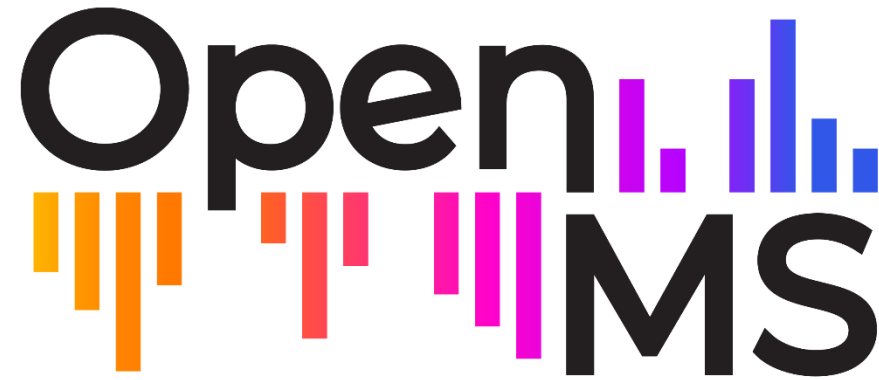


# Projektmanagment im Softwarebereich

SoSe2025



Faster Bioinformatics with C++

Chris Bielow

Proteomics

Genomics

Transcriptomics

“OMICS”

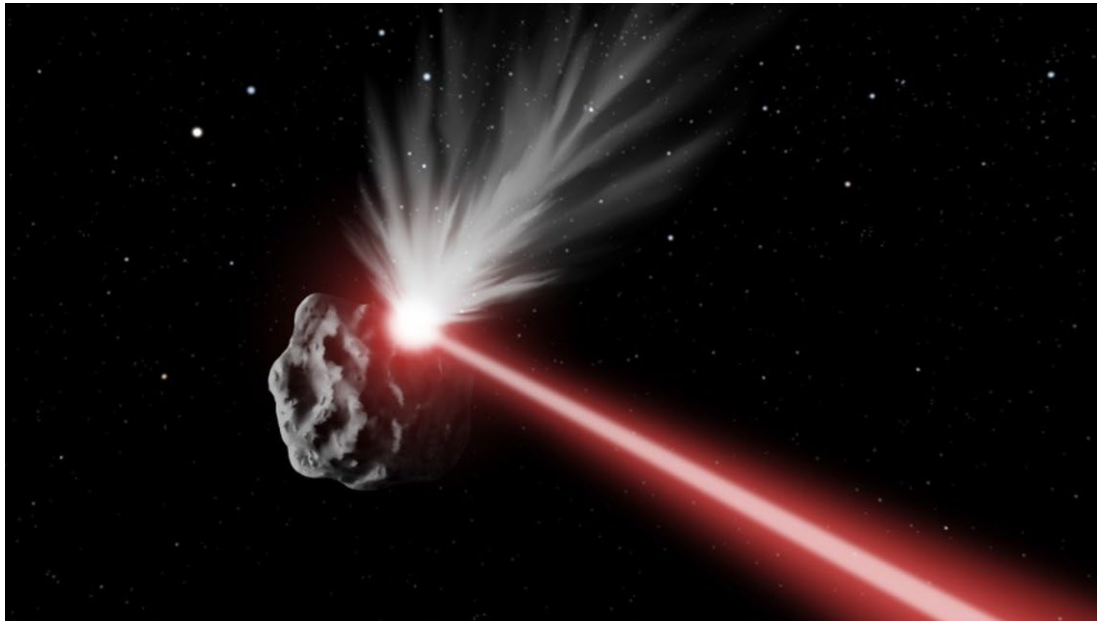
Connectomics

Foodomics

Metabolomics

OMICS – Ganzheitliche Charakterisierung und Quantifizierung der Moleküle einer Zelle/Probe/Organismus

# Proteomics



“Shooting at stuff  
with lasers in space”!

Method of choice:

Liquid Chromatography – (Ion Mobility) – Mass Spectrometry

LC

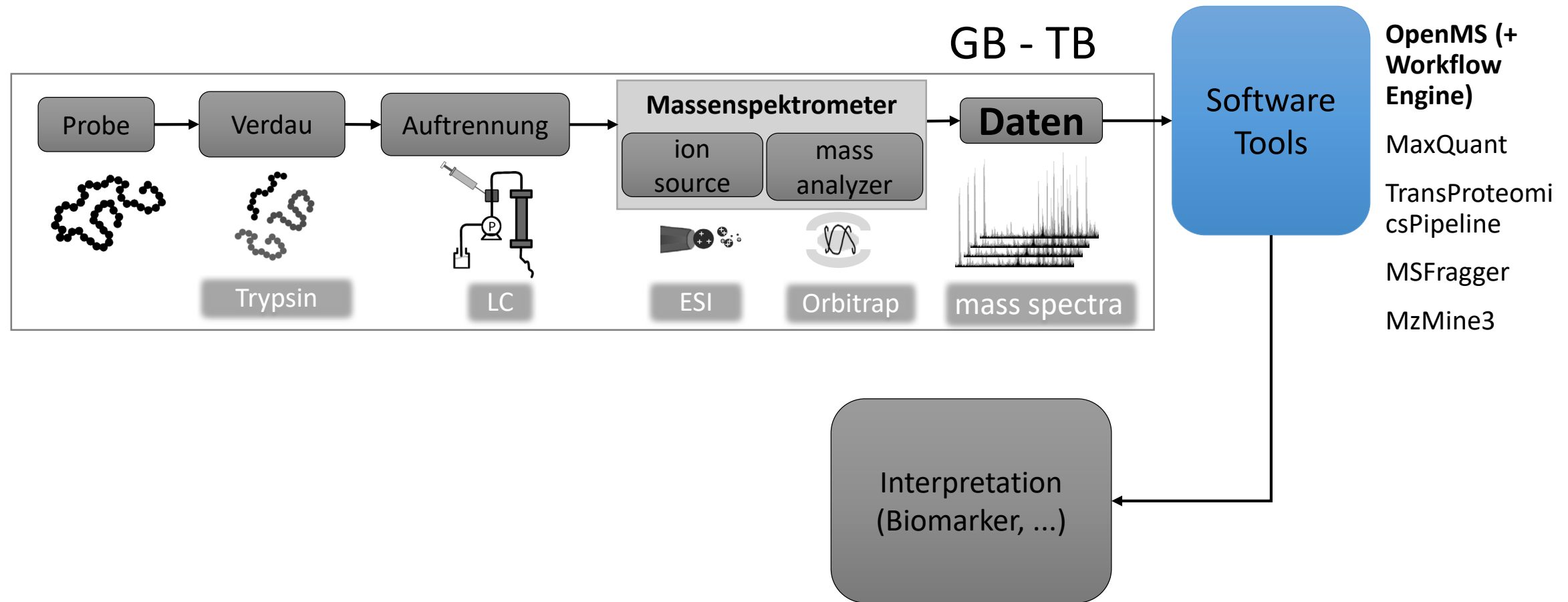
– ( IM )

–

MS

# Proteomics-Pipeline

Liquid Chromatography (LC) + Massenspektrometrie (MS)



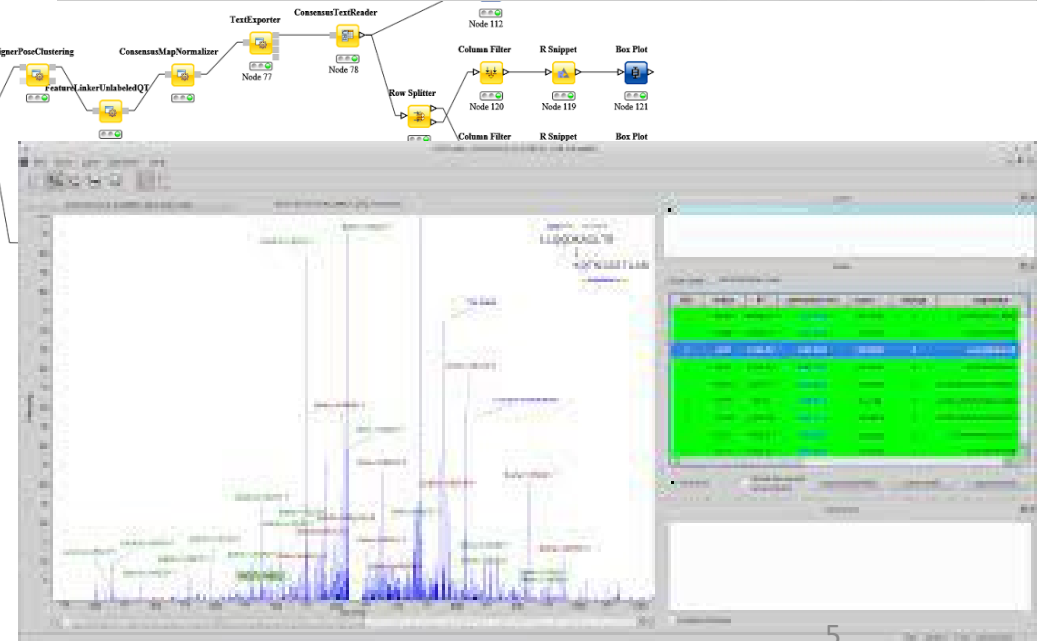
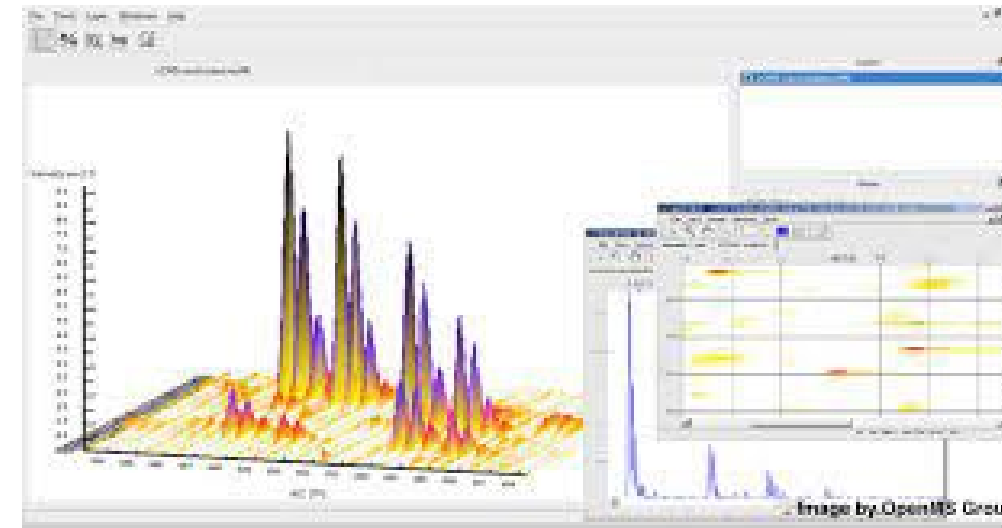
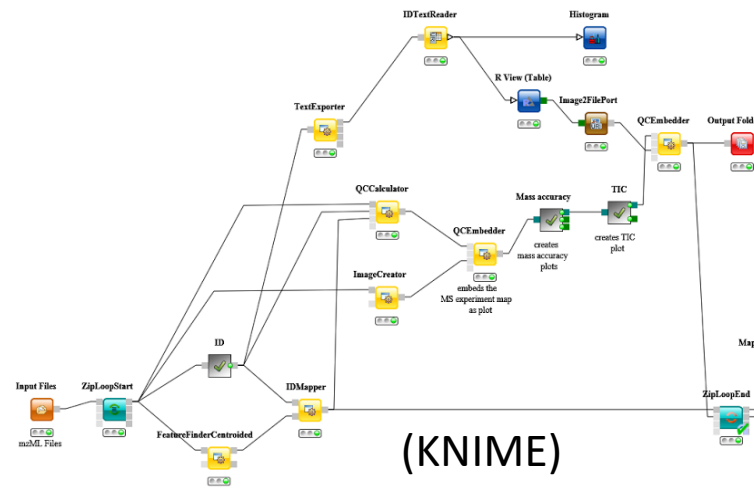
# OpenMS

- C++ Bibliothek für Analyse von LC-MS Daten in der Proteomik

- 804.000 Zeilen Code

- Tools/Executables

- 150 Tools
- „Lego“



# Inhalt des Praktikums

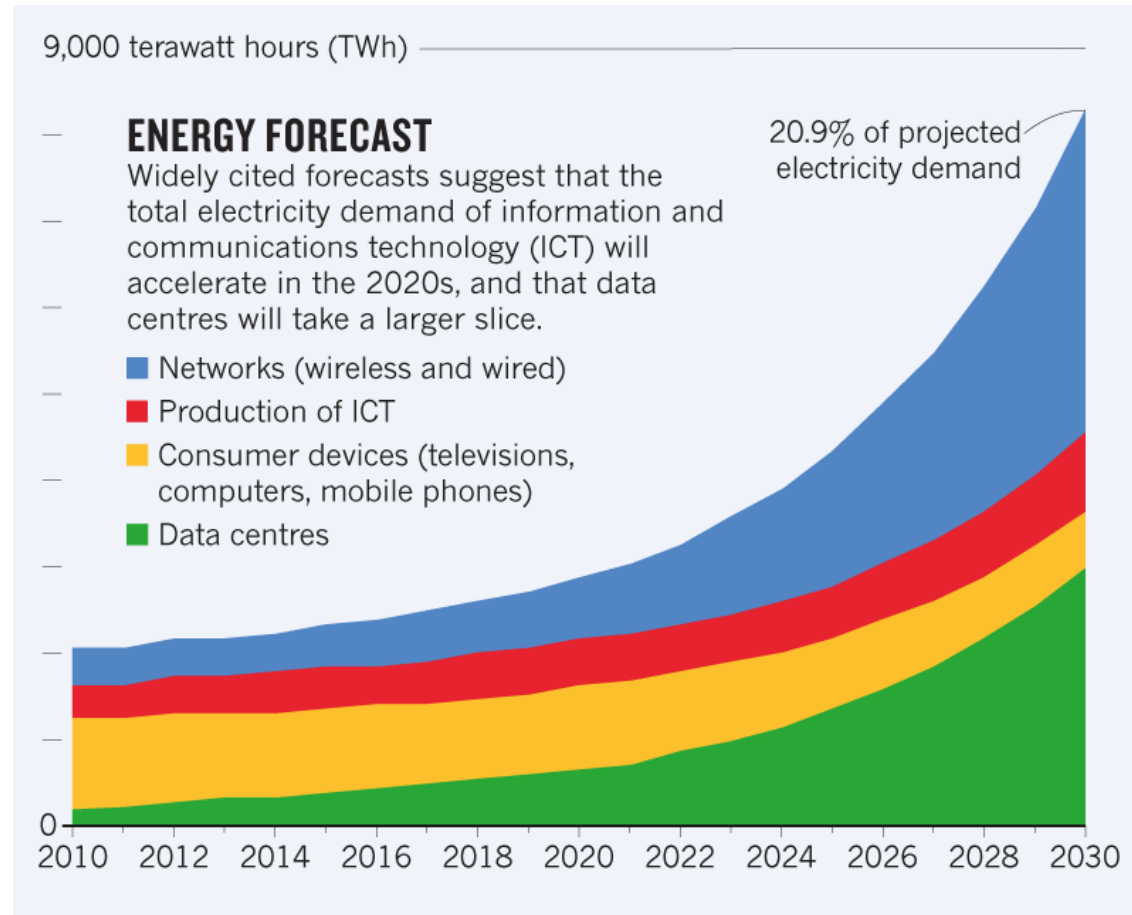
- OpenMS: Arbeit in bestehender open-source Bibliothek (BSD-Lizenz)
  - Erstellung von Pull-Request ( [GitHub](#) ) und Code Reviews
  - Aufnahme der neuen Funktionalität in OpenMS
- “Echte Daten, echte Probleme”
- Algorithmen in der Proteomik
  - Zum Beispiel:
    - Implementierung neuer Algorithmen aus der Literatur (4D Feature Finder für IonMobility)
    - Optimierung der Programmlaufzeit
      - Do/Don't Idioms in C++ (Wahl von Algorithmen und Datentypen, Datenstruktur, Allokatoren, Dispatching)
      - C++ Code Profiling: Intel V-Tune, perf, ...
      - CPU architecture: cache und SIMD/AVX
      - Benchmark-Umgebungen (Google Benchmark)
    - Tools zur Qualitätskontrolle von MS Daten (Schnittstelle mit R)
  - Anwendung auf Tools in der Proteomik-Pipeline von OpenMS

# Warum Performance?

- Gut für den Akku
  - Laptops, Smartphones, ...

# Warum Performance?

- Gut für den Akku
  - Laptops, Smartphones, ...
- Gut für unser Klima
  - ...



**How to stop data centres from gobbling up the world's electricity**, Nature **561**, 163-166 (2018)  
doi: 10.1038/d41586-018-06610-y



# Warum Performance?

- Gut für den Akku
  - Laptops, Smartphones, ...
- Gut für unser Klima
  - ...
- Gut für's Image
  - Quantum Supremacy
- Gut für den Benutzer
  - High-Performance-Computing

nature > articles > article

nature

Google

IBM

IBM Research Blog

We argue that an idea  
the same task can be performed by a  
classical system in **2.5**  
far greater fidelity.

660k Accesses

cy using a  
cting



“a state-require a perform the equivalent task.”

Figure 2: The experimental setup – a Commodore 64 is connected to a monitor through a composite video to HDMI converter, with the code cartridge inserted into the expansion port.

# Zeitplan - Seminar

## Mitte/Ende Februar

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

(C++ Blockkurs 24.2. -28.2.2025 in T9/049)

## Projekteinführungswoche

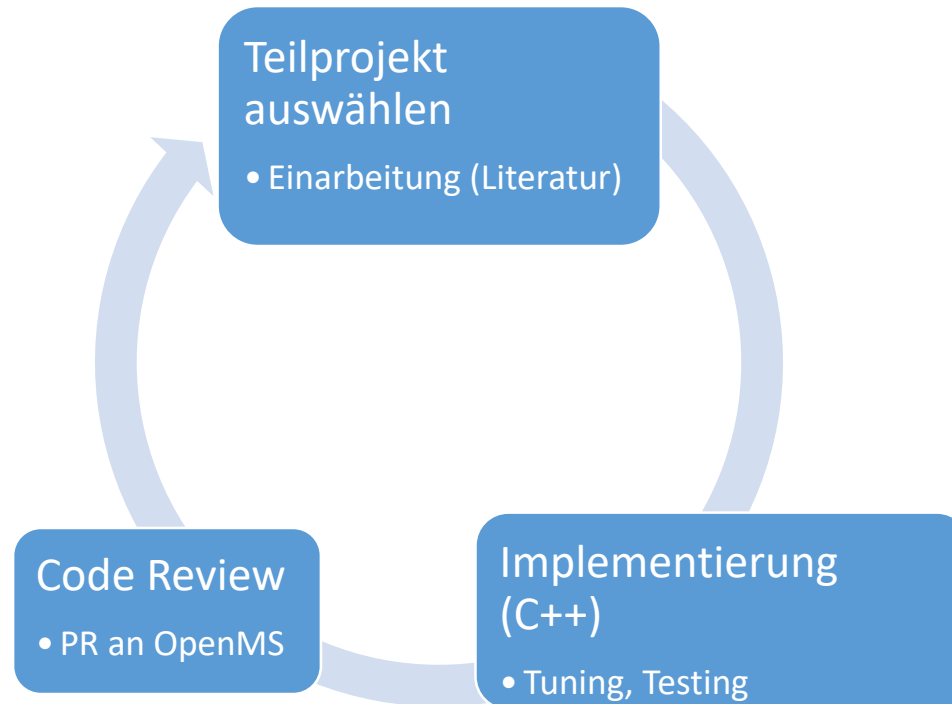
Mo, 24.03. - Fr, 28.03.

- Vormittags: 10-12 "Vorlesung"
- Nachmittags: kleine Übungen

- OpenMS installation
- Einführung in Flüssigkeitschromatographie & Massenspektrometrie (LC-MS)
- Refresher: C++ && Build-Systeme (Cmake, make, ninja)
- Tutorial OpenMS (C++ library und Tools)
- Workflow engines: TOPPAS, KNIME, ...
- Git für Fortgeschrittene
- Einführung in Themen: z.B. 'perf' & Co; flame graphs, ...

# Zeitplan – praktischer Teil

Mo, 31.03. - Fr, 16.05.



## **Besprechung**

Freitags: 10-12 Uhr,  
Weiteres Vorgehen, Anpassung  
des Zeitplans, Problemlösung

und immer wenn Bedarf  
besteht

Fr, 23.05. Vorstellung der Ergebnisse (Zusammenfassung, Plots, Tabellen, ...)

# Zusammenfassung

**Vorraussetzung:** Interesse an objektorientierter Programmierung (Java, C++, ...)

- Spass an C++
- ALDaBi Praktikum oder C++-Kurs (3. Woche findet noch statt)

## Praktische Erfahrungen zum Mitnehmen

- C++ Skills
- Kompetenz in Proteomik/Massenspektrometrie
- Softwareentwicklung in großem Projekt
  - Continuous Integration
  - Pull Requests mit Git
- Arbeit im Team

**Schwierigkeitsgrad (Acht Sterne verteilt auf drei Bereiche):**

A Programmieren: \*\*\*\*\*

B Biologie/Chemie: \*

C Projektmanagement: \*\*

# Fragen?

- mehr Fragen
  - [chris.bielow@fu-berlin.de](mailto:chris.bielow@fu-berlin.de)

Ausbau zu B.Sc. Arbeit  
prinzipiell möglich

Mehr Informationen

- OpenMS
  - [www.OpenMS.de](http://www.OpenMS.de)
- PMSB OpenMS
  - [https://www.bsc.fu-berlin.de/TeachingAndWorkshops/SoSe25/Software Praktikum OpenMS/index.html](https://www.bsc.fu-berlin.de/TeachingAndWorkshops/SoSe25/Software_Praktikum_OpenMS/index.html)

BTW:

Google Summer  
of Code

