

# Catálogo de Análisis estadísticos para datos de Metaboloma

Dra. Cristina Carmona Isunza

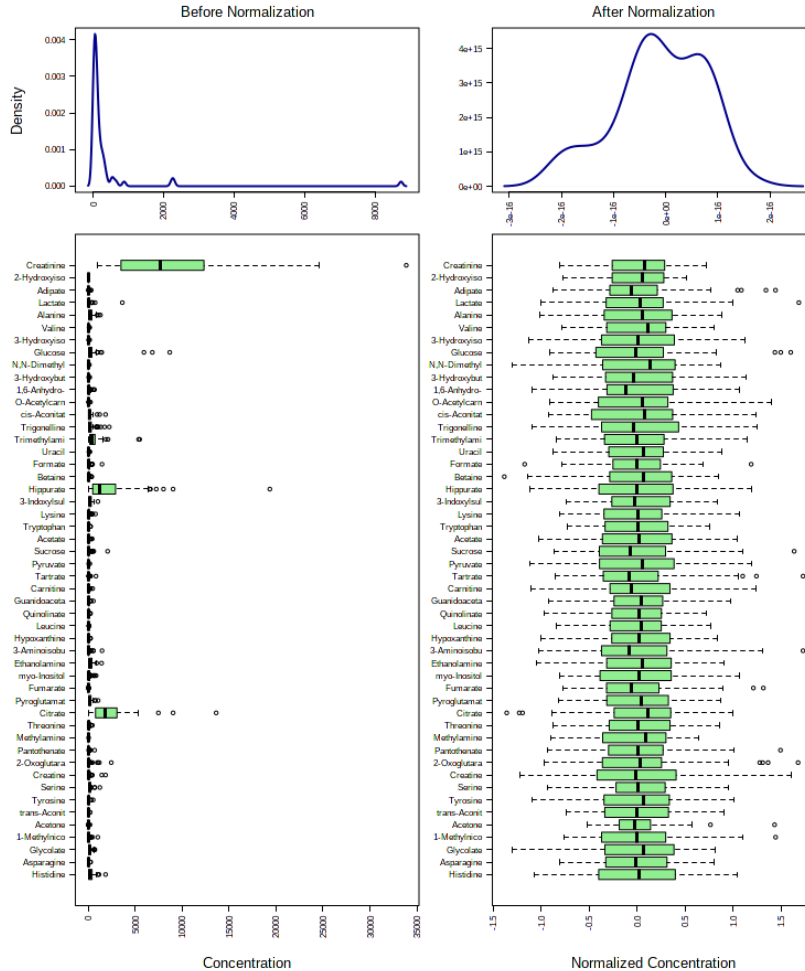
Red de Apoyo a la Investigación

Unidad de Servicios de Bioestadística

CIC- Universidad Nacional Autónoma de México



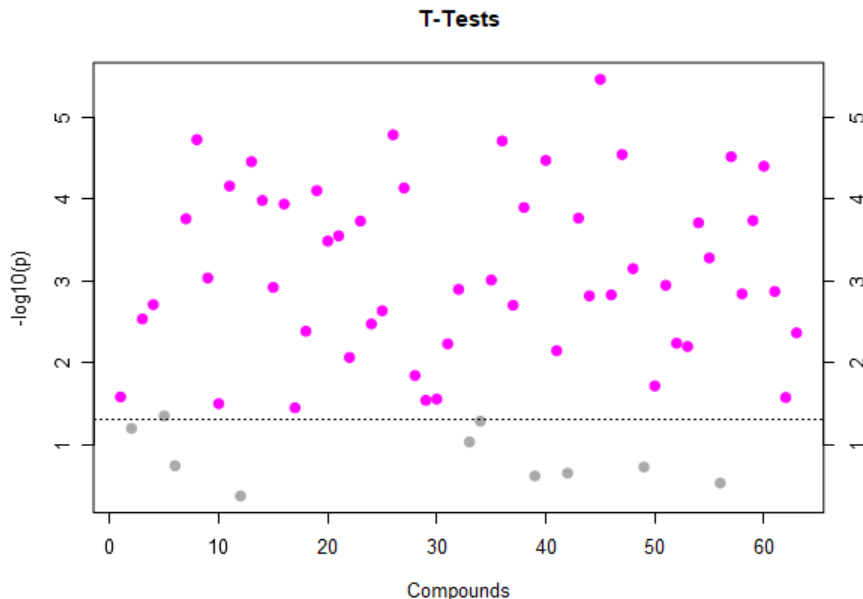
# 1. Normalización y transformación de datos



\*Esta prueba tiene su gráfico y archivo .csv de datos asociado

## 2. Identificar qué metabolitos presentan mayores diferencias entre grupos

Pruebas de t para cada metabolito/compuesto, en caso de que sean más de dos grupos se realizan ANOVAS

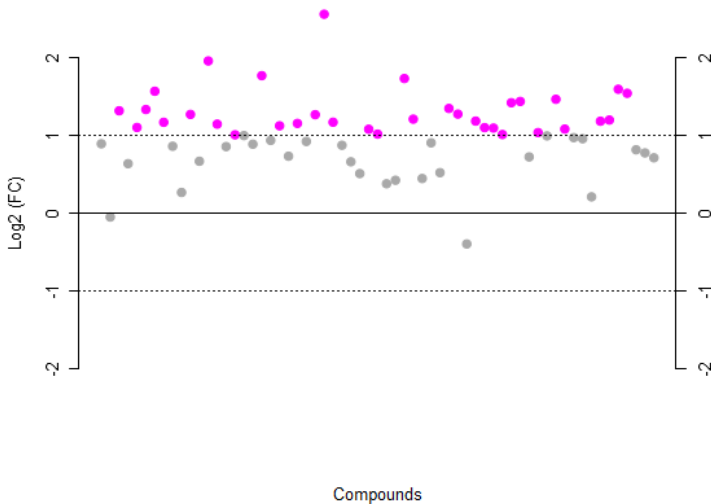


\*Esta prueba tiene su gráfico y archivo .csv de datos asociado

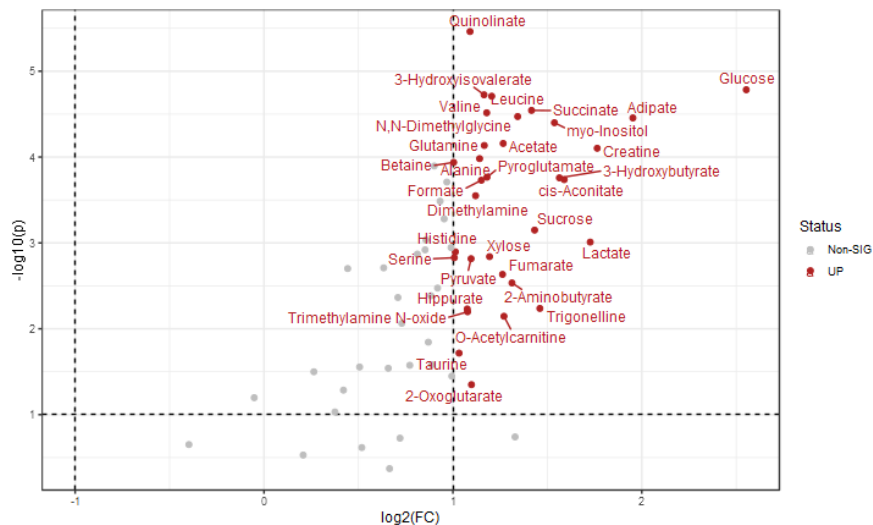
# 2. Identificar qué metabolitos presentan mayores diferencias entre grupos

## Fold change y plot de volcán

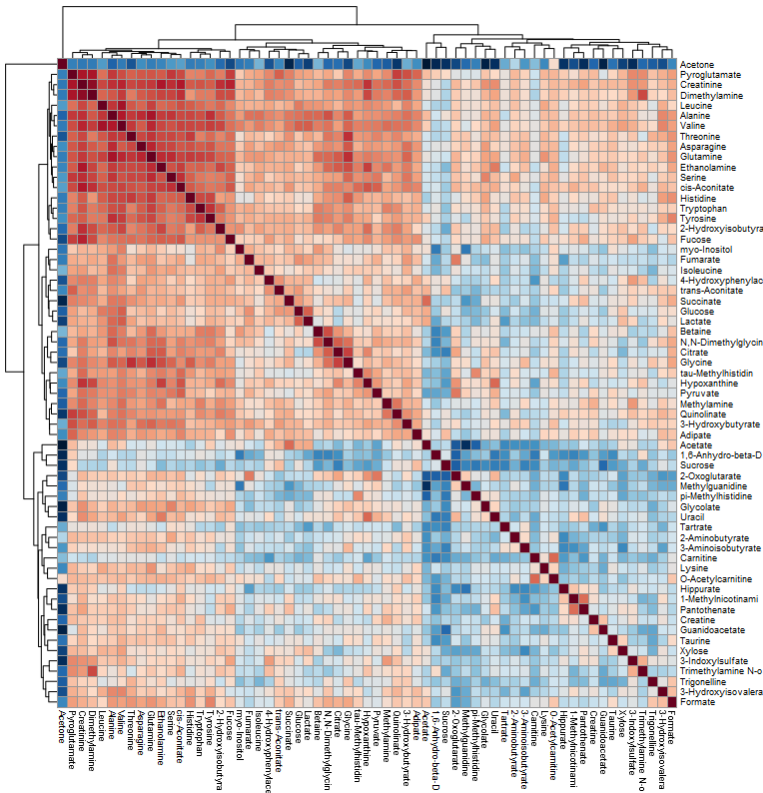
$$\text{Fold Change} = \frac{M_{\text{experimental}}}{M_{\text{control}}}$$



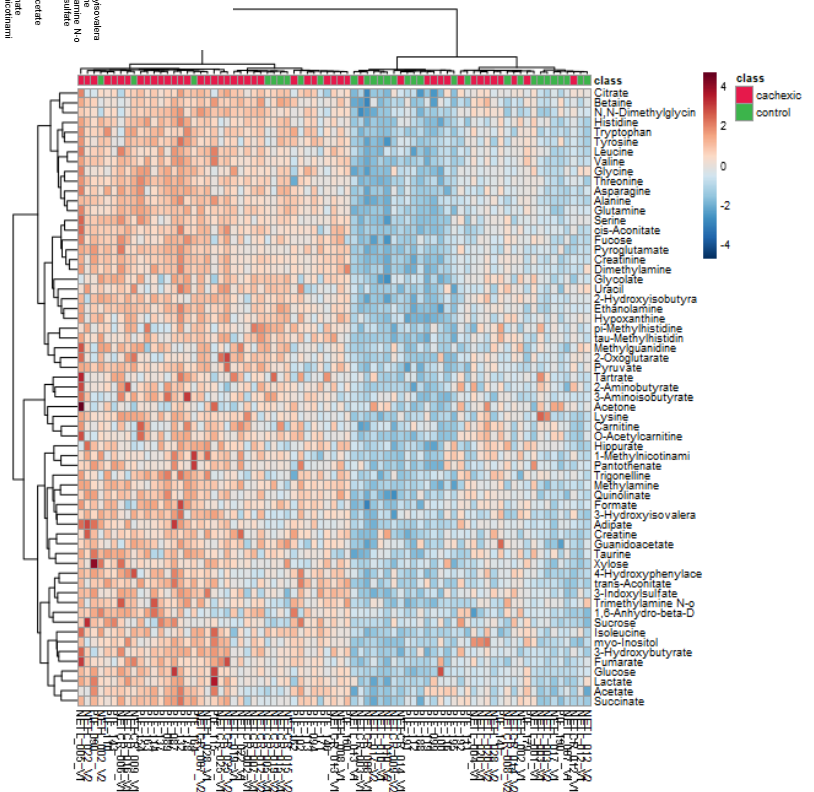
\*Esta prueba tiene su gráfico y archivo .csv de datos asociado



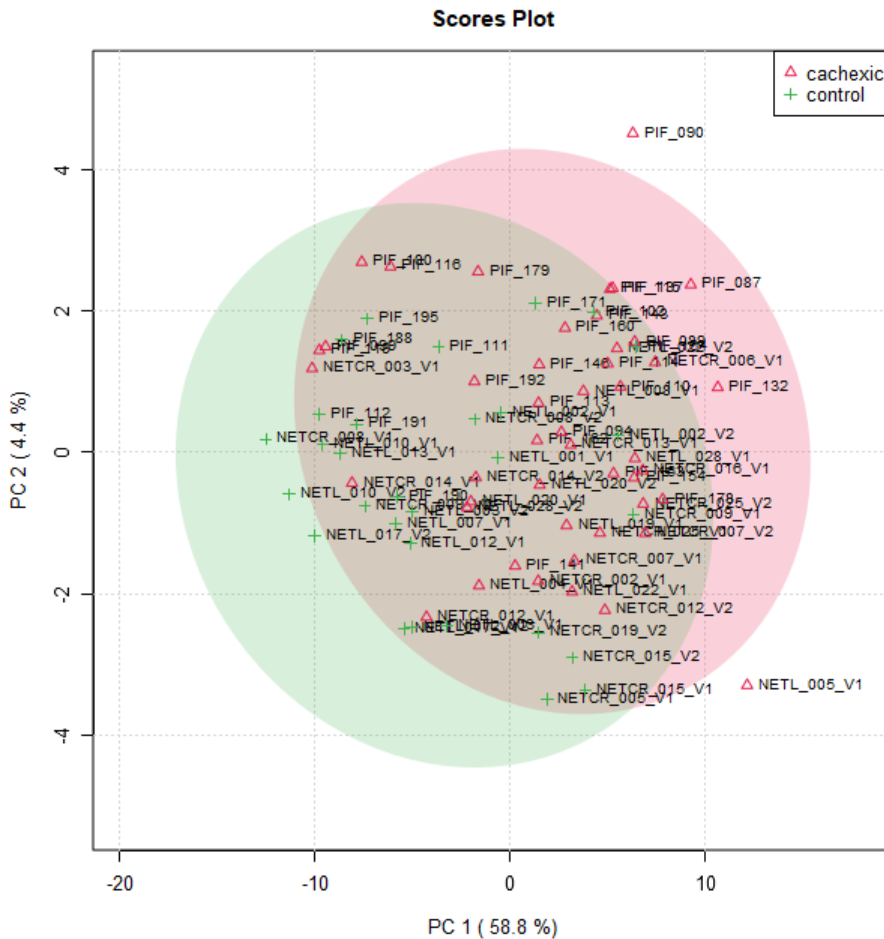
# 3. Visualización de relación entre compuestos y grupos– Heat Map



\*Estas pruebas tienen su gráfico y archivo .csv de datos asociado



# 4. PCA – Análisis de Componentes Principales



\*Esta prueba tiene su gráfico y archivo .csv de datos asociado

# 4. PCA – Análisis de Componentes Principales

## PCA biplot

Permite visualizar la relación entre los Componentes Principales y cada muestra, así como el peso que cada metabolito tiene sobre cada Componente Principal

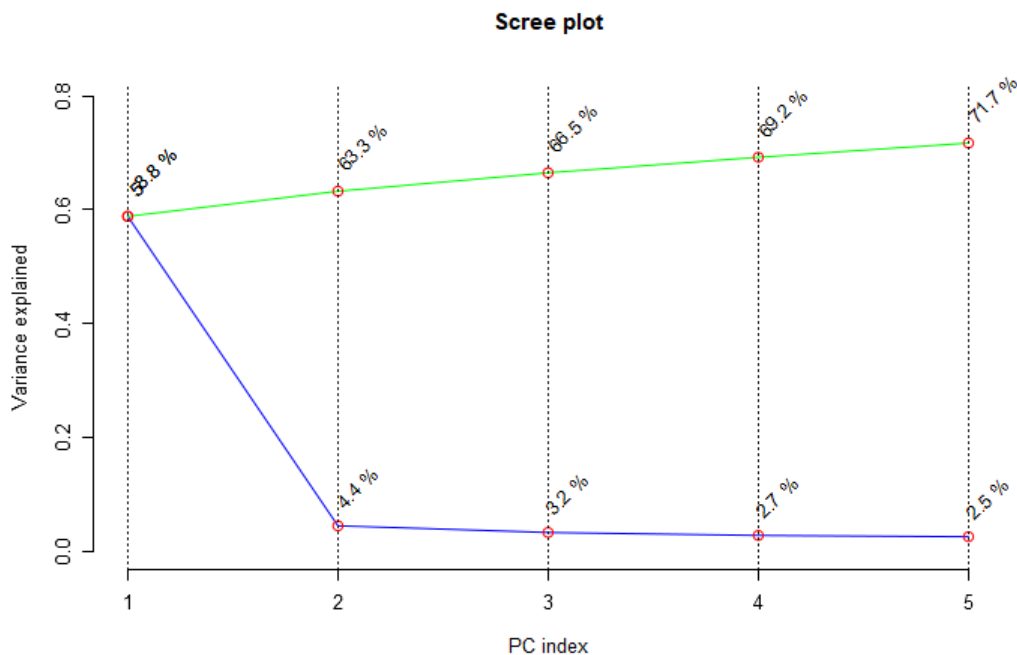


\*Esta prueba tiene su gráfico y archivo .csv de datos asociado

# 4. PCA – Análisis de Componentes Principales

## Scree plot

Permite elegir los componentes que expliquen al menos el 80% de la varianza en caso de requerir agrupar variables para reducción de dimensiones.

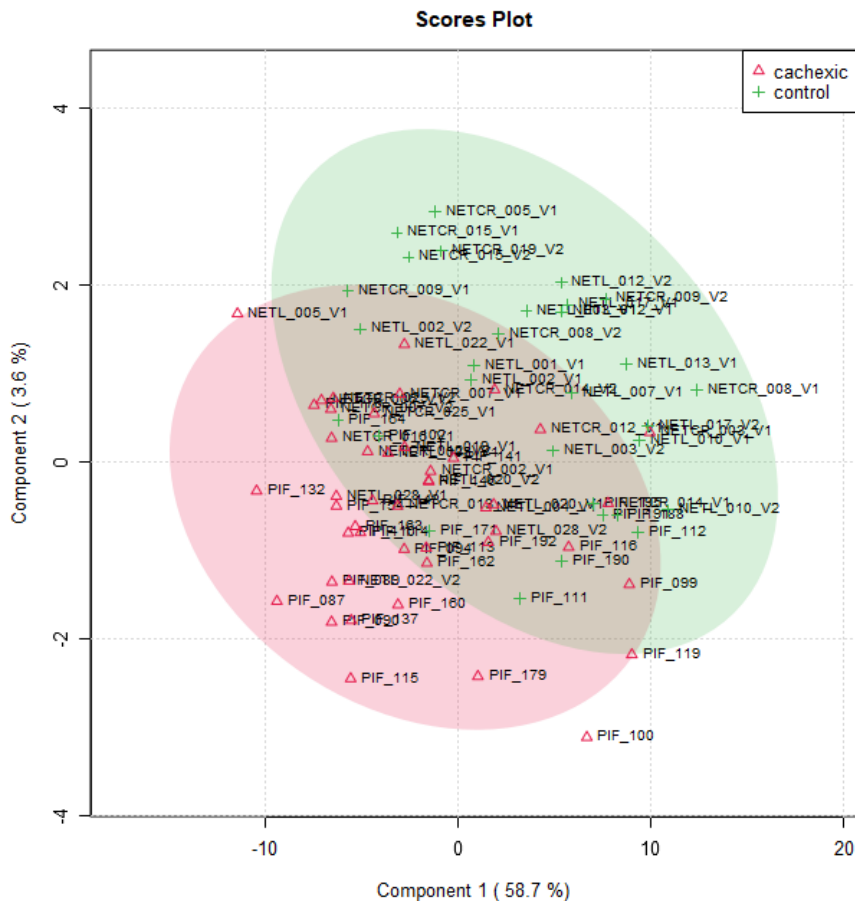




# 5. PLS-DA Análisis Discriminante de Mínimos Cuadrados Parciales

PLS scores plot

Permite detectar outliers visualizar los grupos

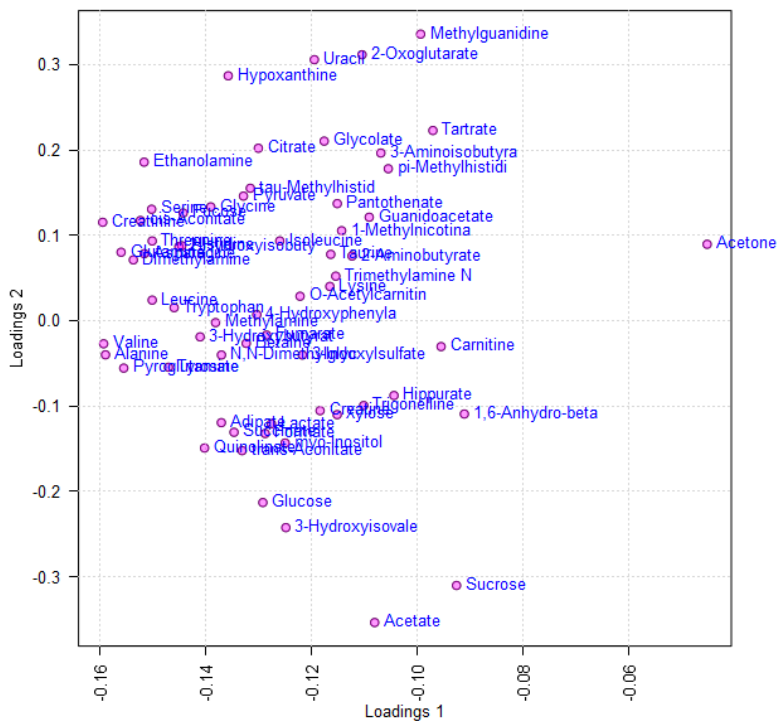


\*Esta prueba tiene su gráfico y archivo .csv de datos asociado

# 5. PLS-DA Análisis Discriminante de Mínimos Cuadrados Parciales

## PLS loadings plot

Permite visualizar el peso que tiene cada metabolito en cada Componente del PLS



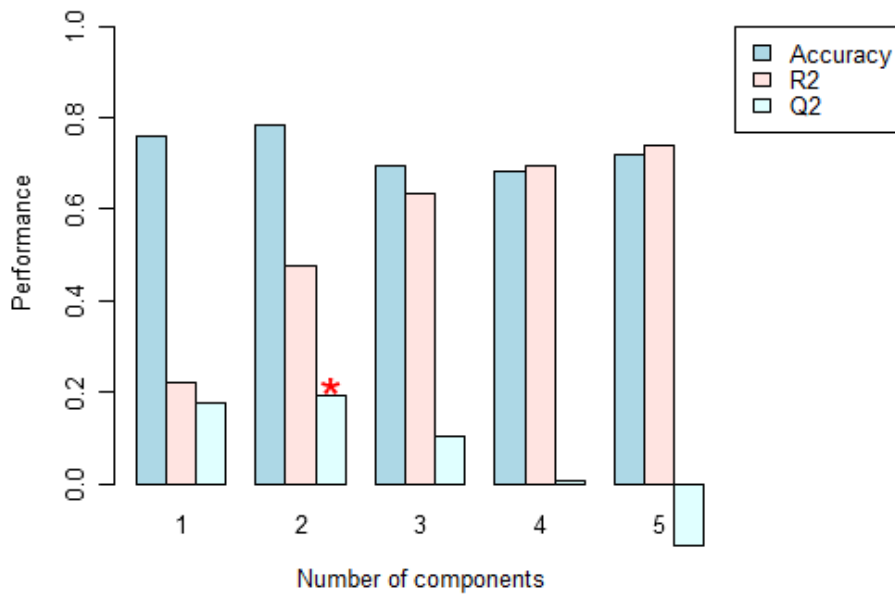
\*Esta prueba tiene su gráfico y archivo .csv de datos asociado

# 5. PLS-DA Análisis Discriminante de Mínimos Cuadrados Parciales

Prueba de Cross-validation:

Permite evaluar la precisión del modelo de PLS.

Resalta el número óptimo de componentes que maximizan la precisión,  $R^2$  (varianza explicada) y  $Q^2$  (capacidad predictiva).

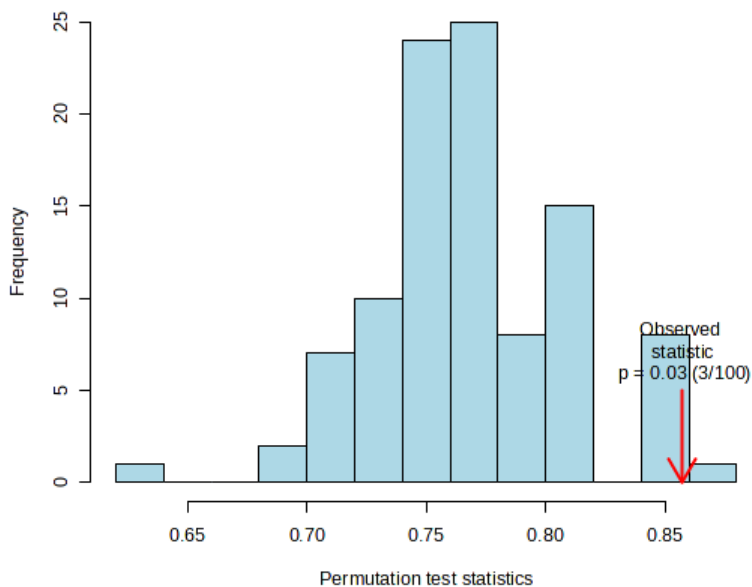


# 5. PLS-DA Análisis Discriminante de Mínimos Cuadrados Parciales

---

Prueba de Permutación:

Permite evaluar si la efectividad del modelo PLS es mejor que lo que se esperaría por azar.

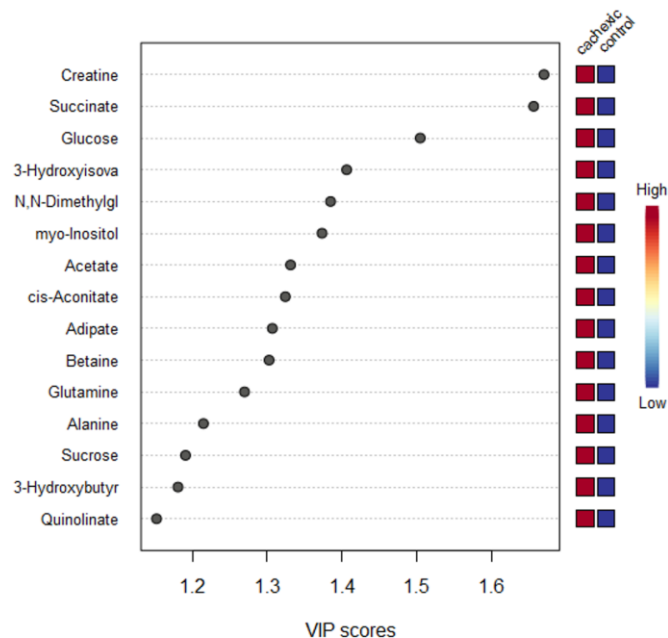


# 5. PLS-DA Análisis Discriminante de Mínimos Cuadrados Parciales

## Variable Importance in Projection (VIP) plot

Cuantifica la importancia de cada variable y permite elegir los compuestos más relevantes:

- VIP score >1: muy importantes
- VIP score < 1: menos importantes y podrían excluirse de análisis subsecuentes



\*Esta prueba tiene su gráfico y archivo .csv de datos asociado

# Costos aproximados (sujeto a cambios)

- En paquete
  - de 1 a 100 muestras – 5% del total del costo del procesamiento de muestras (considerando un costo de procesamiento de \$2000 MXN por muestra)
  - Costo a convenir según número total de muestras
- Sin paquete
  - de 1 a 100 muestras - \$200 por muestra
  - Costo a convenir según número total de muestras

# Resumen de productos a entregar

- Informe/reporte con la siguiente información:
  - Descripción del método estadístico utilizado
  - Las gráficas como se muestran en este catálogo, en el reporte y como archivos independientes .png
  - Resumen de la interpretación básica de los resultados de cada prueba realizada.
- Bases de datos en formato .csv asociadas a las pruebas y gráficos mencionadas en este catálogo

Nota: Se entregan los gráficos como los presentados en la muestra, cualquier modificación tiene costo extra

Contacto: [mcristina.carmona@cic.unam.mx](mailto:mcristina.carmona@cic.unam.mx)

Página web:

<https://sites.google.com/cic.unam.mx/unidad-de-bioestad-rai-unam/Biostatistics-RAI-UNAM?authuser=1>

