



## SGIker Prestakuntza Eskaintza (Ikerkuntzarako Zerbitzu Orokorrak)

**Ikastaroaren izenburua: Metabolomika eta lipidomika ikastaroa. Gaixotasunak diagnostikatzeko, diagnostikatzeko eta tratatzeko tresnak (pertsonek, animaliak, landareak).**

---

<b>Data</b>	Urriak 17tik 28ra
<b>Ordutegia</b>	9:00etatik 14: 00etara eta 15:00etatik 17:00etara.
<b>Iraupena</b>	60 h
<b>Tokia</b>	Martina Casiano Plataforma Teknologikoa

### Hizlariak eta irakasleak:

**Zati 1:** Beatriz Abad García doktorea (SGIker teknikaria) eta **zati 2:** Jose Manuel Amigo doktorea (Ikerbasque).

### Ikastaroaren helburuak:

#### **Zati 2: Anlisi Instrumentala (Beatriz Abad, SGIker teknikaria) 30 h**

- 1.1. Metabolomikaren hastapenak.
- 1.2. Kromatografia likidorako sarrera.
- 1.3. Masen Espektrometriarako Sarrera Tandemen.
- 1.4. Datu metabolomikoak eta lipidomikoak prozesatzea estatistika-analisiaren aurretik.

#### **Zati 1: Anlisi Estatistikoa (Jose Manuel Amigo, Ikerbasque) 30 h**

- 2.1 Anlisi estatistiko Unibariantea.
- 2.2 Aldaera anitzeko anlisi estatistikoa.



Ikastaroaren edukiak:

---

## Teoría:

### Zati 1: Analisi Instrumentala (Beatriz Abad, SGIker teknikaria):

#### 1.1 Metabolomikarako sarrera

1. Saioa. Zer da metabolomika (Lipidomika).
2. Saioa: Diseinu esperimentalak.
3. Saioa: Lagina prestatzea.
4. Saioa: Analisia UHPLC-MS/MSn.

#### 1.2. Kromatografia likidorako sarrera

1. Saioa. Zer da kromatografia likidoa?
2. Saioa: Oinarriko terminoak eta kontzeptuak.
3. Saioa: HPLC edo UHPLC sistema baten osagaiak.
4. Saioa: Metodoak garatzea.
4. Saioa: Aholku praktikoak.

#### 1.3 Masen Espektrometriarako sarrera Tandemen.

1. Saioa. API ionizazioa. Oinarriak.
2. Saioa. Hardware eta eragiketa-printzipioak. QqQ, Q-TOF eta Q-Orbitrap analizatzaileak.
3. Saioa. Tuning.
4. Saioa. Metodoak garatzea.
5. Saioa. Egiturazko interpretazioa.

#### 1.4 Datu metabolomikoak eta lipidomikoak prozesatzea estatistika-analisiaren aurretik.

1. Saioa. Datu-matrizeak sortzea. Seinaleak detektatzea (peak picking), datuak lerrokatzea eta normalizatzea.
2. Saioa. Metabolitoak identifikatzea eta kuantifikatzea.
3. Saioa. Positibo faltsuak kentzea. Ezabatzeko irizpideak.

### Zati 2 : Analisi Estatistikoa (Jose Manuel Amigo, Ikerbasque)

#### 2.1 Unibariante analisi estatistikoa 0.5

1. Saioa-testa.
2. Saioa. Anova.
3. Saioa. Volcano plot.

#### 2.2 Aldaera anitzeko analisi estatistikoa.

##### 2.2.1 Data Mining. Datuak gainbegiratu gabe aztertzea 2.

4. Saioa. Machine Learning eta Data Mining-erako sarrera. Zure datuen egitura.
5. Saioa. Miaketa-analisi. Osagai nagusien analisia (APA).
6. Saioa. Datuak aurrez prozesatzea.
7. Saioa. ANOVA-SCA, MSCA, Multivariate-ANOVA



8. Saioa. Distantziak eta antzekotasuna. Clustering. Dendrogramak. K-Means.

### 2.2.2 Machine Learning. Nola egin Learning en la Machine 2.

9. Saioa. Aldagai anitzeko erregresioa: MLR, PCR, PLS.

10. Saioa. Sailkapena. K-Nearest Neighbor (KNN).

11. Saioa. Sailkapena. Single class modelling. SIMCA.

12. Saioa. Sailkapena. Linear and quadratic discriminant analysis (LDA/QDA).

13. Saioa. Sailkapena. Partial least square discriminant analysis (PLS-DA) eta O  
Ó.

### 2.2.3 Eredua lerrokatu gabe. Deep Learning. 0.5 egun.

14. Saioa. Support Vector Machines.

15. Saioa. Random Forest.

16. Saioa. ANN eta Deep Learning-i buruzko sarrera laburra.

### Laborategian frogapen praktikoak:

**1. Praktika:** Metabolomika gidatua. Plasman ezagutzen diren identitateko bi metabolito detektatzeko eta kuantifikatzeko screening metodo bat garatzea.

**2. Praktika:** Lipidomika ez-zuzendua. Arratoi-garunaren aterakinen profil lipidomikoa identifikatzea eta kuantifikatzea eta datu-matrizea sortzea

### Parte hartzailearen profila:

---

Ikastaro hau gradu, graduondoko eta ikertzaileentzat da (unibertsitateko, beste unibertsitate batzuetako, zentro teknologikoetako eta industriako langileak), sistema biologikoetan lipidoak eta metabolomikoak aztertzeke masa-espektrometrian oinarritutako estrategia analitiko modernoak ezagutu nahi dituztenentzat eta datuen tratamendu estatistikorako tresna analitiko modernoei buruzko informazio gehiago biltzeko prest daudenentzat. 10 eguneko ikastaroa da, eta hainbat masa-espektrometrotan (MS eta LC-MS) lan praktikoak egingo dira, ondoren datuen analisi estatistikoko unibariantea eta aldagai anitzekoa egingo da eta masa-espektroak interpretatuko dira.

### Parte hartzaile kopurua (gutxienezkoa/gehienezkoa):

---

10/20



### Kontaktua

- Beatriz Abad doktorea
- Analisirako Zerbitzu Zentrala
- Zientzia eta Teknologia Fakultatea, Euskal Herriko Unibertsitatea
- Sarriena Auzoa, z/g, Leioa, 48940
- Tfno.: 94 601 3197
- [beatriz.abad@ehu.eus](mailto:beatriz.abad@ehu.eus)

### ZERBITZUA:

- [Analisirako Zerbitzu Zentrala](#)

### Prezioa

- UPV/EHUkoek:  
400 € (Zati 1, 200 € / Zati 2, 200 €)
- IEPkoek:  
600 € (Zati 1, 300 € / Zati 2, 200 €)
- Kanpokoek:  
1000 € (Zati 1, 500 € / Zati 2, 500 €)

## Informazio gehigarria:

- Ikastaroa % 50 teorikoa eta % 50 praktikoa izango da.
- Ikastaroa gaztelaniaz ematen da.
- Praktikak egiteko beharrezko segurtasun-neurriak hartuko dira beti.
- Bertaratze-ziurtagiria emango da. Ikastaroan parte hartzen dutenek ziurtagiri hori jasoko dute, baldin eta gutxienez ikastaroaren iraupenaren % 80 bete badute.
- Hautatzeko irizpidea:
  - Eskabideen sarrera-hurrenkeraren arabera.
  - Bizkaiko Anlisi Zerbitzu Nagusiko Metabolomika eta Lipidomika Unitateko erabiltzaileen inskripzioak lehenestea.
  - Plaza nahikorik ez badago, ikerketa-talde bakoitzeko pertsona bakarra joan daiteke.
- Ikastaroko 1. edo 2. blokeraren edo bietara bakarrik joan zaitezke. **Zerbitzuaren Lipidomika eta Metabolomika Unitateko erabiltzaileek ez dute aukera hori izango, eta bi blokeetara joan beharko dute.** Ikerkuntzarako Zerbitzu Orokorretako teknikariak harremanetan jarriko dira izena eman duten pertsonekin, zer eduki-multzotara joango diren zehazteko.



## Oferta formativa SGIker (Servicios Generales de Investigación)

---

Título del curso: **Curso de metabolómica y lipidómica. Herramientas para el diagnóstico, pronóstico y tratamiento de enfermedades (personas, animales, plantas).**

---

<b>Fechas</b>	17 al 28 Octubre
<b>Horario</b>	9:00 a 14:00 h y de 15:00 a 17:00 h.
<b>Duración</b>	60 h
<b>Lugar</b>	Plataforma Tecnológica Martina Casiano

Ponentes y formadores: Dra. Beatriz Abad y Dr. Jose Manuel Amigo

---

**Bloque 1.** Dra. Beatriz Abad García (Técnico SGIker) y **Bloque 2.** Dr. Jose Manuel Amigo (Ikerbasque)

Objetivos que se pretenden alcanzar en el curso:

---

### **Bloque 1: Análisis Instrumental (Beatriz Abad, Técnico SGIker) 30 h.**

- 1.1. Introducción a la metabolómica
- 1.2. Introducción a la Cromatografía Líquida
- 1.3. Introducción a Espectrometría de Masas en Tandem:
- 1.4. Procesamiento de datos metabolómicos y lipidómicos previo al análisis estadístico.

### **Bloque 2: Análisis Estadístico (Jose Manuel Amigo, Ikerbasque) 30 h.**

- 2.1 Análisis estadístico Univariante.
- 2.2 Análisis estadístico Multivariante.



## Contenidos que se van a trabajar durante el curso:

---

### Teoría:

#### **Bloque 1: Análisis Instrumental (Beatriz Abad, Tecnico SGiker)**

##### **1.1 Introducción a la metabolómica**

Sesión 1. Qué es la metabolómica (Lipidómica)

Sesión 2: Diseño experimental.

Sesión 3: Preparación de la muestra.

Sesión 4: Analisis en UHPLC-MS/MS.

##### **1.2. Introducción a la Cromatografía Líquida.**

Sesión 1. Qué es la cromatografía líquida.

Sesión 2: Términos básicos y conceptos.

Sesión 3: Componentes de un sistema HPLC u UHPLC.

Sesión 4: Desarrollo de métodos.

Sesión 4: Consejos de tipo practico.

##### **1.3 Introducción a Espectrometría de Masas en Tandem.**

Sesión 1. Ionización API. Fundamentos.

Sesión 2. Hardward y principios de operación. Analizadores QqQ, Q-TOF y Q-Orbitrap.

Sesión 3. Tuning.

Sesión 4. Desarrollo de métodos.

Sesión 5. Interpretación estructural.

##### **1.4 Procesamiento de datos metabolómicos y lipidómicos previo al análisis estadístico.**

Sesión 1. Generación de matrices de datos. Detección de señales (peak picking), alineamientos de datos y normalización.

Sesión 2. Identificación y cuantificación de metabolitos.

Sesión 3. Eliminación de falsos positivos. Criterios de eliminación.

#### **Bloque 2: Análisis Estadístico (Jose Manuel Amigo, Ikerbasque)**

##### **2.1 Analisis estadístico Univariante 0.5**

Sesión 1. t-test.

Sesión 2. ANOVA.

Sesión 3. Volcano plot.

##### **2.2 Analisis estadístico Multivariante.**



### 2.2.1 Data Mining. Exploración no supervisada de datos 2.

Sesión 4. Introducción al Machine Learning y el Data Mining. Estructura de tus datos.  
Sesión 5. Análisis exploratorio. Análisis de componentes principales (PCA).  
Sesión 6. Preprocesado de datos.  
Sesión 7. ANOVA-SCA, MSCA, Multivariate-ANOVA  
Sesión 8. Distancias y similaridad. Clustering. Dendrogramas. K-Means.

### 2.2.2 Machine Learning. Cómo hacer el Learning en la Machine 2.

Sesión 9. Regresión Multivariante: MLR, PCR, PLS.  
Sesión 10. Clasificación. k-Nearest Neighbor (KNN).  
Sesión 11. Clasificación. Single class modelling. SIMCA.  
Sesión 12. Clasificación. Linear and quadratic discriminant analysis (LDA/QDA).  
Sesión 13. Clasificación. Partial least square discriminant analysis (PLS-DA) y O

Ó.

### 2.2.3 Non-linear Modelling. Deep Learning. 0.5 día

Sesión 14. Support vector Machines.  
Sesión 15. Random Forest.  
Sesión 16. Breve introducción a ANN y Deep Learning.

### Prácticas en el laboratorio:

**Práctica 1:** Metabolómica dirigida. Desarrollo de un método de screening para la detección y cuantificación de dos metabolitos de identidad conocida en plasma.

**Práctica 2:** Lipidómica no dirigida. Identificación y cuantificación del perfil lipidómico de extractos de cerebro de rata y generación de matriz de datos.

### Perfil del participante:

---

Este curso está dirigido a estudiantes de grado, postgrado e investigadores (personal de la universidad, otras universidades, centros tecnológicos e industria) que deseen conocer las modernas estrategias analíticas basadas en la espectrometría de masas para el análisis de lípidos y metabolómicos en sistemas biológicos, y que estén dispuestos a recabar más información sobre las modernas herramientas analíticas y de tratamiento estadístico de datos. Se trata de un curso de 10 días que incluye trabajos prácticos en diferentes espectrómetros de masas (MS y LC-MS), posterior análisis estadístico univariante y multivariante de datos e interpretación de espectros de masas.



Número de participantes (mínimo/máximo):

10/20

#### Datos de contacto

Dra. Beatriz Abad García  
Servicio Central de Análisis  
Facultad de Ciencia y Tecnología  
Universidad del País  
Vasco/Euskal Herriko  
Unibertsitatea  
Bº Sarriena s/n, leioa, 48940  
Tfno.:94 601 3197  
[beatriz.abad@ehu.es](mailto:beatriz.abad@ehu.es)

SERVICIO:  
Servicio Central de Análisis  
(Unidad de Lipidómica y  
Metabolómica)

#### Precio

- Usuarios de la UPV/EHU:  
400 € (200 €, bloque 1 / 200€, bloque2)
- Usuarios de Organismos Públicos de Investigación:  
600 € (300€, bloque 1/ 300€, bloque 2)
- Usuarios externos:  
1000 € (500 €, bloque 1 / 500 €, bloque 2)

Otra información adicional:

- El curso será 50 % teórico y 50% práctico.
- El curso se imparte en castellano.
- Se seguirán en todo momento las medidas de seguridad necesarias para realizar las prácticas.
- Se entregará certificado de asistencia. El alumnado asistente al curso recibirá dicho certificado siempre y cuando hayan completado al menos el 80 % de duración del total del mismo.
- Criterio de selección:
  - Preferencia de las inscripciones de las personas usuarias de la Unidad de Metabolómica y Lipidómica del Servicio Central de Análisis de Bizkaia
  - Si no hay suficientes plazas, sólo se permite la asistencia de una persona por grupo de investigación.
- Se podrá solicitar la inscripción a la 1ª o 2ª parte del curso o a ambas partes. **Las personas usuarias de la Unidad de Lipidómica y Metabolómica no tendrán esta opción y deberán apuntarse a ambas partes.** El personal técnico de los SGIker se pondrá en contacto con las personas inscritas para concretar a qué bloque de contenidos asistirán.





## SGIker training courses offered (Advanced Research Facilities)

---

Course title: **Metabolomics and lipidomics course. Tools for the diagnosis, prognosis and treatment of diseases (people, animals, plants).**

---

---

<b>Dates</b>	From October 17 to 28, 2022
<b>Hour</b>	9:00 a.m. to 2:00 p.m. and from 3:00 p.m. to 5:00 p.m.
<b>Duration</b>	60 hours.
<b>Course venue</b>	Martina Casiano Technology Platform

Speakers and trainers:

**Block 1:** Dr. Beatriz Abad García (SGIker Technician) and **Block 2:** Dr. Jose Manuel Amigo (Ikerbasque).

Objectives to be fulfilled during the course:

---

### **Block 1: Instrumental Analysis (Beatriz Abad, SGIker Technician) 30 h.**

- 1.1. Introduction to metabolomics.
- 1.2. Introduction to Liquid Chromatography.
- 1.3. Introduction to Tandem Mass Spectrometry.
- 1.4. Metabolomic and lipidomic data processing prior to statistical analysis.

### **Block 2: Statistical Analysis (Jose Manuel Amigo, Ikerbasque) 30 h.**

- 2.1 Univariate statistical analysis.
- 2.2 Multivariate statistical analysis.



Content that is going to be worked on during the course:

---

**Theory:**

**Block 1: Instrumental Analysis (Beatriz Abad, SGIker Technician)**

**1.1 Introduction to metabolomics**

Session 1. What is metabolomics (Lipidomics).

Session 2: Experimental design.

Session 3: Sample preparation.

Session 4: Analysis in UHPLC-MS/MS.

**1.2. Introduction to Liquid Chromatography.**

Session 1. What is liquid chromatography.

Session 2: Basic terms and concepts.

Session 3: Components of an HPLC or UHPLC system.

Session 4: Method development.

Session 4: Practical tips.

**1.3 Introduction to Tandem Mass Spectrometry.**

Session 1. Ionization API. Basics.

Session 2. Hardware and principles of operation. QqQ, Q-TOF and Q-Orbitrap analyzers.

Session 3. Tuning.

Session 4. Method development.

Session 5. Structural interpretation.

**1.5 Metabolomic and lipidomic data processing prior to statistical analysis.**

Session 1. Generation of data matrices. Signal detection (peak picking), data alignment and normalization.

Session 2. Identification and quantification of metabolites

Session 3. Elimination of false positives. Elimination criteria

**Block 2: Statistical Analysis (Jose Manuel Amigo, Ikerbasque).**

**2.1 Univariate statistical analysis 0.5**

Session 1. t-test

Session 2. ANOVA

Session 3. Volcano plot

**2.2 Multivariate statistical analysis.**

**2.2.1 Datamining. Unsupervised exploration of data 2.**

Session 4. Introduction to Machine Learning and Data Mining. Structure of your data.



Session 5. Exploratory analysis. Principal component analysis (PCA).  
Session 6. Data preprocessing.  
Session 7. ANOVA-SCA, MSCA, Multivariate-ANOVA  
Session 8. Distances and similarity. clustering. Dendrograms. K-Means.

### **2.2.2 Machine Learning. How to do the Learning in the Machine 2.**

Session 9. Multivariate Regression: MLR, PCR, PLS.  
Session 10. Classification. k-Nearest Neighbor (KNN).  
Session 11. Classification. Single-class modelling. SIMCA.  
Session 12. Classification. Linear and quadratic discriminant analysis (LDA/QDA).  
Session 13. Classification. Partial least square discriminant analysis (PLS-DA) and OR  
OR.

### **2.2.3 Nonlinear Modelling. deep learning 0.5 day**

Session 14. Support vector machines.  
Session 15. Random Forest.  
Session 16. Brief introduction to ANN and Deep Learning.

### **Practical demonstrations in the Laboratory:**

Practice 1: Targeted Metabolomics. Development of a screening method for the detection and quantification of two metabolites of known identity in plasma.  
Practice 2: Non-targeted lipidomics. Identification and quantification of the lipidomic profile of rat brain extracts and data matrix generation

### **Participant profile:**

---

This course is aimed at undergraduate and postgraduate students and researchers (university staff, other universities, technology centers and industry) who wish to learn about modern analytical strategies based on mass spectrometry for the analysis of lipids and metabolomics in biological systems, and that they are willing to seek more information on modern statistical data processing and analytical tools. It is a 10-day course that includes practical work in different mass spectrometers (MS and LC-MS), subsequent univariate and multivariate statistical analysis of data and interpretation of mass spectra.

### **Number of participants (minimum/maximum):**

---

10/20



### Contact

- Dr. Beatriz Abad.
- Central Analysis Service
- Faculty of Science and Technology, University of the Basque Country.
- B°. Sarriena s/n, Leioa, 48940
- Phone: 94 601 3197
- [beatriz.abad@ehu.eus](mailto:beatriz.abad@ehu.eus)

SERVICE:

[Central Analysis Service.](#)

### Course fee

- UPV/EHU users:  
400 € (block1, 200€ / block 2, 200€)
- PRB users:  
600 € (block 1, 300 € / block 2, 300€)
- External users:  
1000 € (block 1, 500 €/ block 2, 500 €)

### Other additional information:

- The course will be 50% theoretical and 50% practical.
- The course is taught in Spanish.
- The necessary security measures to carry out the practices will be followed at all times.
- A certificate of attendance will be delivered. The students attending the course will receive said certificate as long as they have completed at least 80% of the total duration of the course.
- Selection mode:
  - In order of entry of applications.
  - Preference of the inscriptions of the users of the Metabolomics and Lipidomics Unit of the Central Analysis Service of Bizkaia.
  - If there are not enough places, only one person per research group is allowed to attend.
- There is the possibility of requesting assistance only to block 1 or 2 of the course or both. **Users of the service's Lipidomics and Metabolomics Unit will not have this possibility and must attend both blocks.** The technical staff of the SGiker will contact the registered people to specify which content block they will attend.