

OpenMS

Development of a Quality Control Pipeline for
Liquid Chromatography – Mass Spectrometry

Chris Bielow

Proteomics

Genomics

Transcriptomics

“OMICS”

Connectomics

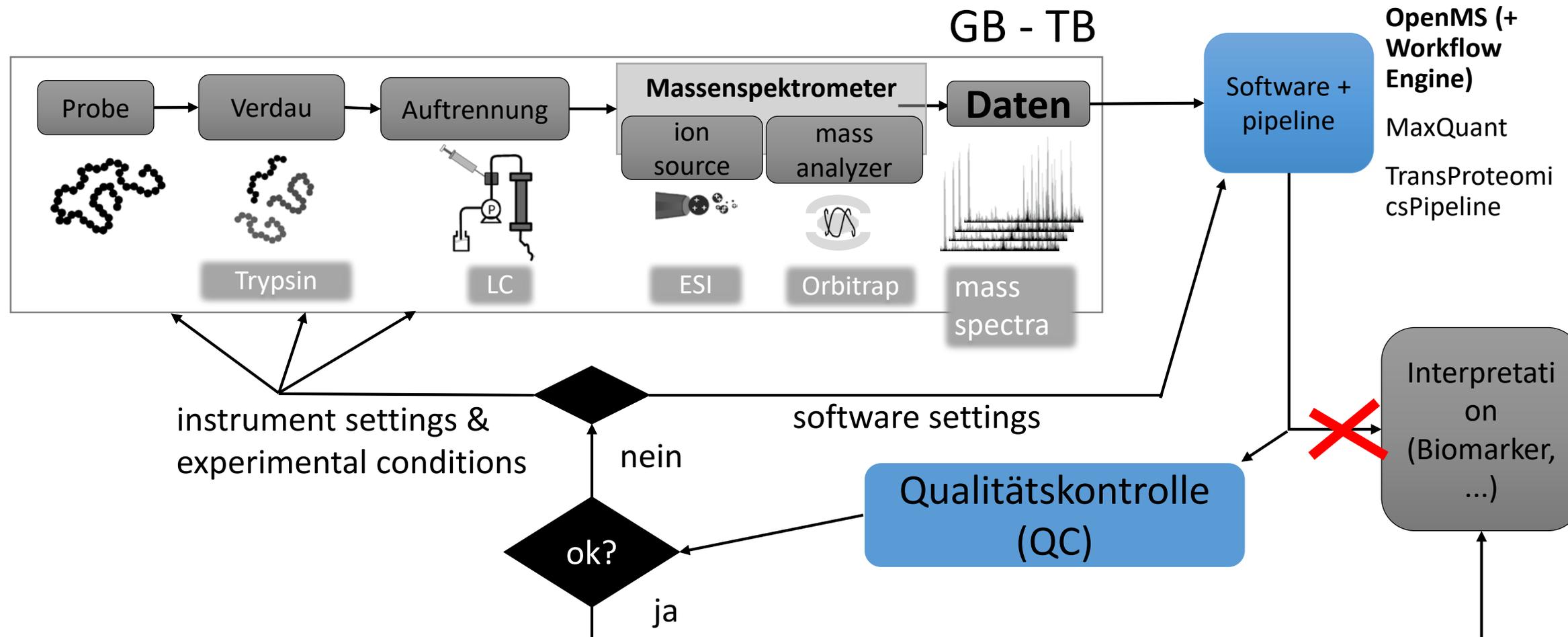
Foodomics

Metabolomics

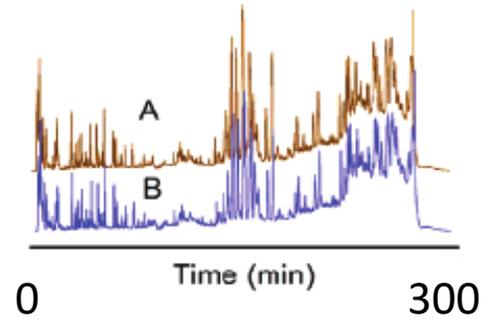
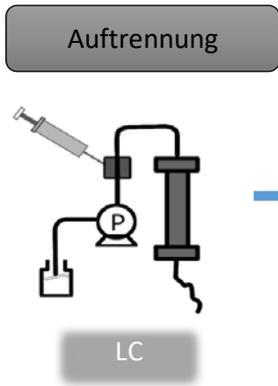
OMICS – Ganzheitliche Charakterisierung und Quantifizierung des entsprechenden Teilgebiets

Proteomik-Pipeline

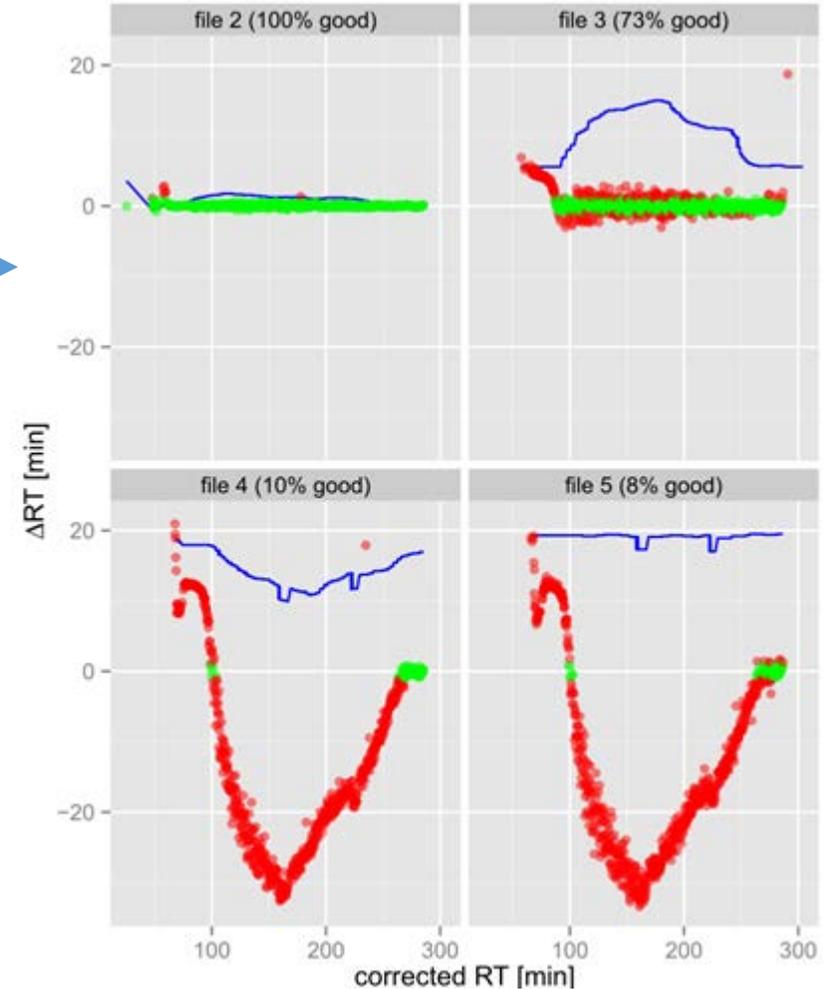
Mittel der Wahl: Liquid Chromatography (LC) + Massenspektrometrie (MS)



QC Beispiel – Alignment von Retentionszeiten

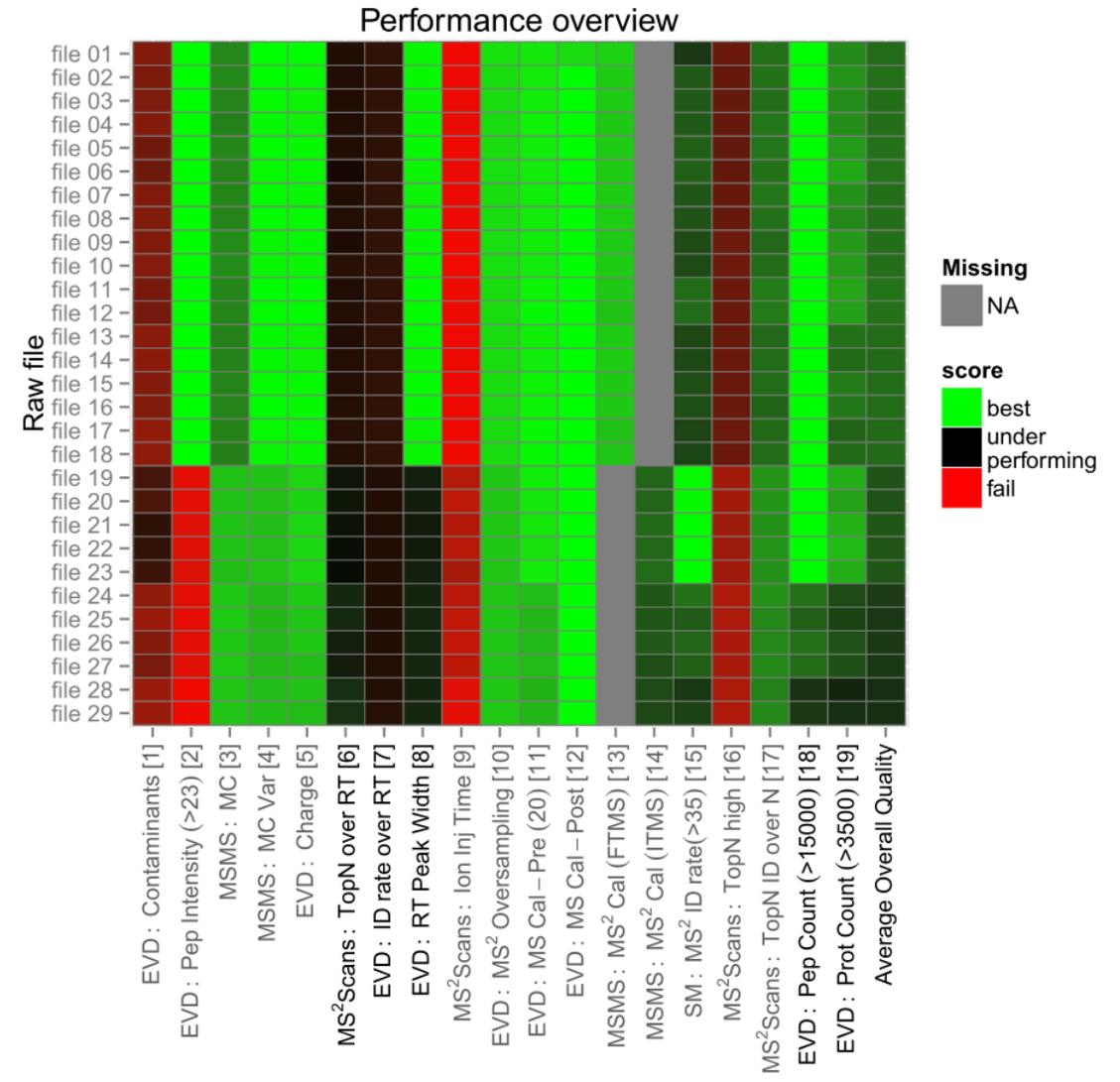


align

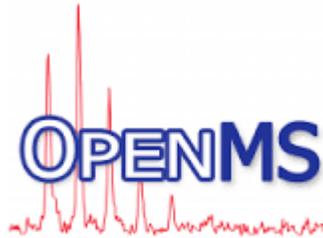


QC Beispiel - Gesamtübersicht

- Automated scoring of results using adequate



Software Pipeline (KNIME)



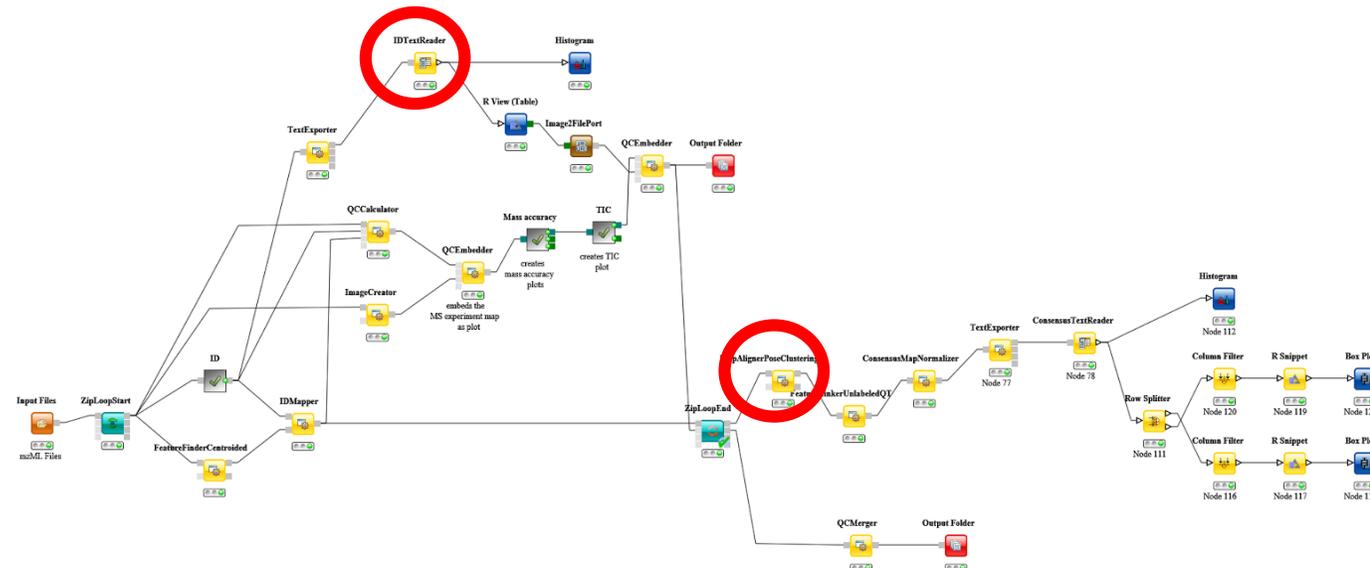
OpenMS

- C++ Bibliothek für Analyse von LC-MS Daten
- Tools/Executables
 - 150 Tools
 - „Lego“



KNIME (konstanz information miner)

- Pipeline tool
- Visualisierung von Daten



Zielstellung

- Implementierung von bekannten (oder neuen) Metriken zur Qualitätssicherung von LC-MS Experimenten
 - OpenMS C++
 - ca. 1-4 Metriken pro Team
- Optimierung der Programmlaufzeit (C++ Code Profiling; V-Tune, perf,...)
 - “Ausgleich” für zusätzlichen Aufwand durch Erzeugung der Metriken
- Visualisierung der Daten
 - Plot (R)
- Zusammenführung der Metriken in einem automatisierten Report
 - Abstimmung zwischen den Teams
- Erstellung eines Pull-Requests zur Aufnahme der neuen Funktionalität in die OpenMS-Entwicklerversion

Zeitplan - Seminar

Fr. 22.2., 10:00 Uhr oder Mo, 25.02., 10:00 Uhr

- Vorbesprechung, genaue Terminvereinbarung per E-Mail zur Vermeidung von Terminkollisionen

Mo, 11.3. - Fr, 15.3. – Projekteinführungswoche

- Projektmanagement, Zeit & Ressourcen-Planung
- Einführung in Flüssigkeitschromatographie & Massenspektrometrie (LC-MS)
- Refresher: C++ und R, Arbeit in einer großen Softwarebibliothek
- Tutorial OpenMS (C++ library und Tools) & PTXQC (QC Tool in R)
- Workflow engines: KNIME und TOPPAS
- Git (version control software)
- Quality metrics

Zeitplan – praktischer Teil

Fr, 22.03.

Vorstellung der Pläne

Mo, 23.03. - Fr, 03.05.

Woche 1(+2):

- OpenMS-develop installieren
- Projekt auf <https://git.imp.fu-berlin.de> clonen
- Einarbeitung in OpenMS
- Relevante Literatur lesen
- (Externe Programme testen)
- Metriken aussuchen, Zeitplan erstellen, Vortrag

Woche 3+4

- Neue Metriken implementieren (C++/R)
- Visualisieren
- Tests schreiben

Woche 5

- Workflows finalisieren (C++/R); evtl. Bugs fixen;
- Abschlussbericht schreiben (Resultate, Metriken, Screenshots, Workflows)

Fr, 10.5. Abschlussbericht und Vorstellung der Ergebnisse

wöchentliche Besprechung

Freitags: 10-12 Uhr,

Weiteres Vorgehen, Anpassung
des Zeitplans, Problemlösung

Weitere Treffen nach Bedarf

Vorraussetzungen

- Erfahrung in Objektorientierter Programmierung (Java, C++, ...)
 - C++ Kenntnisse empfehlenswert (wenig Templates)
 - z.B. AlDaBi Praktikum / C++-Kurs (Nachmeldung mgl., via Pruefungsbuero Formular)

Empfehlenswert

- R Grundwissen (ggplot2)
- Erfahrung mit Profilern

Schwierigkeitsgrad (Acht Sterne verteilt auf drei Bereiche):

A Programmieren: ****

B Biologie/Chemie: **

C Projektmanagement: **

Fragen?

- mehr Fragen
 - chris.bielow@fu-berlin.de

Ausbau zu B.Sc. Arbeit
prinzipiell möglich

Mehr Informationen

- OpenMS
 - www.OpenMS.de
- PMSB OpenMS
 - <http://www.bsc.fu-berlin.de/TeachingAndWorkshops/SoSe19/index.html>