

LIMS zur digitale Erschließung und Bewahrung pflanzengenetischer Ressourcen am IPK- Gatersleben



Matthias Lange
12. Juni 2018

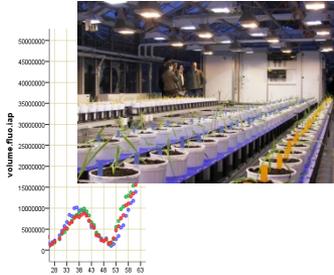


IPK – Leibniz-Institut für Pflanzengenetik und Kulturpflanzenforschung



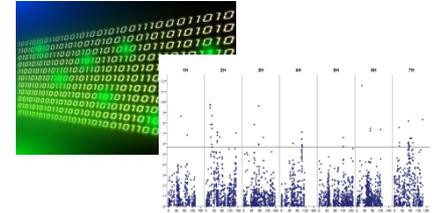
IPK Forschungsschwerpunkte

Anpassung und Nachhaltigkeit



Pflanze-Umwelt
Interaktion

Bereitstellung und Nutzbarmachung



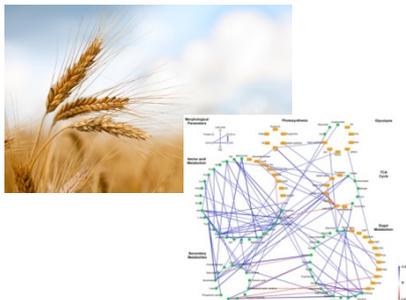
Erschließungs-
konzepte für
PGR

**Biodiversität
der
Kulturpflanzen**

Wachstum
und
Stoffwechsel

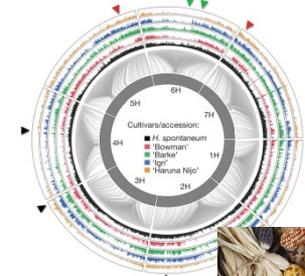
Genom-
diversität
und Evolution

**Pflanzliche
Leistung**

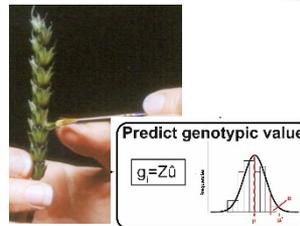


Pflanzliche
Reproduktions-
mechanismen

**Genetische
Vielfalt**



**Züchtungs-
technologien**



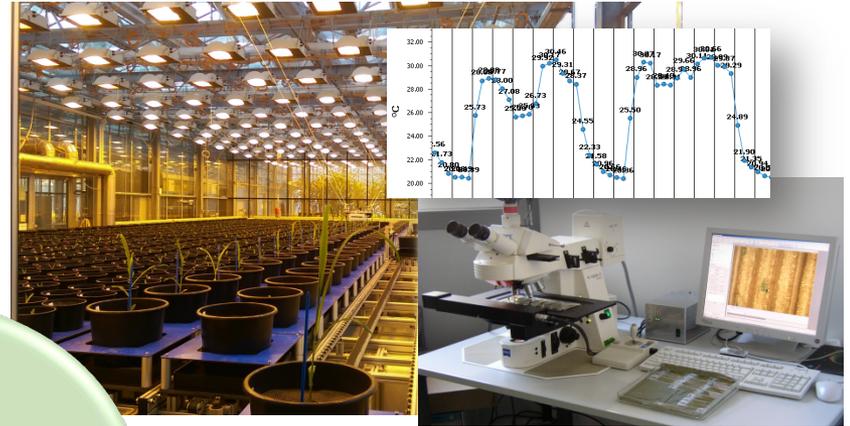
Datenspektrum



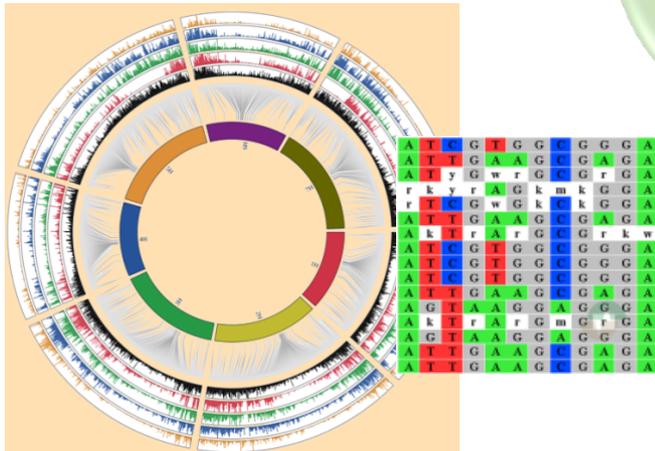
Handschriftliche Aufzeichnungen
Feldbonituren, Lagermanagement



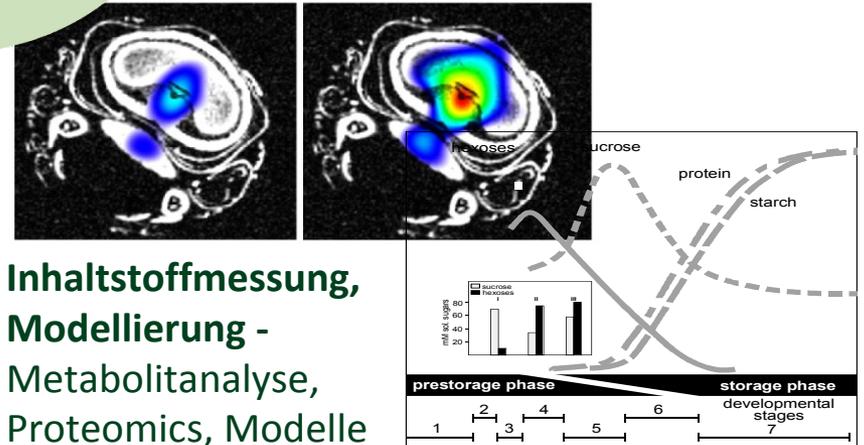
**Biodiversität
der
Kulturpflanzen**



**Automatisierte/Hochdurchsatz
Phenotypisierung - Heterogene
Sensorikplattformen**



**Genotypisierung – Genome und Marker
Daten**



Vorgehensweise LIMS-Einführung am IPK

Entscheidung Institutsleitung zum Bedarf

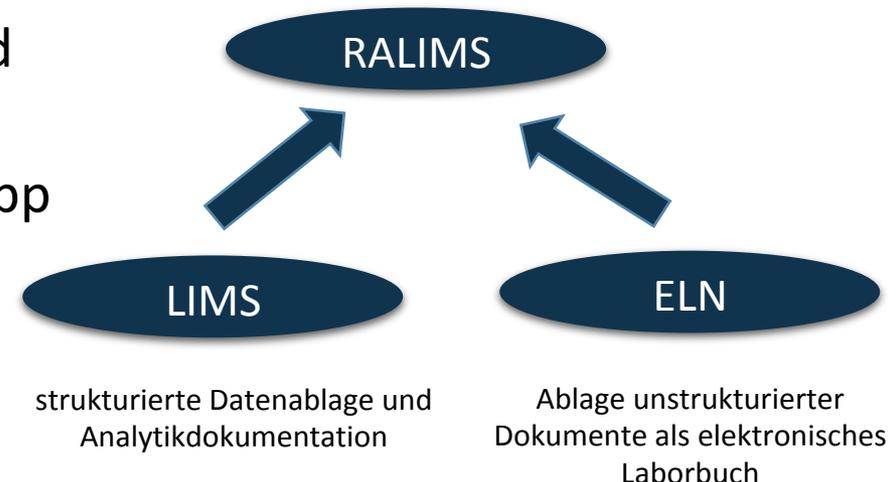
Finanzierung Projektgruppe LIMS über 12 Monate

Eigenschaften IPK-LIMS-System

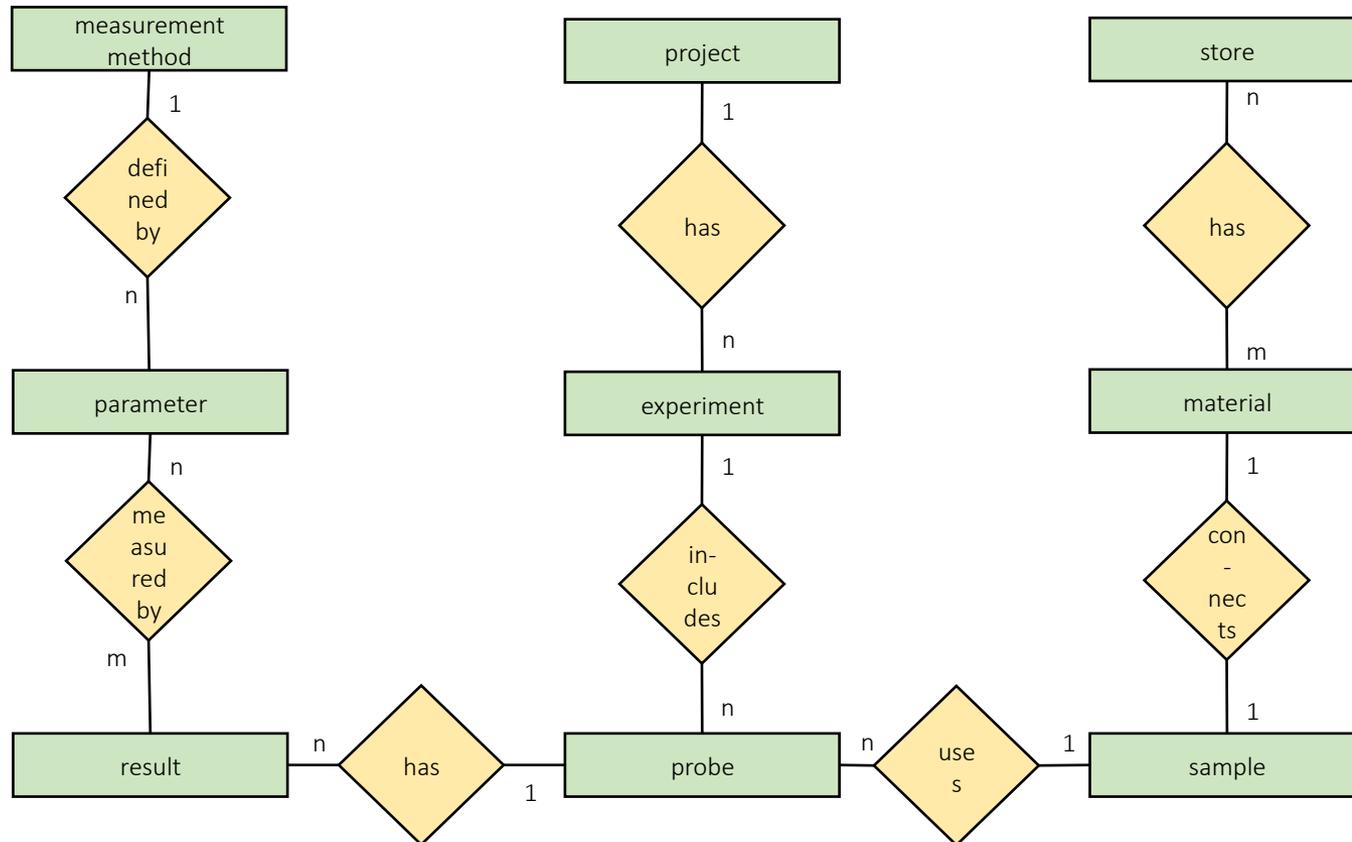
- Kombination aus LIMS und ELN
- Kombination relationale Datenbank und externer Speicher
- Anpassbare, tabellarische Nutzeroberfläche
- Frei programmierbare Import- und Exportschnittstellen
- Zentrale Installation als Remote App (MS-Windows Server)
- Erweiterbares Datenschema
- Auditierung und Datenschutz



A · A · C
Infotray AG



LIMS Datenstruktur – Nachhaltig durch Einfachheit



LIMSOPHY Module

- Gruppiert in Funktionskategorien
- Tabellarische Darstellung von Allgemein zu Details
- Individuelle Ansichten, Layouts und Berechtigungen
- Copy/Paste Integration in Standardsoftware
- Auditierung, Archivierung
- Offline-fähig

The screenshot displays the Limsophy software interface. The main window is titled 'Limsophy' and contains a menu bar with options: Edit, View, Favourites, Layouts, Tools, Modules, Window, and ?. Below the menu is a toolbar with various icons. The main content area is divided into two sections: 'Methods' and 'Methods Version'.

Methods Table:

Name	Methods Typ	Archive Status
Elementar Analyse		aktiv
ELISA		aktiv
Extraktion von DNA		aktiv
Fettsäuren		aktiv
Flow cytometric analysis of le...	Flow cytometric...	aktiv
Flow cytometric analysis of s...	Flow cytometric...	aktiv
Flow cytometric Pufferprotok...		aktiv

Methods Version Table:

Versi...	Description	File	Released on	Released by	Status of Version	Comment
3		alle Präp.protokolle für Same...	08/09/2011	WEIGELT	Freigegeben	
2		alle Präp.protokolle für Samen.d...	05/05/2011	SHARBEL	Ersetzt	
1		Protocols for the Flow Cytometry...	03/05/2011	SHARBEL	Ersetzt	

The 'Methods' section also includes a detailed view for the selected method 'Flow cytometric analysis of seeds'. This view contains fields for Name, Methods Typ (Flow cytometric ana), Archive Status (aktiv), File (Samenpräp), and Responsible (SHARBEL). There is also a Comment field.

At the bottom right of the window, the status bar shows 'Processing Mode' and the user 'Limsophy : LANGE@genophen'.

LIMSOPHY LIMS für strukturierte Daten

- Tabellen und Attributen
- Generische Ergänzungen (EAV)
- Datentypen
 - Wahrheitswerte
 - Text
 - Zahlen
 - Diskrete Werte
 - Dateireferenzen
 - Binärdaten

The screenshot displays the LIMSOPHY LIMS software interface. The main window shows a table of samples with columns for 'Nr.', 'Linie', 'Generation', 'Genotype', 'Datei', 'Pflanzdatum', 'Wachstumsdau.', 'Saatgut', and three 'Result - Val.' columns. Below this, a detailed view of a sample (R096) is shown with a table of leaf area measurements for two different conditions (01 and 02). To the right, a line graph plots 'Biomass mm²' over time, showing two distinct data series (one in red, one in purple). At the bottom left, a microscopic image shows several plant leaves, likely representing the samples being tracked in the system.

Nr.	Linie	Generation	Genotype	Datei	Pflanzdatum	Wachstumsdau.	Saatgut	Result - Val.	Result - Val.	Result - Val.
159	RIL	R096	R096_RIL		09/04/2011	10	✓	0.260	4325	12.67
160	TC-C24	R050	R050_TC-C24		10/04/2011	10	✓	0.310	6322	18.37
161	TC-Col	Q182	Q182_TC-Col		10/04/2011	10	✓	0.560	6347	18.45
162	RIL	Q233	Q233_RIL		10/04/2011	10	✓	0.140	2197	6.38
163	TC-C24	Q157	Q157_TC-C24		10/04/2011	10	✓	0.250	9399	27.31
164	RIL	R178	R178_RIL		10/04/2011	10	✓	0.250	1890	5.49
165	TC-Col	Q233	Q233_TC-Col		10/04/2011	10	✓			

Bestückung	Proben-Nr.	Leaf...	Leaf... mm...	Proben-Nr.	Leaf...	Leaf... mm...	Prot													
A	R096	4325	12,67	3,21	R050	6322	18,37	6,12	Q18											
B	Q088	7601	22,09	7,36	R033	2192	6,37	3,19	R00											
C	R103	1756	5,1	5,1	Q009	3028	8,8	4,4	Q18											
D	Q056	5287	15,36	5,12	R104	5259	15,28	5,09	R07											
E	R114	4478	13,01	4,34	R096	2831	8,23	4,11	R114	5465	15,88	5,29	Q088	2005	5,83	2,91	R094	2706	7,86	3,
F	Q024	3624	10,53	3,51	Q060	3222	9,36	4,68	R007	1948	5,66	2,83	Q230	2103	6,11	6,11	R173	2340	10,26	3,
G	Q179	4809	13,98	4,66	R104	1321	3,84	3,84	R103	1181	3,43	3,43	R007	2038	5,92	5,92	C24	1210	3,52	1,
H	leer	0	0	0	R077	2474	7,19	7,19	R104	3466	10,07	5,04	R077	3681	10,41	3,47	Q180	2941	8,55	4,

LIMSOPHY: ELN Funktionalität

- Elektronisches Laborbuch
- Unstrukturierte Daten
- Vorlagenbasierten Ausfüllen von Laborprotokollen

The screenshot displays the LIMSOPHY software interface. The main window is titled 'RALIMS' and shows a list of experiments under the 'Proben' tab. A specific experiment, 'RNR6 Experiment 14' with the description 'PCR gen. DNA', is selected. The detailed view on the right shows the 'PCR Protokoll Touchdown Taq' protocol with the following components and volumes:

Komponente	Volumen in µL
Taq Master Mix Qiagen (2x)	5 µL
Primer 1 (1µM)	1 µL
Primer 2 (1µM)	1 µL
Water	2 µL

Below the components table is a table detailing the PCR protocol steps:

Step	Temperatur in °C	Zeit in s	Zyklen
Denaturierung	94	120	
Annealing	94	30	
Touchdown	63-53	30	10x
Extension	72	60	
Annealing	94	30	
Touchdown	53	30	30x
Extension	72	60	
Final Extension	72	500	

An inset window shows a thumbnail of a gel image with the following metadata: 'User: Exp. Time: 0:16 sec Upper: 255 Lower: 0 Int.: 0 Date: 21.03.2012 Time: 12:06:51'. The main interface also shows a table of results at the bottom, with columns for 'Parameter', 'Thumbnail (Dat...)', 'Ergebnis - Wert', and 'Date'.

Akzeptanzerhöhung durch Erstellung nutzerspezifische Frontends

Limsofhy

Bearbeiten | Sicht | Favoriten | Layouts | Extras | Module | Fenster ?

Lemnatec_Aufträge

Datenimport | Ergebnisse | Studien

Laden aller Lemnatec_Experimente

1. Wählen Sie bitte das benötigte Lemnatec-Projekt aus und beschreiben Sie Ihr Experiment !

LTA 6-well-tray

LTC 2-pot-config

LTA 12-well-tray

LTC 4-pot-config

LTA single pot

LTC single pot

LTB single pot

2. Importieren Sie ihr CSV-Sheet und speichern Sie ihre Daten im Limsofhy

Datenimport (1. Teilimport)

Datenimport (2. Teilimport)

Speichern

3. Bitte markieren Sie die gewünschten Proben für den Export

Datenexport_Lemnatec



Anlage
▶ LTA 6-well-tray
LTA 12-well-tray
LTA single pot
LTB single pot
LTC 2-pot-config
LTC 4-pot-config
LTC single pot

Numm.../...	Experiment der Anlage	Beginn	Ende	Verantwortlicher	Experimentstatus
▶ 3118	1634AJ_LTA			Dr. Astrid Junker	in Bearbeitung

Assay-Informationen

Ereignisse | Zusätzliche Information | Keywords | Personen | Bereiche | Publikationen

Datensatz für Ereignisse hinzufügen

Name	Beschreibung des Ereignisses	Dateien in der ...
▶ Ereignis	27.08.2016 Carrier stuck in the morn...	
Ereignis	29.08.2016 FluorCam measuremen...	
Datum des Erei...	27.08.2016	
Datum des Erei...	29.08.2016	

Proben (Experimente)

PlantID	Measurement I...	Treatment	Species (...)	Genotyp (...)	Variety	Well/Position	Stc
▶ 1634AJ0...	1634AJ		Zea mays	ZEA 3115		A1	
1634AJ0...	1634AJ		Zea mays	ZEA 3115		A2	
1634AJ0...	1634AJ		Zea mays	ZEA 3115		B1	
1634AJ0...	1634AJ		Zea mays	ZEA 3115		B2	
1634AJ0...	1634AJ		Zea mays	ZEA 3115		C1	
1634AJ0...	1634AJ		Zea mays	ZEA 3115		C2	
1634AJ0...	1634AJ		Zea mays	ZEA 1136		A1	
1634AJ0...	1634AJ		Zea mays	ZEA 1136		A2	
1634AJ0...	1634AJ		Zea mays	ZEA 1136		B1	
1634AJ0...	1634AJ		Zea mays	ZEA 1136		B2	
1634AJ0...	1634AJ		Zea mays	ZEA 1136		C1	
1634AJ0...	1634AJ		Zea mays	ZEA 1136		C2	
1634AJ0...	1634AJ		Zea mays	ZEA 752		A1	

Parameter

	Prüfmethode	Parameter	Ergebnis - Wert	Einheit	Kommentar
▶ <input type="checkbox"/>	01. Carrier-Konf...	seeding date	22.08.2016		
<input type="checkbox"/>	01. Carrier-Konf...	pot	6-well tray		
<input type="checkbox"/>	01. Carrier-Konf...	Covering	no cover		
<input type="checkbox"/>	09. Experiment...	Replicate	6		
<input type="checkbox"/>	02. IsaTab Stud...	Characteristics(Assay s...	22.08.2016		
<input type="checkbox"/>	02. IsaTab Stud...	Characteristics(Assay d...	10		
<input type="checkbox"/>	02. IsaTab Stud...	Characteristics(Growth ...	small LemnaTec phyt...		
<input type="checkbox"/>	03. Rooting Pro...	Rooting medium germi...	substrate 2 (Klasman...		
<input type="checkbox"/>	03. Rooting Pro...	Container type germin...	6-well tray		
<input type="checkbox"/>	03. Rooting Pro...	Container dimension g...	3x3	cm	
<input type="checkbox"/>	03. Rooting Pro...	Number of plants per c...	1		
<input type="checkbox"/>	06. Aerial condi...	start of light peroid post...	06:00		
<input type="checkbox"/>	06. Aerial condi...	end of light peroid post ...	22:00		
<input type="checkbox"/>	08. Watering	Irrigation type germinat...	automated		

Bearbeitungsmod DE | Limsofhy : LANGE@genophen

Projektspezifische Web-Portale

The screenshot shows a web browser window displaying the BRIDGE portal. The browser's address bar shows the URL: `apex.ipk-gatersleben.de/apex/f?p=164:14:427942456578::NO::`. The page features a green header with the 'BRIDGE' logo and a navigation menu on the left with options like Project, Data, Progress, Report, APIs, and Contact. The main content area contains a table with the following data:

Accenumb internal	Last Lims Import	Treatments & Measurements	Fullbotname	Annuality
HOR_16273	17-MAR-2017	comments: It could also be a convar3/not con.2 with spike.Only one spike has branching or could be a con. 3	Hordeum sp.	spring type
HOR_16223	17-MAR-2017	comments: In one of spikes the ending of some of central glumes looks like a new spiklet	Hordeum sp.	spring type
HOR_10801	17-MAR-2017	awns_length: 21.5	Hordeum vulgare L. convar. distichon (L.) Alef. var. nutans (Rode) Alef.	spring type
HOR_10812	17-MAR-2017	awns_length: 13.5	Hordeum vulgare L. convar. distichon (L.) Alef. var. erectum (Rode) Alef.	spring type
HOR_3087	17-MAR-2017	awns_length: 22.5	Hordeum vulgare L. convar. vulgare var. hybernum Viborg	winter type
HOR_11126	17-MAR-2017	awns_length: 15.5	Hordeum vulgare L. convar. distichon (L.) Alef. var. erectum (Rode) Alef.	spring type
HOR_11128	17-MAR-2017	awns_length: 16.5	Hordeum vulgare L. convar. distichon (L.) Alef. var. erectum (Rode) Alef.	spring type
HOR_11137	17-MAR-2017	awns_length: 15.5	Hordeum vulgare L. convar. distichon (L.) Alef. var. erectum (Rode) Alef.	spring type

Status

Querschnittsaufgaben

- Lagerungsverwaltung
- Chemikalien, Gefahrstoffe
- GVO
- Fotoarchiv

Projektdatenmanagement

- Laborbuch/Versuchsprotokollierung
- Primärdatenkatalogisierung und -verwaltung
- Ablage und Organisation von quantifizierten Messdaten
- Migration obsoleter Datenbanken und Informationssystemen
- Laboraufträge und Datenauslieferung
- Projektspezifische Web-Portale

	GESAMT	2017	2016	2015	2014	2013	2012	2011
Proben	2.328.506	1.109.390	162.663	176.540	618.046	48.110	86.444	127.313
Dateien	1.714.149	297.623	261.095	456.352	317.274	178.196	190.319	13.290
Ergebnisse	4.664.003	2.218.708	487.989	353.080	123.6092	96.220	17.288	254.626
Aktive Nutzer (pro Jahr)		160	131	101	54	70	42	nicht mehr verfügbar

Arbeitsschwerpunkte Datenmanagement

• IT-Infrastructure

- Laboratory Information Management System: LIMSOPHY
- Scalable Storage Management System: HSM
- Scalable Hardware: Oracle Data Appliance
- Database Technology: relational, noSQL
- Frontend Technologies (OS-native, Web, Mobile Devs)

Relational DBMS

Students			
ID#	Name	Phone	DOB
S00	Matt	555-4545	06/03/70
S01	Jenny	867-5309	3/15/81
S02	Sean	876-9223	10/31/82

ID#	ClassID	Sem
S00	1001	Fall02
S01	1002	Fall02
S01	1002	Spr03
S02	1003	Spring03

ClassID	Title	ClassNum
1001	Intro to Informatics	1101
1002	Data Mining	1400
1003	Internet and Society	1400

Takes_Course Courses

• FAIR Data Management

- Data Sharing and Publication: DataCite
- Unique Researcher Identifier: ORCID-DE
- Search Engines, Registries, Repositories: diverse
- RESTful API's: Breeding API
- Research Data Management Plans: ongoing



• Defined Processes and Communication

- Minimum Information Standards: MIAPPE, MCPD
- Standards: material naming, IDs, file formats, storage paths
- Lab-Processes and policies: sequencing, chemicals, ...
- User Training and Support

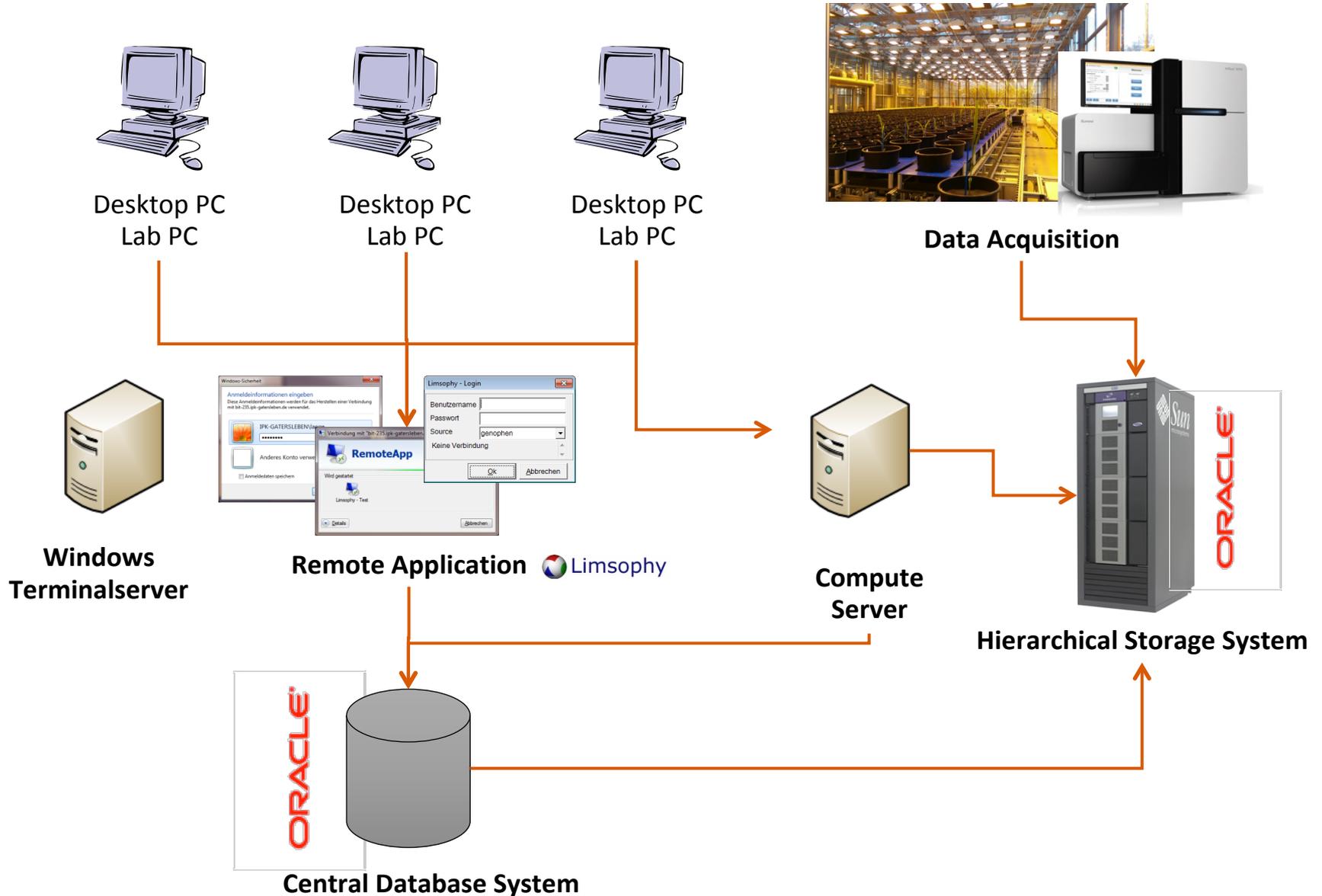




Danke für Ihre Aufmerksamkeit



Architektur der IPK LIMS-Dateninfrastruktur



LIMS als Basis für FAIR Data Management

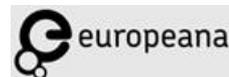
Infrastructure:



Data Publication:



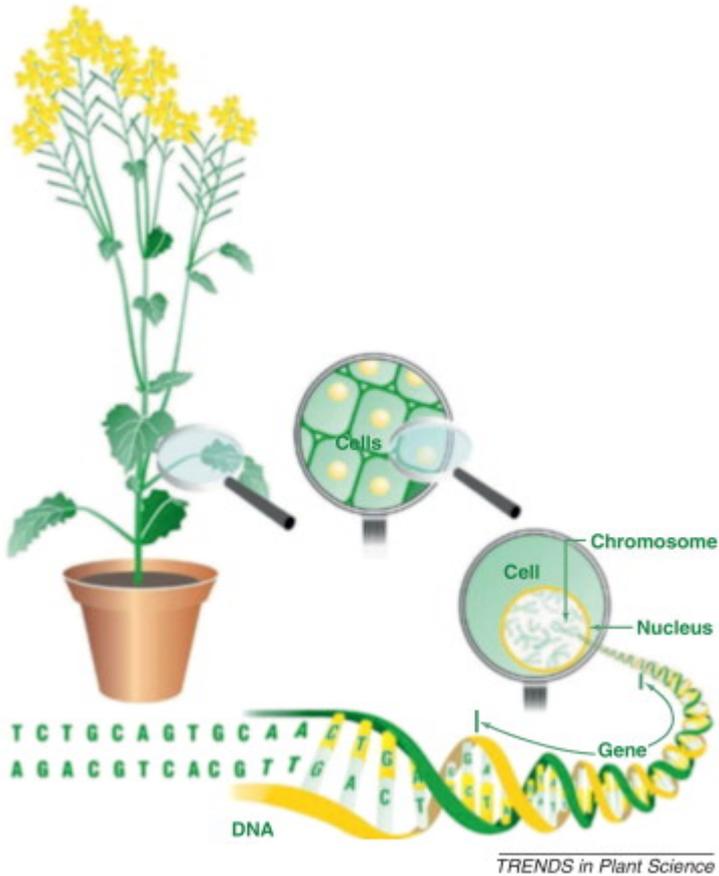
Plant Genetic Resources and Biodiversity:



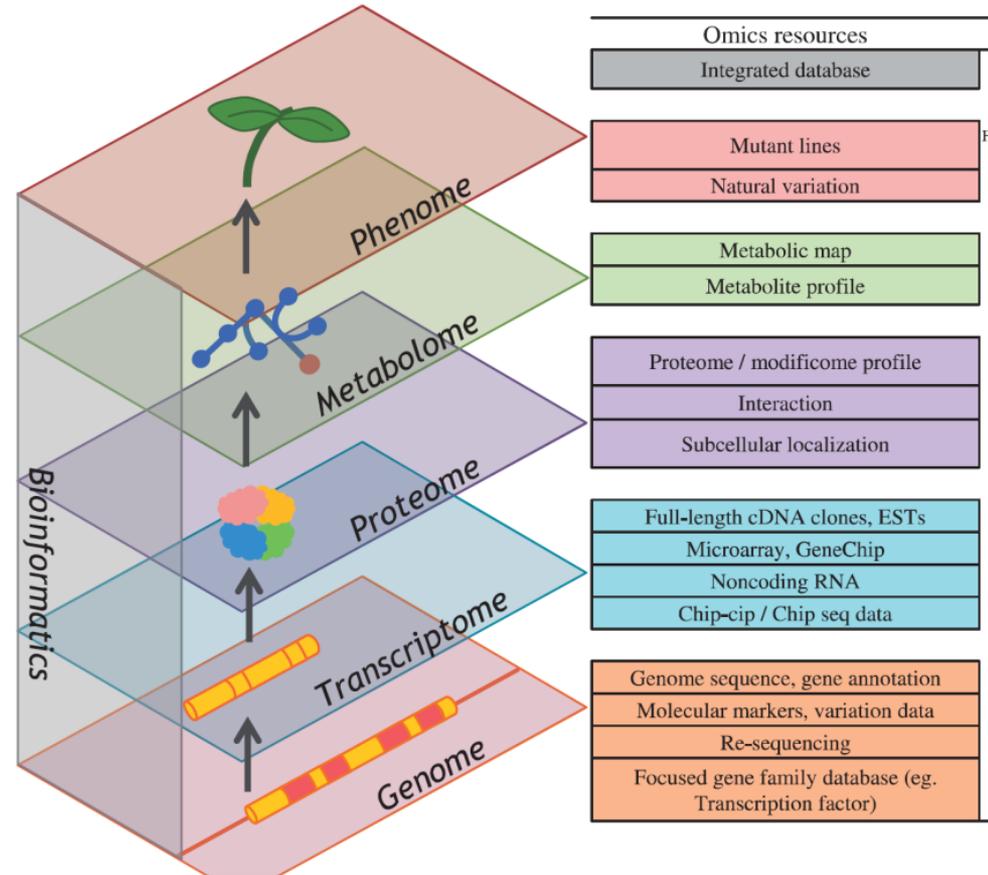
Plant Phenotyping Networks & Standards:



“Vom Gen zum Phen”



(R. Furbank, M. Tester, Trends in Plant Science, 2011)



(K. Mochida K. Shinozaki, Plant Cell & Physiology, 2010)