# 陆地植物系统发育平台 用户使用手册

Version: 1.0 中国科学院计算机网络信息中心

## 用户系统&分析系统

### 01 目录

1	用户到	系统	4
	3.1	用户及权限	4
	3.2	用户注册(普通用户、协同用户)	5
	3.3	用户资料修改(普通用户、协同用户、管理用户)	6
	3.4	用户管理(管理用户)	8
2	数据涉	刘览及管理子系统	10
3	数据如	处理分析子系统	10
	3.1	Wizard步骤式处理过程	10
	3.2	一键式处理过程	17
	3	.2.1 操作步骤	17
	3	.2.2 任务管理	18
	3.3	使用自己提交的数据处理	19
	3.4	处理软件缺省参数设置	21

## palpp@cnic.cn

2009年09月

02	图	目	录
----	---	---	---

冬	01PALPP主页
冬	02 注册页面
冬	03 注册成功页面
冬	04 用户进入界面7
冬	05 用户密码修改7
冬	06 修改资料界面
冬	07 管理员主界面
冬	08 用户管理界面
冬	09 选择序列数据11
冬	10 查看抽提序列11
冬	11 查看待处理数据详细信息12
冬	12 处理程序运行提示12
冬	13 Alignment Multiple进入
冬	14 Alignment Multiple 结果&Cleaning & Editing进入14
图 图	14 Alignment Multiple 结果&Cleaning & Editing进入
图 图 图	14 Alignment Multiple 结果&Cleaning & Editing进入
图 图 图 图 图	14 Alignment Multiple 结果&Cleaning & Editing进入
图图图图图	14 Alignment Multiple 结果&Cleaning & Editing进入
图图图图图图图	14 Alignment Multiple 结果&Cleaning & Editing进入
图图图图图图图图	14 Alignment Multiple 结果&Cleaning & Editing进入
<b>图图图图图图图</b>	14 Alignment Multiple 结果&Cleaning & Editing进入
图图图图图图图图	14 Alignment Multiple 结果&Cleaning & Editing进入
<b>图图图图图图图图</b>	14 Alignment Multiple 结果&Cleaning & Editing进入
<b>图图图图图图图图图图</b>	14 Alignment Multiple 结果&Cleaning & Editing进入
图图图图图图图图图图图图	14 Alignment Multiple 结果&Cleaning & Editing进入

## palpp@cnic.cn

2009年09月

#### 1 用户系统

#### 系统主界面(<u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/index.htm</u>)如图 01 所示:

				HC	ME 中文	English
Phylogen	陆地植物系统发 tic analysin of lay	育平台 nd plants plan				
Published Projects	Taxonomy Browser	Request an Accou	nt I	ntroductory Tutorial	Docume	ntation
	Batch Extraction rbcL: the large subunit of ribulose-bisphosphate carbo gene; rps-trnS: the interge between gene rps4 and gen rnS;trnL-F: the intergenic between gene trnL and gene	the nic region e region e trnF	Usem	ame rord a new user account		Login
A state of the sta	Visualization & Edit provide a high performance that transparently chains pr relevant to phylogenetic ana comprehensive, and flexible	platform ograms lysis in a pipeline.	<b>Our Footst</b> 2009-9-11 2009-8-31 2009-8-28	eps: Statistic information of Excel. Add "Our Footsteps" Add MatK gene data t	of sequences c to home page. to PALPP.	an export to
Cooperated CopyRigh	by Fairylake Botanical Gard It © 2009 Computer Network	en & Institute of Bota Information Center, C	<b>ny &amp; Comp</b> Chinese Aca	uter Network Informat demy of Science. All Ri	ion Center, C. ghts Reserved	AS
		Email : palpp@cni	ic.cn			

图 01PALPP 主页

#### 1.1 用户及权限

- i. 普通用户(ROLE\_USER):一般系统使用人员,通过网站注册即可。可以使用系统的功能,比如查看公共数据、定制范围、提交任务、流程化处理数据、查看历史任务等等。需实名制,具体到所在研究所和单位。
- ii. 协同用户(ROLE\_GROUP):由管理员决定,将普通用户升级为协同用户(分组)。首先通过网站注册成为普通用户,再由管理员处理,选择部分普通用户 升级成为协同用户角色。功能上除了普通用户的使用权限外,还享有一些特殊 功能,比如提交相关数据、查看公共及私有的数据。
- iii. 超级用户(ROLE\_ROOT):系统管理员,由系统开发人员或数据库管理者决

定,不需要通过网站注册,限制性地授予每个研究所或单位一个或两个超级用 户。超级用户除了拥有普通用户、协同用户的功能权限外,还享有更大的功能, 比如指定协同用户、编辑用户属性、删除用户、启动数据更新、处理普通用户 的定制请求、查看所有数据。

1.2 用户注册(普通用户、协同用户)

主页提供链接(Request A new user account, <u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/register.html</u>),如图 02 所示:



图 02 注册页面

需要填写用户名、密码、确认密码、电子邮件地址、所在研究所、联系电话。其中,带 \*号的均为必填项。

- ▶ 用户名(username)只能由字母(a-z A-Z)、数字(0-9)、下划线(\_)、短横线(-) 构成,并且只能由字母和数字开头,不能使用其它特殊字符和汉字。
- ▶ 真实姓名(real name)项可以为英文或中文等。
- ▶ Email应为合法电子邮件地址(如: palpp@cnic.cn)。
- ▶ 研究机构(Institute)一项目前只提供三个待选项,
  - 植物所 (Institute of Botany, CAS);
  - 仙湖植物园 (Fairylake Botanical Garden);
  - 网络中心 (CNIC, CAS) 等。

点击 Submit 按钮, 注册成功, 则进入界面如图 03 所示:

Register Suc	cess (Pleas	e wait for the	permissio	on from adr	ninistrator)		
Username	Password	Email	Institude	Telphone	Real Name		
lxgtest	lxgtest	lxg@cnic.cn	cnic	58812597	林小光		
click here to close window							
register another user							

#### 图 03 注册成功页面

注册成功后,系统会将所注册的所有信息发送邮件到所提供的 Email 中;同时发送邮件 给相应单位的管理员,提醒审批用户。

新注册的用户需要管理员审核通过才能登陆系统,继续使用。管理员审核通过后,系统 也将发送一封邮件到所提供的 Email 中,提示用户。

1.3 用户资料修改(普通用户、协同用户、管理用户)

▶ 用户密码修改

用户使用账户、密码登陆系统如图 04 所示,点击链接(Modify Password,<u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/modifyPassword.htm</u>),进入修改密码界面 如图 05 所示:

ruyivgenetit	发育平台 analysis of land	plants platform		N			
<u>View Public Data</u>	<u>Customize data</u>	<u>Evoke New Task</u>	Customize workf	low	Logout		
dministrator Panel <u>oup User Panel</u> ommon User Panel	Welcome User: lxg! A	dministrator Panel					
Admin Application <ul> <li><u>Users Management</u></li> </ul>		View reque	st list (Latest 10s)				
<ul> <li>request mamagement</li> <li>Data Undata</li> </ul>	numb	ertaxon_name database	gene format process	action			
<ul> <li>Data Opdate</li> <li>Data Submit</li> </ul>	1	Berberidaceae nuccore	rbcL gb lxg 👱	<u>riew data</u> dei	lete		
• Data baonat		more F	<u>Request data</u>				
Group Application							
<u>View Data</u>	Manage Task						
• <u>Customize data</u>							
<ul> <li><u>Evoke New Task</u></li> </ul>		Task Li	st (Latest 10s)				
<u>Customize workflow</u>	TIN	GL 4 TT	T. 1 T.	<b>G</b> ( )	17 D L		
<ul> <li><u>Submit Private Data</u></li> </ul>	Job Name	Start Lime	End Time	Status	View Result		
Common Anntiontion	\$1250675838053	2009-08-19 17:57:22.0	2009-08-19 17:57:47.0	over	result		
Uommon Application     View Public Data	\$1250668882202	2009-08-19 16:01:23.0	2009-08-19 16:02:18.0	over	result		
<ul> <li><u>view ruone Data</u></li> <li>Customize data</li> </ul>	\$1250662796583	2009-08-19 14:19:56.0	2009-08-19 14:20:03.0	over	result		
- CONDECTION OF COLOR	\$1250662345258	2009-08-19 14:12:25.0	2009-08-19 14:12:28.0	over	result		
Evoke New Task	\$120062329585	2009-08-19 14:12:09.0	2009-08-19 14:12:15.0	over	result		
Evoke New Task     Task History List	1000001000000	2009-08-19 14:00:13.0	2009-08-19 14:06:32.0	over	result		
<ul> <li>Evoke New Task</li> <li>Task History List</li> <li>Customize workflow</li> </ul>	s1250661973776	1 2000 00 10 10 47 22 0	2009-08-19 10:47:59.0	over	result		
<ul> <li><u>Evoke New Task</u></li> <li><u>Task History List</u></li> <li><u>Customize workflow</u></li> </ul>	s1250661973776 s1250650051574	2009-08-19 10:47:32.0	0000 00 10 10 11 10 0		result		
Evoke New Task     Task History List     Customize workflow     Modularization Analysis	s1250661973776 s1250650051574 s1250649849516	2009-08-19 10:47:32.0 2009-08-19 10:44:10.0	2009-08-19 10:44:43.0	over	000000042		
Evoke New Task     Task History List     Customize workflow     Modularization Analysis     Alignment Multiple	s1250661973776 s1250650051574 s1250649849516 s1250649710078	2009-08-19 10:47:32.0 2009-08-19 10:44:10.0 2009-08-19 10:41:50.0	2009-08-19 10:44:43.0 2009-08-19 10:42:43.0	over	<u>result</u>		
Evoke New Task     Task History List     Customize workflow     Modularization Analysis     Alignment Multiple     Cleaning & Editing	s1250661973776 s1250650051574 s1250649849516 s1250649710078 s1250630231902	2009-08-19 10:47:32.0 2009-08-19 10:44:10.0 2009-08-19 10:41:50.0 2009-08-19 05:17:13.0	2009-08-19 10:44:43.0 2009-08-19 10:42:43.0 2009-08-19 05:18:57.0	over over over	<u>result</u> <u>result</u>		
Evoke New Task     Task History List     Customize workflow     Modularization Analysis     Alignment Multiple     Cleaning & Editing     Tree Reconstruction     Phylogeny Evaluation     Visualization	s1250661973776 s1250650051574 s1250649849516 s1250649710078 s1250630231902	2009-08-19 10:47:32.0 2009-08-19 10:44:10.0 2009-08-19 10:41:50.0 2009-08-19 05:17:13.0 mm <u>Custor</u>	2009-08-19 10:44:43.0 2009-08-19 10:42:43.0 2009-08-19 05:18:57.0 2009-08-19 05:18:57.0 are Task	over over over	<u>result</u> <u>result</u>		

Cooperated by Fairylake Botanical Garden & Institute of Botany & Computer Network Information Center, CAS

CopyRight © 2009 Computer Network Information Center, Chinese Academy of Science. All Rights Reserved Email : palpp@cnic.cn

#### 图 04 用户进入界面

Modify Password:	
Please input the old password:	*
Please input the new password:	*
Please confirm the new password:	*

图 05 用户密码修改

用户通过提供旧密码,以及新密码和确认新密码,点击 Submit 按钮修改即可。

▶ 用户信息修改

在用户主界面中点击链接(Modify Information,

<u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/modifyInformation.htm</u>), 进入修改资料界面如图 06

Real Name:	协同用户	
Email:	palpp@cnic.cn	
Institute:	CNIC, CAS	~
Telphone:	58812587	

图 06 修改资料界面

1.4 用户管理(管理用户)

用户管理功能只提供给管理员使用。普通用户和协同用户不能使用。

Phylogenetic Analysis of Land Plants Platform Admin - Microsoft Internet Explorer 📃 🛃 🗶				
(性) 医编辑(图) 查看(1) 收藏(4) 工具(1) 帮助(1) (性) (性) (性) (性) (性) (性) (性) (性) (性) (性				
后退・③・■ 2 俗   2 機束 女女権夫 ④   2・3 🗁 - 🖵 ≪ お 🗗 🏭				
地址(D) 🕘 http://159.226.3.34:8080/palpp/adm	nin/index.htm		✓ → 转到 链接 ※	
-				
		(A) HOME 中文   English		
	陆锄结物系统	光 宝 双 丛		
	Phylogenetic	analysis of land plants platform		
	Administrator Panel	View Sequece Data Group User Panel Common User Panel Logout		
A	dministrator Panel	Welcome Administrator: lxg!		
Gr Ch	roup User Panel			
	ommoni o ser ranei	Manage Users		
	Admin Application	New Register Users (Latest 10s)		
	<ul> <li><u>Users Management</u></li> </ul>	username Institute Role		
	<ul> <li>request mamagement</li> </ul>	Ixgrest Computer Network Information Center, CAS Common User enable		
	<ul> <li><u>Data Update</u></li> </ul>	mztest Computer Network Information Center, CAS Common User enable		
	<ul> <li><u>Data Submit</u></li> </ul>	nore users		
	Crown Application	Request list		
	View Data	•		
	<ul> <li>Customize data</li> </ul>	View request list (Latest 10s)		
	Evoke New Task			
	<ul> <li><u>Customize workflow</u></li> </ul>	number taxon_name databasegeneformatprocessaction		
	<ul> <li><u>Submit Private Data</u></li> </ul>	1 Embryophyta nuccore nad5 gb root delete		
	a	2 Hypnales nuccore nad5 gb jane delete		
	Common Application	3 Embryophyta nuccore nad5 gb jane delete		
	Customize data	4 Papaveraceae nuccore nad5 gb jane delete		
	<ul> <li>Evoke New Task</li> </ul>	5 Papaveraceae nuccore rbcL gb pane delete		
	<ul> <li>Task History List</li> </ul>	6 Gnetophyta nuccore rocL gb hexang delete		
	<u>Customize workflow</u>	7 Gnetophyta nuccore rocL gb hexing delete		
		o Dendrocerotales nuccore rocL go pt delete		
	Modularization Analysis	Denarocerotales nuccore rbcL gb jane delete		
	<u>Alignment Multiple</u>	10 Hapiominopsida nuccore roci go root delete		
	<u>Cleaning &amp; Editing</u> Tree Reconstruction	Itore user redusers		
	Phylogeny Evaluation	Submit Squence Data		
	<u>Visualization</u>	Update Data		
	Account Management	View Update Sequence History (Latest 10s)		
	<ul> <li>Modify Password</li> </ul>	2000 02 10 22/5/02 dated		
	<ul> <li>Modify Information</li> </ul>	2009-06-19 20:00:00 updated sequence by administrator, 461		
		2009-08-19 21:31:43 updated sequence by liuhm, 481 sequences		
		added!		
		2009-08-19 21:05:06 updated sequence by liuhm, 481 sequences		
		added!		
285		2009-08-19 08:18:03 undated sequence by iane. 481 sequences added		
e			j j j j 🥥 miternet	

图 07 管理员主界面

管理员登陆后,进入管理员主界面(<u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/admin/index.htm</u>)

如图 07 所示:

- ▶ 左边为系统基本功能的导航:
  - 管理用户功能导航;

所示:

- 协同用户功能导航;
- 普通用户功能导航;
- 分析模块功能导航;
- 用户信息维护功能导航
- ▶ 主体页面部分为管理员特有的几项功能展示:
  - 用户管理;
  - 数据请求响应;
  - 数据更新;
  - 数据提交。

首页的用户管理部分展示最近待审核通过的用户列表(最多十条),主要给出了 username、institte、基本角色 Role 等信息,点击对应的 enable 链接,可以审核通过该用户。

username	real name	Institute		Email	Telep	ohone	Role	Cor	nfirm
sharo		szbg	-	@hotmail.com	1351	0891	Group User	<u>disable</u>	upgrade
tanjingui		szbg	t	ohu.com	13	039	Group User	disable	upgrade
Wang Wei		ibcas		27@ibcas.ac.cr	ι¢		Administrator	disable	upgrade
welcome	候	cnic	i	gmail.com	<u>-</u>		Common User	disable	upgrade
xiangxg		ibcas	2	ocas.ac.cn	e		Group User	disable	upgrade
xiao123		cnic	2	gmail.com	c	37	Common User	disable	upgrade
xt		cnic		cnic.cn	2:		Group User	disable	upgrade
zhenm99		cnic	2	cnic.cn	13	369	Common User	disable	upgrade
zhifei		szbg	1	travelsky.com	C 10.	<del>9</del> 380	Common User	<u>disable</u>	upgrade

#### 图 08 用户管理界面

点击首页用户管理部分的more链接(<u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/admin/userlist.htm</u>) 进入所有用户管理的界面如图 08 所示,此界面列举了所有用户及其详细信息。

▶ 管理用户操作:

- 激活账户 (enable);
- 冻结账户 (disable);
- 升级账户角色 (upgrade);
- 降级用户角色 (degrade);
- 还可以删除账户 (delete)。

初始页面, Confirm 一栏, 未激活账户(或已冻结账户)显示为"enable"、"degrade"、 "delete"; 已激活用户显示为"disable"、"upgrade"。即是只能升级已激活的账户,降级或 者删除已冻结账户,删除账户只能为最低档次用户(即 Common User)

其中,管理员只能管理所注册研究单位的非管理员用户,root 账户可以管理所有用户。

2 数据浏览及管理子系统系统

#### 见数据部分。

3 数据处理分析子系统

只要是已注册(通过审核)的用户,即可使用系统已有数据(协同和管理用户可以使用 组内提交的数据)进行处理工作。

数据处理包括多重序列比对(Multiple Alignment)、序列编辑(Cleaning & Editing)、模型评估(Model Estimation)、构树(Tree Reconstruction)、可视化(Tree Visualization)等过程。

1.1 Wizard 步骤式处理过程

在用户主界面(Common User Panel, <u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/index.htm</u>),点 击 Evoke New Task(<u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/work.htm</u>)进入数据处理界面 (<u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/work.htm</u>),界面上方为历史任务列表(最近三条),点 击more链接可以进入查看所有任务。使用时,

(1)首先,需要选择序列数据(图 09),选择好序列后,点击 Add 按钮添加,再点击 最下方的 next 按钮,进入下一步;

(2)随后,如(图 10)所示界面,可以点击查看每条序列的详细情况,还可以根据需要反选序列,点击 Go on 进入下一步;

Velcome <b>User</b> : lxg! Common User :	Panel				
	Task List (Latest 3s)	more			
Alignment Multiple					
	Job Name	Start Time	End Time	Status	View Result
Cleaning & Editing	s1250675838053	2009-08-19 17:57:22.0	2009-08-19 17:57:47.0	over	result
Model Estimation	s1250668882202	2009-08-19 16:01:23.0	2009-08-19 16:02:18.0	over	<u>result</u>
	s1250662796583	2009-08-19 14:19:56.0	2009-08-19 14:20:03.0	over	<u>result</u>
Iree Reconstruction					
Tree Visualization	Data Batch Extractio	on Please choose the o	data,		
	Search Parameters	i			
	Taxonomic category.				
	Genus 🔻				
	Gene name:				
	rbcL 💌				
	choose the best seqer	nce number:			
	1				
	Search Scope				
	Your taxon name: Search				
	Search Scope:root 💌				
	- Abba				
	auu>>				
	del<<				
	Vour Own Sooner				
	rour own sequeur				
	The sequence format	is fasta:			
			<b>A</b>		
	図	09 选择这列数据			

#### 图 09 选择序列数据

Welcome <b>User</b> : lxg!	Data Batch Extraction
Alignment Multiple	
Cleaning & Editing	<ul> <li><u>&gt;Achiys_AYYCPRBCL</u></li> <li><u>&gt;Berberis_MHOCPRBCLA</u></li> </ul>
Model Estimation	Songardia_BOGCPRBCL
Tree Reconstruction	<ul> <li><u>&gt;Diphylleia_DYHCPRBCL</u></li> </ul>
Tree Visualization	✓ >Dysosma_AF079454 ✓ >Enimedium_EPDCPRBCI
	<ul> <li>&gt;Jeffersonia_JEFCPRBCL</li> </ul>
	Nandina_NADRBCL >Padaphydlum_AE093716
	I odopitylidat _Ar055/10           Image: Structure of the structure of
	✓ >Sinopodophyllum_AF079455 ✓ >Vancouveria_DO923616
	Go on

图 10 查看抽提序列

Welcome <b>User</b> : lxg!	
0	Data Batch Extraction
<u>Alignment Multiple</u>	
Cleaning & Editing	>Achlys_AYYCPRBCL
Model Estimation	aagcgctggattcaaagcgggtgttaaagattacaaattgacttattatactcctgacta >Berberis_MHOCPRBCLA
Tree Reconstruction	gtgttggattcaaagcgggtgttaaagattacaaattgaattattatactcctgactatg >Bongardia BOGCPRBCL
Tree Visualization	aagtgotggattcaaagogggggtgttaaagattacaaattgacttattatactootgaata
	>Caulophyllum_AF190441
	aaactaaagcaagtgttggattcaaagcgggtgttaaagattacaaattgacttattata >Diphylleia DYHCPRBCL
	aagtgetggatteaaagegggtgttaaagattaeaaattgaettattataeteetgaeta >Dysosma AF079454
	aagtgttggattcaaagcgggtgttaaagattacaaattgaattattatactcctgacta >Epimedium EPDCPRBCL
	aagtnttggattcaaagcgggtgttaaagattacaaattgacttattatactcctgacta >Jeffersonia JEFCPRBCL
	_ aagtgetggatteaaagegggtgttaaagattaeaaattgaettattataeteegkaeta >Nandina NADRBCL
	nnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnn
	<pre>&gt;PolicyTrant_Arbs3710 acagagactaaancaagtgntggattccaagcgggtgctnaagattccnnattgacttat &gt;Ranzania_RAZCPRBCL</pre>
	aagtgttggattcaaagcgggtgttaaagattacaaattgacttattatactcctgacta >Sinopodophyllum_AF079455
	$atgtcaccacaaacagagactaaagcaagtgctggattcaaagcgggtgttaaagattac\ldots$
	>Vancouveria_DQ923616
	$gttggattcccagcgggtgttaaagattacaaattgaattattatactcctgactatgta\dots$
	Start Wizard Run
	One Click Run

图 11 查看待处理数据详细信息

(3) 查看待处理数据详细信息。在此页面(图 11),点击 Start Wizard Run 按钮进

入 Wizard 步骤式处理流程过程,点击 One Click Run 按钮进入一键式处理流程过程。

(4) 点击Start Wizard Run进入Wizard处理流程

(http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/wizard.htm),进入时,会出现等待提示界面(滚动 条及当前时间等信息,图 12 所示)。等待片刻,即可进入处理页面。

The Program is Running at Thu Aug 20 10:47:46 CST 2009.

#### 图 12 处理程序运行提示

(5) 第一个处理部分 (Alignment Multiple), 如 (图 13 所示)。

Alignment Multiple	Teaning & Editing	Tree Reconstruction	Phylogeny Evaluation	<u>Visualization</u>	Logout				
Welcome <b>User</b> : lxg! Common	n User Panel								
N 411	Batch Extrac	tion Result: <u>s12507362740</u>	<u>130.fasta</u> Redo						
Alignment Multiple	Please choos	se the method to alignmen	t multiple:						
Cleaning & Editing	@ Church	W (Emma Caranaa)							
Model Estimation	Clust	alW-MPI (local PC)							
Tree Reconstruction	<ul> <li>Clusta</li> </ul>	alW-MPI (cluster)							
Tree Visualization	ClustalW-MPI (Dempcomp 7000)								
	Parameter	rs Setting Panel							
	Slow align	options							
	Do you war	nt to carry out slow pairw	rise alignment?   Yes 💌						
Stow pairwise alignment: gap opening penalty 10.0									
Slow pairwise alignment: gap extension penalty 0.1									
	-Fast align	ontions							
	Fact nairwig	e alianment: similaritu so	ores: K-Tuple size 1		default is 1 for				
	protein, 2 fo	or nucleic)	5165. IL 1 apre 5126 j.	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·					
	Fast pairwis	se alignment: similarity sc	ores: gap penalty 3	(d	efault is 3 for				
	protein, 5 fo	or nucleic)							
	Fast pairwis	se alignment: similarity sc	ores: number of diagonals	to be considered					
	5	(default i	s 5 for protein, 4 for nucle	ic)					
	Fast pairwis	se alignment: similarity sc	ores: diagonal window size	; <b> </b> 5	(default				
	is 5 for prot	en, 4 for nucleic)							
	Fast pairwis	se alignment: similarity sci	ores: suppresses percentag	e score?   res 📩					
	Gap optior	15							
	Multiple alig	nment: Gap opening pena	1ty 10.0						
	Multiple alig	nment: Gap extension per	nalty 5.0						
	Use end gap	separation penalty? Yes	; <b>-</b>						
	Gap separation distance 8								
	No residue	specific gaps? Yes 💌							
	List of hydr	ophilic residues GPSND	QEKR						
	No hydrophilic gaps? Yes 💌								
No hydrophilic gaps? Yes 🗾									
	140 nyaroph								

#### 图 13 Alignment Multiple 进入

页面主体部分上方提供了刚抽取的序列数据文件(fasta 格式),并提供下载,还可以点击 Redo 链接重新抽取数据。

注: 多重序列比对(主要采用 ClustalW 进行处理)提供多种形式以供使用,包括串行 (Emma, Sequence)、本机服务器并行(MPI, local PC,最多提供8个 CPU)、机群服务 器并行(MPI, Cluster,最多提供16个 CPU)、超级计算机并行(MPI, Dempcomp7000, 暂不提供服务)。参数设置面板(http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/customize.htm)提供 运行参数设置功能。

				🗥 номе 中2	文   English
陆地植物。 Phyloge	系统发育平台 enetic analysis of l	and plants platform			
Alignment Multiple	Cleaning & Editing	Tree Reconstruction	Phylogeny Evaluation	<u>Visualization</u>	Logout
Welcome <b>User</b> : lxg! Cor	nmon User Panel Alignment N	Aultiple Result: <u>s125073627</u>	4030.ain s1250736274030.	dnd	
Alignment Multiple	If the follow	ring loads upguedessfully	Diege download IDE(abou	re mercian 6 (1) and inc	tall it manuallu
🕨 Cleaning & Editing	; File Edit	Select View Format C	olour Calculate Help		stan it mandany.
Model Estimation	Berberts MHC	CERECIA	10 , 20 ,		
Tree Reconstructio	n Ranzania_RAi Epimedium_EF	DCPRBCL		- AAGTGTTGGATT - AAGTNTTGGATT	CAAAGCGGG CAAAGCGGGG
Tree Visualization	Vancouveria_L Achiys_AYYCi	DQ923616 PRBCL		- AAGCGCTGGATT	CCCAGCGGG CAAAGCGGG
	Dysosma_AFO Diphylleia_DY Bongardia_BC Gaulophyllum_ Jeffersonia_JE Nandina_NAD	Consensus Consensus Consensus	AAACTAAAG	AAGTGTTGGATT AAGTGCTGGATT CAAGTGCTGGATT CAAGTGCTGGATT NNNNNNNNNNNNN CAAGTGCTGGATT NNNNNNNNNNNNNN CAAGTGTTGGATT	CAAAGCGGG CAAAGCGGG CAAAGCGGG CAAAGCGGG CAAAGCGGG NNNNNNNN NNNNNNNN CAAAGCGGG
	Submit	And Next			
Cooperated	by Fairylake Botanical	Garden & Institute of Bo	any & Computer Networl	k Information Center,	CAS

图 14 Alignment Multiple 结果&Cleaning & Editing进入

(6) 第二个处理部分(Cleaning & Editing),图 14 所示。

页面上方提供了刚进行操作的结果文件(aln 文件和 dnd 文件),并提供下载。

页面左边提供了运行步骤的情况,此时 Alignment Multiple 提供链接,可以点击,回退 到上一步骤进行操作。

#### 注: 以下各步骤均提供回退到之前步骤进行重新操作,不再重复叙述。

页面主体部分使用了 JalView Applet 展示了刚生成的 aln 文件,并可以进行编辑(掐头 去尾等操作),点击 File->Output To Textbox->CLUSTAL,弹出刚刚编辑的结果文件内容, 点击 Save 按钮,提示保存成功,关闭 close 即可。

若不编辑,也可以直接进入下一步;

然后点击 Submit And Next 进入下一步。



#### 图 15Cleaning & Editing结果

(7) 第三个处理部分(Model Estimation),图 15 所示。

页面上部提供刚编辑的文件(aln 格式, 若上一步未编辑则为上一步编辑前的 aln 文件), 并提供下载, 页面左边前两步提供链接可以点击, 回退到对应步骤进行重新操作。

#### 注:模型评估,本版本(V1.0)暂不提供功能。

点击 Submit And Next 按钮进入下一步。

#### (8) 第四个处理部分(Tree Reconstruction),图 16 所示。

Welcome <b>User</b> : lxg! Common U	Iser Panel
Alignment Multiple	Blace choose the method to True Perspectruction:
Cleaning & Editing	Please choose the method to Tree Reconstitucion.
Model Estimation	€ ML
Tree Reconstruction	mBaves
Tree Miner New Marsh	C fdnacomp
Tree visualization	Description (Lattice Description)
	Parameters Setting Panel
	Rete for each exterem
	Transition (transversion ratio
	Use empirical base frequencies from segunce input? Yes
	Base frequencies for A C G T/U (use blanks to separate)
	0.25 0.25 0.25)
	Rate variation among sites Gamma distributed rates 💌
	Coefficient of variation of substitution rate among sites (default:1)
	Number of categories (1-9) (default:1)
	Coefficient of variation of substitution rate among sites(Number 0.001 or more)
	(default:1.0)
	Number of categories (1-9) including one for invariant sites (default:1)
	Fraction of invariant sites (default:0)
	Number of HMM rate categories (default:1)
	HMM category rates (default:1.0)
	Probability for each HMM category ( (default:1.0)
	Rates at adjacent sites correlated?
	(default:1.0)
	Number of times to randomise(Integer 0 or more) (default:0)
	Random number seed between 1 and 32767 (must be odd) (default:1)
	Global rearrangements? No 💌
	Use branch lengths from user trees? N 💌
	Submit And Next
Cooperated by Fai	rylake Botanical Garden & Institute of Botany & Computer Network Information Center. CAS
	,

图 16 Tree Reconstruction 进入

页面主体内容提供构树的四种基本方法,ML、MP(暂不提供)、mrBayes(运行不稳定,暂不推荐使用)、fdnacomp(暂不提供)等。点击相关方法获取相关的参数设置面板。不设置任何参数,则为缺省值。

点击 Submit And Next 进入下一步骤(若选择 mrBayes 进行操作,将会等待相当长时间, 中途可能会出现连接中断的情况,这种推荐使用一键式操作过程)。

Welcome User: lxg! Common Use	er Panel
	Rree Reconstruction Result: <u>s1250736274030.treefile</u>
Alignment Multiple	other files:
	<u>s1250736274030.fdnamlk</u>
Cleaning & Editing	
Model Estimation	Finish
mouriesmanon	
Tree Reconstruction	
Tree Visualization	

图 17 Tree Reconstruction 结果

结果页面内容如图 17 所示,点击 Finish 进入完成。



CopyRight © 2009 Computer Network Information Center, Chinese Academy of Science. All Rights Reserved

图 18 Tree Visualization

(9) 第五个处理部分(Tree Visualization),图 18 所示。

页面主体提供各个中间步骤的结果文件,提供下载。如果顺利进行到构树,则使用 ATV Applet 可视化显示树。关于系统树的各种编辑可以在此完成。

(10) Wizard 过程完成后,该过程操作将记录,并在任务列表(Task List, <u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/taskList.htm</u>)中显示出来。

1.2 一键式处理过程

3.2.1 操作步骤

(1) 选择完所需要处理的序列后,点击 One Click Run 进入一键式操作过程。

一键式操作过程不需要进行详细的参数设置,直接调用已设置好的缺省参数。若没有进行过参数设置,则直接使用系统默认参数。进行页面如图 19 所示。

陆地植物系	统发育平台		HOME	中文   English			
View Public Data	<u>Customize data</u>	Evoke New Task	Customize workflow	Logout			
Welcome <b>User</b> : lxg!	Data Batch Extr	action					
<u>Alignment Multiple</u>							
Cleaning & Editing	>Achlys_AYYCI	<b>PRBCL</b>					
Model Estimation	aagogotggattoaaa;	gogggtgttaaagattacaaattgaotta CPRBCLA	ittatactootgaota				
Tree Reconstruction	gtgttggattcaaagcg	ggtgttaaagattacaaattgaattattat	actcctgactatg				
Tree Visualization	>Bongardia_BO	GCPRBCL cgggtgttaaagattacaaattgactta	ttatactcctgaata				
>Catalophylim, AF 190411 aaactaaagtagtigtiggattcaaagcgggtgttaaagattacaaattgacttattata >Diphylleia_DYHCPRBCL aagtgctggattcaaagcgggtgttaaagattacaaattgaattattatactcctgacta >Dysosma_AF079454 aagtgttggattcaaagcgggtgttaaagattacaaattgaattattatactcctgacta >Epimedium_EPDCPRBCL aagtntggattcaaagcgggtgttaaagattacaaattgacttattatactcctgacta >Jeffersonia_JEFCPRBCL aagtgctggattcaaagcgggtgttaaagattacaaattgacttattatactcctgacta >Nandina_NADRBCL nnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnnn							

图 19 一键式操作页面

(2) 点击 One Click Run 进入下一个参数设置页面,图 20 所示。

Welcome User: lxg! Common U	Iser Panel
	One Click Run Choose Specific Toolkit
Alignment Multiple	Please choose the method to Alignment Multiple:
Cleaning & Editing	
Model Estimation	ClustalW (Emma, Sequence) ClustalW-MPI (local PC)
Tree Reconstruction	ClustalW-MPI (cluster)
Tree Visualization	ClustalW-MPI (Dempcomp 7000)
	Please choose the method to <b>Tree Reconstruction</b> : ML MP mrBayes fdnacomp One-Click Run

图 20 一键式参数设置页面

在该页面中选择所需要耗时最多的两个步骤所采用的处理方式,一个是多重序列比对过程(Alignment Multiple): ClustalW(Emma, Sequence)、ClustalW-MPI(local PC)、ClustalW-MPI(cluster)、ClustalW-MPI(Dempcomp7000)等;另一个是构树过程(Tree Reconstruction):ML、MP、mrBayes、fdnacomp等。

选择好后,点击One-Click Run 按钮,开始执行。页面跳到任务列表显示(Task List,<u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/taskList.htm</u>),如图 21 所示。

系统发育平台				HOME	▶文   En	glish
View Task List	<u>Customize defaul</u>	t parameters	Evoke Ne	ew Task	Log	out
Administrator Panel	Task List	Status	Pauso/Rosumo	Shutdown	Posult	Delet
Mon Aug 24 11:03:33 CST 2000	Enu Thie	normal	Pause	Shutdown	Tresuit	Delet
	条统没育平台 genetic analysis of land View Task List A dministrator Panel Start Time Mon Aug 24 11:03:33 CST 2000				HOME F MARKA Customize default parameters Evoke New Task Mom Aug 24 11:03:33 CST 2000 2000 2000 2000 2000 2000 2000 2	HOME 中文 En FRA 统 没育 平台 genetic analysis of land plants platform View Task List <u>Customize default parameters</u> Evoke New Task Log Administrator Panel Task List <u>Start Time</u> End Time Status Pause/Resume Shutdown Result Mon Aug 24 11:03:33 CST 2000 Pause Shutdown

图 210ne-Click 任务表

3.2.2 任务管理

在用户主界面(Common Panel, <u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/index.htm</u>)中可以 查看到任务列表(最新已完成的十个),并可以查看结果(result)。在任务管理列表界面(Task List, <u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/taskList.htm</u>)中,可以管理一键式执行的任务。

任务列表如图 22 所示,包括 JobName (任务名,唯一标示)、Start Time (任务开始时间)、End Time (任务完成时间)、Status (任务状态,normal 为正常执行、over 为执行完毕、paused 为已暂停)、Pause/Resume (暂停或重启任务)、Shutdown (关闭正在执行的任务)、

Result(宣看仕务执行结果)、Delete(删除历史仕务	lt(查看任务执行结果)、Delete(删除历史任	务	),
--------------------------------	---------------------------	---	----

W	elcome <b>User</b> : lxg!	Administrator Panel							
			Task List						
	Job Name	Start Time	End Time	Status	Pau	ıse/Resume	Shutdown	Result	Delete
	s1251083138898	2009-08-24 11:05:45.0		normal		Pause	Shutdown		
	s1251082364803	2009-08-24 11:03:33.0	2009-08-24 11:03:42.0	over		null	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	result	delete
				·				_	
			First Previous Nex	t Last					

#### 图 22 任务列表

点击 result 链接,将查看历史任务的执行结果。如上面 Wizard 的 Finish 界面。

1.3 使用自己提交的数据处理

数据处理 Wizard 流程化处理过程可以使用自己提交的相关输入文件。如比对过程的 fasta 文件、构树所需要的 aln 文件、可视化所需要的树文件等。

在用户主界面提供了模块化分析的链接,如图 23 所示。

点击上面图中的相关链接即可进入相关处理模块的输入界面。

(1) Alignment Multiple (<u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/ProcessInput.htm?type=0</u>);

(2) Cleaning & Editing (<u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/ProcessInput.htm?type=1</u>);

(3) Tree Reconstruction (<u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/ProcessInput.htm?type=3</u>);

(4) Tree Visualization (<u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/ProcessInput.htm?type=4</u>)  $\mathfrak{P}_{\circ}$ 

				HOME	中文   English	
陆地植物系统	能发育平台					
Phylogenet	ic analysis of land	plants platform				
View Public Data	<u>Customize data</u>	<u>Evoke New Task</u>	Customize workf	low	Logout	
A dministrator Panel	Welcome User: lxg!	Administrator Panel	·			
Group User Panel						
Common O ser ranei	Request list					
Admin Application <ul> <li><u>Users Management</u></li> </ul>		View reque	<b>st list</b> (Latest 10s)			
• <u>request mamagement</u>	num	ertaxon name database	e gene format process	action		
Data Update	1	Berberidaceae nuccore	rbcL gb lxg v	riew data de	lete	
<ul> <li><u>Data Submit</u></li> </ul>		more F	Request data			
Group Application						
<ul> <li>View Data</li> </ul>	Manage Task					
<u>Customize data</u>						
<ul> <li>Evoke New Task</li> </ul>		Task Li	<b>st</b> (Latest 10s)			
• <u>Customize workflow</u>	Tab Nama	Stort Time	End Time	Status	View Degult	
<u>Submit Private Data</u>	a1351092129909	2000 08 24 11:07:02 0	End Thue	Status	view result	
Common Application	\$1251083138808	2009-08-24 11:05:45 0	2000-08-24 11:07:10 0	over	regult	
View Public Data	\$1251082364803	2009-00-24 11:03:43:0	2009-00-24 11:07:19:0	over	result	
• Customize data	more Task					
• Evoke New Task						
Task History List		Custor	<u>nize workflow</u>			
<u>Customize workflow</u>		Erroles o pr	our model our tools			
Modularization Analysi	3	EVOKE A IN	ew workitow task			
<ul> <li>Alignment Multiple</li> </ul>						
<u>Cleaning &amp; Editing</u>						
<u>Tree Reconstruction</u>						
<ul> <li>Phylogeny Evaluation</li> </ul>						
<u>Visualization</u>						
Account Management						
<ul> <li>Modify Password</li> </ul>						
Modify Information						
Cooperated by F	airylake Botanical Garde	n & Institute of Botany & (	Computer Network Infor	mation Cen	ter, CAS	
ielle in	1974	1.11				

图 23 模块化分析的链接

下面以 Tree Reconstruction 为例示例(其它的处理情况类似)。



#### 图 24 构树过程的文件输入界面

点击链接进入构树过程的输入界面,该界面提供一个文本输入框,选择相关文件(aln 格式)后,Submit And Next 按钮可用。点击Submit And Next 按钮后,上传文件,等待片刻

#### 进入构树相关的参数设置界面(图 25)。

陆地植物系	统发育率台			A HOME #	ウ文   English
Phyloger Alignment Multiple	etic analysis of I Cleaning & Editing	and plants platform Tree Reconstruction	Phylogeny Evaluation	Visualization	Logout
Welcome User: lxg! Com	non User Panel				
Alignment Multiple	Please choo	se the method to <b>Tree Re</b>	construction		
Cleaning & Editing					
Model Estimation	© ML © MP				
Tree Reconstruction	• mrB	ayes			
Tree Visualization	🧧 fdna	comp			
	Number(1-9 Rate for eac Transition/t Use empiric Base freque 0.25 0.25 0 Rate variation Coefficient Number of Coefficient Number of Fraction of Number of	P) of substitution rate cate category ransversion ratio al base frequencies from s incies for A C G T/U (use 25) on among sites Gamma d of variation of substitution categories (1-9) of variation of substitution (default:1 categories (1-9) including invariant sites HMM rate categories	gories (defau eqeunce input? Yes blanks to separate) istributed rates rate among sites (default one for invariant sites (default:0 (default:0) (default:0)	(default 1) tt 2.0) t:1) r 0.001 or more) ) lefault:1)	(default:0.25 (default:1) (default:1)

#### 图 25 构树过程的算法选择界面

此页面与 Wizard Run 处理界面稍有不同之处在于左边的模块化处理链接,此处只提供 从开始步骤开始的回退链接(若以 Tree Reconstruction 开始,则此之前的 Alignment Multiple、 Cleaning & Editing、Model Estimation 等均不可回退)。

设置完参数后,点击 Submit And Next 进入下一步,具体操作同前。

处理过程结束后, finish 显示界面, 与之前 Wizard Run 处理后的完成界面有所不同的是, 只显示从开始步骤起完成的结果, 之前步骤不予显示。而且, 自己提交数据的处理过程不列入任务列表中(即不保存)。

1.4 处理软件缺省参数设置

在用户首页(Common Users Panel, <u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/index.htm</u>)点击

#### Customize Workflow (<u>http://phylo.csdb.cn:8080/palpp/user/customize.htm</u>) 链接,进入处理流

程缺省参数设置页面图 26 所示。

Welcome <b>User</b> : lxg! Administrator Panel Please choose the method to set default value:
<ul> <li>ClustalW (Emma, Seqence)</li> <li>ClustalW-MPI (local PC)</li> <li>ClustalW-MPI (cluster)</li> <li>ClustalW-MPI (Dempcomp 7000)</li> <li>ML</li> <li>MP</li> <li>mrBayes</li> <li>fdnacomp</li> </ul>
Parameters Setting Panel
Slow angli ophons Do you want to carry out slow pairwise alignment? Yes Slow pairwise alignment: gap opening penalty 10.0
Slow pairwise alignment: gap extension penalty 0.1
Fast align options Fast pairwise alignment: similarity scores: K-Tuple size 1 (default is 1 for protein, 2 for nucleic)
Fast pairwise alignment: similarity scores: gap penalty 3 (default is 3 for protein, 5 for nucleic)
Fast pairwise alignment: similarity scores: number of diagonals to be considered 5 (default is 5 for protein, 4 for nucleic)
Fast pairwise alignment: similarity scores: diagonal window size 5 (default is 5 for protein, 4 for nucleic)
Fast pairwise alignment: similarity scores: suppresses percentage score?   Yes 💌
Gap options
Multiple alignment: Gap opening penalty 10.0
Multiple alignment: Gap extension penalty  5.0
Use end gap separation penalty?   Yes 💌
Gap separation distance o
List of hydrorphilic residues GPSNDQEKR
No hydrophilic gaps? Yes 🔽
Save

#### 图 26 缺省参数设置页面

页面上方列举各个处理方法,下方根据所选择的方法动态显示参数设置情况。设置完毕,

点击 Save 按钮保存设置结果。

缺省参数设置情况保存到数据库中,待数据处理的时候调用。

## Cooperated by Fairylake Botanical Garden & Institute of Botany & Computer Network Information Center, CAS <u>Email: palpp@cnic.cn</u>