



*Manuale utente
piattaforma B4PhytoWeb:
Guida all'utilizzo utente
dell'applicazione web*



1. <u>Introduzione</u>	3
2. <u>Accesso alla piattaforma</u>	4
3. <u>Gestione utenti</u>	6
4. <u>Sezione: “Home”</u>	7
<u>4.1 Risultati delle ricerche nella “Home”</u>	9
4.1.1 <u>Risultati della ricerca del metabolita singolo</u>	9
4.1.2 <u>Risultati della ricerca del metabolita associato ad una specie vegetale</u>	13
4.1.3 <u>Risultati della ricerca delle Bioattività associate ad una specie vegetale</u>	19
<u>4.2 Come effettuare una ricerca in home</u>	22
4.2.1 <u>Ricerca: “Search for species by selected metabolite”</u>	22
4.2.2 <u>Ricerca: “Search for metabolites by selected species”</u>	24
4.2.3 <u>Ricerca: “Search for metabolites by selected genus”</u>	25
4.2.4 <u>Ricerca: “Search for metabolites by selected family”</u>	26
4.2.5 <u>Ricerca: “Search for metabolites by expected m/z</u>	27
4.2.6 <u>Ricerca: “Search for metabolites by molecular formula with optional retention time (RT)”</u>	29
4.2.7 <u>Ricerca: “Search for metabolites by fragments”</u>	31
4.2.8 <u>Ricerca: “Search for bioactivities by selected species”</u>	33
5. <u>Sezione: “Insert new metabolite”</u>	34
6. <u>Sezione: “Spectrometry”</u>	35
7. <u>Sezione: “Samples”</u>	37
8. <u>Sezione: “Taxonomy”</u>	39
9. <u>Sezione: “Bioactivity”</u>	40
10. <u>Sezione: “Tables”</u>	41
11. <u>Sezione: “Bulk upload”</u>	45
12. <u>Istruzioni per l’inserimento di una nuova specie vegetale</u>	46
13. <u>Istruzioni per l’inserimento di un nuovo campione vegetale</u>	49
14. <u>Istruzioni per l’inserimento di un nuovo metabolita</u>	56
15. <u>Istruzioni per l’inserimento di nuovi dati di bioattività e biosaggi</u>	64

1. Introduzione

Benvenuto su B4PhytoWeb, la piattaforma web progettata per semplificare e potenziare la gestione dei dati chimici e biologici, con particolare attenzione alla ricerca sulla biodiversità vegetale. Questo strumento nasce per superare i limiti dei metodi tradizionali basati sull'inserimento dei dati in fogli Excel, che spesso causano ridondanze, errori e difficoltà di organizzazione. Con B4PhytoWeb i dati vengono centralizzati, strutturati e resi facilmente accessibili, offrendo un ambiente di lavoro affidabile ed efficiente.

L'obiettivo principale della piattaforma è fornire ai ricercatori un sistema completo per raccogliere, archiviare e analizzare informazioni su metaboliti e organismi vegetali. È pensata per supportare attività di ricerca avanzata, come quelle basate sulla spettrometria di massa (LC-MS), semplificando l'inserimento, la gestione e l'interpretazione dei dati.

Con B4PhytoWeb puoi organizzare in maniera standardizzata dati tassonomici e di campionamento, chimici e di bioattività, riducendo il rischio di errori e aumentando la produttività. Puoi effettuare ricerche avanzate in diversi modi: per tassonomia (famiglia, genere, specie), per bioattività, per parametri cromatografici come tempo di ritenzione (RT), o dati spettrometrici come valori di m/z (ioni molecolari e/o frammenti). Ogni metabolita è descritta in schede dettagliate che riportano formula molecolare, massa molecolare, rappresentazioni chimiche (SMILES, InChI, InChIKey), dati LC-MS in modalità ionica positiva e negativa. Sono presenti anche informazioni tassonomiche sulla specie vegetale analizzata, insieme a dati di bioattività ottenuti da saggi condotti sugli estratti della specie stessa.

L'inserimento dei dati è semplice e intuitivo: puoi aggiungere nuovi campioni, metaboliti identificati, dati di spettrometria di massa, e di bioattività, con un'interfaccia semplice che permette di lavorare per macro-argomenti. Molte informazioni possono essere compilate automaticamente da fonti scientifiche affidabili come PubChem, garantendo coerenza e validità scientifica. Inoltre, l'accesso alla piattaforma è organizzato in base a profili utente (Super User, Analyst, Guest, Visitor), che consentono di gestire i permessi in modo sicuro e personalizzato.

B4PhytoWeb è stata sviluppata per essere facile da usare e non richiede competenze di programmazione. L'interfaccia è chiara, reattiva e pensata per ridurre al minimo i tempi di apprendimento. La piattaforma si inserisce nel contesto del progetto NBFC (National Biodiversity Future Center), promosso dal Ministero dell'Università e della Ricerca, con l'obiettivo di favorire la collaborazione tra gruppi di ricerca e preservare la biodiversità attraverso l'integrazione di tecnologie avanzate.

2. Accesso alla piattaforma

La piattaforma è privata e pensata principalmente per ricercatori e studiosi.

Per accedere è necessario inviare la propria richiesta di partecipazione agli utenti amministratori, i quali provvederanno alla creazione dell'account.

Una volta creata l'utenza, il nuovo utente riceverà un'e-mail con le istruzioni per collegarsi e accedere alla piattaforma.

Per completare la registrazione, l'utente amministratore ha bisogno del nome e dell'indirizzo e-mail del nuovo utente.

Il sistema è raggiungibile al link: <https://b4web.inferendo.com/>

Nella pagina di login è necessario inserire username e password (indicato dall'utente amministratore), quindi cliccare sul pulsante "Login".

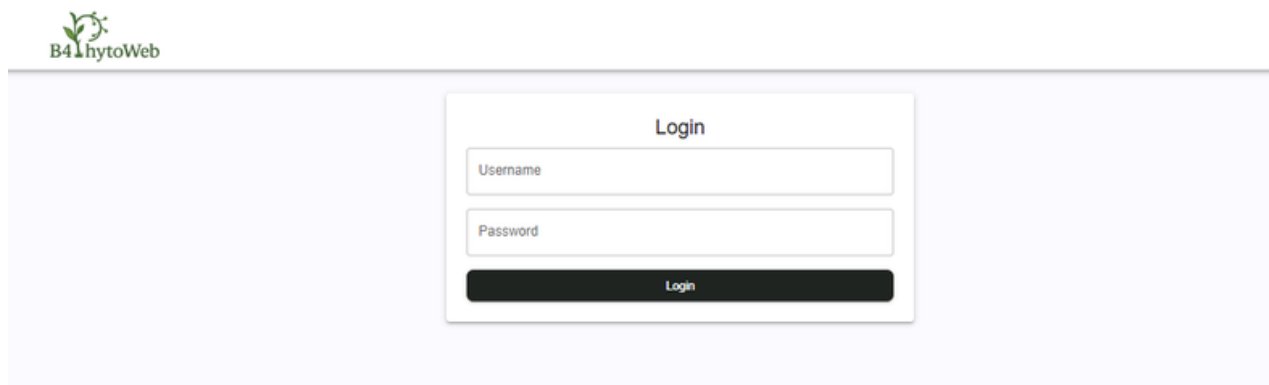
The screenshot shows the B4PhytoWeb login interface. At the top left is the logo, which consists of a green plant icon and the text "B4PhytoWeb". The main content area is a light blue rectangle containing a white box titled "Login". Inside this box, there are two input fields: "Username" and "Password". Below these fields is a black button with the word "Login" in white text.

Fig.1 Login al sistema

Dopo questa operazione, si riceverà un codice OTP via e-mail, da utilizzare per completare l'accesso. L'utente dovrà recuperare il codice OTP ricevuto via e-mail (valido per cinque minuti) e inserirlo nell'apposito campo per completare l'accesso al portale.

Ogni sessione utente ha una durata di otto ore.

Al termine, sarà necessario generare un nuovo codice OTP per accedere nuovamente al sistema.

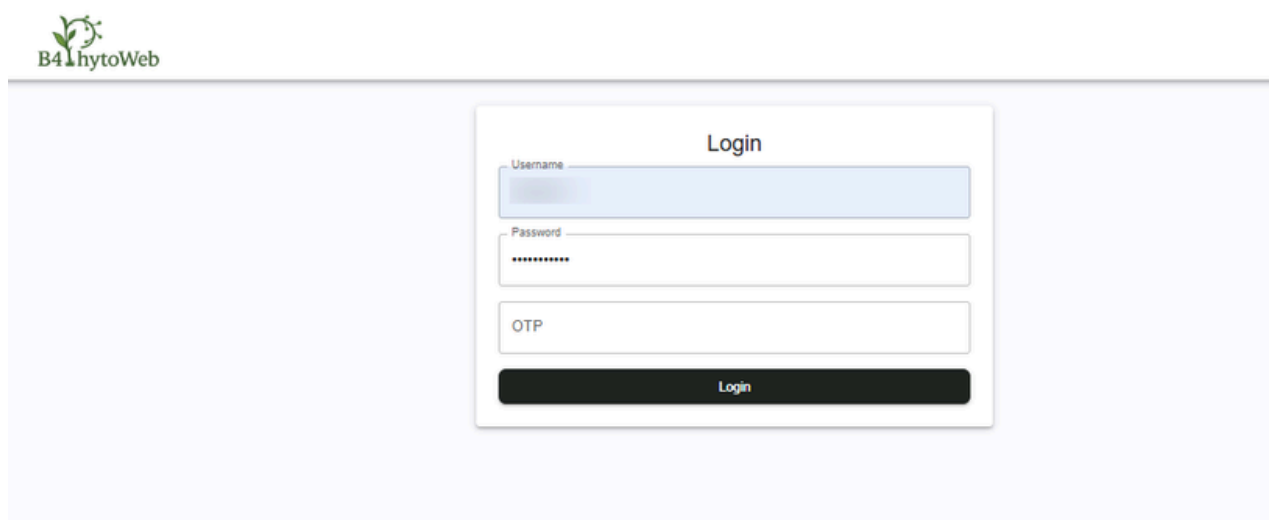
This screenshot shows the same B4PhytoWeb login interface as Figure 1, but with an additional input field. The "Username" field is now filled with a light blue background. Below the "Password" field, there is a new "OTP" input field. The "Login" button remains at the bottom of the white box.

Fig.2 Login al sistema – inserimento OTP

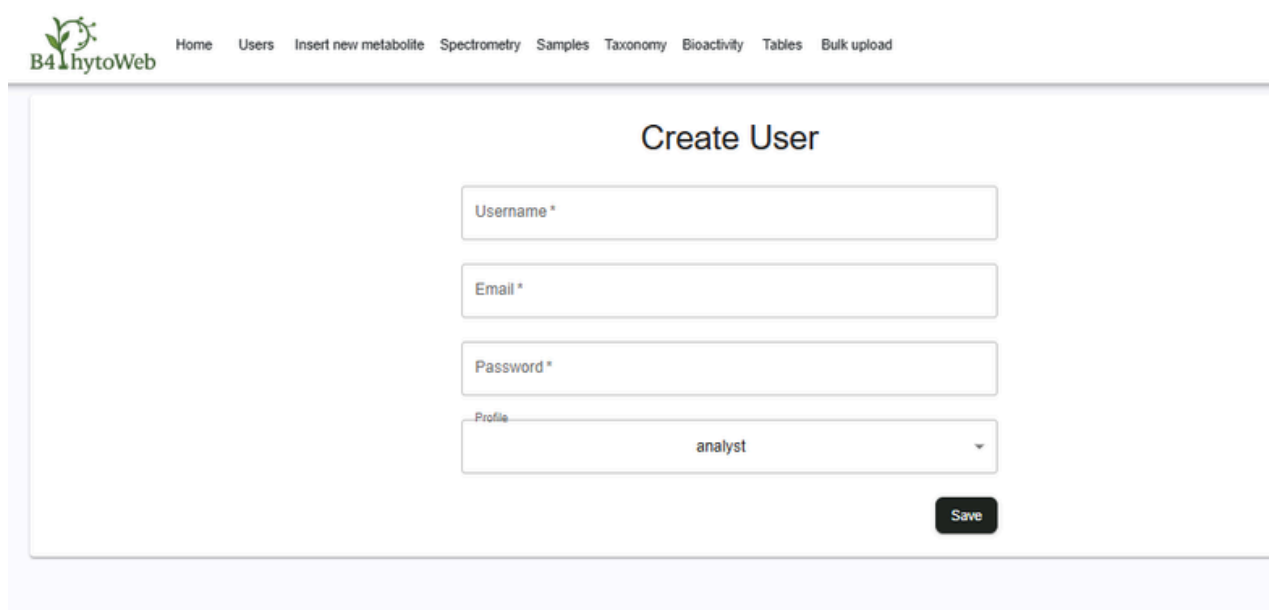
3. Gestione utenti

All'interno dell'applicazione esistono diversi profili utente, ciascuno con differenti livelli di accesso alle informazioni e alle funzionalità della piattaforma.

La creazione di un nuovo utente, e la modifica di un profilo legato ad un utente preesistente, è possibile solo all'utente con profilo "SuperUser" direttamente dalla sezione "Users".

Super User:

È l'utente con i massimi privilegi. Solo per questa tipologia di utente, la barra di navigazione presenta una sezione denominata "Users", all'interno della quale è possibile creare nuovi utenti sulla piattaforma. Durante la procedura di creazione, il Super User deve specificare: username, email, password e profilo assegnato al nuovo utente.



The screenshot shows the 'Create User' form within the B4PhytoWeb application. The navigation bar at the top includes links for Home, Users, Insert new metabolite, Spectrometry, Samples, Taxonomy, Bioactivity, Tables, and Bulk upload. The form itself is titled 'Create User' and contains the following fields:

- Username ***: A text input field.
- Email ***: A text input field.
- Password ***: A text input field.
- Profile**: A dropdown menu with 'analyst' selected.

A 'Save' button is positioned at the bottom right of the form.

Fig.3 Sezione Users – Creazione di un nuovo utente

Analyst:

Ha accesso alle seguenti funzionalità:

- Inserimento dei campioni vegetali
- Inserimento di una nuova specie
- Inserimento di metaboliti identificati
- Inserimento dei dati di spettrometria di massa
- Inserimento delle bioattività e/o dei biosaggi.

Guest:

Può accedere solo alla home e ha la possibilità di inserire nuovi metaboliti.

Visitor:

Ha accesso in sola lettura alla home, con la possibilità di effettuare ricerche, ma non può inserire o modificare dati.

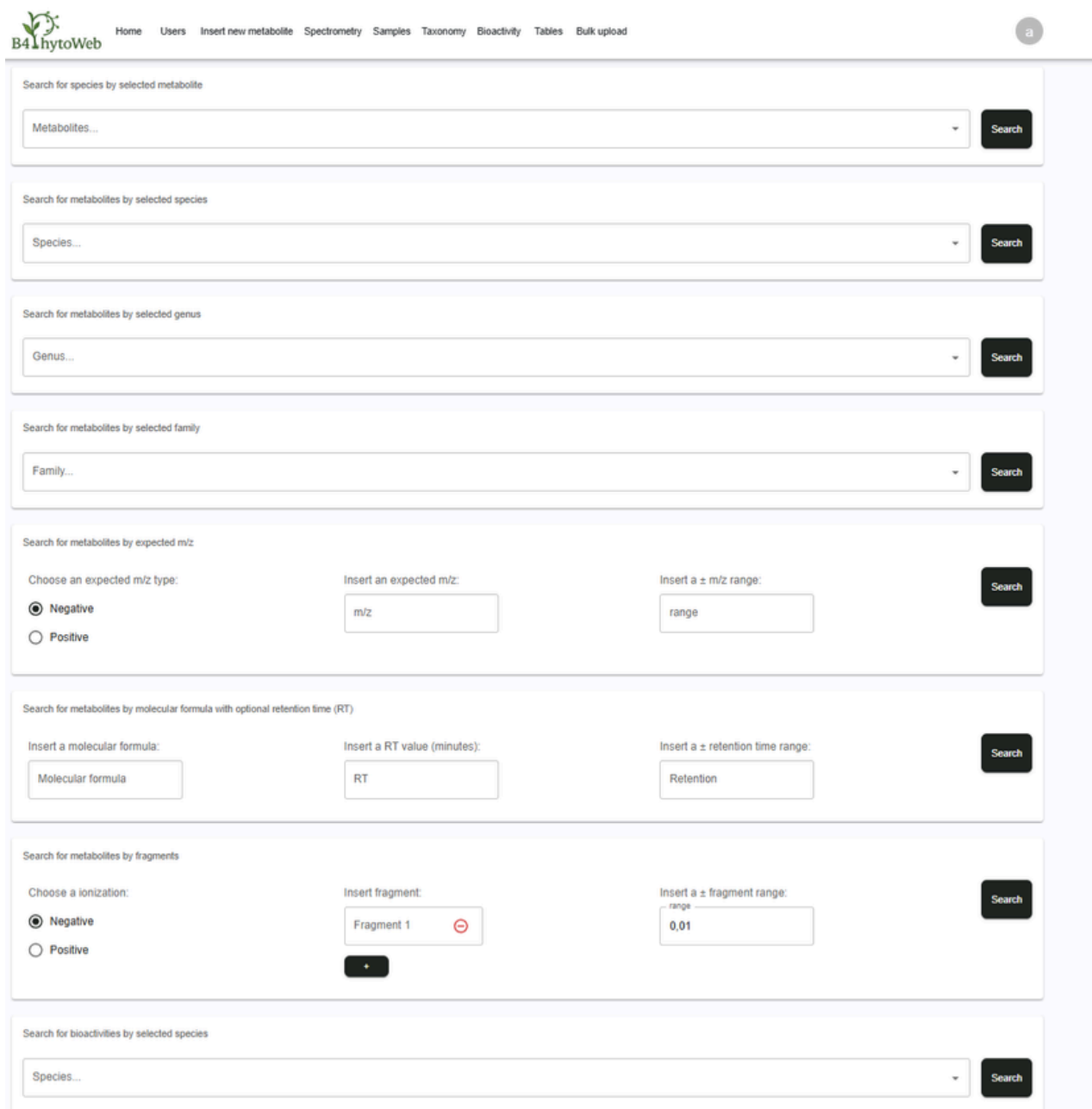
4. Sezione: “Home”

All'interno della prima pagina, denominata “Home” nella barra di navigazione, alla quale l'utente viene reindirizzato dopo il login, sono presenti dei form che consentono una ricerca avanzata dei metaboliti.

La ricerca può essere effettuata in base alla tassonomia della pianta analizzata (Famiglia, Genere, Specie), oppure utilizzando parametri LC-MS.

La funzione principale della “Home” è quella di permettere la ricerca dei metaboliti attraverso diverse modalità, in modo da accedere più velocemente possibile ai dati disponibili sulla piattaforma.

Inoltre, è presente un form dedicato alla ricerca delle bioattività, che può essere effettuata selezionando la specie vegetale di interesse.



The screenshot displays the B4PhytoWeb Home page with a navigation bar at the top containing links: Home, Users, Insert new metabolite, Spectrometry, Samples, Taxonomy, Bioactivity, Tables, and Bulk upload. A user profile icon labeled 'a' is in the top right corner.

The main content area features seven search sections, each with a title and a 'Search' button:

- Search for species by selected metabolite:** Includes a dropdown menu labeled 'Metabolites...'.
- Search for metabolites by selected species:** Includes a dropdown menu labeled 'Species...'.
- Search for metabolites by selected genus:** Includes a dropdown menu labeled 'Genus...'.
- Search for metabolites by selected family:** Includes a dropdown menu labeled 'Family...'.
- Search for metabolites by expected m/z:** Includes three input fields: 'Choose an expected m/z type:' with radio buttons for 'Negative' (selected) and 'Positive'; 'Insert an expected m/z:' with a text box containing 'm/z'; and 'Insert a ± m/z range:' with a text box containing 'range'.
- Search for metabolites by molecular formula with optional retention time (RT):** Includes three input fields: 'Insert a molecular formula:' with a text box containing 'Molecular formula'; 'Insert a RT value (minutes):' with a text box containing 'RT'; and 'Insert a ± retention time range:' with a text box containing 'Retention'.
- Search for metabolites by fragments:** Includes three input fields: 'Choose a ionization:' with radio buttons for 'Negative' (selected) and 'Positive'; 'Insert fragment:' with a text box containing 'Fragment 1' and a red minus button; and 'Insert a ± fragment range:' with a text box containing 'range' and '0,01'.
- Search for bioactivities by selected species:** Includes a dropdown menu labeled 'Species...'.

Fig.4 Sezione Home

4.1 Risultati delle ricerche nella “Home”

Come anticipato, nella sezione “Home”, l’utente può effettuare diverse tipologie di ricerca attraverso i form presenti nella pagina. Le ricerche consentono di ottenere informazioni relative ai metaboliti identificati nelle specie vegetali analizzate, nonché dati riguardanti eventuali bioattività associate.

A seconda dei form utilizzati, i risultati possono riguardare:

- il metabolita singolo,
- il metabolita associato ad una specie vegetale,
- le bioattività correlate alla specie ricercata.

Ogni tipologia di risultato rimanda a un’interfaccia dedicata, che presenta in modo dettagliato i dati pertinenti.

4.1.1 Risultati della ricerca del metabolita singolo


Selezionando il nome del metabolita, si accede ad un’interfaccia dedicata, divisa in sezioni, contenenti diverse informazioni sul composto di interesse.


Nella sezione “PubChem Metabolite Information”, si visualizzano i seguenti campi:


Campo	Descrizione
Metabolite name	Nome del metabolita
CID (Compound ID)	Identificativo PubChem
Molecular formula	Formula chimica molecolare
SMILE	Rappresentazione SMILES della struttura molecolare
InChIKey	Codice hash standardizzato per identificazione
InChI	Codifica estesa standard della struttura molecolare
Synonyms	Nomi alternativi e sinonimi del metabolita (es. Ascorbate, Ferrous Ascorbate)
Chemical class name	Classe chimica di appartenenza (es. organic acids).
Molecular weight	Peso molecolare (es. 176.12 g/mol).


Tra i campi “InChI” e “Synonyms”, è presente un’immagine bidimensionale che rappresenta la struttura chimica del metabolita, mostrando gli atomi e i legami che li connettono. Questa visualizzazione è utile per il riconoscimento immediato della molecola.


Questa sezione consente all’utente di visualizzare e, in alcuni casi, modificare le informazioni relative a un metabolita selezionato (in base ai permessi del profilo con cui si accede alla piattaforma).


 Home Users Insert new metabolite Spectrometry Samples Taxonomy Bioactivity Tables Bulk upload


 **Metabolite information**


Metabolite name
Asiatic acid 

CID (Compound ID)
119034 

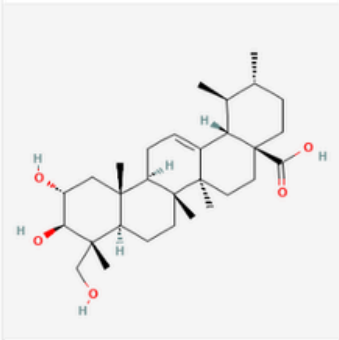
Molecular formula
C30H48O5 


SMILE
CC1CCC2(CCC3(C(=CCC4C3(CCC5C4(CC(C(C5(C)CO)O)O)C)C)C2C1C)C)C(=O)O 


InChIKey
JXSIVVRDWWRQRT-UYDOISQJSA-N 

InChI
InChI=1S/C30H48O5/c1-17-9-12-30(25(34)35)14-13-28(5)19(23(30)18(17)2)7-8-22-26(3)15-20(32)24(33)27(4,16-31)21(26)10-11-29(22,28)6/h7,17-18,20 

2D representation



Synonyms
2α,23-Dihydroxyursolic acid 

Chemical class name
triterpenes c30 


Molecular weight
488.7 

Fig.5 Sezione PubChem Taxonomy information

La sezione “LC-MS” (Liquid Chromatography-Mass Spectrometry), consente all’utente di visualizzare i dati relativi a analisi LC-MS, sia in modalità ionica negativa (sottosezione “negative”) che positiva (sottosezione “positive”).

In questa sezione sono presenti i seguenti campi:

- RT (tempo di ritenzione)
- Negative/Positive adduct (eventuali addotti carichi negativamente o positivamente che si formano in sorgente es. formiati, sodiati, clorurati etc.)
- Negative/Positive m/z (ione molecolare deprotonato/protonato)
- Negative/Positive fragments (frammenti diagnostici per l’identificazione delle biomolecole)
- UV-vis (Lunghezza d’onda UV-Vis registrata)
- Peak ID (Identificativo del picco)

LC-MS						
List of all unique negative fragments:						
NEGATIVE						
Specie	RT	Negative Adduct	Negative m/z	Negative Fragments	UV-Vis	Peak ID
Staphylea pinnata	12.392	[M+HCOO] ⁻	533.3473	487.34		
List of all unique positive fragments:						
POSITIVE						
Specie	RT	Positive Adduct	Positive m/z	Positive Fragments	UV-Vis	Peak ID
Staphylea pinnata	12.392					
MSI Level:						

Fig.5 Sezione LC-MS

4.1.2 Risultati della ricerca del metabolita associato ad una specie vegetale

Selezionando il nome della specie vegetale, si accede ad un'interfaccia dedicata, anch'essa divisa in sezioni, contenenti diverse informazioni sul composto di interesse.

La sezione "PubChem Metabolite Information", è uguale a quella descritta nel capitolo 4.1.1.

Il titolo della sezione "LC-MS" viene associato ad un numero intero progressivo, in relazione agli esperimenti LC-MS inseriti (es. "LC-MS 1", "LC-MS 2", etc.). Questa sezione contiene informazioni aggiuntive rispetto a quella descritta nel capitolo 4.1.1, di seguito riportate:

Rt (min)	Tempo di ritenzione in minuti
Analyst	Nome dell'utente che ha inserito i dati in piattaforma
Bibliography	Riferimenti bibliografici associati
Notes	Campo libero per annotazioni aggiuntive
MS Reference Data	Codice o punteggio dei dati di riferimento MS
MS Identification Level	Livello di affidabilità dell'identificazione spettrometrica

Anche in questa sezione possiamo trovare le sottosezioni “Negative” e “Positive”, relative a dati ottenuti con analisi LC-MS, in modalità ionica negativa e positiva. Queste riportano gli stessi campi descritti nel capitolo 4.1.1, con l’aggiunta del campo:

Negative/Positive ppm error

Errore in parti per milione rispetto al valore teorico

LC-MS 1

Peak ID

UV-Vis (nm)

NEGATIVE

Expected m/z	Experimental m/z	Confirming negative fragments	Negative adduct	Negative ppm error
533.3478104	533.3473	487.34	[M+HCOO]-	0.88150902624478

POSITIVE

Expected m/z	Experimental m/z	Confirming positive fragments	Positive adduct	Positive ppm error
--------------	------------------	-------------------------------	-----------------	--------------------

Rt (min)

12.392

Analyst

Cioni

Bibliography

10.3390/biom15030385

Notes

MS Reference Data

MS Identification Level

Delete experiment

Fig.6 Sezione LC-MS 1

La sezione “Taxonomy Information” riepiloga le informazioni tassonomiche della specie vegetale collegata al metabolita ricercato (Famiglia, Genere, Specie ecc.).

In questa sezione si visualizzano i seguenti campi:

Campo	Descrizione
Scientific name	Nome scientifico della specie
Common name	Nome comune della specie
Kingdom	Regno biologico di appartenenza
Superkingdom	Dominio biologico superiore (Eucarioti, Procarioti, ecc.)
Phylum	Raggruppamento tassonomico sopra la classe.
Taxonomy class	Classe tassonomica
Taxonomy Order	Ordine tassonomico
Family	Famiglia botanica di appartenenza
Genus	Genere della pianta
Species	Campo destinato alla visualizzazione della specie











Taxonomy information		
Scientific name	Staphylea pinnata	
Common name		
Kingdom	Viridiplantae	
Superkingdom	Eukaryota	
Phylum	Streptophyta	
Taxonomy class	Magnoliopsida	
Taxonomy order	Crossosomatales	
Family	Staphyleaceae	
Genus	Staphylea	
Species	pinnata	

Fig.7 Sezione Taxonomy information

La sezione “LC-MS Setting Information” consente di inserire e salvare i principali parametri strumentali utilizzati durante l’analisi LC-MS. Il titolo della sezione viene associato ad un numero intero progressivo, in relazione agli esperimenti LC-MS inseriti (es. “LC-MS Setting Information 1”, “LC-MS Setting Information 2”, etc.).

In questa sezione si visualizzano i seguenti campi:

Campo	Descrizione
Ionization Source	Sorgente di ionizzazione utilizzata (es. ESI - Electrospray Ionization)
Ionization Type	Modalità di ionizzazione: positiva o negativa
Device Model	Modello dello strumento utilizzato per l’analisi
Collision Energy (eV)	Energia applicata nella cella di collisione per frammentare gli ioni (in eV)
Capillary Voltage (kV)	Voltaggio applicato al capillare per favorire la nebulizzazione e ionizzazione
Conical Voltage (V)	Voltaggio del cono: regola la trasmissione degli ioni verso lo spettrometro

LC-MS Setting Information 1

View saved settings

Ionization Source	≡	Collision Energy (eV)	≡
Ionization Type	≡	Capillary Voltage (kV)	≡
Device Model	≡	Conical Voltage (V)	≡

Save

Delete all experiments

Fig.8 Sezione LC-MS Setting Information 1

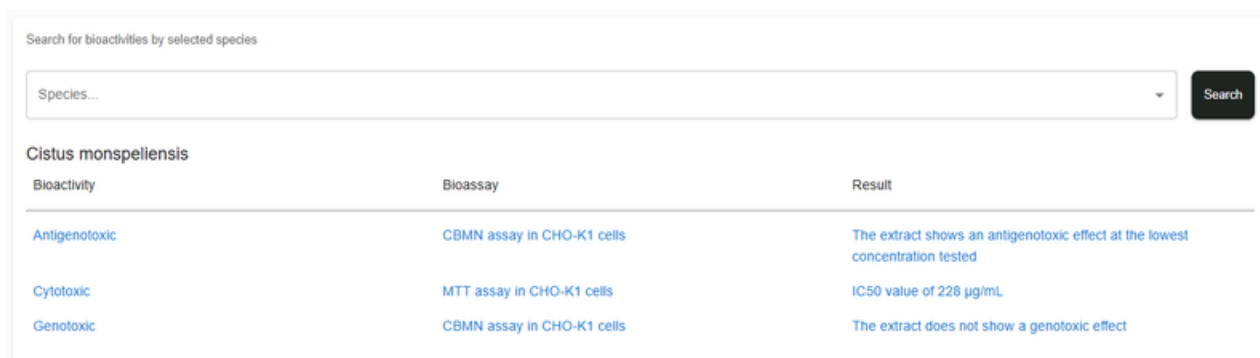
Tutte le sezioni descritte consentono all'utente di visualizzare e, in alcuni casi, modificare le informazioni relative ad un metabolita di interesse (in base ai permessi del profilo con cui si accede alla piattaforma).

4.1.3 Risultati della ricerca delle Bioattività associate ad una specie vegetale

L'ultimo form della Home, "[Search for bioactivities by selected species](#)" consente di effettuare ricerche relative alle bioattività osservate nelle specie vegetali ricercate.

Inserendo il nome di una specie, vengono mostrati:

- l'elenco delle bioattività testate su di essa,
- i biosaggi eseguiti per valutare le bioattività,
- i risultati ottenuti.



Bioactivity	Bioassay	Result
Antigenotoxic	CBMN assay in CHO-K1 cells	The extract shows an antigenotoxic effect at the lowest concentration tested
Cytotoxic	MTT assay in CHO-K1 cells	IC50 value of 228 µg/mL
Genotoxic	CBMN assay in CHO-K1 cells	The extract does not show a genotoxic effect

Fig.9 Form "[Search for bioactivities by selected species](#)"

Cliccando su una bioattività, un biosaggio o un risultato specifico, si accede ad un'interfaccia dedicata, divisa in sezioni, contenente tutti i dati aggiuntivi relativi agli esperimenti inseriti.

Nella sezione "Bioactivity", si visualizzano i seguenti campi:

Campo	Descrizione
Result	Il risultato sperimentale relativo alla bioattività testata
Bioactivity Class	Il nome della bioattività
Bioassay Class	Il nome del biosaggio utilizzato per la ricerca della bioattività
Research Group	Sigla o codice del gruppo di ricerca che ha effettuato il saggio
Note	È un campo libero, dove si trovano eventuali dettagli utili.
Bibliography	Riferimenti bibliografici associati
Analyst	Nome dell'utente che ha inserito i dati in piattaforma








Bioactivity	
Result	The extract does not show a genotoxic effect 
Bioactivity Class...	Genotoxic 
Bioassay Class...	CBMN assay in CHO-K1 cells 
Research Group...	UNIPV-CENA 
Note	
Bibliography	doi: 10.3390/ijms252413707 
Analyst	Benassi 

Fig.10 Sezione Bioactivity

La sezione “Taxonomy Information” riepiloga le informazioni di tassonomia della specie vegetale collegata alla bioattività ricercata. I campi visualizzabili in questa sezione sono simili a quelli relativi alla sezione omonima descritta nel capitolo 4.1.2, con l’aggiunta del campo “Taxonomy ID” riferito all’identificativo tassonomico univoco della specie.








Taxonomy information	
Species...	Cistus monspeliensis 
Taxonomy ID	335184 
Scientific name	Cistus monspeliensis 
Common name	Montpelier cistus; Montpellier rockrose 
Order	Malvales 
Family	Cistaceae 
Genus	Cistus 

Fig.11 Sezione Taxonomy information

La sezione “Sample and biological replicate” riporta il codice del campione vegetale utilizzato per i test di bioattività.

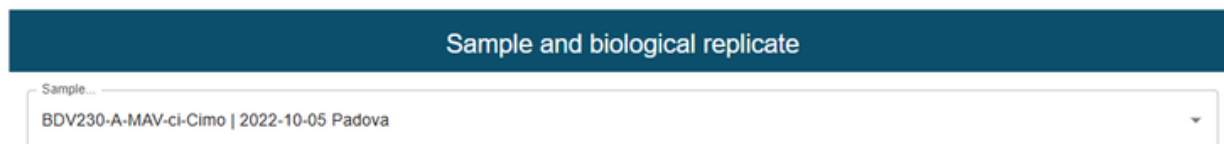


Fig.12 Sezione Sample and biological replicate

4.2 Come effettuare una ricerca in home

4.2.1 Ricerca: “Search for species by selected metabolite”

La ricerca delle specie tramite il metabolita consente di individuare tutte le specie vegetali, presenti in piattaforma, in cui quel determinato metabolita è presente.

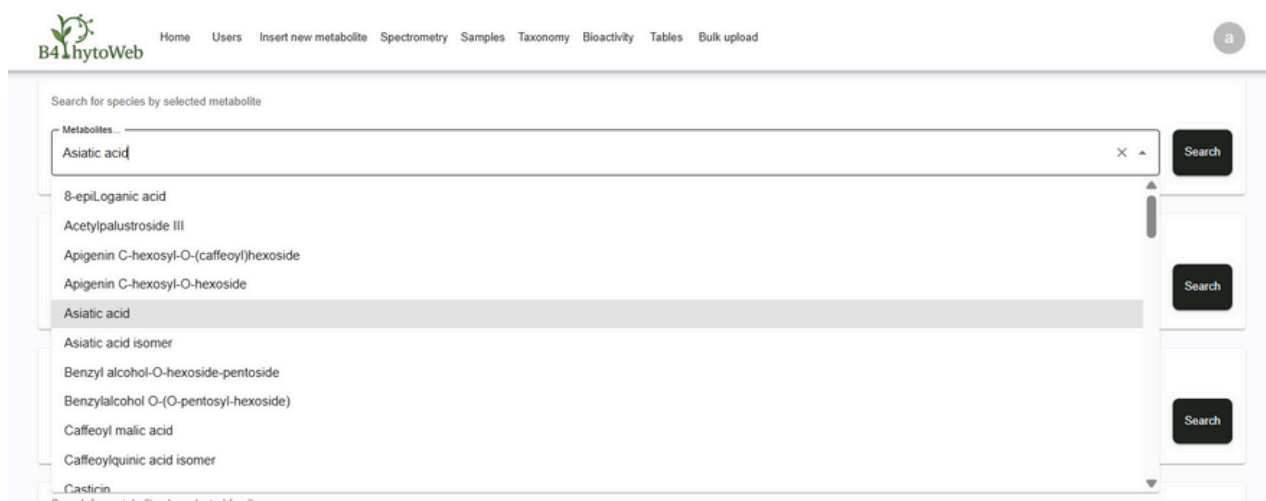
Fig. 3 Ricerca delle specie in cui è presente il metabolita



Fig. 13 Form “Search for species by selected metabolite”

Per effettuare la ricerca:

- digitare il nome del metabolita nel campo di ricerca
- attendere che il sistema suggerisca i metaboliti corrispondenti
- selezionare il metabolita di interesse dall'elenco proposto.

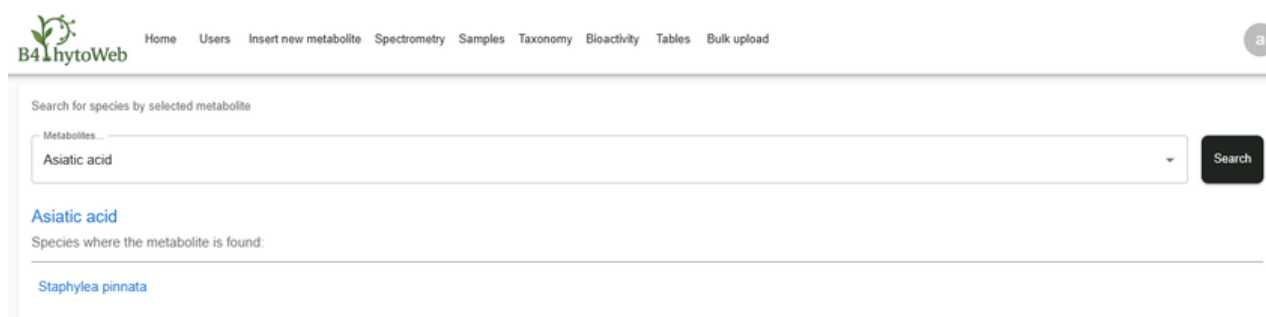


The screenshot shows the B4PhytoWeb interface. At the top, there is a navigation bar with links: Home, Users, Insert new metabolite, Spectrometry, Samples, Taxonomy, Bioactivity, Tables, and Bulk upload. Below this, a search bar is labeled "Search for species by selected metabolite". A dropdown menu titled "Metabolites" is open, showing a list of metabolites. "Asiatic acid" is selected and highlighted. To the right of the dropdown, there are three "Search" buttons. The first button is at the top, the second is in the middle, and the third is at the bottom. The list of metabolites includes: 8-epiLoganic acid, Acetylpalustroside III, Apigenin C-hexosyl-O-(caffeoyl)hexoside, Apigenin C-hexosyl-O-hexoside, Asiatic acid (highlighted), Asiatic acid isomer, Benzyl alcohol-O-hexoside-pentoside, Benzylalcohol O-(O-pentosyl-hexoside), Caffeoyl malic acid, Caffeoylquinic acid isomer, and Casticin.

Fig. 3 Form “Search for species by selected metabolite”

Una volta selezionato il metabolita, è necessario cliccare il pulsante “Search” situato sulla destra della pagina.

Il sistema restituirà l’elenco di tutte le specie in cui il metabolita selezionato è stato rilevato.



The screenshot shows the B4PhytoWeb interface after a search. The search bar is labeled "Search for species by selected metabolite". The dropdown menu titled "Metabolites" is open, showing a list of metabolites. "Asiatic acid" is selected. To the right of the dropdown, there is a "Search" button. Below the search bar, the results are displayed. The first result is "Asiatic acid" in blue text. Below it, the text "Species where the metabolite is found:" is displayed. The first result is "Staphylea pinnata" in blue text.

Fig. 3 risultato della ricerca: “Search for species by selected metabolite”

L’utente a questo punto può accedere:

- cliccando sul nome del metabolita, alle informazioni specifiche del metabolita, come descritto nel Capitolo 4.1.1
- cliccando sul nome della specie vegetale, alle informazioni relative al metabolita e alla specie in cui esso è presente, come illustrato nel Capitolo 4.1.2

4.2.2 Ricerca: “Search for metabolites by selected species”

All'interno del form numero due: “Search for metabolites by selected species” è possibile invece effettuare una ricerca partendo da una data specie vegetale.

Per effettuare la ricerca:

- digitare il nome della specie nel campo di ricerca;
- attendere che il sistema suggerisca le specie corrispondenti;
- selezionare la specie di interesse dall'elenco proposto.

Una volta selezionata la specie, è necessario cliccare il pulsante “Search” situato sulla destra della pagina.

Metabolite	Metabolite information associated to the species
(+)-Catechin	(+)-Catechin (Cistus monspeliensis)
Casticin	Casticin (Cistus monspeliensis)
Di-hexoside	Di-hexoside (Cistus monspeliensis)
Dihydroxybenzoic acid pentoside isomer 1	Dihydroxybenzoic acid pentoside isomer 1 (Cistus monspeliensis)
Myricetin-O- hexoside isomer 3	Myricetin-O- hexoside isomer 3 (Cistus monspeliensis)
Myricetin-O-deoxyhexoside isomer 1	Myricetin-O-deoxyhexoside isomer 1 (Cistus monspeliensis)
Trihydroxy-trimethoxy-flavone isomer 2	Trihydroxy-trimethoxy-flavone isomer 2 (Cistus monspeliensis)

Fig. 3 Form “Search for metabolites by selected species”

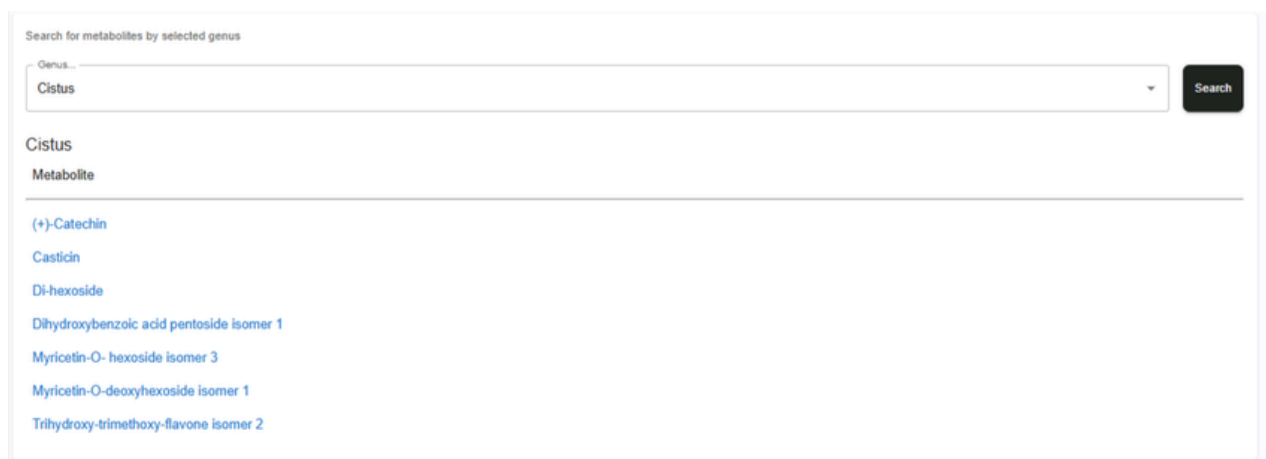
Il sistema restituirà l'elenco di tutti i metaboliti presenti in quella determinata specie.

L'utente a questo punto può accedere:

- cliccando sul nome del metabolita, alle informazioni specifiche del metabolita, come descritto nel Capitolo 4.1.1.
- cliccando sul nome del metabolita con la specie vegetale indicata in parentesi, alle informazioni relative al metabolita e alla specie in cui esso è presente, come illustrato nel Capitolo 4.1.2.

4.2.3 Ricerca: “Search for metabolites by selected genus”

All'interno del form numero tre: “Search for metabolites by selected genus” è possibile invece effettuare una ricerca partendo da un genere vegetale.



Search for metabolites by selected genus

Genus...

Cistus

Search

Cistus

Metabolite

(+)-Catechin

Casticin

Di-hexoside

Dihydroxybenzoic acid pentoside isomer 1

Myricetin-O- hexoside isomer 3

Myricetin-O-deoxyhexoside isomer 1

Trihydroxy-trimethoxy-flavone isomer 2

Fig. 14 Form “Search for metabolites by selected genus”

Per effettuare la ricerca:

- digitare il nome del genere nel campo di ricerca
- attendere che il sistema suggerisca i generi corrispondenti
- selezionare il genere di interesse dall'elenco proposto

Una volta selezionato il genere, è necessario cliccare il pulsante “Search” situato sulla destra della pagina.

Il sistema restituirà l'elenco di tutti i metaboliti presenti in quel determinato genere.

L'utente a questo punto può accedere, cliccando sul nome del metabolita, alle informazioni specifiche del metabolita, come descritto nel Capitolo 4.1.1. Inoltre, nella sezione “LC-MS”, è presente l'elenco di tutte le specie vegetali, relative al genere di interesse, in cui è presente il metabolita cercato.

4.2.4 Ricerca: “Search for metabolites by selected family”

All'interno del form numero quattro: “Search for metabolites by selected family” è possibile invece effettuare una ricerca partendo da una famiglia vegetale. È utile quando si vuole ottenere una panoramica dei composti presenti in più specie appartenenti alla stessa famiglia.



Fig. 15 Form “Search for metabolites by selected family”

Per effettuare la ricerca:

- digitare il nome della famiglia nel campo di ricerca
- attendere che il sistema suggerisca le famiglie corrispondenti
- selezionare la famiglia corrispondente dall'elenco proposto

Una volta selezionata la famiglia, è necessario cliccare il pulsante “Search” situato sulla destra della pagina.

Il sistema restituirà l'elenco di tutti i metaboliti presenti in quella determinata famiglia.

L'utente a questo punto può accedere, cliccando sul nome del metabolita, alle informazioni specifiche del metabolita, come descritto nel Capitolo 4.1.1. Inoltre, nella sezione “LC-MS”, è presente l'elenco di tutte le specie vegetali, relative alla famiglia di interesse, in cui è presente il metabolita cercato.

4.2.5 Ricerca: “Search for metabolites by expected m/z ”

Il form “Search for metabolites by expected m/z ” serve a cercare metaboliti in base al rapporto massa/carica (m/z) rilevato in spettrometria di massa (MS).



Fig. 16 Form “Search for metabolites by expected m/z ”

Per effettuare una ricerca di metaboliti basata sul rapporto massa/carica (m/z), è necessario:

A) Selezionare la modalità di ionizzazione
all’inizio del form viene richiesto di specificare il tipo di ionizzazione utilizzata nell’analisi di spettrometria di massa.

Sono disponibili due opzioni:

- Negative (modalità negativa)
- Positive (modalità positiva)

Selezionare l’opzione corrispondente al metodo usato nella propria analisi.

B) Inserire il valore m/z atteso

Nel campo denominato "Insert an expected m/z " digitare il valore esatto di m/z rilevato o previsto (ad esempio: 289).

C) Definire il range di tolleranza ($\pm m/z$)

Il campo "Insert a $\pm m/z$ range" permette di specificare una tolleranza rispetto al valore m/z inserito.

Ad esempio, inserendo 1, la ricerca verrà effettuata considerando tutti i metaboliti con valori compresi tra $m/z - 1$ e $m/z + 1$.

Una volta compilati tutti i campi, è necessario cliccare il pulsante "Search" situato sulla destra della pagina.

L'utente a questo punto può accedere:

- cliccando sul nome del metabolita, alle informazioni specifiche del metabolita, come descritto nel Capitolo 4.1.1.
- cliccando sul nome della specie vegetale, alle informazioni relative al metabolita e alla specie in cui esso è presente, come illustrato nel Capitolo 4.1.2.

Search for metabolites by expected m/z

Choose an expected m/z type:

☒ Negative

☐ Positive

Insert an expected m/z:

m/z

Insert a $\pm m/z$ range:

range

For the expected -1 1 m/z value (± 1), the results are:

Metabolite Name	m/z experimental	rt (min)	Species	Fragments
acetylremulacin	1	1	Acacia saligna	1
acetylremulacin	1	1	Acacia saligna	1
ascorbic acid	2	1	Acacia saligna	2
ascorbic acid	2	1.2	Acacia saligna	2
ascorbic acid	1	1	Anacamptis sp.	1
ascorbic acid	2	2	Anacamptis sp.	2

Fig. 17 Form "Search for metabolites by expected m/z "

4.2.6 Ricerca: “Search for metabolites by molecular formula with optional retention time (RT)”

Il form “Search for metabolites by molecular formula with optional retention time (RT)” consente di cercare metaboliti a partire dalla loro formula molecolare, con la possibilità di raffinare ulteriormente la ricerca utilizzando il tempo di ritenzione (RT).

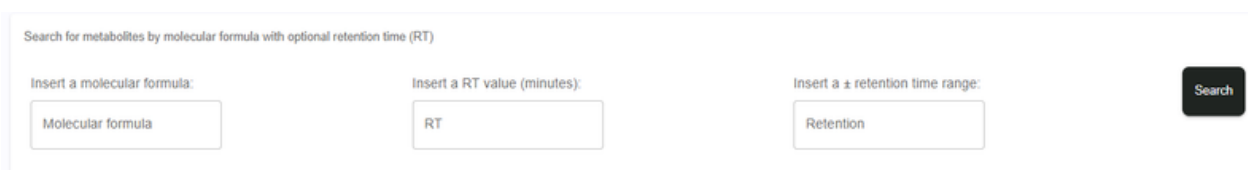


Fig. 18 Form “Search for metabolites by molecular formula with optional retention time (RT)”

Per effettuare la ricerca è necessario:

A) Inserire la formula molecolare

Nel campo “Insert a molecular formula”, digitare la formula chimica del composto di interesse, ad esempio:

C₃₀H₄₈O₅ (corrispondente a “Asiatic acid”)

B) Inserire il tempo di ritenzione (RT)

Il campo “Insert a RT value (minutes)” è opzionale, ma utile se si conosce il tempo di ritenzione in minuti.

C) Definire il range di tolleranza sul tempo di ritenzione

Nel campo “Insert a ± retention time range”, si può indicare un intervallo di tolleranza (in minuti) attorno al valore RT fornito.

Ad esempio, se è possibile inserire un RT di 12 minuti e una tolleranza di 1.

Una volta completati i campi desiderati, è necessario cliccare il pulsante “Search” situato sulla destra della pagina.

Search for metabolites by molecular formula with optional retention time (RT)

Insert a molecular formula:
Molecular formula

Insert a RT value (minutes):
RT

Insert a \pm retention time range:
Retention

For the molecular formula C30H48O5 and retention time 12 (\pm 1) minutes, the results are:

Metabolite Name	Molecular Formula	rt (min)	m/z	Species	Negative fragments	Positive fragments
Asiatic acid	C30H48O5	12.3917	533.347340...	Staphylea pinnata	487.341	
Asiatic acid isomer	C30H48O5	12.6304166...	533.347543...	Staphylea pinnata	487.341	

Fig. 19 Form “Search for metabolites by molecular formula with optional retention time (RT)”

L'utente a questo punto può accedere:

- cliccando sul nome del metabolita, alle informazioni specifiche del metabolita, come descritto nel Capitolo 4.1.1.
- cliccando sul nome della specie vegetale, alle informazioni relative al metabolita e alla specie in cui esso è presente, come illustrato nel Capitolo 4.1.2.

4.2.7 Ricerca: “Search for metabolites by fragments”

Il form “Search for metabolites by fragments” permette di cercare i metaboliti sulla base dei frammenti rilevati nella spettrometria di massa tandem (MS/MS), utile per l’identificazione strutturale delle molecole.

Metabolite Name	Fragments	Species
acetyltremulacin	1	Acacia saligna
ascorbic acid	2	Acacia saligna
ascorbic acid	1	Anacamptis sp.
ascorbic acid	2	Anacamptis sp.

Fig. 20 Form “Search for metabolites by fragments”

Per effettuare la ricerca è necessario:

A) Selezionare la modalità di ionizzazione

Come nella ricerca per m/z, è necessario specificare la modalità con cui sono stati acquisiti i dati LC-MS. Puoi scegliere tra:

- Negative (modalità negativa)
- Positive (modalità positiva)

B) Inserire i frammenti

Nel campo “Insert fragment”, puoi digitare il valore m/z del frammento osservato (es. 487).

È possibile inserire più frammenti, cliccando sul pulsante “+”.

Ogni nuovo campo ti permetterà di aggiungere un ulteriore frammento, costruendo così una ricerca più dettagliata.

Puoi rimuovere un frammento cliccando sull'icona rossa di eliminazione accanto al campo.

C) Definire il range di tolleranza

Nel campo "Insert a \pm fragment range" si può specificare la tolleranza accettata sul valore m/z del frammento.

Ad esempio, inserendo 0.01, il sistema cercherà frammenti con m/z compreso tra- 0.01 e+ 0.01, compensando eventuali imprecisioni strumentali.

Una volta completati tutti i campi, è necessario cliccare il pulsante "Search" sulla destra della pagina.

L'utente a questo punto può accedere:

- cliccando sul nome del metabolita, alle informazioni specifiche del metabolita, come descritto nel Capitolo 4.1.1.
- cliccando sul nome della specie vegetale, alle informazioni relative al metabolita e alla specie in cui esso è presente, come illustrato nel Capitolo 4.1.2.

4.2.8 Ricerca: “Search for bioactivities by selected species”

Questa funzione è particolarmente utile per studi etnobotanici, farmaceutici o nutraceutici, in cui si vuole sapere quali proprietà bioattive (antiossidanti, antimicrobiche, antinfiammatorie, ecc.) siano state documentate per una determinata pianta.

Il form “Search for bioactivities by selected species” consente di cercare le bioattività associate ad una specie vegetale.

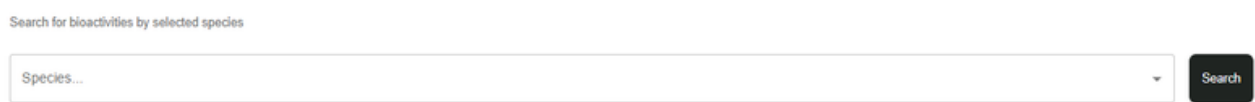


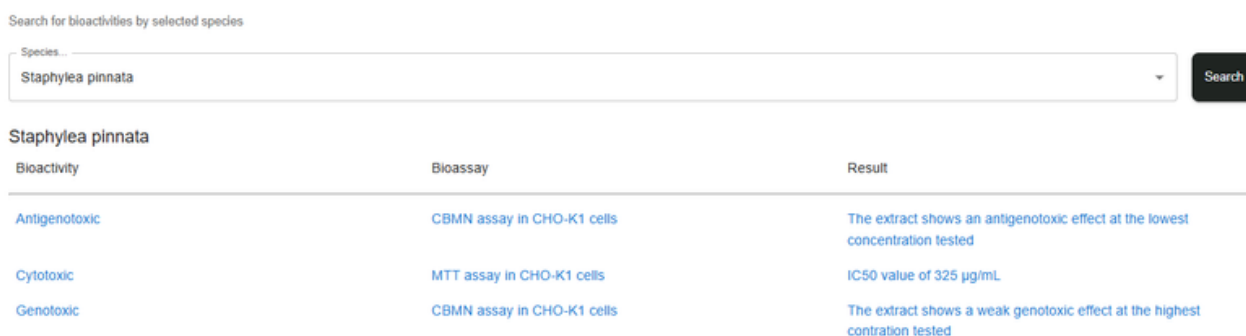
Fig. 21 Form “Search for bioactivities by selected species”

Per effettuare la ricerca è necessario:

- digitare il nome della specie nel campo di ricerca
- attendere che il sistema suggerisca le specie corrispondenti
- selezionare la specie di interesse dall'elenco proposto

Una volta selezionata la specie, è necessario cliccare il pulsante “Search” situato sulla destra della pagina.

L'utente a questo punto può accedere all'elenco delle bioattività disponibili per la specie selezionata, associate ai biosaggi e ai risultati corrispondenti.



Search for bioactivities by selected species		
Species...		
Staphylea pinnata		
Search		
Bioactivity	Bioassay	Result
Antigenotoxic	CBMN assay in CHO-K1 cells	The extract shows an antigenotoxic effect at the lowest concentration tested
Cytotoxic	MTT assay in CHO-K1 cells	IC50 value of 325 µg/mL
Genotoxic	CBMN assay in CHO-K1 cells	The extract shows a weak genotoxic effect at the highest concentration tested

Fig. 22 Form “Search for bioactivities by selected species”

Cliccando sulla bioattività di interesse, si verrà reindirizzati in una pagina contenente ulteriori informazioni riguardanti essa e riguardanti la specie vegetale, come visto nel capitolo 4.1.3.

5. Sezione: “Insert new metabolite”

Questa sezione, presente nella barra di navigazione, consente di inserire un nuovo metabolita agli utenti, in base ai permessi del profilo con cui si accede alla piattaforma.

È l'area dedicata all'aggiornamento e alla creazione di nuovi record all'interno del database del sistema B4PhytoWeb, permettendo così di ampliare i contenuti disponibili nella piattaforma.

Cliccando su questa sezione, apparirà un'interfaccia dedicata all'inserimento singolo di un nuovo metabolita, denominata “Metabolite Annotation Tool”.

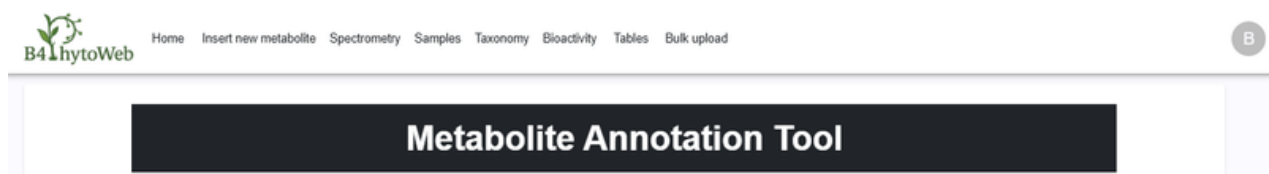
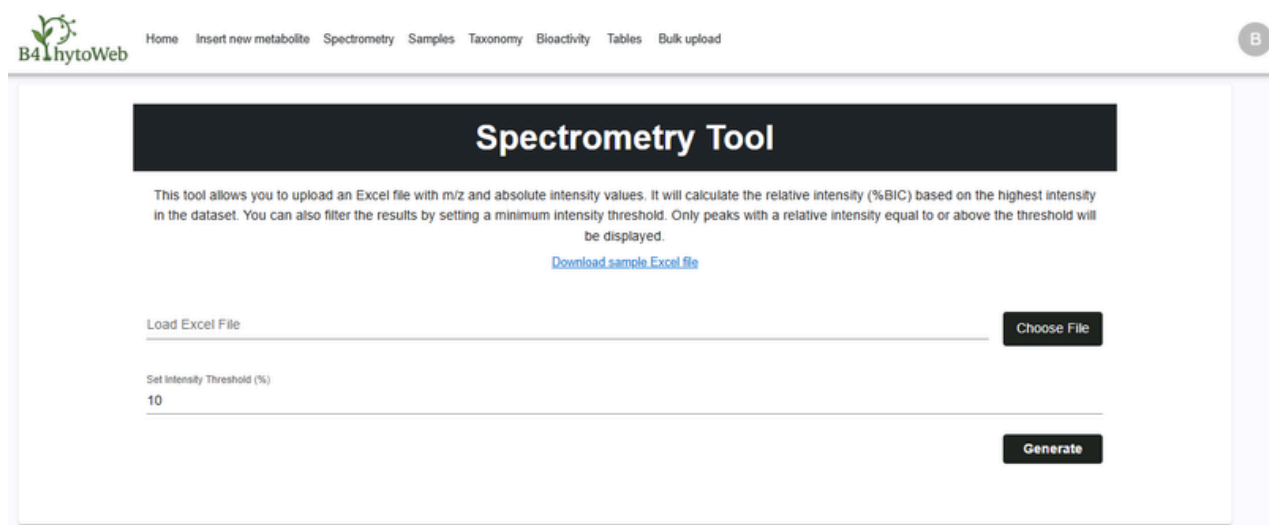


Fig.23 Pagina “Metabolite Annotation Tool”

Le istruzioni per effettuare l'inserimento singolo di un nuovo metabolita sono spiegate nel capitolo 14.

6. Sezione: “Spectrometry”

Cliccando su questa sezione, presente nella barra di navigazione, si accede ad un'area dedicata ad uno strumento, “Spectrometry Tool”, progettato per aiutare l'utente ad elaborare e filtrare dati grezzi di spettrometria di massa relativi ai valori di m/z (rapporto massa/carica) e alle intensità assolute.



The screenshot shows the B4PhytoWeb website with a navigation bar at the top containing links: Home, Insert new metabolite, Spectrometry, Samples, Taxonomy, Bioactivity, Tables, and Bulk upload. The 'Spectrometry' link is highlighted. The main content area is titled 'Spectrometry Tool' and contains the following text: 'This tool allows you to upload an Excel file with m/z and absolute intensity values. It will calculate the relative intensity (%BIC) based on the highest intensity in the dataset. You can also filter the results by setting a minimum intensity threshold. Only peaks with a relative intensity equal to or above the threshold will be displayed.' Below this text is a link: 'Download sample Excel file'. There are two input fields: 'Load Excel File' with a 'Choose File' button, and 'Set Intensity Threshold (%)' with a value of '10' and a 'Generate' button.

Fig 24. Spectrometry Tool

Il suo scopo principale è quello di normalizzare i dati di intensità e consentire un filtraggio basato sull'intensità relativa, rendendo più facile concentrarsi sui picchi più significativi.

Questo strumento consente di caricare un file Excel contenente valori di m/z e le loro corrispondenti intensità assolute.

Una volta caricato, lo strumento calcolerà l'intensità relativa (%BIC) per ciascun picco.

Questa intensità relativa è calcolata basandosi sull'intensità più alta presente nell'intero dataset.

Inoltre offre la possibilità di filtrare i risultati impostando una soglia minima di intensità, assicurandosi che vengano visualizzati solo i picchi che superano tale soglia.

Funzionalità Chiave:

- "Load Excel File" (Carica file Excel):

Accanto a questa etichetta, il pulsante "Choose File" (Scegli file) le permette di selezionare il file Excel dal suo computer. Questo file deve contenere i dati della sua spettrometria di massa, specificamente i valori di m/z e le loro intensità assoluta

- "Set Intensity Threshold (%)" (Imposta soglia di intensità (%)):

Questo campo le consente di definire una percentuale come soglia minima di intensità.

Qualsiasi picco con un'intensità relativa (calcolata come %BIC) inferiore a questa percentuale non verrà visualizzato nei risultati finali.

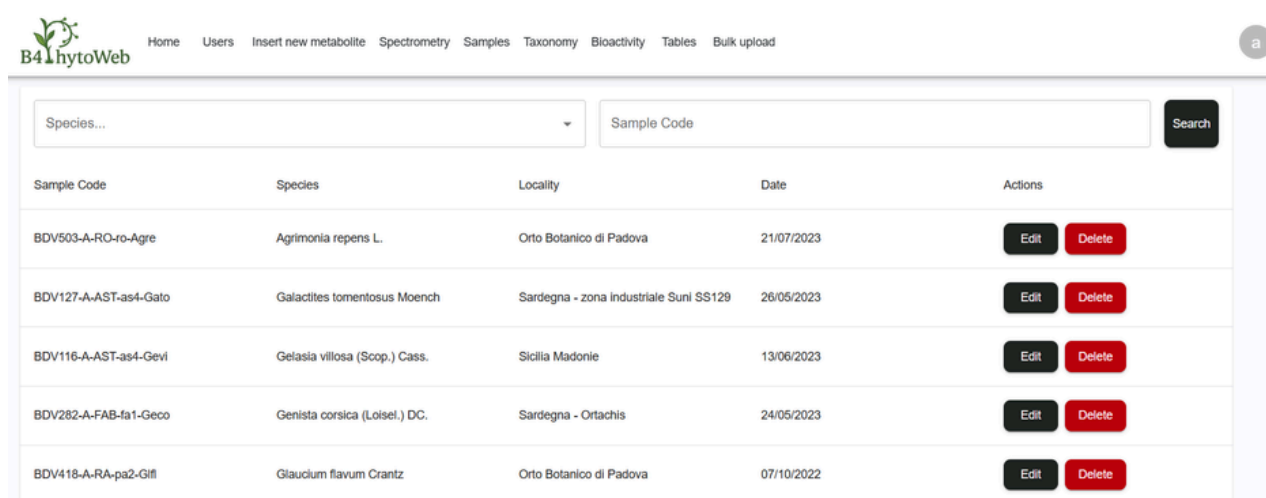
Il valore predefinito mostrato nell'immagine è 10%, il che significa che verranno considerati solo i picchi con un'intensità relativa pari o superiore al 10% dell'intensità più alta nel dataset.

L'utente ha la possibilità di esportare un file d'esempio che mostra come deve essere la struttura del file per una corretta importazione dei dati in piattaforma.

7. Sezione: “Samples”

Questa sezione, presente nella barra di navigazione, consente di visualizzare e gestire tutti i campioni di piante raccolti e registrati nel sistema B4PhytoWeb.

Ogni riga rappresenta un evento di campionamento, identificato da un codice univoco e accompagnato da informazioni fondamentali come il nome della specie raccolta, il luogo e la data.



Sample Code	Species	Locality	Date	Actions
BDV503-A-RO-ro-Agre	Agrimonia repens L.	Orto Botanico di Padova	21/07/2023	Edit Delete
BDV127-A-AST-as4-Gato	Galactites tomentosus Moench	Sardegna - zona Industriale Suni SS129	26/05/2023	Edit Delete
BDV116-A-AST-as4-Gevi	Gelasia villosa (Scop.) Cass.	Sicilia Madonie	13/06/2023	Edit Delete
BDV282-A-FAB-fa1-Geco	Genista corsica (Loisel.) DC.	Sardegna - Ortachis	24/05/2023	Edit Delete
BDV418-A-RA-pa2-Gifi	Glaucium flavum Crantz	Orto Botanico di Padova	07/10/2022	Edit Delete

Fig.25 Sezione “Sample”

Ricerca campioni

È possibile effettuare ricerche mirate utilizzando due filtri:

- Species: per cercare i campioni in base al nome della specie
- Sample Code: per cercare utilizzando Sample Code o altri dettagli inseriti nel campo note.

I risultati della ricerca per codice identificativo del campione (sample code) o per specie (Species) sono organizzati in una tabella strutturata secondo le seguenti colonne:

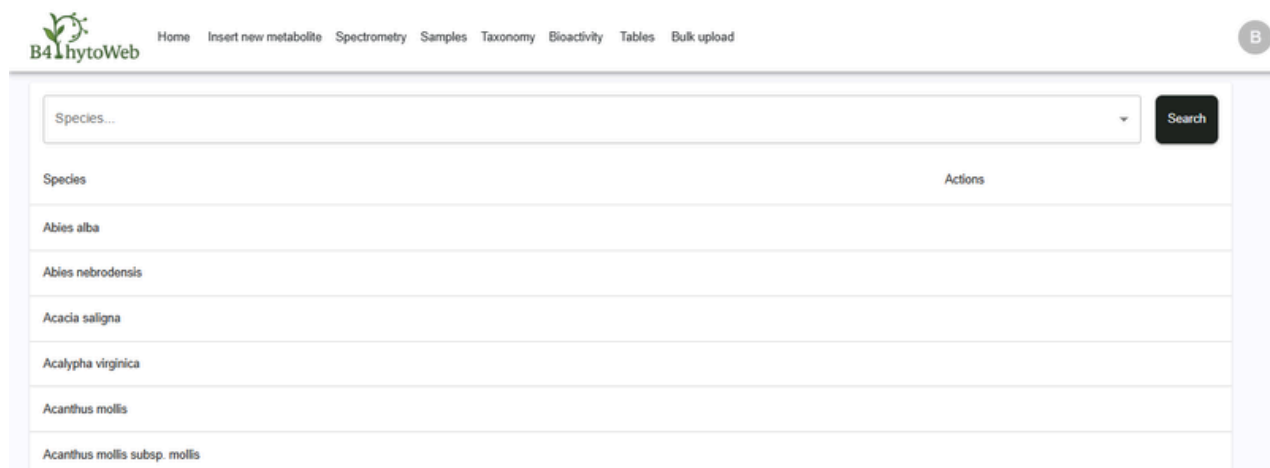
Campo	Descrizione
Sample code	Codice univoco che identifica ogni campione. Include informazioni codificate come area geografica, tipo di campione e sigla della specie.
Specie	Nome scientifico della pianta oggetto del campionamento.
Locality	Località dove il campione è stato raccolto. Può trattarsi di aree naturali o giardini botanici.
Date	Data in cui è stato effettuato il campionamento.
Actions	Due pulsanti: Edit per modificare i dati del campione e Delete per eliminarlo dal sistema.

La sezione “Samples” è indispensabile anche per effettuare l’inserimento singolo di un nuovo campione vegetale. Le istruzioni per effettuare questa operazione sono spiegate nel capitolo 13.

8. Sezione: “Taxonomy”

Questa sezione, presente nella barra di navigazione, consente di visualizzare l'elenco di tutte le specie vegetali registrate nel sistema B4PhytoWeb.

È possibile effettuare una ricerca tramite il form “Species”.



The screenshot displays the B4PhytoWeb interface. At the top, there is a navigation bar with the logo on the left and links for Home, Insert new metabolite, Spectrometry, Samples, Taxonomy, Bioactivity, Tables, and Bulk upload on the right. Below the navigation bar, there is a search bar labeled 'Species...' with a dropdown arrow and a 'Search' button. Below the search bar, there is a table with two columns: 'Species' and 'Actions'. The table contains the following entries:

Species	Actions
Abies alba	
Abies nebrodensis	
Acacia saligna	
Acalypha virginica	
Acanthus mollis	
Acanthus mollis subsp. mollis	

Fig.26 Sezione Taxonomy

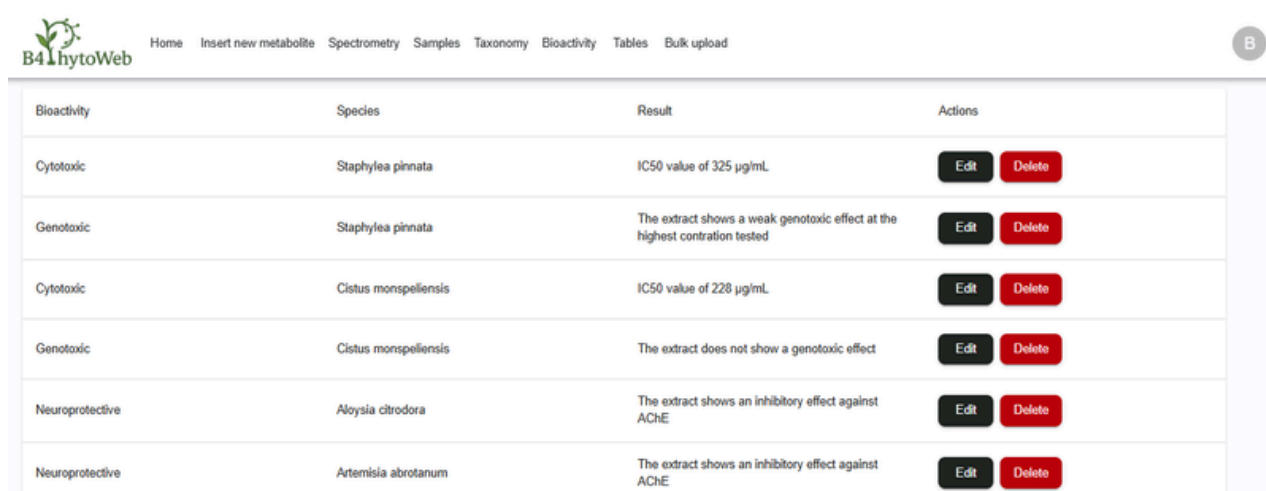
Inoltre, questa sezione, è indispensabile per aggiungere una nuova specie vegetale all'interno della piattaforma o, se utente 'SuperUser', di modificare alcune informazioni tassonomiche relative alle specie già presenti nel database.

Le istruzioni per effettuare queste operazioni sono spiegate nel capitolo 12.

9. Sezione: “Bioactivity”

Questa sezione, presente nella barra di navigazione, consente di visualizzare l'elenco di tutti gli esperimenti relativi alle bioattività che risultano inseriti all'interno della piattaforma B4PhytoWeb. Ogni riga fa riferimento ad un dato differente, composto dalla tipologia di bioattività testata, la specie vegetale il cui estratto è stato utilizzato per la valutazione della bioattività associata e il risultato ottenuto dall'esperimento effettuato.

Nella colonna “Actions”, sono presenti due pulsanti, “Edit” e “Delete”, che permettono di modificare o eliminare un dato di interesse.



The screenshot shows the B4PhytoWeb interface with the 'Bioactivity' tab selected in the navigation bar. The table displays the following data:

Bioactivity	Species	Result	Actions
Cytotoxic	Staphylea pinnata	IC50 value of 325 µg/mL	Edit Delete
Genotoxic	Staphylea pinnata	The extract shows a weak genotoxic effect at the highest contration tested	Edit Delete
Cytotoxic	Cistus monspeliensis	IC50 value of 228 µg/mL	Edit Delete
Genotoxic	Cistus monspeliensis	The extract does not show a genotoxic effect	Edit Delete
Neuroprotective	Aloysia citrodora	The extract shows an inhibitory effect against AChE	Edit Delete
Neuroprotective	Artemisia abrotanum	The extract shows an inhibitory effect against AChE	Edit Delete

Fig.27 Sezione Bioactivity

La sezione “Bioactivity” è indispensabile anche per effettuare l'inserimento singolo relativo a nuovi dati di bioattività con biosaggio associato.

Le istruzioni per effettuare questa operazione sono spiegate nel capitolo 15.

10. Sezione: “Tables”

La sezione “Tables”, presente nella barra di navigazione, consente di accedere a tre aree fondamentali per l’inserimento di nuovi dati all’interno della piattaforma.

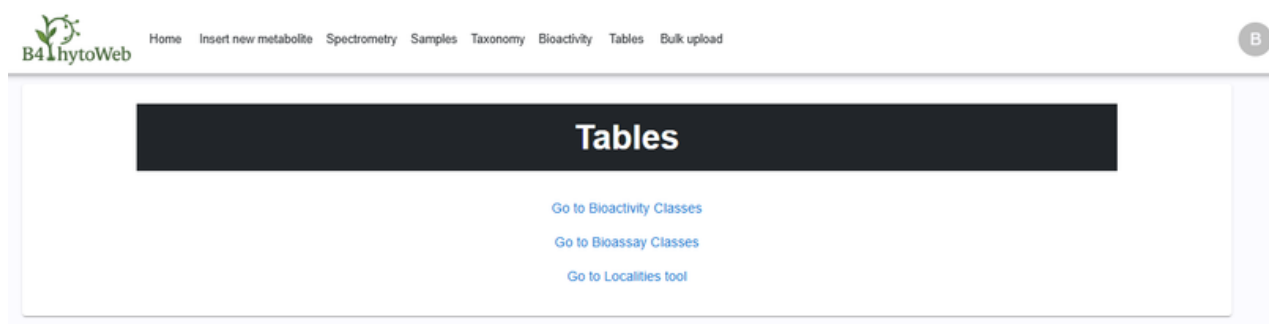


Fig.28 Sezione Tables

“Go to Bioactivity Classes”

Cliccando su questa area, si viene reindirizzati in una pagina contenente l'elenco di tutte le classi di bioattività che risultano già essere inserite in piattaforma.

Ad ogni bioattività è associato un codice identificativo (ID), formato da due numeri separati da uno spazio.

Tramite questi codici, le bioattività sono ordinate in modo lessicografico. Gli ID non sono univoci ma rispecchiano la classificazione delle bioattività, propria della piattaforma.

Per approfondimenti riguardanti questa classificazione, si può consultare la pagina dedicata presente sul sito web di B4PhytoWeb. La consultazione dell'area “Go to Bioactivity Classes” risulta indispensabile quando si vogliono inserire nuovi dati relativi alle bioattività e ai biosaggi associati, inoltre, consente di aggiungere una nuova classe di bioattività qualora questa non sia già presente nell'elenco.

Le istruzioni per effettuare l'inserimento di una nuova classe di bioattività sono spiegate nel capitolo 15. Inoltre, in base ai permessi del profilo con cui si accede alla piattaforma, si può modificare o eliminare una classe di bioattività.

ID	Bioactivity class	Actions	
1 1	Antioxidant	Edit	Delete
1 10	Antigenotoxic	Edit	Delete
1 11	Pain-relieving	Edit	Delete
1 12	Antimicrobial	Edit	Delete
1 2	Anti-inflammatory	Edit	Delete
1 3	Antidiabetic	Edit	Delete
1 4	Neuroprotective	Edit	Delete

Fig.29 Go To Bioactivity Classes

“Go to Bioassay Classes”

Cliccando su questa area, si viene reindirizzati in una pagina contenente l'elenco di tutte le tipologie di biosaggi che risultano già essere inserite in piattaforma.

Ad ogni biosaggio è associato un codice identificativo (ID), formato da tre numeri separati da uno spazio.

Tramite questi codici, i biosaggi sono ordinati in modo lessicografico. Gli ID non sono univoci ma rispecchiano la classificazione dei biosaggi, propria della piattaforma.

Per approfondimenti riguardanti questa classificazione, si può consultare la pagina dedicata presente sul sito web di B4PhytoWeb. La consultazione dell'area “Go to Bioassay Classes” risulta indispensabile quando si vogliono inserire nuovi dati relativi alle bioattività e ai biosaggi associati, inoltre, consente di aggiungere una nuova tipologia di biosaggio qualora questa non sia già presente nell'elenco.

Le istruzioni per effettuare l'inserimento di una nuova classe di biosaggio sono spiegate nel capitolo 15. Inoltre, in base ai permessi del profilo con cui si accede alla piattaforma, si può modificare o eliminare una classe di biosaggio.

ID	Bioassay class	Actions
1 10 1	CBMN assay in CHO-K1 cells	Edit Delete
1 1 1	ABTS/TEAC assay	Edit Delete
1 1 2	DPPH assay	Edit Delete
1 1 3	ORAC assay	Edit Delete
1 1 4	FRAP assay	Edit Delete
1 3 1	Affinity screening for PPARs	Edit Delete
1 4 1	ACHe inhibition assay	Edit Delete

Fig.30 Go To Bioassay Classes

“Go to Localities tool”

Cliccando su questa area, si viene reindirizzati in una pagina contenente uno strumento utile per trovare il codice ISTAT di una determinata località.

Questo codice risulta indispensabile per l’inserimento di nuovi dati relativi a campioni vegetali, metaboliti e bioattività.

Per ottenere l’ISTAT code, bisogna selezionare la provincia e la città da cui è stato prelevato il campione vegetale di partenza.

Localities Tool

Province...
Pisa

Sigla
PI

City...
Pisa

ISTAT code
50026

Fig.31 Go To Localities Tool

11. Sezione: “Bulk upload”

Questa sezione, presente nella barra di navigazione, consente all'utente di caricare in modo massivo i dati all'interno di specifiche sezioni dell'applicazione.

Le aree che supportano il caricamento massivo sono tre:

- “Go to Taxonomy Upload”, dedicata all'inserimento di dati relativi a campioni vegetali
- “Go to Metabolite Upload”, dedicata all'inserimento di dati relativi a metaboliti
- “Go to Bioactivity Upload”, dedicata all'inserimento di dati relativi a bioattività con biosaggi associati.

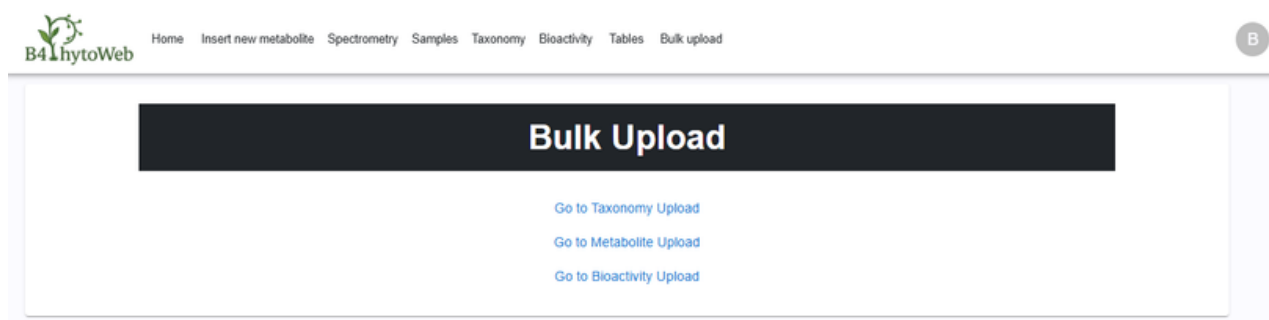


Fig.32 Sezione Bulk Upload

Per ogni operazione di caricamento, è disponibile un template di esempio da poter scaricare, compilare con i propri dati e ricaricare. Le istruzioni per effettuare le operazioni di caricamento massivo dei dati sono spiegate nei capitoli 13, 14 e 15.

12. Istruzioni per l'inserimento di una nuova specie vegetale

In base ai permessi del profilo con cui si accede, è possibile effettuare l'inserimento di una nuova specie vegetale all'interno della piattaforma.

L'inserimento deve essere effettuato in lingua inglese.

Per aggiungere una nuova specie vegetale, bisogna cliccare su "Taxonomy", presente nella barra di navigazione.

Dopodiché, bisogna cliccare su "New Species", presente in fondo alla pagina a destra.

Si verrà quindi reindirizzati ad una pagina dedicata, "New Species", composta dai diversi form di compilazione.

Per l'inserimento, bisogna digitare il nome della specie di interesse all'interno del primo form, "Scientific name", e cliccare su "Search in PubChem".

Se la specie è trovata su Pubchem, gli altri form si auto compileranno (va verificato che tutte le informazioni corrispondano a quelle desiderate).

Si possono aggiungere eventuali informazioni opzionali.

Terminata la compilazione, bisogna cliccare su "Save" per salvare la nuova specie nel database.

I form presenti nella pagina "New Species" sono i seguenti:

Campo	Descrizione
Scientific Name	Nome scientifico completo della specie (es. Lavandula angustifolia)
Search in PUBCHEM	(Opzionale) Pulsante per cercare il nome scientifico nel database PubChem
Taxonomy ID	Codice identificativo univoco della specie, spesso proveniente da database esterni (es. NCBI Taxonomy)
Common Name	Nome comune della pianta (es. "lavanda")
Superkingdom	Livello tassonomico superiore al regno. (Es: Eukaryota)
Kingdom	Regno biologico (es. Plantae)
Phylum	Divisione (es. Tracheophyta)
Class	Classe (es. Magnoliopsida)
Order	Ordine (es. Lamiales)
Family	Famiglia (es. Lamiaceae)
Genus	Genere (es. Lavandula)
Species	Epiteto specifico (es. angustifolia)
Subspecies	Eventuale sottospecie
Synonyms	Altri nomi scientifici conosciuti per la stessa specie

New Specie

Scientific Name *	Search in PUBCHEM
Taxonomy ID *	
Common Name	
Superkingdom	Class *
Kingdom *	Order *
Phylum *	Family *
	Genus
	Species
	Subspecies
	Synonyms
Save	

Un'altra modalità per inserire una nuova specie vegetale nel database, consiste nel cliccare su “[Samples](#)”, nella barra di navigazione, poi su “[New Sample](#)”, presente nella pagina, in basso a destra.

Si verrà reindirizzati in “[Sample Annotation Tool](#)”, descritto nel capitolo 13.

Qui, cliccando su “[Add new species](#)”, si aprirà la pagina “[New Species](#)” descritta in precedenza.

13. Istruzioni per l'inserimento di un nuovo campione vegetale

In base ai permessi del profilo con cui si accede, è possibile effettuare l'inserimento di un nuovo campione vegetale all'interno della piattaforma.

L'inserimento deve essere effettuato in lingua inglese e può avvenire in due modalità:

- inserimento singolo di un campione
- inserimento massivo di più campioni contemporaneamente.

Per effettuare l'inserimento singolo di un nuovo campione vegetale, bisogna cliccare su "[Samples](#)", presente nella barra di navigazione.

Dopodiché, bisogna cliccare su "[New Sample](#)", presente in fondo alla pagina a destra.

Si verrà quindi reindirizzati ad una pagina dedicata, divisa in sezioni, denominata "[Sample Annotation Tool](#)".

Questo strumento è fondamentale per registrare sia le informazioni tassonomiche che i dettagli specifici del campione raccolto.

Nella sezione "[Taxonomy information](#)", si può associare il campione ad una specifica entità tassonomica già presente nel sistema.

Quindi, scegliendo la specie di interesse nel form "[Species](#)", si compileranno automaticamente tutti i campi della sezione.

Se la specie non è ancora presente nel database, è possibile crearne una nuova cliccando sul pulsante “Add new species”, che si trova accanto al form “Species” o cliccando il tasto “~~New Species~~”, presente in fondo alla pagina a destra della sezione “Taxonomy”.

Le istruzioni per l’inserimento di una nuova specie vegetale sono descritte nel capitolo 12.

I campi presenti nella sezione “Taxonomy information” sono i seguenti:

Campo	Descrizione
Species	Form con menù a tendina per selezionare la specie già presente nel database
Taxonomy ID	Codice attribuito alla specie da PubChem
Scientific name	Nome scientifico completo
Common name	Nome comune della specie, se disponibile
Order, Family, Genus, Species, Subspecies	Informazioni tassonomiche dettagliate, derivate dalla specie selezionata

The screenshot displays the 'Taxonomy information' section of the B4PhytoWeb application. At the top, there is a navigation bar with links: Home, Insert new metabolite, Spectrometry, Samples, Taxonomy, Bioactivity, Tables, and Bulk upload. The 'Taxonomy' link is highlighted. Below the navigation bar, the 'Taxonomy information' section is shown. It features a search bar with the text 'Abies alba' and a dropdown arrow. To the right of the search bar is a button labeled 'Add new species'. Below the search bar, there is a list of taxonomic details, each with a lock icon on the right:

- Taxonomy ID: 45372
- Scientific name: Abies alba
- Common name: silver fir
- Order: Pinales
- Family: Pinaceae
- Genus: Abies
- Species: alba
- Subspecies: (empty)

Fig.34 Sezione Taxonomy information di “Sample Annotation Tool”

La sezione “Sample” è dedicata all’inserimento di tutti i dati propri del campione vegetale di interesse e vanno compilati manualmente dall’utente che sta effettuando l’inserimento del nuovo campione.

I campi presenti in questa sezione, e compilabili, sono i seguenti:














































Nome Campo	Descrizione
Sample Code	Codice univoco attribuito dal gruppo di ricerca al campione
Date	Data di raccolta del campione
Province, Sigla, City Locality	Provincia, sigla e città del campionamento Località in cui è avvenuto il campionamento e dove è stato raccolto il campione. Descrizione specifica del luogo
Decimal Latitude	Coordinate rilevate (latitudine)

Nome Campo	Descrizione
Decimal Longitude	Coordinate rilevate (longitudine)
Geodetic Datum	Sistema di riferimento in cui sono state prese le coordinate
Elevation	Quota rilevata
Location Remarks	Provenienza del campione (campo, orto botanico, vivaio privato o universitario)
Recorded By	Rilevatore, persona che ha raccolto il campione
Individual Count	Numero di campioni raccolti
Organism Remarks	Parte della pianta inviata alle analisi
Life Stage	Stadio di sviluppo dell'organismo (specifico della pianta)
Associated Image	Foto del campione raccolto
Institution Code	Luogo e istituzione in cui è conservato il campione
Collection Code	Collezione in cui è conservato il campione
Catalog Number	Codice e località di collocamento in erbario

Nome Campo	Descrizione
Identified By	Determinatore, persona che attribuisce la specie a livello tassonomico
Scientific Name	Nome scientifico della specie completo di autore (se necessario) al momento della determinazione
Associated References	Fonte bibliografica consultata per l'attribuzione del nome scientifico
ID references	ID univoco attribuito in base alla fonte consultata per la determinazione della specie
Date Identified	Anno e/o data in cui è avvenuta la determinazione della specie
Biological replicate	Numero attribuito al campione
Notes	Campo libero per annotazioni relative al campionamento e/o alla determinazione della specie

Alla fine della pagina è presente il pulsante “Save” che permette di registrare tutte le informazioni compilate.

Tutti i campi obbligatori devono essere compilati per poter procedere.

Sample	
Occurrence ID	 
Date	 
Province...	Sigla  City...
Locality	 
Latitude	 
Longitude	 
Geodetic datum	 
Elevation	 
Location remarks	 
Recorded by	 
Individual count (plant)	 
Organism remarks	 
Life stage	 
<div>No image</div> <div>  Nessun file selezionato No associated image selected </div>	
Institution code	 
Collection code	 
Catalog number	 
Identified by	 
Scientific name	
Associated references	 
ID references	 
Date identified	 
Biological replicate *	 
Notes	 

Save

Fig.35 Sezione Sample di "Sample Annotation Tool"

Qualora si volesse effettuare un inserimento di più campioni vegetali contemporaneamente, si può procedere con un inserimento massivo di dati.

Quindi, cliccare su “[Bulk Upload](#)”, presente nella barra di navigazione, e poi cliccare su “[Go To Taxonomy Upload](#)”.

Qui è possibile scaricare il file Excel di esempio tramite “Download sample Excel file”.

Dopo aver compilato il file, con i nuovi dati da inserire in piattaforma, questo va caricato cliccando su “[Choose file](#)” e infine su “[Upload](#)”.

Il file Excel contiene tutti i campi descritti in precedenza, per l’inserimento singolo di un nuovo campione vegetale.

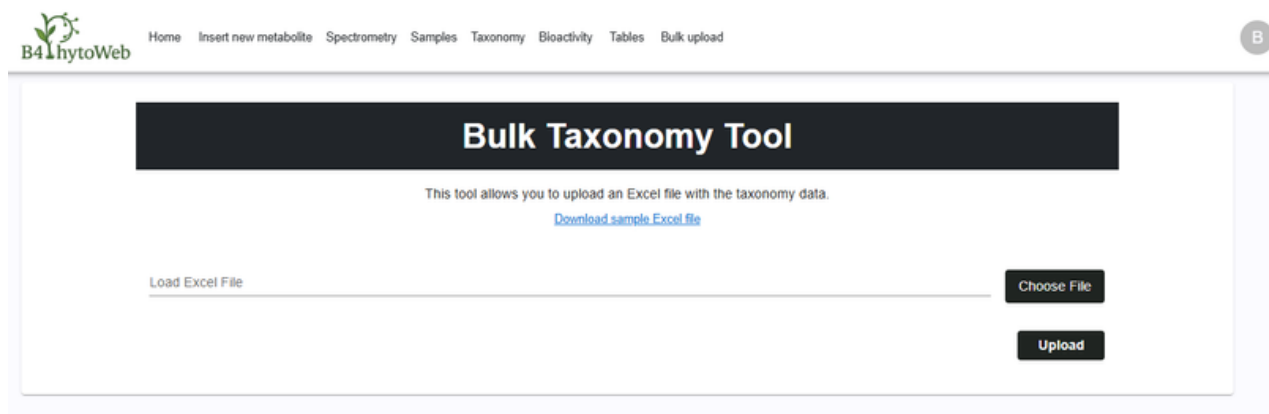


Fig. Sezione dedicata all’inserimento massivo di dati relativi a nuovi campioni vegetali

14. Istruzioni per l'inserimento di un nuovo metabolita

In base ai permessi del profilo con cui si accede, è possibile effettuare l'inserimento di un nuovo metabolita all'interno della piattaforma.

L'inserimento deve essere effettuato in lingua inglese e può avvenire in due modalità:

- inserimento singolo di un campione
- inserimento massivo di più campioni contemporaneamente.

Per effettuare l'inserimento singolo di un nuovo metabolita, bisogna cliccare su "*Insert new metabolite*", presente nella barra di navigazione.

Si verrà quindi reindirizzati ad una pagina dedicata, divisa in sezioni, denominata "*Metabolite Annotation Tool*" che consente all'utente di inserire tutti i dati di interesse relativi al nuovo metabolita.

Nel form "*Metabolites*" bisogna digitare il nome del metabolita e cliccare su "search".

La piattaforma mostrerà tutte le informazioni già presenti nel sistema. Qui, si possono modificare o compilare solo i seguenti campi:

- *Chemical class name*: la classe chimica del metabolita, da attribuire secondo la via biosintetica. Per l'attribuzione è possibile consultare come guida lo schema tassonomico riportato nel sito web della piattaforma.
- *Molecular weight*: peso molecolare
- *Synonyms*: eventuali sinonimi o nomi comuni utilizzati per lo stesso metabolita.

Metabolite Annotation Tool

Please fill out the following fields to search for metabolite information.
 Enter the metabolite name and click the "Search" button to find relevant data.
 Bold text in the input labels are mandatory fields.
 If any fields are invalid or incomplete, error messages will appear next to them.

Metabolites...

Asiatic acid

Search

Metabolite name	Asiatic acid	🔒
CID (Compound ID)	119034	🔒
Molecular formula	C30H48O5	🔒
SMILE	<chem>CC1CCC2(CCC3(C(=CCC4C3(CCC5C4(CC(C(C5(C)CO)O)O)C)C)C2C1C)C)C(=O)O</chem>	🔒
InChIKey	JXSVIVRDWWRQRT-UYDOISQJSA-N	🔒
InChI	InChI=1S/C30H48O5/c1-17-9-12-30(25(34)35)14-13-28(5)19(23(30)18(17)2)7-8-22-26(3)15-20(32)24(33)27(4,16-31)21(26)10-11-29(22,28)6/h7,17-18,20	🔒
Chemical class name	triterpenes c30	✎
Molecular weight	488.7	✎
Synonyms	2α,23-Dihydroxyursolic acid	✎

Fig.36 Sezione principale di "Metabolite Annotation Tool"

La sezione "LC-MS" è dedicata all'inserimento dei dati relativi all'esperimento di spettrometria di massa, effettuato per l'identificazione del metabolita di interesse.

I campi presenti in questa sezione, e compilabili, sono i seguenti:

- Rt (min) - tempo di ritenzione espresso in minuti.
- UV-Vis (nm) - le lunghezze d'onda utilizzate nella cromatografia

Dopo questi campi, si trovano due sottosezioni: Negative e Positive, che corrispondono alle modalità di ionizzazione utilizzate durante le analisi con spettrometria di massa.

Per la modalità negativa si possono compilare i seguenti campi:

- Experimental m/z - il valore m/z sperimentale dello ione molecolare.
- Expected m/z - il valore m/z teorico calcolato dalla formula molecolare.

- Negative ppm result - l'errore calcolato sulla massa molecolare sperimentale, espresso in parti per milione.
- Negative adduct - eventuali addotti formati in sorgente.
- Confirming negative fragments - i frammenti ionici diagnostici utili a confermare l'identità del metabolita.

La sezione positiva funziona in modo analogo, ma riferita alla ionizzazione positiva.

Infine, dopo le due sottosezioni “Negative” e “Positive”, possono essere compilati anche i seguenti campi:

- MS Identification Level - indica il livello di certezza con cui il metabolita è stato identificato (attenersi alla legenda presente in piattaforma).
- Bibliography - DOI di eventuali pubblicazioni attinenti ai dati inseriti.
- Notes - eventuali commenti o annotazioni.
- MS Reference Data - DOI di articoli di riferimento utilizzati per l'attribuzione del metabolita.

Il campo “Analyst” non è compilabile né modificabile ed è riferito al nome dell'utente che sta inserendo i dati.

LC-MS			
Peak ID			
Rt (min)			
UV-Vis (nm)			
NEGATIVE			
Experimental m/z	Expected m/z	Negative PPM Result	
Negative adduct			
Confirming negative fragments			
Please enter numbers separated by semicolons, e.g. 123.45;678.90			

POSITIVE

Experimental m/z

Expected m/z

Positive PPM Result

Positive adduct

Confirming positive fragments

Please enter numbers separated by semicolons, e.g. 123.45;678.90

MS Identification Level

MS Identification Level Values:
1) comparison with commercial standard
2A) molecule described in the literature in the same species (from NMR elucidation or LC-MS work with support of authentic standards)
2B) molecule with fragmentation patterns reported in the literature in other species or in various MS databases
2C) structure deduction from diagnostic neutral losses and characteristic fragments of known aglycones
2D) structure deduction from in silico fragmentation
3) deduction of the molecular class or major portion of the molecule
4A) not identified but some details of the molecule may be known (presence of phenolic acid residues, glycosides, sulphate groups, etc.)
4B) not identified

Bibliography

Notes

MS Reference Data

Analyst
Benassi

Fig.37 Sezione LC-MS di “Metabolite Annotation Tool”

Nella sezione “Taxonomy information”, si può associare il metabolita ad una specifica entità tassonomica già presente nel sistema.

Quindi, scegliendo la specie di interesse nel form “Species”, si compileranno automaticamente tutti i campi della sezione.

Se la specie non è ancora presente nel database, va aggiunta prima di effettuare l’inserimento dei dati relativi al nuovo metabolita. Per effettuare ciò, consultare il capitolo 12, contenente le istruzioni per l’inserimento di una nuova specie vegetale. I campi presenti nella sezione “Taxonomy information”, sono gli stessi della sezione omonima relativa al “Sample Annotation Tool”, descritta nel capitolo 13.

Nella sezione “Latest insertions for the selected species” compare l’elenco dei metaboliti già inseriti e associati alla specie vegetale selezionata.

Genus					
Staphylea					🔒
Species					
pinnata					🔒

Latest insertions for the selected species					
Metabolite Name	Peak ID	RT	Molecular formula	Experimental m/z (Neg)	Confirming Fragments (Neg)
Asiatic acid		12.392	C30H48O5	533.347340249091	487.341
Asiatic acid isomer		12.63	C30H48O5	533.347543117066	487.341
Benzyl alcohol-O-hexoside-pentoside		5.19	C18H26O10	447.15	401.15; 269.11; 161.05
Caffeoyl malic acid		5.544	C13H12O8	591.099375141002	295.04; 179.04; 133.02; 115.00
Citric acid		1.33	C6H8O7	191.0198	191.02; 111.01; 87.01
Dihydroxybenzoic acid derivative		3.929	C18H24O13	447.1152	152.01; 108.02

Fig.38 Sezione *Latest insertions for the selected species* di “Metabolite Annotation Tool”

Nel form “sample” della sezione “Sample and biological replicate” bisogna selezionare il codice del campione relativo alla specie in studio.

Se il campione non è ancora presente nel database, va aggiunto prima di effettuare l’inserimento dei dati relativi al nuovo metabolita. Per effettuare ciò, consultare il capitolo 13, contenente le istruzioni per l’inserimento di un nuovo campione vegetale.

Sample and biological replicate	
Sample...	
BDV230-A-MAV-cl-Cimo 2022-10-05 Padova	✕ ▾

Fig.39 Sezione *Sample and biological replicate* di “Metabolite Annotation Tool”

Nella sezione “LC-MS Setting Information” vanno inseriti i seguenti parametri strumentali:

- Ionization source - ad esempio ESI (Electrospray Ionization Source).
- Device model - modello dello strumento utilizzato.
- Capillary voltage - tensione applicata al capillare durante l'analisi.
- Ionization type - modalità di ionizzazione scelta (positiva o negativa).
- Collision energy - energia applicata per frammentare gli ioni.
- Conical voltage → tensione applicata al cono di ingresso.

Inseriti questi ultimi parametri, è possibile effettuare il salvataggio dei dati inseriti cliccando su “Save” in fondo alla pagina.

The screenshot shows a web form titled "LC-MS Setting Information" with a dark blue header. Below the header is a button labeled "View saved settings". The form contains six input fields arranged in two columns. Each field has a label, a text input area, and a small icon of a document with a pencil. The fields are: "Ionization source", "Ionization type", "Device model", "Collision energy (eV)", "Capillary voltage (kV)", and "Conical voltage (V)". At the bottom of the form is a dark button labeled "Save".

LC-MS Setting Information	
<button>View saved settings</button>	
Ionization source	Ionization type
Device model	Collision energy (eV)
Capillary voltage (kV)	Conical voltage (V)
<button>Save</button>	

Fig.40 Sezione LC-MS Setting Information di “Metabolite Annotation Tool”

Qualora si volesse effettuare un inserimento di più metaboliti contemporaneamente, si può procedere con un inserimento massivo di dati.

Quindi, cliccare su “[Bulk Upload](#)”, presente nella barra di navigazione, e poi cliccare su “[Go To Metabolite Upload](#)”.

Qui è possibile scaricare il file Excel di esempio tramite “[Download sample Excel file](#)”.

Dopo aver compilato il file, con i nuovi dati da inserire in piattaforma, questo va caricato cliccando su “[Choose file](#)” e infine su “[Upload](#)”.

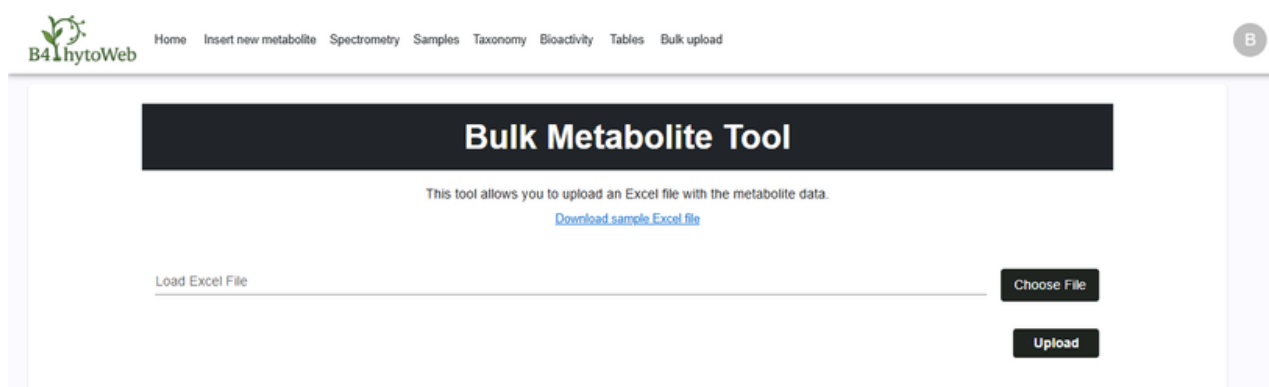


Fig.41 Sezione dedicata all'inserimento massivo di dati relativi a nuovi metaboliti

Attenzione, prima del caricamento massivo è necessario verificare che siano stati inseriti in piattaforma i campioni vegetali da associare ai metaboliti.

Se questi non sono presenti, consultare il capitolo 13 contenente le istruzioni per l'inserimento di un nuovo campione vegetale.

Nel file Excel, i seguenti campi risultano di obbligatoria compilazione:

- scientific name - nome scientifico della specie.
- puchem_taxonomy_id - identificativo tassonomico univoco - questo ID è reperibile in piattaforma, cliccando su “Sample”, ricercando la specie di interesse ed infine cliccando su “Edit”.
- istat_code - corrisponde al codice ISTAT della località di raccolta del campione vegetale - questo codice è reperibile in piattaforma, cliccando su “Tables” e poi su “Go to Localities tool”. Qui bisogna selezionare la provincia e la città da cui è stato prelevato il campione vegetale e il sistema ci fornirà l’ISTAT code corrispondente.
- metabolite_name - nome del metabolita.

Inoltre, i campi collision_energy, capillary_voltage e conical_voltage devono essere compilati con valori numerici.

15. Istruzioni per l'inserimento di nuovi dati di bioattività e biosaggi

In base ai permessi del profilo con cui si accede, è possibile effettuare l'inserimento di nuovi dati relativi a bioattività e biosaggi all'interno della piattaforma.

L'inserimento deve essere effettuato in lingua inglese e può avvenire in due modalità:

- inserimento singolo, relativo a dati di un esperimento
- inserimento massivo, utile quando si dispone di liste di bioattività e biosaggi associati

Prima di inserire nuovi dati, è importante verificare che la bioattività di interesse sia o meno già presente in piattaforma.

Quindi, bisogna cliccare su "Tables", nella barra di navigazione, e poi su "Go to Bioactivity Classes".

Qui, bisogna scorrere la pagina per osservare le bioattività disponibili.

Se presente, è preferibile scegliere una macrobioattività, cioè una categoria generale: ad esempio, se si vogliono inserire dati relativi ad un'attività "Antibiotica", ci si riferirà alla bioattività "Antimicrobica", senza andare ad aggiungere la sotto bioattività all'interno della lista. Questa potrebbe essere esplicitata all'interno del campo note, descritto più avanti. Per l'attribuzione della bioattività è possibile consultare il diagramma ad albero disponibile nella pagina dedicata del sito web della piattaforma.

Alle bioattività presenti in “Go to Bioactivity Classes”, è attribuito un codice numerico identificativo, denominato “ID”.

Questi ID risultano formati da un numero, seguito da uno spazio e un altro numero (es. 1 1, 1 2, 1 3, etc.) e sono ordinati in modo lessicografico.

Se la bioattività desiderata non è presente nell’elenco, è possibile crearne una nuova cliccando su “New Class”, presente nella pagina, in basso a destra.

Si verrà reindirizzati in una pagina denominata “New Bioactivity Class”, dove si potrà inserire:

- l’ID della nuova classe di bioattività, che deve corrispondere all’ID successivo disponibile. Questa informazione si può reperire tornando indietro e scorrendo tutti gli ID collegati alle classi di bioattività già inserite.
 - Il nome della bioattività all’interno del form “Bioactivity class”
- Terminato l’inserimento, cliccare su “Save”.

New Bioactivity Class

ID *

Bioactivity class

Save

Fig.42 Pagina “New Bioactivity Class”

Dopo aver scelto o inserito la bioattività di interesse, bisogna verificare se il biosaggio associato alla bioattività, di cui vogliamo inserire i dati, sia già presente in piattaforma.

Quindi, bisogna cliccare su “Tables”, nella barra di navigazione, e poi su “Go to Bioassay Classes”.

Qui, bisogna scorrere la pagina per osservare i biosaggi disponibili. Anche questi sono ordinati per “ID”, che riprende quello della bioattività associata. Ad esempio, la bioattività “Antiossidante” ha ID 11 di conseguenza, i saggi ad essa collegati inizieranno con la stessa sequenza: il saggio “ABTS/TEAC” ha ID 11 1; il saggio “DPPH” ha ID 11 2 e così via.

Se il biosaggio di interesse non è presente nell’elenco, è possibile crearne uno nuovo cliccando su “New Class”, presente nella pagina, in basso a destra.

Si verrà reindirizzati in una pagina denominata “*New Bioassay Class*”, dove si potrà inserire:

- l’ID della nuova classe di biosaggio, che deve corrispondere all’ID successivo disponibile. Questa informazione si può reperire tornando indietro e scorrendo tutti gli ID dei saggi collegati alla classe di bioattività di interesse.
- Il nome del saggio all’interno del form “Bioassay class”

Terminato l’inserimento, cliccare su “Save”.

New Bioassay Class

Fig.43 Pagina
“*New Bioassay
Class*”

Verificate tutte le informazioni descritte in precedenza, è possibile effettuare l'inserimento singolo dei dati veri e propri relativi agli esperimenti di bioattività di interesse.

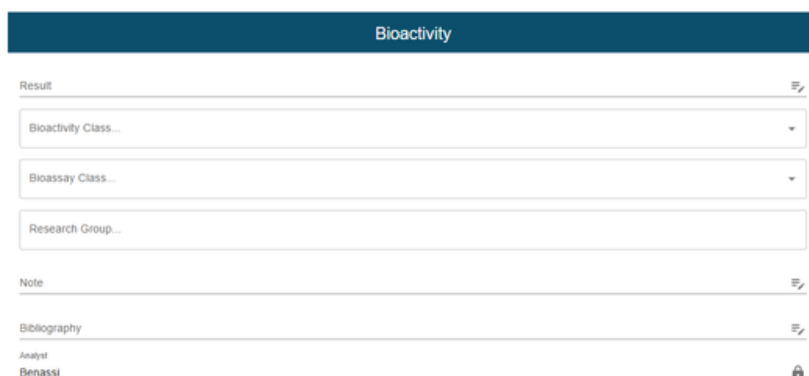
Quindi cliccare su “Bioactivity”, presente nella barra di navigazione, e cliccare su “New Bioactivity”, in fondo a destra della pagina.

Si verrà quindi reindirizzati ad una pagina dedicata, divisa in sezioni, denominata “Bioactivity Annotation Tool” che consente all'utente di inserire tutti i dati di interesse su bioattività e biosaggio associato.

Nella sezione “Bioactivity”, bisogna compilare i seguenti campi:

- Result - il risultato ottenuto dall'esperimento, espresso in modo sintetico.
- Bioactivity class - in questo form va selezionata la bioattività di interesse.
- Bioassay class - in questo form va selezionato il saggio di interesse.
- Research group - la sigla o il codice del gruppo di ricerca che ha effettuato l'esperimento.
- Note - è un campo libero, dove si possono inserire tutti i dettagli che l'utente ritiene utili.
- Bibliography - DOI di eventuali pubblicazioni attinenti ai dati inseriti.

Il campo “Analyst” non è compilabile né modificabile ed è riferito al nome dell'utente che sta inserendo i dati.



The screenshot shows a web form titled "Bioactivity" in a dark blue header. Below the header, there are several input fields: a text field for "Result", a dropdown menu for "Bioactivity Class...", a dropdown menu for "Bioassay Class...", and a text field for "Research Group...". Below these are three more sections: "Note" with a text area, "Bibliography" with a text area, and "Analyst" with a text field containing the name "Benassi". Each section has a small icon to its right.

Fig.44 Sezione
Bioactivity di
“Bioactivity
Annotation Tool”

Nella sezione “Taxonomy information”, si possono associare i dati inseriti ad una specifica entità tassonomica già presente nel sistema.

Quindi, scegliendo la specie di interesse nel form “Species”, si compileranno automaticamente tutti i campi della sezione.

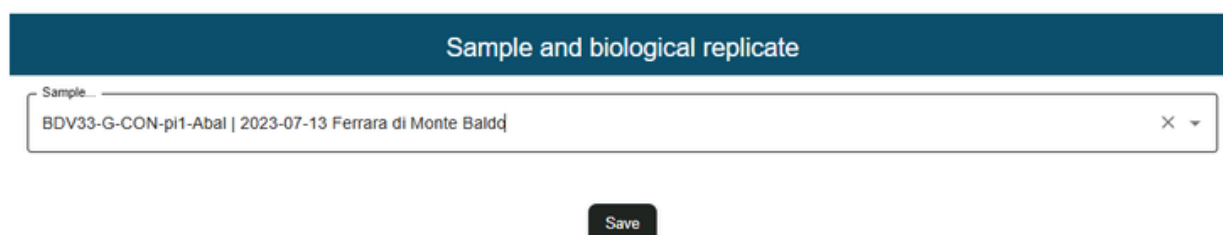
Se la specie non è ancora presente nel database, va aggiunta prima di effettuare l’inserimento dei nuovi dati. Per effettuare ciò, consultare il capitolo 12, contenente le istruzioni per l’inserimento di una nuova specie vegetale.

I campi presenti nella sezione “Taxonomy information”, sono gli stessi della sezione omonima relativa al “Sample Annotation Tool”, descritta nel capitolo 13.

Nel form “Sample” della sezione “Sample and biological replicate” bisogna selezionare il codice del campione relativo alla specie in studio.

Se il campione non è ancora presente nel database, va aggiunto prima di effettuare l’inserimento dei nuovi dati. Per effettuare ciò, consultare il capitolo 13, contenente le istruzioni per l’inserimento di un nuovo campione vegetale.

Completato l’inserimento è possibile effettuare il salvataggio dei dati inseriti cliccando su “Save” in fondo alla pagina.



Sample and biological replicate

Sample...
BDV33-G-CON-pi1-Abal | 2023-07-13 Ferrara di Monte Baldo

Save

Fig.45 Sezione Sample and biological replicate di “Bioactivity Annotation Tool”

Qualora si volesse effettuare un inserimento di più dati di bioattività contemporaneamente, si può procedere con un inserimento massivo di dati.

Quindi, cliccare su “[Bulk Upload](#)”, presente nella barra di navigazione, e poi cliccare su “[Go To Bioactivity Upload](#)”.

Qui è possibile scaricare il file Excel di esempio tramite “[Download sample Excel file](#)”.

Dopo aver compilato il file, con i nuovi dati da inserire in piattaforma, questo va caricato cliccando su “[Choose file](#)” e infine su “Upload”.

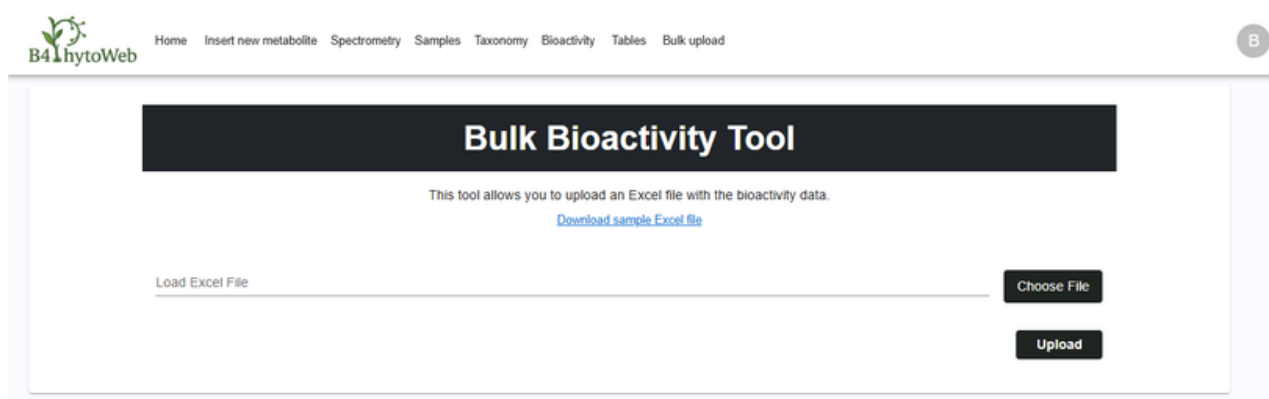


Fig.46 Sezione dedicata all'inserimento massivo di nuovi dati di bioattività

Attenzione, prima del caricamento massivo è necessario verificare che siano stati inseriti in piattaforma i campioni vegetali da associare ai nuovi dati di bioattività.

Se questi non sono presenti, consultare il capitolo 13 contenente le istruzioni per l'inserimento di un nuovo campione vegetale.

Inoltre, bisogna controllare che bioattività e biosaggi di interesse siano già presenti in piattaforma (nomi ed ID).

Se non lo sono, occorre inserirli come da istruzioni descritte per l'inserimento singolo di nuovi dati di bioattività.

Nel file Excel, i seguenti campi risultano di obbligatoria compilazione:

- scientific name - nome scientifico della specie.
- puchem_taxonomy_id - identificativo tassonomico univoco.

Questo ID è reperibile in piattaforma, cliccando su “Sample”, ricercando la specie di interesse ed infine cliccando su “Edit”.

- istat_code - corrisponde al codice ISTAT della località di raccolta del campione vegetale.

Questo codice è reperibile in piattaforma, cliccando su “Tables” e poi su “Go to Localities tool”. Qui bisogna selezionare la provincia e la città da cui è stato prelevato il campione vegetale e il sistema ci fornirà l'ISTAT code corrispondente.

- Bioactivity ID - codice identificativo della bioattività (come visto in precedenza).
- Bioactivity - nome della bioattività.
- Bioassay ID - codice identificativo del biosaggio (come visto in precedenza).
- Bioassay - nome del biosaggio.
- Result - risultato dell'esperimento.