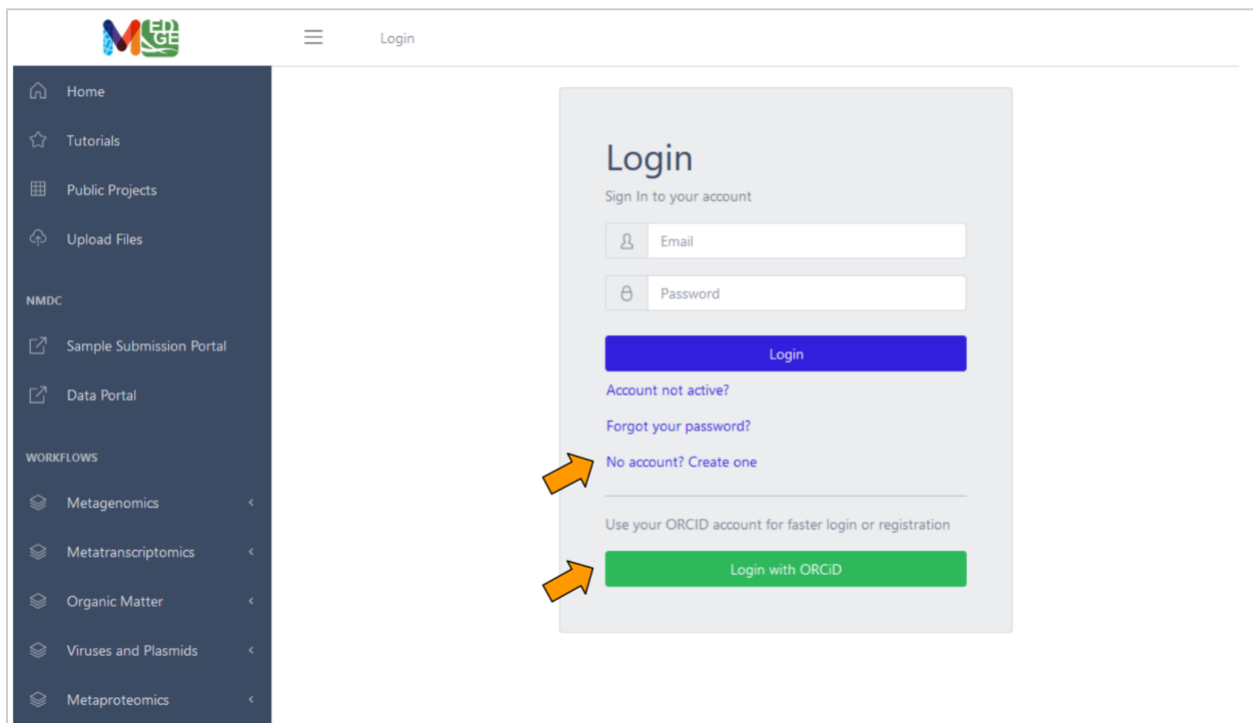
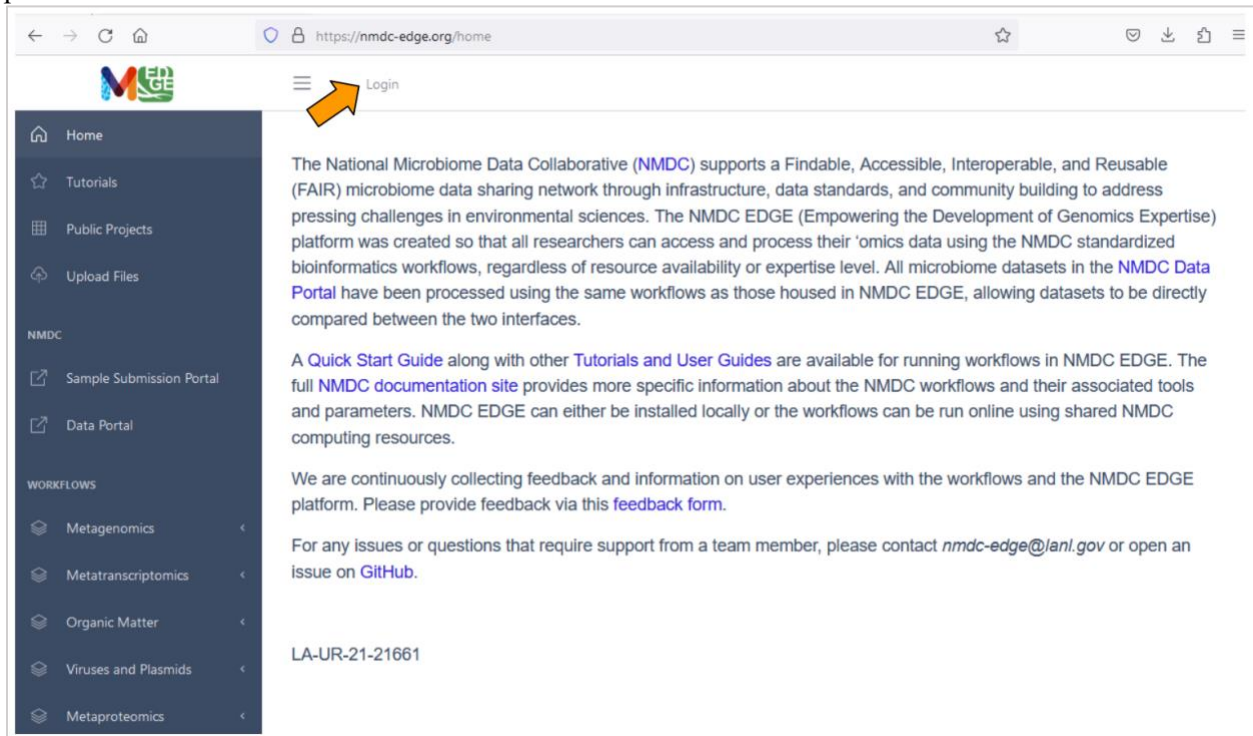


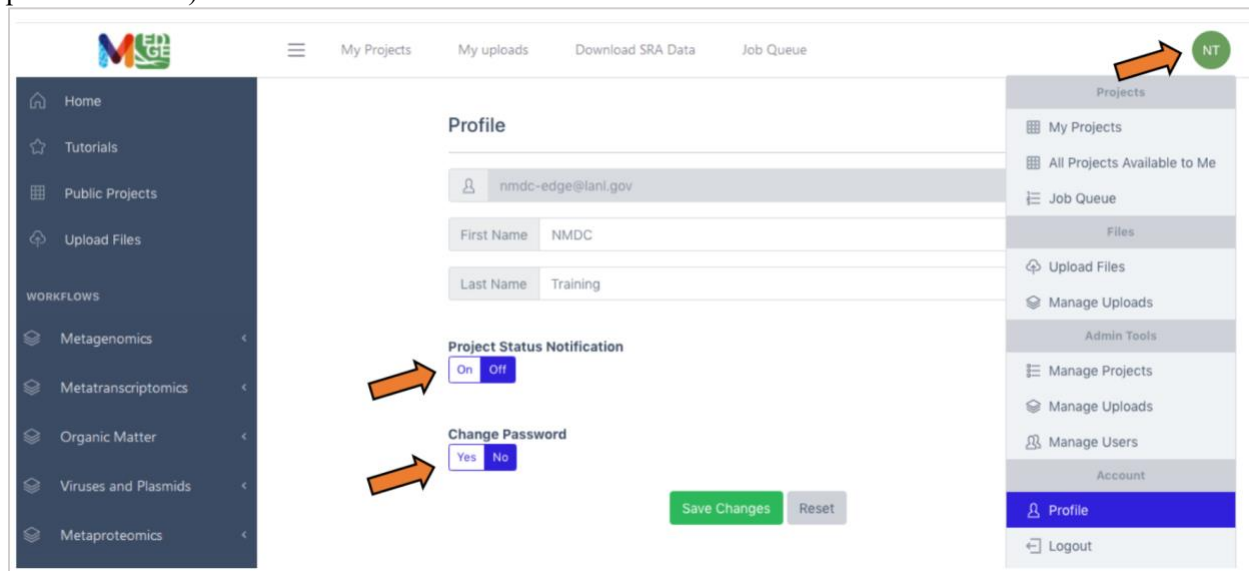
Registrarse para una cuenta

Los usuarios deben registrarse para obtener una cuenta dentro de la plataforma NMDC EDGE. También pueden iniciar sesión utilizando la cuenta ORCID del usuario.



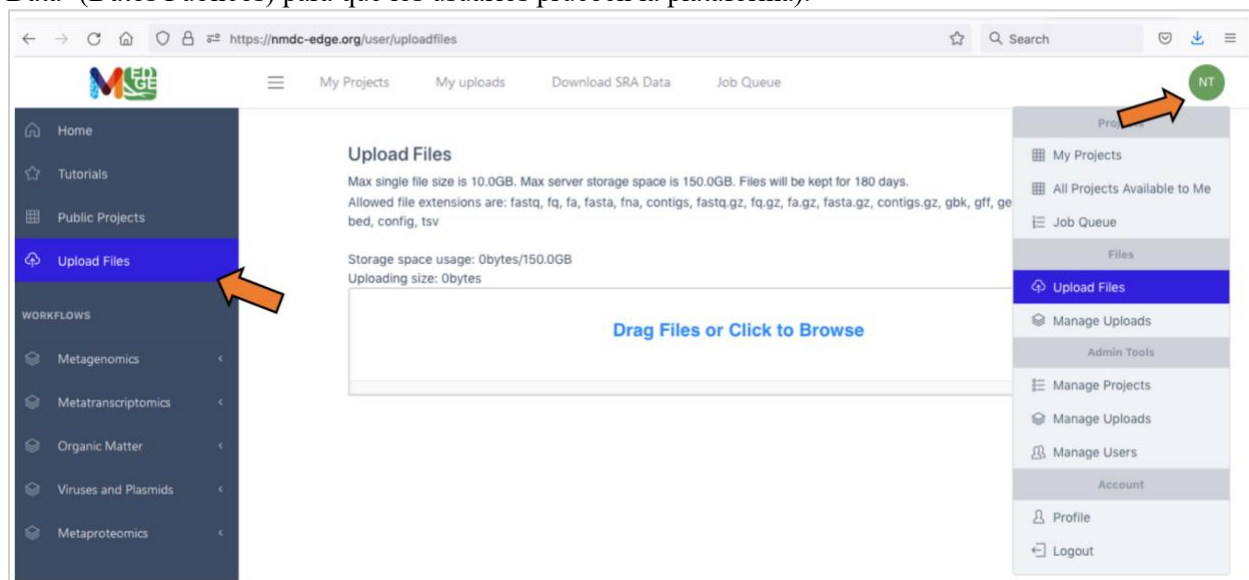
Perfil del Usuario

Una vez que haya iniciado una sesión, el botón verde con las iniciales del usuario a la derecha proporciona un menú desplegable que le permite al usuario administrar sus proyectos y cargas; También hay un botón que permite a los usuarios editar su perfil. En esta página de perfil, hay dos opciones: 1) la opción de recibir una notificación por correo electrónico sobre el estado de un proyecto (desactivada de forma predeterminada) y 2) la opción de cambiar la contraseña del usuario (también desactivada de forma predeterminada).



Subir datos

Hay dos opciones disponibles para que los usuarios carguen sus propios datos para procesarlos a través de los workflows. El primero es usar el botón en la barra de menú de la izquierda. La segunda es a través del menú desplegable que se muestra al pulsar el botón verde con las iniciales del usuario a la derecha. Cualquiera de los botones abrirá una ventana que le permitirá al usuario arrastrar y soltar archivos o buscar archivos dentro de su máquina. (También hay algunos conjuntos de datos en la carpeta 'Public Data' (Datos Públicos) para que los usuarios prueben la plataforma).



Ejecutar un único workflow

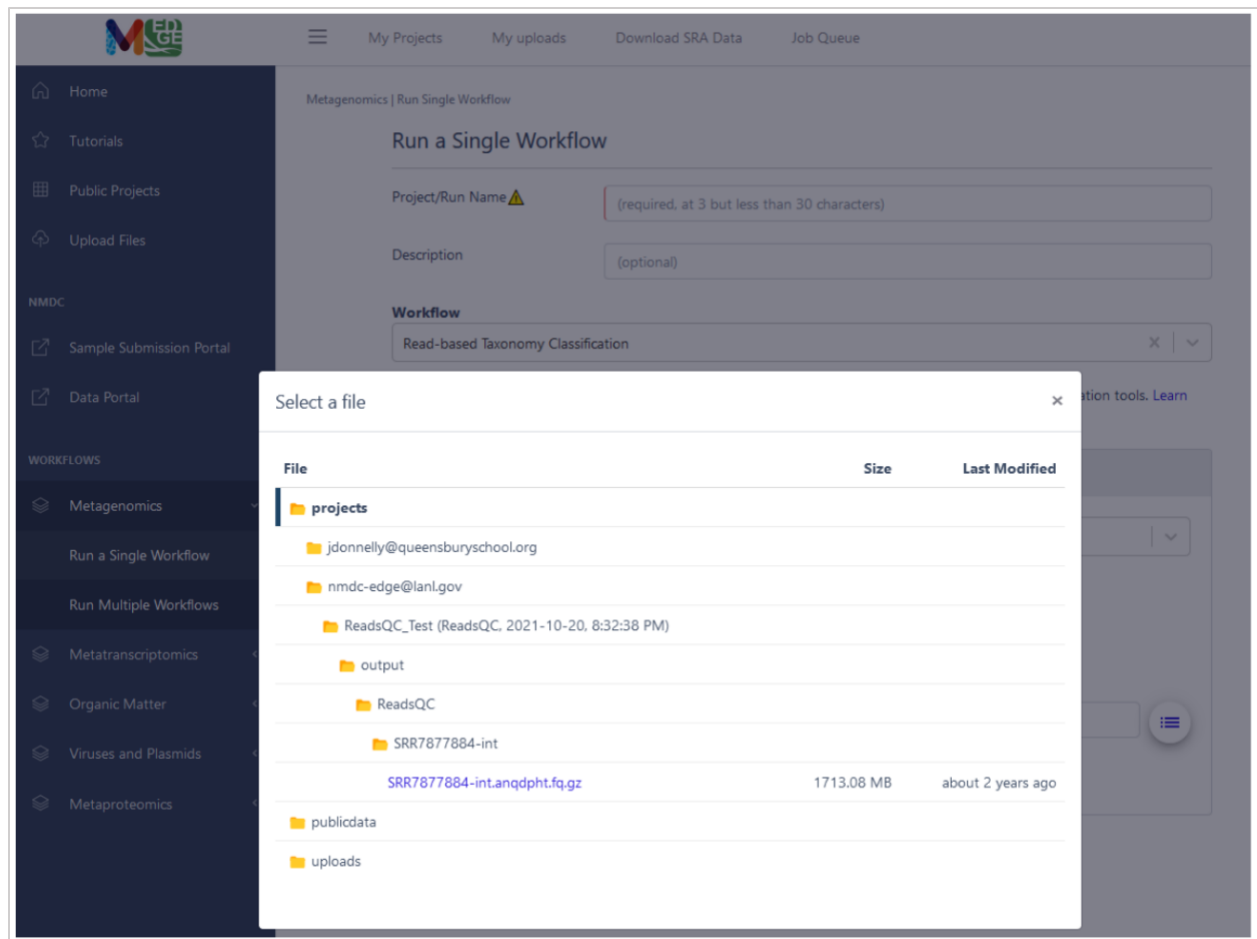
Para ejecutar un workflow, el usuario debe proporcionar:

1. Un nombre de proyecto/ejecución **única** sin espacios (los guiones bajos están permitidos).
2. Una descripción es opcional, pero recomendada.
3. Luego, el usuario elige el workflow deseado en el menú desplegable.
4. Para datos metagenómicos/metatranscriptómicos, el usuario debe seleccionar si los datos ingresados son entrelazados o separados para 'reads' emparejados.
5. Luego, debe seleccionar los archivos que se utilizarán de la lista de archivos que ha ingresado el usuario.
6. El usuario debe hacer clic en 'Submit' (Someter).

The screenshot shows the 'Run a Single Workflow' interface for Metagenomics. The left sidebar contains navigation links: Home, Tutorials, Public Projects, Upload Files, NMDC (Sample Submission Portal, Data Portal), and WORKFLOWS (Metagenomics, Run a Single Workflow, Run Multiple Workflows, Metatranscriptomics, Organic Matter, Viruses and Plasmids, Metaproteomics). The main form has the following fields and elements:

- Project/Run Name**: A text input field with a warning icon and the note '(required, at 3 but less than 30 characters)'. An orange arrow labeled '1' points to it.
- Description**: A text input field with the note '(optional)'. An orange arrow labeled '2' points to it.
- Workflow**: A dropdown menu showing 'ReadsQC'. An orange arrow labeled '3' points to it.
- Workflow Description**: A paragraph stating: 'This workflow is a replicate of the QA protocol implemented at JGI for Illumina reads and use the program "rqfilter2" from BBTools(38:44) which implements them as a pipeline. [Learn more](#)'.
- Input Section**:
 - Input Raw Reads**: A section with a question 'Is interleaved?' and 'Yes'/'No' buttons. An orange arrow labeled '4' points to the 'No' button.
 - Input paired fastq**: A button labeled 'Add paired-end fastq'.
 - Pair-1 FASTQ #1**: A text input field with the placeholder 'Select a file or enter a file http(s) uri'. An orange arrow labeled '5' points to the file selection icon (three horizontal lines) on the right.
 - Pair-2 FASTQ #1**: A text input field with the placeholder 'Select a file or enter a file http(s) uri'. An orange arrow labeled '5' points to the file selection icon on the right.
 - Remove**: A link below the input fields.
- Submit**: A blue button at the bottom right. An orange arrow labeled '6' points to it.

Nota: Al hacer clic en los botones a la derecha de los espacios en blanco de entrada de datos, se abre un cuadro llamado 'Select a file' (Seleccionar un archivo) para permitir al usuario encontrar los archivos deseados (que se muestran en violeta) de 1) proyectos ejecutados anteriormente, 2) la carpeta de datos públicos o 3) los archivos cargados por el usuario.




Ejecutando múltiples workflows

1. Otra opción es seleccionar 'Run Multiple Workflows' (Ejecutar múltiples procesos) si el usuario desea ejecutar más de uno de los workflows metagenómicos o todo el proceso metagenómico.
2. Un nombre de proyecto/ejecución única sin espacios (los guiones bajos están permitidos).
3. Una descripción es opcional, pero recomendada.
4. Para datos metagenómicos/metatranscriptómicos, el usuario debe seleccionar si los datos ingresados son entrelazados o separados para los 'reads' emparejados.

The screenshot shows the 'Run Multiple Workflows' page in a web application. On the left is a dark sidebar with a menu. The main content area has a form for running workflows. Four orange arrows with numbers 1 through 4 point to specific elements: Arrow 1 points to 'Run Multiple Workflows' in the sidebar; Arrow 2 points to the 'Project/Run Name' input field; Arrow 3 points to the 'Description' input field; Arrow 4 points to the 'Yes' button for 'Is interleaved?'. The form includes a 'Project/Run Name' field (required, 3-30 characters), a 'Description' field (optional), and an 'Input Raw Reads' section with a toggle for 'Is interleaved?' (Yes/No), an 'Add interleaved fastq' button, and a file selection input.

Metagenomics | Run Multiple Workflows


Run Multiple Workflows

Project/Run Name  (required, at 3 but less than 30 characters)


Description (optional)

Input Raw Reads





Input

Input Raw Reads ⓘ
Is interleaved? **Yes** No 

Input interleaved fastq [Add interleaved fastq](#)

interleaved FASTQ #1 

[Remove](#)

1  **2**  **3**  **4** 

- Home
- Tutorials
- Public Projects
- Upload Files
- NMDC
 - Sample Submission Portal
 - Data Portal
- WORKFLOWS
 - Metagenomics
 - Run a Single Workflow
 - Run Multiple Workflows**
 - Metatranscriptomics
 - Organic Matter
 - Viruses and Plasmids
 - Metaproteomics

Los cinco workflows metagenómicos están ‘ON’ (Activados) de forma predeterminada, pero el usuario puede seleccionar desactivar cualquier workflow que no desee. El ‘pipeline’ utiliza la salida de cada workflow como entrada para workflows posteriores. (Nota: algunos workflows requieren datos de entrada de los workflows anteriores, por lo que desactivar un workflow puede provocar que otros workflows también se desactiven automáticamente). Luego, el usuario puede hacer clic en ‘Submit’ (Someter).

Choose Workflows

All of the NMDC Metagenomic workflows are connected in EDGE, so that the output of one workflow can automatically be the input for the next workflow if several metagenomic workflows are selected.

The interface shows a list of workflows with toggle switches to turn them on or off. Each workflow has an orange arrow pointing to its 'On' toggle. Below the workflows, there are input fields for 'Input Map File' and 'Input Domain File', each with an orange arrow pointing to the 'Submit' button.

ReadsQC Workflow On Off

Read-based Taxonomy Classification Workflow On Off

Select Analysis Tool(s) GOTTCHA2 x Kraken2 x Centrifuge x

Metagenome Assembly Workflow On Off

Metagenome Annotation Workflow On Off

Metagenome MAGs Workflow On Off

Input Map File (Optional) Select a file or enter a file http(s) url

Input Domain File (Optional) Select a file or enter a file http(s) url

Submit Reset

Productos

1. El enlace para 'My Projects' (Mis Proyectos) abre la lista de proyectos para ese usuario.
2. Se proporcionan enlaces (en los círculos morados) para compartir proyectos, hacerlos públicos o eliminar proyectos.
3. La columna 'Status' (Estado) muestra si el trabajo está en la fila para ser procesado (gris), enviado (morado), ejecutándose (amarillo), falló (rojo) o se completó (verde). Si un proyecto falla, un registro mostrará mensajes de error para solucionar el problema.
4. Haciendo clic en el icono a la izquierda del nombre de un proyecto abre la página de resultados de ese proyecto.

My Projects

Drag headers here to group by

Project	Type	Status	Shared	Public	Created	Updated	Actions
<input type="checkbox"/> Project	Type	Status	Shared	Public	Created	Updated	Actions
<input type="checkbox"/> ReadsQC_Test2	ReadsQC	Submitted	No	No	10/19/2021, 8:37:20 AM	10/19/2021, 8:39:00 AM	
<input type="checkbox"/> Taxonomy_test	Read-based Taxonomy Classification	Submitted	No	No	10/19/2021, 8:34:32 AM	10/19/2021, 8:39:00 AM	
<input type="checkbox"/> ReadsQC_Test	ReadsQC	Complete	No	No	10/18/2021, 11:20:43 AM	10/18/2021, 1:22:00 PM	
<input type="checkbox"/> MAGs_Test	Metagenome MAGs	Complete	No	No	10/18/2021, 10:50:59 AM	10/18/2021, 11:55:00 AM	

Sumario del Proyecto (Resultados)

La página de resumen del proyecto mostrará tres categorías. Haciendo clic en la barra o tabulación abre la información.

1. 'General' contiene la información de ejecución del proyecto.
2. 'Workflow' contiene la salida tabular/visual de los resultados.
3. 'Browser/Download Outputs' (Navegador/Descargar Salidas) contiene todos los archivos de salida disponibles para descargar. Puede haber varias carpetas.

ReadsQC_Test

Project Summary:

Description: This is a test of the ReadsQC workflow for NMDC workflows training
Owner: nmhc-edge@lanl.gov
Submission Time: Mon Oct 18 2021 11:20:43 GMT-0600
Status: Complete
Type: ReadsQC

expand | close sections

- General
- ReadsQC Result
- Browser/Download Outputs

Este ejemplo muestra los resultados de una ejecución del workflow de 'ReadsQC' que muestra el tiempo de ejecución en la tabulación 'General', los resultados del workflow del recorte y filtrado de calidad en la tabulación 'ReadsQC Results' (Resultados de ReadsQC) y los archivos disponibles para descargar (que se muestran en violeta) en la tabulación 'Browser/Download Outputs' (Navegador/Descargar Salidas).

MG-RAST

My Projects My uploads Download SRA Data Job Queue

Home Tutorials Public Projects Upload Files

WORKFLOWS

- Metagenomics
- Metatranscriptomics
- Organic Matter
- Viruses and Plasmids
- Metaproteomics

General

Workflow	Run	Status	Running Time	Start	End
ReadsQC	On	Done	03:03:03	2021-10-20 20:33:14	2021-10-20 23:36:17

"Project Configuration" : { ... }

ReadsQC Result

Input: SRR7877884-int

Reads	Status
inputReads	44,943,418
inputBases	6,741,512,700
qtrimmedReads	8,583
qtrimmedBases	8,690
qfilteredReads	200,626
qfilteredBases	29,786,796
ktrimmedReads	6,186,690
ktrimmedBases	354,478,706
kfilteredReads	100,360
kfilteredBases	14,684,762
outputReads	33,510,668
outputBases	4,868,925,674
gcPolymerRatio	0.42

Browser/Download Outputs

File	Size	Last Modified
ReadsQC		
SRR7877884-int		
filterStats2.txt	706 B	14 days ago
filterStats.json	337 B	14 days ago
filterStats.txt	287 B	14 days ago
SRR7877884-int.anqpht.fq.gz	1713.08 MB	14 days ago

Los resultados completos del pipeline Metagenómica o de la ejecución del 'Multiple Workflow' (Workflow Múltiple) muestran los resultados de cada workflow en una tabulación separada y los archivos asociados disponibles para descargar se encuentran en carpetas de workflow separadas en la tabulación 'Browser/Download Outputs' (Navegador/Descargar resultados).

Pipeline_Test

Project Summary:

Description: This is a test of the NMDC metagenome pipeline for training purposes
Owner: nmdc-edge@lanl.gov
Submission Time: Wed Oct 13 2021 16:49:56 GMT-0600
Status: Complete
Type: Metagenome Pipeline

[expand](#) | [close](#) sections

- General
- ReadsQC Result
- Read-based Taxonomy Classification Result
- Metagenome Assembly Result
- Metagenome Annotation Result
- Metagenome MAGs Result
- Browser/Download Outputs

File	Size	Last Modified
MetagenomeAnnotation		
MetagenomeAssembly		
MetagenomeMAGs		
ReadbasedAnalysis		
ReadsQC		

Como segundo ejemplo, las dos figuras siguientes muestran los resultados del workflow de ‘Read-based Taxonomy Classification’ (Clasificación de Taxonomía). El resumen incluye ‘reads’ clasificados y el número de especies identificadas para todos los clasificadores de taxonomía seleccionados. También se proporcionan los diez organismos principales identificados por cada herramienta en tres niveles taxonómicos. Las tabulaciones para cada una de las herramientas de clasificación que brindan resultados más detallados se encuentran en la sección ‘Detail’ (Detalles). Los gráficos Kronas se generan para los resultados en cada uno de los tres niveles taxonómicos para cada una de las herramientas y también se pueden encontrar en la sección ‘Detail’ (Detalles). Los archivos de todos los resultados (más que los primeros 10) y los gráficos están disponibles para descargar.

Read-based Taxonomy Classification Result

Summary

Tool	Classified Reads	Species Reads	Species
gottcha2	89,222,937	89,222,937	9
centrifuge	14,874,315	14,485,925	5,127
kraken2	30,854,417	29,421,033	2,791

Taxonomy Top 10

Species Genus Family

Tool	Level	Top1	Top2	Top3	Top4	Top5	Top6	Top7	Top8	Top9	Top10
gottcha2	species	Pseudomonas aeruginosa	Salmonella enterica	Listeria monocytogenes	Enterococcus faecalis	Lactobacillus fermentum	Bacillus subtilis	Escherichia coli	Staphylococcus aureus	Listeria phage A500	
centrifuge	species	Pseudomonas aeruginosa	Enterococcus faecalis	Bacillus subtilis	Bacillus intestinalis	Listeria monocytogenes	Lactobacillus fermentum	Pseudomonas fluorescens	Pseudomonas sp. AK6U	Salmonella enterica	
kraken2	species	Pseudomonas aeruginosa	Salmonella enterica	Bacillus subtilis	Listeria monocytogenes	Enterococcus faecalis	Lactobacillus fermentum	Escherichia coli	Staphylococcus aureus	Homo sapiens	

Detail

centrifuge gottcha2 kraken2

Species Genus Family

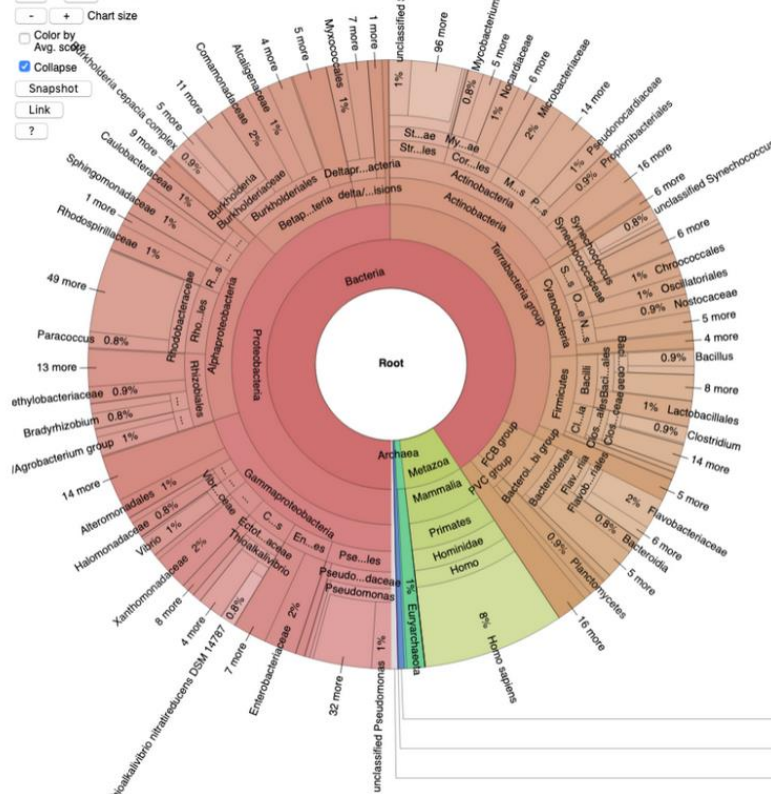
Level	Taxonomy	Reads	Abundance
species	Pseudomonas aeruginosa	7,026,567	0.001
species	Enterococcus faecalis	5,840,658	0.002
species	Bacillus subtilis	5,224,145	0
species	Bacillus intestinalis	5,080,010	0.002
species	Listeria monocytogenes	4,963,265	0.002
species	Lactobacillus fermentum	4,223,501	0.002
species	Pseudomonas fluorescens	2,735,891	0
species	Pseudomonas sp. AK6U	2,685,240	0
species	Salmonella enterica	2,353,819	0
species	Escherichia coli	776,322	0

Krona

Search:

- 30 + Max depth
- 11 + Font size
- + Chart size
☐ Color by Avg. score
☒ Collapse

Root
Magnitude: 1190936
Unassigned magnitude: 4485
Count: 9908
Unassigned: 37



[\[Krona full window view\]](#)

[Browser/Download Outputs](#)