

## Workshop: STOFF-IDENT & openMASP

18. / 19.04.2013

Freising



# Überblick

1. Plattform - Vorschau
2. openMASP (OM)
3. STOFF-IDENT(SI)
4. Plattform - Fazit



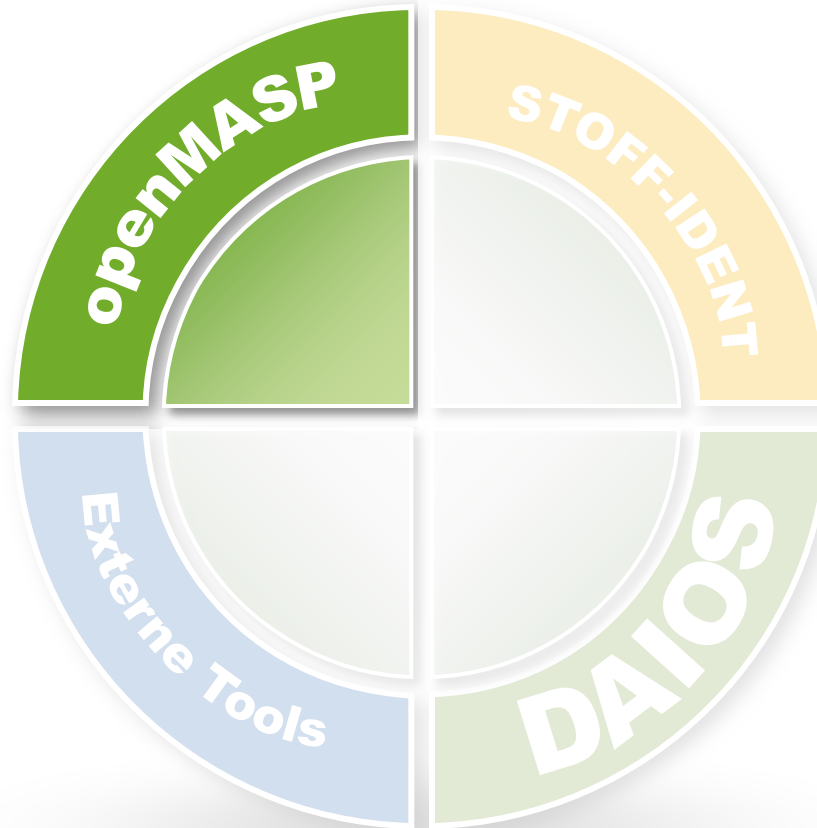
# Plattform - Vorschau

## Gesamtsystem in RISK-IDENT

# Plattform

- Eclipse RCP
- bisher Rich Application
- bereits modular über Eclipse Plugin-Struktur

- Externe Schnittstellen, Tools oder Datenbanken werden in OSGi Modul verpackt



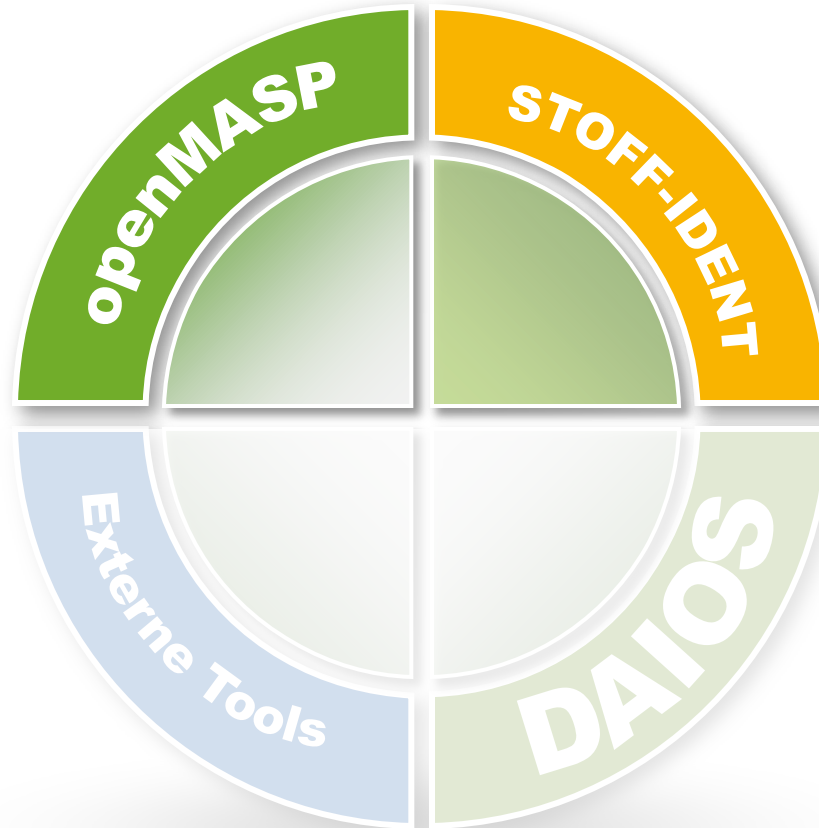
- Stoffdatenbank
- Applikation modular über OSGi
- Eclipse RAP

- Stoff-Analyse-Datenbank
- LW
- Reimplementierung

# Plattform

- Eclipse RCP
- bisher Rich Application
- bereits modular über Eclipse Plugin-Struktur

- Externe Schnittstellen, Tools oder Datenbanken werden in OSGi Modul verpackt



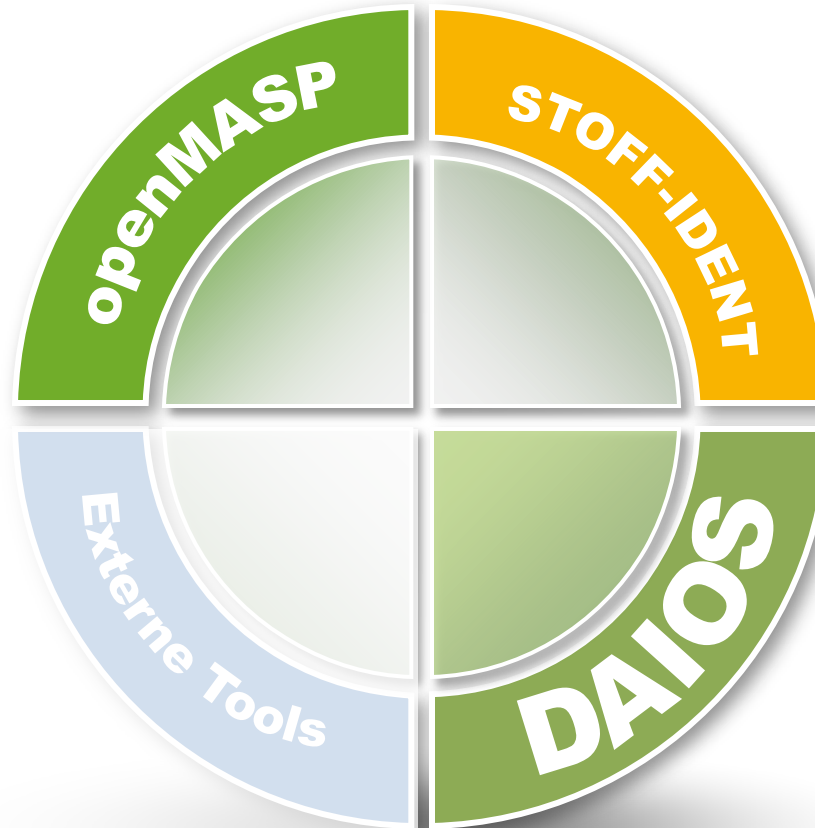
- Stoffdatenbank
- Applikation modular über OSGi
- Eclipse RAP

- Stoff-Analyse-Datenbank
- LW
- Reimplementierung

# Plattform

- Eclipse RCP
- bisher Rich Application
- bereits modular über Eclipse Plugin-Struktur

- Externe Schnittstellen, Tools oder Datenbanken werden in OSGi Modul verpackt



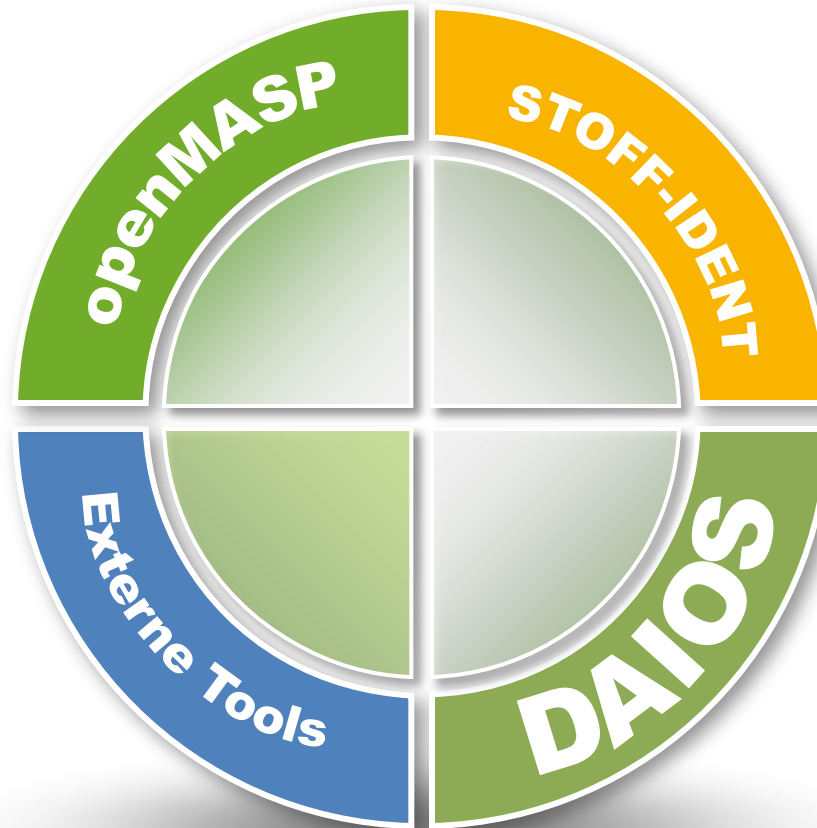
- Stoffdatenbank
- Applikation modular über OSGi
- Eclipse RAP

- Stoff-Analyse-Datenbank
- LW
- Reimplementierung

# Plattform

- Eclipse RCP
- bisher Rich Application
- bereits modular über Eclipse Plugin-Struktur

- Externe Schnittstellen, Tools oder Datenbanken werden in OSGi Modul verpackt



- Stoffdatenbank
- Applikation modular über OSGi
- Eclipse RAP

- Stoff-Analyse-Datenbank
- LW
- Reimplementierung

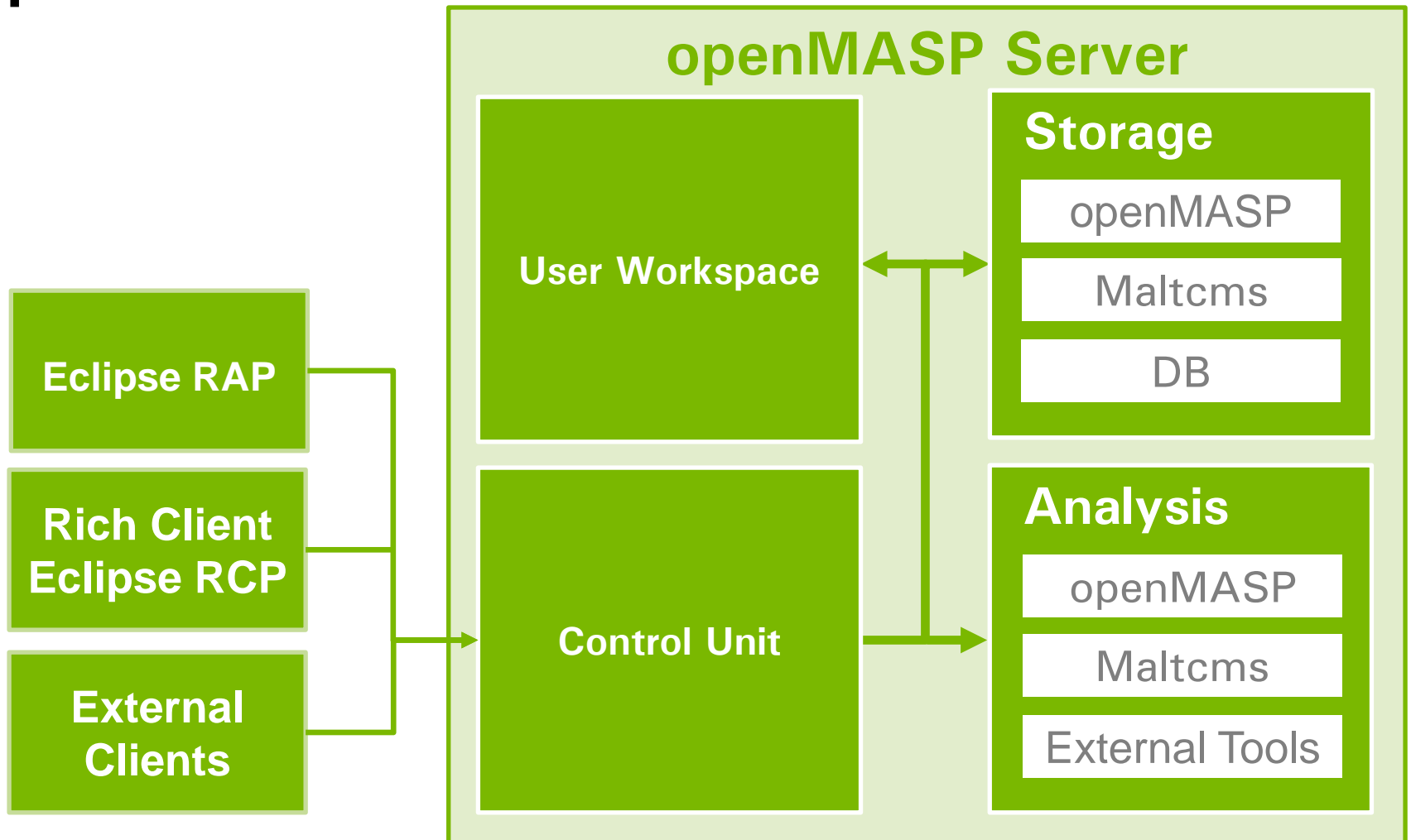


# open**MASP**

## Stand der Entwicklung



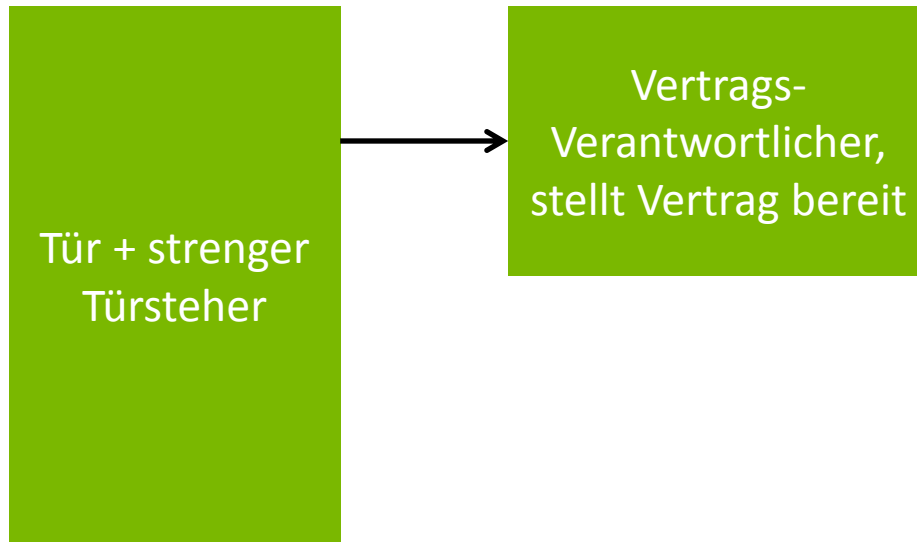
# openMASP

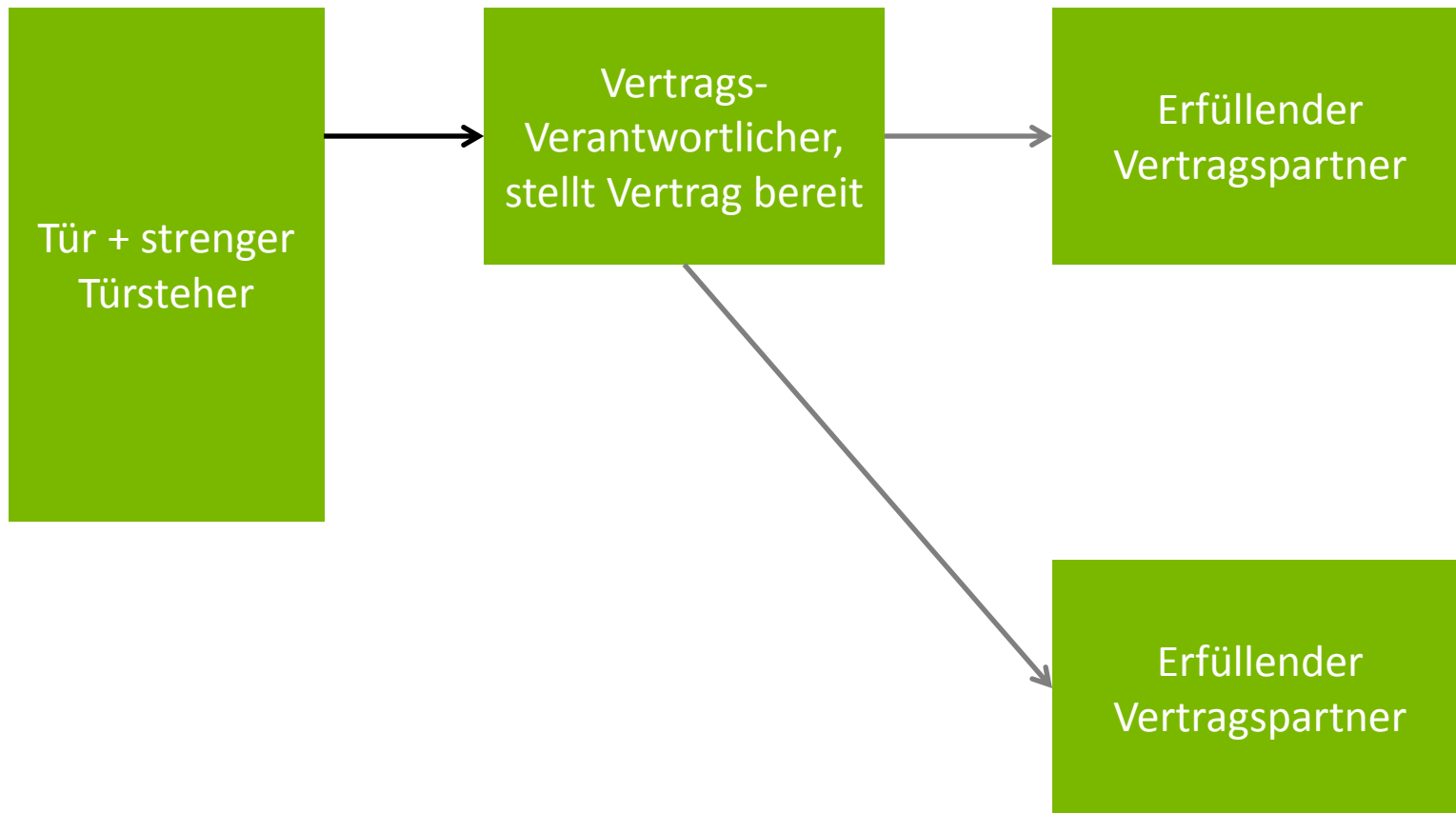


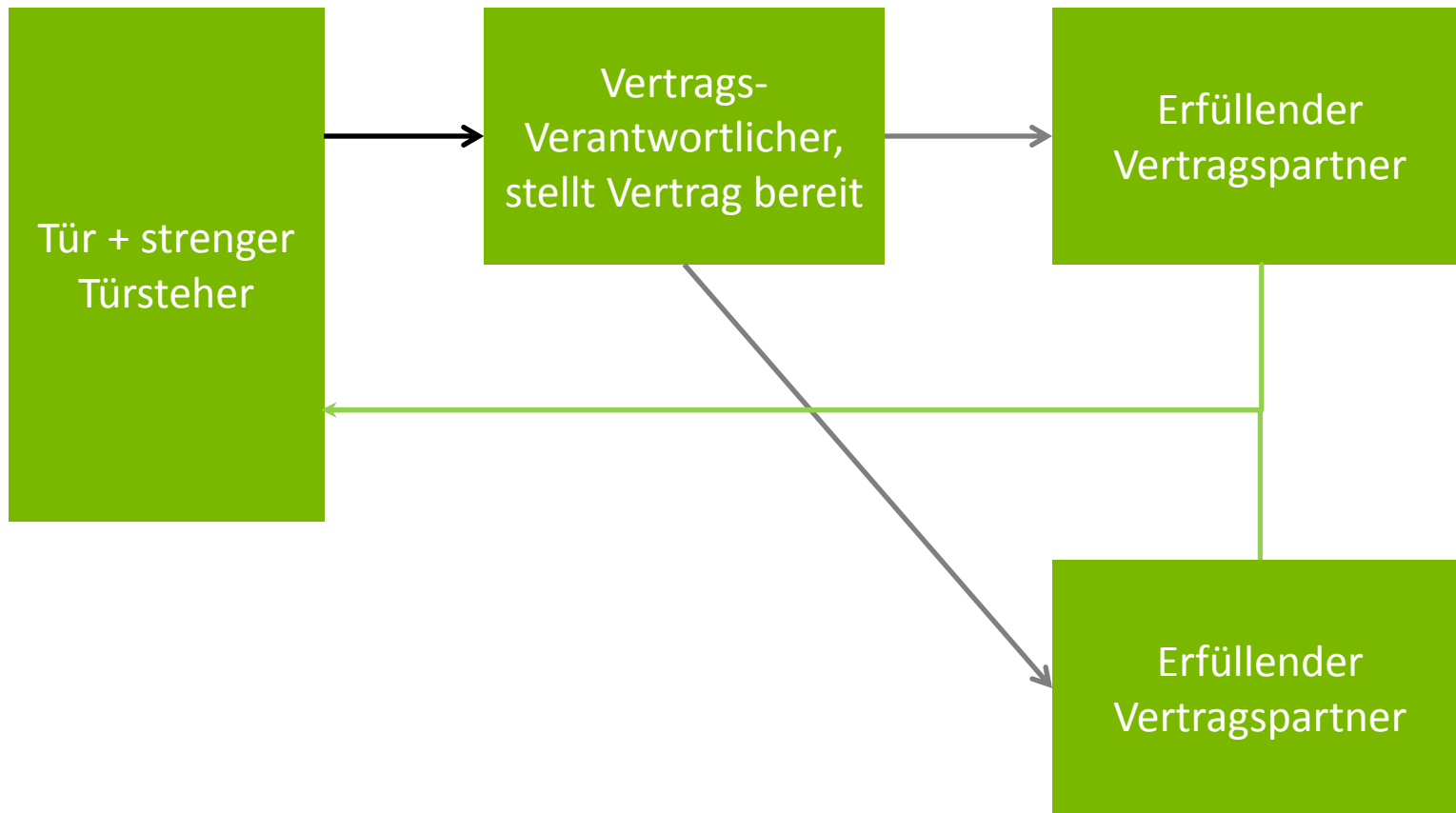


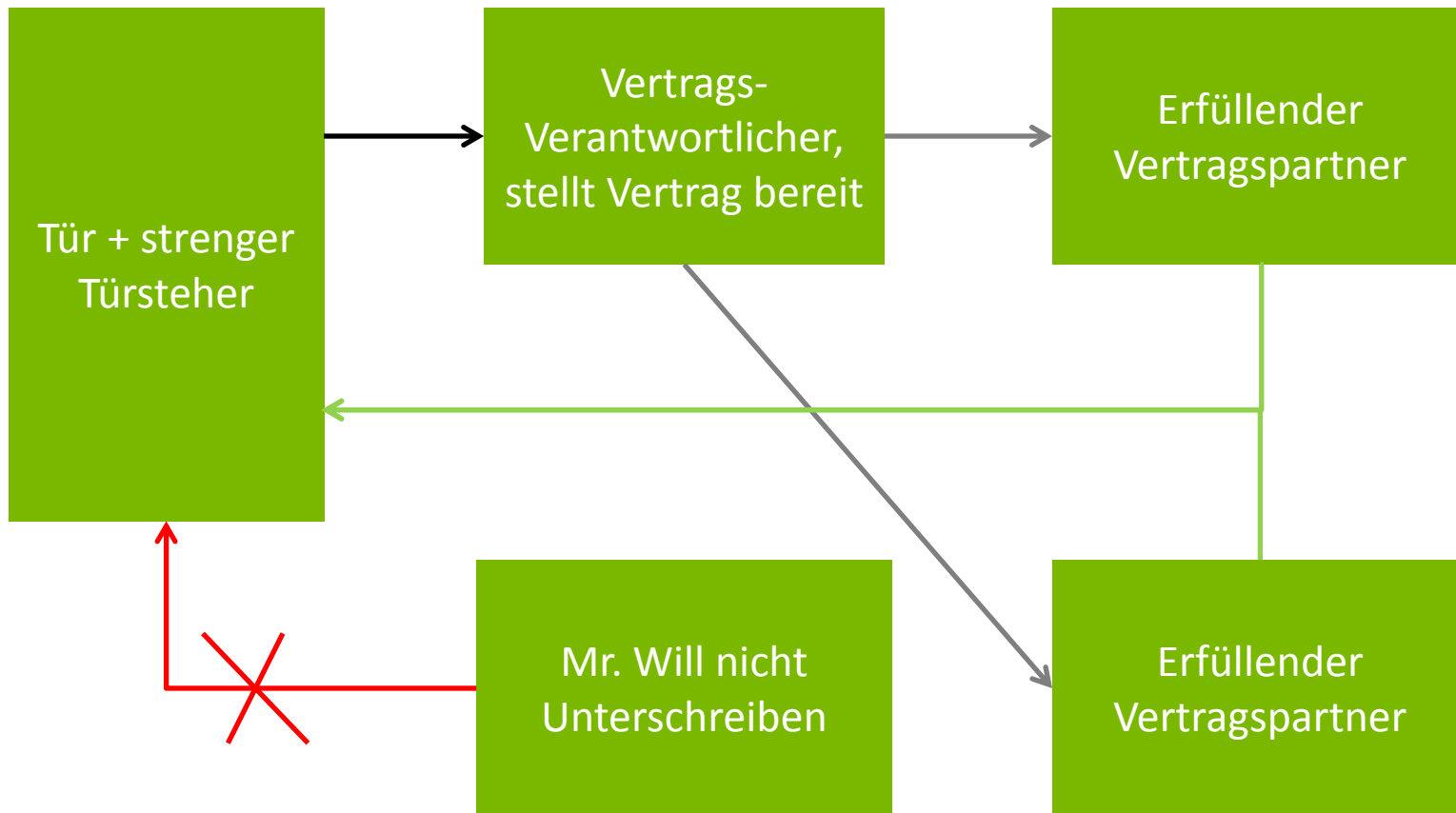
# OSGi

- » Softwareplattform für Softwarekomponenten
- » Mehrere Versionen => gewachsen und gereift
- » OSGi Alliance => Industriekonsortium
- » Große Community mit verschiedenen Implementierungen
- » Hauptsächlich im Java-Umfeld







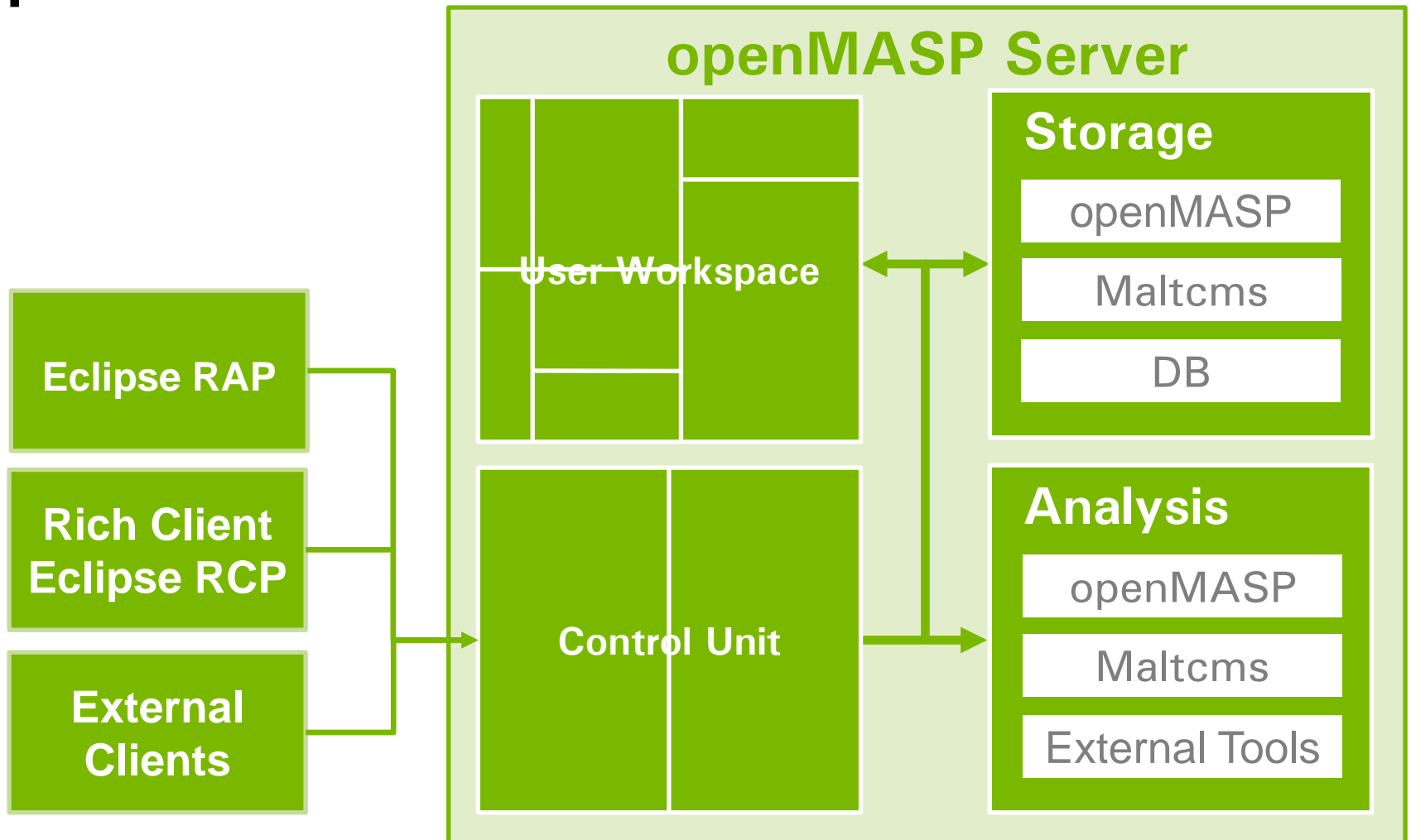




# Softwarekomponenten in OSGi

- » Komponenten sind eine Sammlung von Code
- » Komponente kann Vertrag anbieten oder/und erfüllen
- » OSGi ist also eine Plattform für einen Verbund an Vertragspartnern
- » OSGi bietet eine Registry (Onlineportal) bereit
  - › Kennt alle Komponenten
  - › Vermittelt Komponenten untereinander
  - › Achtet auf Vertragsvereinbarungen

# openMASP







# STOFF-IDENT

## Entwicklungsverlauf



# 1 Prototyp

- » Realisiert als Studentenprojekt
- » Diente als interne Diskussionsgrundlage
- » Keine Weiterentwicklung
- » Wichtige Erkenntnisse:
  - › Datenimport aus REACH
  - › Probleme mit REACH (Datenqualität)

Startseite / Logout

Willkommen auf STOFF-IDENT, Ihrer Datenbank zur Stoffanalyse für gewässerrelevante Spurenstoffe.

**Was Sie hier finden:**  
Die Suchdatenbank stützt sich auf die Inhalte der Reach Datenbank.

**Schnellsuche:**

**Detailsuche:** ↑

CAS-Nummer	<input type="text"/>	LogP	<input type="text"/>	<input type="button" value="±"/>
Summenformel	<input type="text"/>	LogD	<input type="text"/>	<input type="button" value="±"/>
Chem. Name (IUPAC)	<input type="text"/>	Kh	<input type="text"/>	<input type="button" value="±"/>
Einstufung R50-R53	<input type="text"/>	Kd	<input type="text"/>	<input type="button" value="±"/>
Stoffgruppe	<input type="text"/>	Wasserlöslichkeit	<input type="text"/>	<input type="button" value="±"/>
Smiles	<input type="text"/>			
Name	<input type="text"/>			

**Neuer Eintrag:** ↓

Startseite / Ergebnisse

**Ergebnisse:**

CAS-Nummer	Name	Name (IUPAC)
2049-95-8	tert-pentylbenzene	(1,1-dimethylpropyl)benze
947-19-3	hydroxycyclohexyl phenyl ketone	(1-hydroxycyclohexyl)ph
2809-21-4	etidronic acid	(1-hydroxyethane-1,1-diy
15214-89-8	2-acrylamido-2-methylpropanesulphonic acid	(1Z)-N-(2-methyl-1-sulfog
25383-06-6	cis-propenylphosphonic acid	(1Z)-prop-1-en-1-ylphosph
30018-16-7	(2-ethoxy-1-methyl-2-oxoethyl)triphenylphosphonium bromide	(2-ethoxy-1-methyl-2-oxo
1843-05-6	octabenzene	(2-hydroxy-4-octoxypheny
34590-94-8	(2-methoxymethylethoxy)propanol	(2-methoxymethylethoxy
68-26-8	retinol	(2E,4E,6E,8E)-3,7-dimeth
657-27-2	lysine hydrochloride	(2S)-2,6-diaminohexanolo
16088-62-3	(S)-1,2-epoxypropane	(2S)-2-Methyloxirane
42399-49-5	(2S-cis)-2,3-dihydro-3-hydroxy-2-(4-methoxyphenyl)-1,5-benzothiazepin-4(5H)-one	(2S-cis)-2,3-dihydro-3-hy
599-04-2	7-hydroxy-7,7-dimethyl-7-butyrolactone	(3R)-dihydro-3-hydroxy-4,
652-67-5	1,4:3,6-dianhydro-D-glucitol	(3S,3aR,6R,6aR)-2,3,3a,5



## 2. Prototyp

- » Konzipiert als Grundlage für Endprodukt
- » Verwendete Technologie vergleichbar mit openMASP
- » Technische Anforderungen Technologie (LfU):
  - › Bekannte Programmiersprache (vorzugsweise Java)
  - › Nur bekannte Frameworks (z.B. Spring)
  - › Relationale Datenbank (vorzugsweise Oracle)
    - › Warum immer Oracle?
- » Anforderungen durch die Projektstruktur
  - › Kombination von STOFF-IDENT, openMASP und DAIOS



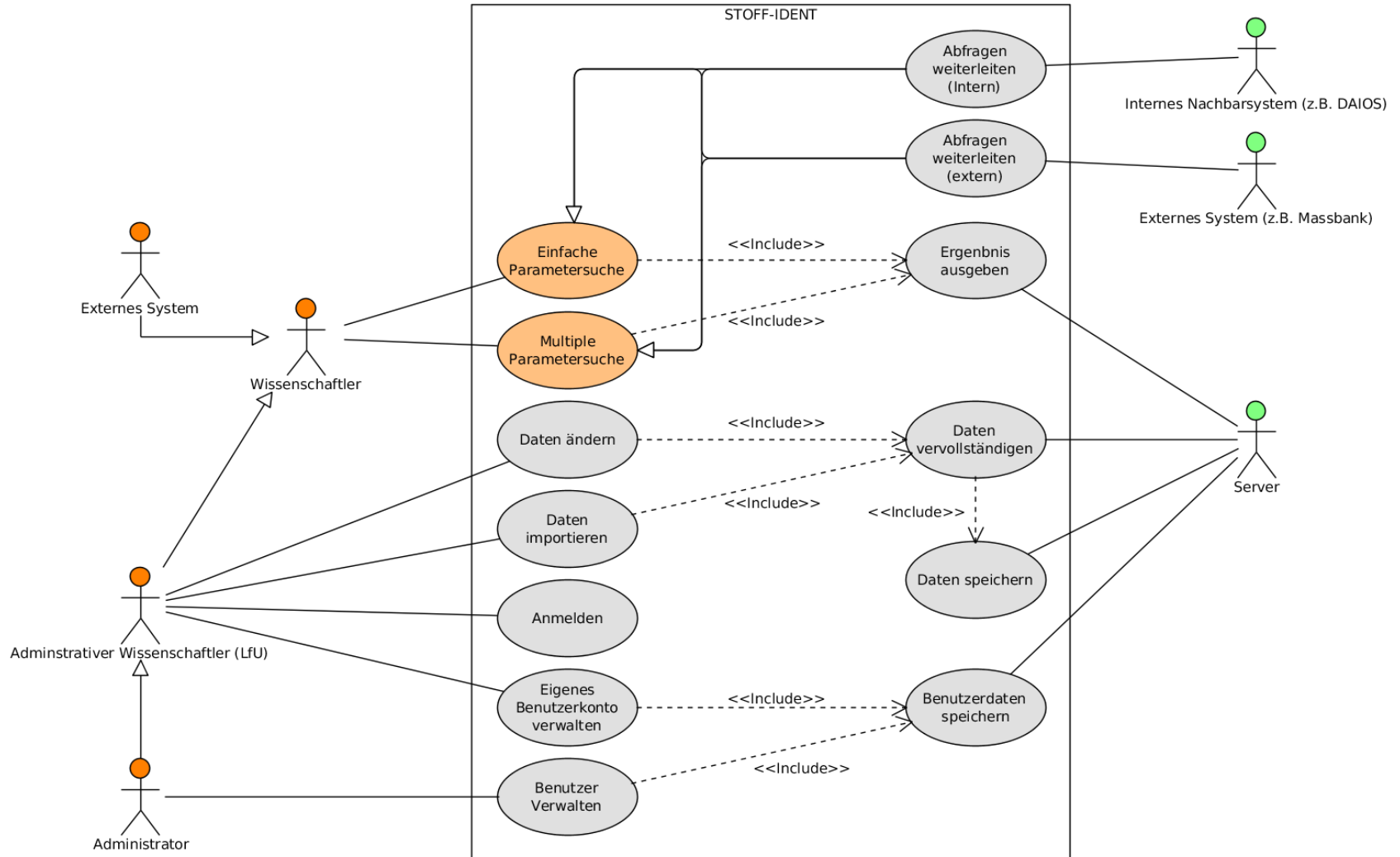
## 2. Prototyp

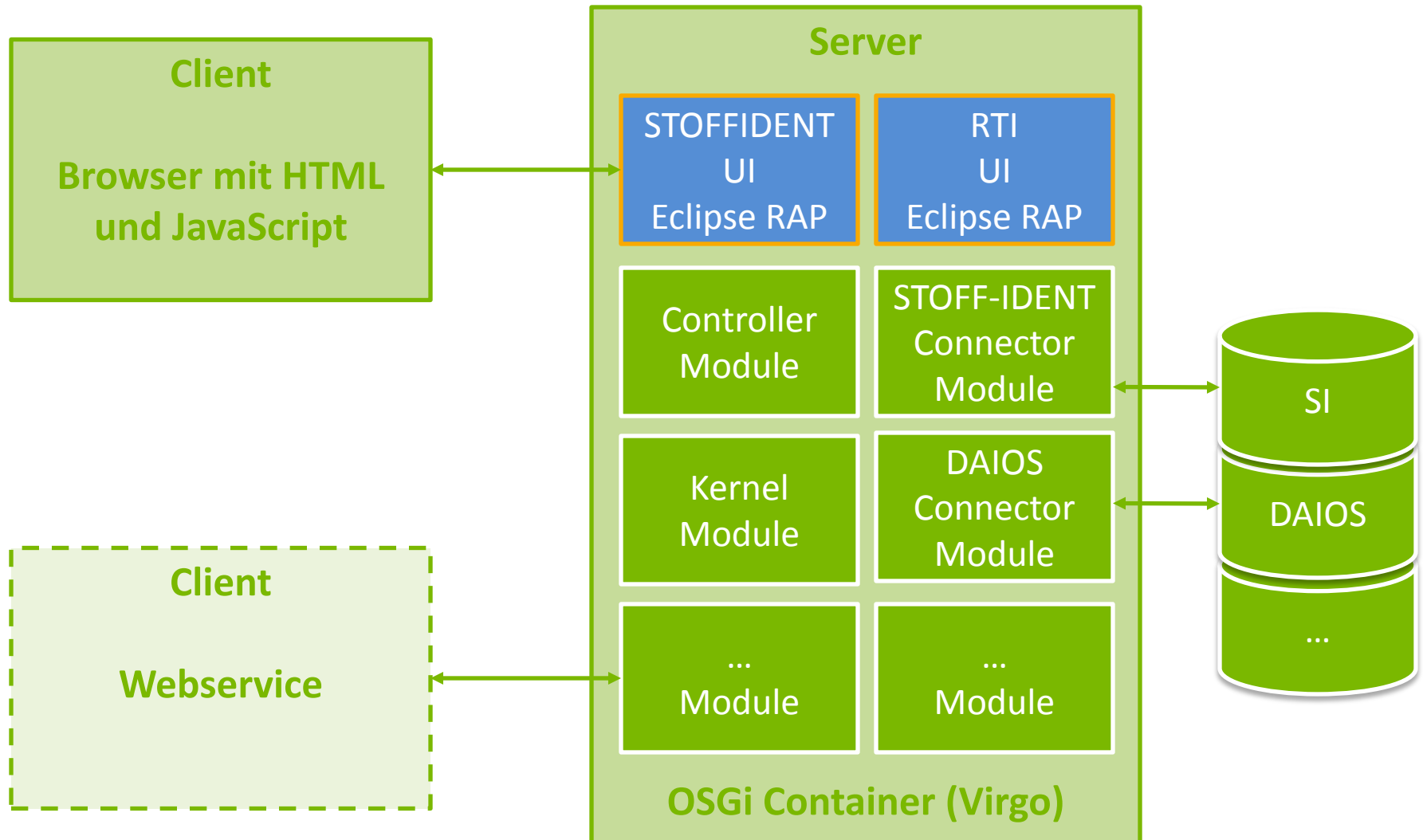
- » Technologien
  - › Java serverseitig
  - › Spring Framework
  - › Diverse Apache-Bibliotheken
  - › Aber: aktuell keine relationale Datenbank
  - › mongoDB (Dokumenten basiert)
  
- » Alle verwendeten Technologien sind frei verfügbar
  - › meist Apache-Lizenz
  - › kann sich in Zukunft noch ändern



# Warum kein SQL?

- » Structured Query Language
  
- » Bei einigen Problemstellungen heute nicht mehr aktuell
  
- » NoSQL
  - › Dokumenten basierte Datenbanken
  
  - › Graph Datenbanken
  
- » Warum?
  - › Kein gezwungenes Schema
  
  - › erste Erfahrungen







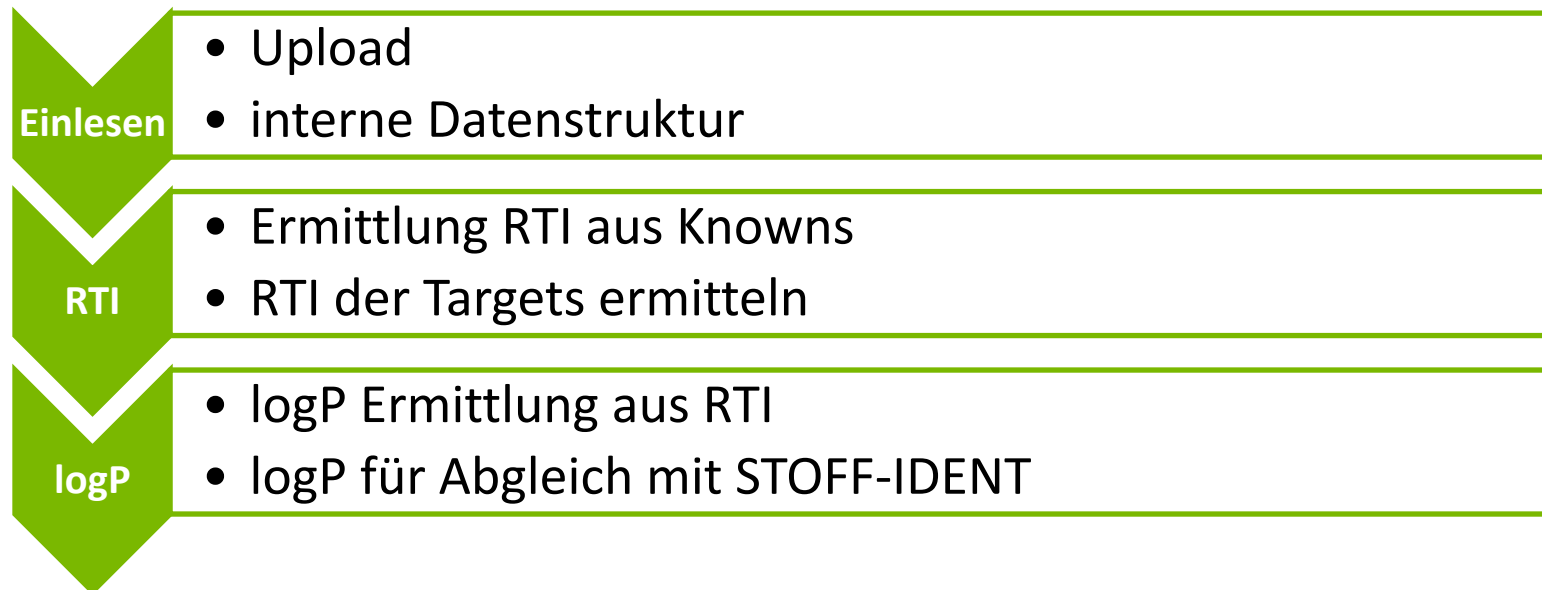


# Datenakquise

- » REACH
  - › Crawler
  - › Selenium + Chrome/Firefox
  - › Problem: häufige Anpassungen notwendig
  
- » chemacalize.org
  - › Rechtliche Fragestellungen
  
- » Interne Berechnungen

# Suspected Target Screening

- » Nutzt aktuell Daten von STOFF-IDENT
- » Externe Daten über einfach strukturierte Excel-Files





# TODO

- » interne Roadmap für 2. Prototyp (ca. August 2013)
  
- » Roadmap 3. Prototyp aufgrund des Feedbacks aus dem Workshop
  - › Entwicklungskapazitäten bis ca. April 2013
  - › Hier vor Ort oder per Mail
  - › Veröffentlichung der Roadmap (Juni/Juli 2013)



# Plattform - Vorschau

## Gesamtsystem in RISK-IDENT



## Plattform

STOFF  
IDENT

DAIOS

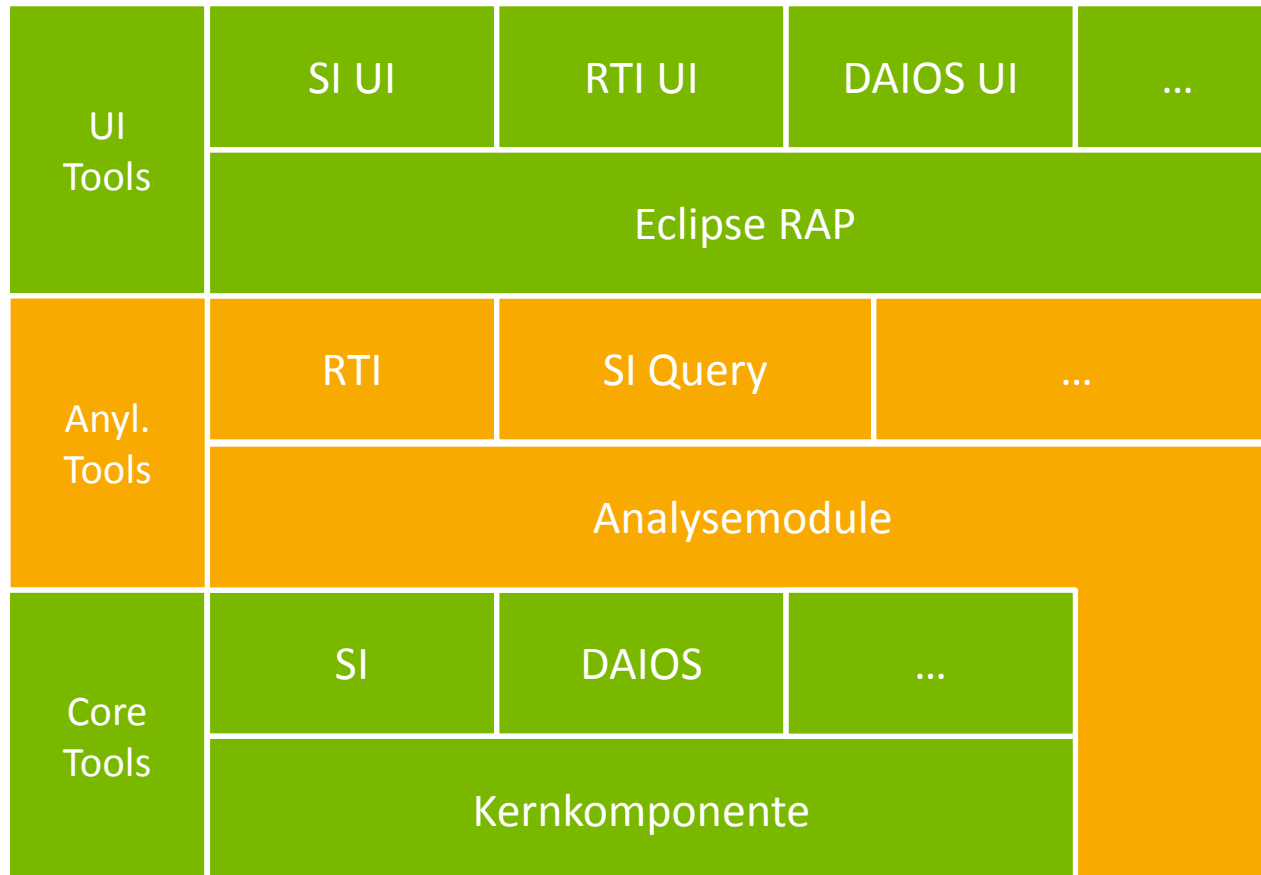
openMASP  
(RTI)

Weitere  
Datenquellen

Weitere  
Auswertungen



# Verbindung über OSGi





**DANKE**