

Guilherme Aquim Filho

**Flux-LNNano - Desenvolvimento de um Sistema
de Gerenciamento de Informações para
Laboratório de Pesquisa em Biologia**

Belo Horizonte, Minas Gerais

2025

Guilherme Aquim Filho

**Flux-LNNano - Desenvolvimento de um Sistema de
Gerenciamento de Informações para Laboratório de
Pesquisa em Biologia**

Relatório Final

Universidade Federal de Minas Gerais
Instituto de Ciências Exatas
Departamento de Ciência da Computação

Orientador: Sérgio Vale Aguiar Campos

Belo Horizonte, Minas Gerais
2025

Sumário

1	RESUMO	3
2	INTRODUÇÃO	4
3	CONTEXTUALIZAÇÃO E TRABALHOS RELACIONADOS	5
4	METODOLOGIA	6
4.1	Entendimento dos ensaios	6
4.2	Coleta de documentação e padronização	8
4.3	Confecção dos <i>workflows</i>	8
4.3.1	Definição de tipos e estruturas de dados	8
4.3.2	Processamento de dados	9
4.3.2.1	Viabilidade Celular	9
4.3.2.2	DLS	9
4.3.2.3	Toxicidade Aguda em Dáfnias	10
4.3.2.4	Toxicidade Aguda em Zebrafish	10
4.3.3	Construção de especificações e <i>workflows</i>	10
5	RESULTADOS	12
5.1	<i>Protein Corona</i>	12
5.2	DLS	13
5.3	Viabilidade Celular	15
5.4	Toxicidade Crônica com <i>Zebrafish</i>	16
5.5	Toxicidade Aguda com <i>Daphnia</i>	18
6	CONCLUSÕES	20
	REFERÊNCIAS	21

1 RESUMO

A gestão de informações de experimentos laboratoriais em muitos casos ainda ocorre de maneira difusa, inclusive em ambientes de pesquisa bem aparelhados e de importância estratégica a nível nacional. Desta forma torna-se essencial mecanismos para auxiliar neste processo. Este trabalho mapeou e reorganizou as informações relativas a 5 tipos de ensaios realizados pelo Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano) do Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM) – Campinas – SP, com a finalidade de desenvolver uma ferramenta para auxiliar nesta gestão. A partir deste mapeamento, o armazenamento e processamento dos dados desses ensaios foram transplantados para um Sistema de Gerenciamento de Informações Laboratoriais – o sistema Flux – resultando em um ambiente mais eficiente e ágil para fazer a gestão, com as informações agregadas em um só local.

Palavras-chave: LNNano, LIMS, Flux, Gestão de Informações

2 INTRODUÇÃO

Um *Laboratorial Information Management System* (LIMS) é um sistema que visa centralizar a gestão de informações em ambientes laboratoriais. Este sistemas caracterizam-se por apresentar algum nível de validação de tipo e a capacidade de armazenar e processar dados de ensaios realizados [4]. Além disso, podem apresentar funcionalidades auxiliares ao processo de visualização e análise de dados [1]. Um desses sistemas é o sistema Flux, desenvolvido pela Satya Sistemas em parceria com o Laboratório de Universalização de Acesso (LUAR), do Departamento de Ciência da Computação da UFMG [2].

O Flux possui uma abrangente biblioteca de tipos de dados, além de possibilitar a construção de estruturas de dados específicas de acordo com a demanda do *workflow*, que é uma coleção de arquivos compactados em um zip capaz de ser carregado no mesmo. Ele é um sistema complexo que permite que *plugins* – escritos em Javascript, Python e R – sejam anexados a cada *workflow*, de forma a realizar cálculos e processamentos de maior complexidade, de acordo com os dados inseridos pelo usuário [3]. As instâncias de preenchimento de cada *workflow* conseguem receber dados de diferentes instâncias do mesmo *workflow* e/ou de diferentes *workflows*. Para cada instância, um relatório de preenchimento em formato PDF pode ser gerado de acordo com a demanda do usuário [7].

Tendo em vista a grande flexibilidade do Flux, este projeto teve como objetivo iniciar a estruturação de um sistema de informação para o Laboratório Nacional de Nanotecnologia (LNNano) do Centro Nacional de Pesquisa em Energia e Materiais (CNPEM) – Campinas – SP com a finalidade de melhorar o armazenamento e processamento dos dados de alguns dos ensaios realizados no laboratório. Esse trabalho é uma continuação do trabalho realizado durante o POC 1, quando a estrutura do laboratório foi mapeada e o estudo das atividades pertinentes aos ensaios definidos foi iniciada.

Na presente etapa, o escopo dos ensaios foi melhor definido e os mesmos foram convertidos em *workflows*. A forma anterior de documentação dos ensaios será apresentada, assim como uma descrição da estrutura e funcionamento das versões em *workflows*.

3 CONTEXTUALIZAÇÃO e TRABALHOS RELACIONADOS

O LNNano é um membro do CNPEM e atua como instalação aberta a usuários de toda a comunidade científica. Experimentos laboratoriais são, de maneira geral, ambientes de controle de fenômenos visando a obtenção de dados. Os dados coletados são processados de forma a tentar obter informações sobre o fenômeno alvo do experimento. No caso do LNNano são investigados os efeitos de nanomateriais em organismos vivos. Os pesquisadores do LNNano, atualmente, não utilizam nenhum tipo de programa computacional especializado para armazenamento e processamento das informações de seus ensaios demonstrando, portanto, a necessidade de implementação de um LIMS [5].

Um LIMS se propõe a ser uma plataforma que visa auxiliar todo esse processo. Eles são desenvolvidos para armazenar, manipular e gerar estruturas de visualização de agrupamentos dos dados obtidos entre outras coisas. O fato dos LIMS conseguirem centralizar várias etapas do processo de coleta, armazenamento, processamento e visualização de dados, faz com que, se bem utilizados, possam gerar um ganho significativo de produtividade em laboratórios que costumavam se valer de ferramentas que não foram construídas com esse foco específico [6].

O LUAR já possui um número significativo de trabalhos realizados seguindo a mesma proposta que o projeto apresentado. Inclusive foram detectados alguns *workflows* do LNNano semelhantes a *workflows* já implementados no FLUX para outros laboratórios, demonstrando a riqueza e flexibilidade do sistema. Assim, parte desse trabalho pode ser aproveitada ao longo do projeto.

4 METODOLOGIA

4.1 Entendimento dos ensaios

A criação dos *workflows* de trabalho no Flux foi feita após discussões com a equipe do LNNano. Assim, foi definida a necessidade de criação de *workflows* para 5 ensaios:

- *Protein Corona* – processo preparatório para outros ensaios que envolve a realização de um conjunto de passos para a formação de uma coroa de proteína em torno de um nanomaterial;

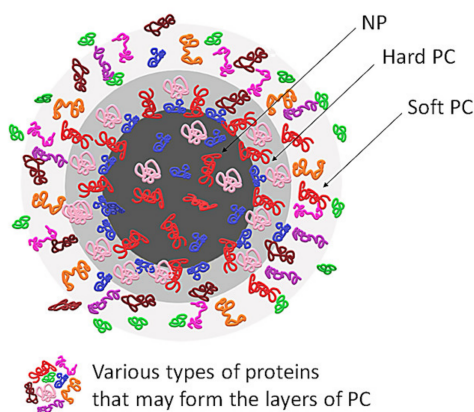


Figura 1 – *Protein Corona*.

- DLS – espalhamento de luz dinâmico, realizado para estimar o tamanho de partículas em suspensão;

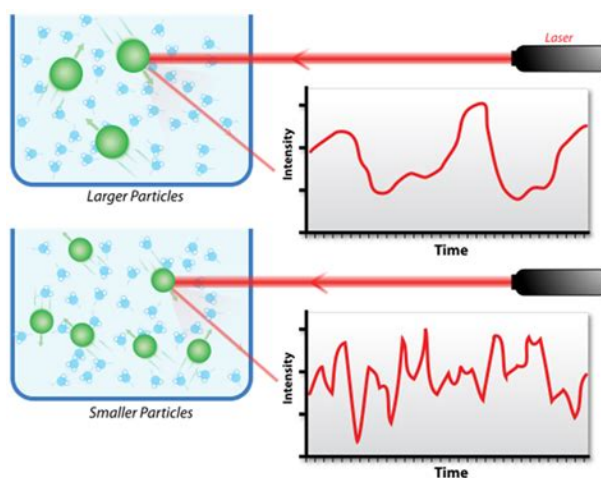


Figura 2 – DLS – Espalhamento de Luz Dinâmico.

- Viabilidade Celular – ensaio de toxicidade medindo a mortalidade de células expostas a distintas concentrações do nanomaterial objeto de estudo;

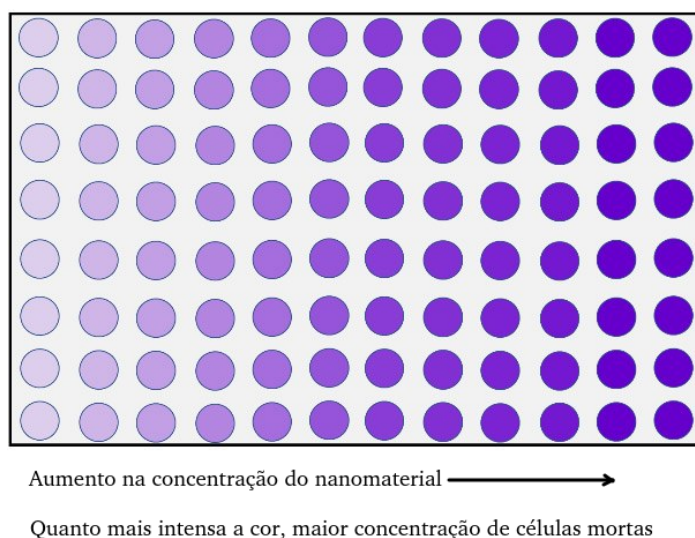


Figura 3 – Modelo de placa de ensaios de Viabilidade Celular.

- Toxicidade aguda em dáfrias – ensaio que envolve a exposição de dáfrias em soluções com diferentes concentrações de um nanomaterial e a análise das taxas de mortalidade nessas soluções em diferentes períodos de tempo;

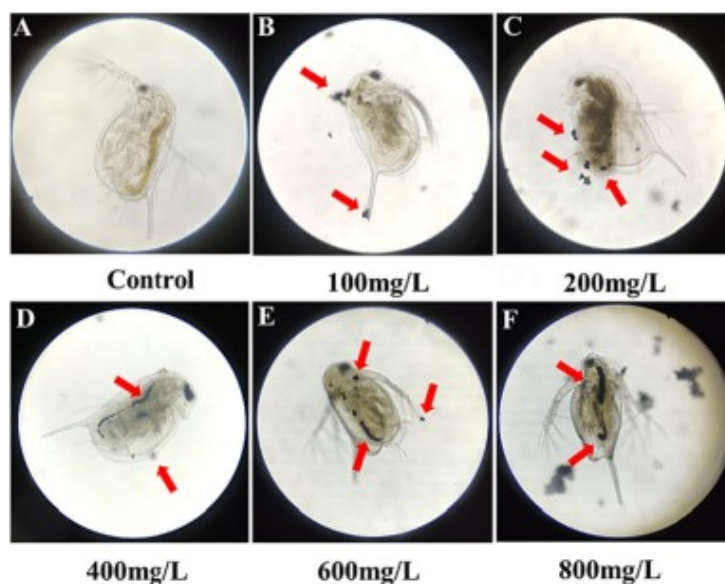
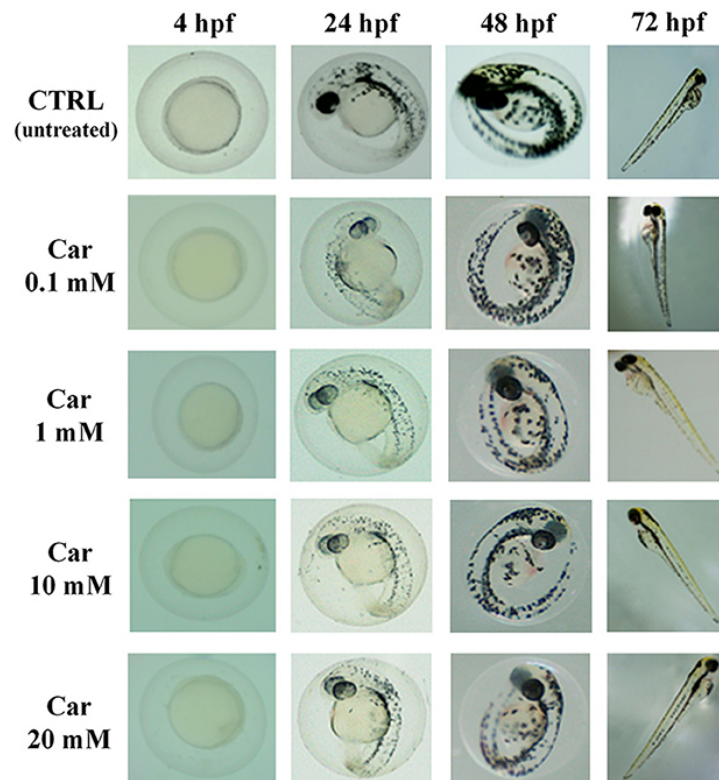


Figura 4 – Ensaio de Toxicidade Aguda em Dáfria.

- Toxicidade crônica em *zebrafish* – ensaio semelhante ao realizado com dáfrias realizado com *zebrafish* com o acréscimo da análise da taxa de deformação dos indivíduos e taxa de eclosão de ovos.

Figura 5 – Ensaio de Toxicidade Crônica em *Zebrafish*.

4.2 Coleta de documentação e padronização

Para cada um dos ensaios documentos eram utilizados como guia de execução do procedimento ou foram gerados como resultados. Ao longo da execução do projeto, esses documentos foram coletados e o preenchimento de alguns deles precisou passar por um processo de padronização, a fim de uniformizar os dados coletados por diferentes laboratoristas.

4.3 Confecção dos *workflows*

Com os documentos devidamente padronizados e a partir de informações coletadas em reuniões com integrantes do LNNano, os *workflows* de cada ensaio começaram a ser construídos. As atividades executadas para construção dos *workflows* estão descritas nas subseções a seguir.

4.3.1 Definição de tipos e estruturas de dados

Como dito anteriormente, o Flux conta com uma robusta coleção de tipos de dados disponíveis para a construção dos *workflows*. A medida que os *workflows* foram sendo construídos, os tipos de cada campo foram definidos. Além dos tipos usuais, como *integer*, *float*, *date*, etc., em todos os *workflows* foi utilizado um tipo exclusivo do sistema conhecido

como *register*. Este tipo tem por objetivo armazenar respostas de preenchimentos anteriores e disponibilizá-las nos preenchimentos subsequentes como um menu suspenso, sendo que o mesmo *register* pode ser utilizado em diferentes *workflows* que compartilhem a mesma listagem. O tipo *register* foi utilizado em campos como 'Operador/Responsável pelo ensaio', 'Amostra', 'Biofluido', etc.

Além dos tipos de campo básicos, é possível criar no sistema tipos definidos pelo usuário (TDU), que são estruturas de dados que variam de acordo com a necessidade de organização e preenchimento, permitindo o uso de estruturas complexas como listas, tabelas, matrizes, etc. Alguns campos dos *workflows* desse projeto são TDUs.

4.3.2 Processamento de dados

Dos ensaios convertidos em *workflows*, quatro deles exigiram alguma forma de processamento dos dados coletados, sendo a exceção o ensaio *Protein Corona*, cujo *workflow* serve apenas como *checklist* da realização do procedimento.

Todos os processamentos necessários foram feitos a partir do uso de *plugins* de arquivos .py e .R capazes de serem interpretados pelo sistema. Os processamentos necessários estão descritos a seguir.

4.3.2.1 Viabilidade Celular

O ensaio de viabilidade celular é feito usando uma placa de cultura celular de 96 poços. Em cada poço é realizado a cultura de células e a posterior inserção de um reagente e de concentrações distintas de um nanomaterial. O reagente reage à células vivas dando coloração ao poço, de forma que quanto mais células vivas, maior a intensidade da cor do poço. As células interagem com o nanomaterial nos poços, e um equipamento do laboratório faz a leitura da intensidade de coloração dos poços, convertendo essa intensidade em um valor numérico.

O mapa dos valores pode ser baixado em formato XLSX. Esse arquivo XLSX é uma das entradas de dados do *workflow* do ensaio. O processamento feito nessa entrada foi o de calcular os valores de média e desvio padrão para cada coluna da tabela, e de gerar uma nova tabela normalizando os números da tabela inicial para valores entre 0 e 1, normalizando também as linhas de média e desvio padrão.

4.3.2.2 DLS

O ensaio de DLS é feito com a leitura de soluções de um nanomaterial em diferentes cubetas. Cada solução pode ter ou não diferentes concentrações comparada às demais. Cada leitura é feita 3 vezes (triplicata). As leituras são feitas ao longo de intervalos arbitrários por um equipamento especializado. A leitura desses dados também pode ser

baixada em um arquivo XLSX, em que estarão presentes várias colunas com atributos diferentes complementares ao que foi medido, como na imagem abaixo:

Sample Name	Measurement Start Date And Time	Measurement Type	Z-Average (nm)	Polydispersity Index (PI)	Intercept	Att
AgNP-Corona PVP_500mg/mL_meio daphnia 0h_rpl1	15-May-23 4:11:24 PM	Size	111.9	0.2866	0.8929	
AgNP-Corona PVP_500mg/mL_meio daphnia 0h_rpl1	15-May-23 4:12:02 PM	Size	109.9	0.245	0.8957	
AgNP-Corona PVP_500mg/mL_meio daphnia 0h_rpl1	15-May-23 4:13:15 PM	Size	113.8	0.2224	0.8989	
AgNP-Corona PVP_500mg/mL_meio daphnia 0h_rpl2	15-May-23 4:15:12 PM	Size	106.8	0.2724	0.9	
AgNP-Corona PVP_500mg/mL_meio daphnia 0h_rpl2	15-May-23 4:15:49 PM	Size	112.1	0.2729	0.9028	
AgNP-Corona PVP_500mg/mL_meio daphnia 0h_rpl2	15-May-23 4:16:51 PM	Size	104.5	0.3008	0.9001	
AgNP-Corona PVP_500mg/mL_meio daphnia 24h_rpl1	16-May-23 4:21:11 PM	Size	107.5	0.2689	0.885	
AgNP-Corona PVP_500mg/mL_meio daphnia 24h_rpl1	16-May-23 4:22:01 PM	Size	110.7	0.2712	0.8852	
AgNP-Corona PVP_500mg/mL_meio daphnia 24h_rpl1	16-May-23 4:23:15 PM	Size	109.9	0.2906	0.8934	
AgNP-Corona PVP_500mg/mL_meio daphnia 24h_rpl2	16-May-23 4:25:50 PM	Size	108.3	0.2227	0.883	
AgNP-Corona PVP_500mg/mL_meio daphnia 24h_rpl2	16-May-23 4:27:04 PM	Size	109.7	0.2642	0.8823	
AgNP-Corona PVP_500mg/mL_meio daphnia 24h_rpl2	16-May-23 4:28:56 PM	Size	107	0.2695	0.8768	

Figura 6 – Exemplo tabela dos experimentos DLS.

Os laboratoristas selecionam as colunas necessárias para o ensaio em uma nova planilha. Tendo essa planilha como entrada, uma nova tabela é gerada, contendo tanto os dados anteriores como novas colunas de cálculo sobre esses dados. Essas novas colunas dizem respeito a médias e desvio padrão de cada:

- Triplicata por intervalo de tempo
- Concentração por intervalo de tempo

4.3.2.3 Toxicidade Aguda em Dáfnias

O ensaio de toxicidade aguda em dáfnias é feito com triplicatas de diferentes concentrações de nanopartículas em recipientes contendo a mesma quantidade de dáfnias. Via observação direta, o laboratorista indica quantas dáfnias morreram em cada recipiente a cada intervalo de tempo. O processamento a ser feito é o de calcular o percentual de mortes, a média e desvio padrão de cada triplicata e o EC50¹ dessas mortes para cada intervalo de tempo observado.

4.3.2.4 Toxicidade Aguda em Zebrafish

O ensaio de toxicidade aguda com *zebrafish* se assemelha muito ao ensaio feito com dáfnias, com a distinção de que o primeiro usa um recipiente por concentração, ao invés de uma triplicata para cada. No ensaio com *zebrafish*, além do número de mortes, também são observados número de eclosões e a quantidade de indivíduos em que ocorreram deformações. A média e desvio padrão é calculada para cada um dos tipos de ocorrência observados, mas nesse ensaio não é calculado o EC50.

4.3.3 Construção de especificações e *workflows*

Para cada ensaio é criado um documento que sintetiza a sua estrutura e conteúdo, o qual é transformado em um *workflow* do Flux. Esse documento é a especificação,

¹ O EC50 representa a concentração para qual 50% da população exibe uma resposta, após uma duração de exposição especificada.

um diagrama feito em program de diagramas online² em que constam as atividades e sua ordem de disponibilidade, os tipos dos campos, seus nomes, e eventuais atributos auxiliares que possam vir a ter (preenchimento obrigatório, conteúdo pré definido, etc.). As atividades são a forma básica de estruturar os campos, cada atividade representando uma etapa, uma página da execução do ensaio. Para cada um dos ensaios, foi criado um par especificação-*workflow*.

² <https://app.diagrams.net/>

5 RESULTADOS

A seguir são apresentadas as especificações e telas dos *workflows* do sistema Flux para o LNNano.

5.1 *Protein Corona*

A estrutura do *workflow Protein Corona* compreende a existência de duas atividades: Cadastro do Ensaio, onde estão os dados básicos de preenchimento; Preparação da Corona, cujos campos podem possuir tanto a função de orientar a execução do preparo, quanto de permitir que o laboratorista especifique etapas da realização do ensaio.

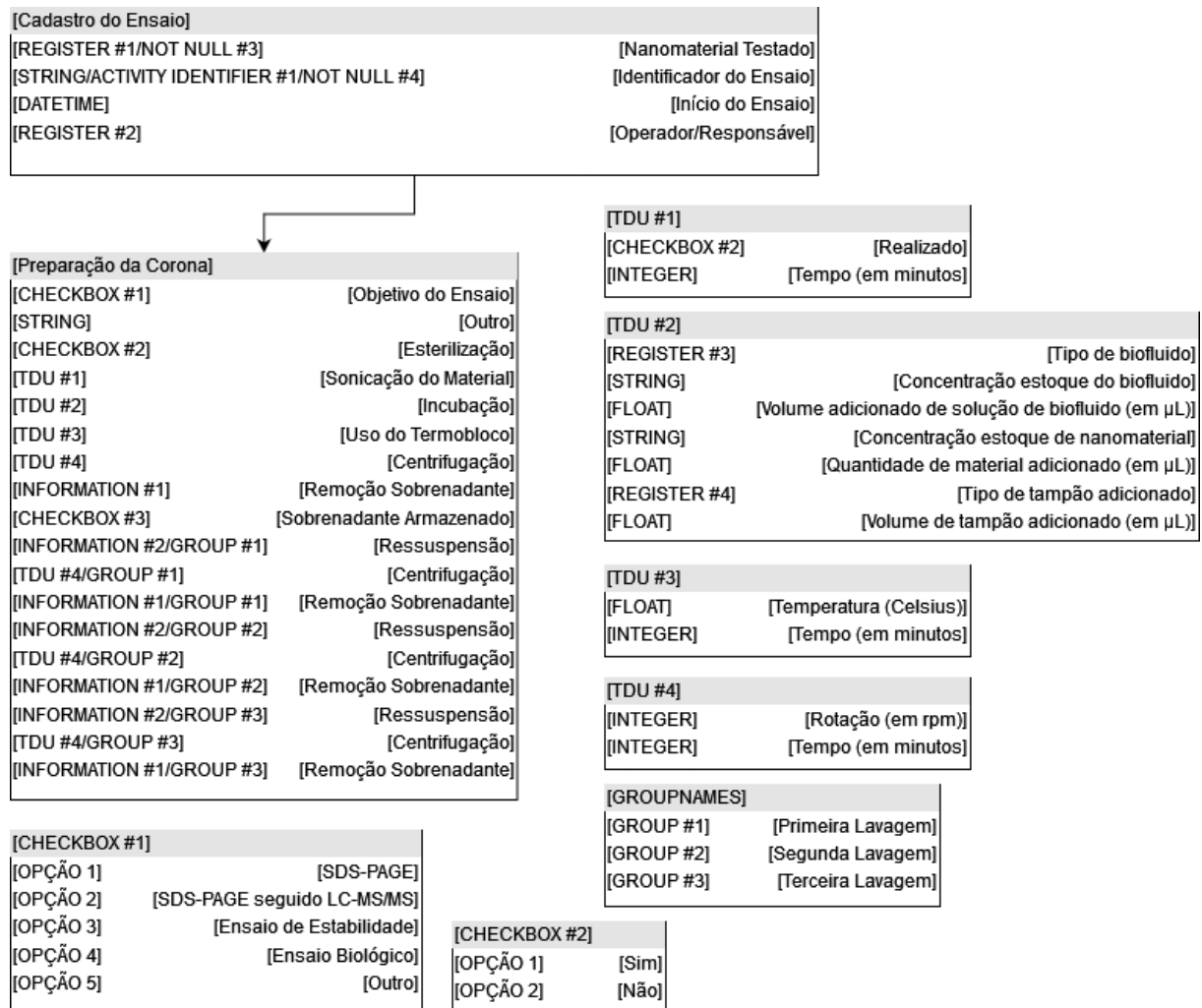


Figura 7 – Especificação do *workflow Protein Corona*.

Preparação da Corona

Objetivo do Ensaio:

☐ SDS-PAGE
☐ SDS-PAGE seguido LC-MS/MS
☐ Ensaio de Estabilidade
☒ Ensaio Biológico
☐ Outro

Esterilização:

☒ Sim
☐ Não

Sonicação do Material:

Realizado: ☒ Sim ☐ Não

Tempo (em minutos):

Incubação:

Tipo de biofluido:

Concentração estoque do biofluido:

Volume adicionado de solução de biofluido (em µL):

Concentração estoque de nanomaterial:

Preparação da Corona

Objetivo do Ensaio:
Ensaio Biológico

Esterilização:
Sim

Sonicação do Material:

Realizado: Sim

Tempo (em minutos): 25

Incubação:

Tipo de biofluido: Plasma Sanguíneo

Concentração estoque do biofluido: Default

Volume adicionado de solução de biofluido (em µL): 20,35

Concentração estoque de nanomaterial: Default

Quantidade de material adicionado (em µL): 38,26

Tipo de tampão adicionado: PLACEHOLDER

Volume de tampão adicionado (em µL): 84,57

Uso do Termobloco:

Temperatura (Celsius): 37

Tempo (em minutos): 20

(a) Preenchimento
(b) Resultado

Figura 8 – Preenchimento e resultado do *workflow Protein Corona* no sistema Flux.

5.2 DLS

O *workflow* DLS é dividido em 3 atividades. A primeira é pertinente ao cadastro do ensaio, a segunda é exclusiva para o usuário inserir a planilha XLSX com os dados a serem processados, e uma terceira exclusiva para gerar, via plugin, um CSV com os dados devidamente processados.

A escolha pela entrada e saída de dados ocorrerem via arquivos se deveu a uma característica do ensaio DLS e dos ensaios de toxicidade aguda, o número de concentrações utilizadas nesses ensaios poder variar indefinidamente de instância para instância do ensaio. Essa característica torna necessário que a estrutura capaz de encapsular os dados de entrada e de saída varie de tamanho de acordo com a instância. E apesar do Flux possuir uma TDU de tipo lista, dotada de capacidade incremental, ainda não é possível passar esses dados de entrada de tamanho variável como parâmetro para um plugin a fim de serem processados. A capacidade de processamento atual se restringe a campos de estrutura rígida e bem definida. Algumas possíveis soluções foram trabalhadas ao longo do projeto, como, por exemplo, a possibilidade de retornar a resposta do processamento como uma tabela HTML, capaz de ser exibida por alguns dos tipos de campos do sistema, mas essa solução esbarrou no limite de caracteres que cada tipo tem por definido no banco de dados do sistema. No fim, a solução mais maleável alcançada foi a de trabalhar com os dados em arquivos.

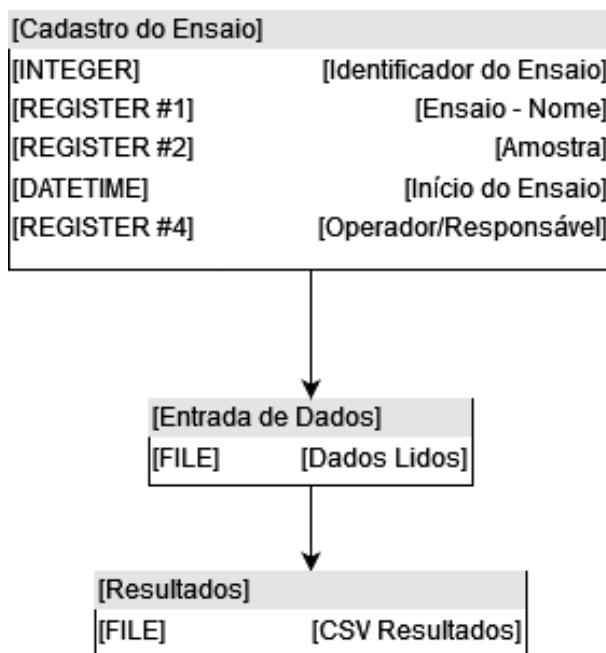


Figura 9 – Especificação do ensaio DLS.

Resultados

Informação:

Para visualizar todos os dados baixe o arquivo clicando no botão abaixo

[Download](#)

CSV:



[tabela.csv](#)

Figura 10 – Resultado do *workflow DLS* no sistema Flux.

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K
Média Polydispersity Index (PI)	Média Z-Average (nm)	Média Zeta Potential (mV)	Nome Amostra	Replicata	STD Polydispersity Index (PI)	STD Z-Average (nm)	STD Zeta Potential (mV)	Tempo	Tip	
0	0.256133333333	111.225	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	Total	0.0310187138041	4.90104348815	0h	Size		
1	0.271616666667	106.175	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	Total	0.0199957647031	3.17035271912	24h	Size		
2	0.28825	115.8	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	Total	0.0389392650629	8.2818531084	48h	Size		
3	0.251333333333	111.866666667	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl1	0.0325652166173	1.95021366351	0h	Size		
4	0.2769	109.366666667	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl1	0.0119201510058	1.66533279957	24h	Size		
5	0.249933333333	116.233333333	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl1	0.0446454178313	7.2472983472	48h	Size		
6	0.259388888889	112.488888889	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl1	0.031173724691	4.88196795474	Total	Size		
7	0.282033333333	107.8	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl2	0.0162543327557	3.89743505398	0h	Size		
8	0.252133333333	108.333333333	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl2	0.0256273941971	1.3503086067	24h	Size		
9	0.315466666667	115.733333333	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl2	0.0291357741159	1.36137185711	48h	Size		
10	0.283211111111	110.622222222	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl2	0.0345735247134	4.41185272243	Total	Size		
11	0.225766666667	112.433333333	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl3	0.00970017181978	4.55448496905	0h	Size		
12	0.2821	102.6	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl3	0.00609179776421	1.3	24h	Size		
13	0.309466666667	105.5	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl3	0.0289741839114	3.46554469023	48h	Size		
14	0.272444444444	106.844444444	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl3	0.0401084190386	5.2685650587	Total	Size		
15	0.2654	112.8	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl4	0.0363360702333	8.26135582093	0h	Size		
16	0.275333333333	104.4	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl4	0.023796288226	1.68226038413	24h	Size		
17	0.278133333333	125.733333333	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl4	0.0227099831205	1.95022521152	48h	Size		
18	0.272955555556	114.311111111	AgNP-Corona_PVP_500mg/mL_meio_daphnia	rpl4	0.0251825391448	10.2588308842	Total	Size		

Figura 11 – Tabela do ensaio DLS.

5.3 Viabilidade Celular

A estrutura do *workflow* de Viabilidade Celular se divide em duas atividades, a primeira faz o cadastro do ensaio e a segunda já recebe a planilha com os dados de entrada e gera, via plugin, as duas tabelas resultantes em campos de tipo TDU tabela.

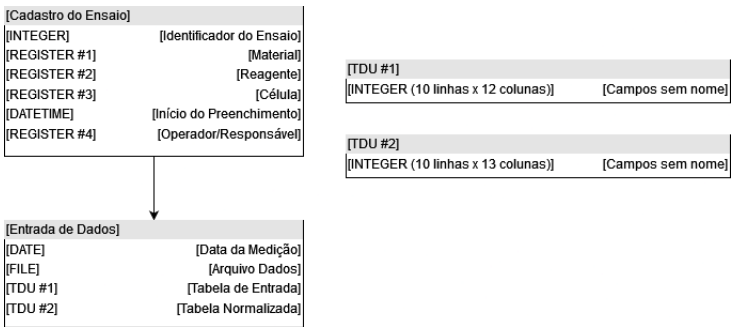


Figura 12 – Especificação do ensaio de Viabilidade Celular.

Processamento de Dados

Data Medida:
08/01/2025

Arquivo Dados:

 [Viabilidade_Celular_alterada.xlsx](#)

Tabela Entrada

C+	100	25	50	12.5	6.3	3.1	1.6	0.8	0.4	c-	sem reagente
358.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	60893.0
248.0	268762.0	250308.0	268235.0	305048.0	321970.0	333309.0	303441.0	315587.0	324374.0	363416.0	49758.0
244.0	249488.0	222668.0	262051.0	248405.0	249972.0	290613.0	253595.0	280692.0	309542.0	304202.0	43842.0
230.0	253333.0	240455.0	256425.0	253416.0	268969.0	262914.0	278183.0	290505.0	308244.0	298475.0	45024.0
242.0	229473.0	221700.0	225526.0	222718.0	237938.0	260803.0	229848.0	266747.0	283113.0	268623.0	38907.0
237.0	240611.0	258924.0	247548.0	254506.0	264612.0	282002.0	292131.0	324803.0	373038.0	299928.0	37462.0
274.0	277934.0	297673.0	378372.0	344551.0	326184.0	332758.0	357962.0	411741.0	316944.0	266663.0	38401.0
335.0	363603.0	447458.0	575452.0	463671.0	425296.0	518298.0	487165.0	511399.0	408762.0	325674.0	45439.0
271.0	269029.16	277026.56	316229.84	298902.16	299277.28	325813.84	314617.84	343067.72	332002.44	303854.44	44965.75
48.711983	44766.22	79444.0	124376.87	83331.02	65106.887	89903.586	86138.484	88146.33	43435.793	33398.12	7692.703

Tabela Normalizada

C+	100	25	50	12.5	6.3	3.1	1.6	0.8	0.4	c-	sem reagente
0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0	0.2
-0.0	0.9	0.8	0.9	1.0	1.1	1.1	1.0	1.0	1.1	1.2	0.2
-0.0	0.8	0.7	0.9	0.8	0.8	1.0	0.8	0.9	1.0	1.0	0.1

Figura 13 – Resultado do *workflow* de Viabilidade Celular no sistema Flux.

5.4 Toxicidade Crônica com *Zebrafish*

O *workflow* de Toxicidade Crônica com *Zebrafish* foi dividido em 4 atividades, a primeira em que é realizado o cadastro do ensaio, uma segunda responsável pela entrada dos dados necessários para o processamento dos resultados, a terceira atividade na qual foi repassada a orientação para o armazenamento de imagens dos indivíduos expostos e uma atividade de resultados que funciona em lógica similar à do *workflow* DLS. A atividade de Armazenamento de Imagens possui além dos campos básicos, uma TDU na qual são passadas tanto as orientações de captura das imagens, quanto *prints* de tela que permitam visualizar o processo de realização do que está sendo orientado.

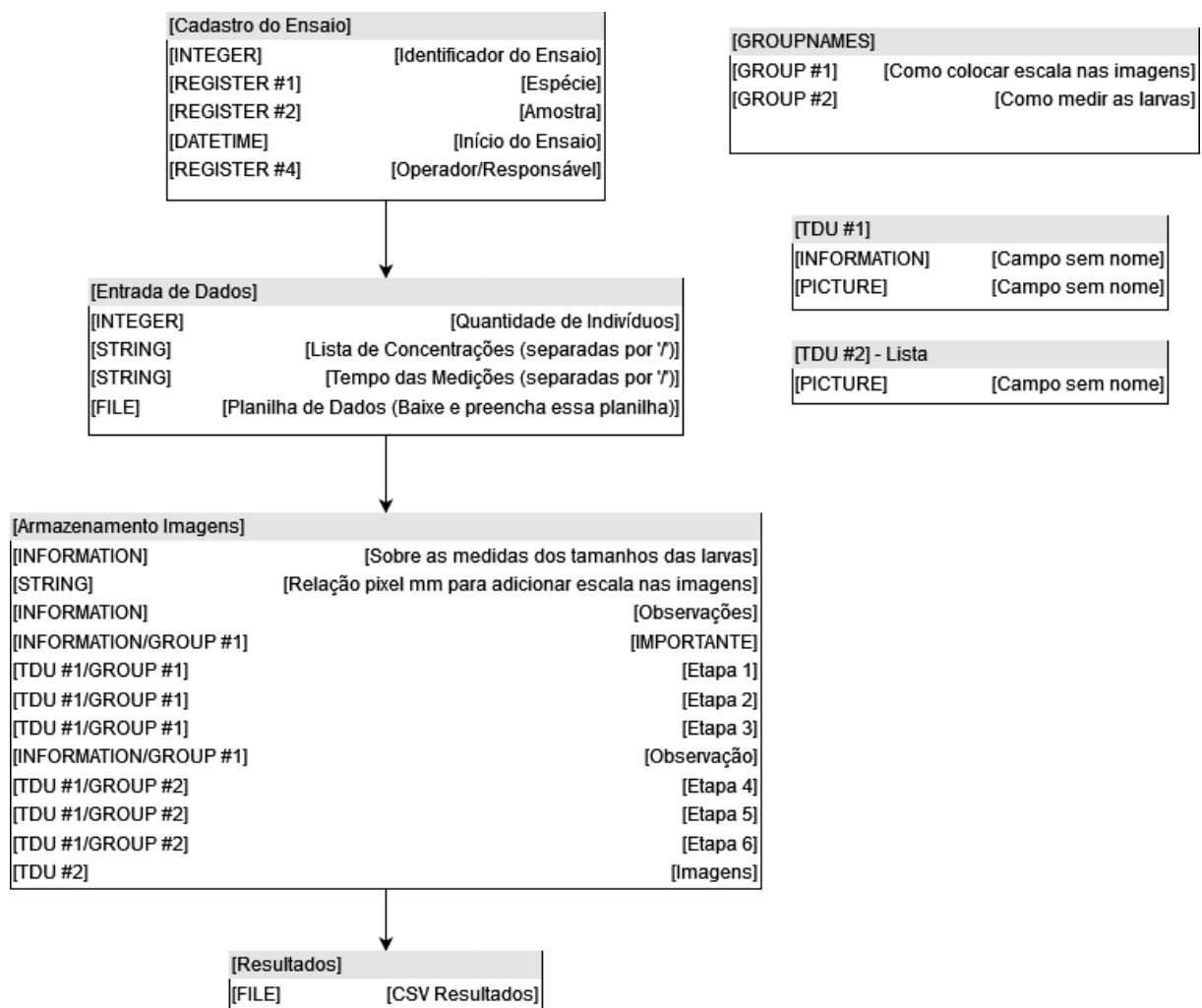


Figura 14 – Especificação do ensaio de Toxicidade Crônica com *Zebrafish*.

Definição Planilha de Dados

Quantidade de Concentrações:

5

Quantidade de Indivíduos:

10

DATE:

10/01/2025

registerLNNANO -- Amostras:

CaNC36

Lista de Concentrações (separadas por '/')

Controle/1/2/3/4/Controle DMSC

Unidade de Medida:

uG/L

Tempo das Medições (separadas por '/')

24/48

Nomeie a Planilha:

Zebrafish3

Planilha de Dados (Baixe e preencha essa planilha):



[Zebrafish3.xlsx](#)

Figura 15 – Resultado do *workflow* de Toxicidade Crônica com *Zebrafish* no sistema Flux.

5.5 Toxicidade Aguda com *Daphnia*

O *workflow* de Toxicidade Aguda com dáfias é parecido com o de Toxicidade Aguda com *Zebrafish*, mas se diferencia por não ter uma atividade relativa ao armazenamento de imagens e por ter um atributo do tipo TEXTBOX para exibição dos valores de EC50 para cada intervalo de medição.

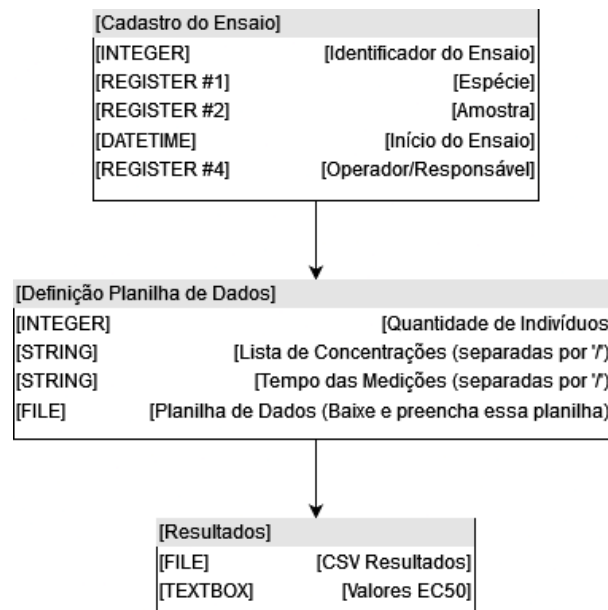


Figura 16 – Especificação do ensaio de Toxicidade Aguda com Dáfia.

Definição Planilha de Dados

Quantidade de Concentrações:

7

Espécie:

Daphnia Similis

Quantidade de Indivíduos:

5

DATE:

17/01/2025

Amostra:

CaNC36

Lista de Concentrações (separadas por '/')

80/40/20/10/5/2.5/0

Tempo das Medições (separadas por '/')

24/48

Nome para a planilha:

Daphnia

Planilha de Dados (Baixe e preencha essa planilha):



[Daphnia.xlsx](#)

Figura 17 – Resultado do *workflow* de Toxicidade Aguda com Dáfnia no sistema Flux.

6 CONCLUSÕES

O processo de implementação do projeto demandou um grande esforço de comunicação entre as partes envolvidas. Alinhar as datas, definir os requisitos, alterar as entradas esperadas de forma a ajustá-las às limitações do sistema, foram aspectos desafiadores a serem superados a fim de se chegar a uma conclusão satisfatória para o projeto. Entretanto, justamente por causa desta cooperação foi possível desenvolver um sistema bem alinhado às necessidades do laboratório.

O trabalho realizado não é uma versão final e definitiva dos *workflows*, e o uso regular dos mesmos acarretará em um processo de refino e de adequação a eventuais e esperadas mudanças de procedimento nos ensaios. Ainda assim, entende-se que o realizado até aqui é um passo firme na direção de uma melhor gestão dos dados laboratoriais e do processamento de parcela considerável desses dados.

Espera-se que os trabalhos futuros sigam agregando outros ensaios do LNNano de forma a centralizar cada vez mais, e quem sabe um dia completamente, a gestão dos dados deste laboratório em um único sistema.

Referências

- [1] Thomas Craig, Richard Holland, Rosalinda D’Amore, James R. Johnson, Hannah V. McCue, Anthony West, Valentin Zulkower, Hille Tekotte, Yizhi Cai, Daniel Swan, Robert P Davey, Christiane Hertz-Fowler, Anthony Hall, and Mark Caddick. Leaf lims: A flexible laboratory information management system with a synthetic biology focus. *ACS Synthetic Biology*, 6(Issue 12):2273–2280, 2017.
- [2] Alessandra Faria-Campos, Lucas Hanke, Paulo Batista, Vinicius Garcia, and Sergio Campos. An innovative electronic health records system for rare and complex diseases. *BMC Bioinformatics*, 16:s4, 2015.
- [3] Alessandra C Faria-Campos, Luciene B Balottin, Gianlucca Zuin, Vinicius Garcia, Paulo HS Batista, Jose Mauro Granjeiro, and SergioV A Campos. Fluxcttx: A lims-based tool for management and analysis of cytotoxicity assays data. *BMC Bioinformatics*, 16(Suppl 19):S8, 2015.
- [4] Mary D Hinton. *Laboratory Management Systems: Development and Implementation for a Quality Assurance Laboratory*. Marcel Dekker Inc, 1995.
- [5] Alexandre Melo, Alessandra Faria-Campos, and Sergio Vale Campos. Sigla: an adaptable lims for multiple laboratories. *BMC genomics*, 11 Suppl 5(Suppl 5):S8, 2010.
- [6] Christine Paszko and Carol Pugsley. Considerations in selecting a laboratory information management system (lims). *American Laboratory*, 32(18):38–43, 2000.
- [7] Francesco Venco, Yuriy Vaskin, Arnaud Ceol, and Heiko Muller. Smith: a lims for handling next-generation sequencing workflows. *BMC Bioinformatics*, 15(Suppl 14):S3, 2014.