

Jácome-Navarrete-Juan-PEC1

Juan C. Jácome Navarrete

2025-03-30

Table of contents

1	Resumen	2
2	Objetivos	2
3	Métodos	2
3.1	Origen de los datos	2
3.2	Estructura de los datos	3
3.3	Herramientas utilizadas	3
3.4	Procedimiento de análisis	3
3.5	Exploración estadística	3
4	Resultados	3
4.1	Estadísticas descriptivas	3
4.2	Visualización	3
4.3	Interpretación biológica	3
5	Discusión	3
6	Conclusiones	3
7	Referencias	3

1 Resumen

2 Objetivos

3 Métodos

3.1 Origen de los datos

Para el presente análisis se seleccionó el dataset **ST000957**, titulado “*Global metabolomics of human milk fractions*”, disponible en Metabolomics Workbench. Este estudio fue realizado por la University of Florida y utiliza tecnología LC-MS (espectrometría de masas acoplada a cromatografía líquida) para la caracterización global de metabolitos en fracciones de leche humana. El conjunto de datos contiene información correspondiente a 12 muestras biológicas de la especie *Homo sapiens*.

```
info_df <- as.data.frame(t(do_query('study','study_id','ST000957','summary')
                               ))[1:6, , drop = FALSE]

# Mostrar con kable
knitr::kable(info_df, col.names = c("Campo", "Valor"),
              caption = "Resumen del estudio ST000957") %>%
  kable_styling(latex_options = c("striped", "hold_position", "scale_down"),
                position = "center", font_size = 10)
```

Table 1: Resumen del estudio ST000957

Campo	Valor
study_id	ST000957
study_title	Global metabolomics of human milk fractions
species	Homo sapiens
institute	University of Florida
analysis_type	LC-MS
number_of_samples	12

3.2 Estructura de los datos

3.3 Herramientas utilizadas

3.4 Procedimiento de análisis

3.5 Exploración estadística

4 Resultados

La base de datos que se obtiene de Metabolics Workbench, tiene los siguientes datos:

Lo primero que se realizó es la construcción del *SummarizedExperiment*, para lo cual se importaron tres tablas.

1. El ensayo: esta matriz contenía en las columnas las muestras y las filas los metabolitos.
2. El colData: contiene información sobre las muestras, como la fracción de leche y el sujeto a quien pertenece. Debe coincidir con la matriz de ensayo.
3. El rowData: contiene información sobre los metabolitos. En este caso se trata de la clasificación de los metabolismos según el Metabolics Workbench.

Además, se limpia la metadata

4.1 Estadísticas descriptivas

4.2 Visualización

4.3 Interpretación biológica

5 Discusión

6 Conclusiones

7 Referencias

- GitHub: <https://github.com/juano3101/Jacome-Navarrete-Juan-PEC1>