



NEXTGENDEM

Una plataforma web para la Gestión Científica de la Biodiversidad

GUÍA RÁPIDA



MAC 2014-2020
Cooperación Territorial

Interreg

Fondo Europeo de Desarrollo Regional



EUROPEAN UNION

ÍNDICE

1_ A MODO DE INTRODUCCIÓN

2_ CÓMO ACCEDER

3_ CÓMO VER SECUENCIAS

4_ CÓMO LANZAR EL PROCESO BLAST

5_ CÓMO VER CAPAS GEOGRÁFICAS

6_ CÓMO ABRIR EL ENTORNO AVANZADO JUPYTER



2.1_ Configura tu perfil
2.2_ La interfaz



3.1_ Listas-Detalles



5.1_ Visor geográfico
5.2_ Cómo se dibuja un mapa

1_ A MODO DE INTRODUCCIÓN



NEXTGENDEM



1_ A MODO DE INTRODUCCIÓN

NEXTGENDEM (<https://sys.nextgendem.eu>), es una plataforma web que sirve de archivo, procesador y visor de datos y cuyo objetivo principal es ayudar en la gestión científica de la flora terrestre. Un sistema que, integrando distintas aplicaciones o programas y mediante supercomputación, es capaz de aprovechar los datos moleculares y geográficos para facilitar la toma de decisiones informada en el ámbito de la conservación de la biodiversidad.

Este sistema innovador está diseñado principalmente para profesionales de la biología y tomadores de decisiones, pero también para estudiantes, profesorado o personas interesadas en la biodiversidad, que buscan aprovechar el poder de los indicadores de diversidad filogenética y otros indicadores ecológicos a nivel geográfico para guiar el proceso decisorio.

Al aprovechar los datos bióticos y abióticos, el sistema NEXTGENDEM tiene como objetivo facilitar la toma de decisiones informadas en el ámbito de la conservación de la biodiversidad y, por lo tanto, en el desarrollo sostenible (principalmente, el objetivo 15 de los ODS, que habla de "proteger, restaurar y promover el uso sostenible de los ecosistemas terrestres, gestionar de forma sostenible bosques, combatir la desertificación y detener e invertir la degradación de la tierra y detener la pérdida de biodiversidad").

NEXTGENDEM cuenta con un marco que proporciona capacidades generalistas, como archivado, control de versiones, anotaciones, control de acceso, etc. que pueden volverlo reutilizable en otras áreas relacionadas con la información molecular o geográfica y su procesamiento.

La interfaz del sistema NEXTGENDEM está diseñada para que las personas usuarias puedan navegar a través de los navegadores en busca de conjuntos de elementos (secuencias, alineamientos de secuencias, capas geográficas...), acceder a formularios detallados y emplear visualizadores especializados adaptados a diferentes tipos de datos. Esto permite explorar, analizar e interpretar de manera eficiente la gran cantidad de información disponible en el sistema. NEXTGENDEM ofrece dos formas de uso. Una es la interfaz de usuario (explicada en este documento), y la otra es Biond, para usar el servidor desde scripts (Python o R) y que no es objeto de la presente Guía.

● **2_** CÓMO ACCEDER

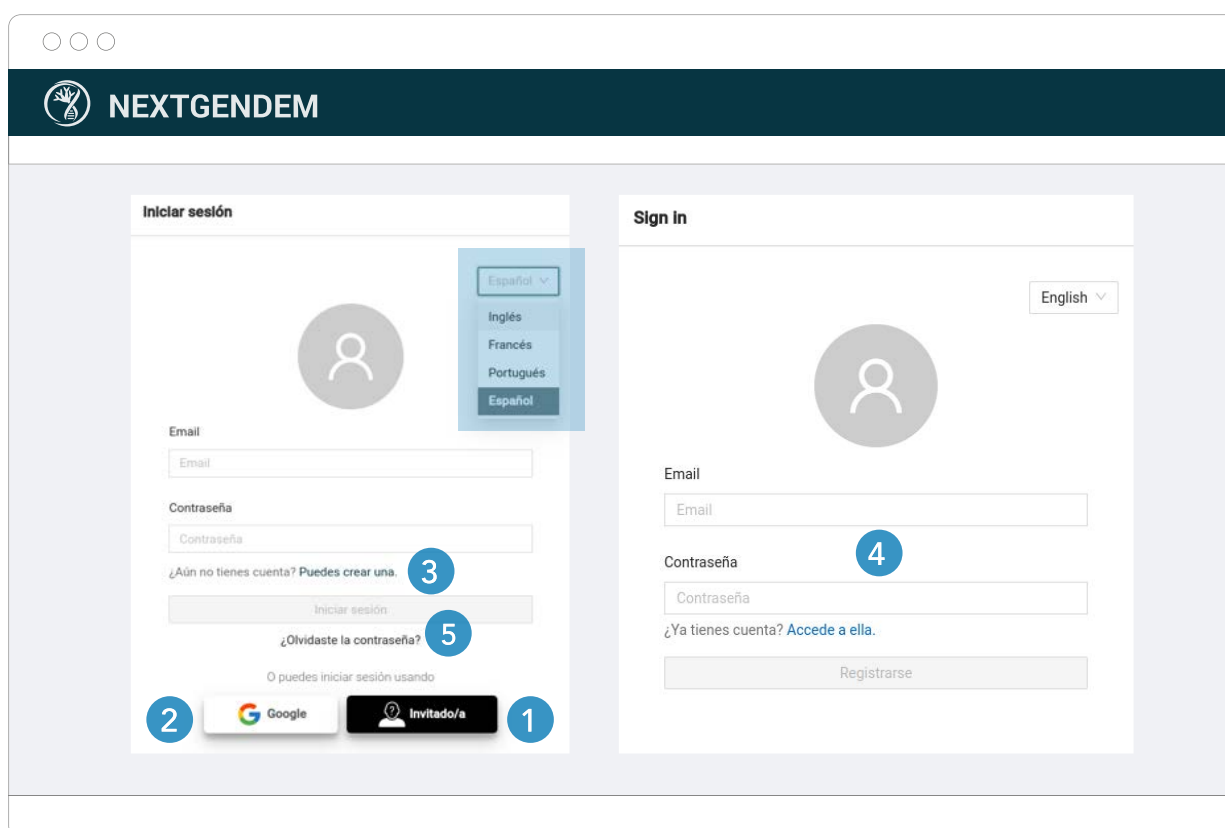


NEXTGENDEM

2_ CÓMO ACCEDER

Cuando una persona abre la aplicación el sistema solicita una identificación (para determinar el nivel de acceso a funciones y datos). En este caso, se muestra un cuadro de diálogo como el siguiente:

Primero seleccione un idioma. Luego están disponibles diferentes opciones para iniciar sesión:



1. Inicie sesión como **invitado/a**.

Al hacer clic en el botón Invitado/a, no se necesitan credenciales ni creación previa de cuenta. Puede ser una buena opción para explorar las funciones y datos abiertos al público.

2. Inicie sesión con la **cuenta de Google**.

Seleccionando el botón de Google deberá seguir las indicaciones.

3. Inicie sesión registrando (**crear**) una cuenta.

Para iniciar sesión con un Email y Contraseña, debe seleccionar "Puedes crear una", donde después de rellenar el formulario de registro, se enviará un correo de confirmación para activar la cuenta e iniciar sesión con la opción 4.

4. **Inicie sesión** con una cuenta ya existente.

Si ya dispone de un correo electrónico y contraseña de usuario, rellene los campos "Correo electrónico" y "Contraseña", para luego seleccionar "Iniciar sesión".

5. También puede **recuperar/recordar su contraseña** activando la opción de ("Olvidó su contraseña").

2_ CÓMO ACCEDER

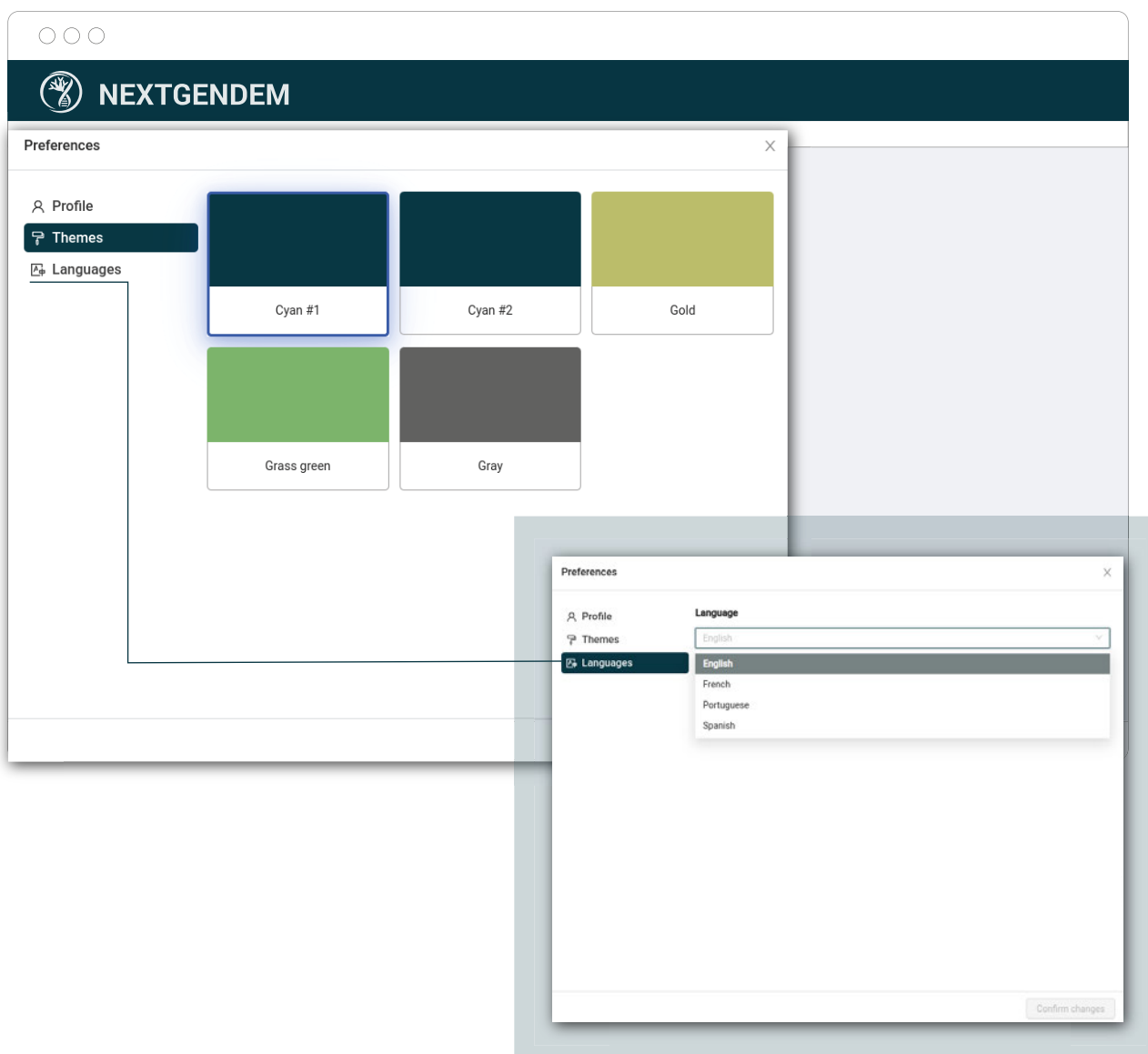
2.1 Configura tu perfil

Una vez que un usuario inicia sesión, es posible configurar los datos de perfil, tema de color, idioma y claves API (esto último, es solo para usuarios que usen el paquete API* Python o R).

Primero haga clic en el icono de Usuario, en la parte superior derecha de la ventana y posteriormente en Preferencias para que se despliegue una ventana con tres opciones; perfil, temas e idiomas.

Para cambiar el color de la interfaz, haga clic en "Temas" y seleccione la combinación preferida.

Para cambiar el idioma seleccione "Idiomas" y elige entre español, portugués, inglés o francés (el idioma cambia inmediatamente). El sistema integra herramientas internacionales como visores y diferentes programas de procesamiento de datos que no serán traducidas y aparecerán siempre en inglés.



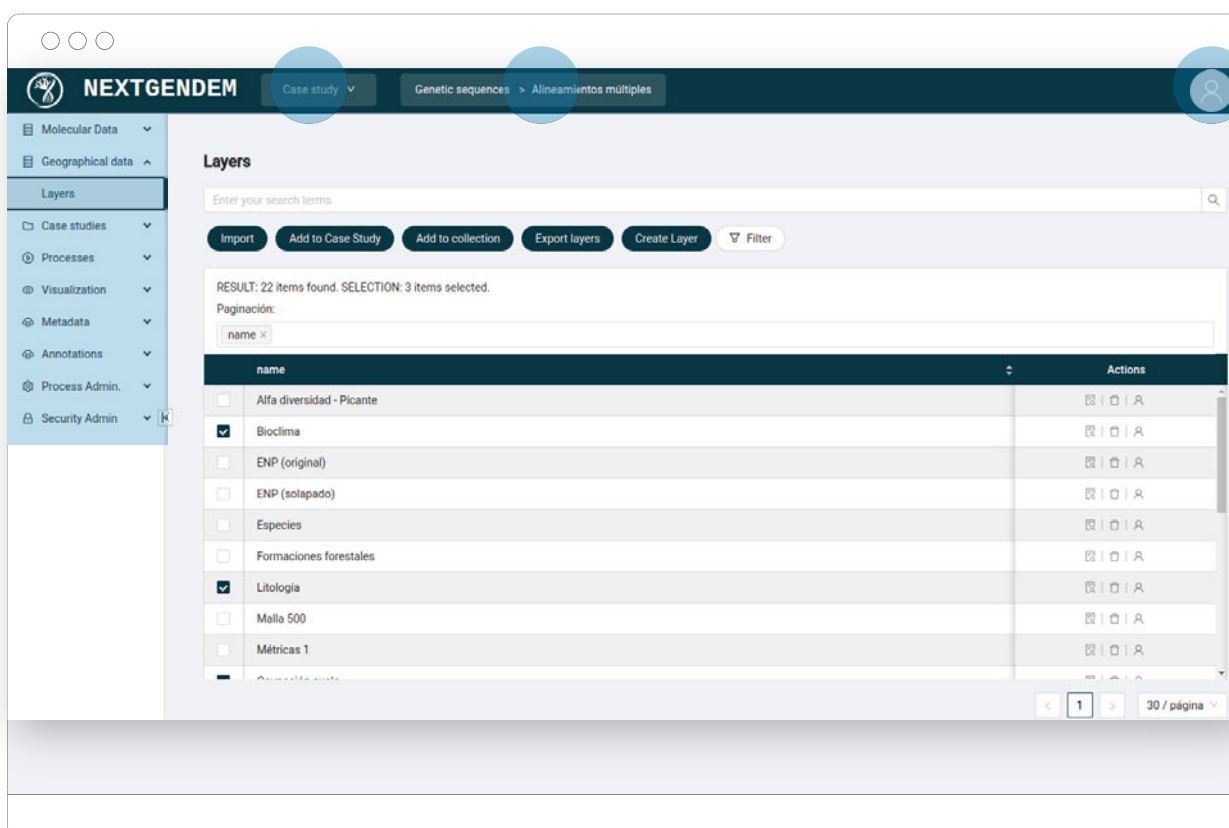
*Si quieres saber más sobre los roles API (solo los administradores pueden hacer esto), dirígete al Manual de Usuario, apartado 4.1.

2_ CÓMO ACCEDER

2.2 La Interfaz

La interfaz gráfica de usuario está diseñada para proporcionar una experiencia de interacción fácil e intuitiva con el sistema. El diseño general consta de varios componentes clave que facilitan la navegación y el acceso a las características y funcionalidades.

En la parte superior de la interfaz se encuentra la **barra superior** que muestra, de izquierda a derecha, el **logotipo** del proyecto NEXTGENDEM sirviendo como identificador visual. Junto a él, tiene un **selector de estudios** de caso que permite a los usuarios establecer el contexto de trabajo para sus búsquedas y operaciones. Esto ayuda a los usuarios a concentrarse en datos y tareas específicos relevantes para su proyecto o estudio actual. A la derecha del selector de estudios de caso, tiene un control de **migas de pan** que permite volver a las pantallas anteriores.



En la esquina derecha de la barra superior, los usuarios pueden encontrar un ícono de **avatar** que brinda acceso a la sesión y las preferencias del usuario registrado. Al hacer clic en el avatar, los usuarios pueden administrar la configuración de su cuenta, personalizar su perfil y realizar otras acciones relacionadas. Consulte la sección anterior.

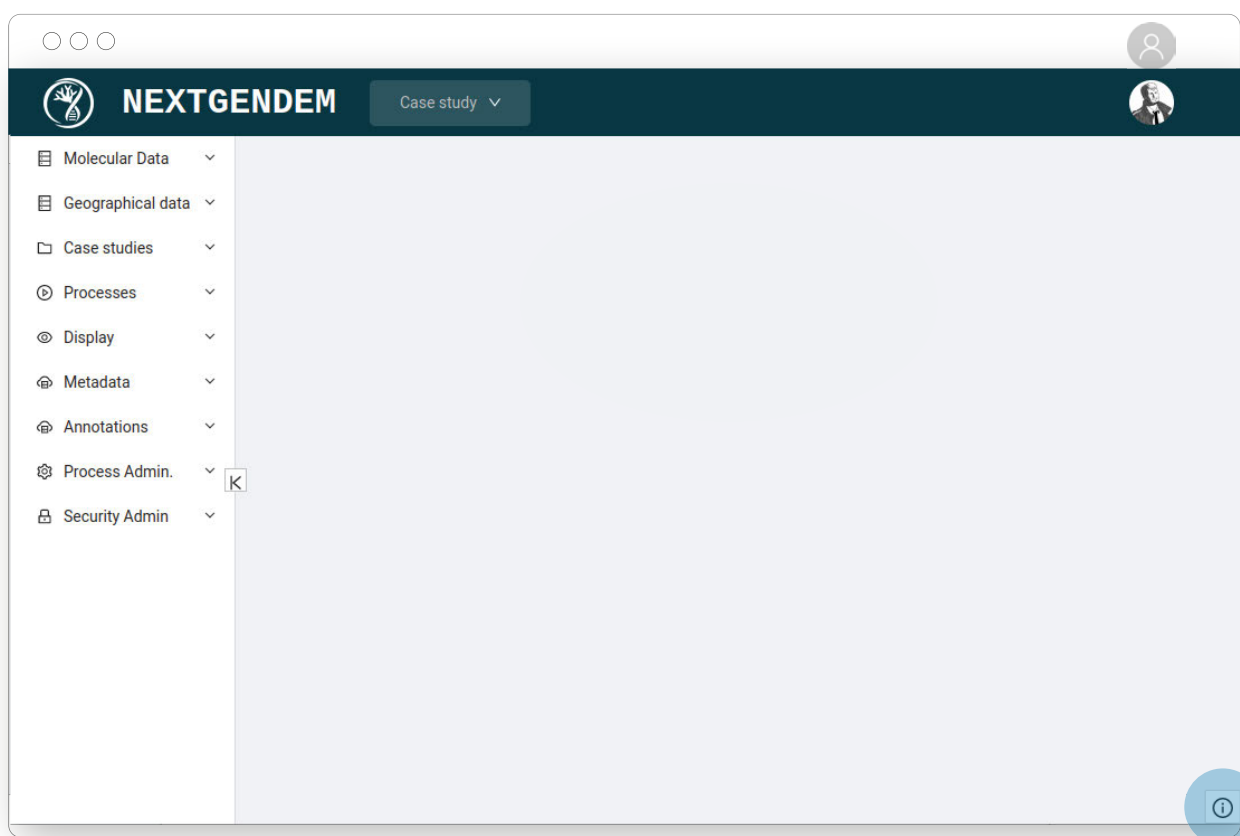
En el lado lateral izquierda de la pantalla, en forma de columna hay un espacio dedicado al **menú de opciones** donde horizontalmente se agrupan las categorías funcionales. Esta columna lateral sirve como centro de navegación, lo que permite a los usuarios navegar fácilmente a través de diferentes pantallas y secciones del sistema.

2_ CÓMO ACCEDER

2.2 La Interfaz

El menú está organizado en categorías siguiendo como lógica, la separación de datos moleculares y geográficos, luego otras etapas como archivo, procesamiento, visualización, administración, etc. Esta estructura ayuda a los usuarios a ubicar y acceder rápidamente a las funcionalidades específicas que necesitan.

En la esquina inferior derecha de la interfaz, hay un pequeño **ícono de exclamación** con una insignia que indica la **cantidad de notificaciones**. Los usuarios pueden hacer clic en este icono para mostrar la tabla con el registro de mensajes recientes. Esta tabla o ventana de notificaciones, alertas o mensajes relevantes, garantiza que los usuarios estén informados sobre los eventos o actualizaciones importantes del sistema.



Por último, la vista del componente principal utiliza el centro de la interfaz, ocupando la mayor cantidad de espacio posible en la pantalla. Esta área está dedicada a mostrar la pantalla actual, donde se activa la funcionalidad de la aplicación. Está diseñado para proporcionar un espacio de trabajo claro y enfocado donde los usuarios pueden interactuar con datos moleculares y geográficos, realizar visualizaciones, acceder a procesos del sistema y realizar otras tareas específicas de sus flujos de trabajo.

Al organizar la interfaz gráfica de usuario de esta manera, se pretende mejorar la productividad del usuario, simplificar la navegación y brindar una experiencia agradable a la vista que facilite la interacción eficiente con el sistema.

3_ CÓMO VER SECUENCIAS



NEXTGENDEM

3_ CÓMO VER SECUENCIAS

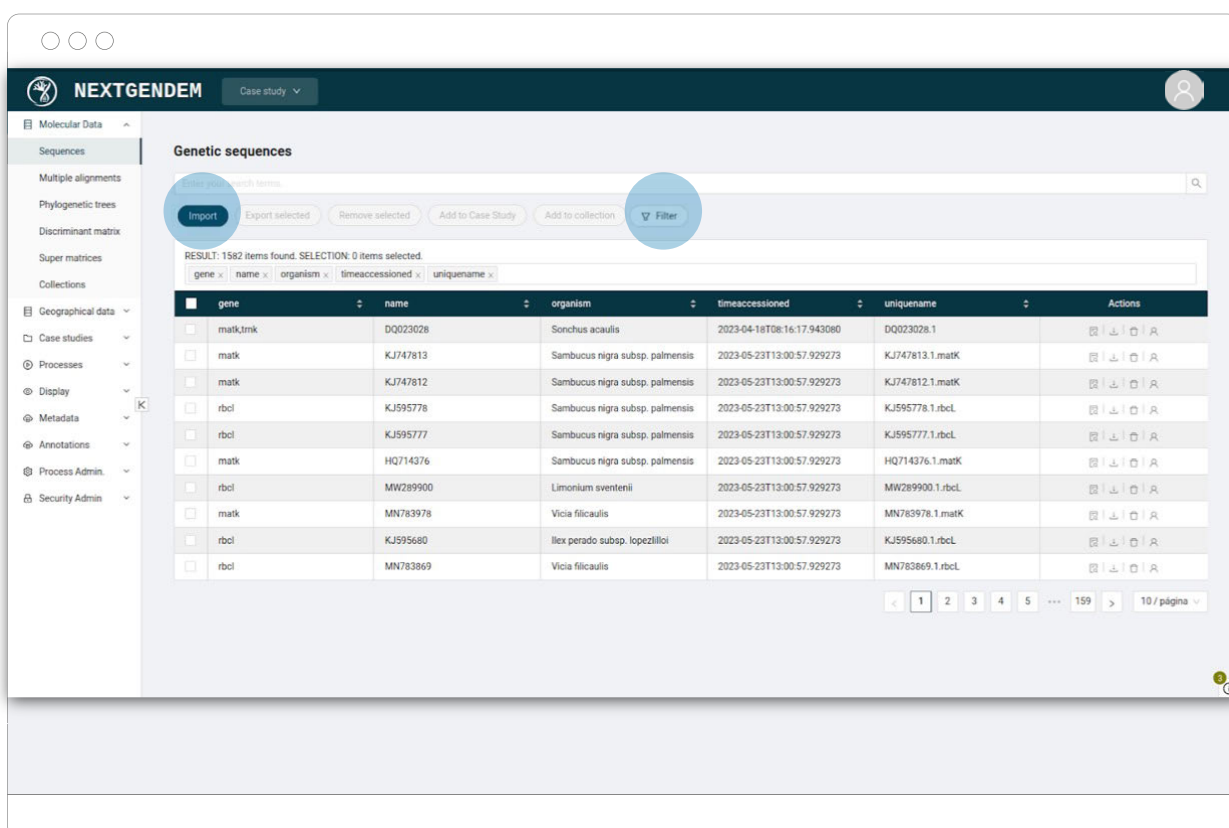
La interfaz de usuario del sistema NEXTGENDEM brinda a los usuarios acceso a un conjunto amplio de información con distinta tipología y características, que abarcan casi 100 pantallas diferentes. Para establecer una experiencia coherente y fácil de usar, se han aplicado patrones específicos en todo el sistema que proporciona una forma uniforme de organizar los diversos elementos de la interfaz gráfica de usuario (GUI). En el resto de la sección se enumeran estos patrones en detalle. En este apartado vamos a ver solo cómo hacerlo a través de listado y detalle. Para ver más posibilidades, consultar el Manual de Uso.

A) LISTAS-DETALLES

Para permitir que los usuarios vean y administren los datos almacenados en el sistema, hay dos vistas importantes, una vista de lista para enumerar todos los objetos de un tipo con los que el usuario puede operar y una vista detallada de un objeto para mostrar todos los datos sobre un objeto seleccionado de la lista, y modificarlo si es preciso.

- **LISTADO**

La vista de lista es un importante componente de la interfaz gráfica de usuario que permite a los usuarios interactuar con los datos de forma estructurada. Dependiendo de la pantalla de **objetos de datos específicos** (secuencias de datos geográficos) a la que se acceda, la vista de lista puede variar ligeramente en su configuración, pero mantiene un conjunto fijo de características para facilitar la exploración y manipulación de datos.



The screenshot displays the 'Genetic sequences' page in the NEXTGENDEM system. The interface includes a sidebar with navigation options like 'Molecular Data', 'Sequences', and 'Geographical data'. The main content area features a search bar, a table of sequence data, and a pagination control at the bottom right. The table lists various sequences with columns for gene, name, organism, timeaccessioned, and unique name.

gene	name	organism	timeaccessioned	unique name	Actions
matk,matk	DQ023028	Sonchus oleraceus	2023-04-18T08:16:17.943080	DQ023028.1	[Icons]
matk	KJ747813	Sambucus nigra subsp. palmensis	2023-05-23T13:00:57.929273	KJ747813.1.matK	[Icons]
matk	KJ747812	Sambucus nigra subsp. palmensis	2023-05-23T13:00:57.929273	KJ747812.1.matK	[Icons]
rbcl	KJ595778	Sambucus nigra subsp. palmensis	2023-05-23T13:00:57.929273	KJ595778.1.rbcl	[Icons]
rbcl	KJ595777	Sambucus nigra subsp. palmensis	2023-05-23T13:00:57.929273	KJ595777.1.rbcl	[Icons]
matk	HQ714376	Sambucus nigra subsp. palmensis	2023-05-23T13:00:57.929273	HQ714376.1.matK	[Icons]
rbcl	MW289900	Limonium sventenii	2023-05-23T13:00:57.929273	MW289900.1.rbcl	[Icons]
matk	MN783978	Vicia ficuifolia	2023-05-23T13:00:57.929273	MN783978.1.matK	[Icons]
rbcl	KJ595680	Ilex perado subsp. lopezilloi	2023-05-23T13:00:57.929273	KJ595680.1.rbcl	[Icons]
rbcl	MN783869	Vicia ficuifolia	2023-05-23T13:00:57.929273	MN783869.1.rbcl	[Icons]

3_ CÓMO VER SECUENCIAS

En la parte superior de la vista, los usuarios encontrarán una **barra de búsqueda** para realizar búsquedas de **texto completo** dentro de los datos mostrados, lo que facilita la localización de información específica de interés. Los usuarios pueden ingresar palabras clave o términos de búsqueda, y la tabla mostrará los resultados coincidentes.

Debajo de la barra de búsqueda, hay un grupo de botones que brindan algunas operaciones y opciones de navegación. Estos botones permiten a los usuarios realizar acciones como ir a la pantalla de **importar, exportar y eliminar objetos de datos seleccionados**, o incluir los seleccionados en estudios de casos o colecciones, y acceder a la **ventana de filtro de búsqueda**, que proporciona una forma alternativa de filtrar la lista. Esto es, utilizando atributos o características cuyos posibles valores se conocen, en lugar de una búsqueda general, así se facilita la obtención del resultado deseado.

La pieza central de la vista es la tabla paginada, que ocupa la mayor parte del espacio de la vista. En el encabezado de la tabla, los usuarios pueden ver el recuento de resultados coincidentes y el recuento de filas seleccionadas, lo que brinda una descripción general y rápida de los datos mostrados. Además, hay disponible un selector de columnas que permite a los usuarios mostrar, ocultar y ordenar columnas según sus preferencias.

La tabla muestra los resultados de la búsqueda en un formato tabulado y en el que cada fila representa un registro distinto. La primera columna de cada fila incluye una casilla de verificación para facilitar la selección, lo que permite a los usuarios realizar acciones masivas en varias filas. Las columnas restantes muestran los campos de datos relevantes en función de las columnas seleccionadas, lo que proporciona una vista completa de los datos. La última columna de cada fila incluye pequeños botones o iconos que permiten a los usuarios realizar acciones individuales, como exportar, eliminar o editar permisos para una fila específica.

- **DETALLE**

La vista detallada única es un tipo de pantalla que proporciona una visión ampliada de un elemento específico de interés dentro del sistema. Está diseñado para ofrecer información completa y para facilitar una mayor exploración e interacción con el elemento seleccionado.

En la parte superior de la vista detallada única, los usuarios encontrarán el nombre del elemento destacado como título. Esto permite a los usuarios identificar rápidamente el elemento que están viendo. Además, se proporciona un conveniente botón "Volver" en forma de flecha situado a la izquierda, concretamente a la izquierda del nombre, lo que permite a los usuarios volver fácilmente a la vista anterior.

3_ CÓMO VER SECUENCIAS

Frente al título, ubicado a la derecha, hay un botón de exportación disponible si el elemento es exportable. Este botón permite a los usuarios exportar el elemento en un formato adecuado a sus necesidades, para brindar interoperabilidad con herramientas o sistemas externos. Recuerde que algunas acciones no estarán disponibles si no se tienen los permisos adecuados.

En general, la vista detallada única brinda a los usuarios una perspectiva integral y enfocada en un elemento específico dentro del sistema. Al organizar la información en pestañas y proporcionar campos editables, objetos relacionados, anotaciones y herramientas de visualización, esta vista permite a los usuarios explorar, comprender e interactuar con el elemento seleccionado de manera estructurada y eficiente.

The screenshot displays the 'NEXTGENDEM' web interface. At the top, there is a dark blue header with the logo and the text 'NEXTGENDEM'. Below the header, a navigation bar shows 'Caso de estudio' and 'Secuencias genéticas'. A left sidebar contains a menu with categories like 'Datos moleculares', 'Datos geográficos', 'Procesos', 'Visualización', 'Metadatos', 'Anotaciones', and 'Admin'. The main content area is titled 'DQ640413.1 - Información detallada' and has tabs for 'General', 'Secuencias', 'Análisis', 'Anotaciones', and 'MSA'. The 'General' tab is selected, showing a form with the following fields: 'Id:' (value: 3), 'Nombre único:' (value: DQ640413.1), 'Organismo:' (value: Micromeria pineolens), 'Dimensión:' (value: 3462), 'Fecha de registro:' (value: 2023-02-20 11:01:49), 'Termino:' (value: sequence_feature), 'Nombre:' (value: DQ640413), 'Individuo:' (value: DQ640413), and 'Última modificación:' (value: 2023-02-24 08:39:24). A blue circle highlights the 'Exportar' button in the top right corner. At the bottom right, there are 'Cancelar' and 'Modificar' buttons.

4_ CÓMO LANZAR EL PROCESO BLAST



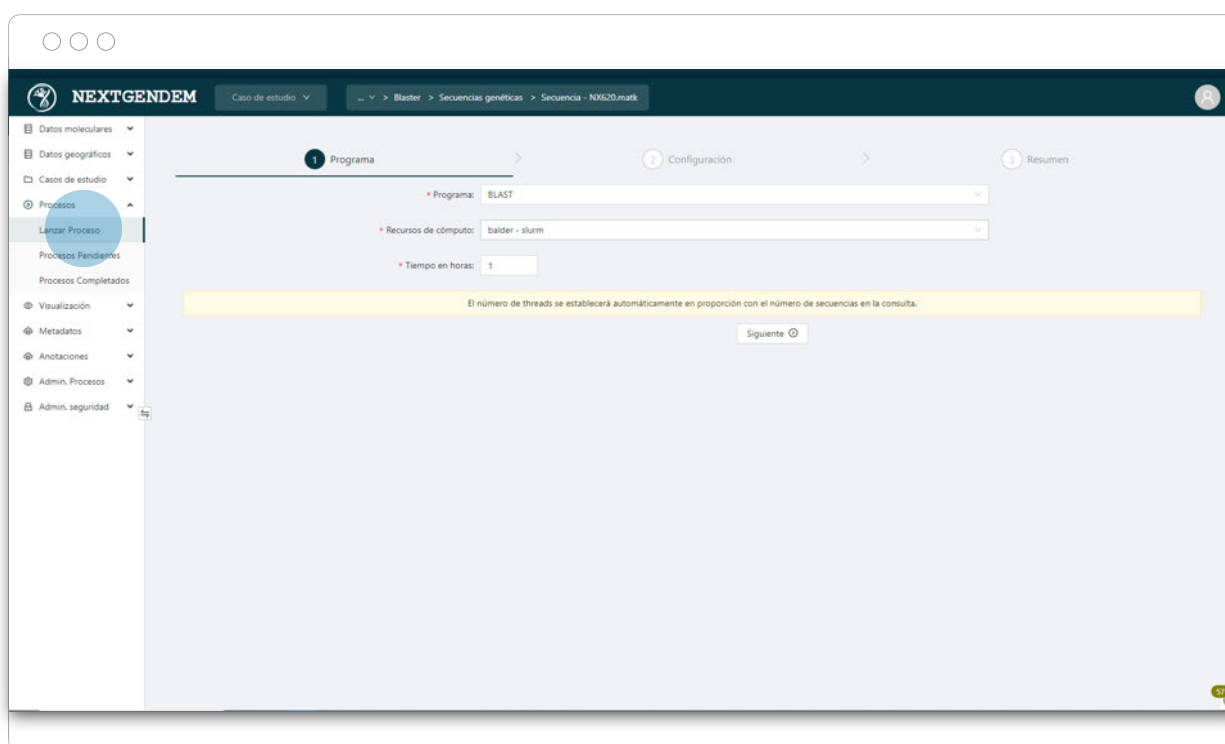
NEXTGENDEM

4_ CÓMO LANZAR EL PROCESO BLAST

BLAST (Herramienta básica de búsqueda de alineamiento local) es una herramienta de software ampliamente utilizada para comparar secuencias biológicas, como el ADN, con una gran base de datos de secuencias para identificar las más similares.

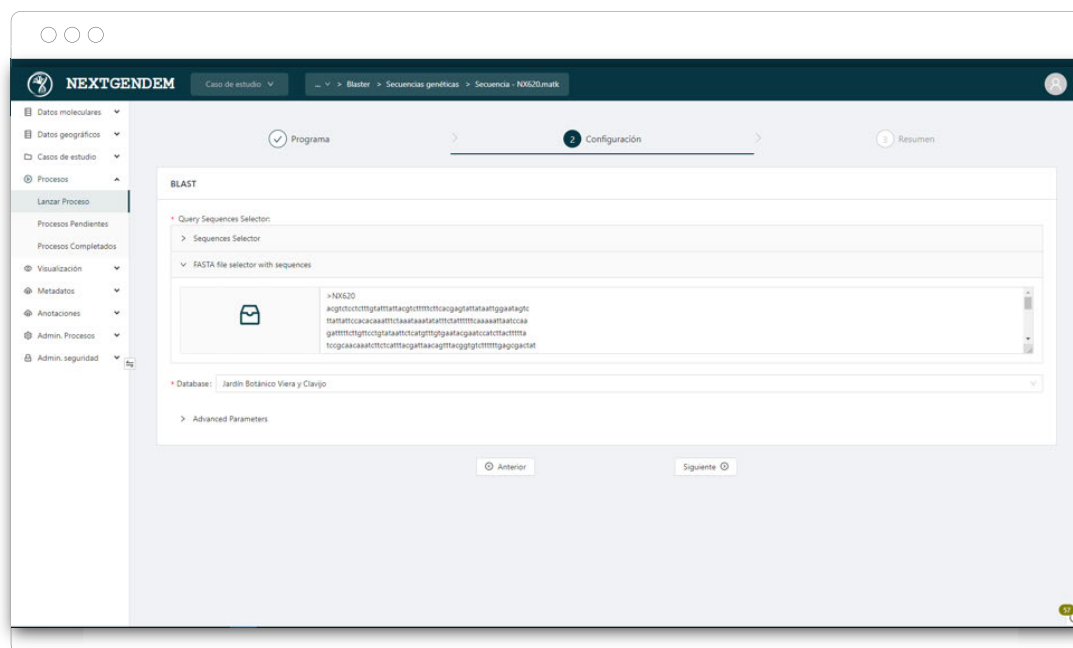
Para lanzar un proceso y aprovechar los potentes recursos computacionales que nos proporciona NEXTGENDEM deberemos de acceder al apartado "Lanzar Proceso" en el menú de navegación.

El lanzamiento de un proceso se divide en tres etapas: Programa, Configuración y Resumen. En la primera etapa se escogerá el Programa BLAST y el recurso de cómputo balder-slurm. Existen otros recursos de cómputo como los supercomputadores Teide HPC y CIPRES pero solamente estarán disponibles para los procesos más complejos. Finalmente hay que introducir "1" en el tiempo en horas, no es un problema si el proceso tarda menos pero no terminará satisfactoriamente si tarda más. Finalmente haga clic en el botón Siguiente para proceder a la siguiente etapa.

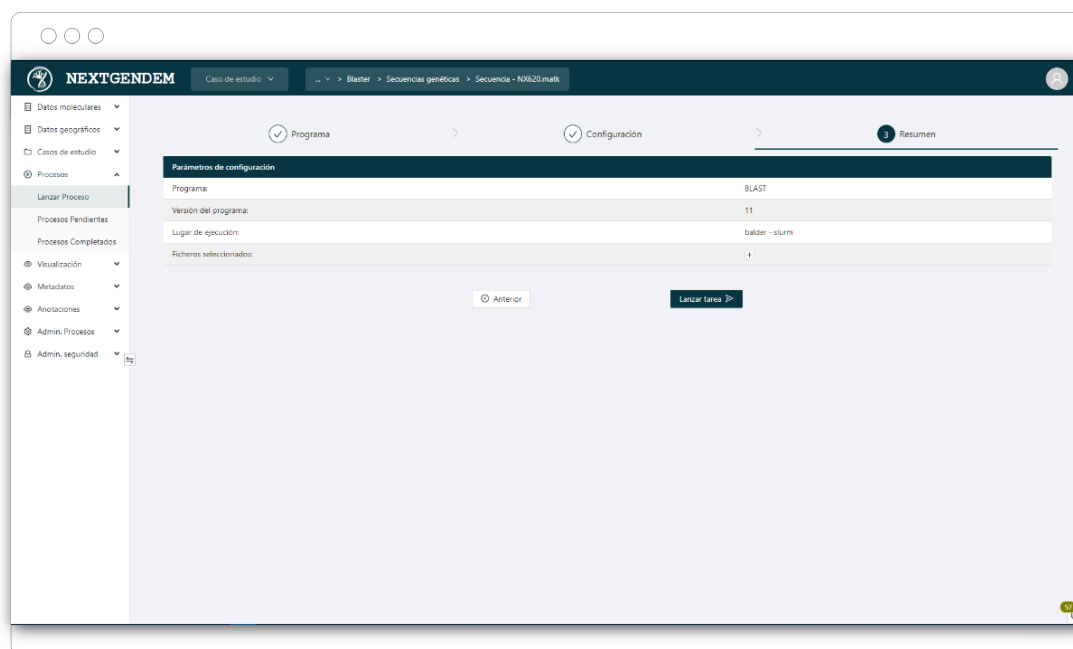


4_ CÓMO LANZAR EL PROCESO BLAST

En este segundo paso se rellenarán los campos que se necesiten para cada proceso. Para este caso, en el primer campo "Query Sequences Selector" abra el "FASTA File Selector with Sequences" y suba un fichero FASTA con secuencias de ADN de la región matK o rbcL. Deje todos los campos restantes con sus valores por defecto y clique en siguiente.

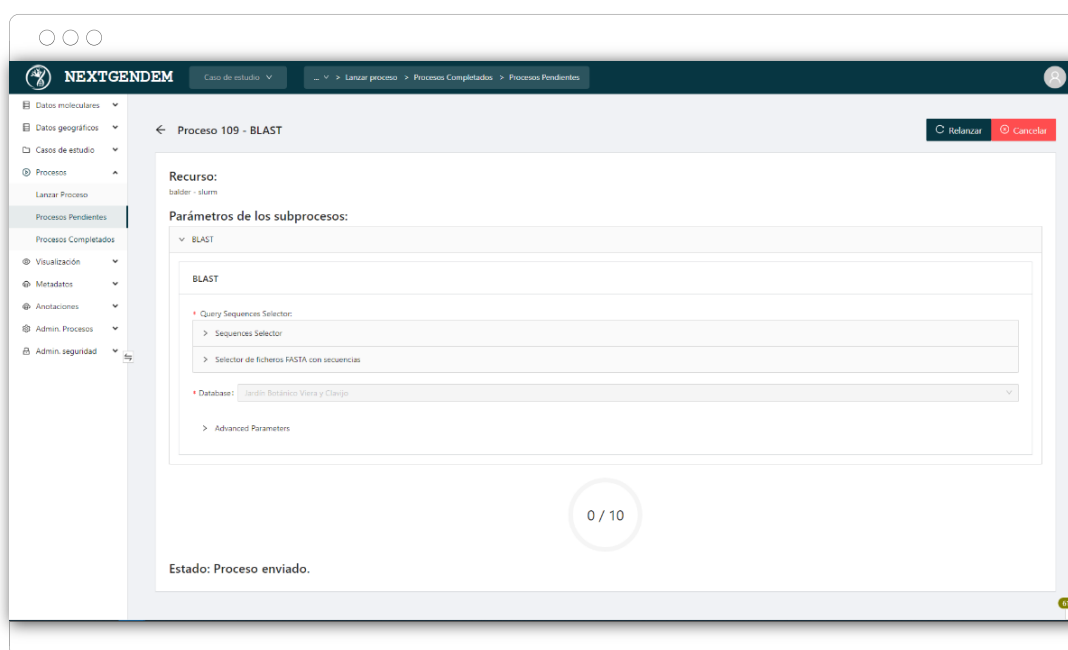


Finalmente verá una tabla con los datos más relevantes del proceso. Clique "Lanzar tarea" para ejecutar BLAST en los servidores de NEXTGENDEM. En el diálogo que aparecerá clique Aceptar

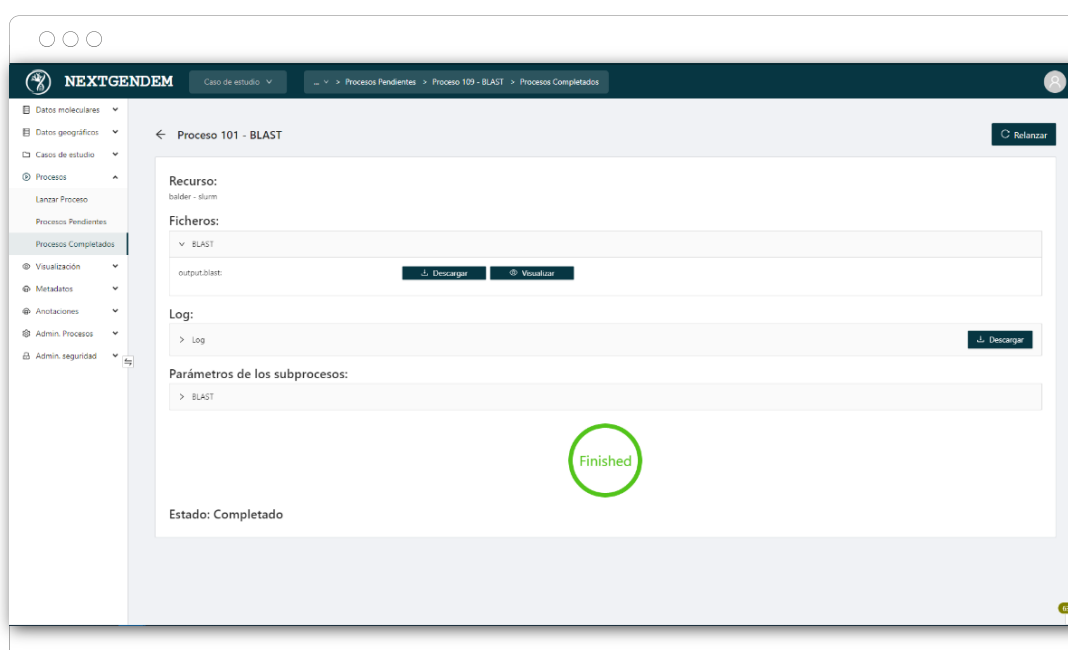


4_ CÓMO LANZAR EL PROCESO BLAST

Al lanzar el proceso irá a la pantalla del detalle del proceso en el que podrá ver su estado de ejecución además del recurso computacional (servidor) se-leccionado y los parámetros usados.



Cuando finalice el proceso aparecerá un nuevo apartado Ficheros con los resultados del proceso y otro Log en el que aparecerá el registro de cómo ha ido la ejecución del proceso.



Para finalizar puede ver los resultados de BLAST pulsando el botón Visualizar en el fichero "output.blast"

● **5**_ CÓMO VER CAPAS GEOGRÁFICAS

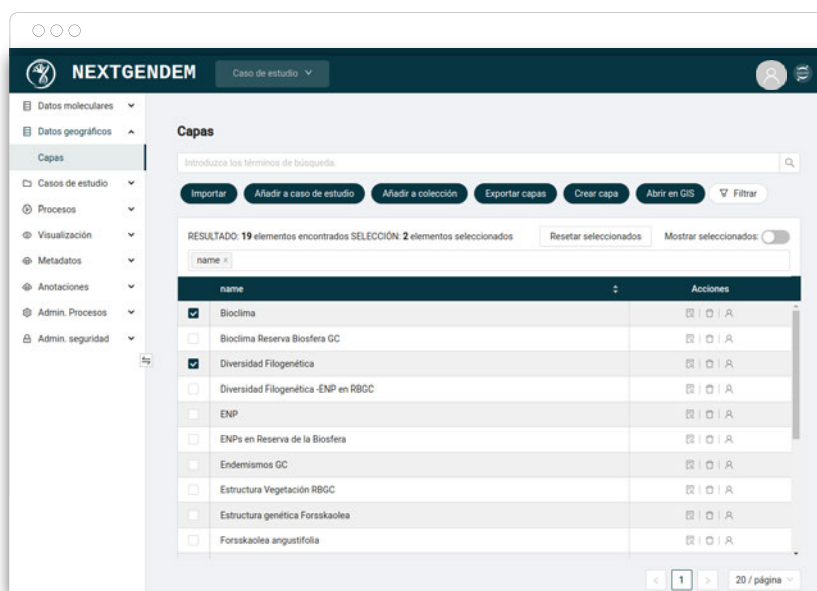


NEXTGENDEM

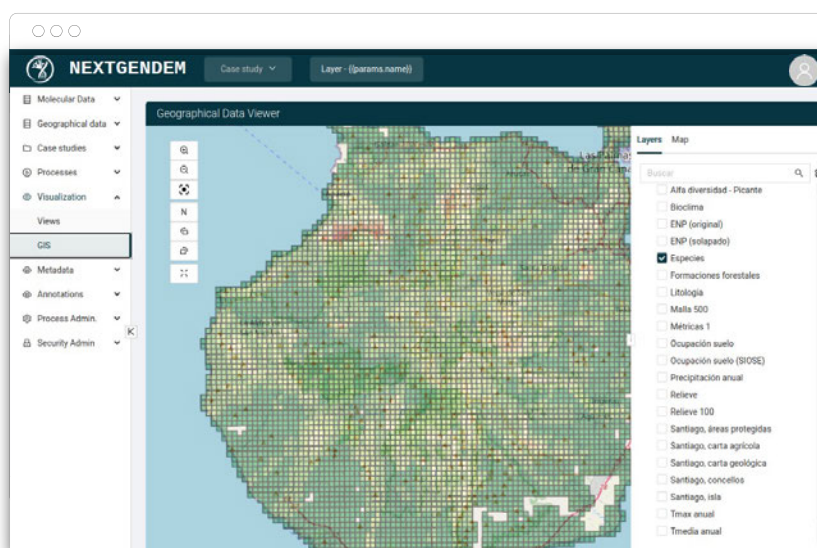
5_ CÓMO VER CAPAS GEOGRÁFICAS

Una vez que los datos se preparan con las funciones de administración de datos geográficos, el visor de datos geográficos permite explorar datos de múltiples capas y guardar mapas para uso posterior.

Para abrir un nuevo mapa, vaya al listado de capas (Datos geográficos > Capas) y seleccione las capas que desea incluir en el mapa:



Hecho esto, pulse el botón "Abrir en GIS" y se verá algo como lo siguiente



En la pestaña Mapa, si se arrastra el nombre de una capa hacia arriba o hacia abajo se modifica el orden en que se visualizan en el mapa.

También en Mapa, al pulsar sobre el nombre de un atributo es posible modificar cómo se visualiza o se filtra.

6_ CÓMO ABRIR EL ENTORNO JUPYTER




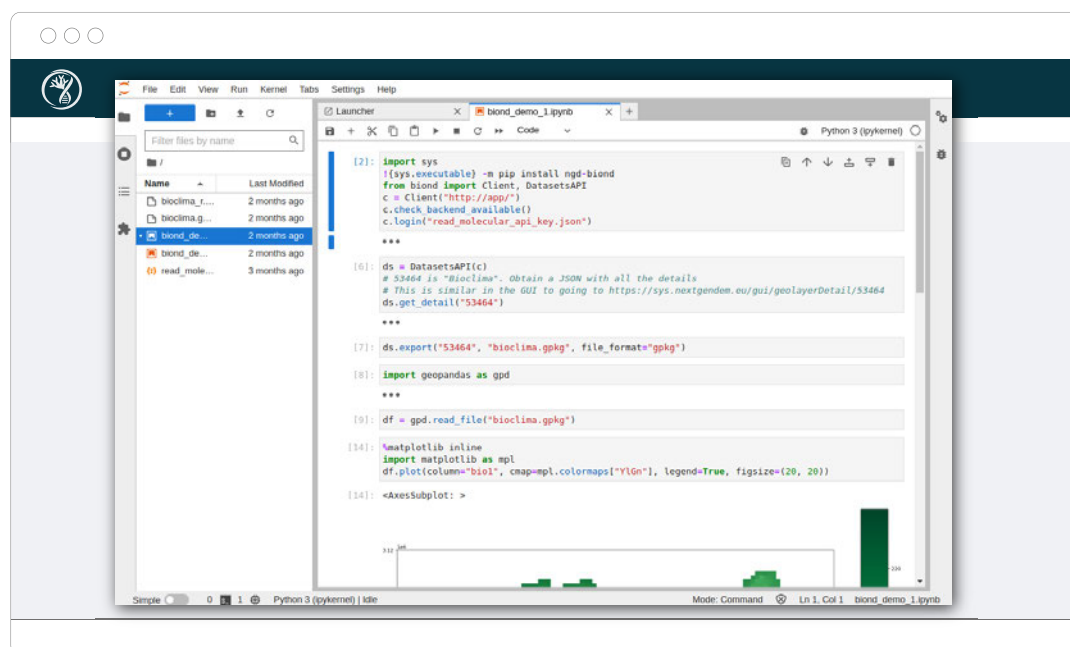
NEXTGENDEM

6_ CÓMO ABRIR EL ENTORNO JUPYTER

En NEXTGENDEM se ha habilitado el Entorno Avanzado Jupyter, de cara a posibilitar determinadas características a ciertos usuarios.

El proceso sería el siguiente:

- El administrador del sistema asigna el rol "jupyterlab" a determinado usuario.
- Cuando el usuario se identifica, a la derecha del círculo con su perfil (en la esquina superior derecha) aparecerá el logo de este sistema (de Jupyter): 
- Al hacer clic se abre en otra pestaña que muestra un botón para entrar con la cuenta Google (solo con cuenta Google en este caso, con la misma que se use para entrar en la plataforma) y es posible programar en R o en Python.
- La captura muestra el entorno con un ejemplo de uso del paquete Biond:





NEXTGENDEM



MAC 2014-2020
Cooperación Territorial

Interreg

Fondo Europeo de Desarrollo Regional



EUROPEAN UNION

www.plataforma-nextgendem.com