Jimenez-Ferandez-Pedro-PEC1

Pedro Jiménez Fernández

2025-03-21

Abstract

Resumen de lo que es la caquexia, y breve descripción de lo que se hace en este estudio

Objetivos

Creación del objeto de tipo summarizedExperiment a partir del conjunto de datos proporcionado, objetivos del análisis estadístico.

Métodos

RStudio, RMarkdown y librerías empleadas, construcción de objeto de tipo summarizedExperiment, métodos estadísticos empleados

Resultados

Importación de los datos

En primer lugar se descargan los datos. Una vez descargados los datos en el repositorio, se importan para su posterior análisis.

Creación del objeto SummarizedExperiment

```
## class: SummarizedExperiment
## dim: 63 77
## metadata(4): title grupos fuente fecha
## assays(1): metabolites
## rownames(63): X1.6.Anhydro.beta.D.glucose X1.Methylnicotinamide ...
##   pi.Methylhistidine tau.Methylhistidine
## rowData names(1): metabolite_name
## colnames(77): PIF_178 PIF_087 ... NETL_003_V1 NETL_003_V2
## colData names(2): patient_id group
```

Tal y como se puede observar, la variable "cachexia_se" contiene 63 variables (metabolitos) y 77 observaciones (pacientes/individuos sanos) distribuídas en filas y columnas respectivamente.

Análisis exploratorio de los datos y PCA (principal component analysis)

Análisis exploratorio de datos (EDA)

A continuación se hace un análisis exploratorio de los datos contenidos en el objeto "cachexia_se".

```
##
## cachexic  control
##       47       30
```

Se puede observar que en total hay 47 individuos con caquexia y 30 individuos pertenecientes al grupo control.

```
##    Min. 1st Qu.  Median    Mean 3rd Qu.    Max.
##       0       0       0       0       0       0
```

```
##    Min. 1st Qu.  Median    Mean 3rd Qu.    Max.
##       0       0       0       0       0       0
```

Aunque en el archivo "description.md" adjunto a los datos se especifica que no existen valores faltantes, se ha realizado una prueba para verificarlo. Tal y como se indica hay ausencia total de valores faltantes o "missing values". A continuación se muestran las estadísticas básicas.

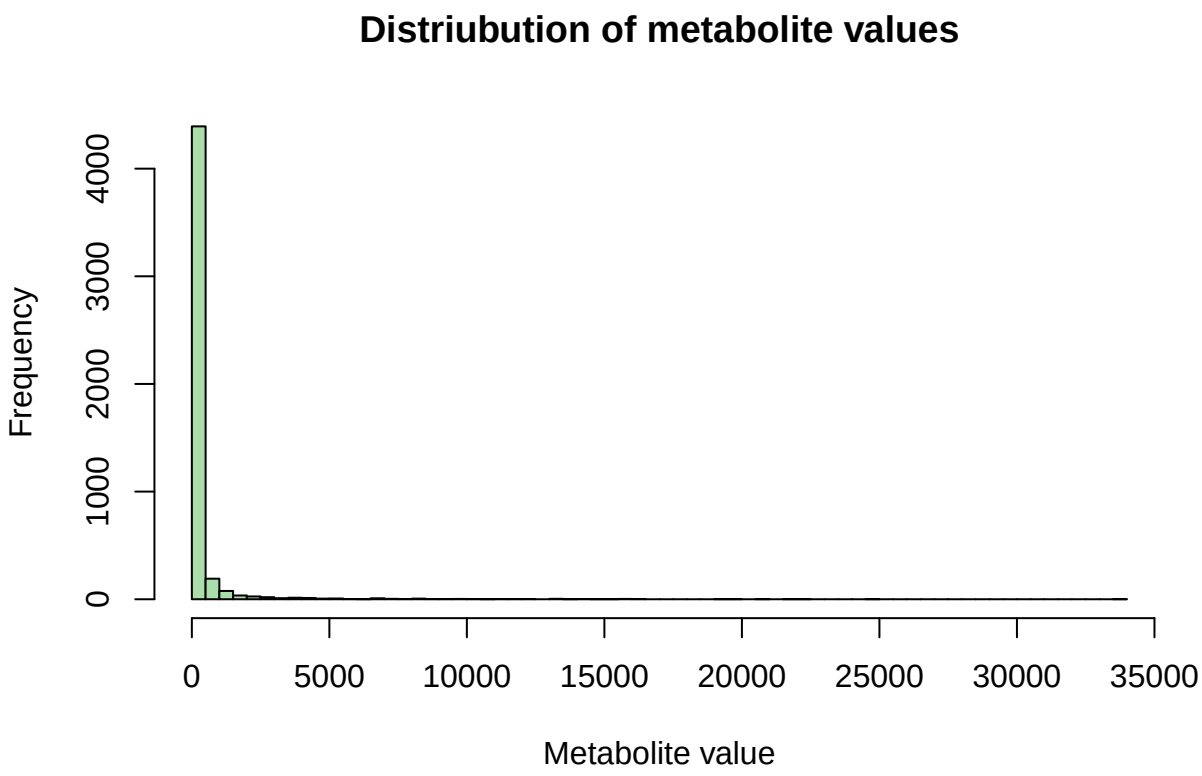
```
##    Min. 1st Qu.  Median    Mean 3rd Qu.    Max.
##    2696    9296   21563   21885   31266   77965
```

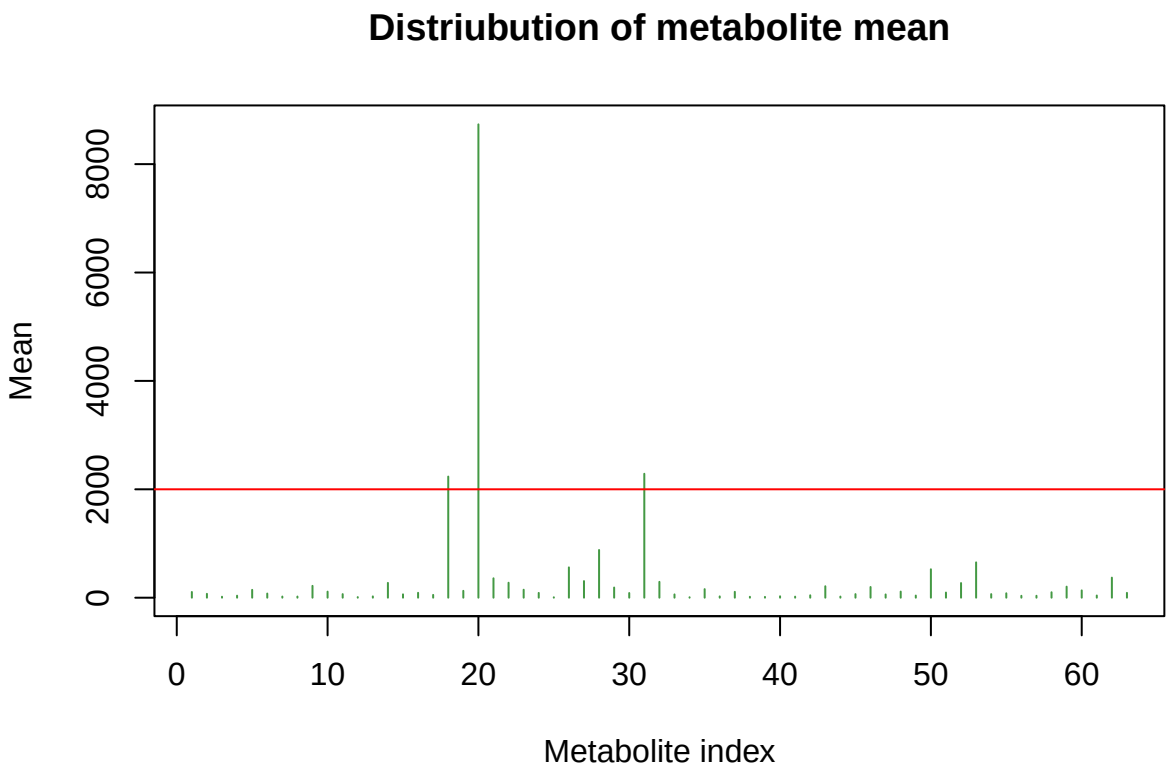
```
##     Min.  1st Qu.   Median     Mean  3rd Qu.     Max.
##    649.9   2974.3   6905.9  26747.8  16003.2 672515.8
```

```
# a continuación, se hace un filtrado de los metabolitos que no presentan
# varianza
variance <- rowSds(matrix)
filtered_matrix <- matrix[variance > 0, ]
nrow(filtered_matrix)
```

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

Los 63 metabolitos presentan varianza. A continuación se representa un histograma global para visualizar la distribución de los valores de los diferentes metabolitos.


Distriubution of metabolite values
Frequency
0
1000
2000
3000
4000
0
5000
10000
15000
20000
25000
30000
35000
Metabolite value



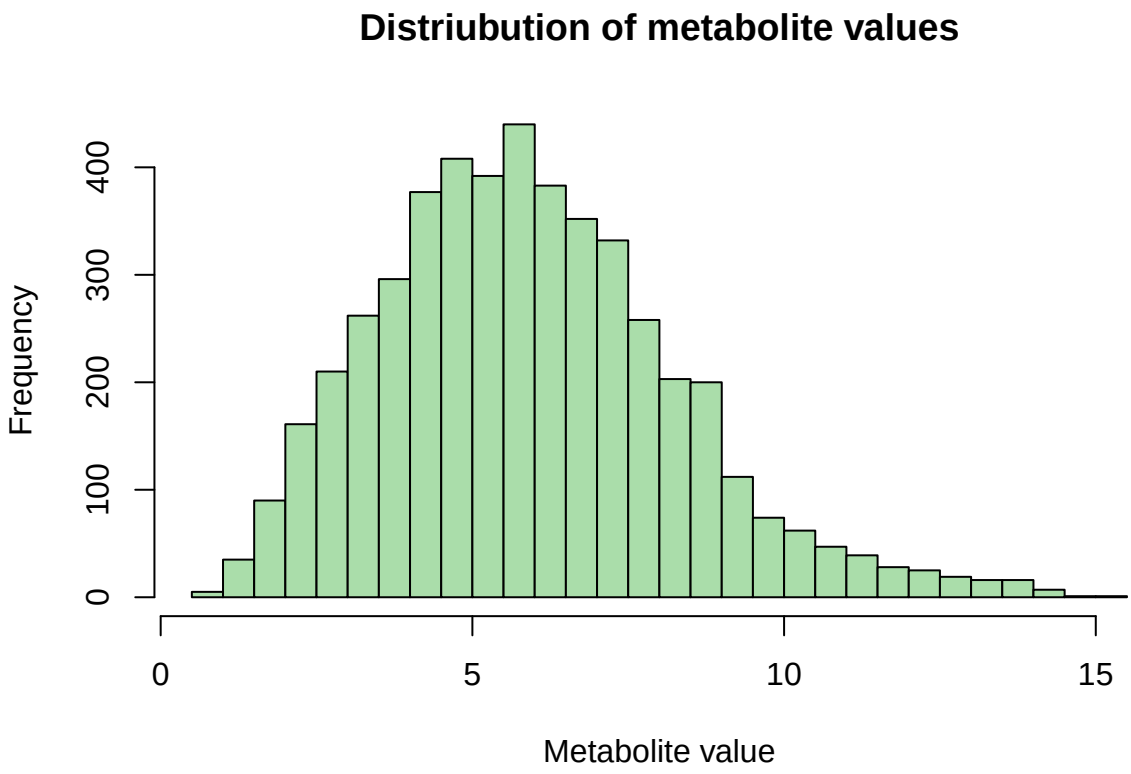
Al observar la distribución global de todos los valores de la matriz, puede observarse que hay un gran número de valores muy cercanos a 0 y después una cola bastante larga que va hasta valores superiores a 30,000. Algunos metabolitos presentan valores muy elevados, lo cual indica la presencia de outliers, por otra parte, las diferencias en la magnitud de los valores de los metablitos indican que las varianzas no son similares, estos 2 factores contribuyen a que la capacidad de predicción del análisis de componentes principales se vea comprometida. Por otra parte, puede observarse que hay 3 metabolitos cuya media está significativamente por encima de la de los demás metabolitos.

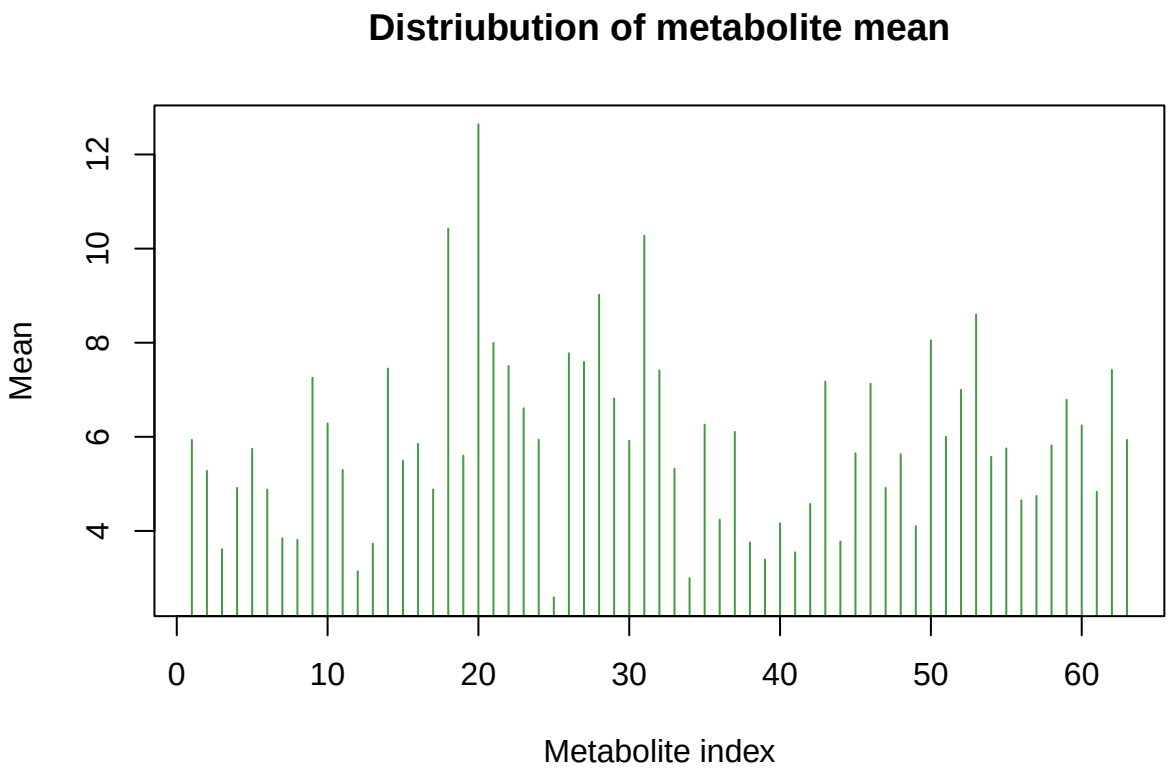
```
##                              mean             metabolite
## Creatinine               8733.9718             Creatinine
## Hippurate                2286.8377              Hippurate
## Citrate                  2235.3460                Citrate
## Glycine                   880.7174                Glycine
## Trimethylamine.N.oxide    652.1569 Trimethylamine.N.oxide
## Glucose                   559.8445                Glucose
```

Se puede observar que los metabolitos con los valores medios más altos son la creatinina, el hipurato y el citrato.

Para solucionar todos los problemas mencionados anteriormente se aplica una normalización logarítmica a los datos y se comprueban los resultados.

```
# normalización logarítmica
log_matrix <- log2(filtered_matrix + 1)
```


Distriubution of metabolite values
Frequency
0
100
200
300
400
0
5
10
15
Metabolite value



Análisis de componentes principales (PCA)

Los 3 metabolitos con niveles medios más altos son son la creatinina, el hipurato y el citrato. `comprobar la diferencia del nivel de estos 3 metabolitos entre el grupo control y el grupo con caquexia, plantear un contraste de hipótesis`.