

Manual de Usuario de ATOM (Atlantic Omics)

Versión: 1.0

Fecha: octubre 2025

1. Introducción

ATOM (Atlantic Omics) es una plataforma web que permite ejecutar análisis completamente automatizados de RNA-seq utilizando scripts predefinidos en R. La plataforma genera informes gráficos listos para su uso en presentaciones o artículos científicos y aplica inteligencia artificial para interpretar los resultados, produciendo un documento en formato .docx con un resumen en inglés en formato de artículo científico. Este manual describe los pasos que el usuario debe seguir para preparar los datos, crear proyectos, ejecutar análisis y acceder a los informes generados.

2. Solicitud de Acceso

Para poder tener acceso a la plataforma ATOM, los usuarios deben ponerse en contacto con el administrador a través de la siguiente dirección de correo electrónico: juan.vladimir.delarosa@ulpgc.es solicitando permiso de acceso.

Una vez creado el registro de acceso, el administrador enviará por la misma vía un **nombre de usuario** y una **contraseña**.

Una vez recibidas las credenciales, el usuario podrá iniciar sesión en la plataforma.

3. Acceso a la Plataforma y Recursos Iniciales

El primer paso es iniciar sesión en la plataforma ATOM con el nombre de usuario y contraseña proporcionados. Una vez que hayan ingresado en la página de inicio, al final del panel central, se encontraran los siguientes archivos:

- Este manual de usuario.
- La plantilla de Excel llamada **template.xlsx**, que debe descargarse para preparar los datos, ya cumplimentada a modo de ejemplo.
- Un archivo de ejemplo llamado **counts.txt**, con el formato típico de una matriz de conteo.

4. Preparación de los datos en Excel

El archivo de Excel llamado **template.xlsx** contiene toda la información necesaria sobre las muestras para poder automatizar el análisis y está constituido por dos hojas: **metadata** y **design**. Ambas deben completarse antes de crear un proyecto.

4.1 La hoja metadata

Esta hoja contiene la información de todas las muestras. A continuación, se presenta una tabla con las diferentes columnas y una descripción de los datos contenidos en cada una de ellas:

Columna	Descripción
sample_id *	Nombre de cada muestra
condition *	Estado de la muestra (tratada o control)
treatment *	Tipo de tratamiento aplicado
cell *	Tipo celular
genotype *	Genotipo de la célula
gender *	Género del animal de origen
organism *	Tipo de organismo
molecule *	Molécula estudiada (ej. un factor de transcripción modulado por el tratamiento)
fastq1_file	Nombre del archivo FASTQ1 (para muestras single-end o primer archivo de paired-end)
fastq2_file	Nombre del archivo FASTQ2 (solo para paired-end)
bam_file	Nombre del archivo BAM de alineamiento
counts_file	Nombre del archivo de matriz de contajes con formato: gene_id, seguido de columnas por muestra coincidiendo con sample_id

Nota: Las columnas indicadas con un “*” son campos obligatorios. Para las columnas correspondientes al tipo de archivo de datos para el análisis (fastq1_file, fastq2_file, bam_file o counts_file), solo se deberá rellenar aquella/as columna/s que se corresponda con los datos de partida. En el caso de partir el análisis de un archivo de matriz de contajes, este será el mismo para todas las muestras. Las columnas que no sean usadas deberán dejarse en blanco.

Formato del archivo de matriz de contajes:

La matriz de contajes no es más que un archivo, obtenido a partir del preprocesamiento de las muestras una vez estas han sido alineadas al genoma de referencia, en el cual se muestra el conteo de las lecturas en cada una de las muestras para cada gen referenciado anotado según la nomenclatura de ENSEMBL. Por lo tanto, para aquellos análisis que parten de este tipo de datos, el archivo deberá estar formateado de la siguiente manera:

- La primera columna llamada gene_id (debe ser el identificador de cada gen según el tipo de anotación de ENSEMBL).
- La segunda columna y subsiguientes se corresponderán a los contajes de lecturas de cada una de las muestras, por lo que en sus encabezados se deberá mostrar exactamente el mismo nombre que se ha utilizado en el campo **sample_id** de la hoja **metadata** del archivo Excel **template.xlsx**.

4.2 La hoja design

Esta hoja contiene toda la información que define las comparaciones entre muestras que se analizarán. A continuación, se presenta una tabla con las diferentes columnas y una descripción de los datos contenidos en cada una de ellas:

Columna	Descripción
designID	Nombre del análisis
treatment1	Tratamiento de la primera muestra
treatment2	Tratamiento de la segunda muestra
genotype1	Genotipo de la primera muestra
genotype2	Genotipo de la segunda muestra
gender1	Género de la primera muestra
gender2	Género de la segunda muestra
cell1	Tipo celular de la primera muestra
cell2	Tipo celular de la segunda muestra
analysis_type	Tipo de análisis (ej. rna-seq)
analysis_design	Factor que se usará para la comparación: treatment, genotype, gender o cell

Nota: Las columnas deben rellenarse cuidadosamente para que coincidan exactamente con los valores de la hoja metadata.

5. Creación de un Proyecto

El siguiente paso, una vez que se ha cumplimentado el archivo Excel con la información necesaria para llevar a cabo el análisis, es crear un nuevo proyecto. Para ello hay que clicar en el link “**Crear Proyecto**” situado en el panel izquierdo del “**Menú de Acciones**”.



A continuación, se deberá cumplimentar los campos del formulario “**Crear Nuevo Proyecto**” como se indica a continuación y clicar en el botón “**Crear Proyecto**”:

- **Nombre del proyecto:** Definir un nombre descriptivo.
- **Archivo Excel:** Seleccionar el archivo **template.xlsx** ya cumplimentado.
- **Archivos adicionales:** Seleccionamos todos los archivos necesarios para el análisis, en los formatos FASTQ, BAM o matriz de contajes TXT según lo indicado en el archivo Excel template.xlsx.

Crear Nuevo Proyecto

GW_Vs_SR_2

Archivo Template (Excel):

Seleccionar archivo template.xlsx

Archivos adicionales:

Elegir archivos 2 archivos *

Crear Proyecto

Nota: En el campo Archivos adicionales marcado con un “*” se indicarán tantos archivos como hayan sido seleccionados. En el caso de haber seleccionado un solo archivo, se indicará su nombre

Una vez creado el proyecto, en el menú del panel de la derecha “**Mis Proyectos**”, se mostrarán los diferentes proyectos como carpetas azules con el nombre del proyecto a su derecha. Al hacer clic en la carpeta azul del proyecto, se mostrarán todos los archivos relacionados con el proyecto.



6. Ejecución del Análisis

A la derecha del nombre de los proyectos para los cuales todavía no se ha ejecutado el análisis, se muestra un icono de **play** en color azul, sobre el que deberemos clicar para iniciar el análisis.



Durante la ejecución del análisis, el icono de **play** se reemplaza por una animación de rueda giratoria.



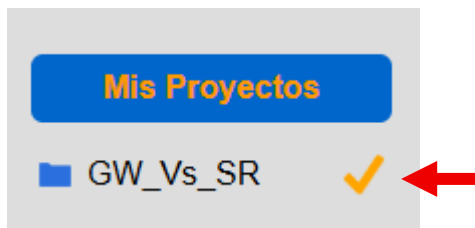
Durante la ejecución del análisis, se muestra el progreso de cada paso del análisis en tiempo real en la ventana central de la plataforma.

Salida RMD

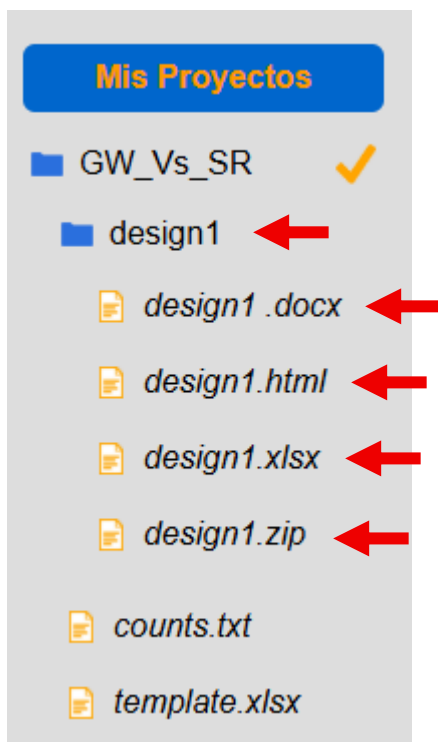
```
Running analysis for designID design1 using rna-seq.Rmd
```

```
processing file: rna-seq.Rmd
1/57
2/57 [load_libraries]
3/57
4/57 [setup_analysis]
5/57
6/57 [load_metadata]
7/57
8/57 [load_sample_info]
9/57
10/57 [start_analysis]
11/57
12/57 [QC_Scatter_Plots]
```

Al finalizar el análisis, el icono de **play** cambia a un **check naranja**, momento en el que se podrá visualizar una o varias carpetas que contienen nuevos archivos generados durante el análisis:



- Un archivo en formato **HTML** correspondiente al informe del análisis con todos los resultados y gráficos que se podrá visualizar en el panel central al clicar sobre él.
- Un archivo en formato **DOCX** correspondiente al resumen de los resultados generado por la IA.
- Un archivo en formato **XLSX** correspondiente a los resultados del análisis de expresión diferencial, de ontología génica y de pathways KEGG.
- Archivo **ZIP** con todos los archivos del análisis comprimidos en un solo archivo para cada diseño especificado en la hoja **design** del archivo Excel **template.xlsx**, listo para descargar.



7. Descarga y Uso de Resultados

Para descargar los resultados del análisis, debemos expandir la carpeta del proyecto para acceder a las carpetas de diseños de análisis generadas y expandir esta a su vez para acceder a todos los archivos generados.

A continuación, debemos clicar en el **archivo ZIP** para descargar el análisis completo. Este archivo contiene todos los demás archivos, y las imágenes del informe **HTML** por separado para su uso en cualquier otro documento.

8. Recomendaciones

- Asegurase de que los nombres de muestras en todas las hojas de archivo Excel coincidan exactamente.
- Indicar en las hojas del archivo Excel sólo aquel archivo de datos de partida del análisis que será usado, ya sean archivos FASTQ sin procesar, BAM o una matriz de conteo, el resto de las columnas deberán de quedar vacías.
- Revisar que todos los campos obligatorios en metadata y design están cumplimentados correctamente antes de crear un proyecto.