

Was bisher geschah...



Der erste Kontakt...





Die ersten Schritte...

- Analytische Gruppe PD Dr. Thomas Letzel, TUM
- Erfassen der Problemstellung
- Untypische analytische Daten keine Software zum Auswerten

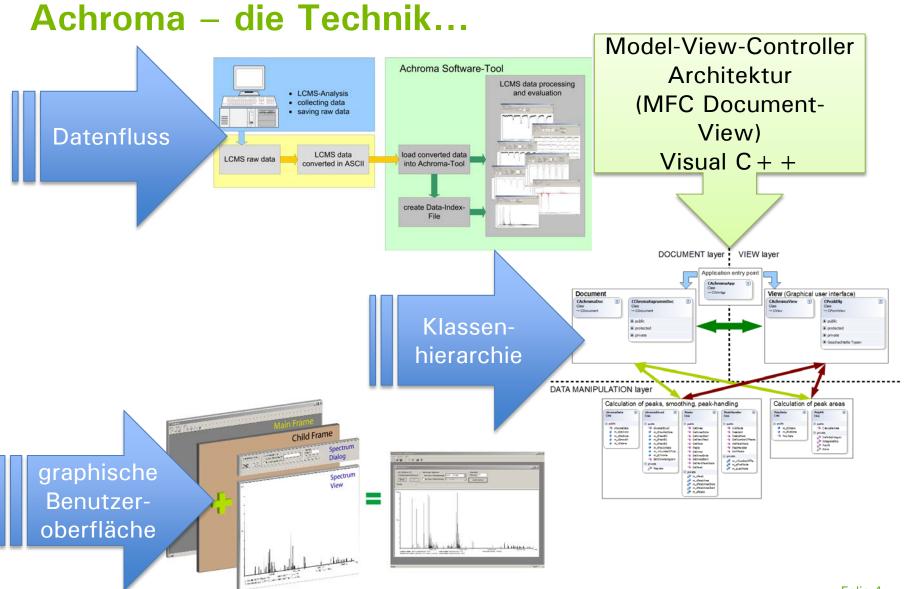
2008

- 5 Praxissemester später...
- Achroma mit mehreren Modulen zur Datenauswertung

2004

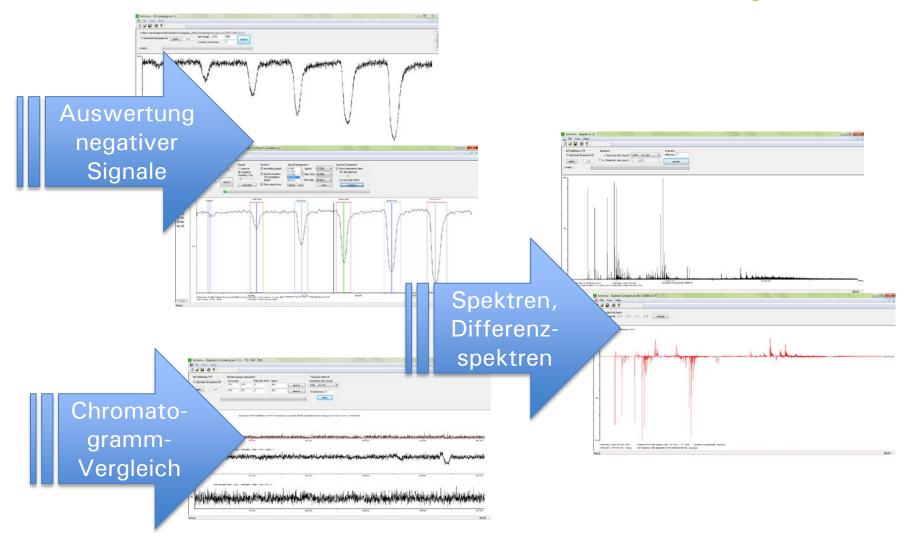
- ▼ kontinuierlicher LC-MS Enzym-Assay negative Signale
- ▼ Finden von Inhibitoren in unbekannten Proben → negative Signale, "Differenzspektrum"
- Enzym-Inhibitor Komplex Bildung Vergleich von Chromatogrammen
- Mehrere Gigabyte große Datensätze
- V ...







Achroma – eine erste "modulare" Lösung...

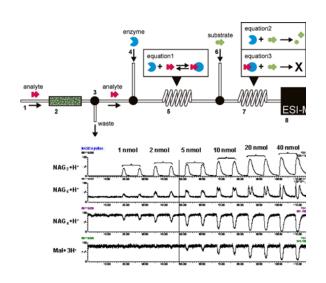


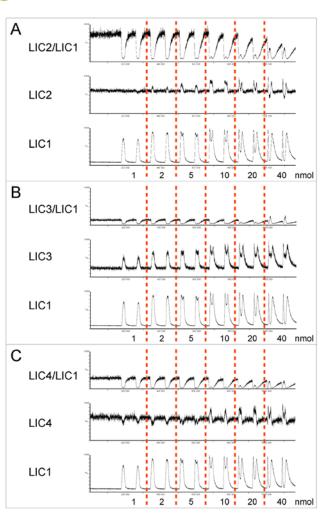


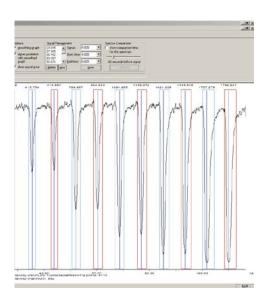


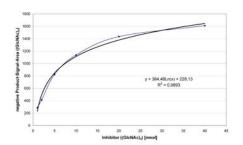
Achroma – einige Beispiele...

Komplexbildung (Chromatogramm-Vergleich)





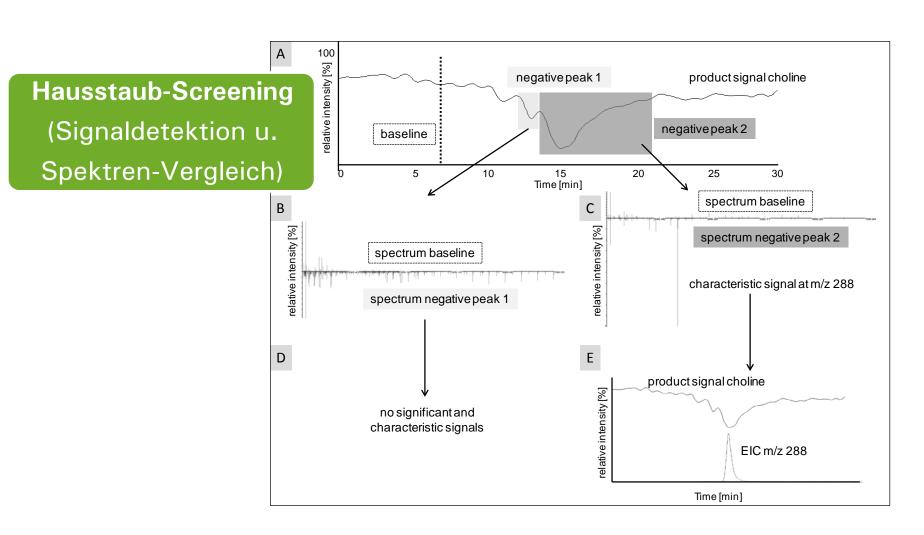








Achroma – einige Beispiele...

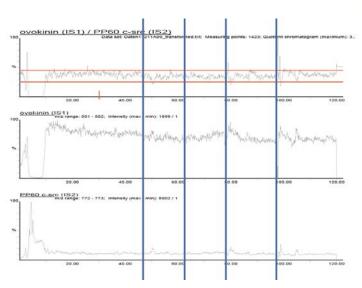


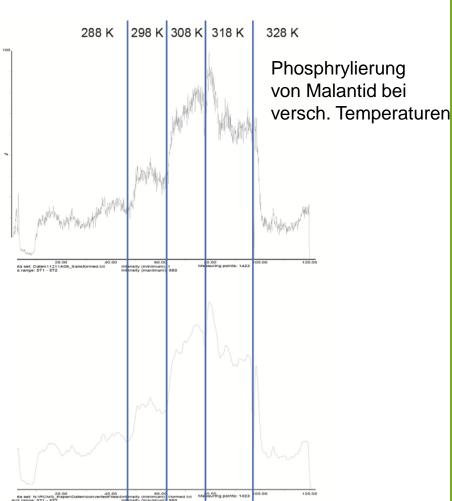




Achroma – einige Beispiele...

Enzymatische Reaktionen
(Signaldetektion u.
ChromatogrammVergleich)







Ein schwieriger Kunde...

- Analytische Gruppe PD Dr. Thomas Letzel, TUM
- Erfassen der Problemstellung
- Untypische analytische Daten keine Software zum Auswerten

2004

2008

- 5 Praxissemester später...
- Achroma mit mehreren Modulen zur Datenauswertung

- Oligosaccharid Degradation mittels Exochitosanase
- NEUES PROBLEM Enzym Kinetik
- Achroma ausbauen oder Schritt zu neuer Technologie?

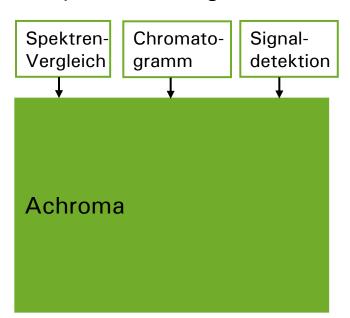
03/2009

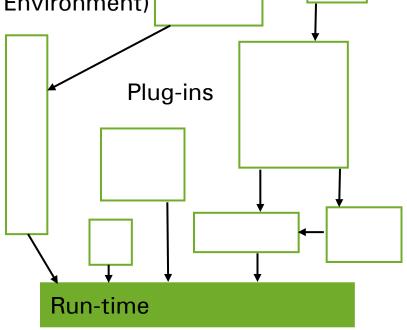
Aufgabe im Projektstudium mit Herrn PD Dr. Letzel als "schwierigen Kunden"



Eine neue Programmiersprache und eine neue Technologie...

- Umstieg von Visual C + + auf Java
- ▼ Eclipse Rich Client Platform (RCP) Technologie
- ▼ Open Source Software Projekt
- V Keine Module mehr sondern Plug-ins
- ▼ Eclipse IDE (Integrated Development Environment)

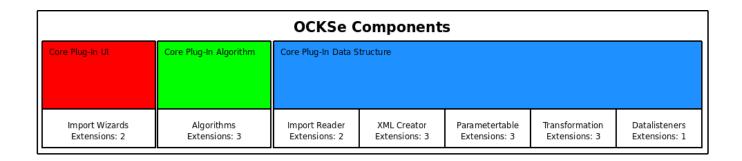


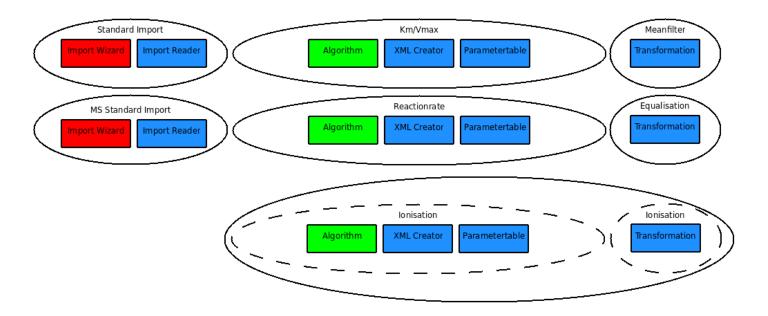


Plug-in basierte Applikation



OCKSe (Oligosaccharid Kinetik Software) - Plugins

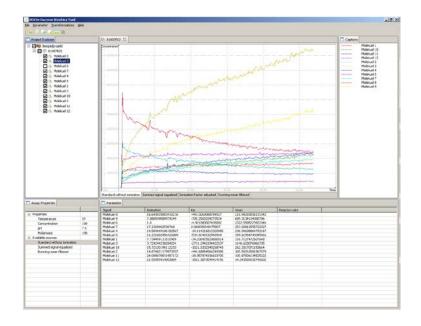


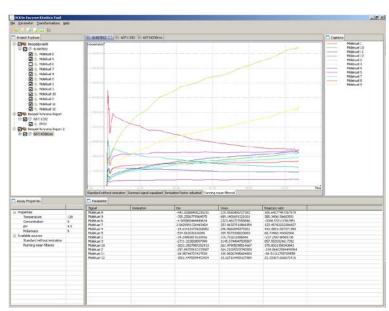




OCKSe - Funktionalität

- ▼ Berechnung von Km und Vmax
- ▼ Plugin Konzept = jederzeit erweiterbar
- ▼ Standardisierte Plattformtechnologie (OSGi) mit Eclipse Equinox
- ▼ Plattform unabhängig (Windows, Linux, ...)
- V XML-basiertes internes Datenformat
- ▼ Open Source
- ▼ Rich Client Platform Eclipse Technologie





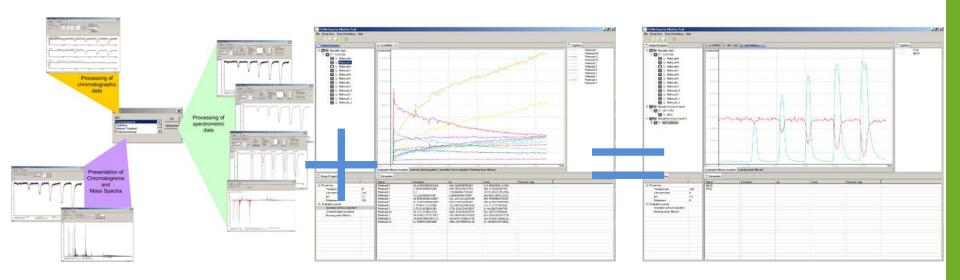


Eine Idee nimmt Form an...





Achroma + OCKSe = openMASP





Warum openMASP umsetzen?

- ∀ Viele neue Anwendungen/Auswertungen
- ▼ Trägheit der Hersteller in der Weiterentwicklung bestehender Software (Beispiel: Agilent ChemStation)
- Viele verschiedene Analytik-Software Tools
 - ▼ Freie
 - V Kommerzielle
 - ▼ Shareware
- Verschiede offene Daten Standards, z.B. mzml, mzData, netCDF, ...
- ∀ Viele Hersteller-spezifische Formate:
 - Thermo Scientific Xcalibur .RAW files
 - ▼ Agilent .wiff files, .d files
 - Micromass .DAT files (inside .Raw folders)
 - ▼ Bruker .acqu files
 - ▼ Bruker ASCII .ascii files
 - ▼ PNNL ion-mobility spectrometry (IMS) .imf files
 - Waters Raw-files
 - V ...



Unsere Vision...

definierte und standardisierte offene Schnittstellen

Datenformate:

- V offen
- V standardisiert
- Kooperation mit den Herstellern KEINE
 - Konkurrenz
- V Datenbanken
- V ...

Open Source Plattform:

- V modular (Plug-in Technologie)
- ∨ unabhängig
- ∇ einfach zu handhaben
- V frei
- ∨ standardisierte Datenformate
- V Gemeinschaft (von
 - Plattformen, Industrie und Anwendern)

Software/ Tools:

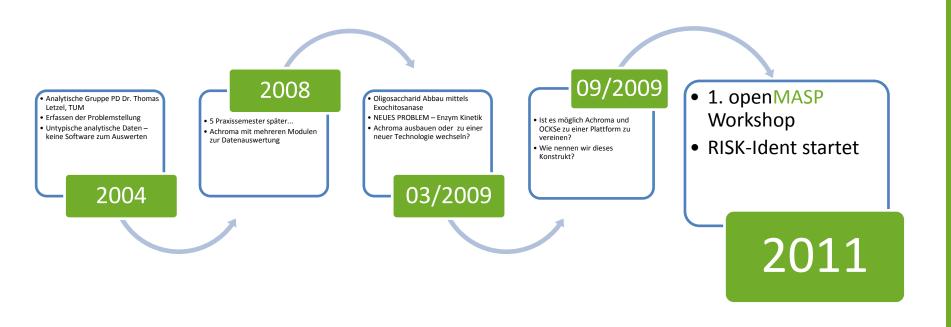
- V offen
- **V** standardisiert
- V kommerziell
- V Datenbanken
- V eigene
 - Algorithmen
- V andere
 - Algorithmen
- /

Anwender/Industrie:

- v unabhängig von analytischen Geräten
- V Kooperation anstatt Wettbewerb

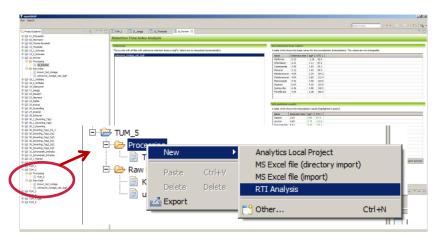


Jetzt gehts los...





RISK-Ident Plug-in: RTI – Analyse mit openMASP



Normalization base values

A table which shows the base values for the normalization

Name	Retention time	logP 1	RTI 1
Metformin	0.33	-1.36	50.0
Chloridazon	2.21	1.11	87.2
Carbetamide	2.99	1.65	95.3
Monuron	3.12	1.93	99.5
Metobromuron	4.06	2.24	104.2
Chlorbromuron	4.84	2.85	113.4
Metconazole	5.52	3.59	124.5
Diazinon	6.04	4.19	133.6
Quinoxyfen	6.36	4.98	145.5
Fenofibrate	7.05	5.28	150.0

Tabelle der Referenz-Substanzen mit Retentionszeit, logP Wert und normalisiertem RTI

Interpolation results

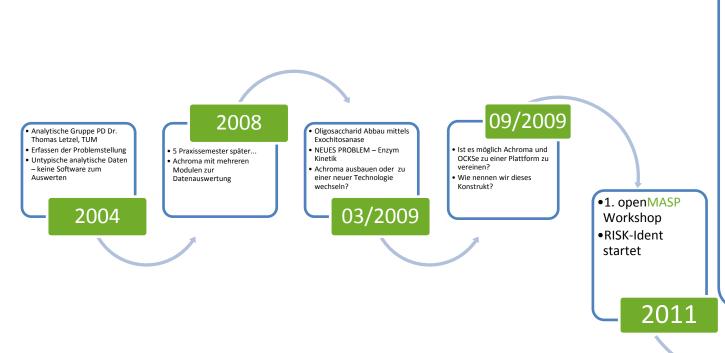
A table which shows the interpolation results (highligh

Name	Retention time	logP 1	RTI 1
Dapson	2.02	0.86	83.4
Linuron	4.69	2.73	111.6
Picoxystrobin	6.01	4.16	133.1

Tabelle der unbekannten Substanzen mit kalkuliertem RTI und logP Wert



Im Hier und Jetzt...

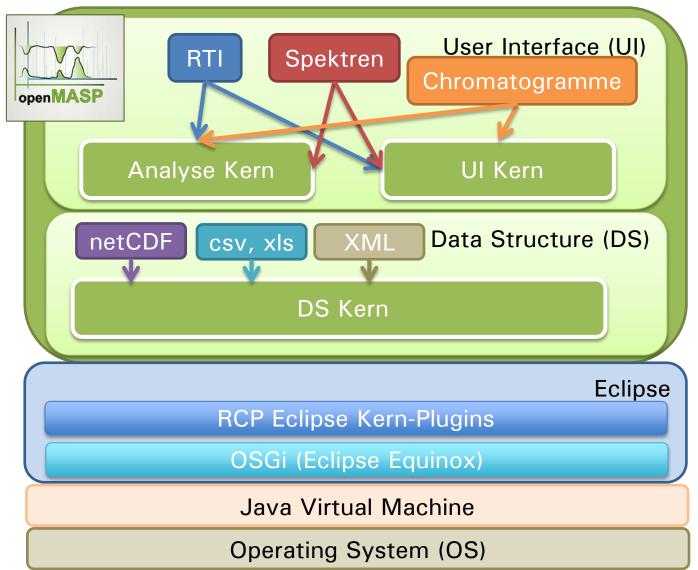


2012 bis dato

- Komplett neue interne Datenstruktur (Maltcms)
- Komplett überarbeitete Kern-Komponenten
- RAP App
- Science IWG
- Client Server Architektur

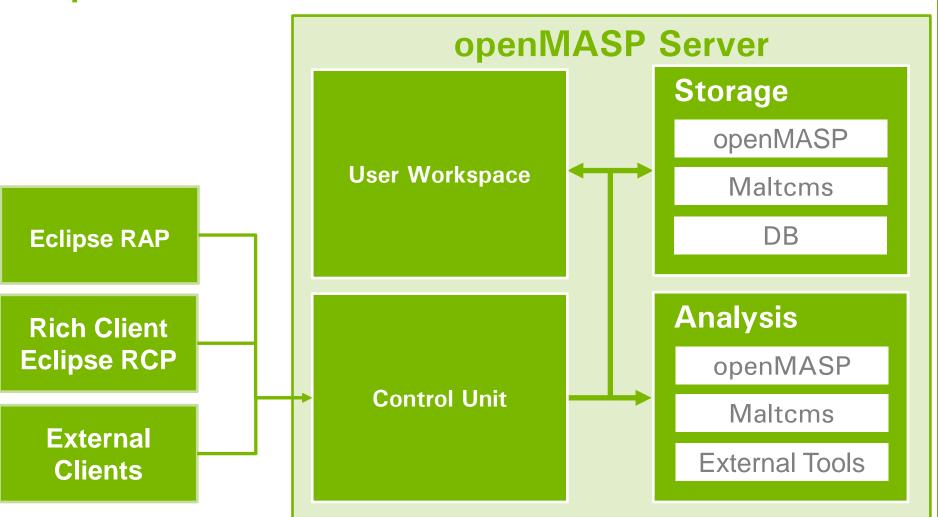


openMASP - Architektur "alt"





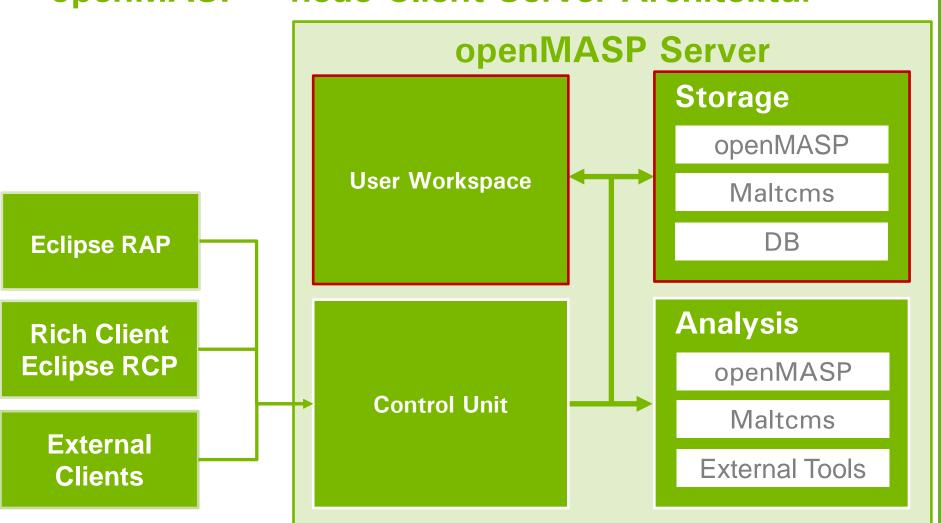
openMASP – neue Client-Server Architektur







openMASP – neue Client-Server Architektur

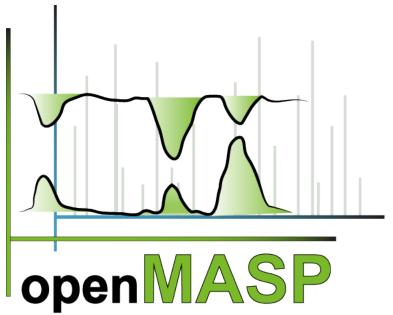




... und zu guter Letzt...

- V Maltcms als Datenstruktur
 - ∨ Vortrag Nils Hoffmann
- **V** IWG = Industry Working Group "Science"
 - ▼ Vortrag Ralph Müller
 - ▼ Ziel: Einrichtung einer Arbeitsgruppe, die dazu beiträgt die vielen Open Source Lösungen in Zusammenarbeit mit der Industrie näher an ein "Ganzes" zu bringen
 - - ▼ 16 Open Source RCP Projekte, 4 Proprietäre RCP Projekte, 9
 Partner und 2 andere Projekte
- V Stoffident RTI RAP App = Webfähige openMASP Anwendung, die über einen gewöhnlichen Browser aufrufbar.
 - ▼ Vortrag Marco Luthardt
- ▼ Server und Umsetzung weiterer Plugins/Clients geplant für 2013/2014, z.B. Achroma Module





Vielen Dank für die Aufmerksamkeit