

# PRUEBA DE EVALUACIÓN CONTINUA 1

Análisis de datos ómicos



**Tania Perdomo González**

**Curso 2024-25**

# Tabla de contenidos

1.	<i>Resumen ejecutivo.....</i>	2
2.	<i>Objetivos del estudio.....</i>	3
3.	<i>Materiales y Métodos:.....</i>	4
4.	<i>Resultados.....</i>	6
4.1.	<i>Análisis Univariante de los datos.....</i>	6
4.2.	<i>Análisis multivariante de los datos .....</i>	6
5.	<i>Discusión, limitaciones y conclusiones del estudio.....</i>	11
6.	<i>Repositorio de github.....</i>	13
7.	<i>APÉNDICES.....</i>	14
	<i>Apéndice A. Análisis Univariante .....</i>	14

# 1. Resumen ejecutivo

Se ha llevado a cabo un análisis de un estudio de caquexia en 77 individuos, de los cuales 47 presentan el síndrome y 30 son sujetos sanos. Para ello, se ha implementado un análisis univariante y multivariante de los datos, por medio de diversas herramientas del programa estadístico R como `str()` o `summary()` y representaciones como son los diagramas de cajas y bigotes o agrupaciones jerárquicas por ejemplo. Asimismo, los datos no presentan aparentemente problemas, ya que las muestras parecen distribuirse de manera similar y no hay valores faltantes.

Como resultado del mismo, se ha concluido que existe una asociación con la alteración de varias vías metabólicas en los pacientes con caquexia, especialmente aquellas relacionadas con la degradación muscular así como que en estos pacientes se intenta compensar la alteración en su catabolismo con el aumento de glicina para producir mayor cantidad de proteínas.

Al ser especialmente diferentes los niveles de creatinina e hipurato con respecto al resto de metabolitos incluidos en el estudio, se plantea su posible futuro papel como biomarcadores de caquexia, siendo necesarios otros estudios que profundicen en su análisis y que incluyan otros datos clínicos como el sexo, la edad o marcadores de procesos inflamatorios.

Paralelamente, también se ha creado un objeto `SummarizedExperiment` haciendo uso de `bioconductor` y un repositorio github en el que se incluyeron todos los documentos desarrollados a lo largo de esta prueba de evaluación continua.

## 2. Objetivos del estudio

El objetivo principal de esta prueba de evaluación continua es llevar a cabo un análisis exploratorio de los niveles de distintos metabolitos en pacientes con caquexia descargados desde el repositorio de github <https://github.com/nutrimetabolomics/metaboData/tree/main/Datasets/2024-Cachexia> utilizando el programa estadístico R y las librerías para análisis de datos ómicos integradas en Bioconductor así como familiarizarse con el empleo de github a la hora de realizar y compartir estudios bioinformáticos.

### 3. Materiales y Métodos:

Los datos con los que se ha trabajado han sido descargados desde el repositorio de github aportado de entre un listado de estudios. En concreto, se ha seleccionado el dataset human\_cachexia dado que su estudio podría permitir identificar biomarcadores que distingan pacientes caquéticos de los que no presentan dicho síndrome, para conseguir así un diagnóstico más temprano e intentando mejorar la respuesta a posibles tratamientos; o incluso estudiar su posible asociación con enfermedades crónicas como el cáncer.

Una vez descargados los datos, haciendo uso del programa R y Bioconductor se ha creado un contenedor del tipo SummarizedExperiment y se ha guardado en formato binario .Rda tal y como se muestra a continuación:

```
# Cargamos Los datos con Los que se va a trabajar
library(SummarizedExperiment)

data <- read.csv("~/Dropbox/UOC/SEMESTRE 3/PEC1/PEC1/human_cachexia.csv", header=TRUE)
patient_ids <- data$Patient.ID
#eliminamos los dos primeras columnas para que todos los datos sean de
#l mismo tipo.
data <- data[, -c(1, 2)]
rownames(data) <- patient_ids

# Creamos el contenedor de los datos cuantitativos y metadatos
se <- SummarizedExperiment(
  # Se almacenan los datos experimentales en la lista counts
  assays = list(counts = data),
  # Con Patient.ID se relaciona cada muestra con su identificador
  rowData = DataFrame(Patient.ID = rownames(data)),
  # Se relaciona cada columna con un parámetro.
  colData = DataFrame(Metabolite = colnames(data))
)

#Añadimos información general sobre el dataset como su nombre o contenido.
metadata(se) <- list(
  title = "Human Caquexia Dataset",
  description = "Dataset conteniendo niveles de metabolitos de pacientes cachexicos y no cachexicos (un grupo control.)"
)

se

# class: SummarizedExperiment
## dim: 77 63
## metadata(2): title description
## assays(1): counts
## rownames(77): PIF_178 PIF_087 ... NETL_003_V1 NETL_003_V2
## rowData names(1): Patient.ID
## colnames(63): X1.6.Anhydro.beta.D.glucose X1.Methylnicotinamide ...
```

```
## pi.Methylhistidine tau.Methylhistidine
## colData names(1): Metabolite

#Guardamos el dataset en formato binario.
save(se, file = "human_caquexia.Rda")
# Aplicamos distintas herramientas para comprobar que el contenedor
está correctamente implementado:
num_samples <- nrow(se)
num_metabolites <- length(unique(colnames(se)))
missing_values <- sum(is.na(se))
```

Por otro lado, a la hora de realizar el análisis en profundidad de human\_caquexia se han usado diversas herramientas del programa R siguiendo como modelo el siguiente ejemplo: [https://aspteaching.github.io/Analisis\\_de\\_datos\\_omicos-Ejemplo\\_0-Microarrays/ExploreArrays.html](https://aspteaching.github.io/Analisis_de_datos_omicos-Ejemplo_0-Microarrays/ExploreArrays.html).

En primer lugar, se procedió a llevar a cabo un análisis univariante de los datos para estudiarlos a nivel general por medio de diversas herramientas y representaciones. Tras ello, se pasó al análisis multivariante de los datos mediante el análisis de componentes principales (PCA) y clustering, para determinar si existe alguna relación de los grupos de estudio (caquexia/control) y la variabilidad existente en los distintos niveles de metabolitos medidos experimentalmente. Los resultados obtenidos de dichos análisis exploratorios se muestran en el siguiente apartado.

Por otro lado, el informe se elaboró por medio del procesador de texto Word, recogiendo los datos obtenidos directamente desde el archivo markdown de R.

Al final, se depositaron en un repositorio de github este informe así como el contenedor creado en formato binario .Rda, el código R implementado durante la exploración de los datos, los datos en formato texto así como los metadatos acerca del dataset en un archivo markdown.

Previamente se creó un repositorio desde la cuenta personal de github desde la página <https://github.com/new> y a la que se le dio el nombre Perdomo-Gonzalez-Tania-PEC1. Al mismo se le añadieron los archivos solicitados clicando en *Add files < Upload files*.

The screenshot shows a GitHub repository page for 'Perdomo-Gonzalez-Tania-PEC1'. The repository is marked as 'Private'. At the top, there are buttons for 'main', '1 Branch', and 'Tags'. A search bar with 'Go to file' and a dropdown menu with 'Add file' and 'Code' are visible. Below this, a table lists the repository's files:

File Name	Commit Message	Time Ago
tpergonp README.md	5913cd7 · 1 minute ago	3 Commits
PEC1_Perdomo_Tania.Rmd	Add files via upload	2 minutes ago
README.md	README.md	1 minute ago
human_cachexia.csv	Add files via upload	2 minutes ago
human_caquexia.Rda	Add files via upload	2 minutes ago
metadata.md	Add files via upload	2 minutes ago

## 4. Resultados

### 4.1. Análisis Univariante de los datos

Tal y como se puede apreciar en el *apéndice A*, a partir de los histogramas representados, los valores de los distintos metabolitos no siguen una distribución normal, esto es, se encuentran sesgados pero se distribuyen similarmente.

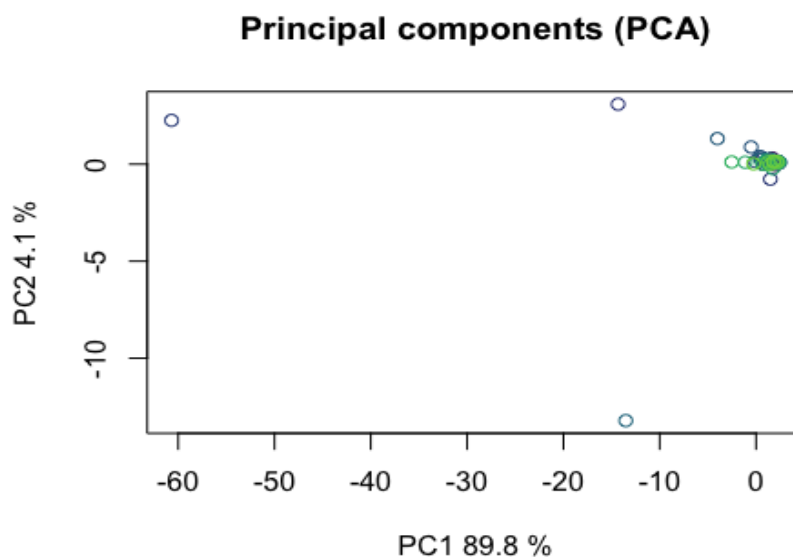
En cuanto a los diagramas de cajas y bigotes o boxplots, queda patente que existen diferencias entre los niveles de los grupos control y pacientes caquéticos. En general, el grupo caquético presenta valores medianos y máximos superiores para cada metabolito así como más dispersos en comparación con el grupo control.

### 4.2. Análisis multivariante de los datos

La técnica PCA permite transformar un conjunto de datos que contiene muchas variables, en nuestro caso 63, en un nuevo conjunto de variables – denominadas componentes principales - que conserve la variabilidad existente en las mismas, lo que permite simplificar su análisis. En concreto, cada punto del gráfico representa a un paciente cuya posición en la gráfico viene definida por cómo se relacionan con la media en los niveles para cada metabolito. La existencia de colores diferentes indica en principio un agrupamiento de los datos, probablemente en cuanto al grupo al que pertenecen.

```
pca<-prcomp(t(data), scale=TRUE)
loads<- round(pca$sdev^2/sum(pca$sdev^2)*100,1)

xlab<-c(paste("PC1",loads[1],"%"))
ylab<-c(paste("PC2",loads[2],"%"))
plot(pca$x[,1:2],xlab=xlab,ylab=ylab, col=groupColors,
      main ="Principal components (PCA)")
```

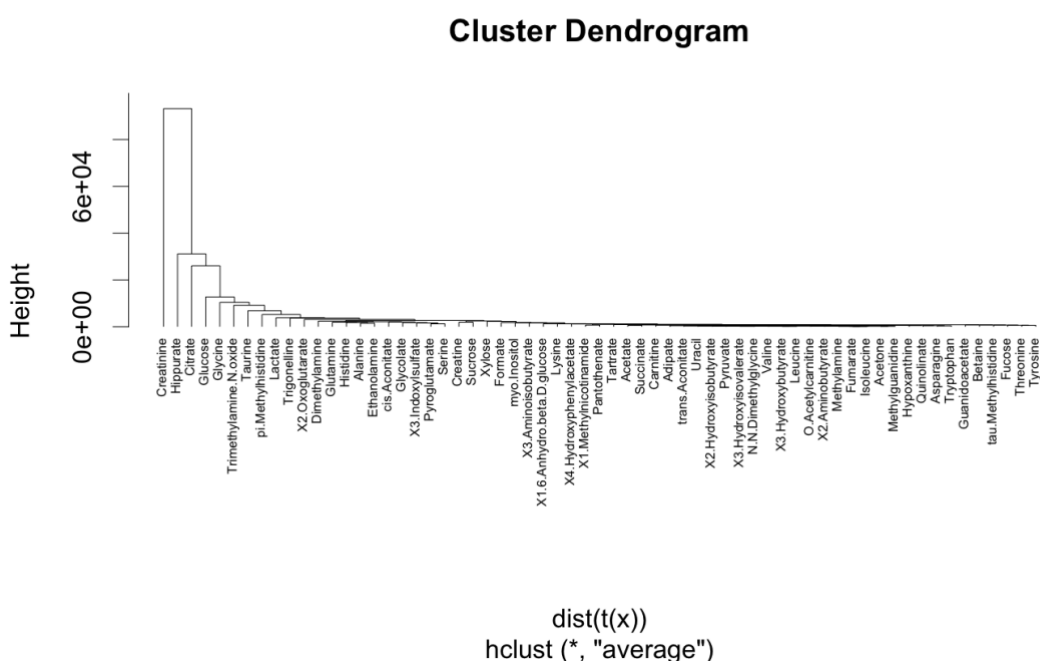


En el gráfico anterior se aprecia que varios grupos de pacientes se encuentran agrupados en la misma región del gráfico o se encuentran muy próximos entre sí, lo que indica que dichos pacientes comparten perfiles similares en cuanto a los metabolitos incluidos en el estudio. En base a ello, otros próximos estudios podrían centrarse en conocer si la respuesta al tratamiento por medio de distintos metabolitos es parecida.

Los puntos que se encuentran muy alejados de los demás pueden representar pacientes con valores atípicos y que podría ser interesante incluir en otros estudios más detallados para intentar conocer las diferencias encontradas.

Por otro lado, también se realizó un agrupamiento jerárquico, invirtiendo las filas y columnas, así como calculando la matriz de distancias. Como resultado, se generan dendogramas que representan cómo se agrupan los distintos metabolitos y grupos de pacientes entre sí.

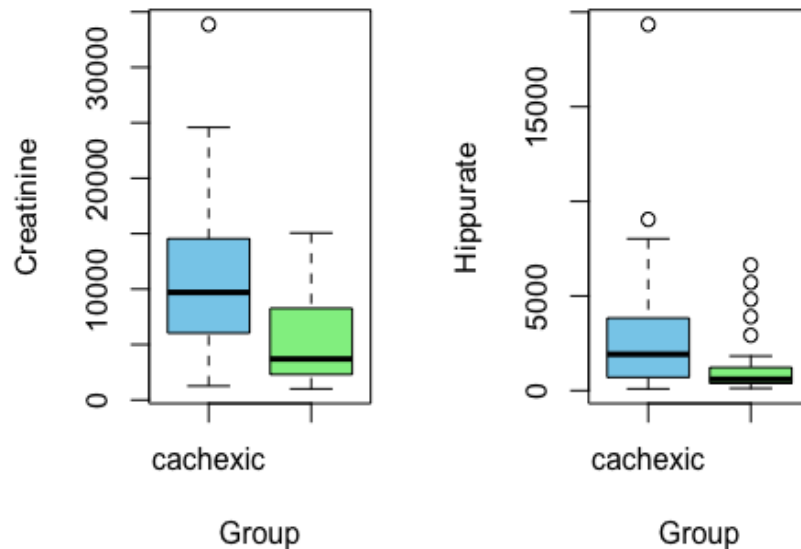
Cada rama representa un grupo de pacientes o metabolitos con características similares, de tal manera que cuanto más cerca estén las ramas, más similares son. Asimismo, la altura a la que se fusionan dos ramas también es indicativa de la similitud de los grupos analizados; por lo que una fusión con poca altura indica que los grupos son similares y con altura que son más diferentes.



Atendiendo a lo anterior, el dendrograma mostrado representa el agrupamiento de los metabolitos incluidos en este estudio y su correlación. Con ello, se aprecia que los metabolitos más diferentes, en términos metabólicos, al compararlos con el resto son la creatitina y el hipurato. Esto podría estar indicando alteraciones metabólicas implicadas en la síntesis de ambos compuestos en pacientes con caquexia.

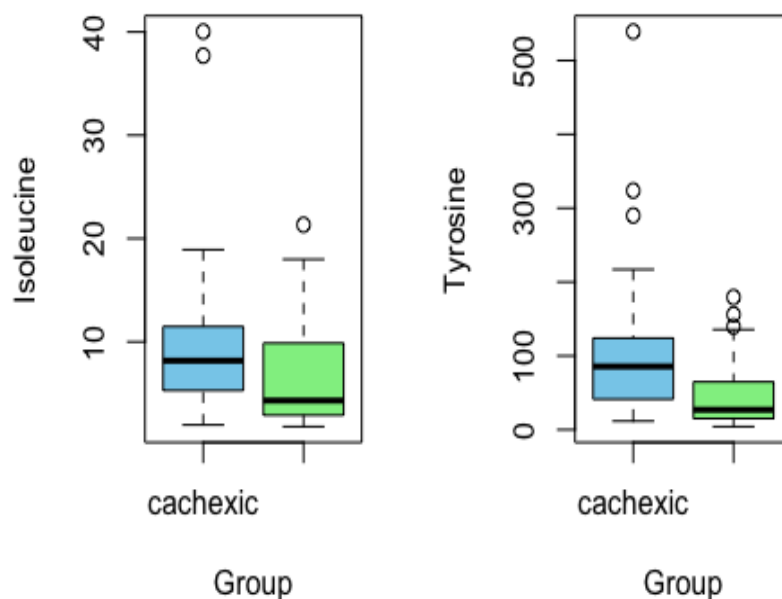


Partiendo de esto, si se analizan los boxplots de los grupos control y caquexico se evidencia que la mediana de los niveles de creatinina e hipurato en el grupo caquético son superiores a los del control, validando la mayor degradación muscular así como degradación de aminoácidos aromáticos en los segundos.

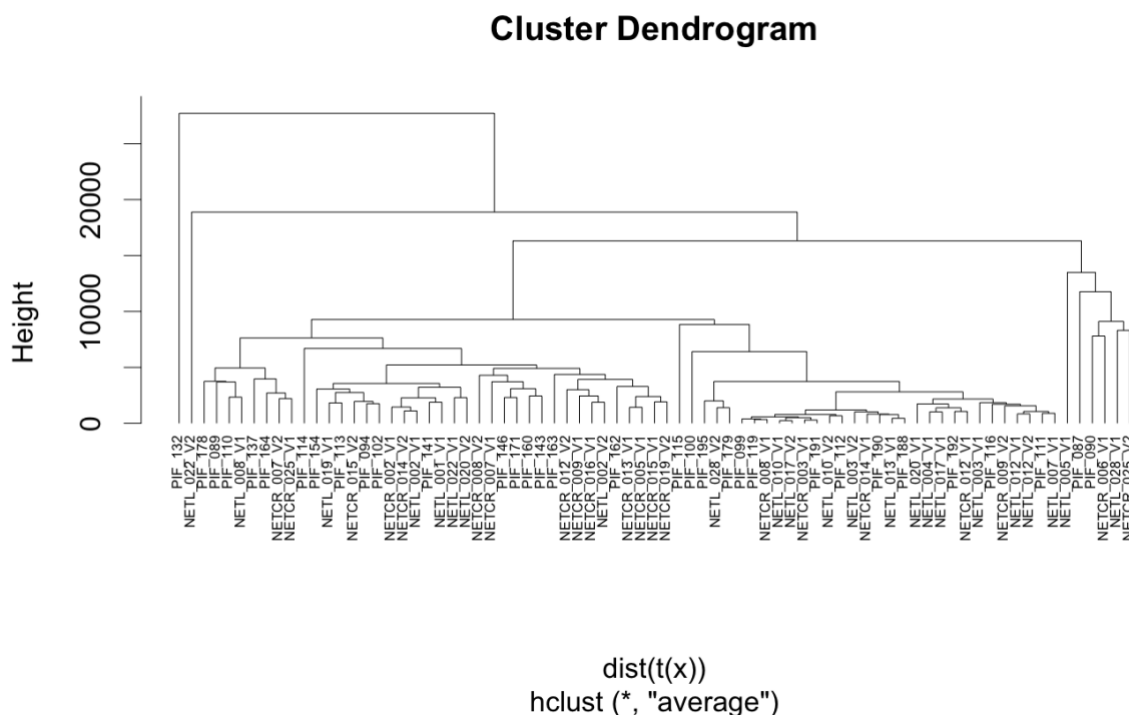


De igual manera, para aminoácidos no aromáticos como la isoleucina y tirosina, sus niveles son más elevados en los pacientes con respecto al control, si bien sus diferencias no son tan notables como las observadas en la creatinina e hipurato.

Las diferencias observadas en las medianas en el grupo control podría estar indicando una distribución asimétrica de los datos dentro del mismo y que influyen en los niveles de las distintas sustancias medidas. Por tanto, hay factores dentro de este grupo que estarían afectando en los niveles de estos metabolitos y que deberían considerarse en estudios posteriores a la hora de seleccionar los individuos de este grupo.



Por otro lado, el dendrograma siguiente permite visualizar cómo se agrupan los pacientes del estudio según sus características, esto es, grupos de pacientes con niveles similares en algunos metabolitos y que permitirían establecer una distinción entre pacientes con el síndrome y los individuos control.

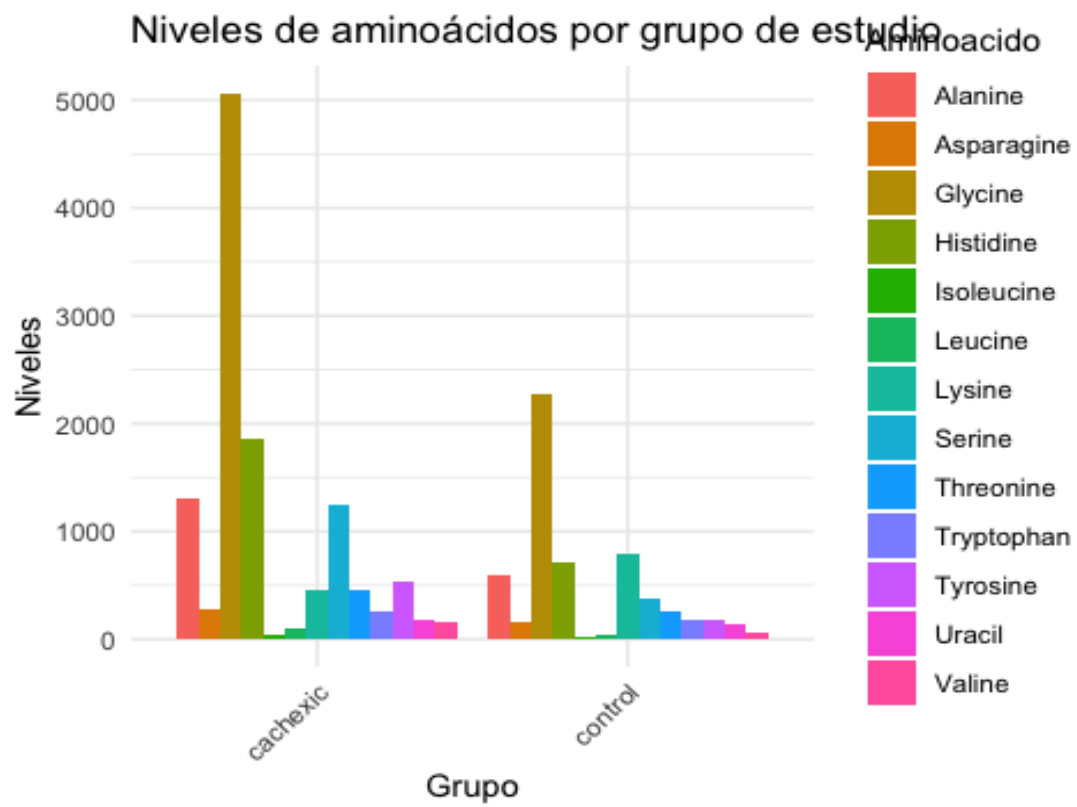


Cabe destacar que la variabilidad intrínseca de los datos en ambos grupos puede llevar a un agrupamiento inusual de algunos pacientes.

Finalmente, se llevó a cabo un análisis del perfil aminoacídico de los grupos del estudio, por medio de la representación de la concentración media de aminoácido para cada grupo en un diagrama de barras combinado.

En general, se observan mayores concentraciones de aminoácidos en el grupo caquético que en el control, pudiendo indicar un mayor catabolismo de proteínas en el primero, siendo coherente con la degradación muscular que presentan estos pacientes.

Asimismo, ciertos aminoácidos presentan niveles más pronunciado en los pacientes que en el control, como es el caso de la glicina. Este aminoácido juega un papel importante en la síntesis de proteínas, por lo que este aumento podría ser el resultado del organismo de intentar compensar la pérdida de proteínas en los pacientes con caquexia.



## 5. Discusión, limitaciones y conclusiones del estudio.

Una vez analizados los resultados, queda patente que los niveles de los metabolitos presentan una gran variabilidad entre los pacientes, lo que podría ser relevante para el diagnóstico y/o seguimiento de los mismos.

En rasgos generales, los resultados de los boxplots sugieren que niveles elevados de los metabolitos del estudio podrían estar relacionados con la caquexia, si bien se necesitarían más estudios para poder confirmar alguno de ellos como un buen biomarcador del síndrome.

Además, la existencia de niveles elevados de aminoácidos y otras moléculas como el lactato parece indicar una alteración metabólica en el grupo caquético.

Concretamente, se puede extraer que la creatinina e hipurato debería ser estudiados en mayor profundidad en estudios posteriores para conocer su posible papel como biomarcadores de caquexia. Así, por ejemplo, los niveles elevados de creatinina se podría asociar con la degradación muscular típica de estos pacientes, por lo que el metabolismo de la misma podría verse alterado en los mismos.

En cuanto al hipurato, este se encuentra relacionado con el metabolismo de algunos aminoácidos aromáticos como la fenilalanina. La rama alta del dendograma podría indicar alteraciones en el metabolismo de este, explicando así las pocas diferencias encontradas en el resto de aminoácidos no aromáticos en el dendograma implementado. Si bien hay diferencias en los niveles de dichos aminoácidos, las diferencias no son lo suficientemente significativas como para influir en gran medida al desarrollo de la caquexia en comparación a la creatinina y el hipurato.

Por otro lado, cabe señalar que los pacientes caquéticos tienen asociado un perfil de aminoácidos alterado, especialmente con niveles altos de glicina para compensar el catabolismo acelerado que sufren estos pacientes, patente en los niveles elevados del resto de aminoácidos.

De todo lo anterior, se puede concluir que la caquexia es un síndrome muy complejo que involucra la alteración de varias rutas metabólicas, no necesariamente sólo aquellas relacionadas con los aminoácidos. Una comprensión más profunda de la misma permitiría conseguir buenos biomarcadores para poder realizar una detección temprana y un buen seguimiento de esta, mejorando la calidad de vida de estos pacientes.

En lo que a nuestro estudio se refiere, es notoria la distribución asimétrica de los datos observados a partir de las medianas de los grupos control, por lo que sería interesante considerar otros factores en el análisis metabólico para intentar disminuir

esa asimetría y obtener así una interpretación más precisa en ambos grupos. Con ellos, se podrían considerar en estudios posteriores otros parámetros como biomarcadores inflamatorios, el sexo, edad, nutrición, tipo y/o duración de la caquexia. Asimismo, se podría reconsiderar el tamaño de la muestra, haciendo no sólo el filtrado de los grupos a estudiar sino también su número, de tal manera que exista una adecuada representatividad de los grupos y que permita dar robustez a los resultados a describir y descartar así la posible variabilidad existente en los perfiles metabólicos de cada paciente.

En resumen, a partir de este análisis exploratorio se ha conseguido relacionar la caquexia con un perfil anómalo de varios aminoácidos y moléculas, pudiendo servir como buenos biomarcadores del síndrome y que en caso de confirmarse en próximos estudios se podrían buscar terapias que ayuden a mitigar los efectos del síndrome, y por tanto, disminuir su concentración.

## 6. Repositorio de github

El enlace directo al repositorio de github donde se han colgado los distintos documentos es el siguiente:

<https://github.com/tpergonp/Perdomo-Gonzalez-Tania-PEC1.git>

## 7. APÉNDICES

### Apéndice A. Análisis Univariante

#### Resumen del dataset

`summary(data2)`

```
## Patient.ID      Muscle.loss X1.6.Anhydro.beta.D.glucose
## Length:77      cachexic:47   Min.    : 4.71
## Class :character control :30   1st Qu.: 28.79
## Mode  :character      Median : 45.60
##                      Mean    :105.63
##                      3rd Qu.:141.17
##                      Max.    :685.40
## X1.Methylnicotinamide X2.Aminobutyrate X2.Hydroxyisobutyrate X2.Ox
oglutamate
## Min.    : 6.42      Min.    : 1.28   Min.    : 4.85      Min.
: 5.53
## 1st Qu.: 15.80      1st Qu.: 5.26   1st Qu.:15.80      1st Q
u.: 22.42
## Median : 36.60      Median : 10.49   Median :32.46      Media
n : 55.15
## Mean    : 71.57      Mean    : 18.16   Mean    :37.25      Mean
: 145.09
## 3rd Qu.: 73.70      3rd Qu.: 19.49   3rd Qu.:54.60      3rd Q
u.: 92.76
## Max.    :1032.77     Max.    :172.43   Max.    :93.69      Max.
:2465.13
## X3.Aminoisobutyrate X3.Hydroxybutyrate X3.Hydroxyisovalerate X3.In
doxylsulfate
## Min.    : 2.61      Min.    : 1.70   Min.    : 0.92      Min.
: 27.66
## 1st Qu.: 11.70      1st Qu.: 5.99   1st Qu.: 5.26      1st Q
u.: 82.27
## Median : 22.65      Median : 11.70   Median : 12.55      Media
n : 144.03
## Mean    : 76.76      Mean    : 21.72   Mean    : 21.65      Mean
: 218.88
## 3rd Qu.: 56.26      3rd Qu.: 29.96   3rd Qu.: 30.27      3rd Q
u.: 333.62
## Max.    :1480.30     Max.    :175.91   Max.    :164.02      Max.
:1043.15
## X4.Hydroxyphenylacetate Acetate      Acetone      Adipa
te
## Min.    : 15.49      Min.    : 3.49   Min.    : 2.29      Min.    :
1.55
## 1st Qu.: 41.68      1st Qu.: 16.28   1st Qu.: 4.95      1st Qu.:
6.11
## Median : 70.11      Median : 39.65   Median : 7.10      Median :
10.18
## Mean    :112.02      Mean    : 66.14   Mean    : 11.43      Mean    :
24.76
```

##	3rd Qu.:145.47	3rd Qu.: 86.49	3rd Qu.: 10.49	3rd Qu.: 19.11
##	Max. :796.32	Max. :411.58	Max. :206.44	Max. :327.01
##	Alanine	Asparagine	Betaine	Carnitine
##	Min. : 16.78	Min. : 6.69	Min. : 2.29	Min. : 2.18
##	1st Qu.: 78.26	1st Qu.: 20.49	1st Qu.: 28.79	1st Qu.: 14.44
##	Median : 194.42	Median : 42.10	Median : 64.72	Median : 23.81
##	Mean : 273.56	Mean : 62.28	Mean : 90.32	Mean : 52.09
##	3rd Qu.: 399.41	3rd Qu.: 89.12	3rd Qu.:127.74	3rd Qu.: 60.95
##	Max. :1312.91	Max. :273.14	Max. :391.51	Max. :487.85
##	Citrate	Creatine	Creatinine	Dimethylamine
##	Min. : 59.74	Min. : 2.75	Min. : 1002	Min. : 41.
##	1st Qu.: 788.40	1st Qu.: 17.64	1st Qu.: 3498	1st Qu.: 142.
##	Median : 1790.05	Median : 44.26	Median : 7631	Median : 304.
##	Mean : 2235.35	Mean : 126.83	Mean : 8734	Mean : 358.
##	3rd Qu.: 3071.74	3rd Qu.: 117.92	3rd Qu.:12333	3rd Qu.: 454.
##	Max. :13629.61	Max. :1863.11	Max. :33860	Max. :1556.
##	Ethanolamine	Formate	Fucose	Fumarate
##	Min. : 16.12	Min. : 6.42	Min. : 5.70	Min. : 0.79
##	1st Qu.: 86.49	1st Qu.: 53.52	1st Qu.: 29.37	1st Qu.: 2.23
##	Median : 204.38	Median : 95.58	Median : 61.56	Median : 4.10
##	Mean : 276.26	Mean : 147.40	Mean : 88.67	Mean : 8.44
##	3rd Qu.: 407.48	3rd Qu.: 167.34	3rd Qu.:123.97	3rd Qu.: 7.85
##	Max. :1436.55	Max. :1480.30	Max. :407.48	Max. :96.54
##	Glucose	Glutamine	Glycine	Glycolate
##	Min. : 26.84	Min. : 23.34	Min. : 38.09	Min. : 5.
##	1st Qu.: 80.64	1st Qu.: 113.30	1st Qu.: 262.43	1st Qu.: 50.
##	Median : 210.61	Median : 225.88	Median : 528.48	Median :130.
##	Mean : 559.85	Mean : 306.87	Mean : 880.72	Mean :187.
##	3rd Qu.: 407.48	3rd Qu.: 445.86	3rd Qu.:1096.63	3rd Qu.:267.
##	Max. :8690.62	Max. :1685.81	Max. :5064.45	Max. :720.
##	Guanidoacetate	Hippurate	Histidine	Hypoxanthine
##	Min. : 7.03	Min. : 92.76	Min. : 14.15	Min. : 3.
##	1st Qu.: 33.78	1st Qu.: 492.75	1st Qu.: 66.69	1st Qu.: 20.
##	Median : 64.72	Median : 1224.15	Median : 174.16	Median : 40.
##	Mean : 86.37	Mean : 2286.84	Mean : 292.64	Mean : 61.



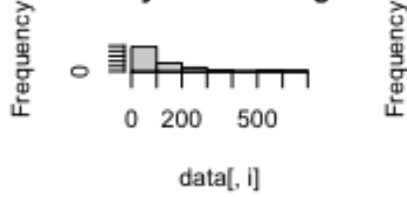
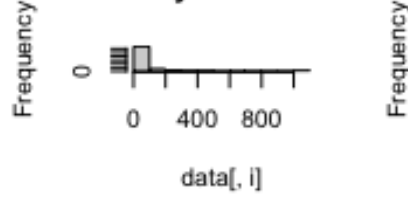
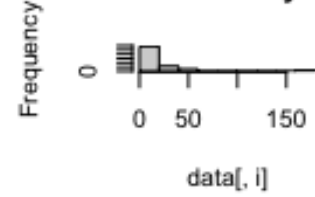
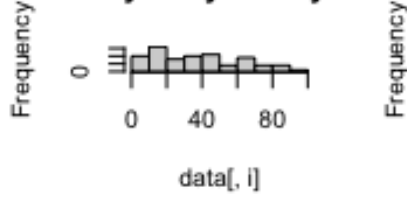
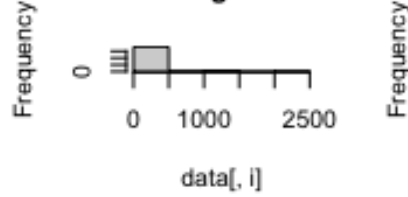
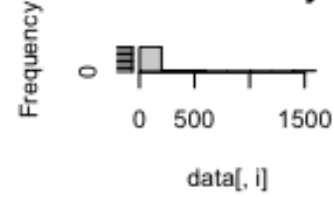
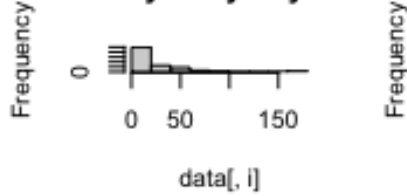
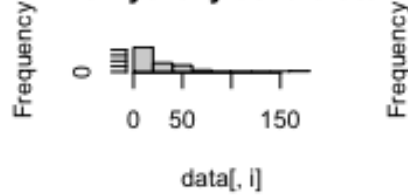
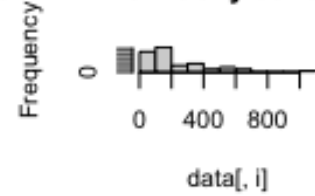
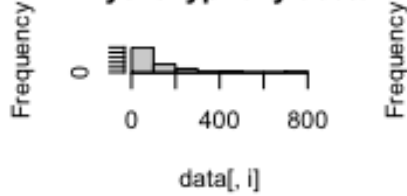
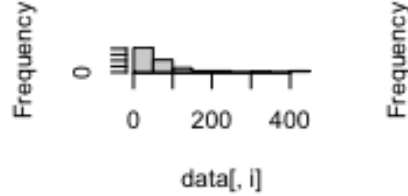
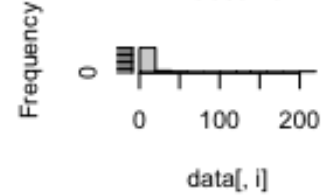
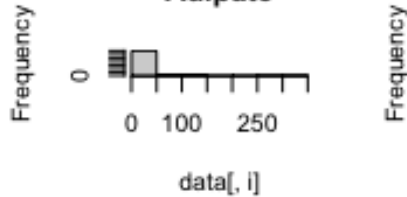
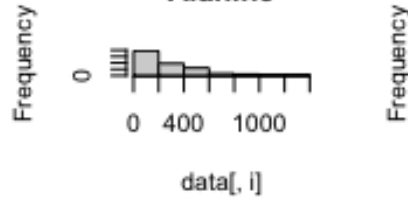
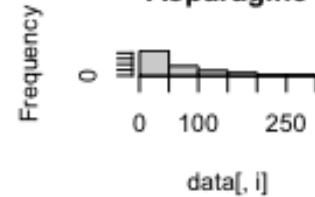
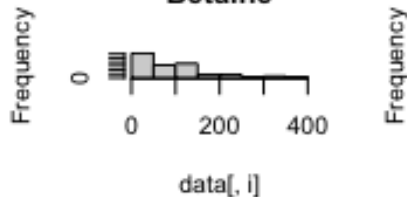
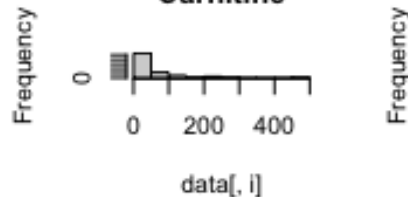
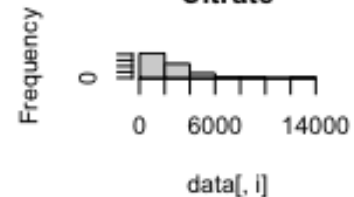
## 3rd Qu.:108.85	3rd Qu.: 2921.93	3rd Qu.: 419.89	3rd Qu.: 83.93
## Max. :561.16	Max. :19341.34	Max. :1863.11	Max. :265.07
## Isoleucine	Lactate	Leucine	Lysine
## Min. : 1.790	Min. : 7.32	Min. : 2.51	Min. : 10.49
## 1st Qu.: 3.900	1st Qu.: 35.52	1st Qu.: 9.12	1st Qu.: 30.27
## Median : 7.170	Median : 81.45	Median : 19.11	Median : 69.41
## Mean : 8.709	Mean : 158.46	Mean : 24.36	Mean :108.79
## 3rd Qu.:11.250	3rd Qu.: 139.77	3rd Qu.: 31.19	3rd Qu.:121.51
## Max. :40.040	Max. :3640.95	Max. :103.54	Max. :788.40
## Methylamine	Methylguanidine	N.N.Dimethylglycine	O.Acetylcarnitine
## Min. : 1.513	Min. : 1.70	Min. : 0.79	Min. : 1.2
## 1st Qu.: 5.264	1st Qu.: 4.26	1st Qu.: 7.03	1st Qu.: 3.9
## Median :14.737	Median : 7.85	Median : 21.98	Median : 11.4
## Mean :17.383	Mean : 15.32	Mean : 26.35	Mean : 19.7
## 3rd Qu.:24.051	3rd Qu.: 19.30	3rd Qu.: 40.04	3rd Qu.: 20.9
## Max. :52.468	Max. :141.17	Max. :120.30	Max. :254.6
## Pantothenate	Pyroglutamate	Pyruvate	Quinolinate
## Min. : 2.59	Min. : 21.33	Min. : 0.90	Min. : 5.21
## 1st Qu.: 11.13	1st Qu.: 68.72	1st Qu.: 4.85	1st Qu.: 26.58
## Median : 22.65	Median : 157.59	Median : 13.46	Median : 51.42
## Mean : 44.88	Mean : 211.45	Mean : 21.29	Mean : 66.44
## 3rd Qu.: 41.26	3rd Qu.: 301.87	3rd Qu.: 29.08	3rd Qu.: 87.36
## Max. :692.29	Max. :1064.22	Max. :184.93	Max. :259.82
## Serine	Succinate	Sucrose	Tartrate
## Min. : 16.120	Min. : 1.72	Min. : 6.49	Min. : 2.2
## 1st Qu.: 83.109	1st Qu.: 8.58	1st Qu.: 19.30	1st Qu.: 6.8
## Median : 142.594	Median : 30.88	Median : 40.85	Median : 12.9
## Mean : 197.690	Mean : 60.23	Mean : 113.23	Mean : 40.0
## 3rd Qu.: 270.439	3rd Qu.: 74.44	3rd Qu.: 94.63	3rd Qu.: 25.7
## Max. :1248.885	Max. :589.93	Max. :2079.74	Max. :837.1
## Taurine	Threonine	Trigonelline	Trimethylamine.N.oxide
## Min. : 17.817	Min. : 8.25	Min. : 10.07	Min. : 55.
## 1st Qu.: 99.489	1st Qu.: 31.82	1st Qu.: 53.52	1st Qu.: 175.
## Median : 249.648	Median : 64.07	Median : 114.43	Median : 383.
## Mean : 525.12	Mean : 95.36	Mean : 270.44	Mean : 652.

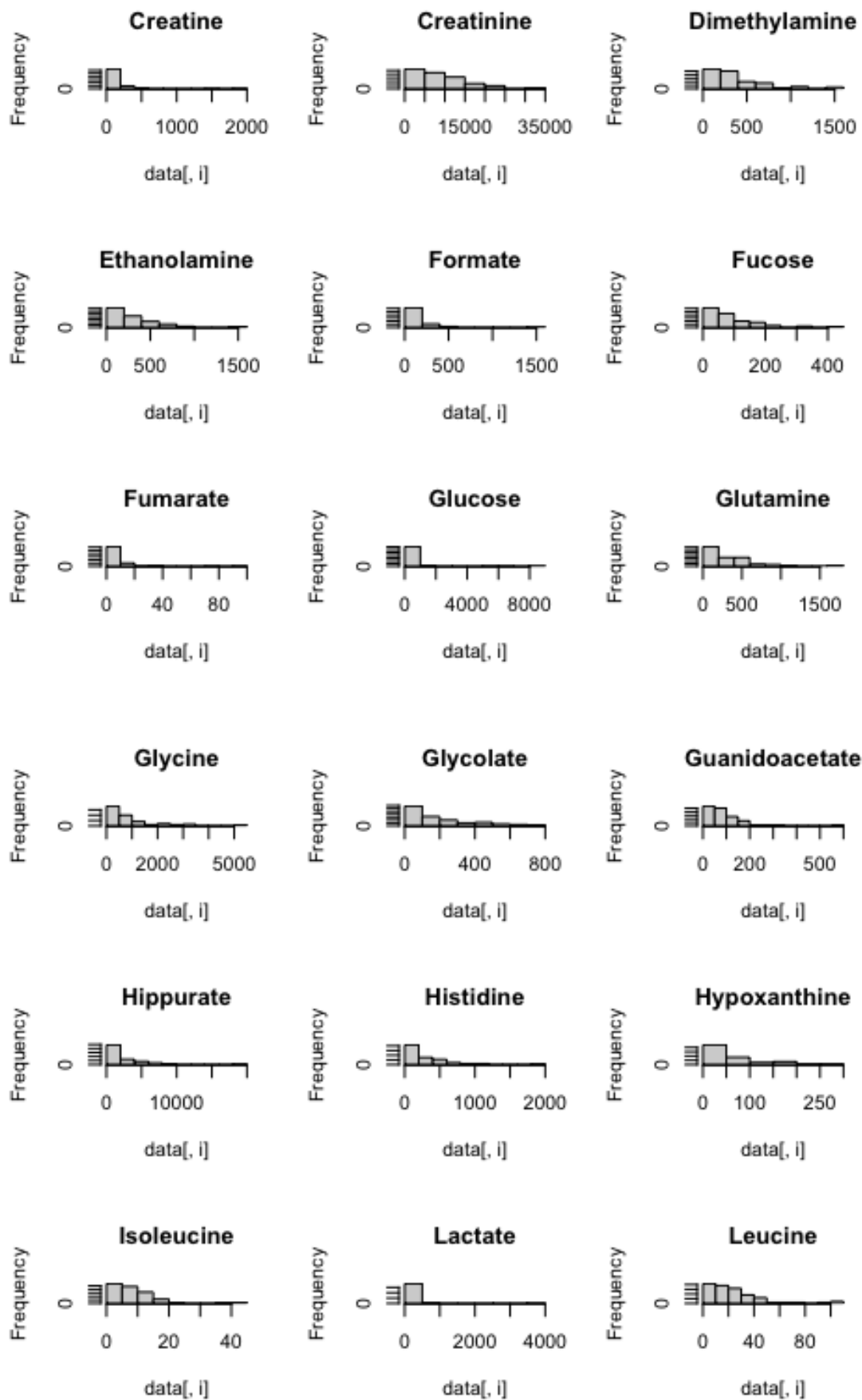
```

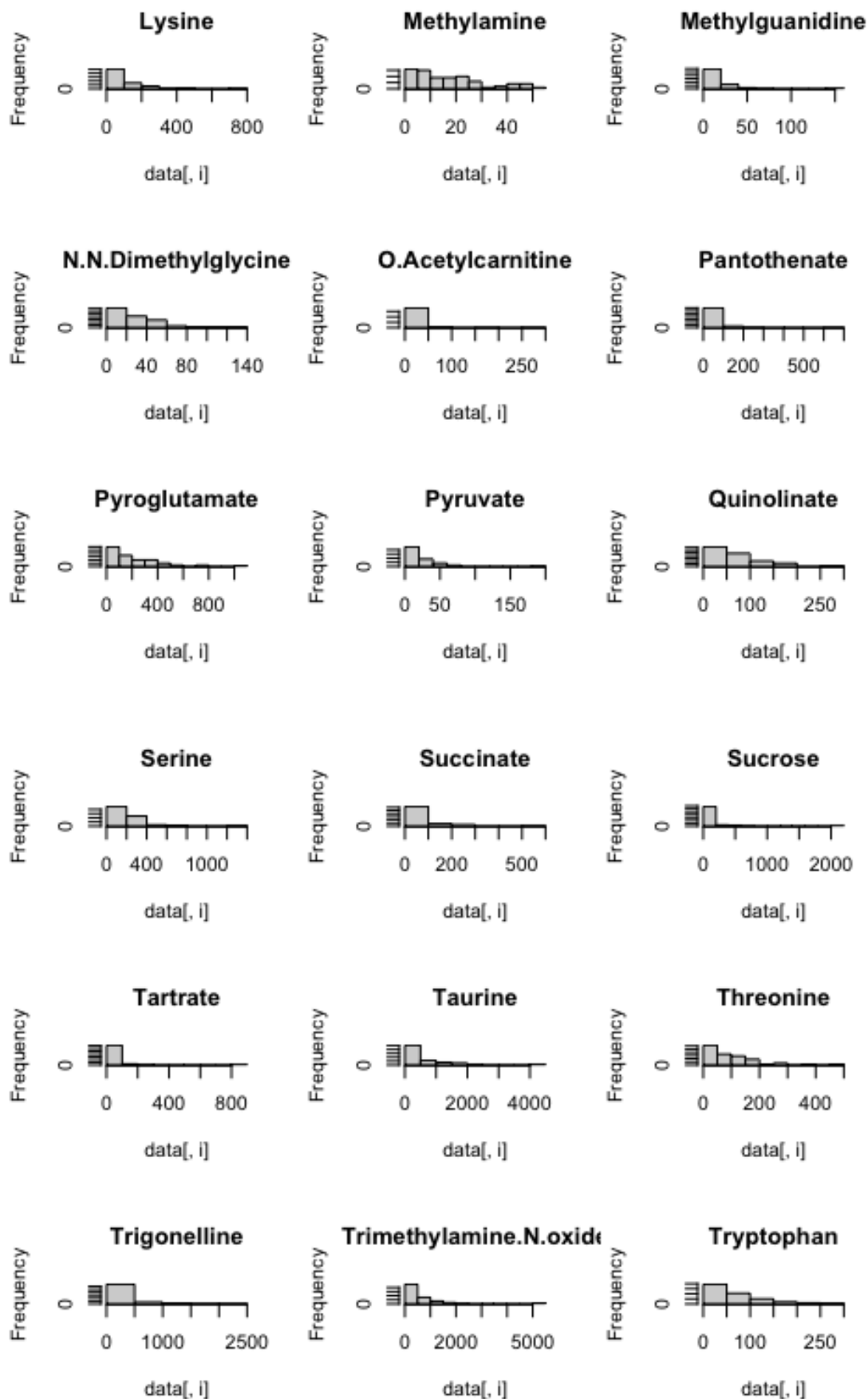
2
## 3rd Qu.: 665.14    3rd Qu.:137.00    3rd Qu.: 340.36    3rd Qu.: 735.
1
## Max.    :4272.69    Max.    :450.34    Max.    :2252.96    Max.    :5486.
2
##      Tryptophan      Tyrosine      Uracil      Valine
## Min.    : 8.67      Min.    : 4.22      Min.    : 3.10      Min.    : 4.10
## 1st Qu.: 21.33      1st Qu.: 23.57      1st Qu.: 11.94      1st Qu.: 12.18
## Median : 46.99      Median : 60.34      Median : 27.39      Median : 33.12
## Mean    : 66.24      Mean    : 81.76      Mean    : 35.56      Mean    : 35.67
## 3rd Qu.: 96.54      3rd Qu.:113.30      3rd Qu.: 44.26      3rd Qu.: 50.40
## Max.    :259.82      Max.    :539.15      Max.    :179.47      Max.    :160.77
##      Xylose      cis.Aconitate      myo.Inositol      trans.Aconita
te
## Min.    : 10.07      Min.    : 12.94      Min.    : 11.59      Min.    : 4.9
0
## 1st Qu.: 29.96      1st Qu.: 36.23      1st Qu.: 30.27      1st Qu.: 12.4
3
## Median : 50.40      Median : 129.02      Median : 78.26      Median : 26.8
4
## Mean    : 100.93      Mean    : 204.22      Mean    :135.40      Mean    : 40.6
3
## 3rd Qu.: 89.12      3rd Qu.: 254.68      3rd Qu.:167.34      3rd Qu.: 57.4
0
## Max.    :2164.62      Max.    :1863.11      Max.    :854.06      Max.    :217.0
2
## pi.Methylhistidine tau.Methylhistidine
## Min.    : 11.36      Min.    : 8.00
## 1st Qu.: 67.36      1st Qu.: 27.39
## Median : 162.39      Median : 68.72
## Mean    : 370.29      Mean    : 89.69
## 3rd Qu.: 387.61      3rd Qu.:130.32
## Max.    :2697.28      Max.    :317.35

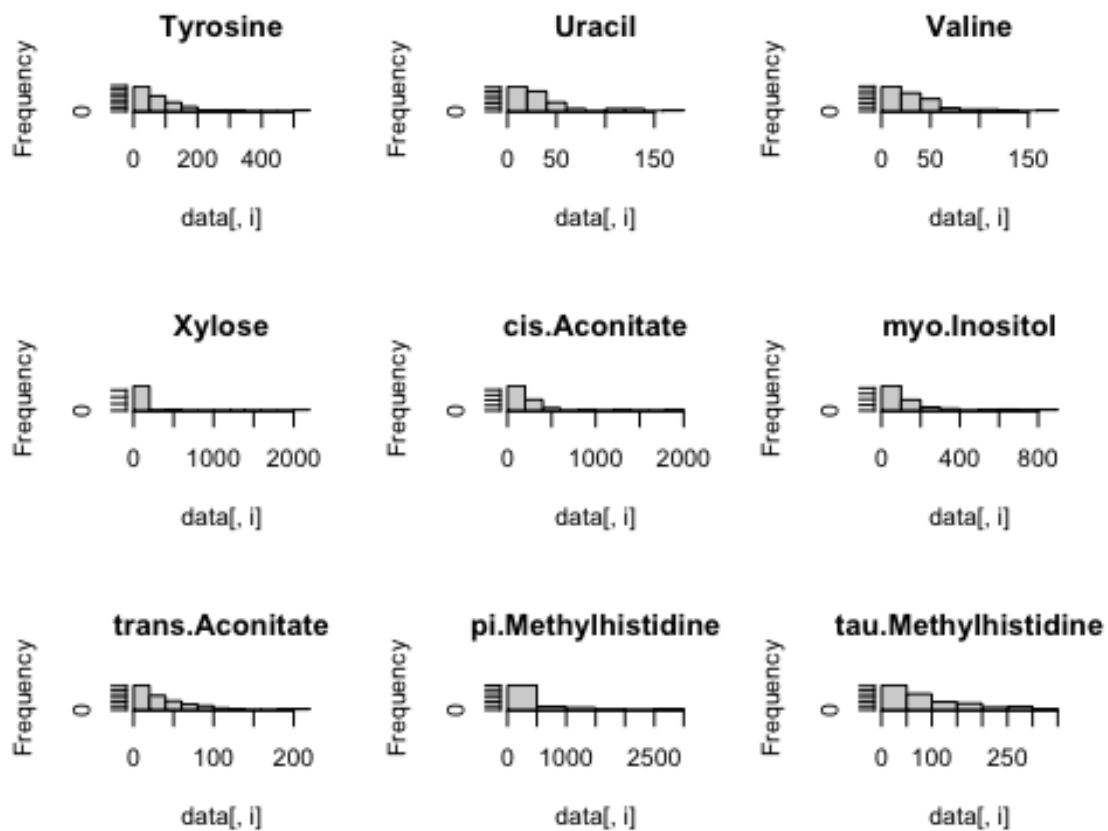
```

## Representación de histogramas para cada metabolito

**X1.6.Anhydro.beta.D.gluc:****X1.Methylnicotinamide****X2.Aminobutyrate****X2.Hydroxyisobutyrate****X2.Oxoglutarate****X3.Aminoisobutyrate****X3.Hydroxybutyrate****X3.Hydroxyisovalerate****X3.Indoxylsulfate****X4.Hydroxyphenylaceta****Acetate****Acetone****Adipate****Alanine****Asparagine****Betaine****Carnitine****Citrate**







**Comparación de distintos metabolitos en los grupos Control (verde)/Cachexia (azul)**

