# Prova de d'avaluación continua 1

## Bianca Teresa Castro Criado

## 30/03/2025

# Índice

0.1	Resum	. 1
0.2	Objectius	. 1
0.3	Mètodes	. 1
0.4	Resultats	. 10
0.5	Discussió	. 11
0.6	Referències	. 11

### 0.1 Resum

Aquest informe presenta una anàlisi de dades de fosfoproteòmica de dos tipus de tumors (MSS I PD), el qual es centra en la seva organització, exploració i interpretació. Primer, s'ha seleccionat un conjunt de dades i s'ha estructurat en un objecte SummarizedExperiment, facilitant-ne la gestió i l'anàlisi. A continuació, s'han aplicat tècniques d'anàlisi exploratòria, incloent la normalització i la visualització mitjançant PCA, per identificar patrons i variabilitat en les dades. Els resultats obtinguts proporcionen informació sobre la distribució i característiques de les mostres. S'ha conclòs que els pèptids son deferents pels dos tipus de tumors.

## 0.2 Objectius

L'objectiu principal d'aquest treball és realitzar una anàlisi de les dades mitjançant eines bioinformàtiques i estadístiques, amb la finalitat d'obtenir coneixements rellevants sobre el conjunt de dades proporcionat. Concretament, es busca:

- Explorar les dades i identificar patrons significatius.
- Aplicar tècniques estadístiques per validar resultats.
- Integrar codi i anàlisi en un document clar i estructurat.

### 0.3 Mètodes

Les dades escollides són aquelles recollides a l'arxiu TIO2+PTYR-human-MSS+MSIvsPD del repositori de GitHub proporcionat. Les dades provenen de un experiment de fosfoproteòmica que ha analitzat (3+3) models PDX de dos subtipus diferents de tumors mitjançant mostres enriquides en fosfopèptids. L'anàlisi es

va dur a terme mitjançant LC-MS, amb 2 rèpliques tècniques per mostra. El conjunt de resultats consisteix en abundàncies normalitzades dels senyals de MS per a aproximadament 1400 fosfopèptids.

Tant ExpressionSet com SummarizedExperiment són clases emprades per gestionar dades òmiques, i tot i compartir algunes similituds, presenten diferències importants en flexibilitat i aplicació. ExpressionSet, que forma part del paquet Biobase i és més antic, conté tres components principals: exprs() per a la matriu d'expressió (valors de senyal gènic, proteic, RNA, etc), pData() per a les metadades de les mostres i fData() per a les metadades de la unitat biológica/anotacions. És adequat per a dades d'expressió tradicionals (microarrays o RNA-seq senzills), però és limitat per a dades complexes, ja que no permet gestionar múltiples matrius ni nivells de dades. En canvi, SummarizedExperiment, que és més recent que l'ExpressionSet, ofereix una estructura més flexible amb assays() per emmagatzemar una o més matrius d'expressió, colData() per a metadades de mostres, rowData() per a metadades de característiques i metadata() per informació addicional. Això el fa ideal per a dades obtingudes per metodologies més complexes, ja que permet gestionar múltiples tipus de dades.

A continuació es detalla el procés de creació d'un SummarizedExperiment:

```
library(readxl)
library(SummarizedExperiment)
## Loading required package: MatrixGenerics
## Loading required package: matrixStats
##
## Attaching package: '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
##
## Loading required package: GenomicRanges
## Loading required package: stats4
## Loading required package: BiocGenerics
## Attaching package: '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
##
## Loading required package: S4Vectors
##
## Attaching package: 'S4Vectors'
## The following object is masked from 'package:utils':
##
##
       findMatches
## The following objects are masked from 'package:base':
##
##
       expand.grid, I, unname
## Loading required package: IRanges
## Loading required package: GenomeInfoDb
## Loading required package: Biobase
## Welcome to Bioconductor
##
##
       Vignettes contain introductory material; view with
##
       'browseVignettes()'. To cite Bioconductor, see
       'citation("Biobase")', and for packages 'citation("pkgname")'.
##
## Attaching package: 'Biobase'
## The following object is masked from 'package:MatrixGenerics':
##
##
       rowMedians
## The following objects are masked from 'package:matrixStats':
##
##
       anyMissing, rowMedians
```

```
# Primer s'importen les dades i s'assignen a una variable
dades <- "/Users/biancacastrocriado/Desktop/metaboData/Datasets/2018-Phosphoproteomics/TIO2+PTYR-human-
# Després, com a l'arxiu hi ha dos fulls, s'assigna al primer d'ells la ruta a l'arxiu
# excel amb les dades de la matriu i anotacions sobre els fosfopèptids.
# A la variable dades_mostres s'assignen les dades relatives a les mostres.
primer_full <- read_excel(dades, sheet = "originalData")</pre>
metadata mostres <- read excel(dades, sheet = "targets")</pre>
## New names:
## * 'Sample' -> 'Sample...1'
## * 'Sample' -> 'Sample...2'
# Llavors es crea primer el dataframe que es passarà a la funció SummarizedExperiment
# per crear l'objecte i que contrindrà la ColData que, com s'ha mencionat anteriorment,
# emmagatzema la informació relativa a les mostres, que es la informació que es troba
# a les columnes i que ve determinada per la perosna invetigadora (son les metadades
# de la mostra).
print(metadata_mostres)
## # A tibble: 12 x 4
      Sample...1 Sample...2 Individual Phenotype
      <chr>
##
                 <chr>
                                <dbl> <chr>
## 1 M1 1
                                    1 MSS
                                     1 MSS
## 2 M1 2
                M1
## 3 M5_1
                М5
                                     2 MSS
## 4 M5_2
                                     2 MSS
                М5
## 5 T49 1
                                     3 MSS
                T49
## 6 T49_2
                                     3 MSS
                T49
## 7 M42_1
                M42
                                     4 PD
## 8 M42_2
                M42
                                     4 PD
## 9 M43_1
                M43
                                     5 PD
## 10 M43_2
                                     5 PD
                 M43
## 11 M64 1
                 M64
                                     6 PD
## 12 M64 2
                                     6 PD
                 M64
# Com es pot observar, la colData conté dades sobre les mostres per duplicat.
# On la primera columna conté el nom de la mostra que hauria de coincidir amb el nom
# de les columnes de l'Assay (matriu de dades). Si s'exploren els noms de les columnes
# que representen les mostres (més les anotacions):
colnames(primer_full)
## [1] "SequenceModifications" "Accession"
                                                        "Description"
   [4] "Score"
                                "M1_1_MSS"
                                                        "M1 2 MSS"
## [7] "M5 1 MSS"
                                "M5 2 MSS"
                                                        "T49 1 MSS"
## [10] "T49 2 MSS"
                               "M42 1 PD"
                                                        "M42 2 PD"
                               "M43 2 PD"
                                                        "M64 1 PD"
## [13] "M43 1 PD"
## [16] "M64_2_PD"
                                "CLASS"
                                                        "PHOSPHO"
```

```
# Es pot comprovar que no coincideixen. Per tant, es canvia el format de la columna
# per que coincideixi.
metadata_mostres$`Sample...1` <-</pre>
  paste0(metadata_mostres$`Sample...1`, "_", metadata_mostres$Phenotype)
colnames(metadata_mostres)[colnames(metadata_mostres) == "Sample...2"] <- "sample"</pre>
# S'assigna com a nom de les mostres l'informació continguda a Sample...1
metadata_mostres <- as.data.frame(metadata_mostres)</pre>
rownames(metadata mostres) <- metadata mostres$`Sample...1`</pre>
metadata_mostres$`Sample...1` <- NULL</pre>
# Atès que l'experiment és de fosfoproteòmica la unitat biològica de cada fila són
# fosfopèptids, les files s'han d'identificar per un identificador únic per a cada
# fosfopèptid. Respecte a les columnes del dataset, cap de les variables sembla adequada
# com a identificador. Això és deguta a que, per exemple, SequenceModifications conté la
# sequência del peptid juntament amb les seves modificacions post-traduccionals, informació
# que seria més adequada per la secció rowData. La variable description tampoc seria una
# bona opció perquè moltes files tenen la mateixa descripció, ja que diversos fosfopèptids
# poden provenir de la mateixa proteïna. De la mateixa manera, accesion es el número
# identidicatiu a Uniprot de la proteïna que pot patir una modificació post-traduccional a
# un dels seus pèptids, pel que tampoc seria adequada. Per tant, primer es crea el
# dataframe de rowData (que inclou anotacions sobre el pèptid en qüestió, que seria
# el metadata dels pèptids).
# Primer s'ha de crear un vector que contingui els identificadors dels pèptids.
# Aquest vector será tan llarg com pèptids hi hagi.
peptide_names <- paste0("peptide ", seq_len(nrow(primer_full)))</pre>
# Després, es crea el dataframe que contidrá l'assay data, que serán les dades
# numériques de l'abundància normalitzada de la senyal MS dels pèptids.
# També s''assqna com a nom de les files l'identificador dels pèptids.
assay_data <- data.frame(primer_full[5:16], row.names = peptide_names)</pre>
# Se sequeix el mateix procediment per crear la secció de les anotacions,
# on s'emmagatzemarà la informació de SequenceModification, el accesion number,
# description, Score (elque ha de ser una mètrica de qualitat d'identificació
# del fosfopèptid a l'espectrometria de masses), la classe i l'aminoàcid on succeeix
# la fosforilació. A tots aquests també se'ls assigna un identificador del pèptid.
# També s'assigna a les files el nom que es troba a la variable peptide_names.
metadata_peptides <- data.frame(primer_full[c(1:4,17,18)], row.names = peptide_names)</pre>
# Es crea l'objecte SummarizedExperiment
se <- SummarizedExperiment(</pre>
 assays = list(counts = assay_data),
 colData = metadata_mostres,
 rowData = metadata_peptides
)
```

## class: SummarizedExperiment

## dim: 1438 12

```
## metadata(0):
## assays(1): counts
## rownames(1438): peptide 1 peptide 2 ... peptide 1437 peptide 1438
## rowData names(6): SequenceModifications Accession ... CLASS PHOSPHO
## colnames(12): M1_1_MSS M1_2_MSS ... M64_1_PD M64_2_PD
## colData names(3): sample Individual Phenotype
# S'explora l'objecte SummarizedExperiment
# Resum de l'objecte
print(se)
## class: SummarizedExperiment
## dim: 1438 12
## metadata(0):
## assays(1): counts
## rownames(1438): peptide 1 peptide 2 ... peptide 1437 peptide 1438
## rowData names(6): SequenceModifications Accession ... CLASS PHOSPHO
## colnames(12): M1_1_MSS M1_2_MSS ... M64_1_PD M64_2_PD
## colData names(3): sample Individual Phenotype
# Matriu de dades
head(assay(se))
                                       M5_1_{MSS}
##
                 M1_1_MSS
                           M1_2_MSS
                                                  M5_2_{MSS}
                                                              T49_1_MSS T49_2_MSS
## peptide 1
                 24.29438 44475.964
                                          0.000
                                                  6269.141
                                                              1135.8169
                                                                          21933.90
                 0.00000 43138.904
## peptide 2
                                       2102.056 50355.051
                                                               248.9275
                                                                           3239.16
              3412.60332 172143.040 77323.019 307637.429
## peptide 3
                                                             98442.2773 192982.37
## peptide 4 220431.17880 145656.887 104287.815 75887.365 773377.4981 481165.54
## peptide 5 18254.77813
                           8529.755 35955.901 44102.316
                                                             57145.1682
                                                                          34638.01
## peptide 6 644513.31840 261938.025 187023.484 124867.715 4487443.6920 2572575.27
##
               M42_1_PD
                          M42_2_PD
                                        M43_1_PD
                                                    M43_2_PD
                                                                M64_1_PD
## peptide 1
                   0.000
                               0.00
                                        772.9056
                                                    2136.746
                                                                1820.724
               1315.904
                               0.00
                                          0.0000
                                                       0.000
## peptide 2
                                                                   0.000
## peptide 3
              24851.344
                           16547.95
                                       5565.2821
                                                       0.000
                                                                3264.563
## peptide 4 1027196.292 1163747.38 4080239.1820 4885818.113 3093786.793
## peptide 5
              21231.256
                           49499.70 666107.0448 379313.615 255792.117
                                      91361.8781
## peptide 6 535809.187 434645.89
                                                   65997.913 243250.439
                M64_2_PD
## peptide 1
                1727.9098
## peptide 2
                892.3565
## peptide 3
                5901.9577
## peptide 4 2759104.5440
## peptide 5 579765.0018
## peptide 6 206632.6444
# Metadades de les anotacions
head(rowData(se))
## DataFrame with 6 rows and 6 columns
##
              SequenceModifications
                                      Accession
                                                           Description
                                                                           Score
##
                        <character> <character>
                                                           <character> <numeric>
## peptide 1 LYPELSQYMGLSLNEEEIR[..
                                        000560 Syntenin-1 OS=Homo s..
                                                                           48.07
```

```
## peptide 2 VDKVIQAQTAFSANPANPAI..
                                         000560 Syntenin-1 OS=Homo s..
                                                                            67.05
## peptide 3 VIQAQTAFSANPANPAILSE..
                                         000560 Syntenin-1 OS=Homo s..
                                                                            77.71
                                                                            44.87
## peptide 4 HADAEMTGYVVTR[6] Oxi..
                                         015264 Mitogen-activated pr..
## peptide 5 HADAEMTGYVVTR[9] Pho..
                                         015264 Mitogen-activated pr..
                                                                            67.42
## peptide 6 STGPGASLGTGYDR[12] P...
                                         015551 Claudin-3 OS=Homo sa..
                                                                            63.69
##
                   CLASS
                             PHOSPHO
             <character> <character>
## peptide 1
                      Η
## peptide 2
                       Η
                                   Y
                       Η
                                   Y
## peptide 3
## peptide 4
                      Η
                                   Y
## peptide 5
                                   Y
                       Η
## peptide 6
                       Η
                                   Y
# Metadades de les mostres
colData(se)
## DataFrame with 12 rows and 3 columns
##
                  sample Individual
                                      Phenotype
##
             <character> <numeric> <character>
## M1_1_MSS
                     M1
                                  1
## M1 2 MSS
                     M1
                                            MSS
                                  1
## M5_1_MSS
                     M5
                                  2
                                            MSS
## M5 2 MSS
                     M5
                                  2
                                            MSS
## T49_1_MSS
                                  3
                     T49
                                            MSS
## ...
                     . . .
                                            . . .
                                . . .
## M42_2_PD
                    M42
                                 4
                                             PD
## M43 1 PD
                     M43
                                  5
                                             PD
## M43_2_PD
                                  5
                     M43
                                             PD
## M64_1_PD
                     M64
                                  6
                                             PD
## M64_2_PD
                    M64
                                  6
                                             PD
#Es quarden les dades en els formats especificats a l'enunciat:
\#Summarize dexperiment:
save(se, file = "SummarizedExperiment phospho.Rda")
#Per carregar-ho posteriorment en un altre arxiu: load("SummarizedExperiment_phospho.Rda")
# Dades en format .txt amb separador tabulador. Es crea un .txt per acada tipus de dades
write.table(assay(se), file = "assay data.txt", sep = "\t", row.names = TRUE, quote = FALSE)
write.table(rowData(se), file = "peptide_metadata.txt", sep = "\t", row.names = TRUE, quote = FALSE)
write.table(colData(se), file = "samples_metadata.txt", sep = "\t", row.names = TRUE, quote = FALSE)
# Es crea l'arxiu markdown amb la descripció de les dades
cat("# Metadades de l'experiment\n
Aquest arxiu acompanya les dades exportades.\n
## arxius:\n
- assay_data.txt: Matriu d'abundància dels pèptids amb les dades quantitatives.\n
- peptide_metadata.txt: Metadades relatives a les mostres, que inclou: el nom de la
mostra, l'individu i el fenotip\n
- samples_metadata.txt: Metadades dels pèptids, que inclouen el accesion number
de Uniprot, la sequència dels pèptids, la descripció de la proteïna on es troba aquest
pèptid, l'Score, la clase y l'aminoàcid on succeeix la fosforilació.\m
", file = "metadades.md")
```

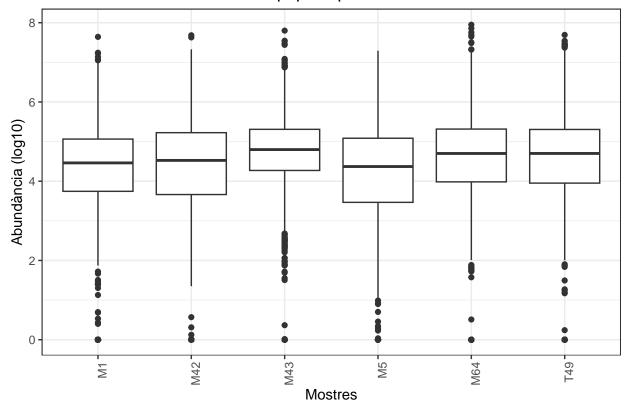
#### summary(assay(se))

```
M1_2_MSS
                                            M5_1_MSS
                                                               M5_2_MSS
##
       M1 1 MSS
                                                        0
##
   Min.
                  0
                      Min.
                                     0
                                         Min.
                                                            Min.
##
   1st Qu.:
               5653
                      1st Qu.:
                                  5497
                                         1st Qu.:
                                                     2573
                                                            1st Qu.:
                                                                        3273
  Median :
              30682
                      Median:
                                 26980
                                         Median :
                                                    20801
                                                            Median :
                                                                       26241
  Mean
         : 229841
                      Mean : 253151
                                         Mean : 232967
                                                            Mean : 261067
                                                            3rd Qu.: 130132
##
   3rd Qu.: 117373
                      3rd Qu.: 113004
                                         3rd Qu.: 113958
##
  Max.
         :16719906
                      Max.
                            :43928481
                                         Max.
                                               :15135169
                                                            Max. :19631820
##
     T49 1 MSS
                        T49_2_MSS
                                            M42 1 PD
                                                               M42 2 PD
                                     0
## Min.
                  0
                                                        0
                                                            Min.
                      Min.
                                         Min.
## 1st Qu.:
               9306
                      1st Qu.:
                                  8611
                                         1st Qu.:
                                                     5341
                                                            1st Qu.:
                                                                        4216
## Median:
              55641
                                 46110
                                                    36854
                                                            Median :
                                                                       30533
                      Median :
                                         Median :
## Mean
         : 542449
                            : 462616
                                               : 388424
                                                                  : 333587
                      Mean
                                         Mean
                                                            Mean
## 3rd Qu.: 223103
                      3rd Qu.: 189141
                                         3rd Qu.: 180252
                                                            3rd Qu.: 152088
          :49218872
                             :29240206
                                                :48177680
                                                                   :42558111
##
   Max.
                      Max.
                                         Max.
                                                            Max.
##
      M43_1_PD
                         M43_2_PD
                                            M64_1_PD
                                                               M64_2_PD
## Min.
                  0
                                     0
                                         Min.
                                                        0
                                                            Min.
         :
                      Min.
                                 17299
##
  1st Qu.:
              19641
                      1st Qu.:
                                         1st Qu.:
                                                    11038
                                                             1st Qu.:
                                                                        8660
## Median :
              67945
                      Median :
                                 59607
                                         Median :
                                                    52249
                                                            Median :
                                                                       47330
## Mean
         : 349020
                      Mean
                            : 358822
                                         Mean : 470655
                                                            Mean
                                                                  : 484712
## 3rd Qu.: 205471
                      3rd Qu.: 201924
                                         3rd Qu.: 209896
                                                             3rd Qu.: 206036
## Max.
         :35049402
                      Max.
                             :63082982
                                         Max.
                                                :71750330
                                                            Max.
                                                                    :88912734
library(ggplot2)
library(tidyr)
##
## Attaching package: 'tidyr'
## The following object is masked from 'package:S4Vectors':
##
##
       expand
# S'aplica una transformació logarítmica, ja que Les dades tenen una distribució
\# molt asimètrica, amb valors mínims de 0 i màxims que arriben a desenes de milions.
# Això fa que la distribució estigui fortament esbiaixada a la dreta (molts valors petits
# i uns pocs valors molt grans). L'aplicació del logaritme ajuda a reduir aquest
# efecte i a fer que la distribució siqui més propera a una normal
dades <- as.data.frame(log10(assay(se) + 1))</pre>
# Es traspossa la matriu perquè cada columna sigui una fila
dades <- t(dades)</pre>
dades <- as.data.frame(dades)</pre>
# S'agrega la información de les mostres desde colData
dades $Mostra <- colData(se) $sample # Ajusta "sample" según el nombre correcto en colData(se)
# La següent línia transforma dades de format ample a llarg, de manera que converteix
# les columnes de pèptids en files. Manté la variable Mostra fixa, crea una columna "Feature"
```

```
# amb els noms dels pèptids i una columna "Abundància" amb els valors corresponents.
# Així, cada fila representa una combinació de mostra, pèptid i abundància, el que facilita
# la creació del boxplot.
dades_long <- pivot_longer(dades, cols = -Mostra, names_to = "Feature", values_to = "Abundància")

ggplot(dades_long, aes(x = Mostra, y = Abundància)) +
    geom_boxplot() +
    theme_bw() +
    theme(axis.text.x = element_text(angle = 90, hjust = 1)) +
    labs(title = "Distribució de l'abundància de pèptids per mostra",
        x = "Mostres",
        y = "Abundància (log10)")</pre>
```

## Distribució de l'abundància de pèptids per mostra



Tal i com es comenta al arxiu que descriu les dades de l'arxiu original, l'objectiu de les dades és buscar fosfopèptids que permetin la diferenciació de dos grups tumorals. Per tal de fer això es pot recórrer a tècniques com el PCA.

```
# Primer ha d'extreure's la matriu d'abundâncies
abundances <- assay(se)
matriu <- as.matrix(log10(abundances + 1))

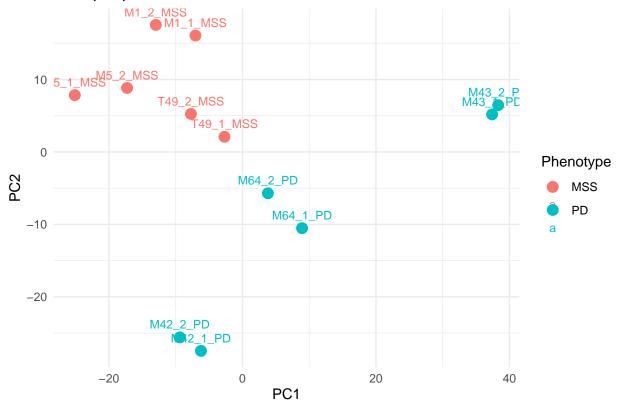
# Es calcula el PCA
pca_res <- prcomp(t(matriu), scale. = FALSE)

# Es crea un dataframe amb les dades i s'hi afegeixen els noms de la mostra i el</pre>
```

```
# fenotip/tipus de tumor. Les metadates s'extreuen directament de l'objecte SummarizedExperiment
pca_data <- as.data.frame(pca_res$x)
pca_data$Sample <- colnames(abundances)
pca_data$Phenotype <- colData(se)$Phenotype

ggplot(pca_data, aes(x = PC1, y = PC2, color = Phenotype, label = Sample)) +
    geom_point(size = 3.5) +
    geom_text(vjust = -1, size = 3) +
    theme_minimal() +
    ggtitle("Phosphoproteomic data") +
    labs(x = "PC1", y = "PC2")</pre>
```

## Phosphoproteomic data



### 0.4 Resultats

L'anàlisi estadística descriptiva mostra una gran variabilitat en l'abundància, amb valors mínims de 0 i màxims que arriben als milions. Aquesta àmplia dispersió suggereix la presència d'alguns pèptids altament abundants juntament amb molts de baixa abundància. A més, la mitjana és significativament superior a la mediana en totes les mostres, indicant una distribució esbiaixada cap a la dreta amb valors extrems que influeixen en la mitjana. També s'observen diferències entre les mostres, amb les etiquetades com a PD mostrant en general valors mitjans i màxims més elevats en comparació amb les MSS, fet que podria reflectir diferències biològiques o experimentals. A més, la presència de valors mínims de 0 en totes les mostres indica que alguns pèptids no han estat detectats en determinades condicions. Es fa una representació de les dades per captar aquesta variabilitat.

Confirmant el que s'ha dit abans, en el boxplot s'observa una gran variabilitat en l'abundància, amb valors

mínims propers a 0 i màxims molt elevats. L'existència de valors extrems indica la presència de pèptids altament abundants en algunes mostres. Les medianes són relativament similars entre les mostres.

El gràfic PCA mostra una clara separació entre els grups MSS i PD, el que indica que les seves signatures fosfoproteòmiques són diferents. Els punts que representen les mostres MSS (en vermell) es troben agrupats de manera més compacta, el que suggereix que aquest grup és més homogeni en termes de variació molecular. D'altra banda, les mostres del grup PD (en blau) es dispersen més al llarg dels eixos principals, cosa que indica una major heterogeneïtat dins d'aquest grup. Aquesta variabilitat en el grup PD podria estar relacionada amb patrons de fosforilació més versàtils dins d'aquest tipus de tumor, o bé amb una resposta diferencial a factors externs com ara el tractament o l'estat del turmor en relació a la fase clínica de la malaltia. La distribució dels punts també suggereix que la primera component principal és la que captura la major part de la variació entre els dos grups, mentre que la segona component podria estar reflectint diferències individuals dins de cada grup.

### 0.5 Discussió

Els resultats obtinguts a partir de l'anàlisi de fosfoproteòmica permeten identificar patrons diferencials en les mostres analitzades. Aquests patrons en un context biològic indiquen possibles vies de regulació diferencial sorgides de la diferència entre tumors en la fosforilació dels pèptids. L'anàlisi està subjecta a diverses limitacions, incloent la qualitat i el pretractament de les dades. La presència de valors extrems poden haver influït en els resultats. A més, la selecció del mètode de normalització pot haver afectat la interpretació de les diferències observades entre grups experimentals. Per millorar la robustesa de l'anàlisi, es podria augmentar la mida de la mostra i aplicar tècniques avançades de machine learning per detectar patrons més complexos. A més, es podrien integrar altres fonts de dades òmiques per proporcionar una visió més completa dels mecanismes biològics subjacents.

#### 0.6 Referències

Repositori de Github