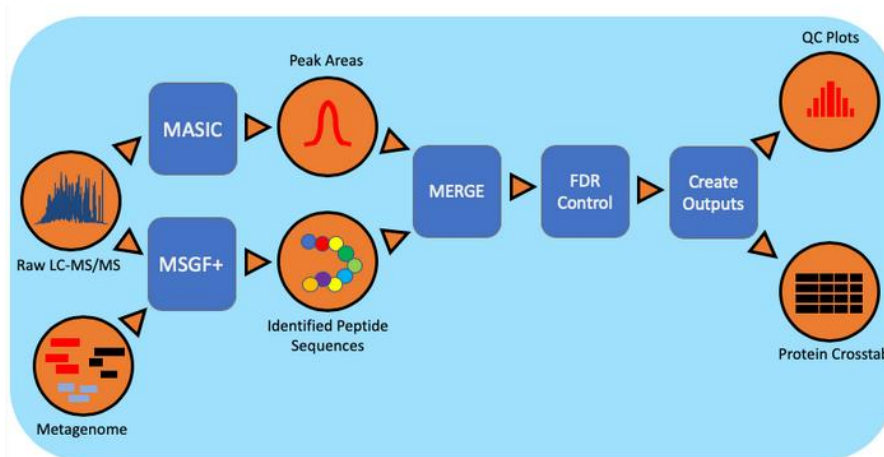


Workflow d'analyse Métabotéomique (v1.0.0)



Aperçu

Le workflow d'analyse métabotéomique comprend un traitement et analyse de données complets pour étudier les protéomes, c'est-à-dire obtenir l'identification et la caractérisation des protéines à l'aide de données MS/MS.

Exécution du Workflow

Ce workflow peut être exécuté via [NMDC EDGE](#) ou sur des ressources de calcul locales (les instructions et conditions d'installation se trouvent [ici](#))

Des didacticiels vidéo sur la façon d'exécuter chaque workflow dans NMDC EDGE sont disponibles [ici](#).

Fichiers d'entrée

Le workflow d'analyse métabotéomique nécessite xxx.

- **Formats de fichier acceptés:** .raw, xxx

Instructions détaillées

Le workflow d'analyse métabotéomique est un workflow de traitement de données complet pour l'identification et la caractérisation des protéines à l'aide de données MS/MS. Les fichiers de données générés par les instruments de spectrométrie de masse (.RAW) sont convertis en mzML, un format de données ouvert, à l'aide de MSConvert. L'identification des peptides est réalisée à l'aide de MSGF+ et des informations métagénomiques associées au format FASTA (séquences protéiques). Les informations sur l'intensité des espèces identifiées sont extraites à l'aide de MASIC et combinées avec des informations sur les protéines.

Versions des outils

- MSGFPlus (v20190628)
- Mzid-To-Tsv-Converter (v1.3.3)
- PeptideHitResultsProcessor (v1.5.7130)
- pwiz-bin-windows (x86_64-vc141-release-3_0)20149_b73158966
- MASIC (v3.0.7235)
- Sqlite-netFx-full-source (1.0.111.0)
- Conda (3-clause BSD)

Fichiers de sortie

Le tableau ci-dessous répertorie les principaux fichiers de sortie. Les principales sorties sont xxx.

Fichiers de sortie principaux	Description

Exécution du workflow Métaprotéomique dans NMDC EDGE

Sélectionner un workflow

1. Dans la catégorie Metaproteomics dans la barre de menu de gauche, sélectionnez 'Run a Single Workflow'.
2. Entrez un nom de projet unique sans espaces (les traits de soulignement conviennent).
3. Une description est facultative, mais utile.
4. Sélectionnez «Metaproteomics» dans le menu déroulant sous Workflow.

Fichiers d'entrée

Le flux de travail métaprotéomique nécessite xxx. **Formats de fichiers acceptables:** xxx.

5. Cliquez sur le bouton à droite de l'espace vide pour sélectionner le fichier brut d'entrée. Une boîte de dialogue appelée «Select a File» s'ouvrira pour permettre à l'utilisateur de trouver le fichier souhaité à partir d'un projet d'assemblage précédemment exécuté, du dossier de données public ou d'un fichier téléchargé par l'utilisateur.
6. Cliquez sur le bouton à droite de l'espace vide pour sélectionner le fichier Fasta d'entrée. Une boîte de dialogue appelée « Select a File » s'ouvrira pour permettre à l'utilisateur de trouver le fichier obtenu à partir d'un workflow d'assemblage précédemment exécuté, du dossier de données public ou d'un fichier téléchargé par l'utilisateur.
7. Cliquez sur le bouton à droite de l'espace vide pour le fichier GFF d'entrée. Une boîte appelée « Select a File » s'ouvrira pour permettre à l'utilisateur de trouver le(s) fichier(s) souhaité(s) à partir d'un projet d'annotation précédemment exécuté, du dossier de données public ou d'un fichier téléchargé par l'utilisateur.
8. Sélectionnez «True» ou « False » pour spécifier si votre fichier de spécifications de masse provient d'un instrument ThermoFisher.
9. Sélectionnez le seuil QValue souhaité pour analyser les peptides d'intérêt à l'aide de la barre coulissante.
10. Saisissez le nom de votre étude à partir de son projet de séquençage. S'il n'y en a pas, indiquez n'importe quel nom.
11. Cliquez sur 'Submit' lorsque vous êtes prêt à exécuter le workflow.

Fichiers de sortie

La section « General » indique quel workflow et quels outils ont été exécutés, ainsi que les informations d'exécution.

La section « Metaproteome Result » inclus xxx.

La section « Browser/Download » fournit des fichiers de sortie disponibles au téléchargement. xxx.