Biologia: Vector NTI

Krótki opis usługi

Usługa jest przeznaczona dla biologów prowadzących badania nad kolistymi DNA, w tym dla tych, którzy w swoich badaniach wykorzystują plazmidy. Oprogramowanie *Vector NTI Express* jest zintegrowanym, wielofunkcyjnym pakietem aplikacji do analizy sekwencji DNA, RNA i białek. Jest uznawany za jedno z najlepszych tego typu narzędzi dostępnych obecnie na rynku, które zapewnia dobrą integrację, zarządzanie danymi i skalowalność Oprócz tego oprogramowanie *Vector NTI Express* posiada bardzo intuicyjny interfejs użytkownika. Do najważniejszych modułów aplikacyjnych należą:

- **Vector NTI z lokalną bazą danych** - podstawowe narzędzie do analizy, adnotacji i ilustracji cząsteczek DNA/RNA/białek. Szczególnie przydatne w procesie planowania jak i dokumentacji konstruktów stosowanych w inżynierii genetycznej. Program w sposób łatwy i przejrzysty ułatwia również zarządzanie posiadanymi oligonukleotydami, enzymami, markerami wielkości DNA lub danymi dotyczącymi analiz bioinformatycznych.
- **ContigExpress** - aplikacja do analizy jakościowej wyników sekwencjonowania DNA, usuwanie sekwencji wektora, składanie kilku sekwencji DNA w contig, wykrywanie w sekwencji polimorfizmów i mutacji.
- **BioAnnotator** - narzędzie do analiz fizykochemicznych sekwencji DNA i białek jak również do mapowania i adnotacji sekwencji białek przy wykorzystaniu motywów odnalezionych w bazach danych m.in. Pfam, Prosite.
- **AlignX** - przyrównywanie globalne sekwencji DNA lub sekwencji białkowych oraz tworzenie kladogramów i identyfikacja powtórzeń.
- **GenomBench** - wizualizacja i analiza obszernych fragmentów genomowego DNA pochodzących z serwerów DAS.

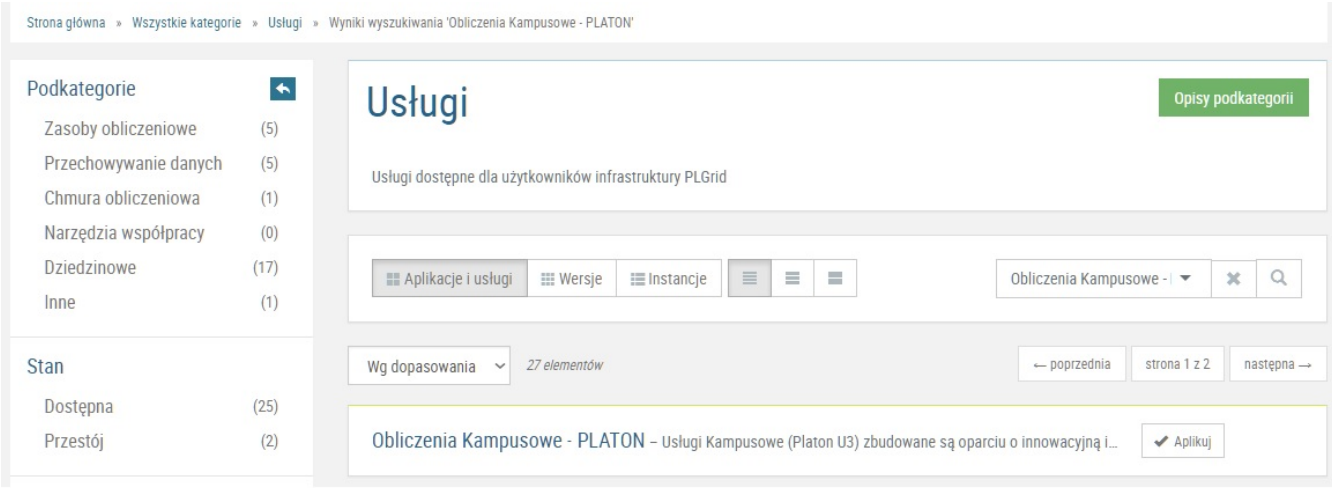
Ponadto oprogramowanie umożliwia analizę wyników standardowego sekwencjonowania DNA jak i pochodzących z nowych technologii sekwencjonowania (NGS) takich platform jak Ion Torrent PGM™, SOLiD® i Illumina® HiSeq®

Aktywowanie usługi

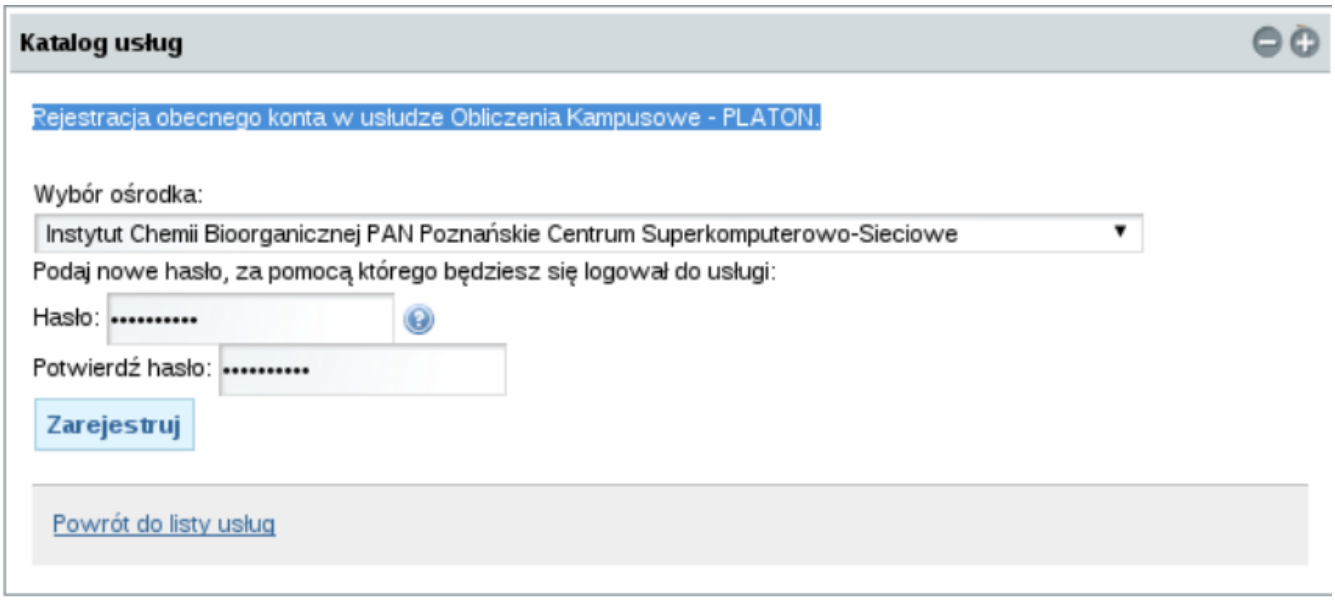
Aby skorzystać z usługi Vector NTI, należy mieć aktywne konto w infrastrukturze PLGrid.

Do usługi Vector NTI może uzyskać dostęp każdy użytkownik PLGrid, który jest użytkownikiem usługi **Grid Dziedzinowy Biologia** oraz usługi chmurowej **Obliczenia Kampusowe Platon**. W celu uzyskania dostępu do tych usług należy wejść na stronę http://portal.plgrid.pl a następnie zalogować się podając swój identyfikator plgrid (np. *plgkowalski*) i hasło do portalu, po czym wybrać zakładkę „Usługi".

Kolejnym krokiem jest przejście do Katalogu Usług, poprzez przycisk „Zarządzaj Usługami" i wpisanie w polu Szukaj **Obliczenia Kampusowe – PLATON i kliknięcie „Aplikuj".**



Po kliknięciu ukaże się formularz. W formularzu należy z listy rozwijanej wybrać instytucję z jaką użytkownik jest afiliowany oraz wpisać dwukrotnie hasło do usługi. Po wypełnieniu formularza należy kliknąć przycisk „*zarejestruj*”.

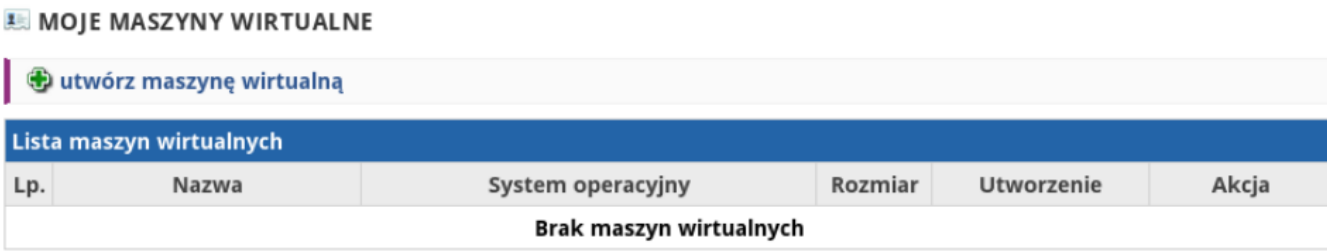


Po prawidłowym wypełnieniu i wysłaniu formularza ukaże się komunikat o pomyślnym dokonaniu zlecenia rejestracji i zostanie ponownie wyświetlony katalog usług.

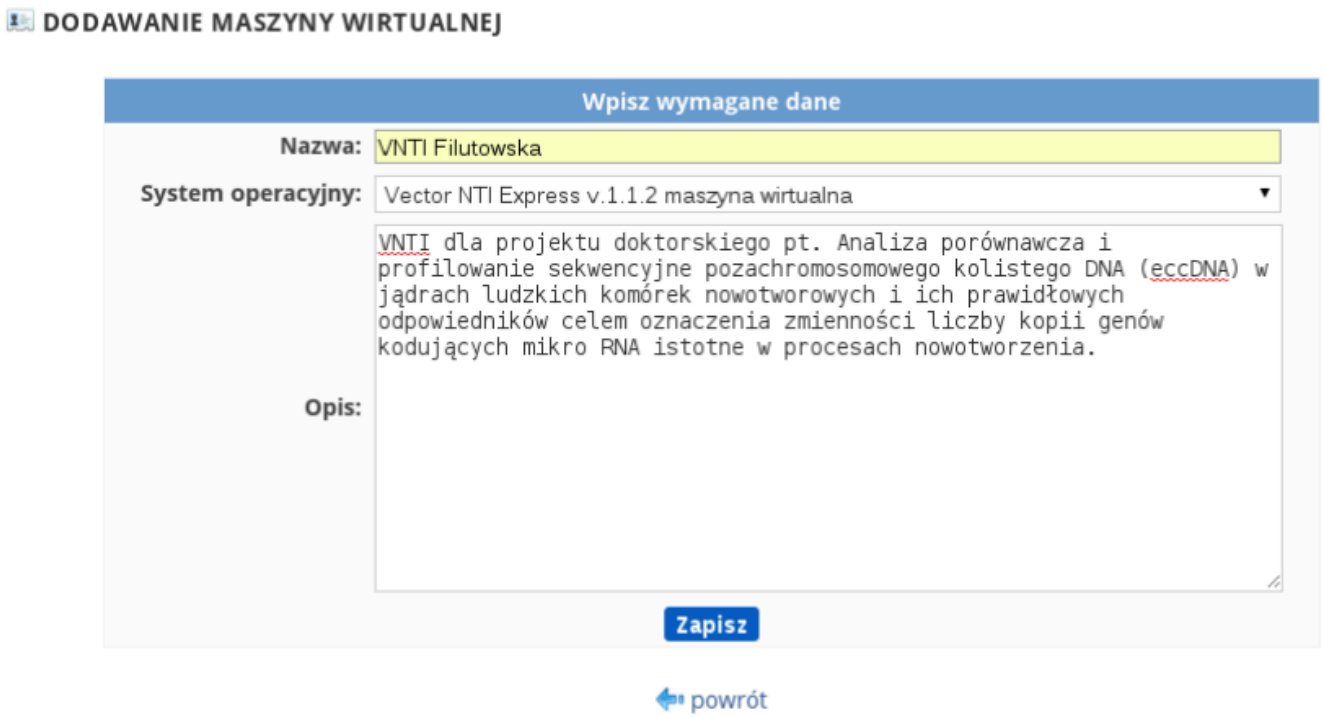
Następnie w katalogu usług należy znaleźć kategorię „Platforma Dziedzinowa – Biologia”, rozwinąć i zaaplikować analogicznie jak w przypadku usług chmurowych. Akceptacja użytkownika następuje automatycznie. Gdy obie rejestracje się powiodą, usługi na liście w katalogu zyskają status „**aktywny**”.

Pierwsze kroki

By skorzystać z nowo uzyskanej usługi należy wejść na stronę: https://pcss.cloud.pionier.net.pl/ i zalogować się przy użyciu swojej nazwy użytkownika PLGrid i hasła ustawionego podczas rejestracji do usługi Platon. Vector NTI jest oprogramowaniem, które w PLGrid uruchamiane jest na maszynie wirtualnej, tak więc po zalogowaniu należy z menu „*Strefa użytkownika*” znajdującego się po lewej stronie wybrać „*Maszyny wirtualne*”. Ukaże się strona zawierająca listę maszyn wirtualnych użytkownika i opcję dodania nowej maszyny wirtualnej (na górze tuż pod nagłówkiem).

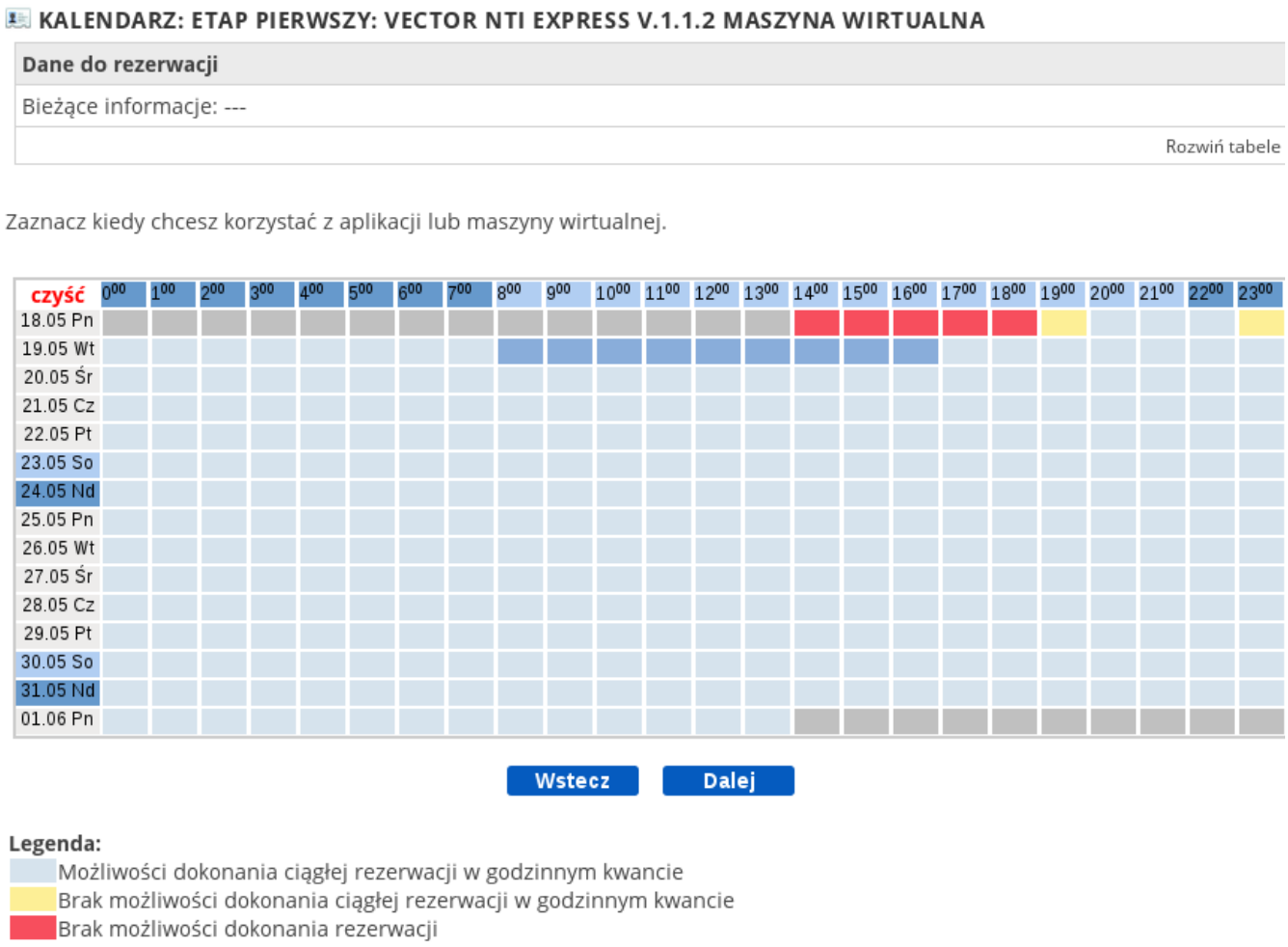


By utworzyć nową maszynę wirtualną, należy kliknąć na „*utwórz maszynę wirtualną*”. Ukaże się formularz zatytułowany „*dodawanie maszyny wirtualnej*”. W formularzu tym należy nadać maszynie wirtualnej nazwę, wybrać system operacyjny z listy rozwijanej oraz opisać tworzoną maszynę. Nazwa może być dowolna, system operacyjny, jaki należy wybrać to „*Vector NTI Express 1.1.2 maszyna wirtualna*”. W opisie można umieścić informacje na temat tego, do czego nasza maszyna, *in statu nascendi*, będzie używana. Po wypełnieniu wszystkich pól należy kliknąć przycisk „*zapisz* ”.



Po zapisaniu zmian pojawi się potwierdzenie dodania maszyny wirtualnej a sama maszyna znajdzie się na liście maszyn wirtualnych użytkownika.

Po utworzeniu maszyny wirtualnej należy utworzyć rezerwację, która umożliwi nam korzystanie z aplikacji na tej maszynie. By to uczynić, należy kliknąć ikonkę kalendarza znajdującą się w kolumnie „*Akcja*” w tabelce będącej spisem maszyn wirtualnych użytkownika. Warto wspomnieć, że po najechaniu myszą na dowolną ikonę w tej kolumnie pojawi się podpowiedź dotycząca funkcji tej ikony. Po kliknięciu ikony kalendarza pojawi się terminarz, każda kratka w tym terminarzu symbolizuje jedną godzinę. Standardowo wyświetlany jest dzień bieżący oraz 14 kolejnych. Więcej niż godzinę można zaznaczyć przy użyciu klawiszy shift lub ctrl albo przytrzymując lewy klawisz myszy i przeciągając.



Po kliknięciu na „*rozwiń tabelę*” (link ten znajduje się powyżej tabeli, po prawej stronie) można uzyskać informacje dotyczące tworzenia rezerwacji, takie jak ich maksymalna ich liczba czy czas trwania. Zaś poniżej tabeli znajduje się legenda wyjaśniająca poszczególne oznaczenia. Po uzyskaniu wszystkich potrzebnych informacji i okresu rezerwacji należy kliknąć przycisk „*dalej*” znajdujący się poniżej tabeli. Ukaże się graficzne podsumowanie tworzonej rezerwacji zawierające podstawowe informacje o niej, również zawiera ono legendę z objaśnieniami.

Po upewnieniu się ze wprowadzone dane są właściwe należy kliknąć przycisk „*Dalej*”. Ukaże się tabelka z podsumowaniem wszystkich zaplanowanych rezerwacji. Jeśli zmienimy zdanie co do którejś z tworzonych rezerwacji możemy odznaczyć pole w kolumnie „*Zapis*” - co skutkuje nie zapisaniem danej rezerwacji. Po sprawdzeniu poprawności wprowadzonych danych należy kliknąć przycisk „*Zapisz*”.

WYBRANE REZERWACJE: VECTOR NTI EXPRESS V.1.1.2 MASZYNA WIRTUALNA

Rezerwacje			
Lp.	Początek	Koniec	Zapis
1	19.05.2015 8:00	19.05.2015 17:00	☑

Anuluj Zapisz

Po zapisaniu wybranych rezerwacji użytkownik zostanie przekierowany na stronę umożliwiającą kontrolę i przeglądanie wszystkich dotychczasowych rezerwacji.

Istotną rzeczą jest to że login i hasło używane do podłączenia się do maszyny wirtualnej są inne niż do konta w PLGrid czy w Platonie. Aby uzyskać dane konieczne do zalogowania się do maszyny wirtualnej, na której będzie uruchomiony program Vector NTI należy kliknąć na ikonę klucza znajdującą się w kolumnie "*Akcje*". Dane do logowania zostaną wyświetlone nad tabelką.

MOJE REZERWACJE

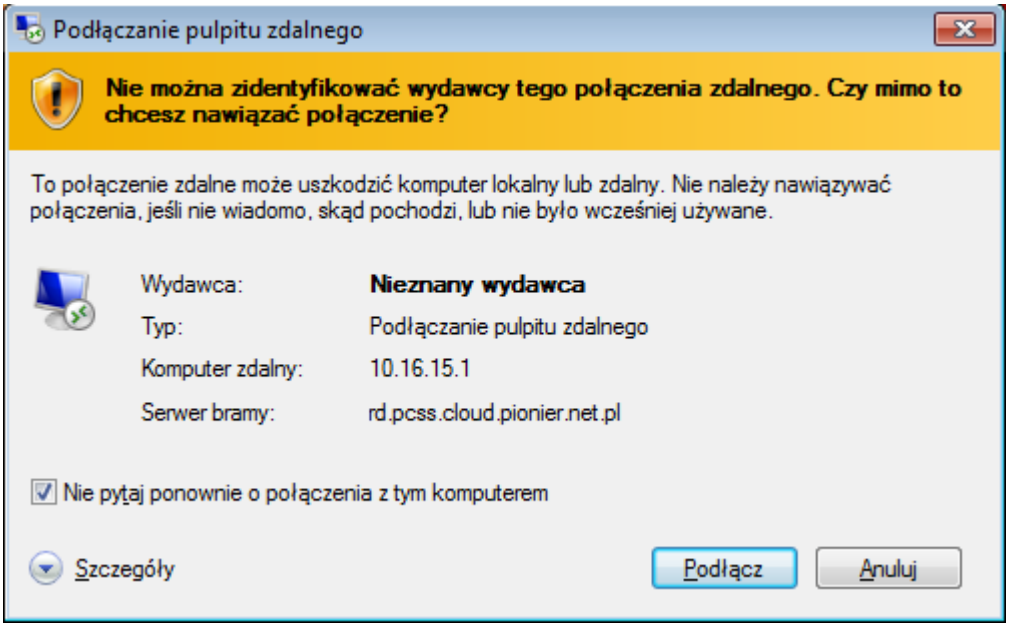
Sortowanie: Data rozpoczęcia ▾ Rosnąco ▾ **Filtrowanie:** --Wszystkie-- ▾ **Typ:** --Wszystkie-- ▾

Zarezerwowane aplikacje i maszyny wirtualne					
Lp.	Nazwa zasobu	Początek	Koniec	Status	Akcja
1	VNTI Filutowska Vector NTI Express v.1.1.2 maszyna wirtualna	2015-05-18 12:30	2015-05-18 19:00	Uruchomiona	
2	VNTI Filutowska Vector NTI Express v.1.1.2 maszyna wirtualna	2015-05-19 08:00	2015-05-19 17:00	Nowa	

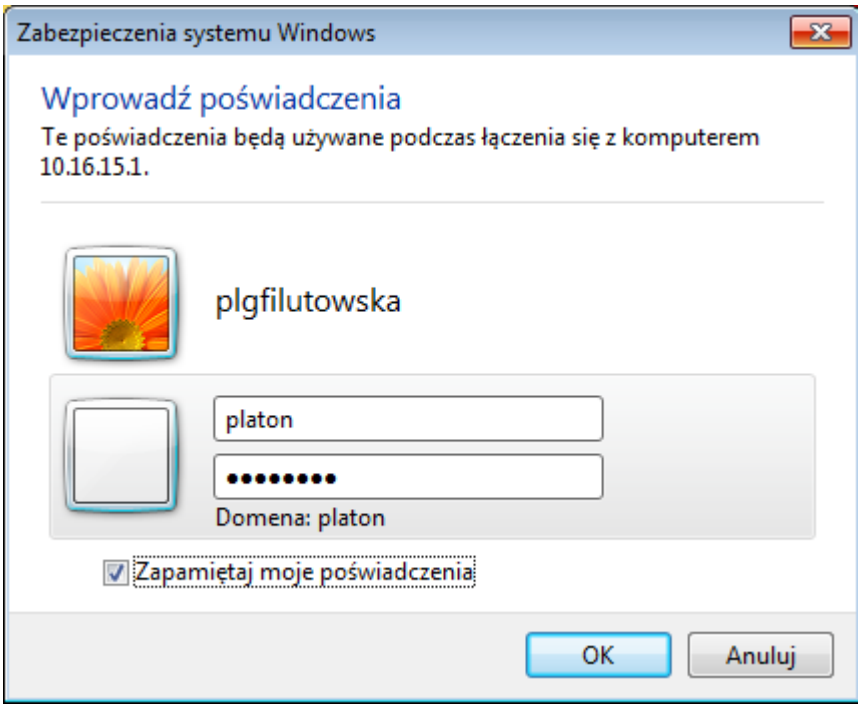
Uwaga! Instrukcje uruchomienia aplikacji i maszyn wirtualnych znajdują się w dziale FAQ

Gdy nadejdzie czas rozpoczęcia rezerwacji zyska ona status „*Uruchomiona*", a kolumnie „*Akcja*" pojawią się nowe ikony, w tym ikona przedstawiająca monitor komputerowy. Kliknięcie tej ikony umożliwi nam ściągniecie pliku typu „*remote desktop (zdalny pulpit)*" (rozszerzenie rdp). Plik ten zawiera dane potrzebne lokalnemu systemowi operacyjnemu użytkownika do połączenia z maszyną wirtualną. Plik ten należy zapisać na dysku lokalnym w dowolnym katalogu np. na pulpicie. Do logowania używamy danych uzyskanych po kliknięciu ikony klucza.

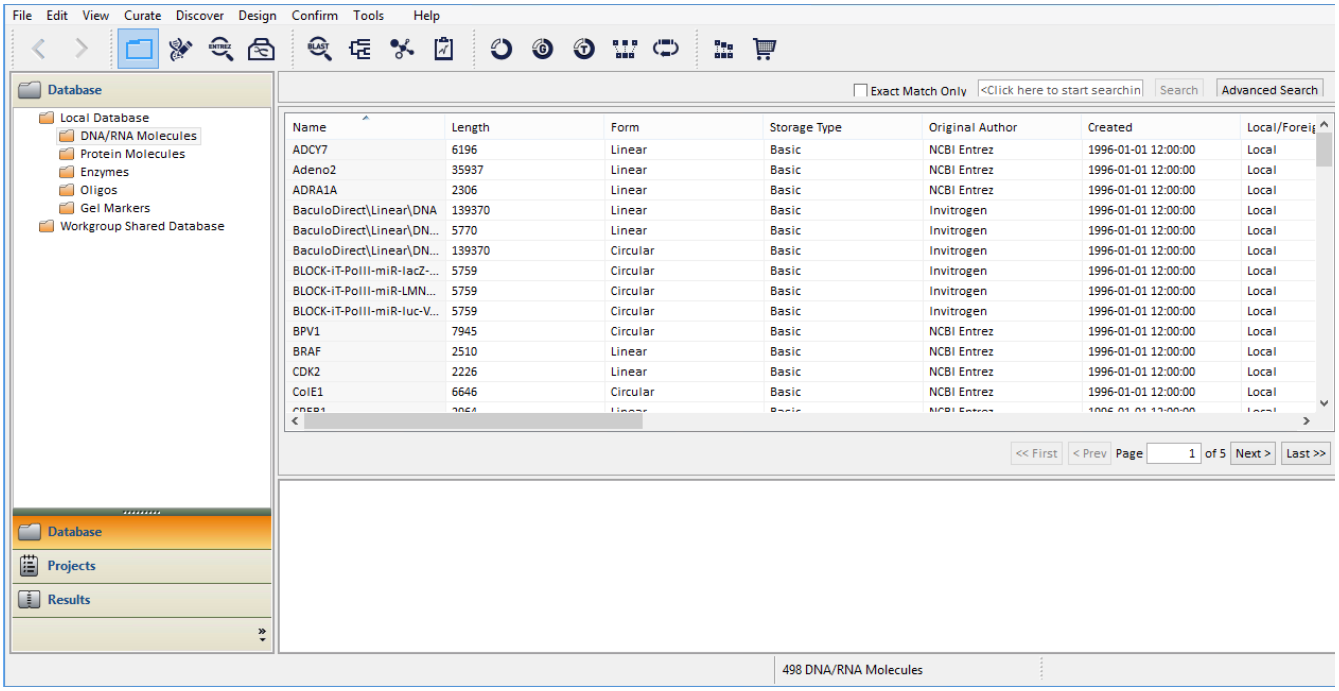
Po kliknięciu na plik start.rdp ukaże się okno, w którym należy zaakceptować wydawcę połączenia zdalnego, można zaznaczyć opcję "*nie pytaj ponownie o połączenia z tym komputerem*" przy następnym połączeniu, po czym należy kliknąć przycisk "*Podłącz*".



Następnie pojawi się okno logowania do domeny, należy wybrać "*inne poświadczenia*" po czym wpisać login i hasło do maszyny wirtualnej (te same, które użytkownik otrzymał po kliknięciu ikony klucza na liście rezerwacji). Po wpisaniu danych do logowania można zaznaczyć opcję "*zapamiętaj moje poświadczenia*", następnie należy zatwierdzić klikając "*ok*".



Po zalogowaniu ukaże się ekran z kwadratowymi ikonami, wśród nich, w prawym górnym rogu, ikony "*Vector NTI*" i "*Vector NTI Data Migration*", należy wybrać pierwszą z nich. Po kliknięciu na tę ikonę pojawi się okno zawierające zdalny pulpit Windows. Na pulpicie tym znajduje się ikona programu "*Vector NTI Express*", po kliknięciu na nią ukaże się okno główne programu Vector NTI. Ewentualne ostrzeżenia zapory systemu Windows można zignorować klikając "*Anuluj*". Programów na pulpicie zdalnym używa się dokładnie tak samo jak programów na pulpicie lokalnym czyli na systemie Windows znajdującym się na dysku użytkownika.

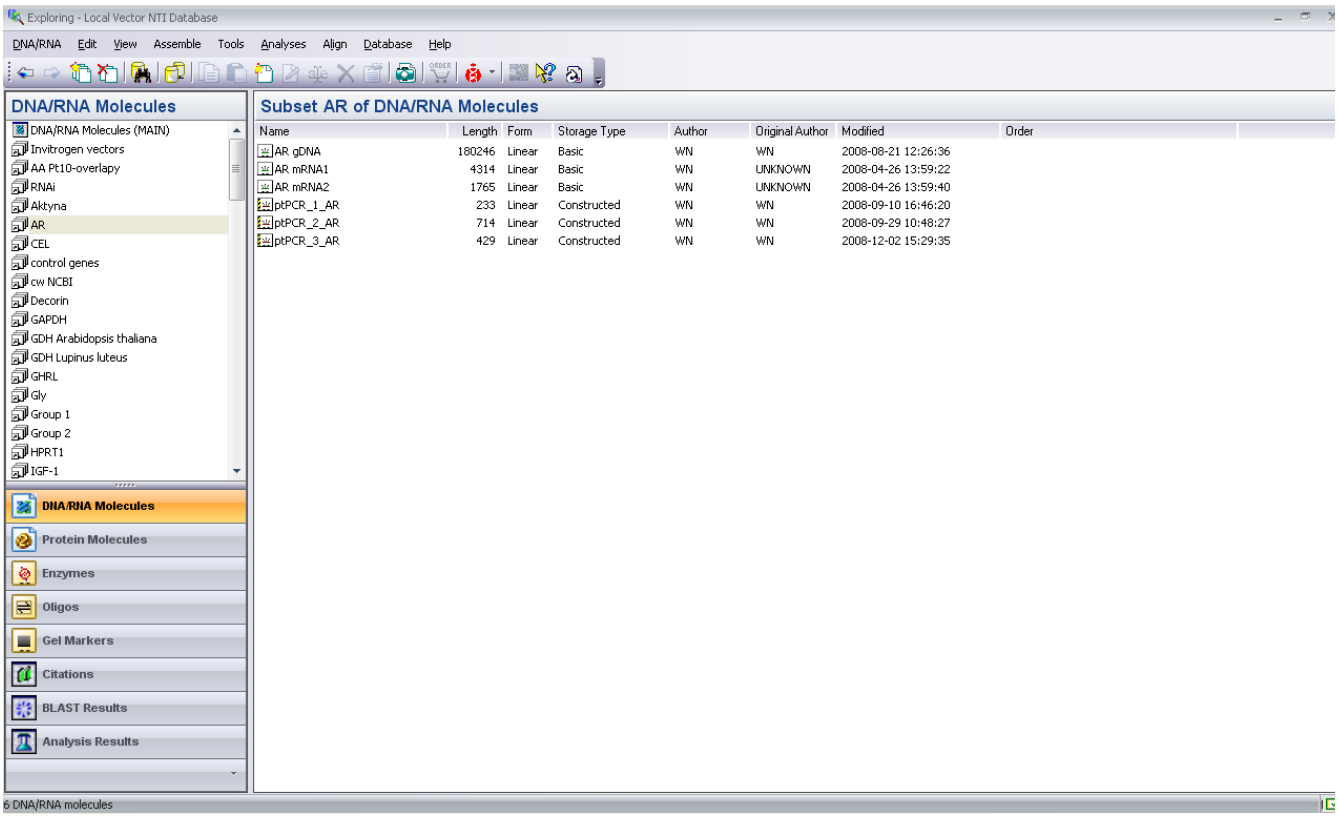


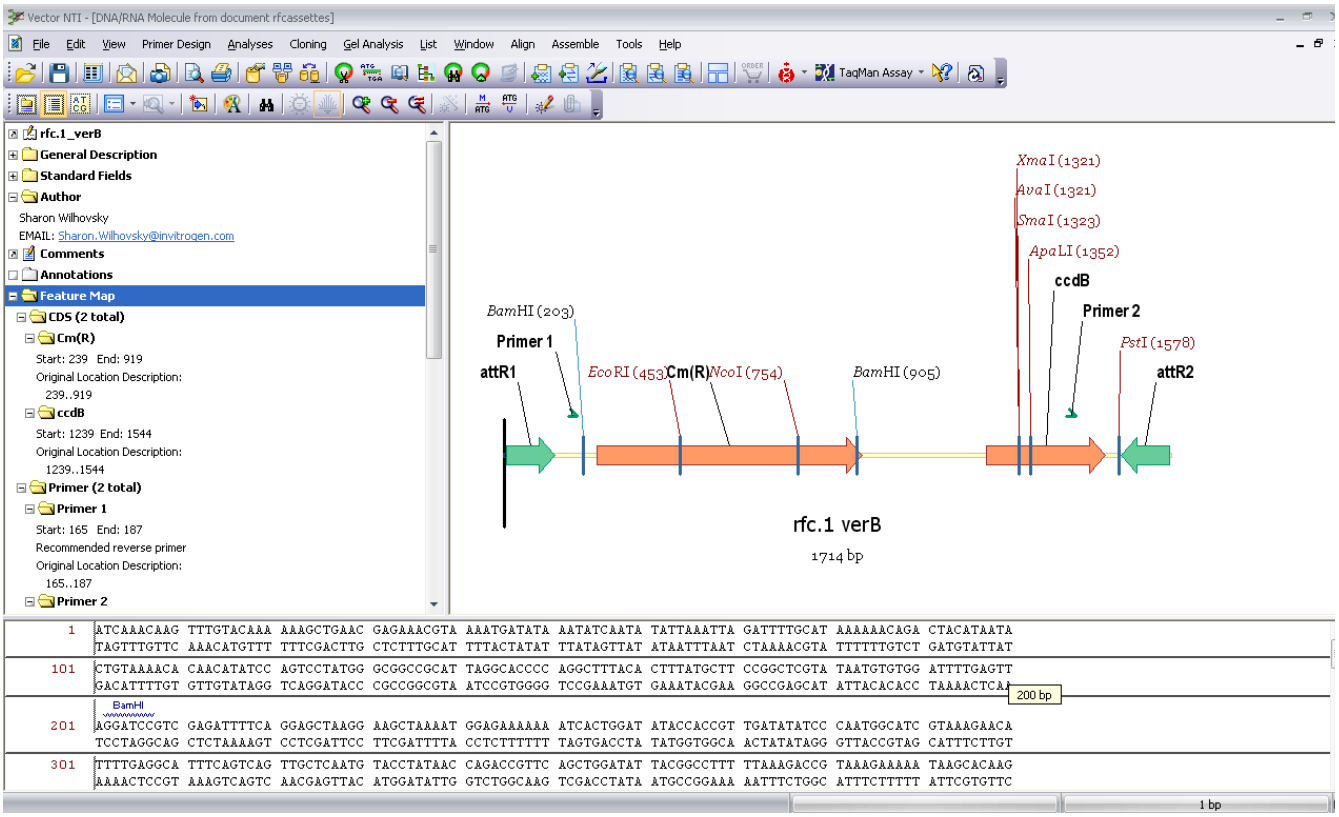
Zaawansowane użycie

Poniżej znajdują się przykłady rezultatów uzyskanych za pomocą każdego z najważniejszych narzędzi programu Vector NTI Express.

Vector NTI z lokalną bazą danych

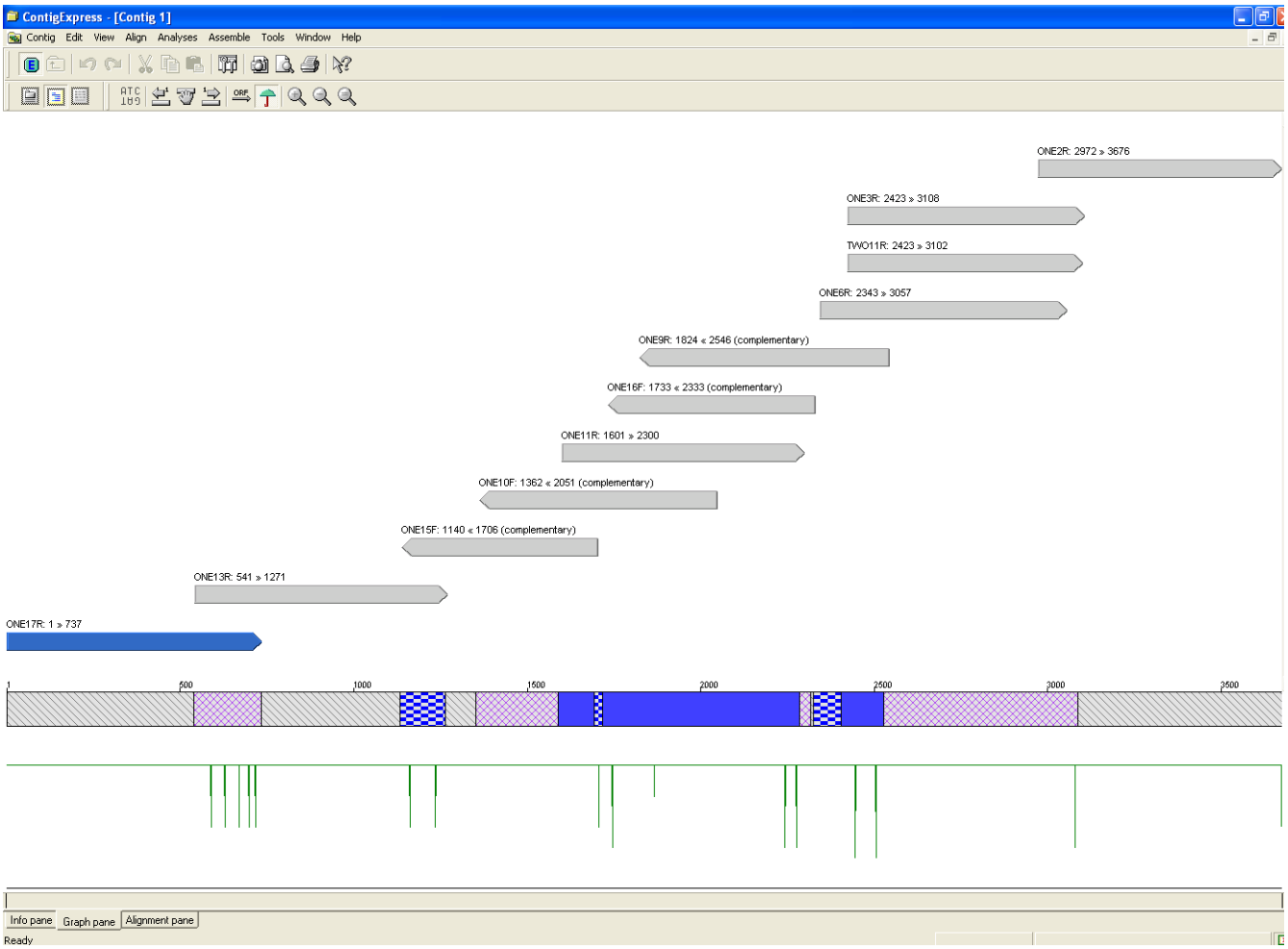
Podstawowe narzędzie do analizy, adnotacji i ilustracji cząsteczek DNA/RNA/białek. Szczególnie przydatne w procesie planowania jak i dokumentacji konstruktów stosowanych w inżynierii genetycznej. Program w sposób łatwy i przejrzysty ułatwia również zarządzanie posiadanymi oligonukleotydami, enzymami, markerami wielkości DNA lub danymi dotyczącymi analiz bioinformatycznych.





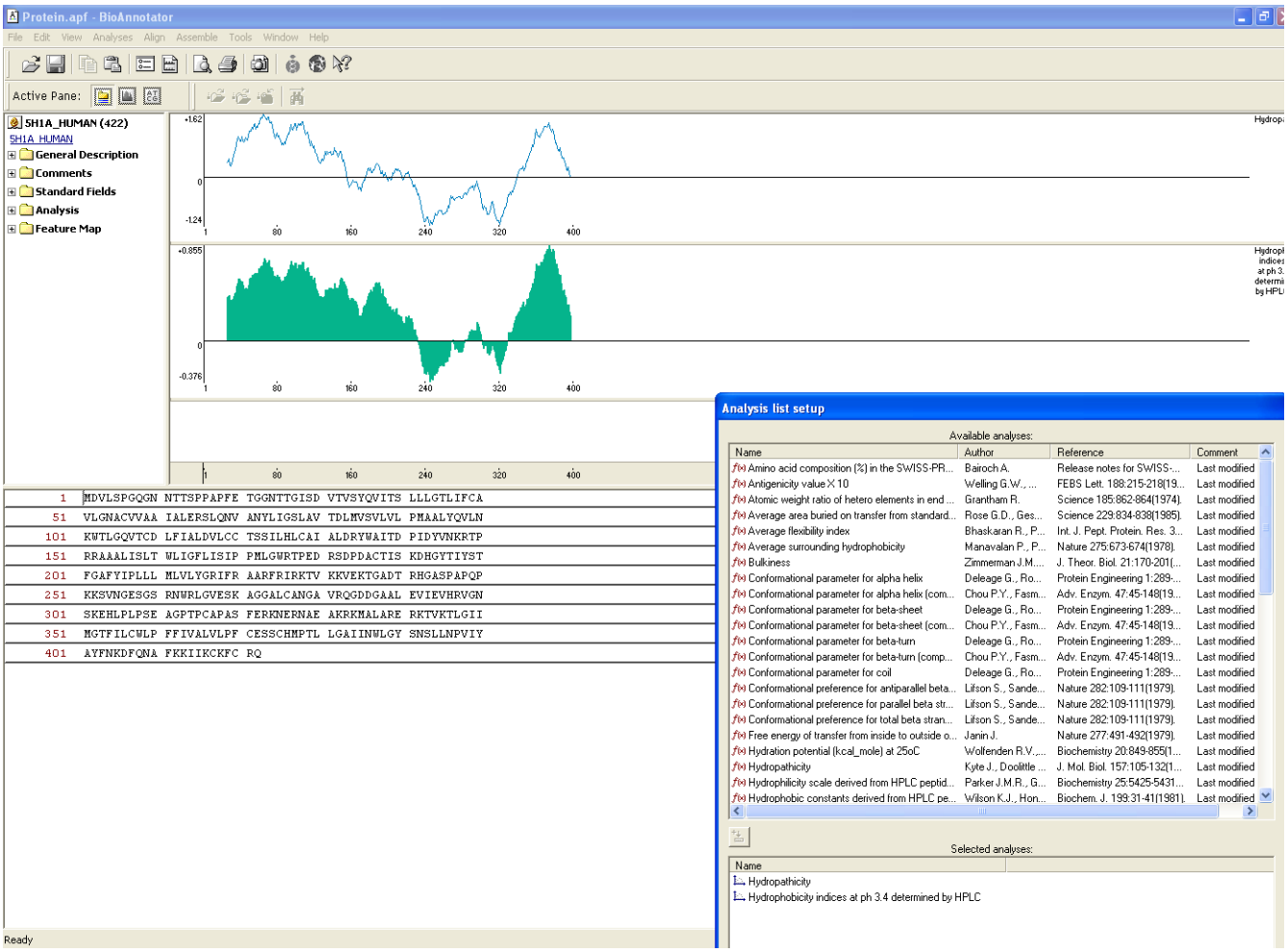
ContigExpress

Aplikacja do analizy jakościowej wyników sekwencjonowania DNA, usuwanie sekwencji wektora, składanie kilku sekwencji DNA w kontig, wykrywanie w sekwencji polimorfizmów i mutacji.



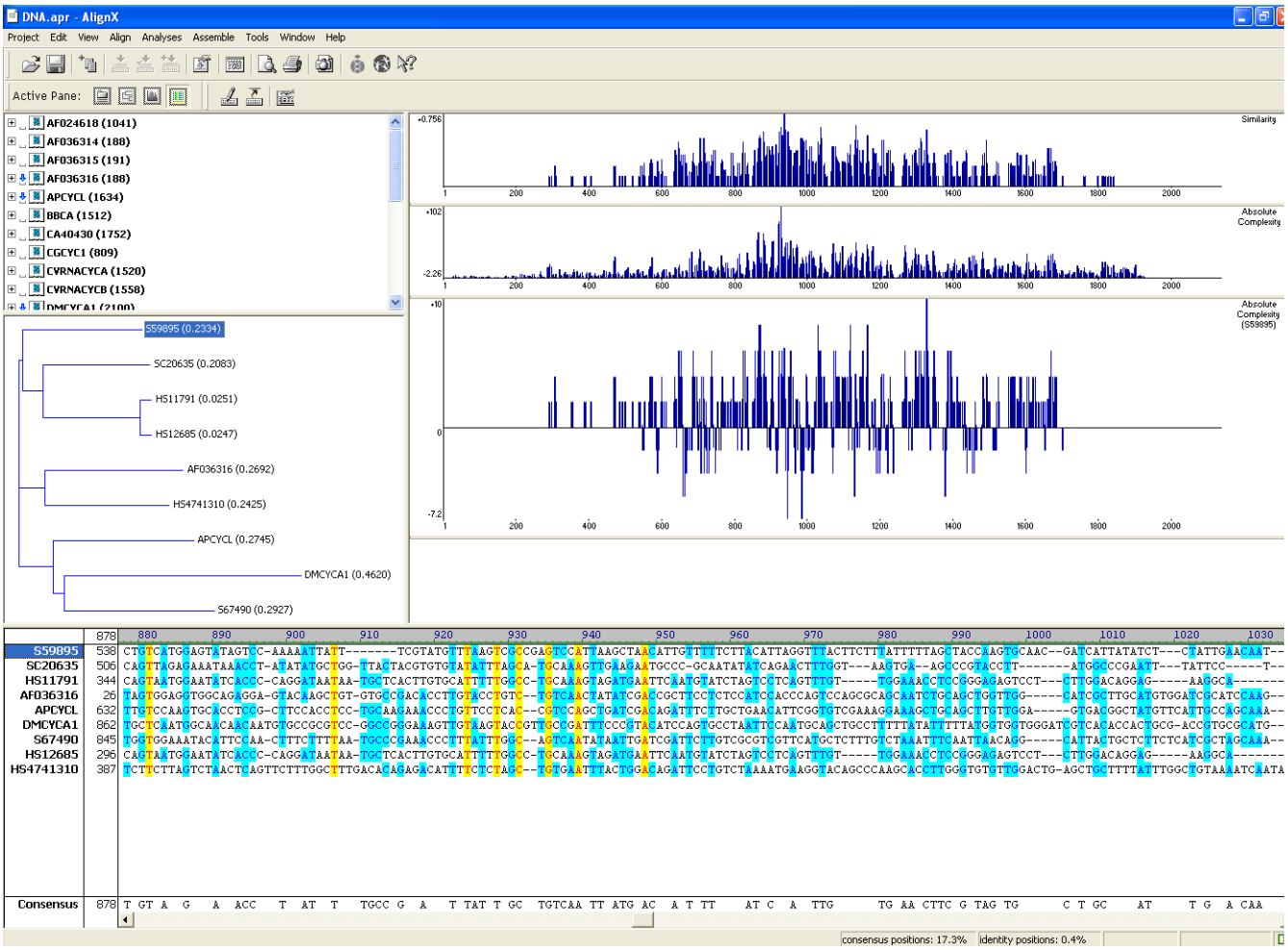
BioAnnotator

Narzędzie do analiz fizykochemicznych sekwencji DNA i białek jak również do mapowania i adnotacji sekwencji białek przy wykorzystaniu motywów odnalezionych w bazach danych m.in. Pfam, Prosite.



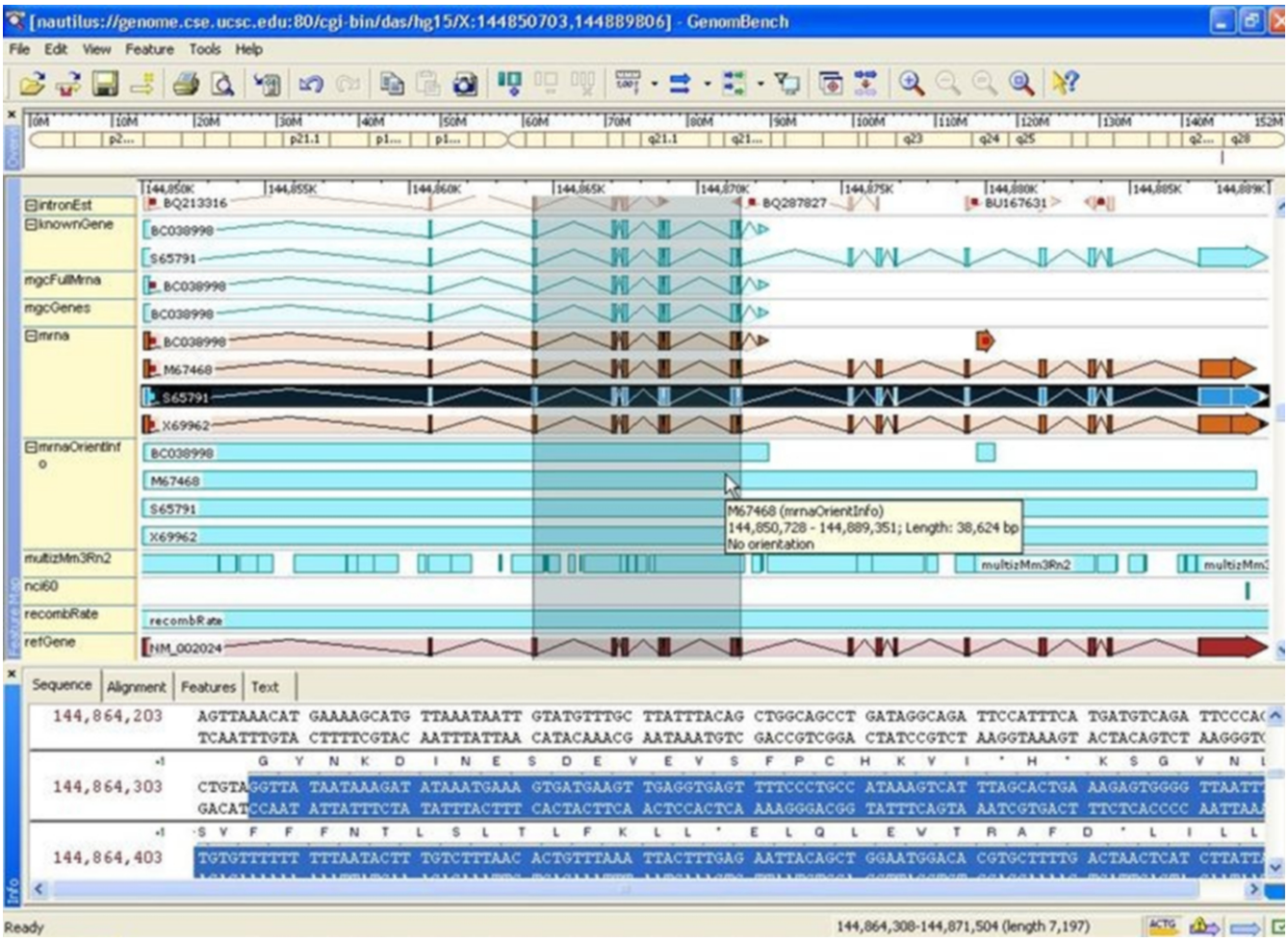
AlignX

Przyrównywanie globalne sekwencji DNA lub sekwencji białkowych oraz tworzenie kladogramów i identyfikacja powtórzeń.



GenomBench

Wizualizacja i analiza obszernych fragmentów genomowego DNA pochodzących z serwerów DAS.



Gdzie szukać dalszych informacji?

Szczegółowe informacje o użytkowaniu infrastruktury PLGrid znajdują się w Podręczniku Użytkownika.

Szczegółowe informacje o użytkowaniu usługi Platon znajdują się pod adresem: https://pcss.cloud.pionier.net.pl/index.php?page=faq.

Szczegółowa dokumentacja programu Vector NTI znajduje się w tym pliku: VectorNTIExpressUG.pdf.

Informacje o usługach dziedzinowych *Biologia* dostępne są na stronie: http://biologia.plgrid.pl/.