

M0.157 - Análisis de datos ómicos

PEC 1

Autor: Cristina Pozo Salgado

Fecha: 02 de abril de 2025

Contents

Abstract	2
Objetivos	2
Metodología	2
Resultados	4
Discusión	8
Conclusión	9
Anexos	10
Referencias	13

Abstract

Se analizó un dataset de metabolómica, proveniente de un estudio sobre cachexia, en el que se evaluaron 63 metabolitos relevantes para los procesos metabólicos asociados a la pérdida muscular. El dataset integró 77 muestras, distribuidas en 47 pertenecientes al grupo “cachexic” y 30 al grupo “control”.

Se calculó un resumen estadístico que evidenció una alta variabilidad en los niveles de expresión, con una media de 347.37, mediana de 51.42 y un amplio rango (0.79–33860.35). La aplicación de un análisis de Componentes Principales (PCA) redujo la dimensionalidad del dataset; sin embargo, los dos primeros componentes, que explicaron el 48.6 % de la varianza, no separaron claramente los grupos. El clustering jerárquico y el heatmap complementaron estos hallazgos, mostrando agrupamientos parciales con solapamiento entre las condiciones.

Estos resultados resaltan la complejidad del perfil metabólico y la necesidad de métodos analíticos más sofisticados para detectar diferencias sutiles entre las condiciones.

Objetivos

- **Objetivo principal:**

Analizar el dataset de metabolómica *human_cachexia.csv* para identificar diferencias en la expresión metabólica asociadas a la cachexia, mediante un análisis de componentes principales (PCA), clustering jerárquico y generación de mapas de calor.

- **Objetivos específicos:**

1. Crear un objeto de clase SummarizedExperiment que consolide los datos y metadatos del dataset de forma estructurada.
2. Realizar un análisis descriptivo del dataset para determinar la distribución y variabilidad de los metabolitos.
3. Aplicar análisis de componentes principales (PCA) y clustering jerárquico para explorar la estructura subyacente de los datos.
4. Generar visualizaciones (heatmaps) que faciliten la interpretación de los resultados.
5. Interpretar los hallazgos en el contexto biológico y discutir las limitaciones del estudio.

Metodología

El análisis se realizó mediante un enfoque integrado, combinando herramientas estadísticas y de visualización en R, estructuradas en un objeto de clase SummarizedExperiment. A continuación, se describieron los pasos fundamentales del proceso:

1. Origen del dataset:

El archivo *human_cachexia.csv* se obtuvo desde el repositorio *metaboData*, mantenido por *nutrimetabolomics*, en el que se almacena una colección de datasets de metabolómica.

2. Selección y preparación del dataset:

Se seleccionó el archivo *human_cachexia.csv* por cumplir con los criterios de disponibilidad en formato descargable (.csv), la inclusión de metadatos relevantes y la ausencia de valores perdidos. Este dataset contiene medidas cuantitativas de metabolitos correspondientes a dos grupos experimentales: “cachexic” y “control”, y ha sido utilizado previamente en diversos tutoriales de MetaboAnalyst (Sánchez and collaborators 2024).

3. Creación del objeto SummarizedExperiment:

A continuación se creó el objeto SummarizedExperiment, utilizando el paquete homónimo de Bioconductor. ExpressionSet y SummarizedExperiment son clases S4 desarrolladas en Bioconductor para organizar datos ómicos (como microarrays, RNA-seq o metabolómica), pero SummarizedExperiment es una evolución más flexible y moderna. (Morgan et al. 2023)

Con este procedimiento se consolidó la matriz de expresión, en la que las filas representaron los metabolitos y las columnas, las muestras; los metadatos de filas, incluyendo los nombres de los metabolitos; y los metadatos de columnas, para la información de grupo (cachexic vs. control).

****Resumen del objeto SummarizedExperiment:****

```
class: SummarizedExperiment
dim: 63 77
metadata(0):
assays(1): expr
rownames(63): 1,6-Anhydro-beta-D-glucose 1-Methylnicotinamide ...
               pi-Methylhistidine tau-Methylhistidine
rowData names(1): nombre_metabolito
colnames(77): PIF_178 PIF_087 ... NETL_003_V1 NETL_003_V2
colData names(1): grupo
```

Esta estructura permitió manejar de forma ordenada la información y facilitó la aplicación posterior de métodos estadísticos y de visualización. En el anexo (página 10) se puede consultar el resto de comprobaciones realizadas tras la creación del objeto SummarizedExperiment.

4. Análisis Exploratorio de Datos:

El análisis exploratorio se dividió en varias etapas complementarias:

- Análisis Descriptivo:

Se analizaron las características generales del objeto SummarizedExperiment para obtener una visión global del dataset. En primer lugar, se imprimió el número de muestras (columnas) y metabolitos (filas) del objeto, lo que permitió conocer la dimensión de los datos y confirmar que se habían cargado correctamente.

Posteriormente, se examinó la distribución de los grupos experimentales utilizando la información contenida en los metadatos (colData), mostrando la cantidad de muestras en cada grupo (“cachexic” y “control”). El objetivo de este ejercicio fue garantizar que la agrupación inicial fuese la esperada e identificar posibles desequilibrios entre los grupos.

A continuación, se extrajo la matriz de expresión y se convirtió en un vector para calcular diversas medidas estadísticas globales: media, para evaluar la tendencia central; mediana, para identificar el valor central y detectar posibles asimetrías; y los valores mínimo y máximo, para conocer el rango de los datos y detectar la presencia de outliers o valores extremos.

Además, se verificó la existencia de valores perdidos (NA) en la matriz de expresión, confirmando que el dataset estaba completo y no presentaba huecos en la información.

En el anexo del informe se incluyó un resumen estadístico completo obtenido mediante la función summary(assay(se)), que ofreció un análisis más detallado de la distribución de todos los valores de expresión

- Análisis de Componentes Principales (PCA):

Se aplicó PCA tras escalar la matriz de expresión, lo que garantizó que todas las variables (metabolitos) se midieran en la misma escala y evitaran que aquellos con rangos mayores dominaran el análisis. La transposición de la matriz de datos se realizó para que cada muestra se tratara como una observación independiente, permitiendo evaluar la variabilidad global entre ellas. El PCA permitió reducir la dimensionalidad del dataset,

identificando las direcciones (componentes principales) que explicaban la mayor parte de la variación. Esto facilitó la visualización de la estructura subyacente de los datos en un plano bidimensional y posibilitó la exploración de la separación entre los grupos experimentales (“cachexic” y “control”). (Universitat Oberta de Catalunya 2023).

- Clustering Jerárquico y Visualización:

Se realizó un clustering jerárquico de las muestras utilizando la distancia euclidiana y la distancia euclidiana, la cual cuantificó las diferencias entre los perfiles de expresión. Se empleó el método de enlace completo para calcular las distancias entre grupos de muestras, lo que permitió construir un dendrograma que reflejara de forma clara la estructura de similitud y agrupamiento. Adicionalmente, se generó un heatmap a partir de los datos escalados por filas (metabolitos), lo que facilitó la identificación visual de patrones y agrupamientos. Esta representación gráfica ayudó a detectar subgrupos o anomalías en la expresión de los metabolitos, proporcionando una visión intuitiva de la organización de los datos. (Universitat Oberta de Catalunya 2023; Gentleman et al. 2005).

El proceso se documentó y ejecutó utilizando R y RMarkdown, lo que permitió integrar el código, el análisis y las interpretaciones en un único documento reproducible. Se emplearon paquetes de CRAN (como ggplot2, dplyr y pheatmap) y herramientas de Bioconductor, lo que garantizó la robustez del análisis y la claridad en la presentación de los resultados.

Resultados

- Resultados del análisis descriptivo del dataset:

Características generales del objeto `SummarizedExperiment`:

- Número de muestras (columnas): 77
- Número de metabolitos (filas): 63

Distribución de grupos (`colData`):

cachexic control 47 30

Resumen global de los valores de expresión:

- Media: 347.37
- Mediana: 51.42
- Mínimo: 0.79
- Máximo: 33860.35
- Desviación estándar: 1500.84

Valores perdidos en la matriz de expresión: 0

En la evaluación de las características generales del objeto `SummarizedExperiment`, se obtuvo un total de 77 muestras y 63 metabolitos. La distribución de los grupos, según los metadatos (`colData`), mostró que el grupo “cachexic” comprendió 47 muestras, mientras que el grupo “control” incluyó 30 muestras, lo que permitió constatar que la representación de los grupos era adecuada para el análisis comparativo.

El resumen global de los valores de expresión indicó que la media fue de 347.37 y la mediana de 51.42. La diferencia entre ambos estadísticos sugirió la presencia de una distribución asimétrica, ya que la media resultó considerablemente mayor que la mediana. Asimismo, se observó un amplio rango de valores, que osciló entre un mínimo de 0.79 y un máximo de 33860.35, con una desviación estándar de 1500.84, lo que evidenció una alta dispersión en los datos.

Es relevante señalar que no se detectaron valores perdidos en la matriz de expresión (Total NA: 0).

Table 1: Resumen estadístico por metabolito

metabolito	media	mediana	minimo	maximo
1,6-Anhydro-beta-D-glucose	105.63	46.06	4.71	685.40
1-Methylnicotinamide	71.57	38.53	6.42	1032.77
2-Aminobutyrate	18.16	10.93	1.28	172.43
2-Hydroxyisobutyrate	37.25	33.12	4.85	93.69
2-Oxoglutarate	145.09	55.15	5.53	2465.13
3-Aminoisobutyrate	76.76	22.76	2.61	1480.30
3-Hydroxybutyrate	21.72	11.76	1.70	175.91
3-Hydroxyisovalerate	21.65	12.75	0.92	164.02
3-Indoxylsulfate	218.88	144.03	27.66	1043.15
4-Hydroxyphenylacetate	112.02	71.90	15.49	796.32
Acetate	66.14	41.08	3.49	411.58
Acetone	11.43	7.10	2.29	206.44
Adipate	24.76	10.60	1.55	327.01
Alanine	273.56	203.57	16.78	1312.91
Asparagine	62.28	42.31	6.69	273.14
Betaine	90.32	65.37	2.29	391.51
Carnitine	52.09	23.93	2.18	487.85
Citrate	2235.35	1790.05	59.74	13629.61
Creatine	126.83	45.62	2.75	1863.11
Creatinine	8733.97	7708.28	1002.25	33860.35
Dimethylamine	358.17	304.90	41.26	1556.20
Ethanolamine	276.26	205.41	16.12	1436.55
Formate	147.40	98.03	6.42	1480.30
Fucose	88.67	62.81	5.70	407.48
Fumarate	8.44	4.12	0.79	96.54
Glucose	559.84	212.74	26.84	8690.62
Glutamine	306.87	225.88	23.34	1685.81
Glycine	880.72	562.17	38.09	5064.45
Glycolate	187.99	131.64	5.42	720.54
Guanidoacetate	86.37	65.70	7.03	561.16
Hippurate	2286.84	1275.12	92.76	19341.34
Histidine	292.64	178.62	14.15	1863.11
Hypoxanthine	61.10	40.44	3.78	265.07
Isoleucine	8.71	7.20	1.79	40.04
Lactate	158.46	84.40	7.32	3640.95
Leucine	24.36	19.50	2.51	103.54
Lysine	108.79	72.67	10.49	788.40
Methylamine	17.38	14.73	1.51	52.46
Methylguanidine	15.32	7.92	1.70	141.17
N,N-Dimethylglycine	26.35	21.98	0.79	120.30
O-Acetylcarnitine	19.73	11.53	1.23	254.68
Pantothenate	44.88	22.99	2.59	692.29
Pyroglutamate	211.45	159.18	21.33	1064.22
Pyruvate	21.29	14.25	0.90	184.93
Quinolate	66.44	52.47	5.21	259.82
Serine	197.69	147.00	16.12	1248.88
Succinate	60.23	32.16	1.72	589.93

Sucrose	113.23	41.26	6.49	2079.74
Tartrate	40.00	13.00	2.20	837.15
Taurine	525.12	252.16	17.81	4272.69
Threonine	95.36	64.39	8.25	450.34
Trigonelline	270.44	115.59	10.07	2252.96
Trimethylamine N-oxide	652.16	393.59	55.70	5486.25
Tryptophan	66.24	49.47	8.67	259.82
Tyrosine	81.76	60.95	4.22	539.15
Uracil	35.56	27.52	3.10	179.47
Valine	35.67	33.12	4.10	160.77
Xylose	100.93	50.91	10.07	2164.62
cis-Aconitate	204.22	142.52	12.94	1863.11
myo-Inositol	135.40	78.26	11.59	854.06
trans-Aconitate	40.63	27.12	4.90	217.02
pi-Methylhistidine	370.29	165.70	11.36	2697.28
tau-Methylhistidine	89.69	70.12	8.00	317.35

En la tabla resumen por metabolitos (Tabla 1) se observó, por ejemplo, que el metabolito Creatinine presenta una media de 8733.97 y una mediana de 7708.28, junto con un rango que abarca desde 1002.25 hasta 33860.35. Esta discrepancia y el amplio rango sugirieron la presencia de valores atípicos que influyen significativamente en su distribución. De igual manera, el metabolito 2-Oxoglutarate mostró una diferencia notable entre su valor mínimo (5.53) y su máximo (2465.13), lo que indica una variabilidad considerable en su expresión entre las muestras.

- Resultados del análisis PCA:

Tras escalar la matriz de expresión, la primera componente principal (PC1) explicó un 40.4 % de la varianza, mientras que la segunda (PC2) explicó un 8.2 %, sumando en total un 48.6 % de la variabilidad presente en los datos. En la Figura 1, se muestra la proyección de las 77 muestras en el plano definido por estas dos primeras componentes, donde cada punto representa una muestra y su color indica el grupo experimental (“cachexic” en rojo y “control” en turquesa).

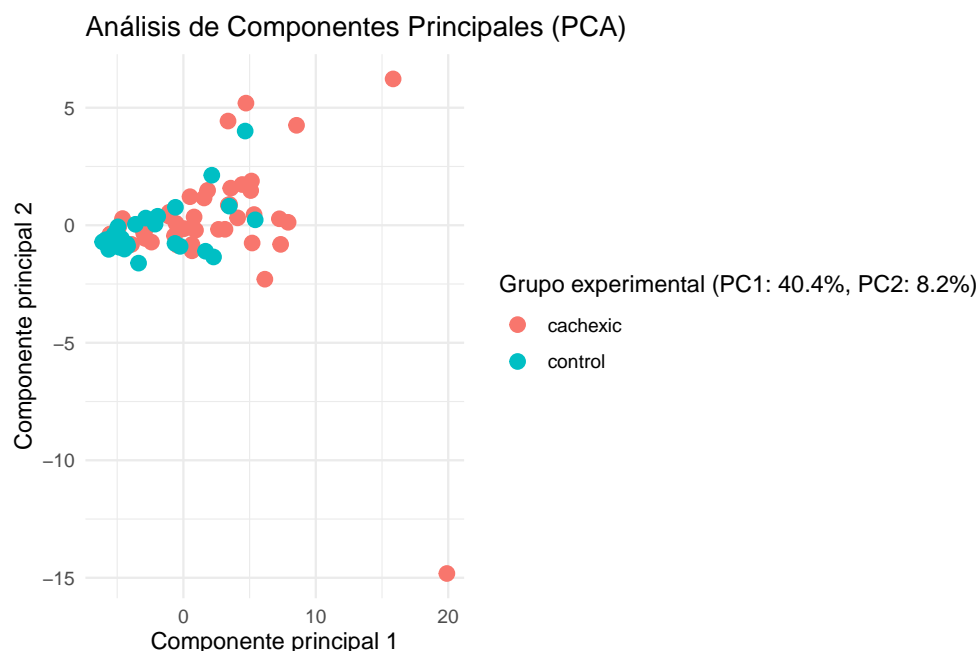
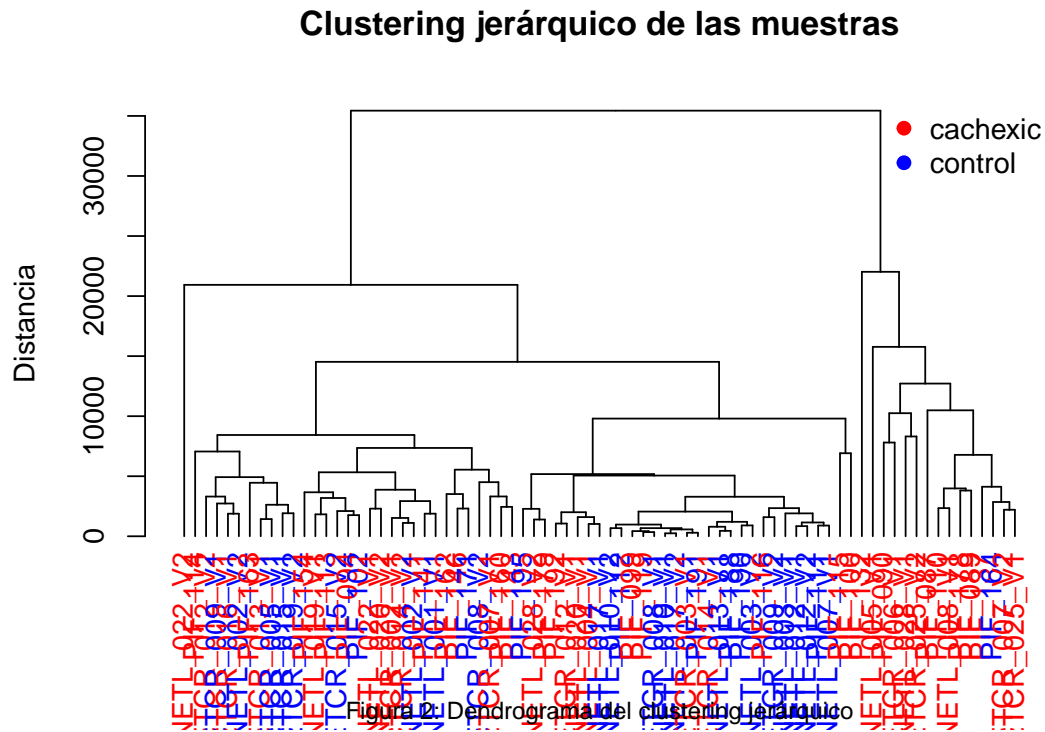


Figura 1: Análisis de Componentes Principales (PCA)

- Resultados del clustering jerárquico de las muestras:

En la Figura 2 se muestra el dendrograma resultante de realizar un clustering jerárquico sobre la matriz de expresión transpuesta, utilizando la distancia euclidiana y el método de enlace completo, donde cada muestra se representa mediante una etiqueta en color rojo (grupo “cachexic”) o azul (grupo “control”).



Se observaron varios subgrupos de muestras, algunos de los cuales incluyeron mayoritariamente muestras de un mismo grupo experimental; sin embargo, no se apreció una separación nítida que agrupara de forma consistente todas las muestras de “cachexic” frente a las de “control”.

- Resultados del heatmap:

La Figura 3 muestra el mapa de calor generado a partir de la matriz de expresión escalada por filas (metabolitos). Cada columna corresponde a una muestra y cada fila a un metabolito, ordenados mediante clustering jerárquico. La anotación superior indica el grupo experimental al que pertenece cada muestra (“cachexic” en rojo y “control” en azul), mientras que la escala de colores ilustra los niveles de expresión relativos de cada metabolito tras la estandarización.

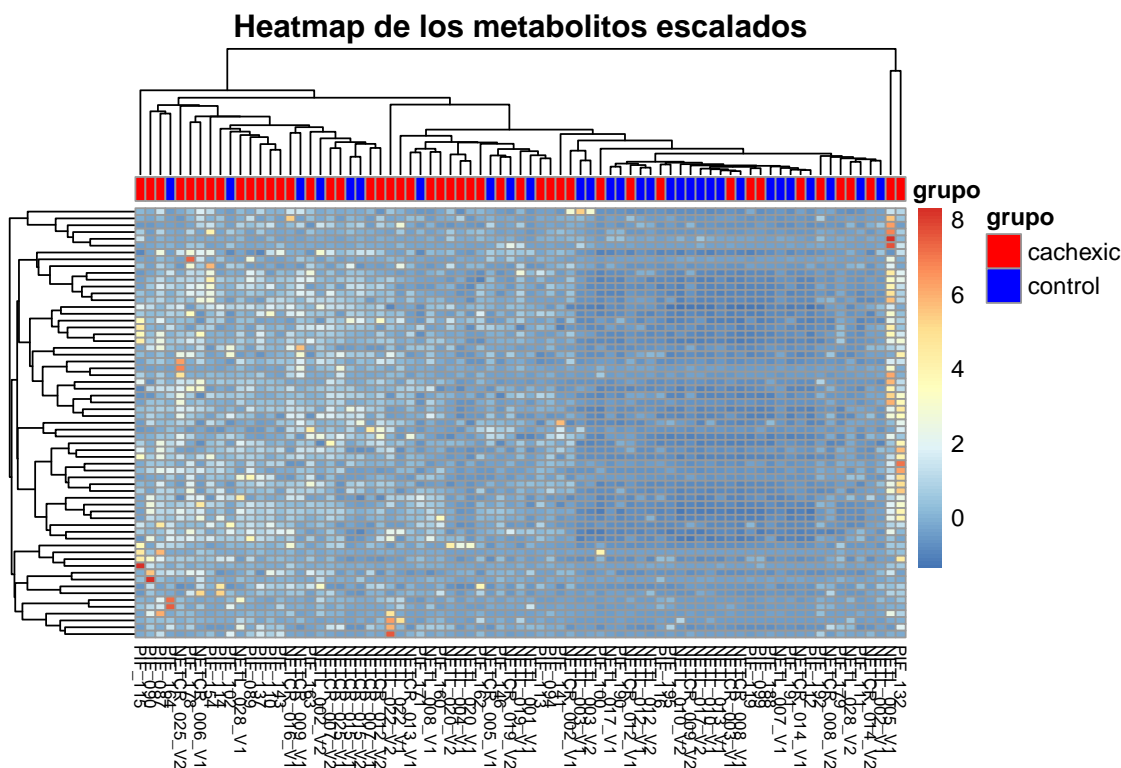


Figura 3: Heatman de los metabolitos escalados

Se observó una distribución heterogénea de patrones de expresión, con regiones cuyos patrones de expresión estaban bien diferenciados, en las que determinados subconjuntos de muestras presentaron perfiles de expresión más altos o más bajos para un conjunto concreto de metabolitos. Sin embargo, de forma global, no se observó un patrón uniforme que separase claramente las muestras de “cachexic” y “control”.

Discusión

Los resultados del análisis exploratorio ofrecieron una visión global y multidimensional del dataset de metabolómica human_cachexia.csv. El análisis descriptivo evidenció una elevada variabilidad en los niveles de expresión de los 63 metabolitos medidos en 77 muestras, distribuidas en 47 muestras del grupo “cachexic” y 30 del grupo “control”. Los valores de tendencia central –con una media de 347.37 y una mediana de 51.42– junto con el amplio rango (0.79–33860.35) y una desviación estándar de 1500.84, indican distribuciones asimétricas y la presencia de outliers. Por ejemplo, el metabolito Creatinine mostró una marcada discrepancia entre sus valores mínimos y máximos, lo que sugiere la existencia de valores extremos que podrían deberse tanto a variabilidad biológica real como a posibles errores técnicos.

El análisis de Componentes Principales (PCA) se aplicó para reducir la dimensionalidad y visualizar la variabilidad global entre las muestras. Los dos primeros componentes, que en conjunto explicaron menos del 50 % de la varianza total, no permitieron separar claramente los grupos “cachexic” y “control”. Este hallazgo sugiere que las diferencias en la expresión metabólica no se concentran únicamente en las direcciones de mayor varianza, reflejando la complejidad del proceso patológico de la cachexia, donde múltiples vías metabólicas interactúan para generar patrones sutiles.

El clustering jerárquico y el heatmap complementaron estos resultados, revelando agrupamientos parciales y regiones con patrones diferenciados, aunque con un considerable solapamiento entre las muestras de ambos grupos. Desde el punto de vista biológico, estos hallazgos sugieren que la cachexia está asociada a alteraciones en la homeostasis metabólica –posiblemente vinculadas a cambios en la degradación muscular y el metabolismo energético–, pero también indican que existen factores adicionales no medidos, como variaciones individuales, que contribuyen a la heterogeneidad observada.

Además, las limitaciones detectadas, tales como la alta variabilidad, la presencia de outliers y la moderada capacidad discriminatoria de los análisis multivariantes empleados, resaltan la necesidad de incorporar métodos analíticos más sofisticados y de contar con información clínica complementaria en futuros estudios. Esto permitirá desentrañar con mayor precisión los biomarcadores asociados a la cachexia y mejorar la interpretación de las diferencias metabólicas entre las condiciones experimentales.

Conclusión

El análisis exploratorio del dataset de metabolómica evidenció una alta variabilidad en los niveles de expresión de los metabolitos, reflejada en el amplio rango de valores y en las diferencias entre las medidas de tendencia central. La aplicación del PCA permitió visualizar la dispersión global de las muestras, aunque los dos primeros componentes, que explicaron menos del 50 % de la varianza total, no lograron separar de forma clara los grupos “cachexic” y “control”, lo que sugiere que las diferencias entre condiciones no se concentran exclusivamente en las direcciones de mayor varianza.

El clustering jerárquico y el heatmap complementaron estos hallazgos, mostrando agrupamientos parciales con cierto solapamiento entre las muestras de ambos grupos, lo que subraya la complejidad del perfil metabólico. Estos resultados destacan la utilidad del enfoque exploratorio para identificar tendencias generales en los datos ómicos, pero también señalan la necesidad de emplear métodos analíticos más sofisticados para capturar diferencias sutiles y mejorar la discriminación entre las condiciones experimentales.

Anexos

- Comprobaciones realizadas tras la creación del objeto SummarizedExperiment

****Vista de los primeros metabolitos y muestras (assay):****

	PIF_178	PIF_087	PIF_090	NETL_005_V1	PIF_115
1,6-Anhydro-beta-D-glucose	40.85	62.18	270.43	154.47	22.20
1-Methylnicotinamide	65.37	340.36	64.72	52.98	73.70
2-Aminobutyrate	18.73	24.29	12.18	172.43	15.64
2-Hydroxyisobutyrate	26.05	41.68	65.37	74.44	83.93
2-Oxoglutarate	71.52	67.36	23.81	1199.91	33.12

****Metadatos de muestras (colData):****

DataFrame with 77 rows and 1 column

	grupo
	<character>
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

****Metadatos de metabolitos (rowData):****

DataFrame with 63 rows and 1 column

	nombre_metabolito
	<character>
1,6-Anhydro-beta-D-glucose	1,6-Anhydro-beta-D-g..
1-Methylnicotinamide	1-Methylnicotinamide
2-Aminobutyrate	2-Aminobutyrate
2-Hydroxyisobutyrate	2-Hydroxyisobutyrate
2-Oxoglutarate	2-Oxoglutarate
...	...
cis-Aconitate	cis-Aconitate
myo-Inositol	myo-Inositol
trans-Aconitate	trans-Aconitate
pi-Methylhistidine	pi-Methylhistidine
tau-Methylhistidine	tau-Methylhistidine

- Resumen estadístico del dataset:

****Resumen estadístico general de los valores de expresión:****

PIF_178	PIF_087	PIF_090	NETL_005_V1
Min. : 5.58	Min. : 7.69	Min. : 4.44	Min. : 25.03
1st Qu.: 52.72	1st Qu.: 78.66	1st Qu.: 31.50	1st Qu.: 102.51
Median : 154.47	Median : 208.51	Median : 141.17	Median : 247.15
Mean : 699.86	Mean : 708.30	Mean : 771.79	Mean : 1021.28
3rd Qu.: 416.24	3rd Qu.: 412.10	3rd Qu.: 308.03	3rd Qu.: 673.71
Max. : 16481.60	Max. : 15835.35	Max. : 24587.66	Max. : 20952.22
PIF_115	PIF_110	NETL_019_V1	NETCR_014_V1
Min. : 4.53	Min. : 5.05	Min. : 2.10	Min. : 1.73
1st Qu.: 44.26	1st Qu.: 35.34	1st Qu.: 26.73	1st Qu.: 7.14
Median : 84.77	Median : 113.30	Median : 91.84	Median : 18.17
Mean : 441.22	Mean : 537.48	Mean : 400.85	Mean : 82.77
3rd Qu.: 196.62	3rd Qu.: 325.58	3rd Qu.: 223.63	3rd Qu.: 52.52
Max. : 6836.29	Max. : 15677.78	Max. : 8022.46	Max. : 2208.35
NETCR_014_V2	PIF_154	NETL_022_V1	NETL_022_V2
Min. : 2.41	Min. : 9.12	Min. : 4.26	Min. : 7.17
1st Qu.: 14.63	1st Qu.: 43.82	1st Qu.: 31.98	1st Qu.: 38.77
Median : 39.65	Median : 117.92	Median : 83.93	Median : 127.74
Mean : 207.80	Mean : 478.07	Mean : 367.52	Mean : 650.75
3rd Qu.: 102.00	3rd Qu.: 405.50	3rd Qu.: 182.20	3rd Qu.: 283.05
Max. : 6634.24	Max. : 8690.62	Max. : 8433.78	Max. : 19341.34
NETL_008_V1	PIF_146	PIF_119	PIF_099
Min. : 6.05	Min. : 3.49	Min. : 1.48	Min. : 2.230
1st Qu.: 36.30	1st Qu.: 28.09	1st Qu.: 5.17	1st Qu.: 5.965
Median : 83.93	Median : 71.52	Median : 17.46	Median : 18.360
Mean : 484.70	Mean : 355.17	Mean : 53.48	Mean : 56.669
3rd Qu.: 218.11	3rd Qu.: 152.94	3rd Qu.: 40.65	3rd Qu.: 37.155
Max. : 15677.78	Max. : 12209.87	Max. : 1480.30	Max. : 1635.980
PIF_162	PIF_160	PIF_113	PIF_143
Min. : 3.29	Min. : 3.39	Min. : 2.92	Min. : 3.10
1st Qu.: 17.91	1st Qu.: 26.06	1st Qu.: 18.82	1st Qu.: 39.26
Median : 64.07	Median : 78.26	Median : 74.44	Median : 82.27
Mean : 318.71	Mean : 424.13	Mean : 356.55	Mean : 461.16
3rd Qu.: 164.90	3rd Qu.: 193.47	3rd Qu.: 176.13	3rd Qu.: 296.43
Max. : 9701.15	Max. : 10198.54	Max. : 6974.39	Max. : 11158.98
NETCR_007_V1	NETCR_007_V2	PIF_137	PIF_100
Min. : 4.85	Min. : 5.26	Min. : 4.35	Min. : 1.55
1st Qu.: 28.80	1st Qu.: 44.97	1st Qu.: 39.41	1st Qu.: 8.85
Median : 64.72	Median : 98.49	Median : 75.94	Median : 17.81
Mean : 460.75	Mean : 645.12	Mean : 546.23	Mean : 153.92
3rd Qu.: 210.62	3rd Qu.: 397.55	3rd Qu.: 267.15	3rd Qu.: 53.80
Max. : 9798.65	Max. : 14328.42	Max. : 13359.73	Max. : 5943.18
NETL_004_V1	PIF_094	PIF_132	PIF_163
Min. : 4.71	Min. : 4.57	Min. : 6.42	Min. : 2.41
1st Qu.: 16.20	1st Qu.: 25.03	1st Qu.: 69.42	1st Qu.: 31.00
Median : 31.19	Median : 72.97	Median : 196.37	Median : 97.51
Mean : 183.79	Mean : 350.55	Mean : 1237.54	Mean : 516.61
3rd Qu.: 108.31	3rd Qu.: 186.53	3rd Qu.: 641.11	3rd Qu.: 330.37
Max. : 4865.87	Max. : 8349.86	Max. : 33860.35	Max. : 11271.13
NETCR_003_V1	NETL_028_V1	NETL_028_V2	NETCR_013_V1
Min. : 0.790	Min. : 10.07	Min. : 1.82	Min. : 2.69
1st Qu.: 6.425	1st Qu.: 46.06	1st Qu.: 13.33	1st Qu.: 31.82
Median : 15.180	Median : 115.58	Median : 45.15	Median : 70.81
Mean : 62.813	Mean : 738.89	Mean : 199.61	Mean : 376.69

3rd Qu.: 29.370	3rd Qu.: 336.99	3rd Qu.: 119.20	3rd Qu.: 267.74
Max. :1737.150	Max. :21590.31	Max. :4188.09	Max. :11731.12
NETL_020_V1	NETL_020_V2	PIF_192	NETCR_012_V1
Min. : 2.32	Min. : 3.19	Min. : 2.08	Min. : 2.01
1st Qu.: 14.82	1st Qu.: 28.64	1st Qu.: 20.19	1st Qu.: 12.94
Median : 37.34	Median : 61.56	Median : 45.60	Median : 24.05
Mean : 227.97	Mean : 327.88	Mean : 191.82	Mean : 148.51
3rd Qu.: 104.17	3rd Qu.: 153.72	3rd Qu.: 110.89	3rd Qu.: 64.39
Max. :5431.66	Max. :8349.86	Max. :5014.05	Max. :4315.64
NETCR_012_V2	PIF_089	NETCR_002_V1	PIF_179
Min. : 5.53	Min. : 4.01	Min. : 3.67	Min. : 2.18
1st Qu.: 42.32	1st Qu.: 49.70	1st Qu.: 21.02	1st Qu.: 14.88
Median : 101.49	Median : 116.75	Median : 62.80	Median : 50.91
Mean : 496.29	Mean : 581.79	Mean : 270.28	Mean : 198.65
3rd Qu.: 290.56	3rd Qu.: 330.69	3rd Qu.: 177.69	3rd Qu.: 121.56
Max. :13359.73	Max. :16481.60	Max. :7631.20	Max. :3533.34
PIF_114	NETCR_006_V1	PIF_141	NETCR_025_V1
Min. : 5.47	Min. : 7.32	Min. : 1.95	Min. : 4.01
1st Qu.: 32.62	1st Qu.: 50.91	1st Qu.: 21.66	1st Qu.: 36.88
Median : 98.49	Median : 119.10	Median : 48.42	Median : 94.63
Mean : 502.98	Mean : 697.47	Mean : 279.24	Mean : 579.72
3rd Qu.: 234.00	3rd Qu.: 404.56	3rd Qu.: 144.90	3rd Qu.: 242.27
Max. :12332.58	Max. :19930.37	Max. :7115.28	Max. :14764.78
NETCR_025_V2	NETCR_016_V1	PIF_116	PIF_191
Min. : 2.53	Min. : 6.62	Min. : 1.120	Min. : 0.90
1st Qu.: 61.26	1st Qu.: 45.40	1st Qu.: 7.885	1st Qu.: 9.68
Median : 120.30	Median : 127.74	Median : 27.390	Median : 21.98
Mean : 745.91	Mean : 525.02	Mean : 143.280	Mean : 72.36
3rd Qu.: 337.24	3rd Qu.: 497.73	3rd Qu.: 68.400	3rd Qu.: 44.70
Max. :22247.84	Max. :14328.42	Max. :2864.070	Max. :1702.75
PIF_164	NETL_013_V1	PIF_188	PIF_195
Min. : 6.89	Min. : 1.21	Min. : 1.28	Min. : 1.51
1st Qu.: 47.94	1st Qu.: 7.15	1st Qu.: 7.03	1st Qu.: 7.30
Median : 121.51	Median : 15.18	Median : 18.92	Median : 18.54
Mean : 639.13	Mean : 76.81	Mean : 71.90	Mean : 170.47
3rd Qu.: 306.53	3rd Qu.: 42.85	3rd Qu.: 44.26	3rd Qu.: 62.80
Max. :15063.05	Max. :2392.27	Max. :2489.91	Max. :4817.45
NETCR_015_V1	PIF_102	NETL_010_V1	NETL_010_V2
Min. : 6.17	Min. : 7.10	Min. : 1.36	Min. : 0.79
1st Qu.: 27.12	1st Qu.: 35.34	1st Qu.: 7.58	1st Qu.: 5.56
Median : 106.70	Median : 101.49	Median : 14.30	Median : 11.25
Mean : 396.24	Mean : 343.37	Mean : 64.50	Mean : 54.02
3rd Qu.: 250.44	3rd Qu.: 231.62	3rd Qu.: 35.17	3rd Qu.: 24.31
Max. :9996.60	Max. :7480.09	Max. :1480.30	Max. :1064.22
NETL_001_V1	NETCR_015_V2	NETCR_005_V1	PIF_111
Min. : 1.97	Min. : 4.39	Min. : 4.10	Min. : 1.77
1st Qu.: 20.19	1st Qu.: 29.52	1st Qu.: 26.57	1st Qu.: 15.34
Median : 54.05	Median : 87.36	Median : 49.40	Median : 35.87
Mean : 289.17	Mean : 347.33	Mean : 361.04	Mean : 137.42
3rd Qu.: 115.00	3rd Qu.: 234.28	3rd Qu.: 202.39	3rd Qu.: 79.56
Max. :6974.39	Max. :8266.78	Max. :11849.01	Max. :3827.63
PIF_171	NETCR_008_V1	NETCR_008_V2	NETL_017_V1
Min. : 4.31	Min. : 1.23	Min. : 1.14	Min. : 2.05
1st Qu.: 21.45	1st Qu.: 4.00	1st Qu.: 15.93	1st Qu.: 10.48

Median : 62.18	Median : 13.46	Median : 46.06	Median : 23.57
Mean : 357.12	Mean : 42.80	Mean : 316.91	Mean : 159.57
3rd Qu.: 177.72	3rd Qu.: 28.08	3rd Qu.: 107.86	3rd Qu.: 56.26
Max. :10614.75	Max. :1339.43	Max. :7785.36	Max. :5115.34
NETL_017_V2	NETL_002_V1	NETL_002_V2	PIF_190
Min. : 1.55	Min. : 3.29	Min. : 6.23	Min. : 3.03
1st Qu.: 5.78	1st Qu.: 22.43	1st Qu.: 50.41	1st Qu.: 9.30
Median : 15.96	Median : 49.90	Median : 100.48	Median : 24.05
Mean : 63.52	Mean : 240.74	Mean : 467.35	Mean : 97.24
3rd Qu.: 34.65	3rd Qu.: 125.86	3rd Qu.: 284.31	3rd Qu.: 63.47
Max. :1571.84	Max. :6768.26	Max. :13359.73	Max. :2121.76
NETCR_009_V1	NETCR_009_V2	NETL_007_V1	PIF_112
Min. : 3.10	Min. : 0.920	Min. : 1.21	Min. : 1.230
1st Qu.: 45.45	1st Qu.: 6.795	1st Qu.: 10.54	1st Qu.: 6.145
Median : 152.93	Median : 17.990	Median : 26.05	Median : 17.460
Mean : 511.55	Mean : 110.017	Mean : 118.81	Mean : 56.986
3rd Qu.: 323.05	3rd Qu.: 60.700	3rd Qu.: 60.37	3rd Qu.: 30.725
Max. :13493.99	Max. :2298.470	Max. :3165.29	Max. :1002.250
NETCR_019_V2	NETL_012_V1	NETL_012_V2	NETL_003_V1
Min. : 3.67	Min. : 1.84	Min. : 2.69	Min. : 2.51
1st Qu.: 22.12	1st Qu.: 10.70	1st Qu.: 9.30	1st Qu.: 14.88
Median : 58.56	Median : 21.33	Median : 24.05	Median : 34.12
Mean : 342.26	Mean : 142.84	Mean : 147.55	Mean : 159.46
3rd Qu.: 180.37	3rd Qu.: 63.44	3rd Qu.: 59.20	3rd Qu.: 90.47
Max. :10097.06	Max. :3789.54	Max. :3498.19	Max. :3498.19
NETL_003_V2			
Min. : 1.62			
1st Qu.: 12.55			
Median : 24.29			
Mean : 121.70			
3rd Qu.: 80.70			
Max. :2864.07			

Referencias

- Gentleman, Robert, Vincent Carey, Wolfgang Huber, Rafael Irizarry, and Sandrine Dudoit. 2005. *Bioinformatics and Computational Biology Solutions Using r and Bioconductor*. Springer. <https://link.springer.com/book/10.1007/0-387-29362-0>.
- Morgan, Martin, Vincent Obenchain, Jim Hester, and Hervé Pagès. 2023. *SummarizedExperiment: SummarizedExperiment Container*. Bioconductor. <https://bioconductor.org/packages/SummarizedExperiment>.
- Sánchez, Alex, and collaborators. 2024. “Description of the 2024 Cachexia Dataset.” <https://github.com/nutrimetabolomics/metaboData/blob/79036d1897db72955c0aa0634c1a6aa06d0532fa/Datasets/2024-Cachexia/description.md>.
- Universitat Oberta de Catalunya. 2023. “Exploración Multivariante de Datos Ómicos.” <https://campus.uoc.edu>.