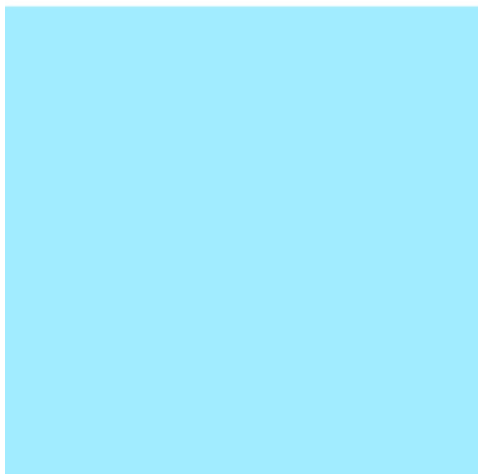


A Modular Pipeline for Metabolomic Data Preprocessing



Universitat Oberta
de Catalunya



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Eduard Pérez Méndez

Statistical Bioinformatics and
Machine Learning

Master's degree in Bioinformatics
and Biostatistics

Name of the tutor:

Alexandre Sánchez Pla

Name of the SRP:

Carles Ventura Royo

March 28, 2024



This work is under the license Attribution-NonCommercial-ShareAlike
<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/3.0>

Final Work Card

Title of the work:	A Modular Pipeline for Metabolomic Data Preprocessing
Name of the author:	Eduard Pérez Méndez
Name of the tutor:	Alexandre Sánchez Pla
Name of the SRP:	Carles Ventura Royo
Date of delivery:	March 28, 2024
Studies or Program:	Master's degree in Bioinformatics and Biostatistics
Area or the Final Work:	Statistical Bioinformatics and Machine Learning
Language of the work:	English
Keywords:	targeted metabolomics, preprocessing, pipeline

Abstract

A maximum of 250 words, detailing the purpose, context of application, methodology, results and conclusions of the work.

"BIG MOTIVATIONAL QUOTE"

AUTHOR NAME

Contents

1	Introduction	8
1.1	General description	8
1.2	Context and justification	8
1.3	State of the art	8
2	Objectives	9
2.1	Main objective	9
2.2	Specific objectives	9
3	Sustainable development goals	10
4	Approach and methodology	11
4.1	Methodology	11
4.2	Planning and calendar	11
4.3	Risk analysis	11
4.4	Final products	11
4.5	Chapters structure	11
5	Materials and methods	12
6	Results	13
7	Conclusion and future vision	14
8	Glossary	15
	Bibliography	16

List of Figures

6.1	Error en función de la distancia en unidades arbitrarias.	13
-----	---	----

List of Tables

1. Introduction

Esta plantilla se concibe como una guía para el estudiante. Se puede adaptar a las necesidades de cada trabajo, siempre que el/la tutor/a del trabajo esté de acuerdo.

1.1 General description

1.2 Context and justification

1.3 State of the art

Punto de partida del trabajo (¿Cuál es la necesidad a cubrir? ¿Por qué es un tema relevante? ¿Cómo se resuelve el problema de momento?) y aportación realizada (¿Qué resultado se quiere obtener?).

Es importante tener en cuenta que el trabajo final tiene que ser comprensible para cualquier persona que conozca el área de conocimiento, pero no tiene porque ser experta en el tema del que versa el trabajo.

2. Objectives

Listado de los objetivos del trabajo.

2.1 Main objective

2.2 Specific objectives

3. Sustainable development goals

Esta sección tendría que identificar los impactos positivos y/o negativos del trabajo final en las tres dimensiones de la competencia transversal UOC “Compromiso ético y global”.

La Guía transversal sobre la Competencia Ética y Global os ayudará a redactar estos apartados.

4. Approach and methodology

Mención de cuáles son las posibles estrategias para llevar a cabo el trabajo y cuál es la estrategia elegida (desarrollar un producto nuevo, adaptar un producto existente...). Hay que incluir una valoración de por qué esta es la estrategia más apropiada para conseguir los objetivos.

4.1 Methodology

4.2 Planning and calendar

Descripción de los recursos and necesarios para hacer el trabajo, las tareas a realizar y una planificación temporal de cada tarea mediante un diagrama de Gantt o similar. Esta planificación tendría que marcar cuáles son los hitos parciales de cada una de las PEC.

Identificación de los posibles riesgos que pueden hacer que esta planificación no se cumpla y descripción de los planes de mitigación o alternativos en caso de que estos riesgos sean un problema.

4.3 Risk analysis

4.4 Final products

No hay que entrar en detalle: la descripción detallada se hará en el resto de capítulos.

4.5 Chapters structure

Breve explicación de los contenidos de cada capítulo y su relación con el proyecto global.

5. Materials and methods

En estos apartados, hay que describir:

- Los aspectos más relevante del diseño y desarrollo del trabajo.
- La metodología elegida para hacer este desarrollo, describiendo las alternativas posibles, las decisiones tomadas, y los criterios utilizados para tomar estas decisiones.
- Los productos obtenidos.

La estructuración de los capítulos puede variar según el tipo de trabajo.

En caso de que se proceda, se incluirá un apartado de “Valoración económica del trabajo”. Este apartado indicará los gastos asociados al desarrollo y mantenimiento del trabajo, así como los beneficios económicos obtenidos y un análisis final sobre la viabilidad del producto.

6. Results

Detallad en este apartado los resultados obtenidos utilizando la metodología descrita en el apartado anterior.

Las figuras tienen que estar explicadas y citadas en el texto, como la 6.1, en la cual se muestra el error en función de la distancia, en unidades arbitrarias. En todas las gráficas tiene que haber el título de los ejes.

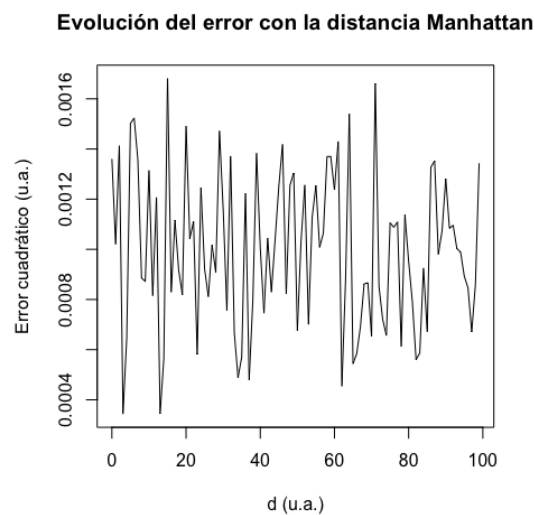


Figure 6.1: Error en función de la distancia en unidades arbitrarias.

7. Conclusion and future vision

Este capítulo tiene que incluir:

- Una descripción de las conclusiones del trabajo:
 - Una vez se han obtenido los resultados, ¿qué conclusiones se extraen?
 - ¿Estos resultados son los esperados? ¿O han sido sorprendentes? ¿Por qué?
- Una reflexión crítica sobre el logro de los objetivos planteados inicialmente:
 - ¿Hemos logrado todos los objetivos? Si la respuesta es negativa, ¿por qué motivo?
- Un análisis crítico del seguimiento de la planificación y metodología a lo largo del producto:
 - ¿Se ha seguido la planificación?
 - ¿La metodología prevista ha sido suficientemente adecuada?
 - ¿Ha habido que introducir cambios para garantizar el éxito del trabajo? ¿Por qué?
- De los impactos previstos en 3, ético-sociales, de sostenibilidad y de diversidad, evaluar/mencionar si se han mitigado (si eran negativos) o si se han conseguido (si eran positivos).
- Si han aparecido impactos no previstos a 3, evaluar/mencionar cómo se han mitigado (si eran negativos) o que han aportado (si eran positivos).
- Las líneas de trabajo futuro que no se han podido explorar en este trabajo y han quedado pendientes.

8. Glossary

Definición de los [1] términos y acrónimos más relevantes utilizados dentro de la Memoria.

Bibliography

1. Ulaszewska, M. M. *et al.* Nutrimetabolomics: An Integrative Action for Metabolomic Analyses in Human Nutritional Studies. *Molecular Nutrition & Food Research* **63**, 1800384. ISSN: 1613-4133 (2019).

Lista numerada de las referencias bibliográficas utilizadas dentro de la memoria. En cada lugar donde se utilice una referencia dentro del texto, se tiene que indicar citando el número de la referencia, por ejemplo: [7].

Es muy importante incluir todas las referencias utilizadas y citarlas apropiadamente, es decir, incluyendo toda la información necesaria para identificar la referencia. La información mínima que se tiene que incluir según el tipo de referencia es:

- Libro: Autores, Título, Edición (si procede) Editorial, Ciudad, Año.
- Artículo de revista: Autores, Título, Nombre de la Revista, Número de Página inicial y final, Número de la revista / Volumen, Año.
- Web: URL y fecha en que se ha visitado.

Información de como citar documentos: <http://biblioteca.uoc.edu/es/recursos/citacion-bibliografica>

Listado de apartados que son demasiado extensos para incluir dentro de la memoria y tienen un carácter autocontenido (por ejemplo, manuales de usuario, manuales de instalación, etc.)

Dependiendo del tipo de trabajo, es posible que no haya que añadir algún anexo.