

Anna



Eu me chamo Anna Abrahão, sou doutoranda em Ecologia na Unicamp. Meu projeto se intitula “Estratégias de aquisição de nutrientes de plantas de campos rupestres de cerrado”. Minha motivação para fazer a disciplina é refazer algumas análises da dissertação de mestrado, para publicação, bem como delinear as análises do doutorado.

Meus exercícios

exec

Proposta de Trabalho Final

Plano A

Os valores de $\delta^{15}\text{N}$ (medida da razão $^{15}\text{N}/^{14}\text{N}$) são integradores do ciclo do nitrogênio. Cada etapa do ciclo de N tem um fator de discriminação, que gera uma assinatura isotópica ($\delta^{15}\text{N}$) do produto diferente da do substrato. Consequentemente, cada forma de nitrogênio no solo (amônio, nitrato, N orgânico) possui uma assinatura isotópica característica. Dessa forma, é possível estudar mecanismos de aquisição e uso de N pelas plantas a partir de isótopos estáveis de nitrogênio (^{14}N e ^{15}N). Esses valores nos tecidos vegetais dependem dos mecanismos de aquisição, translocação e perda de N, bem como da(s) fonte(s) nas quais o N é adquirido. Como para a maioria das espécies (exceto epífitas, carnívoras, e plantas com associações com organismos fixadores de N atmosférico) a maior fonte de N é o solo, a subtração do valor de $\delta^{15}\text{N}$ do solo do valor de $\delta^{15}\text{N}$ foliar de uma espécie indica muito sobre os mecanismos de aquisição e uso desse nutriente: $\Delta\delta^{15}\text{N} = \delta^{15}\text{N}_{\text{foliar}} - \delta^{15}\text{N}_{\text{solo}}$. Esse índice nos permite comparar o uso de N em de diferentes espécies em diferentes locais retirando o efeito do solo. A função que eu pretendo construir deverá me informar o $\Delta\delta^{15}\text{N}$ para cada espécie coletada, e fazer um gráfico de $\Delta\delta^{15}\text{N}$ em função do $\delta^{15}\text{N}$ do solo. Usualmente, os valores de condições do ambiente e das espécies são anotados em matrizes diferentes. O que eu tenho são os valores de $\delta^{15}\text{N}$ foliar por indivíduo em uma matriz e os valores de $\delta^{15}\text{N}$ de solo em outra matriz, ambas com uma coluna com a localidade. As entradas serão então as matrizes de (1) $\delta^{15}\text{N}$ foliar com as colunas de local, espécie, indivíduo (dentro de cada espécie) e $\delta^{15}\text{N}$ foliar; e (2) local e $\delta^{15}\text{N}$ do solo. O output será então composto por um dataframe igual ao da matriz (1) ao qual foi adicionada uma coluna com os valores de $\Delta\delta^{15}\text{N}$; por três boxplots, um de $\delta^{15}\text{N}$ foliar por local, um de $\delta^{15}\text{N}$ do solo por local e o terceiro de $\Delta\delta^{15}\text{N}$ por local; além dos gráficos de $\Delta\delta^{15}\text{N}$ em função do $\delta^{15}\text{N}$ do solo e do $\delta^{15}\text{N}$ foliar.

Plano B

A análise de compostos em UPLC-MS nos permite identificar e quantificar compostos, comparando-os com uma amostra padrão de composição e concentração conhecidas. A partir do tempo de retenção na coluna de cromatografia, é possível identificar o composto, e a área do pico no tempo de retenção

determinado é proporcional à concentração deste composto. A minha proposta é que inserindo-se dados de uma curva padrão e de áreas de pico de amostras, seja possível determinar a concentração das amostras. As matrizes de entrada serão (1) dados da curva padrão que tenham dados de concentração e tempos de retenção respectivos, e (2) Dados de área do pico. A partir dos dados da curva padrão serão calculados o intercepto e a inclinação da reta. Com esses parâmetros, serão calculadas as concentrações com base nas áreas do pico da matriz 2. É possível que sejam vários compostos, e que haja várias curvas padrão e que cada curva padrão seja usada para calcular a concentração de um composto diferente.

Comentário - Anna

Anna,

A sua proposta A, pelo que eu entendi envolve juntar duas fontes de informações que estão em arquivos diferentes, fazer uma conta de menos e voilà! E o gráfico que você quer que ele te retorne não parece ser muito informativo...

Já a sua proposta B parece bem mais desafiadora! Você pode até tentar encaixar a sua idéia de pedir pro R retornar algo gráfico nela...

Ale

Concordo com a Anna que a proposta B parece mais desafiadora, mas acho que se vc. se sente mais confortável com a proposta A, fique com ela. — [Alexandre Adalardo de Oliveira](#) 2013/03/24 11:18

Código da função (Plano B)

```
Croma<-function(dados, padrao)
{
  cat("\n \t \t \t 0 primeiro argumento é o dataframe com cada composto em
      uma coluna e com as áreas dos picos observadas nas linhas.
      0 nome de cada composto deve vir no cabeçalho de cada coluna.
      \n
      0 segundo argumento é um dataframe com as concentrações das soluções
      padrão na primeira coluna, e as áreas dos picos correspondentes a
      cada composto nas colunas seguintes \n")
  dados<-as.data.frame(dados)
  padrao<-as.data.frame(padrao)
  #Verifica se foi inserida a mesma quantidade de compostos na planilha de
  dados e na de curvas-padrão
  if(ncol(dados)!=ncol(padrao)-1)
  {
    stop("\t \t \t \n 0 numero de compostos deve ser o mesmo para o
    dataframe de dados e o das curvas-padrão", call.=FALSE)
  }
}
```

```
#Verifica de o nome dos compostos está igual nas planilhas de dados e na
de curvas-padrão
for(i in 1:ncol(dados))
{
  if(colnames(dados)[i]!=colnames(padrao)[i+1])
  {
    stop("\n A ordem e o nome dos compostos devem ser os mesmos na
planilha de dados e na de curvas-padrão")
  }
}
#Verifica, para cada composto, se há valores de áreas de pico observadas
maiores que as da planilha curvas-padrão
maior<-matrix(NA, ncol=ncol(dados), nrow=1)
colnames(maior)<-colnames(dados)
maior<-as.data.frame(maior)
for(i in 1:ncol(dados))
{
  if(max(dados[,i], na.rm=T)>max(padrao[,i+1], na.rm=T))
  {
    maior[1,i]<-TRUE
  }
  else
  {
    maior[1,i]<-FALSE
  }
}
cat("\n Cuidado, há valores de concentração maiores que o maior
valor de concentração da curva padrão nos compostos",
dimnames(maior[which(maior==TRUE)])[[2]])
#Gera matriz com intercepto, inclinação e r2 das curvas padrão de cada
composto
curvas<-matrix(NA, ncol=ncol(padrao), nrow=3)
curvas<-as.data.frame(curvas)
curvas[,1]<-c("Intercepto", "Inclinacao", "r2")
colnames(curvas)<-c("Coeficientes", colnames(dados))
for(i in 2:ncol(padrao))
{
  curvas[1,i]<-coef(lm(padrao[,i]~padrao[,1]))[[1]]#Intercepto
  curvas[2,i]<-coef(lm(padrao[,i]~padrao[,1]))[[2]]#Inclinação
  curvas[3,i]<-summary(lm(padrao[,i]~padrao[,1]))[8]#Coeficiente de
correlação
}
#Verifica se as curvas padrão tem um bom ajuste (r2>0.7)
ruim<-matrix(NA, ncol=ncol(dados), nrow=1)
colnames(ruim)<-colnames(dados)
for(i in 2:ncol(curvas))
{
  if(curvas[3,i]<0.7)
  {
    ruim[1,i-1]<-TRUE
  }
}
```

```
else
  {
    ruim[1,i-1]<-FALSE
  }
}
if(sum(ruim)>=1)
{
  ruim<-as.data.frame(ruim)
  stop("\n \n Atenção, os seguintes compostos tem curvas padrão ruins
(com r2<0.7):", dimnames(ruim[which(ruim==TRUE)])[[2]])
}
#Calcula a concentração de cada composto, com base nas curvas-padrão
concentracao<-matrix(NA, ncol=ncol(dados), nrow=nrow(dados))
concentracao<-as.data.frame(concentracao)
colnames(concentracao)<-colnames(dados)
for(i in 1:ncol(concentracao))
{
  concentracao[,i]<-(dados[,i]-curvas[1,i+1])/curvas[2,i+1]
}
cat("\n \n \n A concentração dos compostos é a seguinte: \n \n")
return(list(concentracao))
}
```

Página de ajuda

Croma{sem pacote}
Documentação do R

Descrição

Calcula concentração de compostos a partir de dados de área do pico para cromatografia, ou abosrbância para espectrofotômetro, com base em uma curva padrão.

Uso

```
Croma(dados, padrao)
```

Argumentos

dados um objeto do R, por exemplo vetor, matriz ou data frame com cada composto em uma coluna e com as áreas dos picos observadas nas linhas. O nome de cada composto deve vir no cabeçalho de cada coluna.

padrao um objeto do R, por exemplo matriz ou data frame com as concentrações das soluções padrão na primeira coluna, e as áreas dos picos correspondentes a cada composto nas colunas seguintes

Detalhes

O objeto padrão deve ser uma matriz ou um data frame com pelo menos duas colunas. A primeira coluna sempre tem as concentrações dos compostos das amostras padrão e as seguintes tem os valores lidos de áreas de pico ou de valores de absorbância.

O objeto dados possui apenas as colunas com as leituras de área de pico ou absorbância, a partir das quais serão calculadas as respectivas concentrações.

A ordem, a quantidade e grafia dos compostos deve ser a mesma no objeto dados e no objeto padrão.

A função alerta quando a curva padrão não tem um bom ajuste, com $r^2 < 0.7$, mas roda a análise.

A função alerta se há valores de leitura dos dados maiores que as leituras da curva padrão.

Valor

A função Croma retorna uma lista com um composto em cada coluna, cada leitura de concentração em uma linha e o nome do composto no cabeçalho.

Autor(es):

Anna Abrahão

Estudante de Doutorado em Ecologia. Universidade Estadual de Campinas, Campinas, Brasil.

Exemplos:

```
#Matriz de dados com NAs
matrix.na<-matrix(sample(c(rep(NA, 17), runif(483, 0, 100))), ncol=4)
colnames(matrix.na)<-c("A", "B", "C", "D")
dados<-matrix.na
```

```
#Matriz de dados sem NAs
matriz.picos<-matrix(runif(500, 0, 100), ncol=4)
colnames(matriz.picos)<-c("A", "B", "C", "D")
dados<-matriz.picos
```

```
#Matriz de padrões certinha
con<-c(seq(from=0, to=10, by=2))
matriz.padrao<-matrix(c(con, con*10, con*7, con*4, con*6), ncol=5)
colnames(matriz.padrao)<-c("Concentracao", "A", "B", "C", "D")
padrao<-matriz.padrao
```

```
Croma(matriz.picos, matriz.padrao)
Croma(matrix.na, matriz.padrao)

#Matriz de padrões esculhambada
con<-c(seq(from=0, to=10, by=2))
matriz.esc<-matrix(c(con, runif(24,0,100)), ncol=5)
colnames(matriz.esc)<-c("Concentracao", "A", "B", "C", "D")
padrao<-matriz.esc

Croma(matriz.picos, matriz.esc)
Croma(matrix.na, matriz.esc)
```

Arquivos para baixar

[Arquivo da função Documentação de ajuda](#)

From:

<http://ecor.ib.usp.br/> - **ecoR**

Permanent link:

http://ecor.ib.usp.br/doku.php?id=05_curso_antigo:r2013:alunos:trabalho_final:anna.abraham:start



Last update: **2020/08/12 06:04**