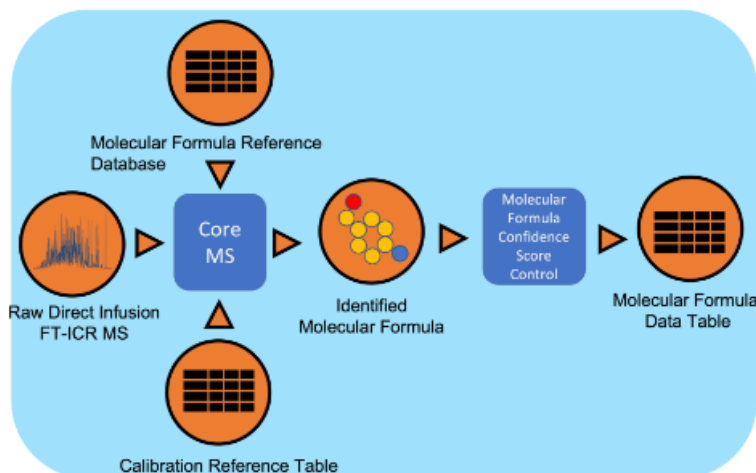


Workflow d'analyse de Matière Organique Naturelle (v4.1.5)



Aperçu

Ce workflow analyse des données de spectrométrie de masse FTICR collectées à partir d'extraits organiques pour déterminer les formules moléculaires des biomolécules organiques naturelles présentes dans l'échantillon.

Exécution du Workflow

Actuellement, 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

Les fichiers d'entrée de ce workflow sont la sortie d'une expérience massSpec (une liste massSpec) qui comprend au minimum deux colonnes de données : un ratio masse/charge (m/z) et une colonne d'intensité du signal (Intensity). Un fichier d'étalonnage de références de formules moléculaires est également requis lors de l'exécution du workflow via la ligne de commande (ce fichier d'étalonnage est intégré à NMDC EDGE).

- **Formats de fichiers acceptés:** .raw, .tsv, .csv, .xlsx

Instructions détaillées

Les données de spectrométrie de masse à résonance cyclotronique ionique à transformation de Fourier à infusion directe (DI FTICR-MS) subissent un traitement du signal et une attribution de formule moléculaire en tirant parti du cadre CoreMS d'EMSL. Les données brutes temporelles sont transformées en m/z à l'aide de la transformée de Fourier et de l'équation de Ledford. Les données sont débruitées, suivies d'une sélection de pics, d'un réétalonnage à l'aide d'une liste de référence externe de composés connus et d'une recherche dans une bibliothèque de formules moléculaires générées dynamiquement avec un espace de recherche moléculaire défini. Les scores de confiance pour tous les candidats de formule moléculaire sont calculés sur la base de la précision de la masse et de la structure isotopique fine, et le meilleur candidat est attribué sur la base du score le plus élevé. Ce workflow ne fonctionnera pas de manière aussi fiable avec les données de spectrométrie de masse Orbitrap.

Versions des outils

- CoreMS (2-clause BSD)

- Click (BSD 3-Clause “New” or “Revised” License)

Fichiers de sortie

Le fichier de sortie principal est la table de formules moléculaires (dans un fichier .csv).

Fichiers de sortie principaux Description

INPUT_NAME.csv	m/z, Hauteur du pic, Surface du pic, Formule moléculaire, Score, etc.
----------------	---

Exécution du workflow d'analyse de Matière Organique Naturelle dans NMDC EDGE

Sélectionner un workflow

1. Dans la catégorie « Organic Matter » 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 sont possibles).
3. Une description est facultative, mais utile.
4. Sélectionnez « EnviroMS » dans le menu déroulant sous Workflow.

Organic Matter | Run Single Workflow

Run a Single Workflow

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

3 Description (optional)

Workflow

Select a Workflow...

4 EnviroMS

Submit

1 Run a Single Workflow

Fichiers d'entrée

Le fichier d'entrée du workflow d'analyse de Matière Organique Naturelle est la sortie d'une expérience MassSpec (une liste MassSpec) qui comprend au minimum deux colonnes de données : un ratio masse/charge (m/z) et une colonne d'intensité du signal (Intensity). **Formats de fichier acceptés:** .tsv, .csv, .raw, .xlsx

5. Cliquez sur le bouton à droite du champ de saisie des données pour sélectionner le fichier de données pour l'analyse. (S'il y a des fichiers séparés, il y aura deux espaces de saisie.) Une boîte de dialogue appelée « Select a File » s'ouvrira pour permettre à l'utilisateur de trouver le(s) fichier(s) souhaité(s) à partir de projets précédemment exécutés, du dossier de données public ou des fichiers téléchargés. par l'utilisateur.

6. Des fichiers de données supplémentaires peuvent être ajoutés avec le bouton « Add file ».

7. Enfin, cliquez sur « Submit ».

The screenshot shows the 'Input' section of a web application. At the top, there is a header 'Input' with a chevron icon. Below it, the text 'Input Data' is followed by a help icon and 'mass list file(s)'. To the right of this text is a blue 'Add file' button with an orange arrow labeled '6' pointing to it. Below the 'Add file' button is a text input field with the placeholder text 'Select a file or enter a file http(s) url'. To the right of the input field is a circular menu icon with three horizontal lines, with an orange arrow labeled '5' pointing to it. Below the input field is a blue 'Remove' button. At the bottom of the section is a large blue 'Submit' button with an orange arrow labeled '7' pointing to it.

Fichiers de sortie

La section « General » indique quel workflow et quels outils ont été exécutés, ainsi que les informations d'exécution. Les paramètres du projet sont disponibles en cliquant sur les trois points.

expand | close sections

Workflow	Run	Status	Running Time	Start	End
EnviroMS	On	Done	00:10:55	2021-10-20 17:03:08	2021-10-20 17:14:03

► "Project Configuration" : { . . . }

La section « Browser/Download » fournit des fichiers de sortie disponibles au téléchargement. Le fichier de sortie principal est la table de formules moléculaires (.csv file) qui contient les ratios m/z , hauteur du pic, surface du pic, formule moléculaire, type d'ion, et score.

File	Size	Last Modified
EnviroMS		
20190709_WK_CADY_Auto_S16_H1_Post_O5_1_01_36		
dbe_vs_c		
ms_class		
mz_error_class		
van_krevelen		
20190709_WK_CADY_Auto_S16_H1_Post_O5_1_01_36.csv	4.93 MB	6 days ago
20190709_WK_CADY_Auto_S16_H1_Post_O5_1_01_36.json	9 kB	6 days ago
assigned_unassigned.png	13 kB	6 days ago
mz_error.png	73 kB	6 days ago

