



LOGS

im universitären Service an der FSU Jena

—

Resumé und aktuelle Einblicke

Oder: Wie man mehr Zeit für die interessanten Dinge bekommt.



Dr. Peter Bellstedt

Head of NMR (until 2022)



Über was wir reden werden

- Ausgangssituation an der FSU Jena 2020
- Ziele und Umsetzung unser „Digitalisierungsoffensive“
- Rechtliche Einbindung (falls wir alle Lust dazu haben)
- Q&A I

- LOGS Python
- Q&A II

Ausstattung 2020

NMR-Plattform

IAAC

- 400 MHz
- 400 MHz
- **600 MHz** ❄️

IOMC

- 250 MHz
- 300 MHz ^{OA}
- 400 MHz ^{19F{1H}}

- 300 MHz ^{OA}
- 400 MHz ^{ssMAS}
- 500 MHz ^{hrMAS / ❄️}

OA: Open Access, ss: solid-state, hr: high-resolution, MAS: Magic Angle Spinning,
❄️ : Cryo-probehead (He) / Prodigy (N₂), Locations: [Humboldtstr. 8/10](#), [ZAF](#), [CEEC](#)
Inverse Probehead

2023 plus:

- 300 MHz ^{HT-OA}
- 800 MHz ^{BioNMR}

Situation 2020

- Geräte verteilt auf 4 Standorte
- > 15 NMR-affine Arbeitsgruppen
- > 30.000 Proben pro Jahr

Ziele und Wege der „Digitalisierungsoffensive 2020“

- Verknüpfung von strukturellen Informationen mit NMR-Daten
- Persönliche Zuordnung der Spektren
- Browserbasiertes Abrufen der Spektren

Ziele und Wege der „Digitalisierungsoffensive 2020“

- Verknüpfung von strukturellen Informationen mit NMR-Daten

Elektronisches Messauftragsformular mit Struktureditor

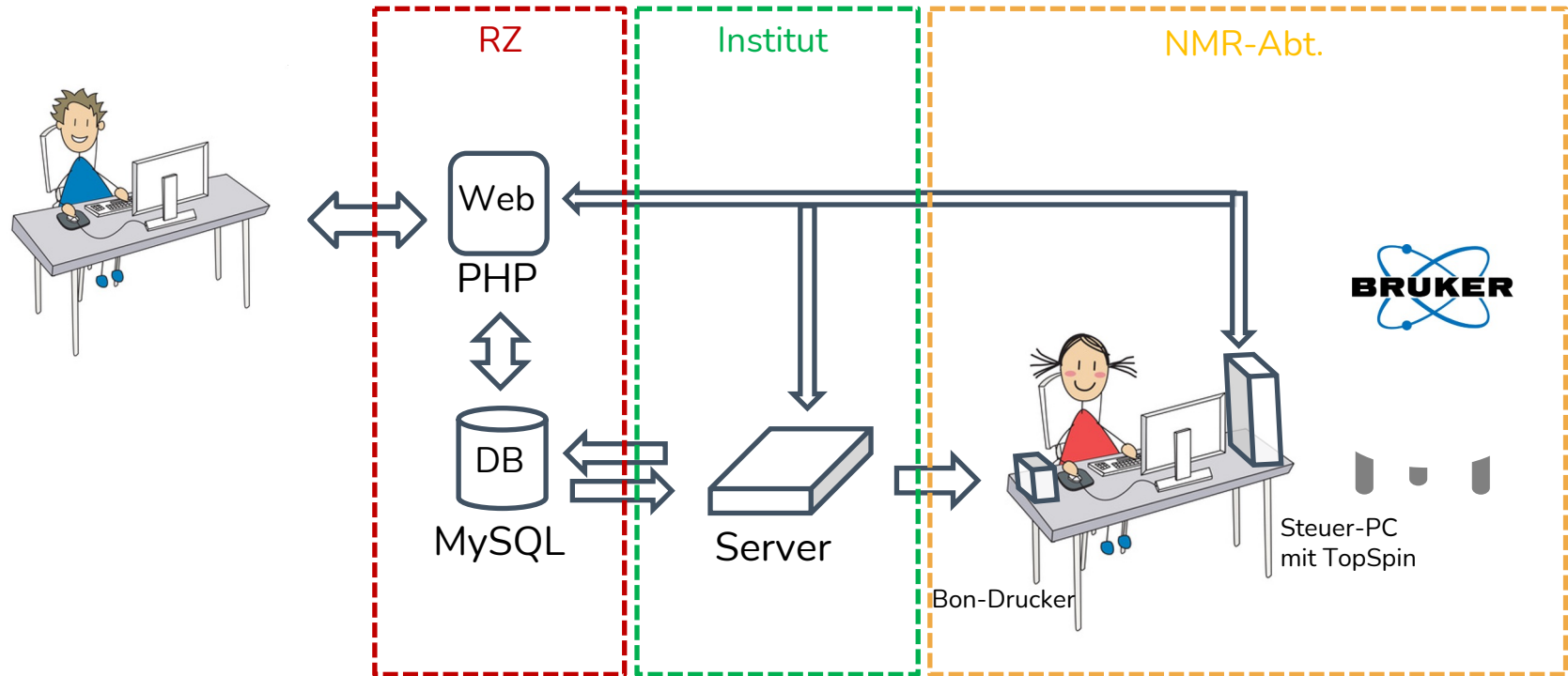
- Persönliche Zuordnung der Spektren

Login mit RZ-Account (via LDAP); einfacher eindeutiger Barcode

- Browserbasiertes Abrufen der Spektren

Kommerzielle Lösung: LOGS

Setup für elektronische Messaufträge



Live Demo: Messauftragsformular

(Offline Screenshots auf den nächsten Folien)

ste ●

Gruppe: Nothing selected Your name Tel.nr (intern)

Proben-ID: Ihre Initialien

Ist die Probe ein Polymer

Bitte zeichnen Sie mit Hilfe des
hinterlegt und später in Ihrem Aus
diese in den meisten Fällen bequ
lokal auf Ihrem Rechner speichern

Bitte melden Sie sich mit Ihrem URZ-Login an.

Nutzername:

Passwort:



[Warum soll ich mich anmelden?](#)

[Ich habe keinen URZ-Login.](#)

Gruppe: Nothing selected	Your name	Tel.nr (intern)
---------------------------------	-----------	-----------------

Proben-ID: Ihre Initialien (2-3)	-	eindeutige ID (1-1:
---	---	---------------------

Ist die Probe ein Polymer ? Nothing	d-Solvent: Nothing	wie viel?	mg	+24	°C
--	---------------------------	-----------	-----------	-----	-----------

Bitte zeichnen Sie mit Hilfe des nachfolgenden Editors die **chemische Struktur** Ihrer Substanz. Diese wird dann automatisch bei Ihren Messdaten hinterlegt und später in Ihrem Auswertprogramm angezeigt. Wenn Sie Ihre Struktur bereits als Molfile auf Ihrem Computer gespeichert haben, können Sie diese in den meisten Fällen bequem per *Drag&Drop* oder über den *Load*-Button in das Editorfeld laden. Über das Diskettensymbol läßt sich die Struktur lokal auf Ihrem Rechner speichern.

The image shows a chemical structure editor interface. At the top, there is a toolbar with icons for copy, paste, save, undo, redo, clear, and delete. On the left side, there is a vertical toolbar with icons for mouse selection, drawing a bond, drawing a line, a carbon atom (C), a ring structure, and a plus/minus sign. The main area is a large, empty white space for drawing the chemical structure. At the bottom, there is another toolbar with icons for zoom in, zoom out, pan, and other navigation functions.

Bitte geben Sie nun die gewünschten **NMR-Experimente** an. Beachten Sie dabei die X{Y} Nomenklatur für Breitbandkopplungen. Wenn Sie also zum Beispiel ein Phosphorspektrum ohne Kopplungen zu Protonen haben möchten geben Sie "31P{1H}" an, ansonsten lediglich "31P".



Exp.1



Exp.2



Exp.3



Exp.4



Exp.5



Exp.6



Haben Sie Bemerkungen/Hinweise? (nur bei elektron. Übertragung)

Zur NMR Abteilung übertragen

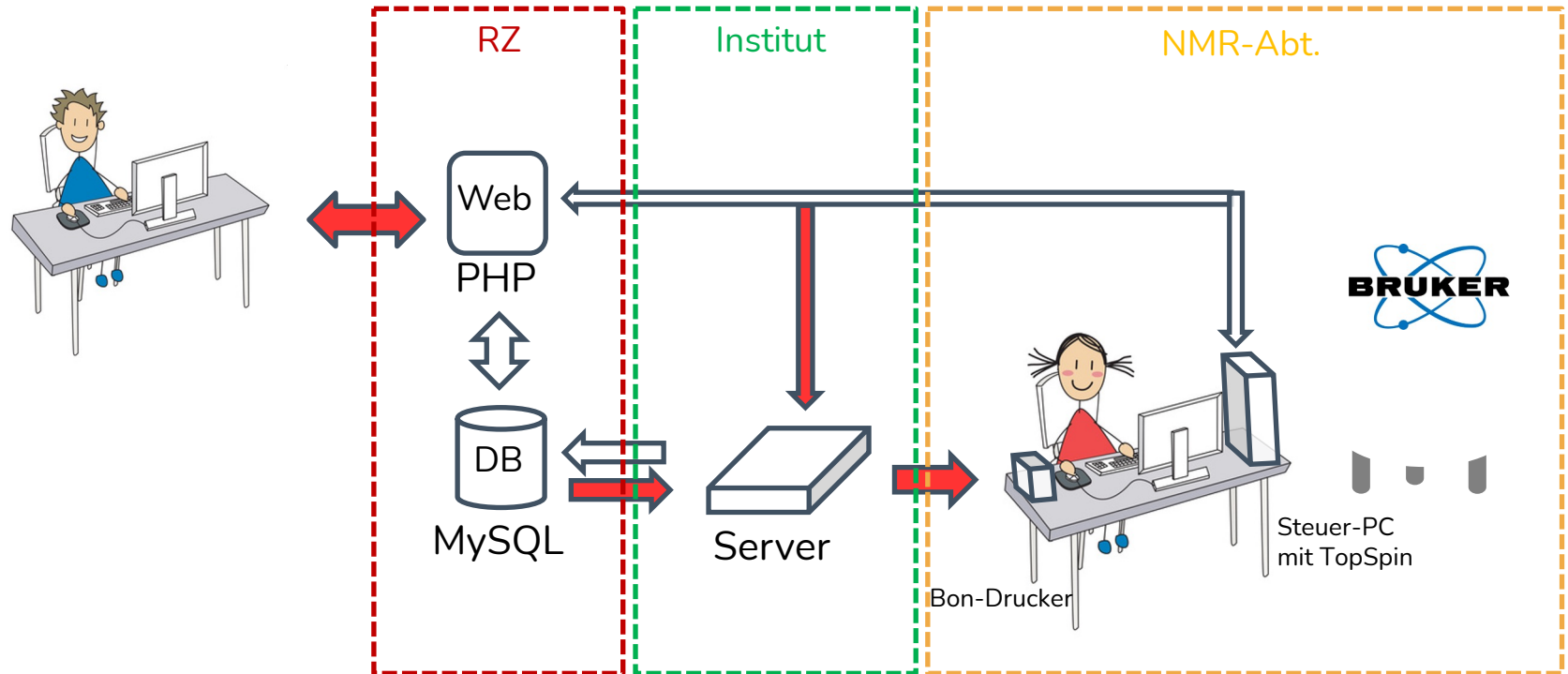
Messauftragssuche

SampleID oder eMail-Adresse (ohne @uni-jena.de); % = variabler Platzhalter

Meine Messaufträge

#	SampleID	Übertragen am	Struktur	Messauftrag (PDF)
60	PB-12345	2021-10-11 09:41:00	2D 3D	Ansehen / Herunterladen
59	PB-1234	2021-10-08 12:52:00	-	Ansehen / Herunterladen
58	PB-15-REFE	2021-06-15 12:31:00	2D 3D	Ansehen / Herunterladen
57	PB-123456	2020-12-16 14:07:00	2D 3D	Ansehen / Herunterladen
56	PB-BERLIN	2020-03-09 16:11:00	2D 3D	Ansehen / Herunterladen
55	PB-BERLIN	2020-03-09 16:08:00	2D 3D	Ansehen / Herunterladen

Setup für elektronische Messaufträge



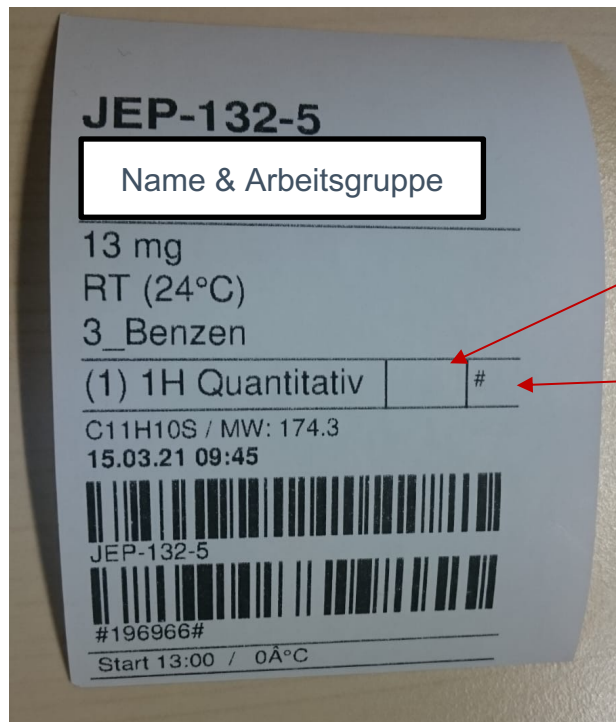
Setup für elektronische Messaufträge



(Alle 2 Minuten)

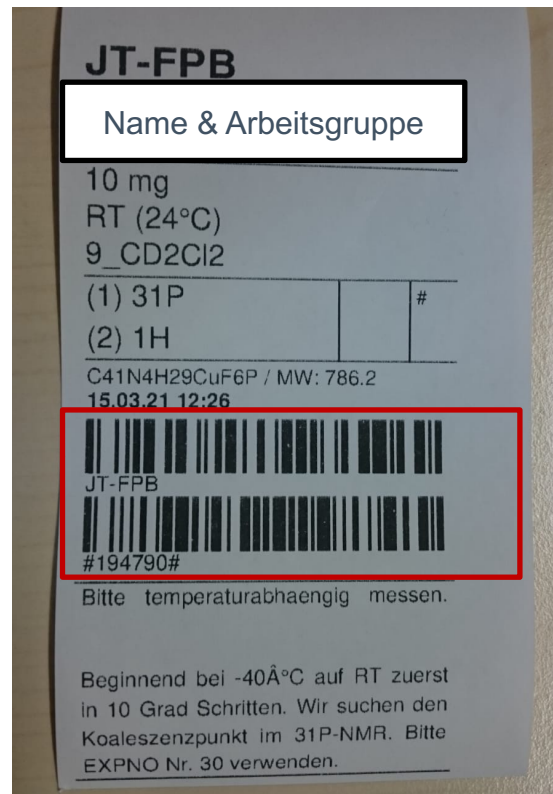


Setup für elektronische Messaufträge

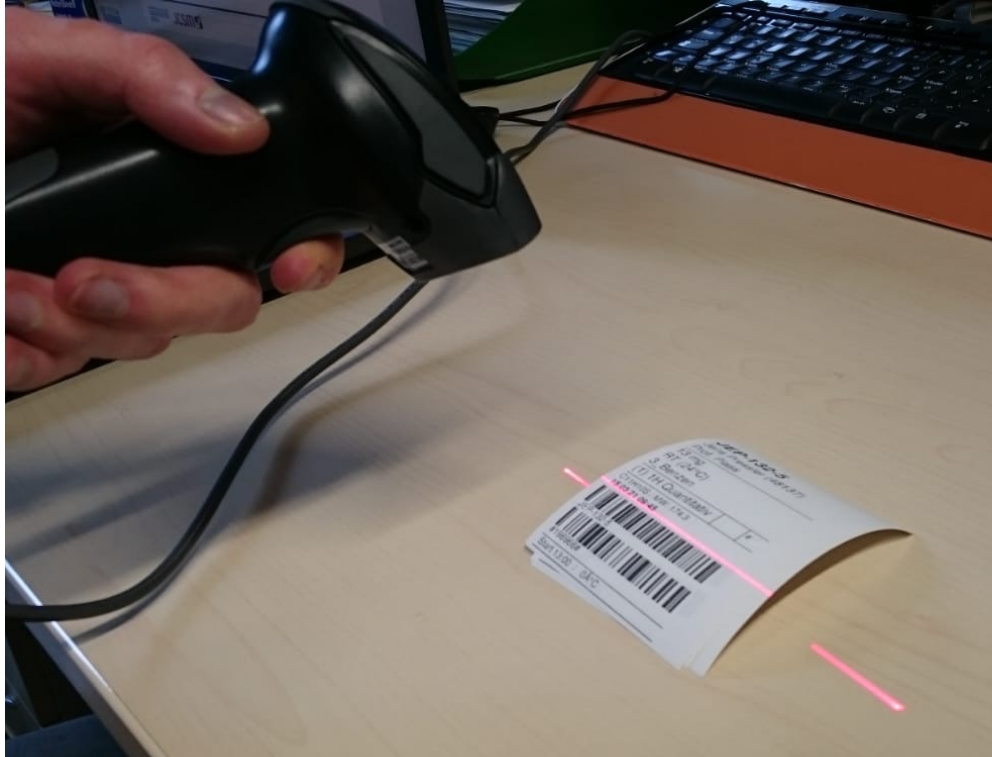


ExpNo

Pos SampleChanger



Einscannen von Probenbezeichnung und persönlichen Barcode



Digitalisierung sollte das Leben einfacher machen



The screenshot displays a software interface for scientific data management. On the left, a list of items is shown, with item 8 selected. The interface includes a toolbar with buttons for Submit, Cancel, Edit, Delete, Add, Copy, and a numeric input field. On the right, a 'Title' dialog box is open, featuring a text input field and two buttons: 'Set Title' and 'Set & Copy Title'.

Item ID	Status	Item Name	Quantity	Unit
8	Available	JEP-132-5	10	N 1H
9	Available			
10	Available			
11	Available			
12	Available			

Buttons: Submit, Cancel, Edit, Delete, Add, Copy, 1, 1

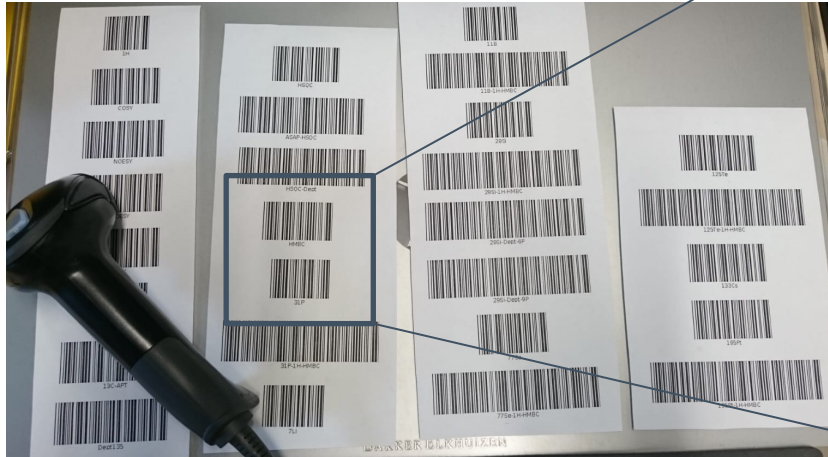
Dialog Box: Title, Set Title, Set & Copy Title

Digitalisierung sollte das Leben einfacher machen

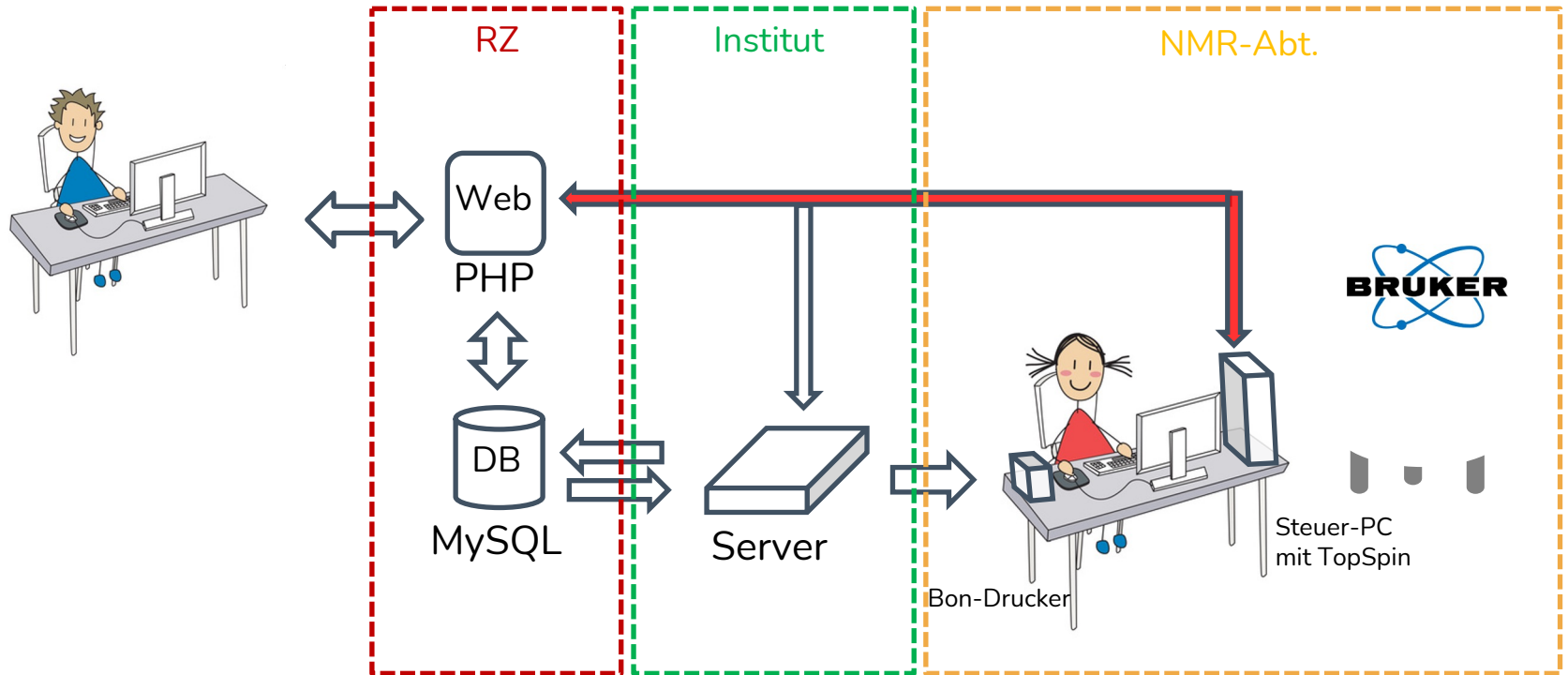
Experiment Table

Ho...	Type	Status	Name	No.	Solvent	Experiment	Pri	Par	Title/Orig
∨ 32	📄↶ 2	Finished							
	📄↶	Finished	IDP-PBZ	10	CD2Cl2	dichlormetha N 1H	★🟡	📊🟢	IDP-PBZ #202391# [redacted] 1H
	📄↶	Finished	IDP-PBZ	11	CD2Cl2	dichlormetha N 31P	★🟡	📊🟢	IDP-PBZ #202391# [redacted] 31P
∨ 33	📄↶ 1	Finished							
	📄↶	Finished	IDP-PB3	10	CD2Cl2	dichlormetha N 1H	★🟡	📊🟢	IDP-PB3 #202391# [redacted]

Digitalisierung sollte das Leben einfacher machen



Setup für elektronische Messaufträge: Daten <-> Struktur?



Integration in TopSpin

The screenshot shows the TopSpin software interface with the 'AcqPars' tab selected. The 'Automation' section is highlighted with a red box. The parameters are as follows:

Parameter	Value
LOCNOC	ZH
SOLVENT	DMSO
Automation	
AUNM	au_zg
EXP	1H
Miscellaneous	
GRDPROG	
CHEMSTR	none
User parameters	
USERA1	user
USERA2	user
USERA3	user

```
GETCURDATA
GETPROSOL
XCMD("sendgui xpy getMolFileFromWeb.py")
RGA
ZG
QUIT
```

Automatisiertes Herunterladen von Strukturdaten

```
1 import os.path
2 import sys.version
3
4 overwrite_file = 0
5
6 #CURDATA hat in TopsSpin2 (jython2.1) leicht anderen Aufbau als TS>3(jython2.5), daher hier unterscheiden
7 if(sys.version == "2.1"):
8     # Informationen zum aktuellen Datensatz laden
9     exp_data = CURDATA() # [0] name,[1] expno,[2] procno [4] user !
10    # Arbeitsgruppe/User bestimmen
11    user=exp_data[4]
12    # Zielverzeichnisse generieren
13    targetdir = exp_data[3]+'data/'+user+'/nmr/'+exp_data[0]+'/'+exp_data[1]+'/'
14 if(sys.version != "2.1"):
15    # Informationen zum aktuellen Datensatz laden
16    exp_data = CURDATA() # [0] name,[1] expno,[2] procno [3] datadir !
17    # Arbeitsgruppe/User bestimmen
18    dir=exp_data[3].split('/')
19    user=dir[5]
20    # Zielverzeichnisse generieren
21    targetdir = exp_data[3]+'/'+exp_data[0]+'/'+exp_data[1]+'/'
22
23
24 url = 'http://www.nmr.uni-jena.de/[REDACTED]'+user+'/'+exp_data[0]+'mol'
25 if((overwrite_file == 1) or (os.path.isfile(targetdir+"structure.mol") == 0)):
26    # Zielformat existiert noch nicht oder soll ueberschrieben werden
27    os.system('wget -q -O '+targetdir+'structure.mol '+url)
28    print 'Strukturabfrage: '+url
29
```

Ziele und Wege der „Digitalisierungsoffensive 2020“

- Verknüpfung von strukturellen Informationen mit NMR-Daten

Elektronisches Messauftragsformular mit Struktureditor



- Persönliche Zuordnung der Spektren



Login mit RZ-Account (via LDAP); einfacher eindeutiger Barcode

- Browserbasiertes Abrufen der Spektren

Kommerzielle Lösung: LOGS

Jeder Nutzer hat eine eindeutige Barcode Identifizierung

Experiment Table

Ho...	Type	Status	Name	No.	Solvent	Experiment	Pri	Par	Title/Orig
32	2	Finished							
	Finished	IDP-PBZ				N 1H	★		IDP-PBZ #202391# [redacted] 1H
	Finished	IDP-PBZ				N 31P	★		IDP-PBZ #202391# [redacted] 31P
33	1	Finished							
	Finished	IDP-PB3				N 1H	★		IDP-PB3 #202391# [redacted]

JT-FPB

[redacted]

10 mg
RT (24°C)
9_CD2Cl2

(1) 31P	#
(2) 1H	

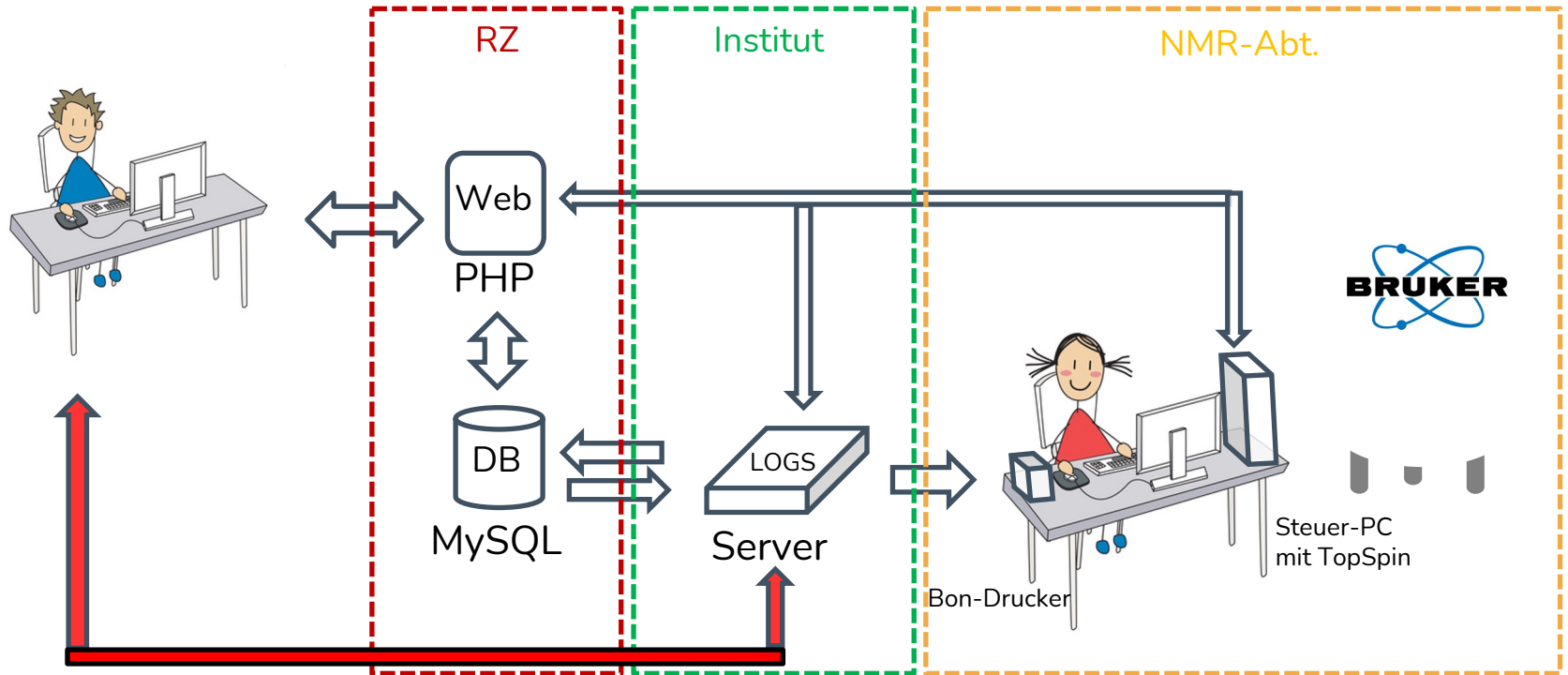
C41N4H29CuF6P / MW: 786.2
15.03.21 12:26

JT-FPB
#194790#

Bitte temperaturabhaengig messen.

Beginnend bei -40Å°C auf RT zuerst
in 10 Grad Schritten. Wir suchen den
Koaleszenzpunkt im 31P-NMR. Bitte
EXPNO Nr. 30 verwenden.

Setup für elektronische Messaufträge: Daten <-> Struktur?



Empfehlung für LOGS Hardware

HP ProLiant DL360p Gen8 V2 Rack
Server mit 2x Xeon E5-2690v2 10-
Core 3.00 GHz, 16 GB DDR3 RAM, 2x
300 GB SAS 10K



499,99 € *

**SERVER
SHOP24**

<https://www.servershop24.de/>



Live Demo: Abruf & Ansicht der Daten über LOGS

(Offline Screenshots auf den nächsten Folien)

Dashboard

Datasets
90.181

Samples
55.102

Documents
3

Instruments
11

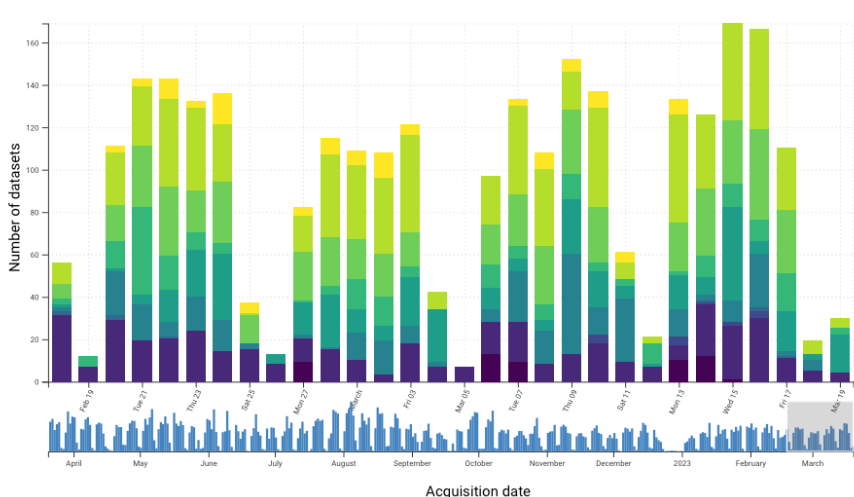
Methods
1

Projects
465

Acquisition timeline

Methods Instruments Data formats

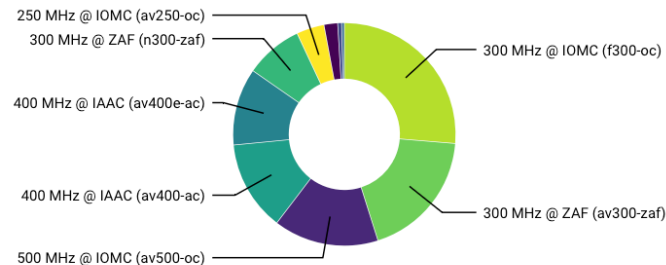
Last 12 months Last 30 days Last 7 days



- 250 MHz @ IOMC (av250-oc)
- 300 MHz @ IOMC (f300-oc)
- 300 MHz @ ZAF (av300-zaf)
- 300 MHz @ ZAF (n300-zaf)
- 400 MHz @ IAAC (av400-ac)
- 400 MHz @ IAAC (av400e-a)
- 400 MHz WB @ ZAF (av400)
- 500 MHz @ CEEC (av500-ce)
- 600 MHz @ IAAC (av600-ac)

Statistics

2023-02-18 to 2023-03-19



Instruments	Datasets	%
300 MHz @ IOMC (f300-oc)	748	26.4
300 MHz @ ZAF (av300-zaf)	534	18.9
500 MHz @ IOMC (av500-oc)	433	15.3
400 MHz @ IAAC (av400-ac)	371	13.1
400 MHz @ IAAC (av400e-ac)	317	11.2

Dashboard

Datasets
90.181

Samples
55.102

Documents
3

Instruments
11

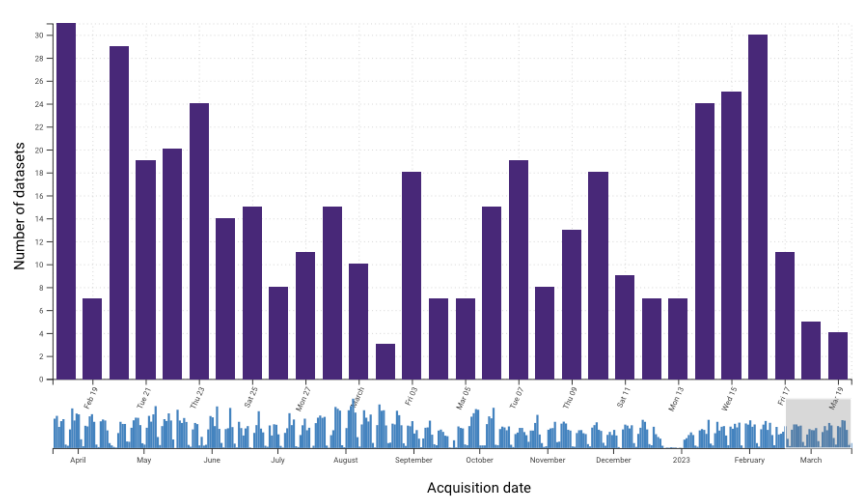
Methods
1

Projects
465

Acquisition timeline

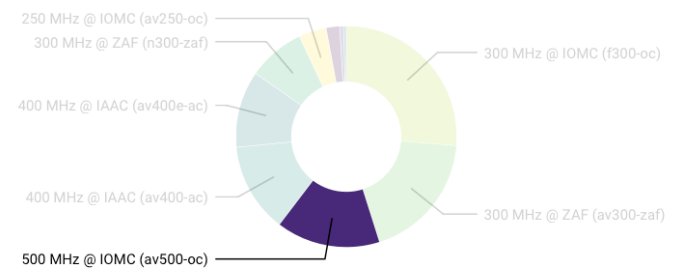
Methods Instruments Data formats

Last 12 months Last 30 days Last 7 days Unselect all



Statistics

2023-02-18 to 2023-03-19



Instruments	Datasets	%
500 MHz @ IOMC (av500-oc)	433	100.0

Search datasets beta

[Export CSV](#)

Search terms

1

claimed (54)

Method

NMR (54)

Experiment

HSQC (22)

HSQC_DEPT (16)

1H (8)

COSY (2)

NOESY_NEW (2)

[more](#)

Year

2022 (2)

2021 (40)

2018 (12)

Project

Peter Bellstedt (25)

Research (25)

Michael Duong (1)

AG_Vilotijevic (1)

NotAssigned_BarcodeMissing (1)

[more](#)

Person

Peter Bellstedt (38)

NMR (2)

<input type="checkbox"/>	49534-2 NOESY_NEW NOESYgp Menthol DMSO-d6 49534 YBO-22A-undefined	500 MHz @ IOMC (av500-oc) Wed, Dec 7 2022 10:37	NMR
<input type="checkbox"/>	2304-1 1H MDR-MENTHOL 2304 MDR-MENTHOL	250 MHz @ IOMC (av250-oc) Thu, Feb 4 2021 10:58	
<input type="checkbox"/>	703-22 HSQC 20 mg Menthol in CDCI3 703 HSQC	500 MHz @ CEEC (av500-ceec) Fri, Jan 15 2021 16:09	Peter Bellstedt
<input type="checkbox"/>	703-21 HSQC_DEPT 20 mg Menthol in CDCI3 703 HSQC	500 MHz @ CEEC (av500-ceec) Fri, Jan 15 2021 15:51	Peter Bellstedt
<input type="checkbox"/>	722-1 HSQC 20 mg Menthol in CDCI3 722 HSQC_2	500 MHz @ CEEC (av500-ceec) Fri, Jan 15 2021 15:34	Peter Bellstedt
<input type="checkbox"/>	703-20 HSQC_DEPT 20 mg Menthol in CDCI3 703 HSQC	500 MHz @ CEEC (av500-ceec) Fri, Jan 15 2021 15:16	Peter Bellstedt
<input type="checkbox"/>	703-19 HSQC 20 mg Menthol in CDCI3 703 HSQC	500 MHz @ CEEC (av500-ceec) Fri, Jan 15 2021 14:19	Peter Bellstedt
<input type="checkbox"/>	703-18 HSQC_DEPT 20 mg Menthol in CDCI3 703 HSQC	500 MHz @ CEEC (av500-ceec) Fri, Jan 15 2021 14:02	Peter Bellstedt
<input type="checkbox"/>	703-17 HSQC 20 mg Menthol in CDCI3 703 HSQC	500 MHz @ CEEC (av500-ceec) Fri, Jan 15 2021 09:23	Peter Bellstedt
<input type="checkbox"/>	703-16 HSQC 20 mg Menthol in CDCI3 703 HSQC	500 MHz @ CEEC (av500-ceec) Fri, Jan 15 2021 09:18	Peter Bellstedt
<input type="checkbox"/>	703-15 HSQC_DEPT 20 mg Menthol in CDCI3 703 HSQC	500 MHz @ CEEC (av500-ceec) Fri, Jan 15 2021 09:01	Peter Bellstedt
<input type="checkbox"/>	703-14 HSQC 20 mg Menthol in CDCI3 703 HSQC	500 MHz @ CEEC (av500-ceec) Fri, Jan 15 2021 08:44	Peter Bellstedt
<input type="checkbox"/>	703-13 HSQC_DEPT 20 mg Menthol in CDCI3 703 HSQC	500 MHz @ CEEC (av500-ceec) Fri, Jan 15 2021 08:27	Peter Bellstedt
<input type="checkbox"/>	703-12 1H 20 mg Menthol in CDCI3 703 HSQC	500 MHz @ CEEC (av500-ceec) Fri, Jan 15 2021 08:11	Peter Bellstedt
<input type="checkbox"/>	703-11 HSQC 3 mg Menthol in CDCI3 703 HSQC	500 MHz @ CEEC (av500-ceec) Fri, Jan 15 2021 08:00	Peter Bellstedt
<input type="checkbox"/>	703-10 HSQC_DEPT 3 mg Menthol in CDCI3 703 HSQC	500 MHz @ CEEC (av500-ceec) Fri, Jan 15 2021 07:02	Peter Bellstedt

Dataset #1890-2 13C{1H} - MLK-J08B ▶ MLK-J08B

Data Origin: data-server//home/logstransfer/nmrdata/av250-oc/AG_X/nmr/MLK-J08B/11

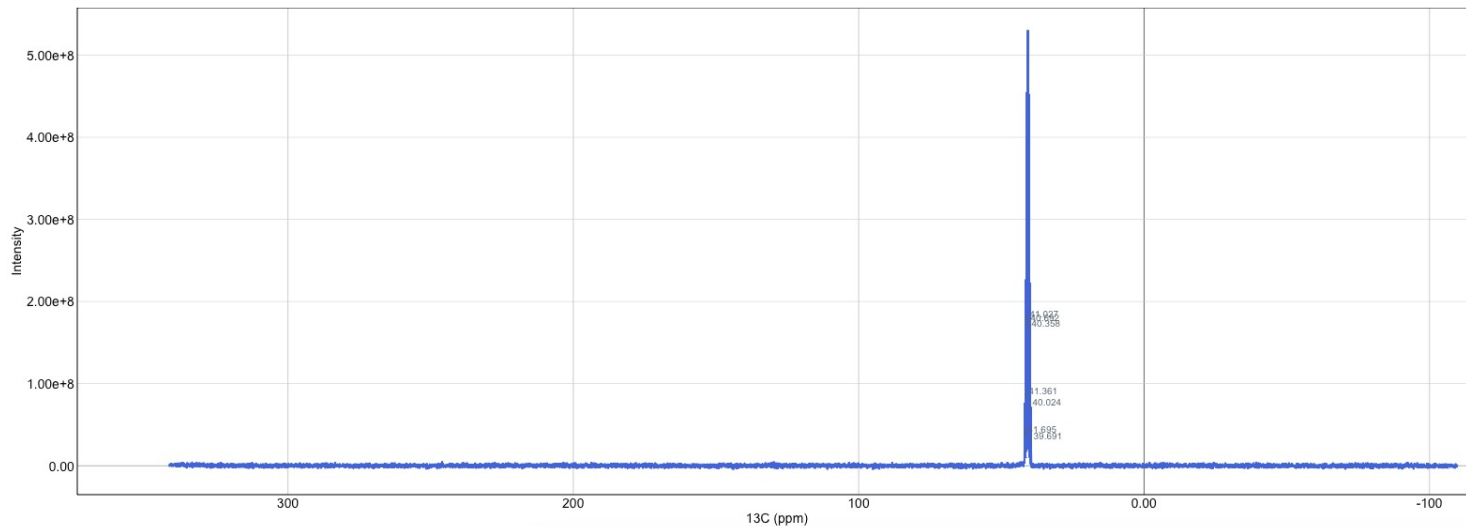
[Download](#) [Edit](#) [Trash](#)

Entry: NMR - Thu, Jan 28, 2021

[Details](#) [Documents](#) [More data on this sample](#) [File contents](#) [View spectrum](#)

Zoom: [Reset](#) Tools: Track slider Curve stacking Processing
 Select box Auto zoom

[Export](#)
[Settings](#)



- MLK-J08B/11
 - spectra
 - proc 1
 - fid
 - fid.re
 - fid.im
 - LOGS generated
 - spectrum

Acquisition parameters

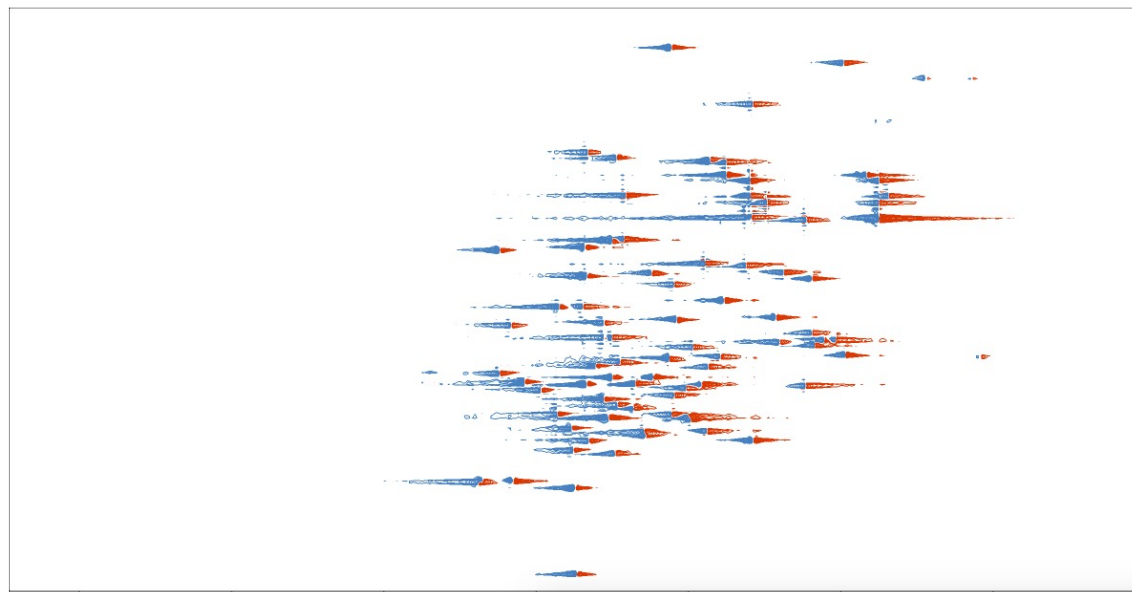
- Pulse program zgpg30
- Scans 1024
- Dummy scans 4
- Receiver gain 2048
- Spectral width 451.637114206743 ppm
- Spectral width 28409.0909090909 Hz
- Acquisition time 1.153 s
- Size of FID 65536
- Transmitter frequency 62.895239 MHz
- Frequency offset 115.0 ppm
- Temperature 297.0163 K
- Probe 5 mm BBO BB-1H Z-GRD Z3074/
- MAS Spin Rate 4200

Dataset #720-7 HSQCFFP3GPPHWG - 1H, 15N HSQC (with 13C Decoupling) ▶ PB-Ubiquitin

Data Origin: <data-server//home/logstransfer/nmrdata/examples/Research/nmr/PB-Ubiquitin/5>

[Download](#)[Edit](#)[Trash](#)

Entry: NMR - Mon, Jan 18, 2021

[Details](#) [Documents](#) [More data on this sample](#) [File contents](#) [View NMR spectrum \(Bruker\)](#)[Spectrum](#) [FID](#) [fft on f2 dimension](#) [Bruker Acqus File](#) [Bruker Acqu2s File](#) [Bruker Pulseprogram](#) hide negative

contour level

contour factor

 phase rows phase columns

Filter

Acquisition parameters

Pulse program hsqcftp3gpphwg

Scans 4

Dummy scans 16

Receiver gain 451.44

Spectral width 16.0215603155368 ppm, 34.997909136943 ppm

Spectral width 9615.38461538462 Hz, 2128.56534695615 Hz

Acquisition time 106.496 ms, 60.134 ms

Size of FID 2048, 256

Transmitter frequency 600.15 MHz, 60.812671 MHz

Frequency offset 4.69999166874948 ppm, 116.99995877503883 ppm

Temperature 298.0713 K

Probe Z856301_0002 (PA QXI 600S3 H/P-C/N-D-05 XYZ BTO)

MAS Spin Rate 4200

Nucleus 1H, 15N

General information

Measurement duration 20 min 5 s

Dimension 2

LOGS Projects Samples Datasets Documents Search Monitoring More

Dataset #720-7 HSQCFF3GPPHWG - 1H, 15N HSQC
 Data Origin: data-server//home/logstransfer/nmrdata/examples/Research/nmr/PB-Ubiqutin/5

Details Documents More data on this sample File contents

Spectrum FID fft on f2 dimension Bruker Acqus File Bruker Acqus2s File Bruker

Phasing F2 at 127.28 ppm (row 52) Save phase Cancel

0th order correction

1st order correction

12.71

$\delta(1H)$ [ppm]

Pivot point (ppm)

contour level

contour factor

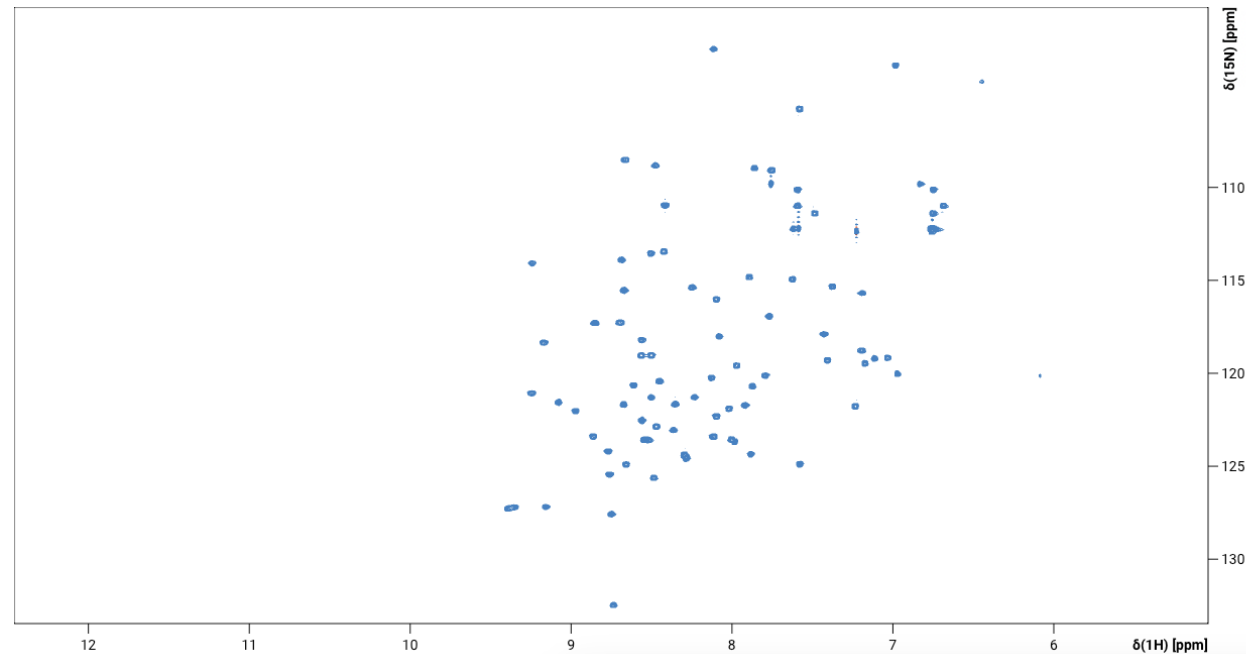
Filter

Acquisition parameters

- Pulse program hsqcff3gpphwg
- Scans 4
- Dummy scans 16
- Receiver gain 451.44
- Spectral width 16.0215603155368 ppm, 34.997909136943 ppm
- Spectral width 9615.38461538462 Hz, 2128.56534695615 Hz
- Acquisition time 106.496 ms, 60.134 ms
- Size of FID 2048, 256
- Transmitter frequency 600.15 MHz, 60.812671 MHz
- Frequency offset 4.69999166874948 ppm, 116.99995877503883 ppm
- Temperature 298.0713 K
- Probe Z856301_0002 (PA QXI 600S3 H/P-C/N-D-05 XYZ BTO)
- MAS Spin Rate 4200
- Nucleus 1H, 15N

General information

- Measurement duration 20 min 5 s
- Dimension 2



Reset zoom and position hide negative



contour level

contour factor

phase rows

phase columns

Filter

Scans 4

Dummy scans 16

Receiver gain 451.44

Spectral width 16.0215603155368 ppm, 34.997909136943 ppm

Spectral width 9615.38461538462 Hz, 2128.56534695615 Hz

Acquisition time 106.496 ms, 60.134 ms

Size of FID 2048, 256

Transmitter frequency 600.15 MHz, 60.812671 MHz

Frequency offset 4.69999166874948 ppm, 116.99995877503883 ppm

Temperature 298.0713 K

Probe Z856301_0002 (PA QXI 600S3 H/P-C/N-D-05 XYZ BTO)

MAS Spin Rate 4200

Nucleus 1H, 15N

General information

Measurement duration 20 min 5 s

Dimension 2

Pulses & Delays

D16 200 μ s

Ziele und Wege der „Digitalisierungsoffensive 2020“

- Verknüpfung von strukturellen Informationen mit NMR-Daten

Elektronisches Messauftragsformular mit Struktureditor



- Persönliche Zuordnung der Spektren



Login mit RZ-Account (via LDAP); einfacher eindeutiger Barcode

- Browserbasiertes Abrufen der Spektren

Kommerzielle Lösung: LOGS



Rechtliche Aspekte: DFG



Guidelines for Safeguarding Good Research Practice

Code of Conduct



Leitlinien zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis

Kodex

<https://doi.org/10.5281/zenodo.6472827>

Rechtliche Aspekte

„[...] all universities and non-university research institutions will be required to implement the 19 guidelines in a legally binding manner to be eligible to receive DFG funding.“

The four-year transition period for implementing ends 31 July 2023

„[...] alle Hochschulen und außerhochschulischen Forschungseinrichtungen [müssen] die 19 Leitlinien und ihre Erläuterungen rechtsverbindlich umsetzen, um Fördermittel durch die DFG erhalten zu können.“

Vierjährige Übergangsfrist zur Umsetzung endet am 31. Juli 2023

Rechtliche Aspekte: DFG - Leitlinien

Leitlinie 17 - Archivierung: Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler sichern öffentlich zugänglich gemachte Forschungsdaten beziehungsweise Forschungsergebnisse sowie die ihnen zugrunde liegenden, zentralen Materialien und gegebenenfalls die eingesetzte Forschungssoftware, gemessen an den Standards des betroffenen Fachgebiets, in adäquater Weise und bewahren sie für einen angemessenen Zeitraum [in der Regel 10 Jahre] auf. Die Aufbewahrungsfrist beginnt mit dem Datum der Herstellung des öffentlichen Zugangs.

Guidline 17 – Archiving: Researchers back up research data and results made publicly available, as well as the central materials on which they are based and the research software used, by adequate means according to the standards of the relevant subject area, and retain them for an appropriate period of time [10 years]. The archiving period begins on the date when the results are made publicly available.

SCIENTIFIC DATA

Amended: Addendum

OPEN

SUBJECT CATEGORIES

- » Research data
- » Publication characteristics

Comment: The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship

Wilkinson, M. D. et al. The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship. *Sci Data* **3**, 160018 (2016).

Rechtliche Aspekte: FAIR(e Daten)

Findable Accessible Interoperable Reusable

To be Findable:

- F1. (meta)data are assigned a globally unique and persistent identifier
- F2. data are described with rich metadata (defined by R1 below)
- F3. metadata clearly and explicitly include the identifier of the data it describes
- F4. (meta)data are registered or indexed in a searchable resource

To be Accessible:

- A1. (meta)data are retrievable by their identifier using a standardized communications protocol
 - A1.1 the protocol is open, free, and universally implementable
 - A1.2 the protocol allows for an authentication and authorization procedure, where necessary
- A2. metadata are accessible, even when the data are no longer available

Wilkinson, M. D. et al. The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship. *Sci Data* **3**, 160018 (2016).

Rechtliche Aspekte: FAIR(e Daten)

Findable Accessible Interoperable Reusable

To be Interoperable:

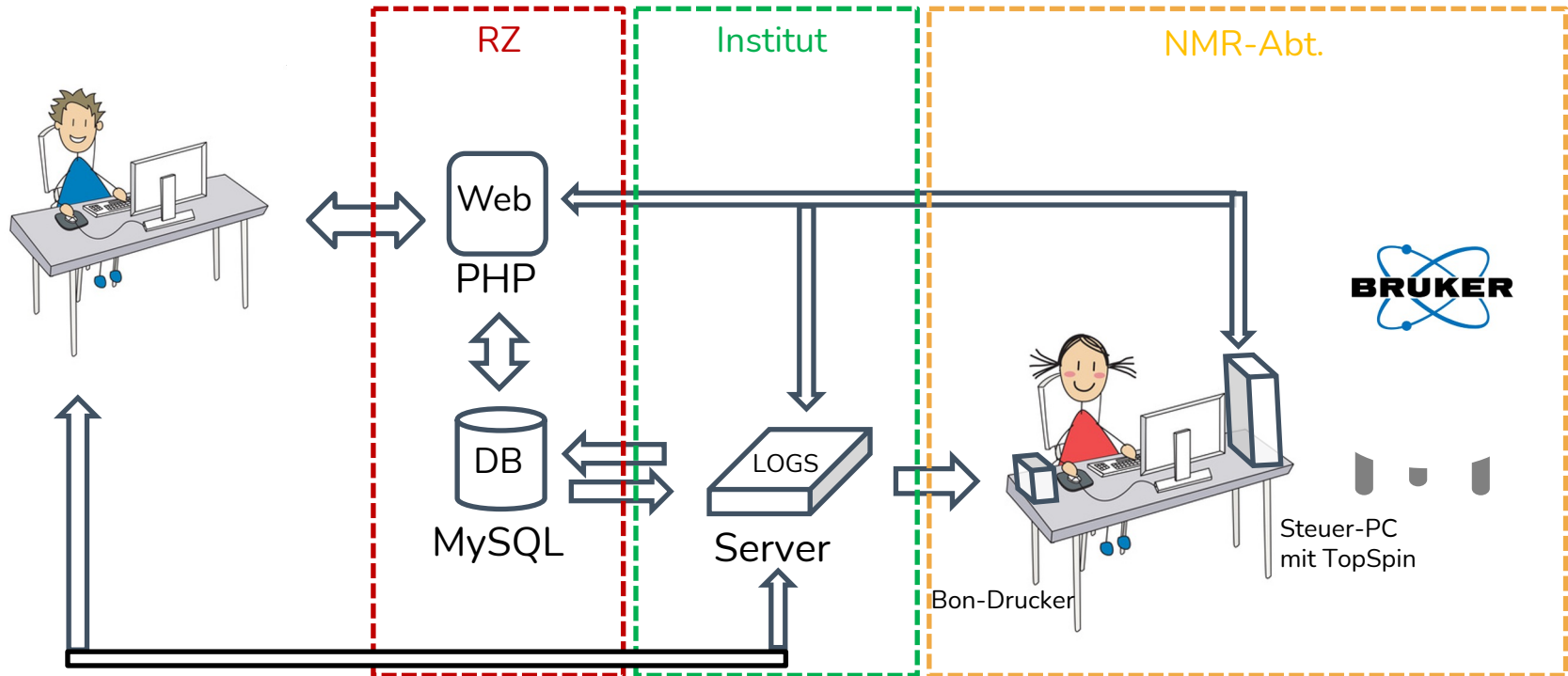
- I1. (meta)data use a formal, accessible, shared, and broadly applicable language for knowledge representation.
- I2. (meta)data use vocabularies that follow FAIR principles
- I3. (meta)data include qualified references to other (meta)data

To be Reusable:

- R1. meta(data) are richly described with a plurality of accurate and relevant attributes
 - R1.1. (meta)data are released with a clear and accessible data usage license
 - R1.2. (meta)data are associated with detailed provenance
 - R1.3. (meta)data meet domain-relevant community standards

Wilkinson, M. D. et al. The FAIR Guiding Principles for scientific data management and stewardship. *Sci Data* **3**, 160018 (2016).

Fragen / Diskussion / Q&A





LOGS

Python

Dr. Sina Kazemi

sina.kazemi@signals.company

44. Tagung Praktische Probleme der Kernspinresonanz, Berlin-Buch, 22.03.2023



```
for user in logs.persons():
    print("Person: %a" % user.name)
    datasets = logs.datasets(
        DatasetRequestParameter(operatorIds=user.id, includeParameters=True)
    )
    for dataset in datasets:
        if dataset.parameters:
            duration = 0
            if "General info/Duration" in dataset.parameters:
                duration = Counter.durationToSec(
                    dataset.parameters["General info/Duration"]
                )

            if user.name not in countPersonMeasurements:
                countPersonMeasurements[user.name] = Counter()
                countPersonSamples[user.name] = set()
                personDetails[user.name] = {
                    "name": user.name,
                    "address": user.privateAddress.split("\n")
                    if user.privateAddress
                    else "",
                    "phone": user.phone,
                    "email": user.email,
                }

            if dataset.sample and dataset.sample.name:
                countPersonSamples[user.name].add(dataset.sample.name)
```

```
+++ Result: +++
```

```
User 'Baker, Charles' measured 42 datasets on 22 samples  
the total Measuring time was 22800 s (6:20:00)  
with a measuring cost of 120 €/h this costs 760.0 €
```

```
User 'Parker, Nancy' measured 20 datasets on 20 samples  
the total Measuring time was 1200 s (0:20:00)  
with a measuring cost of 120 €/h this costs 40.0 €
```



bill_000002.html

30,6 kB



LOGS
Python



bill_000002.pdf

87,5 kB



LOGS

Python

Invoice 000002

Baker, Charles

charles.baker@davis.com

Samples (22): #8 Pepsi , #9 Pepsi Light , #4 Coca Cola Zero Koffeinfrei , #18 Afri Cola , #19 Coca Cola (USA) , #7 Dr. Pepper , #20 Coca Cola (Mexico) , #11 Sinalco Cola , #14 Bizzl Cola , #17 Fritz Cola , #3 Coca Cola Zero , #21 Ubiquitin , #5 Coca Cola Vanille , #48 Sample Name , #13 Korrekt Cola , #2 Coca Cola Light , #12 Bionade Cola , #15 Vita Cola , #16 Red Bull Cola , #1 Coca Cola , #10 Pepsi Max , #6 Fanta Orange

Datasets measured: 42

Measurement time: 6:20:00

Total cost: 760.0€ (cost per hour 120€)

Created at 22/03/2023 08:17:20



bill_000003.html

28,0 kB



LOGS

Python



bill_000003.pdf

84,7 kB



LOGS

Python

Invoice 000003

Campbell, Nicole

nicole.campbell@harris.edu

Samples (1): #43 Azol

Datasets measured: 9

Measurement time: 2 days, 11:48:33

Total cost: 7177.1€ (cost per hour 120€)

Created at 22/03/2023 08:17:20

LOGS



Search...

Contents

When Version Who What

2021-07-16 0.1 Sina Kazemi First version

API Documentation

class LOGS

- LOGS()
- getHumanReadableSize()
- update()
- create()
- delete()
- deleteById()
- sample()
- samples()
- project()
- projects()
- dataset()
- datasets()
- document()
- documents()
- person()

LOGS.LOGS

Purpose: A library to access the LOGS API via Python Python Version: Python 3.8 and above Disclaimer: This script is provided "as is" by Signals GmbH & KO KG to demonstrate the functionality of the LOGS API License: MIT License

When Version Who What

2021-07-16 0.1 Sina Kazemi First version

class LOGS:

Python class to access the LOGS web API

```
LOGS(  
    url: str,  
    apiKey: str,  
    use_internal: bool = False,  
    verbose: bool = False,  
    verify: bool = True  
)
```

Checks the connection to the server on creation

Args: url (str): URL to specific LOGS group (e.g. <https://mylogs/mygroup> or <https://mylogs:80/mygroup/api/0.1>) api_key (str): The API key that grants access to LOGS (you need to generate one in LOGS and copy it) verbose (bool, optional): If set you see some information about the server connection. Defaults to False.

Raises: Exception: URL does not defined or is invalid. Exception: The URL does not define a group. Exception: Server cannot be reached.

```
@classmethod  
def getHumanReadableSize(cls, size, suffix='B'):
```




LOGS

Python

Example application cases

Question for the audience:

Which type of application examples could you think of?

What kind of automated data extraction or manipulation could help you with your daily work?

(e.g. routine tasks, monitoring of properties, automated data manipulation and analysis)

Bleiben Sie neugierig!

