

Maltcms

ein Modulares Applikations Toolkit für
Chromatographie-Massenspektrometrie

Nils Hoffmann

AG Genominformatik, Technische Fakultät
Graduate School in Bioinformatics and Genome Research, CeBiTec

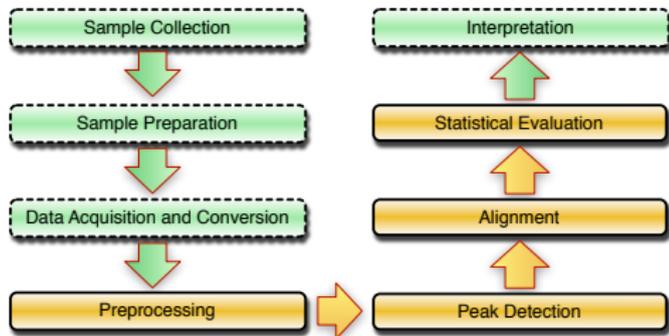
18. April, 2013

Übersicht

- 1 Einführung und Hintergrund
- 2 Maltcms
- 3 Anwendungsbereiche
- 4 Maltcms User Interface

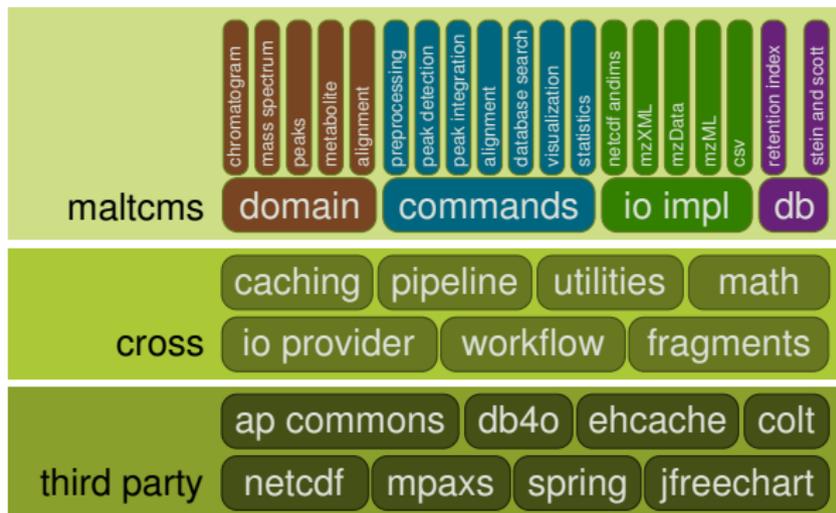
Zielsetzung und Konzept

- Entwicklungsbeginn 2007 mit DTW Retentionszeit-Alignment¹
- Unterstützt Chromatographie mit verschiedenen Detektoren
- Fokus auf Prozessierung von Metabolomikdaten



¹Hoffmann and Stoye, 2009, Bioinformatics

Übersicht



- plattformunabhängig
- modular und erweiterbar
- Prozessierung als Pipeline"
- basiert auf freien Bibliotheken
- versch. Abstraktionsebenen
- L-GPL v3 / EPL OS Lizenz

Dateiformat Unterstützung

- netCDF (ANDI-MS/ANDI-CHROM, lokal und http)
- mzXML via JRAP (lokal)
- mzData (lokal)
- mzML via jmzML (lokal)
- csv, Agilent Peak Reports (lokal)

Transparente Parallelisierung - MPAXS

- Prozessierung skalierbar vom Laptop bis zum Rechnercluster
- Ausführung
 - ▶ im gleichen Prozessraum
 - ▶ auf der gleichen Maschine (bei Mehrkernprozessoren)
 - ▶ verteilt im Cluster / Grid / Cloud (via OGE/DRMAA)
- Einfache Integration in Maltcms

Prozessierungs Workflow

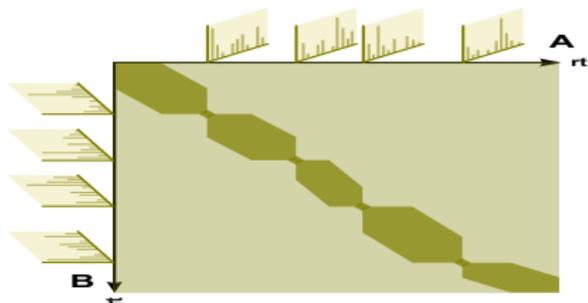
Variablenhierarchie

- Prozessierungseinheiten (FileFragment) können beliebig viele andere Prozessierungseinheiten als *Eltern* referenzieren
- Variablen der Eltern sind transparent verfügbar
- Variablen der Eltern maskierbar (shadowing)

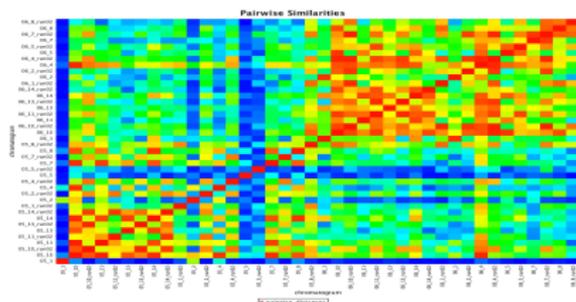
Pipeline Aufbau

- Linear, daher leicht zu konfigurieren
- Verzweigung für komplexe Workflows möglich durch Referenzierung verschiedener Eltern
- Pipeline Elemente werden durch den Spring IoC container aus xml Beschreibungen erzeugt und konfiguriert

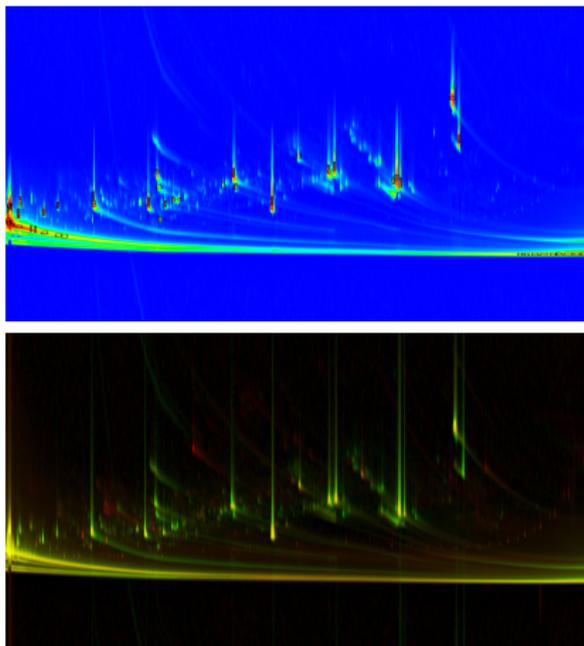
Anwendungsbereich GC-MS



- TIC-basiertes Peak-Finding und -Integration
- Signalglättung
- Peak- und Profilbasiertes RT-Alignment²
- Visualisierung alignierter Profile
- RI Berechnung
- Putative Identifizierung gegen MS-Datenbanken (ohne mit RI), AMDIS/MSP Format

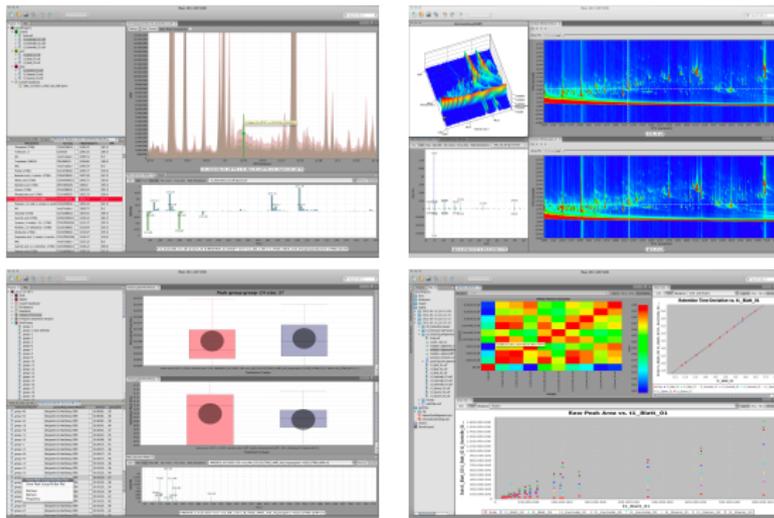


Anwendungsbereich GCxGC-MS



- 2D-TIC-basiertes Peak-Finding und -Integration basierend auf MS-Ähnlichkeiten
- Signalglättung und Rauschreduktion
- Peak-basiertes RT-Alignment³
- Warping alignierter Chromatograms
- Putative Identifizierung gegen MS-Datenbanken (ohne mit RI), AMDIS/MSP Format

MAUI - Maltcms User Interface



- basiert auf NetBeans RCP Komponente-narchitektur
- ServiceProvider Architektur, modular
- 29+ modules
- Visualisierung (JFreeChart, Jzy3D)
- Statistische Analyse alignierter Peakgruppen (Anova, PCA via GNU R/Rserve)

Danksagung

Betreuer:

- Prof. Dr. Jens Stoye (AG Genominformatik, Bielefeld)
- Prof. Dr. Karsten Niehaus (AG Proteomik and Metabolomik, Bielefeld)

Partner:

- Marco Luthardt, Michael Krappmann (HSWT, Freising, openMASP)
- Dietrich Meier (Thünen-Institut, Hamburg, GC-Pyrolyse)
- Matthias Keck (HCIR, Braunschweig, GCxGC-MS)
- Anja Döbbe (Algen Biotechnologie, Bielefeld, GCxGC-MS)
- Steffen Neumann (IPB Halle, LC-MS, mzML für Metabolomik)
- Theresa Strätner (HDZ NRW Bad Oeynhausen, GC-TOF/Quad)
- Heiko Neuweiger (Bruker Daltonics, Bremen, GC-Quad)

Maltcms Entwicklung

Mitentwickler an Maltcms und Maui:

- Sören Müller, SR-Alignment, (AG Genominformatik, Bielefeld)
- Rolf Hilker, MS-Suche, (Computational Genomics, Bielefeld)
- Mathias Wilhelm, GCxGC-MS, Maui (AG Proteomik und Bioanalytik, TU München)
- Kai-Bernd Stadermann, Mpaxs, (Computational Genomics, Bielefeld)
- Tobias Placht, OSGI-Integration, (HSWT, Freising)

Maltcms ist frei und im Quelltext verfügbar unter
<http://maltcms.sf.net>

Vielen Dank für Ihre Aufmerksamkeit.