**PROPUESTA : Preprocesado de datos en metabolómica dirigida**

Los datos de metabolómica, como los de cualquier otra ómica, deben pasar a través de una serie de transformaciones y ajustes que se denominan genéricamente "preprocesado" y cuyos objetivos son realizar un control de calidad de los datos y resolver algunos de los problemas que se puedan encontrar, intentando eliminar posibles sesgos técnicos y preparar los datos para análisis posteriores, como la búsqueda de grupos o el descubrimiento de biomarcadores.

El objetivo de este trabajo es hacer un review de los pipelines más comunes de análisis de datos de metabolómica, especialmente los basados en R/Bioconductor.

Los objetivos específicos son: (1) La elaboración de una propuesta de pipeline flexible y robusta que integre los resultados del review (2) Una implementación del pipeline resultante utilizando un sistema de creación de flujos como `targets` en R que permita crear variantes del pipeline adaptadas a distintas situaciones y (3) Una aplicación a algunos datos reales ya publicados, en donde se pueda comparar el efecto de cambios en el pipeline sobre los resultados finales.

Referencias:

* Ulaszewska MM, et alt. Nutrimetabolomics: An Integrative Action for Metabolomic Analyses in Human Nutritional Studies. Mol Nutr Food Res. 2019 Jan;63(1):e1800384. doi: 10.1002/mnfr.201800384.
* Castellano-Escuder P, González-Domínguez R, Carmona-Pontaque F, Andrés-Lacueva C, Sánchez-Pla A. POMAShiny: A user-friendly web-based workflow for metabolomics and proteomics data analysis. PLoS Comput Biol. 2021 Jul 1;17(7):e1009148. doi: 10.1371/journal.pcbi.1009148
* Kelsey Chetnik et alt maplet: an extensible R toolbox for modular and reproducible metabolomics pipelines, *Bioinformatics*, Volume 38, Issue 4, February 2022, Pages 1168–1170,<https://doi.org/10.1093/bioinformatics/btab741>

Requisitos:

Conocimientos sólidos de R y haber completado las asignaturas del máster que se puedan relacionar con el TFM como "Análisis de datos ómicos" o "Regresión, modelos y métodos".