



Groupe de travail LIMS

Christophe Bruley - CEA Grenoble

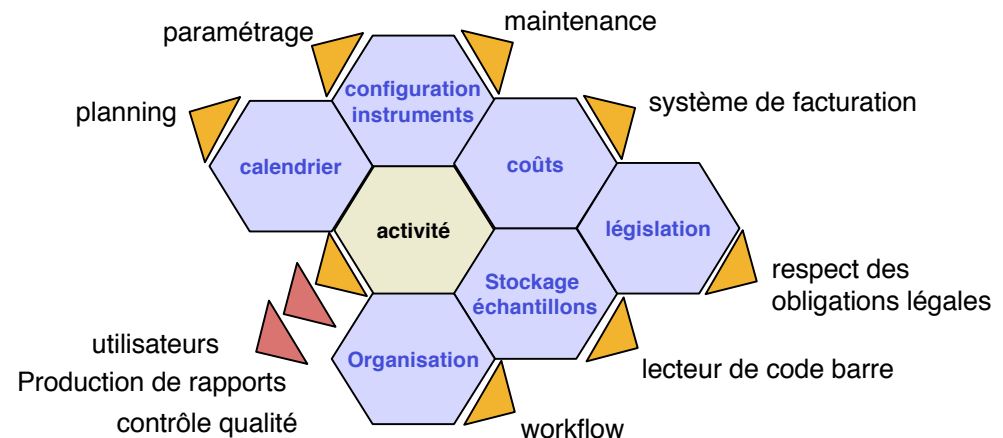
Constat

- **Besoin**

- Volumétrie analyses MS et MS/MS induite par :
 - Le nombre de personnes soumettant des échantillons
 - Le nombre et la nature des instruments utilisés sur la plate-forme
 - La complexité des échantillons (durée des LC)
- Démarche qualité
 - Traçabilité des expérimentations

- **Evaluation des outils commerciaux (LIMS)**

- Couverture fonctionnelle inappropriée
 - Gestion rigide de l'activité qui vise l'uniformité des traitements et non pas le travail prospectif
 - Absence de gestion des données électroniques
 - Manque d'ouverture



Historique

- **Juin 2004 - Informatique et Bioinformatique pour la protéomique (INRIA)**
 - « Intention et proposition autour de la gestion des données de protéomique »

Intention

- Concevoir et développer un système de gestion des données de la plate-forme.
- Le système de gestion des données doit :
 - *Permettre de conserver une trace de l'activité de la plate-forme*
 - *Permettre de conserver les données générées*
 - *Être un support aux analyses*
 - *Être un système modulaire*

Proposition

- La richesse du système dépend directement des forces de développement en présence
 - ➡ **Mutualiser les efforts de développement de différentes plate-forme**

- **Création d'un groupe de travail « LIMS »**

Historique

- **Novembre 2004 : 1ère réunion du groupe de travail**
 - 13 participants (7 plates-formes ou laboratoires)
 - Contenu
 - Comparaison de l'infrastructure, des pratiques et des objectifs des différentes plate-formes.
 - Décisions
 - Création d'un groupe dit « opérationnel » par opposition au groupe chargé de définir les spécifications du système
 - *1,5 personne*
- **Mai 2005 : 2ème réunion du groupe de travail**
 - 13 participants (6 plates-formes ou laboratoires)
 - Contenu
 - Définition du périmètre fonctionnel
 - Ordonnancement des fonctionnalités
 - Décision
 - Une personne à mi-temps rejoint le groupe « opérationnel »

Historique

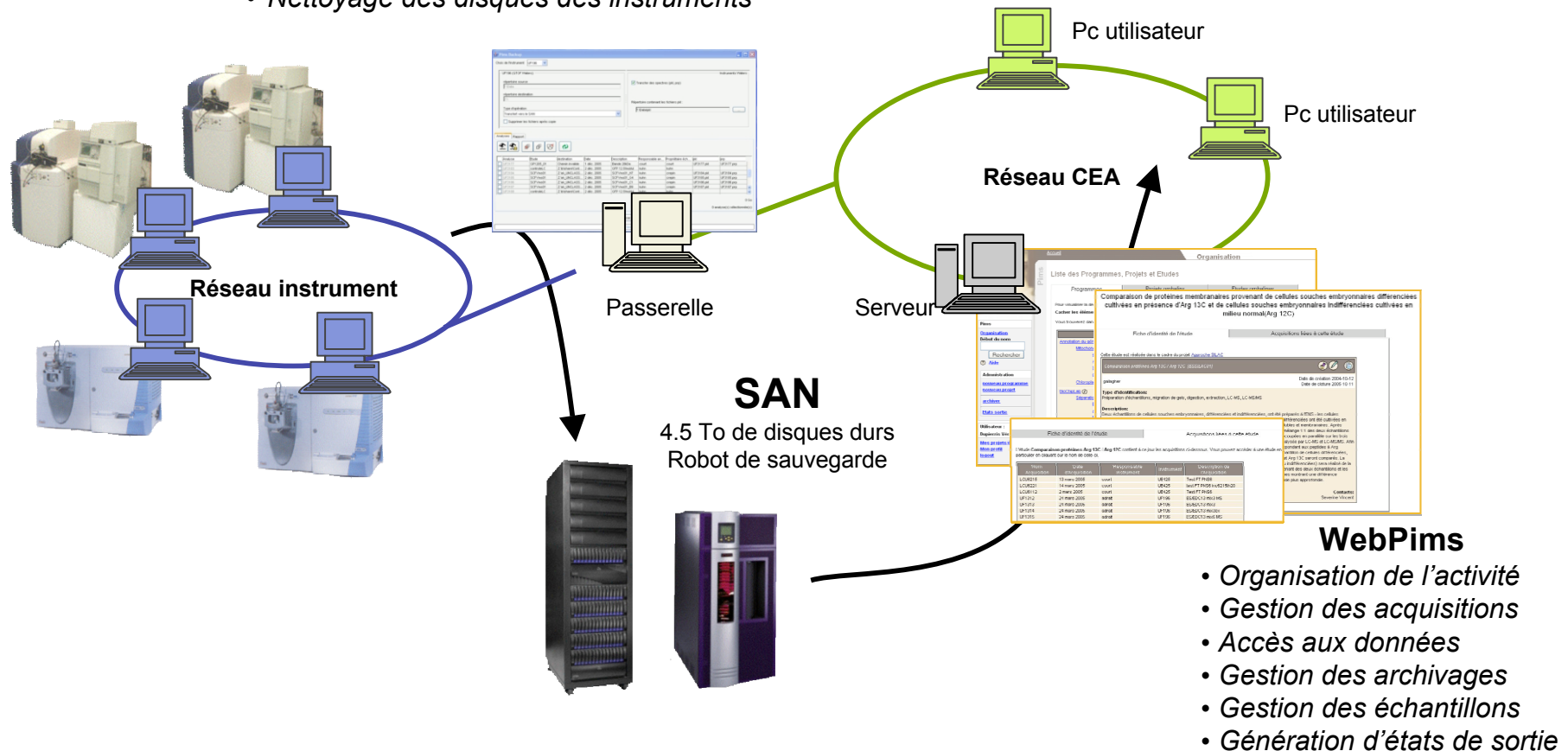
- **Mai 2005**
 - Transfert du code du système vers un serveur géré par l'INRA
 - 4 jours de formation
- **Juin 2005**
 - Mimi Grebici effectue son stage de Master Pro sur la plate-forme Rhône Alpes (3 mois)
- **Juillet 2005**
 - Une personne supplémentaire rejoint le groupe (mi-temps)
 - 2 jours de formation
- **Et depuis ?**
 - Pas d'autre réunion du groupe de travail
 - Seule la Génopôle Rhône Alpes participe au développement
- **Pourquoi ?**
 - Manque évident de moyens de la part des plates-formes intéressées
 - Complexité des technologies utilisées
 - Lourdeur du travail d'animation

- **PIMS**

- Plus qu'un simple outil, il s'agit d'une infrastructure de gestion des données de spectrométrie de masse

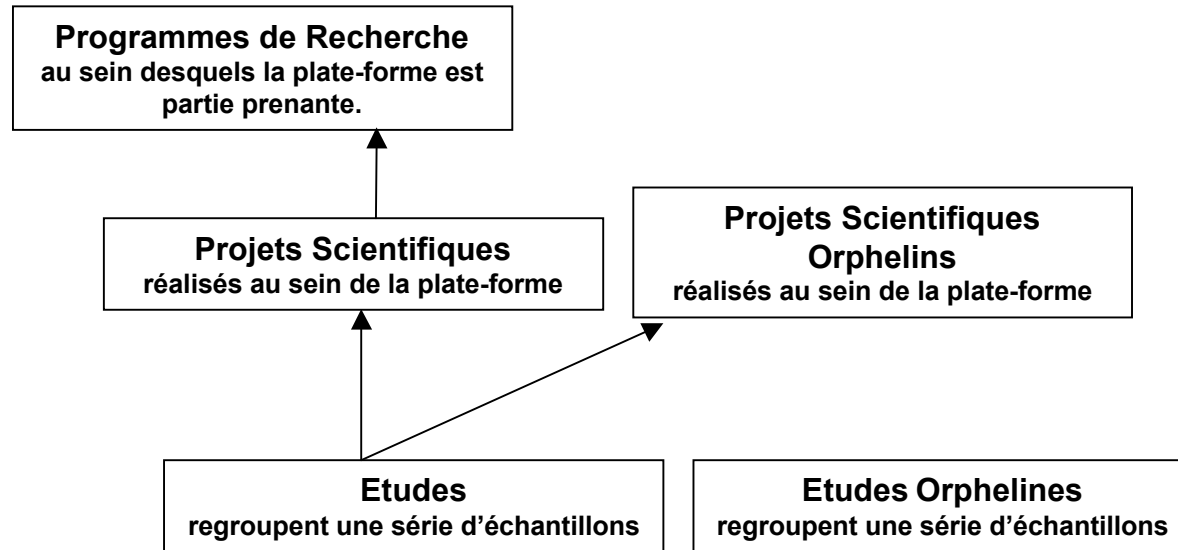
BackPims

- *Transfert des données*
- *Enregistrement d'information dans la base de données*
- *Nettoyage des disques des instruments*



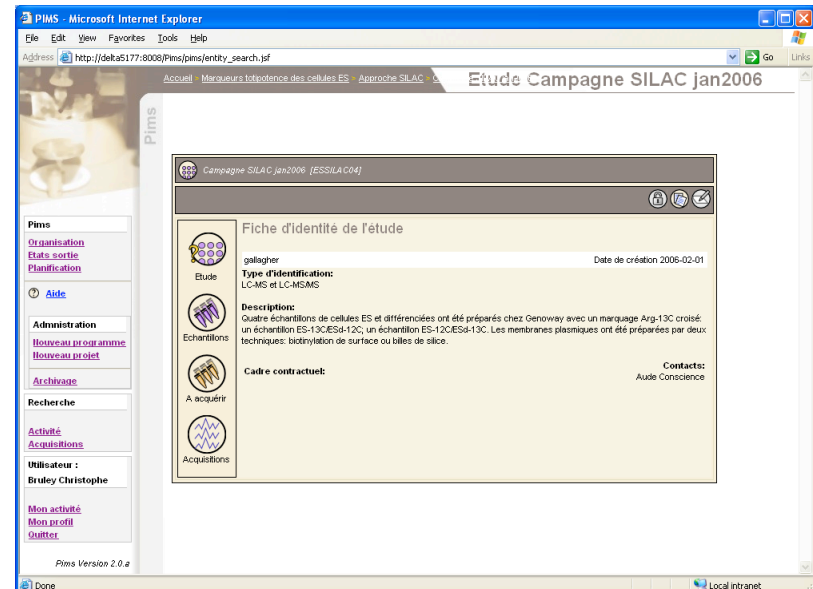
- **Etat des lieux du système**
 - Version 1.0
 - Mise en service en Novembre 2004
 - Ajout de nouvelles fonctionnalités durant l'année 2005
 - Version 2.0
 - Installée depuis Mai 2006
 - Gestion des échantillons
 - Charge actuelle
 - ~15 utilisateurs
 - 4 instruments
 - ~ 280 échantillons / mois
 - ~ 250 Go (données brutes et listes de pics) / mois

- **Organisation de l'activité du laboratoire**



- Actuellement

- 17 Programmes
- 87 Projets dont 19 “orphelins”
- 267 Etudes dont 25 “orphelines”



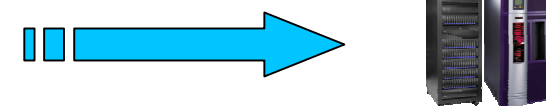
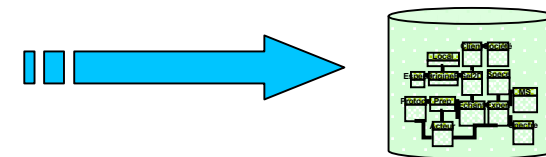
- **Création d'une étude**

The screenshot shows the 'Création d'une étude' (Create a study) form in the PIMS application. The form includes the following fields and options:

- Titre (50 car. max) (*)**: Text input field.
- Institut (libre)**: Text input field.
- Nomenclature (10 car. max) (*)**: Text input field.
- Projet de rattachement**: Text input field with the value 'Approche SILAC'.
- Responsable (*)**: Dropdown menu with the value 'gallagher'.
- Date de création (*)**: Text input field with the value '30/05/2006'.
- Date prévisionnelle de fin**: Text input field.
- Type d'analyse**: Text input field.
- Cadre contractuel**: Text input field.
- Contact(s)**: List box containing 'Adrien Annie', 'ALBAN Claude', 'Ali Hakimi Mohammed', 'Andrieux Annie', and 'André Gilles'. A 'Nouveau' button is next to it.
- Facturation**: A checkbox that is currently unchecked.
- Description**: A large text area for entering details.

At the bottom of the form are two buttons: 'Créer' and 'Abandonner'. A note at the bottom left states '(*) Valeur requise'. The browser window title is 'PIMS - Microsoft Internet Explorer' and the address bar shows 'http://delta5177:8008/Pims/pims/view_project.jsf'. The left sidebar contains navigation links for 'Pims', 'Organisation', 'Etat sortie', 'Planification', 'Aide', 'Recherche', 'Activité', 'Acquisitions', 'Utilisateur : Gallagher Mighread', 'Mon activité', 'Mon profil', and 'Quitter'. The version 'Pims Version 2.0.a' is also visible.

- Définition de l'étude



- Préparation de l'espace associé

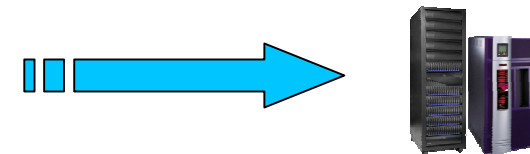
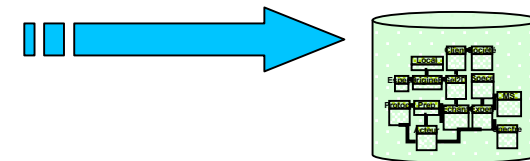
- **Gestion des échantillons**

- Création

- Saisie des informations relatives aux échantillons
 - Identification

The screenshot displays the PIMS web application in a Microsoft Internet Explorer browser window. The main content area is titled 'Création d'échantillons' (Sample Creation). It features a table listing existing samples with columns for Name, Original Name, Description, Acquisitions, and Status. Below the table, there are three steps for registration: Step 1/3 (Biological Origin), Step 2/3 (Information per sample), and Step 3/3 (Validation). The 'Etape 1/3' form is expanded, showing fields for 'Origine biologique' (Species, Cell/Tissue Type, Genus, Sub-cellular Location) and 'Fichiers attachés' (File upload). A 'Remettre à zéro' (Reset) button and a 'Suivant >' (Next) button are also visible.

- Description de l'échantillon
 - } origine biologique
 - } volume
 - } pré-traitement
- Description de la demande



- Informations annexes
 - Fiche Demande d'analyse
 - Fiche Echantillon

- **Gestion des échantillons**
 - Planification des analyses

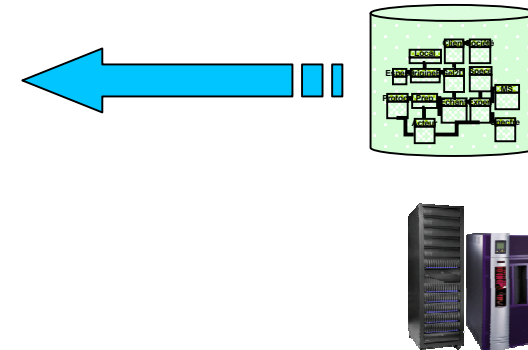
The screenshot shows the PIMS web application in a Microsoft Internet Explorer browser window. The page title is "Planning général" and the main heading is "Liste des échantillons en attente d'acquisition". Below this, there is a dropdown menu and a table of samples. The table is divided into two sections: "QTOF Ultima" and "type instrument non spécifié".

Echantillon	Etude	Responsable	Type Instrument	Acquisition	Description
GN15mpat05_HMb	GN15mpat05	kuhn	QTOF Ultima		Test TOF/TOF bande 10 peu complexe (MP)
GN15mpat05_2Da	GN15mpat05	kuhn	QTOF Ultima		Test TOF/TOF spot 2D (ET)
GN15mpat05_2Db	GN15mpat05	kuhn	QTOF Ultima		Test TOF/TOF spot 2D (ET)
GN15mpat05_2Dc	GN15mpat05	kuhn	QTOF Ultima		Test TOF/TOF spot 2D (ET)
GN15mpat05_2Dd	GN15mpat05	kuhn	QTOF Ultima		Test TOF/TOF spot 2D (ET)
GN15mpat05_2De	GN15mpat05	kuhn	QTOF Ultima		Test TOF/TOF spot 2D (ET)
SPM03mpen02_01	SPM03mpen02	kuhn	QTOF Ultima		Stacking
SPM03mpen02_02	SPM03mpen02	kuhn	QTOF Ultima		Stacking
SPM03mpen02_03	SPM03mpen02	kuhn	QTOF Ultima		Stacking
PRGNymv05_C2	PRGNymv05	kuhn	QTOF Ultima		Bande 10 Bleu
PRGNymv05_I08	PRGNymv05	kuhn	QTOF Ultima		Bande 10 Bleu
PRGNymv05_P81	PRGNymv05	kuhn	QTOF Ultima		Bande 10 Bleu
PRGNymv05_P71	PRGNymv05	kuhn	QTOF Ultima		Bande 10 Bleu
PRGNymv05_P81	PRGNymv05	kuhn	QTOF Ultima		Bande 10 Bleu
PRGNymv05_I07	PRGNymv05	kuhn	QTOF Ultima		Bande 10 Bleu
PRGNymv05_C3	PRGNymv05	kuhn	QTOF Ultima		Bande 10 Bleu
PRGNymv05_P41	PRGNymv05	kuhn	QTOF Ultima		Bande 10 Bleu
PRGNymv05_P81	PRGNymv05	kuhn	QTOF Ultima		Bande 10 Bleu

Echantillon	Etude	Responsable	Type Instrument	Acquisition	Description
ESSILAC04_T114b_2	ESSILAC04	galagher			Mélange vV(1:30)E513C:ED12C.
ESSILAC04_T114b_4	ESSILAC04	galagher			Mélange vV(1:30)E513C:ED12C.

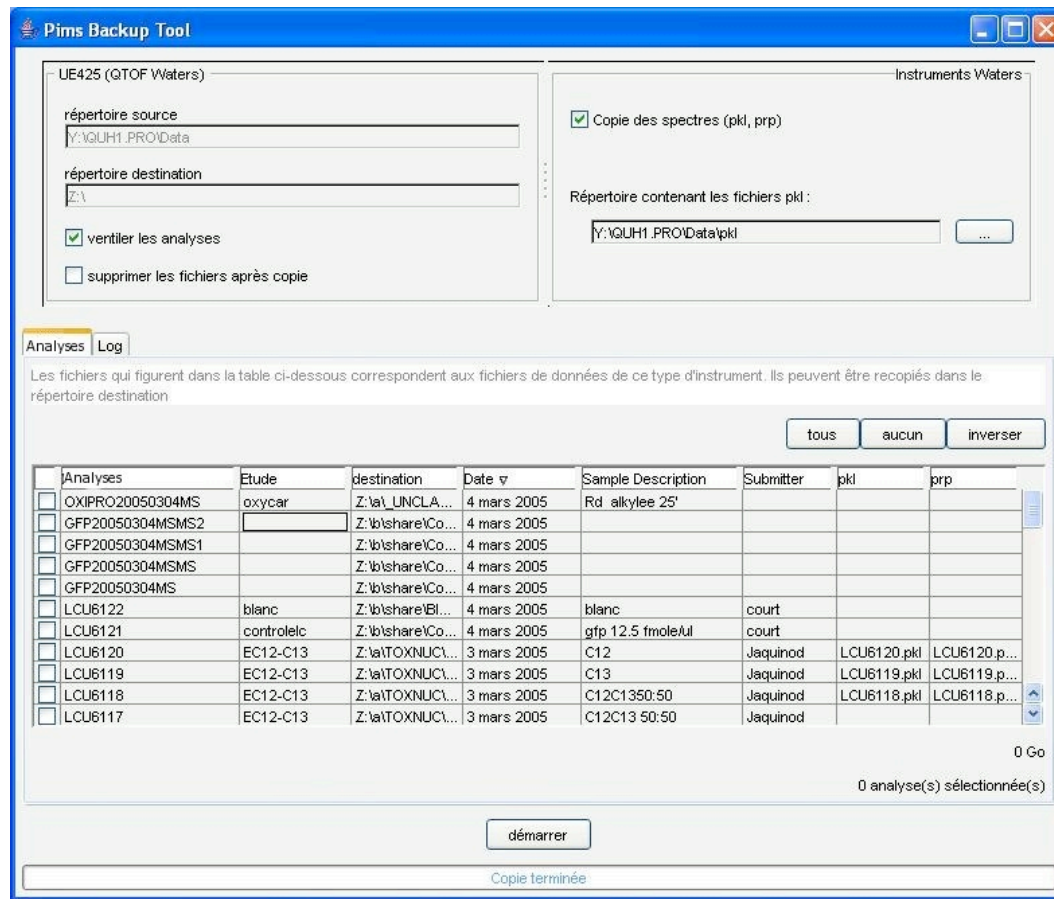
At the bottom of the table, there is a button labeled "Exporter toute la liste de planification".

- Liste d'échantillons à passer en masse
 - } étude de rattachement
 - } identification
 - } propriétaire de l'échantillon
- Export Excel

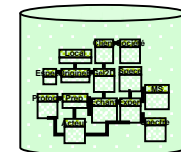
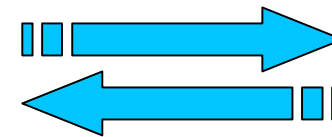


- **Gestion des données d'acquisition**

- Transfert des données des instruments vers une zone de dépôt
- Suppression sécurisée des acquisitions après leur transfert
- Organisation des données en fonction de l'étude auxquelles elle appartient



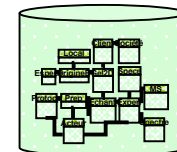
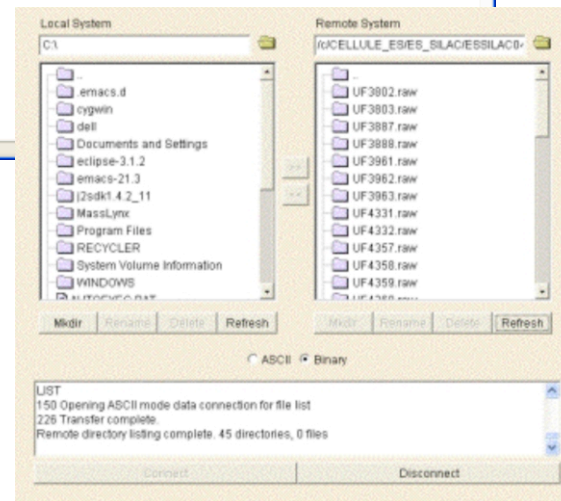
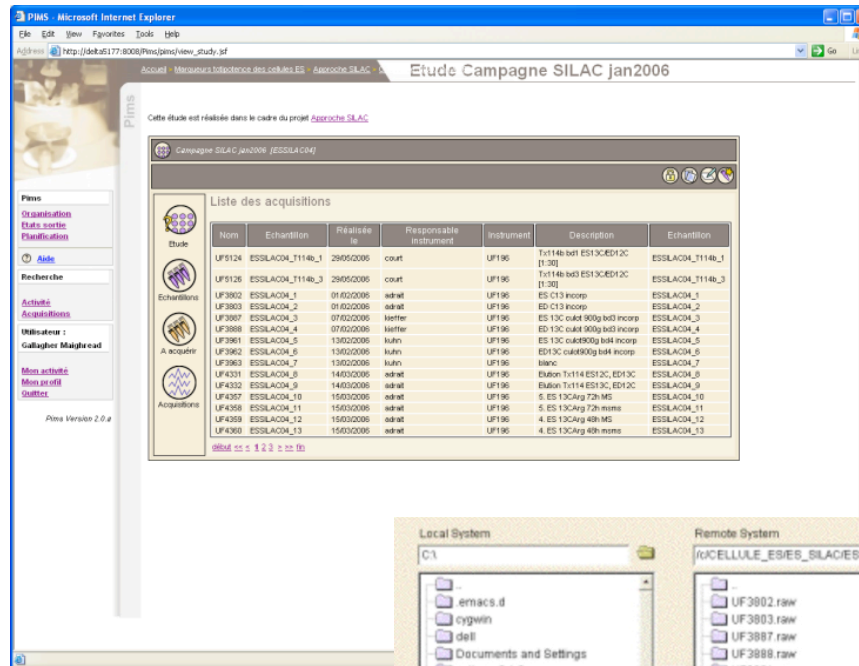
- Description de l'acquisition
 - } Paramétrage Analyse
 - } Responsable
- Information sur l'instrument



- Données brutes
- Listes de pics

- **Gestion des données d'acquisition**

- Accessible aux utilisateurs du système pour un transfert vers leur poste de travail



- Données brutes
- Listes de pics

- Recherches multicritères

Acquisitions

Cette recherche permet de retrouver des acquisitions répondant aux critères ci-dessous.

Nom: Type d'acquisition: Recherche Propriétaire échantillon: adrait
 Instrument: UF196 Responsable instrument: -Indifferent-
 Réalisée(s) après le: 01/05/2006 et avant le: 30/05/2006

Résultat de la recherche

7 acquisition(s) trouvée(s)

Résultat de la recherche des acquisitions de type "Recherche" effectuée(s) sur le spectrometre "UF196"

Propriétaire de l'échantillon "adrait"
 Réalisée : après le 01/05/2006 avant le 30/05/2006

Acquisition(s) trouvée(s)						
Nom	Echantillon	Réalisée le	Responsable instrument	Instrument	Description	Etude
UF5101	equapep01_23	23/05/2006	adrait	UF196	pepAqua thermo di250	analyses MS des peptides synthétiques marqués
UF5102	equapep01_24	23/05/2006	adrait	UF196	pepAqua thermo di250	analyses MS des peptides synthétiques marqués
UF5104	equapep01_25	23/05/2006	adrait	UF196	pepAqua Sigma1 di250	analyses MS des peptides synthétiques marqués
UF5105	equapep01_26	23/05/2006	adrait	UF196	pepAqua Sigma1 di250	analyses MS des peptides synthétiques marqués
UF5106	equapep01_27	23/05/2006	adrait	UF196	gtp 3trioles AI	analyses MS des peptides synthétiques marqués
UF5107	equapep01_28	23/05/2006	adrait	UF196	pepAqua Sigma2 di250	analyses MS des peptides synthétiques marqués
UF5108	equapep01_29	24/05/2006	adrait	UF196	pepAqua Sigma2 di250	analyses MS des peptides synthétiques marqués

Activité

Cette recherche permet de retrouver des programmes, projets et/ou études répondant aux critères ci-dessous. Le nom de l'entité peut être indiqué seulement par la/les première(s) lettre(s).

Programme Projet Etude
 Titre: Responsable: -Indifferent-
 créé(s) après le: 01/01/2006 avant le:

Résultat de la recherche

12 Projet(s)
73 Etude(s)

Résultat de la recherche des entités de l'organisation créé(s) : après le 01/01/2006

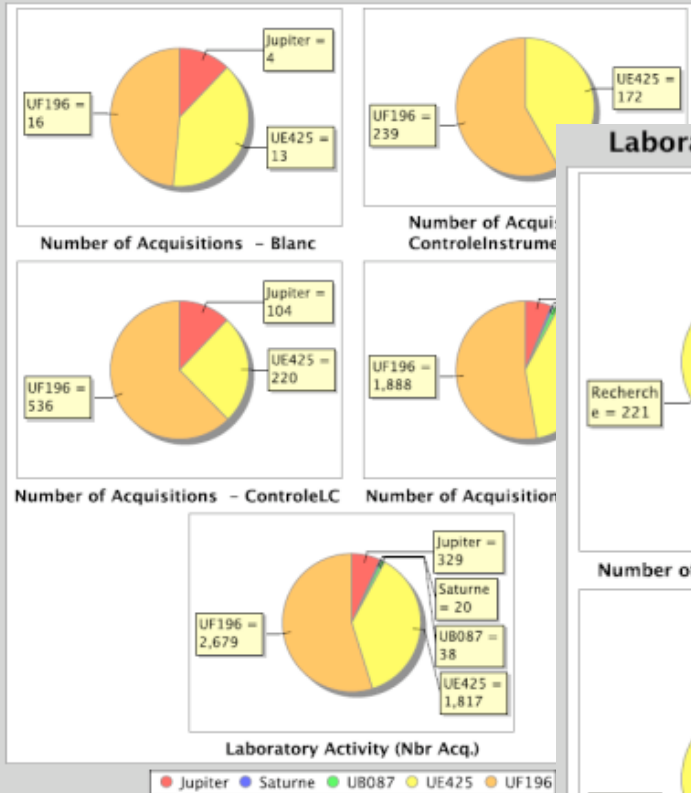
Projet(s)				
Titre	Nomenclature	Créé le	close le	Responsable
Optimisation Saturne	OPTSAT	11/01/2005		masselon
Optimisation Jupiter	OPTJUPITER	19/01/2005		masselon
Installation Junoer	INST-JUP	23/01/2005		masselon
Installation Saturne	INST-SAT	23/01/2005		masselon
Boîtier d'ubiquité	UBI	24/01/2005		jaquinod
Professeur du complexe métabolique du virus TBMV	PRONymv	08/02/2005		ferro
Optimisation Europe/Calvada	OPT-EUCA	14/02/2005		masselon
Fiberon	Fiberger200	23/03/2005		brugere
LysaCC-stratégie ASD	HYDRALAZ	03/04/2005		dupuis
Module Protéomique	ModuleProt	20/04/2005		cout
Chloroplaste d'A. thaliana	AT-CHLORO	26/04/2005		masselon
Recherche des peptides Mer chez Chlamydomonas	CHRE-ITER	26/04/2005		tarati

Etude(s)				
Titre	Nomenclature	créée le	close le	Responsable
boines recombinantes produites in vitro	VITROTK01	03/01/2006		brun
Mise au point d'un mélange de peptides tests	PEPMIXLC	06/01/2006		kielffer
Complexe associé à la protéine TgAvasah	Musash1_AG	09/01/2006		kielffer
Etude du phosphorectome différentiel	ESphosph01	09/01/2006		gallagher
Recepteur adéno-virus	LEMBA001	16/01/2006		jaquinod
tests de dilution en solution	equapep01	20/01/2006		adrait
contrôle sur est Ai de digest en solution	equapep02	24/01/2006		adrait

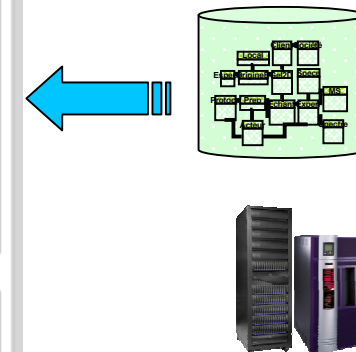
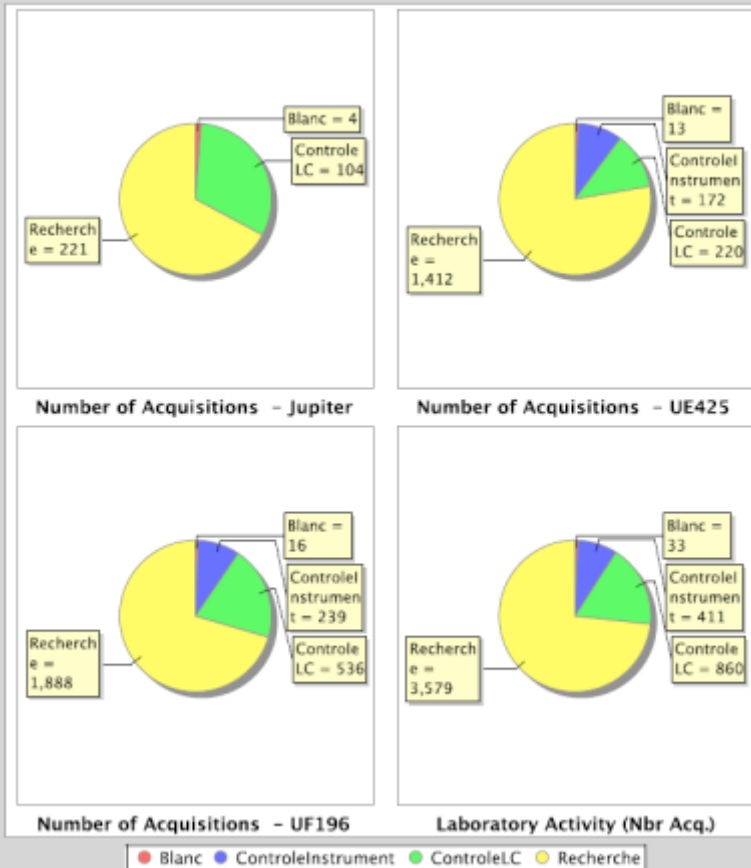
- **Pilotage de l'activité de la plate-forme**
 - Etats de sorties

- Données sur les acquisitions
- Données sur l'activité

Laboratory Acquisition Activity per acquisition nature



Laboratory Acquisition Activity per instruments



Perspectives

- **Embauche de Mimi Grebici**
 - Soutien du RNG pour l'année 2006
 - Développement et aide au déploiement de PIMS
- **De nouvelles « forces vives »**
 - Génopole Montpellier Languedoc-Roussillon
 - Christelle Dantec (P. Jouin)
 - Recrutement en cours (M. Rossignol)
- **Etat d'avancement PIMS**
 - Stabilité éprouvée depuis 18 mois
 - Déploiement possible sur d'autre plates-formes

- **Comment gérer le partage de PIMS ?**

- Evaluation de l'adéquation entre l'infrastructure, les pratiques, les besoins de la plate-forme et le système existant :

1. Parfaite adéquation ...

- Aide à l'installation
- Formation à l'utilisation
- ... dans la mesure de nos moyens

2. Fonctionnalités manquantes - 3 cas de figure :

- *Des ressources et compétences disponibles au sein de la plate-forme*
 - Intégration à l'équipe de développement
 - Aide aux spécifications et au développement
- *Des ressources ... financières disponibles*
 - Aide aux spécifications et à l'estimation du travail nécessaire
 - Via un contrat de collaboration, financement d'un poste sur la plate-forme Rhône-Alpes
 - Encadrement
 - Réalisation
- *Des besoins ... mais pas de moyens*
 - Aide à l'expression des besoins
 - Lobbying commun auprès des instances de tutelle.