

SARS-CoV-2-Sequenzdaten aus Deutschland

SARS-CoV-2 sequences from Germany

Robert Koch-Institut | RKI

Nordufer 20

13353 Berlin

Robert Koch-Institut (2021): SARS-CoV-2-Sequenzdaten aus Deutschland, Berlin: Zenodo. DOI: [10.5281/zenodo.5139363](https://doi.org/10.5281/zenodo.5139363)

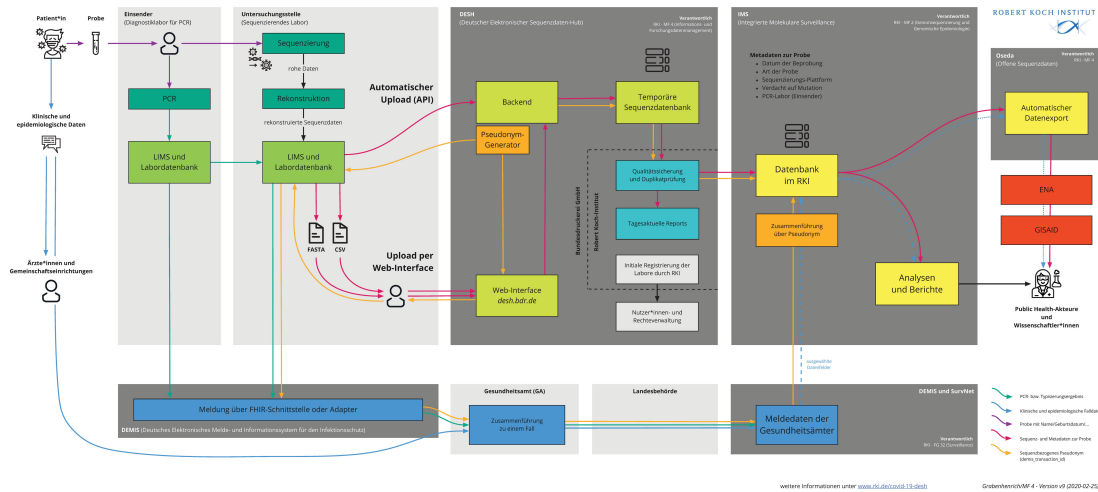
Der Datensatz "SARS-CoV-2-Sequenzdaten_aus_Deutschland" ist lizenziert unter der [Creative Commons Namensnennung 4.0 International Public License](#) | [CC-BY 4.0 International](#)

Informationen zum Datensatz und Entstehungskontext

Für die Planung von Maßnahmen zur Eindämmung von COVID-19 kommt der genauen Kenntnis der Eigenschaften von SARS-CoV-2 eine zentrale Bedeutung zu. Eine besondere Rolle spielen in diesem Zusammenhang Mutationen des Virus. Für eine erfolgreiche Eindämmung der Pandemie ist es daher entscheidend, einen detaillierten Überblick über die Ausbreitungsmuster spezifischer SARS-CoV-2-Mutationen zu erhalten und auch neue Mutationen frühzeitig zu entdecken.

Hierfür stellt das Robert Koch-Institut die Systeme zur bundesweiten molekularen Surveillance bereit. Jedes Labor in Deutschland, das SARS-CoV-2 sequenziert, ist laut der [Verordnung zur molekulargenetischen Surveillance des Coronavirus SARS-CoV-2](#) verpflichtet, dem Robert Koch-Institut die Sequenz- und zugehörige Metadaten zu übermitteln. Technisch erfolgt diese Übermittlung über den [Deutschen Elektronischen Sequenzdaten-Hub](#) (DESH).

Im Projekt "OSEDa - Offene Sequenzdaten" verpflichtet sich das RKI, die aufgearbeiteten und qualitätskontrollierten Sequenzdaten zusammen mit einer Auswahl von klinisch-epidemiologischen Daten über die öffentlich zugängliche Repositorien des [European Nucleotide Archive](#) (ENA) und [GISAID](#) für weitere Forschungsvorhaben bereitzustellen.



[Kontextmaterialien/2021-01-29_DESH_CorSurV_BAnz_AT_V2.pdf](#)

Administrative und organisatorische Angaben

Der Datensatz "SARS-CoV-2-Virusvarianten in Deutschland" wird vom [Robert Koch-Institut](#) für Forschungsarbeiten im Zusammenhang mit der SARS-CoV-2-Pandemie bereitgestellt.

Die Datenübermittlung an das RKI erfolgt über das System des [Deutschen Elektronischen Sequenzdaten-Hub](#) (DESH). Teil dieses Systems ist die von der Bundesdruckerei bereitgestellte DESH-Plattform über die Sequenzdaten durch sequenzierenden Labore übermittelt werden können (nur mit einem individuellen Zertifikat aufrufbar). Fragen bezüglich der DESH-Plattform können direkt an das DESH Team unter desch@rki.de gerichtet werden.

Die Veröffentlichung der Daten, die Datenkuration sowie das Qualitätsmanagement der (Meta-)Daten erfolgen durch das Fachgebiet [MF 4 | Forschungsdatenmanagement](#) des RKI. Fragen zum Datenmanagement können an das Open Data Team des Fachgebiets MF4 gerichtet werden (OpenData@rki.de).

Übermittlung der Sequenzdaten

Auf der [DESH Projektwebseite](#) des RKI befindet sich eine [Anleitung zur Bereitstellung der Sequenzdaten](#), die Sequenzierenden Laboren im Prozess der Bereitstellung der Metadaten und Sequenzdaten über <https://desch.bdr.de> (nur mit einem individuellen Zertifikat aufrufbar) behilflich ist. Für die sequenzierenden Labore werden bestimmte [Qualitätskriterien](#) für die Sequenzdaten gefordert. Die Einhaltung der Qualitätskriterien wird durch die sequenzierenden Labore sichergestellt. Das RKI hat keine Kenntnis über die zugrundeliegenden Rohdaten (sog. "Reads").

[Kontextmaterialien/2021-02-18_DESH_Anleitung_zur_Bereitstellung_Sequenzdaten.pdf](#)

[Kontextmaterialien/2021-02-08_DESH_Qualitätsvorgaben_für_die_Sequenzdaten.pdf](#)

Veröffentlichung der Sequenzdaten

In der Veröffentlichung von Sequenzdaten in [ENA](#) und [GISAID](#) kommt es durch notwendige Zwischenschritte zu einer zeitlichen Verzögerung der Publikation. Daher stellt das RKI zusätzlich alle über DESH empfangenen Sequenzdaten tagesaktuell zu Verfügung.

:warning: Der Datensatz ist keiner weiteren Qualitätskontrolle durch das RKI durchlaufen. Zu beachten ist, dass Daten in diesem Datensatz zum Beispiel:

- Sequenzdaten von niedriger Qualität enthalten
- unverifizierte Frameshifts vorhersagen
- mehrmals im Datensatz vorhanden sind
- bereits vom sequenzierendem Labor veröffentlicht worden sind

Die hier veröffentlichten Daten können daher nicht ohne weiteres mit dem wöchentlichen [Bericht zu Virusvarianten von SARS-CoV-2 in Deutschland des RKIs](#) verglichen werden. Außerdem können diese Daten ausdrücklich nicht als Grundlage für die Abrechnung der Labore mit der KBV verwendet werden.

Aufbau und Inhalt des Datensatzes

Der Datensatz enthält Daten über SARS-CoV-2-Sequenzen in Deutschland und die in der Datenverarbeitung unterstützenden Kontextmaterialien. Im Datensatz enthalten sind:

- Sequenzdaten der übermittelten SARS-CoV-2-Genomsequenzen
- Metadaten zu den SARS-CoV-2-Genomsequenzen
- Archiv mit der Sammlung aller bisherig übermittelten SARS-CoV-2-Genomsequenzen und der entsprechenden Metadaten
- Lizenz mit der Nutzungslizenz des Datensatzes
- Datensatzdokumentation und Kontextmaterialien in deutscher Sprache
- Metadaten Datei zum Import in Zenodo

Formatierung der Sequenzdaten

Die SARS-CoV-2-Sequenzdaten werden als [xz-komprimierte .fasta](#) Datei bereitgestellt. Daraus ergibt sich die Dateiendung .fasta.xz. Die Zeilen werden bei 80 Zeichen umgebrochen. Es werden Linux Zeilenumbrüche verwendet.

- Zeichensatz: UTF-8
- Komprimierung: [.xz](#)
- Enthaltenes Dateiformat: [.fasta](#)
- Zeilenlänge: maximal 80 Zeichen
- Zeilenumbrüche: Linux Zeilenumbrüche

Formatierung der Metadaten

Die Metadaten der Sequenzierung werden als [xz-komprimierte](#), kommaseparierte .csv-Datei bereitgestellt. Daraus ergibt sich die Dateiendung .csv.xz. Der verwendete Zeichensatz der .csv-Datei ist UTF-8. Trennzeichen der einzelnen Werte ist ein Komma ",". Datumsangaben sind im ISO-8601-Standard formatiert.

- Zeichensatz: UTF-8
- Datumsformat: ISO 8601
- Komprimierung: [.xz](#)

- Enthaltenes Dateiformat: .csv
- .csv-Trennzeichen: Komma ",",

Die Dateien können auf gängigen Betriebssystemen, beispielsweise mit den Programmen [7zip](#) oder [XZ Utils](#), entpackt werden. Die Komprimierung wird vorgenommen, da insbesondere die .fasta-Dateien mehrere Gigabyte (GB) groß sind.

SARS-CoV-2-Sequenzdaten und Metadaten der Sequenzierung

Die SARS-CoV-2-Sequenzdaten werden tagesaktuell im Hauptverzeichnis unter "SARS-CoV-2-Sequenzdaten_Deutschland.fasta.xz" bereitgestellt. Gleiches gilt für zugehörigen Metadaten, die unter "SARS-CoV-2-Sequenzdaten_Deutschland.csv.xz" im Datensatz enthalten sind. Im Archivordner sind die täglichen Datenstände unter den Dateinamen "JJJJ-MM-TT_SARS-CoV-2-Sequenzdaten_Deutschland.fasta.xz" und "JJJJ-MM-TT_SARS-CoV-2-Sequenzdaten_Deutschland.csv.xz" abgelegt.

```
Aktuell_SARS-CoV-2-Sequenzdaten_Deutschland.fasta.xz
Aktuell_SARS-CoV-2-Sequenzdaten_Deutschland.csv.xz
Archiv/JJJJ-MM-TT_SARS-CoV-2-Sequenzdaten_Deutschland.fasta.xz
Archiv/JJJJ-MM-TT_SARS-CoV-2-Sequenzdaten_Deutschland.csv.xz
```

Im Dateinamen repräsentiert die Sequenz "JJJJ-MM-TT" das Erstellungsdatum der Datei und gleichzeitig das Datum des enthaltenen Datenstands. "JJJJ" steht dabei für das Jahr, "MM" für den Monat und "TT" für den Tag der Erstellung bzw. des enthaltenen Datenstands.

Die Daten werden jeden Tag um die verarbeiteten Sequenzdaten des aktuellen Tages erweitert (kummulation). Dabei werden nach 20:00 eingesendete Sequenzdaten erst am Folgetag verarbeitet. Der Datenstand bildet also immer den Stand des aktuellen Tages um 19:59 ab.

Struktur der Sequenzdaten

Die Sequenzeinträge der bereitgestellten .fasta-Datei beginnen mit einer einzeiligen Beschreibung, der Kopfzeile, auch "Description line" genannt. Auf die Kopfzeile folgt die [Nukleinsäuresequenz](#) des sequenzierten SARS-CoV-2-Virus.

Die Kopfzeile wird durch ein ">" markiert, eine Sequenz endet mit dem Ende der Datei oder einem weiteren Sequenzeintag, beginnen mit einer neuen Kopfzeile.

In den bereitgestellten Sequenzdaten enthält die Kopfzeile die FASTA-ID, die in den Daten der IMS_ID der Probe entspricht. Die IMS_ID erlaubt die Verknüpfung mit den Metadaten. Die Kodierung der Nucleotide der Sequenzdaten folgen dem IUB/IUPAC Standard.

- Kopfzeile: >IMS_ID
- Nukleinsäuresequenz: IUB/IUPAC Standard

Daraus ergibt sich beispielhaft folgende Struktur einer .fasta-Datei:

```
>IMS-101XX-CVDP-XX
NNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNACCAACCAACTTTTCGATCTCTT
GTTCTCTAAACGAACCTTTAAATCTGTGTGGCTGTCTCTCGGCTGCATGCTTAGTGCACT
...
```

```

YGACCGGGTGTGACCGAAAGGTAAGATGGAGAGCCTTGTCCCTGGTTTCAACGAGAA
GGGAGGACTTGAAAGAGCCACCACATTTTCACCGAGGCN
>IMS-101YY-CVDP-YY
NNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNNACCAACTCTCGGCTGCATGCT
GTTCTCTAAACGAACCTTAAATCTGTGTGGCTGTCTTGAAAGAGCCACCACATTTTCA
...

```

Variablen und Variablenausprägungen Metadaten

In den als .csv bereitgestellten Metadaten enthalten in folgender Tabelle aufgeführte Variablen als Spalten. Zentral für die Verknüpfung der Metadaten mit den Genomsequenzen ist die IMS_ID, die in beiden Daten enthalten ist.

Variable	Beschreibung	Value Set
IMS_ID	Ein eindeutiger Identifikator der Sequenzdaten und Metadaten zusammenführt. Dieser Identifikator wird als FASTA ID in den Sequenzdaten genutzt	
DATE_DRAW	Das Datum der Probeentnahme im Format JJJJ-MM-TT	
SEQ_TYPE	Die verwendete Sequenzierungs-Plattform	ena
SEQ_REASON	Der Grund für die Durchführung der Sequenzierung	rki
SAMPLE_TYPE	Art der Probe	snomed
OWN_FASTA_ID	Die vom Labor genutzte FASTA ID in verschlüsselter Form	
RECEIVE_DATE	Verarbeitungsdatum im RKI (JJJJ-MM-TT). Üblicherweise <24 Stunden nach Einsendung durch die Labore	
SENDING_LAB_PC	Die Postleitzahl des sequenzierenden Labors	
PRIMEDIAGNOSTIC_LAB_PC	Die Postleitzahl des primärdiagnostischen Labors	

Weitere Informationen zu den aufgeführten Variablen finden sich in der [Anleitung zur Bereitstellung der Sequenzdaten](#) die auch in [Kontextmaterialien](#) hinterlegt ist.

Hinweise zur Nachnutzung der Daten

:warning: Der Datensatz ist keiner weitere Qualitätskontrolle durch das RKI durchlaufen. Zu beachten ist, dass Daten in diesem Datensatz zum Beispiel:

- Sequenzdaten von niedriger Qualität enthalten
- unverifizierte Frameshifts vorhersagen
- mehrmals im Datensatz vorhanden sind
- bereits vom sequenzierendem Labor veröffentlicht worden sind

Die hier veröffentlichten Daten können daher nicht ohne weiteres mit dem wöchentlichen [Bericht zu Virusvarianten von SARS-CoV-2 in Deutschland des RKIs](#) verglichen werden. Außerdem können diese Daten ausdrücklich nicht als Grundlage für die Abrechnung der Labore mit der KBV verwendet werden.

Weitere, offene Forschungsdaten des RKI werden auf [GitHub.com](#) sowie [Zenodo.org](#) bereitgestellt:

- <https://github.com/robert-koch-institut>
- <https://zenodo.org/communities/robertkochinstitut>

Metadaten der Publikation

Die bereitgestellten Daten sind mit Metadaten beschrieben und wissenschaftlich zitierbar, u.a. durch die Vergabe einer DOI durch Zenodo.org. Die für den Import in Zenodo bereitgestellten Metadaten sind in folgender Datei hinterlegt:

`.zenodo.json`

Die Dokumentation der einzelnen Metadatenvariablen ist unter <https://developers.zenodo.org/#representation> nachlesbar.

Lizenz

Der Datensatz "SARS-CoV-2-Virusvarianten in Deutschland" ist lizenziert unter der [Creative Commons Namensnennung 4.0 International Public License | CC-BY 4.0 International](#).

Die im Datensatz bereitgestellten Daten sind, unter Bedingung der Namensnennung des Robert Koch-Instituts als Quelle, frei verfügbar. Das bedeutet, jede_r hat das Recht die Daten zu verarbeiten und zu verändern, Derivate des Datensatzes zu erstellen und sie für kommerzielle und nicht kommerzielle Zwecke zu nutzen. Weitere Informationen zur Lizenz finden sich in der [LICENSE](#) bzw. [LIZENZ](#) Datei des Datensatzes.

Die empfohlene Zitierweise ist:

Robert Koch Institut (2021): SARS-CoV-2-Sequenzdaten aus Deutschland, Berlin: Zenodo. DOI: [10.5281/zenodo.5139363](https://doi.org/10.5281/zenodo.5139363) .