

**input**[inicial\\_dado\\_a\\_ser\\_processado.csv](#)**Funções auxiliares**[list.of.neg.r](#) [list.of.is.pos.r](#)**Help****Omics.process**

package: unknown

R documentation

**Organização e Processamento de dados de Lipidômica****Description:**

Função para organizar dados de lipidômicas de várias amostras onde é necessário normalizar os valores dos lipídios por um padrão interno e corrigido com um fator de correção. A função cria novos arquivos em .csv que contenham os valores normalizados e corrigidos, caso seja triplicata, a função irá fornecer arquivos em .csv que contém os valores das triplicas normalizados e corrigidos com média e desvio padrão por metabólito, além do arquivo que contenha os valores de médias por triplicata e um arquivo com os desvios padrões em uma nova pasta chamada "Final".

**Usage:**`omics.process(input,method,n, group,triplicate)`**Arguments:**

**input:** data frame que contenha os dados de lipidômica em três colunas: 1ª Amostra, 2ª Lipídio e 3ª valor da quantificação do lipídio.

**Method :** "pos" ou "neg", determina qual foi modo de identificação, positivo ou negativo.

**N:** número inteiro, remete ao número de amostras.

**group :** vetor contendo os nomes dos grupos de amostras, ex:

`c("controle","tratamento 1","tratamento 2")`.

**TriPLICATE:** TRUE ou FALSE, caso seja em triplicata, resultará arquivos que contenham os valores de cada réplica com média e desvio padrão por grupo. Caso não seja, resultará um arquivo único com os valores normalizados e corrigidos pelo fator de correção de cada amostra.

**Details:**

Lipídios devem conter espaço entre o nome e as cadeias, ex: PC (16:0/16:1), SM (d18:1/24:1), etc...

Tipos de ionização e forma de mostrar não deve conter "+, - ou H2O", tipos de ionização:

$[M-H] = M\ H$ ,  $[M+H] = M\ H$ ,  $[M+H_2O] = M\ W$ ,  $[M+Cl] = M\ Cl$ ,  $[M+AcO] = M\ AcO$ ,  $[M+Form] = M\ Form$ ,  $[M+NH_4] = M\ NH_4$

Padrão internos deve ter "IS" no nome, ex: "PC (17:0/17:0) IS"

Não deve conter NA no valor da terceira coluna

**Warning:**

Depende de um arquivo chamado "IS.list.csv", output da função

`List.of.IS.Pos.R` ou `List.of.IS.Neg.R`

**Author(s):**

Rodrigo Lucas de Faria  
Email: rodrigo\_faria@usp.br

#### Exemples:

```
Input <- read.csv("Inicial_dado_a_ser_processado.csv", as.is = TRUE, header = TRUE)
group.names <- c("0min", "5min", "10min", "30min", "60min", "120min", "240min")
# Nomes dos grupos de amostras
source("List.of.IS.Neg.R")
List.of.IS.Neg(input) #Escolher os padroes internos e fator de correcao para NEGATIVO
omics.process(input, n = 21, triplicate = TRUE, method = "neg", group.names = group.names)
```

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

Permanent link:  
[http://ecor.ib.usp.br/doku.php?id=05\\_curso\\_antigo:r2018:alunos:trabalho\\_final:rodrigo\\_faria:help](http://ecor.ib.usp.br/doku.php?id=05_curso_antigo:r2018:alunos:trabalho_final:rodrigo_faria:help) 

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