, see
##     'citation("Biobase")', and for packages 'citation("pkgname")'.

##
## Adjuntando el paquete: 'Biobase'

## The following object is masked from 'package:MatrixGenerics':
##
##     rowMedians

## The following objects are masked from 'package:matrixStats':
##
##     anyMissing, rowMedians
```

```
#Convertim cachexia$data a una matriu R per tal que SummarizedExperiment accepti el format i formi part
assay_data <- as.matrix(cachexia$data)
#Agafem cachexia$metadata i ens assegurem que els noms de les files coincideixin amb le nom de les colu
col_metadata <- cachexia$metadata
rownames(col_metadata) <- colnames(assay_data)
#Creem l'objecte SummarizedExperiment amb la matriu de dades empaquetada en una llista (counts) i les m
se <- SummarizedExperiment(
  assays = list(counts = assay_data),
  colData = col_metadata
)
```

```
se
```

```
## class: SummarizedExperiment
## dim: 63 77
## metadata(0):
## assays(1): counts
## rownames(63): 1.6-Anhydro-beta-D-glucose 1-Methylnicotinamide ...
##   pi-Methylhistidine tau-Methylhistidine
## rowData names(0):
## colnames(77): PIF_178 PIF_087 ... NETL_003_V1 NETL_003_V2
## colData names(1): Muscle.loss
```

```
View(assay(se))
View(colData(se))
colData(se)
```

```
## DataFrame with 77 rows and 1 column
##              Muscle.loss
##                 <factor>
## PIF_178         cachexic
## PIF_087         cachexic
## PIF_090         cachexic
## NETL_005_V1     cachexic
## PIF_115         cachexic
## ...                  ...
## NETCR_019_V2     control
## NETL_012_V1      control
## NETL_012_V2      control
## NETL_003_V1      control
## NETL_003_V2      control
```

```
colnames(colData(se))
```

```
## [1] "Muscle.loss"
```

```
se
```

```
## class: SummarizedExperiment
## dim: 63 77
## metadata(0):
## assays(1): counts
## rownames(63): 1.6-Anhydro-beta-D-glucose 1-Methylnicotinamide ...
##   pi-Methylhistidine tau-Methylhistidine
## rowData names(0):
## colnames(77): PIF_178 PIF_087 ... NETL_003_V1 NETL_003_V2
## colData names(1): Muscle.loss
```

Una vegada creat el *SummarizedExperiment*, el guardarem en un arxiu en format .Rda com indica l'enunciat:

```
save(se, file = "se_cachexia.rda")
```

ANÀLISIS EXPLORATORI

```
load("se_cachexia.rda")
```

```
apply(assay(se), 1, summary)
```

```
##         1.6-Anhydro-beta-D-glucose 1-Methylnicotinamide 2-Aminobutyrate
## Min.                       4.7100              6.42000         1.28000
## 1st Qu.                   28.7900             15.80000         5.26000
## Median                    45.6000             36.60000        10.49000
## Mean                     105.6304             71.57364        18.15974
## 3rd Qu.                  141.1700             73.70000        19.49000
## Max.                     685.4000           1032.77000       172.43000
##         2-Hydroxyisobutyrate 2-Oxoglutarate 3-Aminoisobutyrate
## Min.                 4.85000         5.5300            2.61000
## 1st Qu.             15.80000        22.4200           11.70000
```

```
## Median              32.46000        55.1500           22.65000
## Mean                37.25065       145.0871           76.75636
## 3rd Qu.             54.60000        92.7600           56.26000
## Max.                93.69000      2465.1300         1480.30000
##         3-Hydroxybutyrate 3-Hydroxyisovalerate 3-Indoxylsulfate
## Min.              1.70000              0.92000          27.6600
## 1st Qu.           5.99000              5.26000          82.2700
## Median           11.70000             12.55000         144.0300
## Mean             21.71701             21.64779         218.8792
## 3rd Qu.          29.96000             30.27000         333.6200
## Max.            175.91000            164.02000        1043.1500
##         4-Hydroxyphenylacetate   Acetate   Acetone   Adipate   Alanine
## Min.                    15.490   3.49000   2.29000   1.55000   16.7800
## 1st Qu.                 41.680  16.28000   4.95000   6.11000   78.2600
## Median                  70.110  39.65000   7.10000  10.18000  194.4200
## Mean                   112.021  66.14143  11.42701  24.75636  273.5623
## 3rd Qu.                145.470  86.49000  10.49000  19.11000  399.4100
## Max.                   796.320 411.58000 206.44000 327.01000 1312.9100
##         Asparagine   Betaine Carnitine   Citrate  Creatine Creatinine
## Min.       6.69000   2.29000   2.18000    59.740    2.7500   1002.250
## 1st Qu.   20.49000  28.79000  14.44000   788.400   17.6400   3498.190
## Median    42.10000  64.72000  23.81000  1790.050   44.2600   7631.200
## Mean      62.28364  90.32468  52.08506  2235.346  126.8319   8733.972
## 3rd Qu.   89.12000 127.74000  60.95000  3071.740  117.9200  12332.580
## Max.     273.14000 391.51000 487.85000 13629.610 1863.1100  33860.350
##         Dimethylamine Ethanolamine  Formate    Fucose Fumarate   Glucose
## Min.          41.2600      16.1200    6.420   5.70000  0.79000   26.8400
## 1st Qu.      142.5900      86.4900   53.520  29.37000  2.23000   80.6400
## Median       304.9000     204.3800   95.580  61.56000  4.10000  210.6100
## Mean         358.1661     276.2604  147.403  88.66883  8.44013  559.8445
## 3rd Qu.      454.8600     407.4800  167.340 123.97000  7.85000  407.4800
## Max.        1556.2000    1436.5500 1480.300 407.48000 96.54000 8690.6200
##         Glutamine   Glycine Glycolate Guanidoacetate Hippurate Histidine
## Min.      23.3400   38.0900    5.4200        7.03000    92.760   14.1500
## 1st Qu.  113.3000  262.4300   50.9100       33.78000   492.750   66.6900
## Median   225.8800  528.4800  130.3200       64.72000  1224.150  174.1600
## Mean     306.8716  880.7174  187.9894       86.37052  2286.838  292.6375
## 3rd Qu.  445.8600 1096.6300  267.7400      108.85000  2921.930  419.8900
## Max.    1685.8100 5064.4500  720.5400      561.16000 19341.340 1863.1100
##         Hypoxanthine Isoleucine   Lactate   Leucine   Lysine Methylamine
## Min.         3.78000   1.790000    7.3200   2.51000  10.4900     1.51000
## 1st Qu.     20.70000   3.900000   35.5200   9.12000  30.2700     5.26000
## Median      40.04000   7.170000   81.4500  19.11000  69.4100    14.73000
## Mean        61.09766   8.709091  158.4565  24.36364 108.7942    17.37623
## 3rd Qu.     83.93000  11.250000  139.7700  31.19000 121.5100    24.05000
## Max.       265.07000  40.040000 3640.9500 103.54000 788.4000    52.46000
##         Methylguanidine N.N-Dimethylglycine O-Acetylcarnitine Pantothenate
## Min.            1.70000             0.79000           1.23000      2.59000
## 1st Qu.         4.26000             7.03000           3.94000     11.13000
## Median          7.85000            21.98000          11.47000     22.65000
## Mean           15.32455            26.34961          19.73338     44.88377
## 3rd Qu.        19.30000            40.04000          20.91000     41.26000
## Max.          141.17000           120.30000         254.68000    692.29000
##         Pyroglutamate  Pyruvate Quinolinate    Serine Succinate   Sucrose
```

```
## Min.          21.3300   0.90000     5.21000   16.1200   1.72000    6.4900
## 1st Qu.       68.7200   4.85000    26.58000   83.1000   8.58000   19.3000
## Median       157.5900  13.46000    51.42000  142.5900  30.88000   40.8500
## Mean         211.4478  21.29442    66.43948  197.6869  60.22909  113.2278
## 3rd Qu.      301.8700  29.08000    87.36000  270.4300  74.44000   94.6300
## Max.        1064.2200 184.93000   259.82000 1248.8800 589.93000 2079.7400
##          Tartrate   Taurine Threonine Trigonelline Trimethylamine N-oxide
## Min.      2.20000   17.8100    8.2500      10.0700                55.7000
## 1st Qu.   6.89000   99.4800   31.8200      53.5200               175.9100
## Median   12.94000  249.6400   64.0700     114.4300               383.7500
## Mean     40.00403  525.1235   95.3574     270.4361               652.1569
## 3rd Qu.  25.79000  665.1400  137.0000     340.3600               735.1000
## Max.    837.15000 4272.6900  450.3400    2252.9600              5486.2500
##          Tryptophan  Tyrosine    Uracil    Valine    Xylose cis-Aconitate
## Min.        8.67000   4.22000   3.10000   4.10000   10.0700       12.9400
## 1st Qu.    21.33000  23.57000  11.94000  12.18000   29.9600       36.2300
## Median     46.99000  60.34000  27.39000  33.12000   50.4000      129.0200
## Mean       66.24312  81.75727  35.55766  35.66701  100.9334      204.2197
## 3rd Qu.    96.54000 113.30000  44.26000  50.40000   89.1200      254.6800
## Max.      259.82000 539.15000 179.47000 160.77000 2164.6200     1863.1100
##          myo-Inositol trans-Aconitate pi-Methylhistidine tau-Methylhistidine
## Min.          11.5900         4.90000            11.3600             8.00000
## 1st Qu.       30.2700        12.43000            67.3600            27.39000
## Median        78.2600        26.84000           162.3900            68.72000
## Mean         135.3975        40.63039           370.2883            89.68688
## 3rd Qu.      167.3400        57.40000           387.6100           130.32000
## Max.         854.0600       217.02000          2697.2800           317.35000
```

```
dim(se) #Nombre de files i columnes
```

```
## [1] 63 77
```

Ena quest cas, es pot deduïr que les variables són 63 concentracions de metabòlits analitzats en la orina de 77 individus. Totes les variables, doncs, són numèriques.

```
anyNA(assay(se)) #No hi ha valors faltants (NA) en la matriu de dades
```

```
## [1] FALSE
```

```
colnames(colData(se))
```

```
## [1] "Muscle.loss"
```

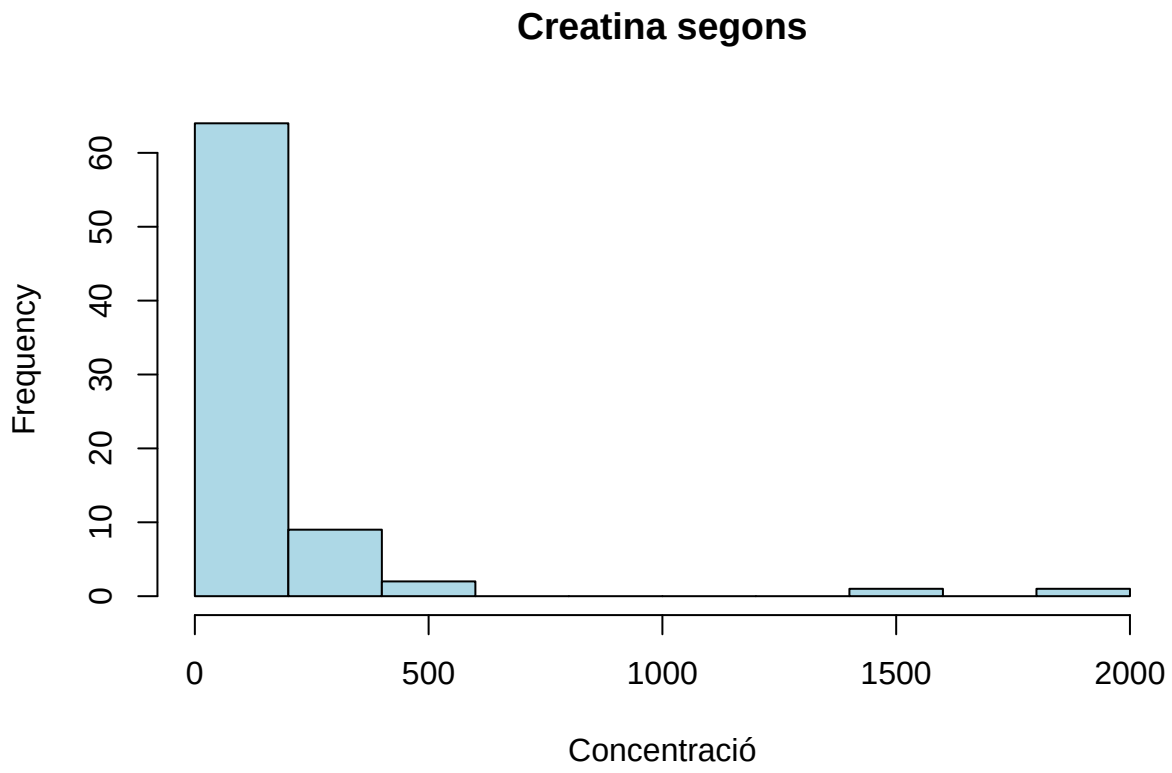
```
colData(se)
```

```
## DataFrame with 77 rows and 1 column
##              Muscle.loss
##                 <factor>
## PIF_178         cachexic
## PIF_087         cachexic
## PIF_090         cachexic
```

```
## NETL_005_V1     cachexic
## PIF_115         cachexic
## ...                  ...
## NETCR_019_V2     control
## NETL_012_V1      control
## NETL_012_V2      control
## NETL_003_V1      control
## NETL_003_V2      control
```

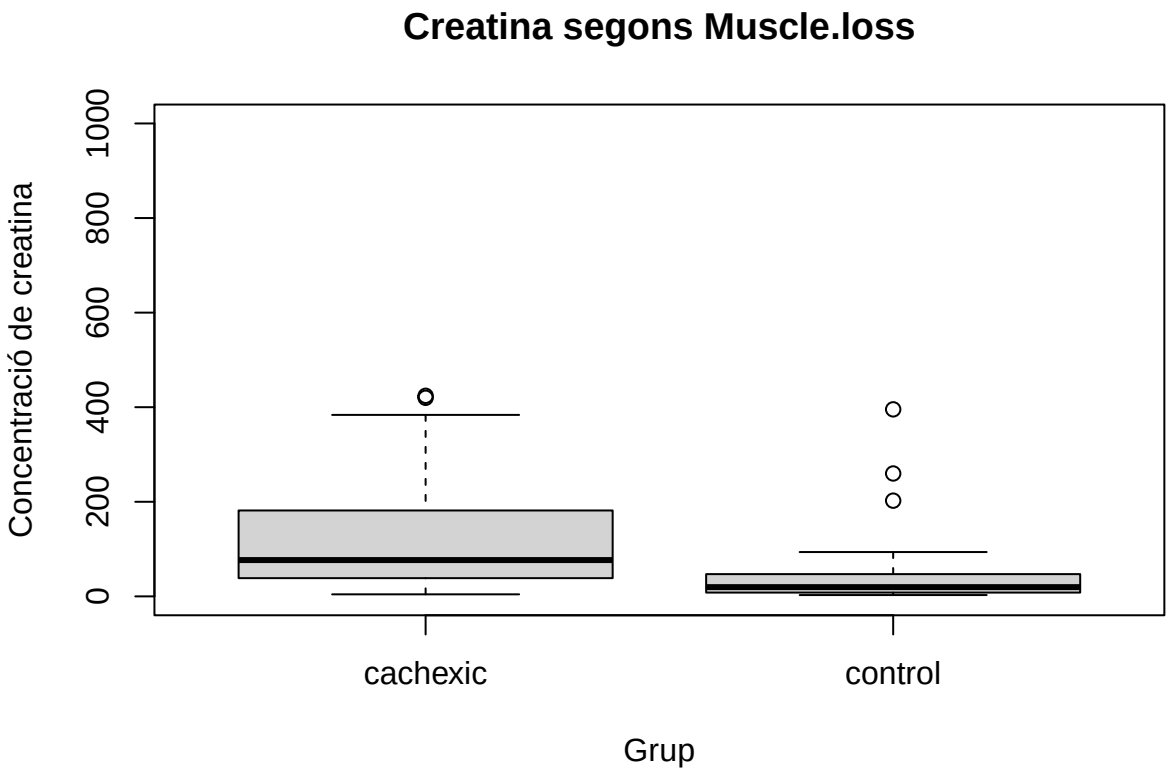
Podem observar de forma general que aquestes dades consten d'un OOP *summarizedExperiment* on la matriu de dades està format per 77 pacients (columnes) els quals estàn dividits pel grup "Muscle.Loss" i 63 metabòlits (files) que són les concentracions de diferents metabòlits analitzades en les mostres d'orina proporcionades pels pacients.

```
Creatina <- assay(se)["Creatine", ] #Extraim le concentracions del metabòlit "creatine"
muscle_loss <- colData(se)$Muscle.loss #ExtraIm el grup Muscle.loss
#Creem un histograma
hist(Creatina,
     main = "Creatina segons",
     xlab = "Concentració",
     col = "lightblue")
```




```
boxplot(Creatina ~ muscle_loss,
        main = "Creatina segons Muscle.loss",
        xlab = "Grup",
```

```
        ylab = "Concentració de creatina",
        ylim = c(0, 1000))
```




```
t.test(Creatina ~ muscle_loss)
```

```
##
##  Welch Two Sample t-test
##
## data:  Creatina by muscle_loss
## t = 2.3988, df = 55.284, p-value = 0.01985
## alternative hypothesis: true difference in means between group cachexic and group control is not equa
## 95 percent confidence interval:
##   20.3217 226.4964
## sample estimates:
## mean in group cachexic  mean in group control
##              174.91340               51.50433
```

Mitjançant aquest anàlisi bàsic podem observar que el metabòlit creatina mostra una diferència significativa en la concentració entre els grups Muscle.loss. Observem que la mitjana en el grup que tenen *cachexia* (pèrdua constant de massa muscular) és significativament superior (174.91) a la del grup control (51.50) amb un interval de confiança de [20.32 - 226.50]. Aquests resultats poden indicar que la concentració de creatina en la orina podria estar relacionada amb l'estat de cachexia i, per tant, podria ser un potencial marcador per ajudar a diagnosticar aquesta malaltia.

```r
rownames(se)
```

```
##  [1] "1.6-Anhydro-beta-D-glucose" "1-Methylnicotinamide"
##  [3] "2-Aminobutyrate"            "2-Hydroxyisobutyrate"
##  [5] "2-Oxoglutarate"             "3-Aminoisobutyrate"
##  [7] "3-Hydroxybutyrate"          "3-Hydroxyisovalerate"
##  [9] "3-Indoxylsulfate"           "4-Hydroxyphenylacetate"
## [11] "Acetate"                    "Acetone"
## [13] "Adipate"                    "Alanine"
## [15] "Asparagine"                 "Betaine"
## [17] "Carnitine"                  "Citrate"
## [19] "Creatine"                   "Creatinine"
## [21] "Dimethylamine"              "Ethanolamine"
## [23] "Formate"                    "Fucose"
## [25] "Fumarate"                   "Glucose"
## [27] "Glutamine"                  "Glycine"
## [29] "Glycolate"                  "Guanidoacetate"
## [31] "Hippurate"                  "Histidine"
## [33] "Hypoxanthine"               "Isoleucine"
## [35] "Lactate"                    "Leucine"
## [37] "Lysine"                     "Methylamine"
## [39] "Methylguanidine"            "N.N-Dimethylglycine"
## [41] "O-Acetylcarnitine"          "Pantothenate"
## [43] "Pyroglutamate"              "Pyruvate"
## [45] "Quinolinate"                "Serine"
## [47] "Succinate"                  "Sucrose"
## [49] "Tartrate"                   "Taurine"
## [51] "Threonine"                  "Trigonelline"
## [53] "Trimethylamine N-oxide"     "Tryptophan"
## [55] "Tyrosine"                   "Uracil"
## [57] "Valine"                     "Xylose"
## [59] "cis-Aconitate"              "myo-Inositol"
## [61] "trans-Aconitate"            "pi-Methylhistidine"
## [63] "tau-Methylhistidine"
```

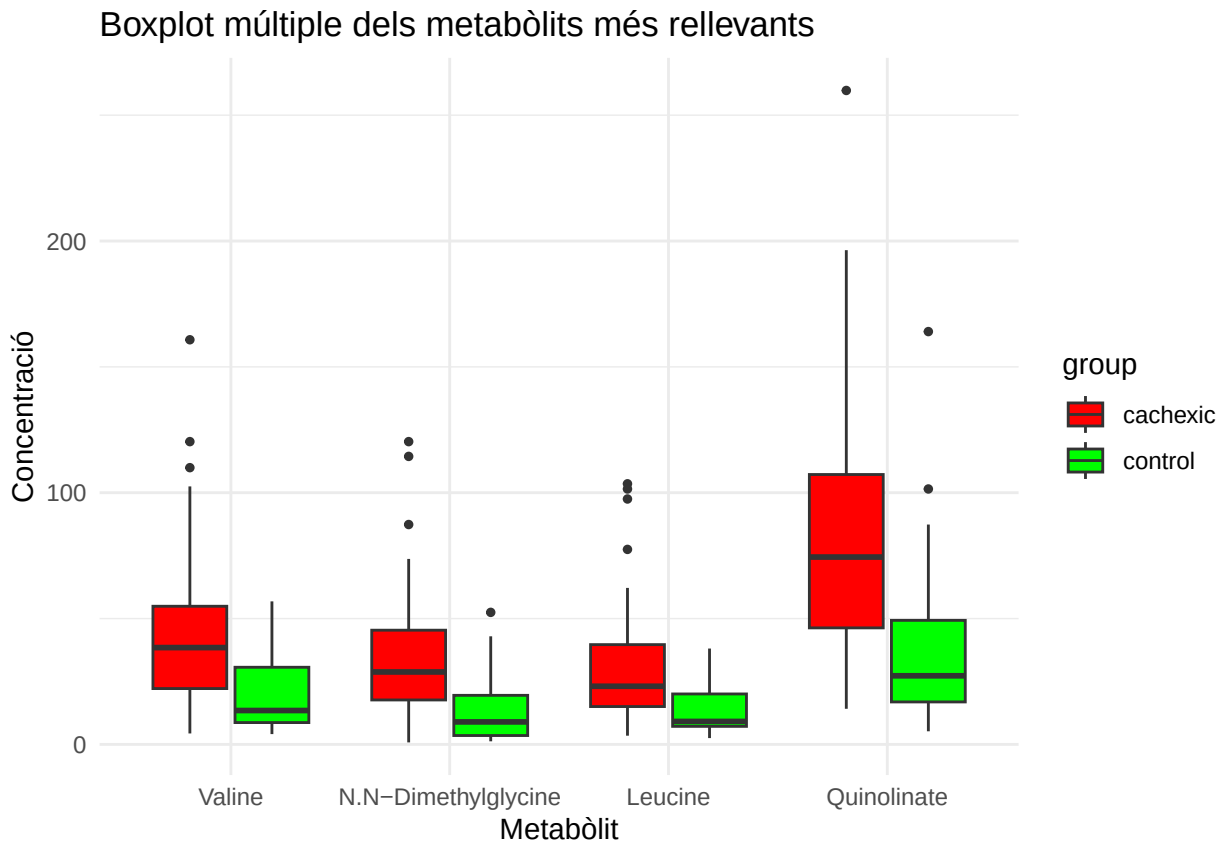
Seguidament, sseguirem amb l'anàlisis estadístic descriptiu mitjançant un boxplot múltiple. Com que no podem fer un boxplot dels 63 metabòlits, farem un t-test univariant per a cada metabòlit i seleccionarem els 6 metabòlits que tinguin p-valors més baixos.

```r
metab <- assay(se)
group <- colData(se)$Muscle.loss
#Fem un t-test per a cada metabòlit i guardem els p-valors dels t-tests
p_valors <- apply(metab, 1, function(x) {
  tryCatch(t.test(x ~ group)$p.value, error = function(e) NA)
})
#Ordenem els metabòlits segons els p-valors que tinguin del t-test
p_valors_ordenats <- sort(p_valors)
top_metabolits <- names(p_valors_ordenats)[1:4]
top_metabolits
```

```
## [1] "Valine"              "N.N-Dimethylglycine" "Leucine"
## [4] "Quinolinate"
```

Aquests són els metabòlits que han donat més nivell de significació fent el t-test segons la variable grup *Muscle.loss*. Per tant, haurien de ser els que tenen diferències més significatives de concentracions segons si els pacients tenen *cachexia* o no.

```
library(reshape2)
library(ggplot2)
#Seleccionem els metabòlits
top_metabolits <- c("Valine", "N.N-Dimethylglycine", "Leucine", "Quinolinate")
#Extraïm la matriu només amb els metabòlits seleccionats
top_data <- assay(se)[top_metabolits, ]
#Preparem les dades per ggplot2 (passem les mostres a les files en comptes de les columnes i anyadim la
top_data_prep <- as.data.frame(t(top_data))
top_data_prep$group <- colData(se)$Muscle.loss #Anyadim la columna group
#Format compatible amb boxplot
data_met <- reshape2::melt(top_data_prep, id.vars = "group",
                           variable.name = "metabòlit",
                           value.name = "concentració")
#Amb les dades preparades, procedim a fer el boxplot múltiple
ggplot(data_met, aes(x = metabòlit, y = concentració, fill = group)) +
  geom_boxplot(outlier.size = 1) +
  labs(title = "Boxplot múltiple dels metabòlits més rellevants",
       x = "Metabòlit",
       y = "Concentració") +
  scale_fill_manual(values = c("cachexic" = "red", "control" = "green")) + #Separem grups amb colors (M
  theme_minimal()
```



Aquest gràfic mostra les diferències de concentracions dels 4 metabòlits que presenten més diferències

significatives segons la variables categórica *Muscle.loss*. Tal i com s'observa en el gràfic, els 4 metabòlits tenen majors concentracions en els individus que presenten la malaltia *cachexia* que en els individus del grup control.

Pas 1: Anàlisi de Components Principals (PCA)

Mitjançant aquest tipus d'anàlisis, l'objectiu serà reduïr la dimensió de les dades i visualitzar si les mostres s'agrupen segons "Muscle.Loss" (*cachexia/control*) basant-se en els seus perfils metabolòmics:

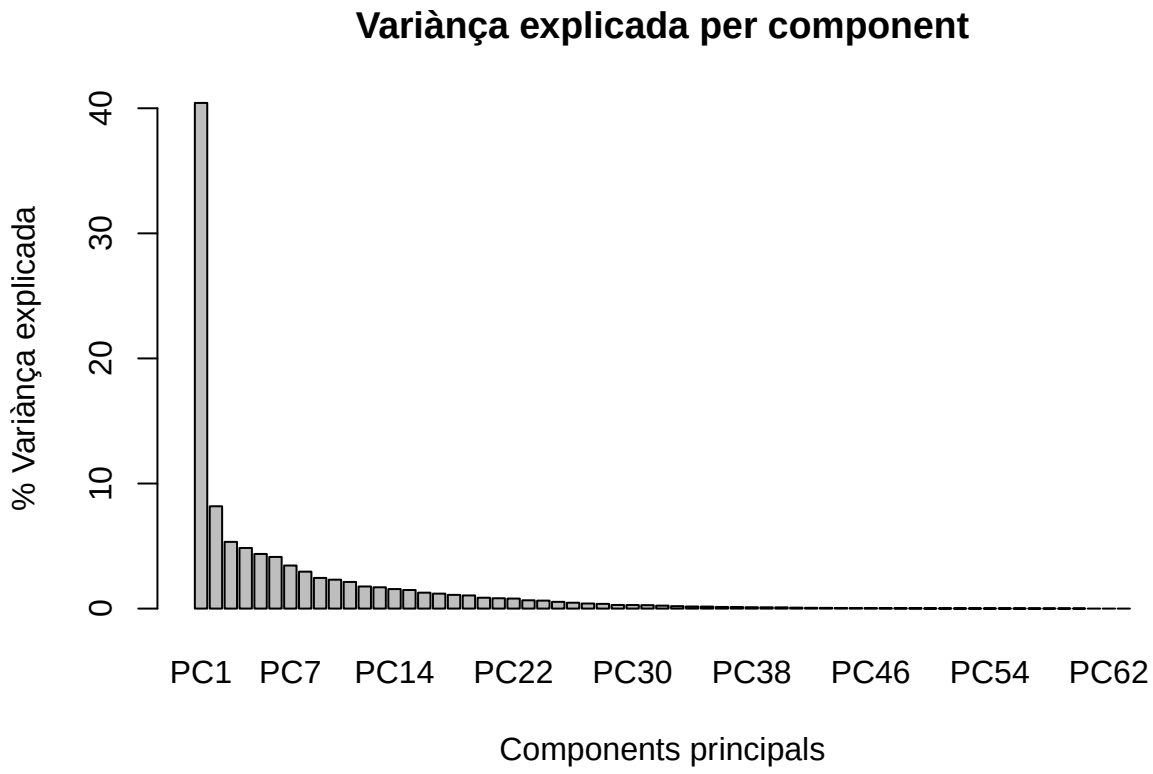
Matriuc covariança FACER*

```
#Trasposem la matriu per tenir les mostres com a files i els metabòlits com a columnes
t_data <- t(assay(se))
cach_control <- colData(se)$Muscle.loss
#És recomanable centrar i escalar les variables quan estàn en diferents escales, en el nostre cas algun
pca_resultats <- prcomp(t_data, scale. = TRUE) #Calcula internament la matriu de covariàncies i centra
summary(pca_resultats)
```

```
## Importance of components:
##                           PC1    PC2     PC3     PC4     PC5    PC6     PC7
## Standard deviation     5.0467 2.2701 1.83311 1.74728 1.65906 1.6130 1.47304
## Proportion of Variance 0.4043 0.0818 0.05334 0.04846 0.04369 0.0413 0.03444
## Cumulative Proportion  0.4043 0.4861 0.53941 0.58787 0.63156 0.6729 0.70730
##                           PC8     PC9    PC10   PC11    PC12    PC13   PC14
## Standard deviation     1.36403 1.24275 1.20650 1.1584 1.05503 1.03620 0.9914
## Proportion of Variance 0.02953 0.02451 0.02311 0.0213 0.01767 0.01704 0.0156
## Cumulative Proportion  0.73683 0.76135 0.78445 0.8057 0.82342 0.84046 0.8561
##                           PC15    PC16    PC17    PC18   PC19    PC20    PC21
## Standard deviation     0.96773 0.89551 0.86788 0.83041 0.8133 0.73918 0.72112
## Proportion of Variance 0.01487 0.01273 0.01196 0.01095 0.0105 0.00867 0.00825
## Cumulative Proportion  0.87093 0.88366 0.89562 0.90656 0.9171 0.92573 0.93399
##                           PC22    PC23    PC24   PC25   PC26    PC27    PC28
## Standard deviation     0.71053 0.64606 0.63389 0.5830 0.5442 0.50539 0.48743
## Proportion of Variance 0.00801 0.00663 0.00638 0.0054 0.0047 0.00405 0.00377
## Cumulative Proportion  0.94200 0.94863 0.95500 0.9604 0.9651 0.96916 0.97293
##                           PC29    PC30    PC31    PC32    PC33    PC34    PC35
## Standard deviation     0.42674 0.42427 0.41483 0.38653 0.35092 0.32424 0.31646
## Proportion of Variance 0.00289 0.00286 0.00273 0.00237 0.00195 0.00167 0.00159
## Cumulative Proportion  0.97582 0.97867 0.98141 0.98378 0.98573 0.98740 0.98899
##                           PC36    PC37    PC38    PC39    PC40    PC41    PC42
## Standard deviation     0.2867 0.28435 0.26060 0.25353 0.24800 0.21896 0.19537
## Proportion of Variance 0.0013 0.00128 0.00108 0.00102 0.00098 0.00076 0.00061
## Cumulative Proportion  0.9903 0.99158 0.99266 0.99368 0.99465 0.99541 0.99602
##                           PC43   PC44    PC45   PC46    PC47   PC48    PC49
## Standard deviation     0.18914 0.1767 0.16864 0.1580 0.15287 0.1380 0.13101
## Proportion of Variance 0.00057 0.0005 0.00045 0.0004 0.00037 0.0003 0.00027
## Cumulative Proportion  0.99659 0.9971 0.99753 0.9979 0.99830 0.9986 0.99888
##                           PC50    PC51    PC52    PC53    PC54    PC55    PC56
## Standard deviation     0.10759 0.10374 0.09853 0.08760 0.08258 0.08049 0.06927
## Proportion of Variance 0.00018 0.00017 0.00015 0.00012 0.00011 0.00010 0.00008
## Cumulative Proportion  0.99906 0.99923 0.99939 0.99951 0.99962 0.99972 0.99979
##                           PC57    PC58    PC59    PC60    PC61    PC62    PC63
## Standard deviation     0.05937 0.05673 0.05088 0.04001 0.02972 0.02789 0.01876
## Proportion of Variance 0.00006 0.00005 0.00004 0.00003 0.00001 0.00001 0.00001
## Cumulative Proportion  0.99985 0.99990 0.99994 0.99997 0.99998 0.99999 1.00000
```

Observem en els resultats de l'anàlisis de components principals que els dos primers ja tenen una variabilitat del **48.61%**, que ja es considera bastant alta per ser dades òmiques. Seguidament

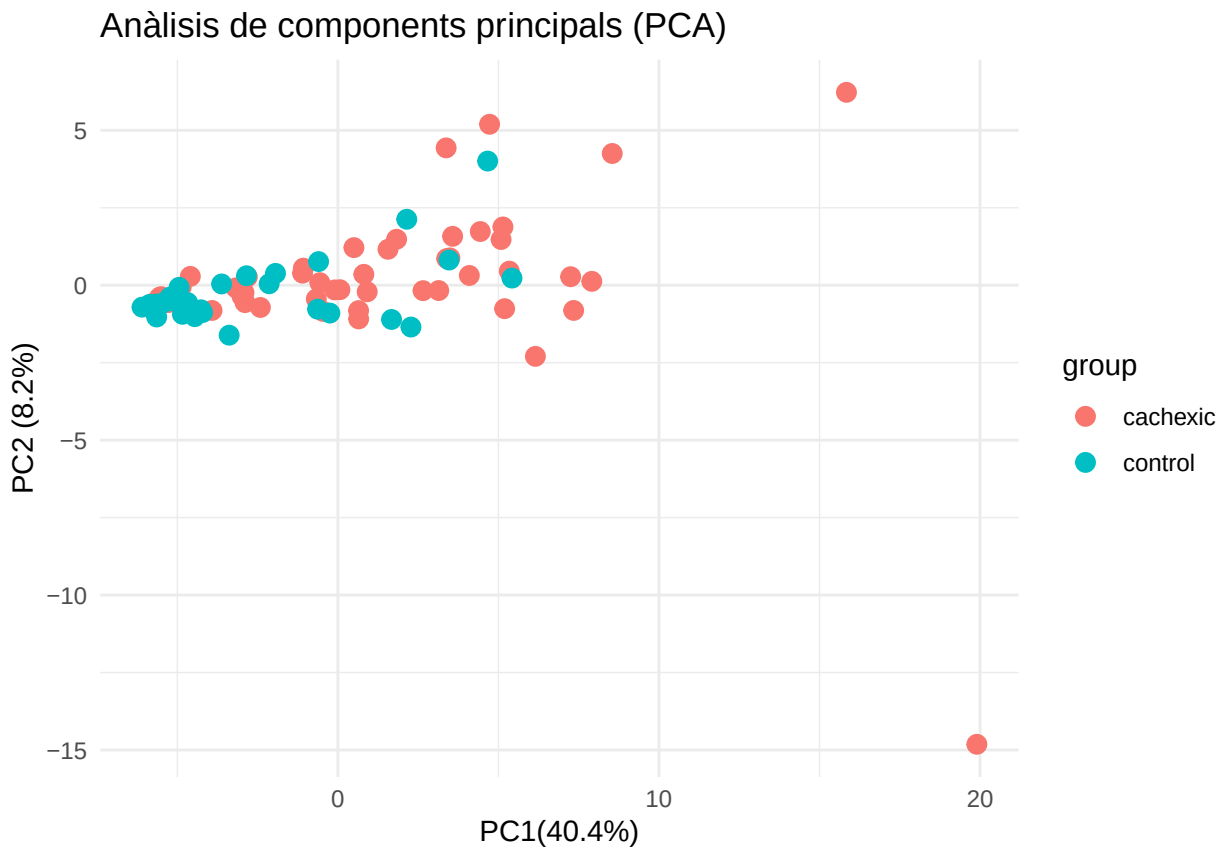
```
var_explicada <- summary(pca_resultats)$importance[2, ] * 100 #Seleccionem PC1 i PC2
barplot(var_explicada,
        main = "Variança explicada per component",
        xlab = "Components principals",
        ylab = "% Variança explicada",
)
```



Ara ut8ilitzarem els valors dels primers components principals per a obtenir una representació de les dades en una dimensió reduïda.

```
pca_d <- as.data.frame(pca_resultats$x) #Cada fila representa una mostra i cada columna un PCA
pca_d$group <- cach_control #Afegim la classe de cada mostra
library(ggplot2)
ggplot(pca_d, aes(x = PC1, y = PC2, color = group)) + #Separem per grup segons el color
  geom_point(size = 3) +
  labs(
    title = "Anàlisis de components principals (PCA)",
    x = paste0("PC1(", round(var_explicada[1], 1), "%)"),
    y = paste0("PC2 (", round(var_explicada[2], 1), "%)")

  ) + theme_minimal()
```



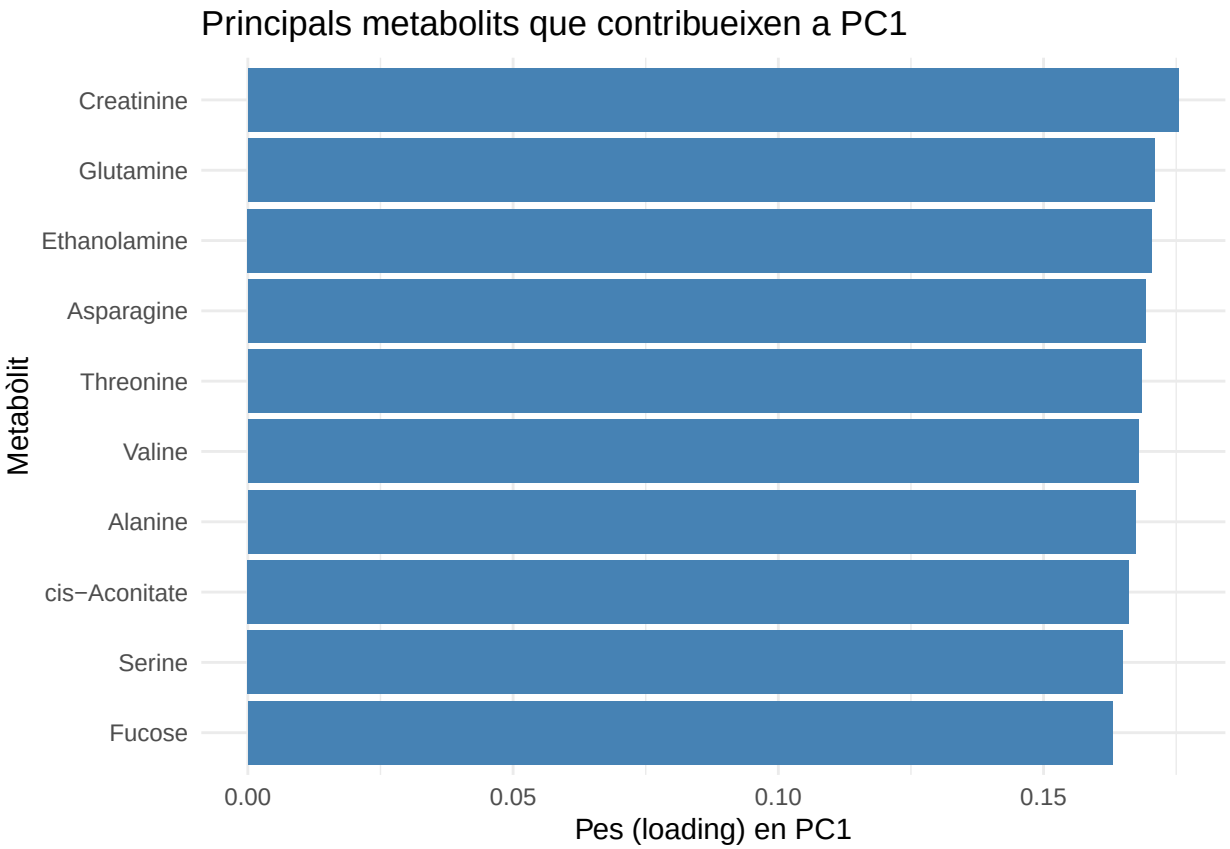
S'ha realitzar un anàlisi de components principals sobre la matriu de concentracions de metabòlits. Prèviament s'han centrat i escalat les dades per a evitar que les diferències d'escala entre les variables afectin l'anàlisi. Els dos primers components principals, com es pot observar, expliquen gairebé un 50% de la variança total (48.6%).

La magnitud de la contribució de cada variable a les PC són els seus "loadings" en cada PC. Els autovectors (eigenvectors) associats a la matriu de covariança són els loadings, indiquen quina direcció prenen els nous components i quines variables (metabòlits) contribueixen més.

```
#Creem un data frame amb els loadings
loadings_pca <- as.data.frame(pca_resultats$rotation)
loadings_pca$metabolit <- rownames(loadings_pca)
```

```
top_PC1 <- loadings_pca[order(abs(loadings_pca$PC1), decreasing = TRUE), ][1:10, ]

ggplot(top_PC1, aes(x =reorder(metabolit, PC1), y = PC1)) +
  geom_col(fill = "steelblue") +
  coord_flip() +
  labs(title = "Principals metabolits que contribueixen a PC1",
       x = "Metabòlit",
       y = "Pes (loading) en PC1") +
  theme_minimal()
```


Principals metabolits que contribueixen a PC1
Creatinine
Glutamine
Ethanolamine
Asparagine
Threonine
Valine
Alanine
cis−Aconitate
Serine
Fucose
Metabòlit
0.00
0.05
0.10
0.15
Pes (loading) en PC1