Kemistin data-analysaattori
Projektisuunnitelma

Taisto Gerdt
Timo Kääriäinen
Mika Miettinen
Pasi Rastas
Jari Tuominiemi

Ohjelmistotuotantoprojekti
Helsingin yliopisto
Tietojenkäsittelytieteen laitos
10. syyskuuta 2002

Sisältö

1 Tehtävän ohjelmiston yleiskuvaus 1

1.1 Aihepiiri 1
1.2 Toteutettava ohjelmisto 1
1.3 Asiakkaat 1

2 Työryhmä 2

2.1 Projektiryhmän työnjako 2

3 Toteutusaikataulu 3

3.1 Prosessimalli 3
3.2 Aikataulu 3

4 Koodiriviarvio 3

5 Riskit ja niihin varautuminen 4

5.1 Huomioonotettavat riskit 4
5.2 Riskien kuvaus 4
5.2.1 Asiakas tavoittamattomissa 4
5.2.2 Ryhmän jättäminen 5
5.2.3 Sairastuminen 6
5.2.4 Laitteisto-ongelmat 6
5.2.5 Epätasainen työnjako 6
5.2.6 Ohjelmointivaikeudet 7
5.2.7 Laskentamenetelmään liittyvät vaikeudet 7
5.2.8 Laskentamenetelmä muuttuu 7

Lähteet **8**

1 Tehtävän ohjelmiston yleiskuvaus

1.1 Aihepiiri

Mikrobisolujen kasvua voidaan analysoida muun muassa mittaamalla solun tuottamia kemiallisia yhdisteitä. Erityisen tehokas menetelmä on niinkutsuttu isotooppijäljitys, jossa solulle syötetään hiili-13 -isotooppia sisältävää ravinnetta ja mitataan solun tuottamien yhdisteiden isotopomeerijakaumia, eli isotooppien jakaumia yhdisteen hiiliketjussa. Näiden isotopomeerijakaumien määrittämiseksi käytetään niinkutsuttua tandem-massaspektrometria, jossa voidaan mitata sekä koko molekyylin tuottama spektri että molekyylin palasten spektrit. Yhdistämällä eri spektrien tiedot isotopomeerijakaumasta saadaan tarkempi arvio kuin käyttämällä yhtä spektriä.

1.2 Toteutettava ohjelmisto

Ryhmä toteuttaa ohjelmiston molekyylin positionaalisten isotopomeerien jakauman laskemiseksi massaspektrometrin tuottamasta datasta. Tähän käytettävä laskentamenetelmä [Ran02] on kehitetty vasta aivan äskettäin, joten työ on luonteeltaan hyvin kokeellinen. Itse ohjelmiston lisäksi ryhmä toteuttaa erillisen fragmenttitietokannan, joka sisältää tiedot siitä, millaisia fragmentteja kustakin molekyylista voi masssaspektrometrissä syntyä.

Kehitystyön pohjana ryhmä käyttää aiemmin laitoksella kehitettyä Matlab-pohjaista PIDC-ohjelmistoa.

1.3 Asiakkaat

Projektin asiakkaina ovat Raimo Ketola VTT:ltä, sekä Ari Rantanen ja Juho Rousu tietojenkäsittelytieteen laitokselta. Projektin asiakkaat ja heidän yhteystietonsa käyvät ilmi taulukosta 1.

Asiakas	Sähköposti
Raimo Ketola	raimo.ketola@vtt.fi
Ari Rantanen	ari.rantanen@cs.helsinki.fi
Juho Rousu	juho.rousu@cs.helsinki.fi

Taulukko 1: Projektin asiakkaat

Henkilö	Sähköposti	Rooli/vastuualue
Taisto Gerdt	taisto.gerdt@helsinki.fi	Tietokanta
Timo Kääriäinen	timo.kaariainen@helsinki.fi	Tietokanta
Mika Miettinen	mikamiet@cs.helsinki.fi	Dokumentointivastaava
Pasi Rastas	prastas@cs.helsinki.fi	Projektipäällikkö
Jari Tuominiemi	jari.tuominiemi@cs.helsinki.fi	Käyttöliittymä
Katja Nyman	kmnyman@cs.helsinki.fi	Ohjaaja

Taulukko 2: Projektityöryhmä

2 Työryhmä

Ryhmässä on viisi jäsentä, sekä ohjaaja Katja Nyman. Projektiryhmän jäsenet ja ennaltamääritellyt roolit näkyvät taulukosta 2.

2.1 Projektiryhmän työnjako

Ryhmän projektipäällikkönä toimii Pasi Rastas. Lisäksi ryhmä on nimennyt dokumentointivastaavan, joka ainoana ryhmässä vastaa dokumenttien lopullisesta ulkoasusta. Kaikki kirjoittavat dokumentaatiota ja lähettävät omat osansa dokumentointivastaavalle, joka lisää ne ylläpitämäänsä lopulliseen dokumenttiin.

Ryhmän viiden jäsenen työnjako pidetään melko avoimena. Alustavasti työryhmä jakautuu kahteen ryhmään. Taisto Gerdt ja Timo Kääriäinen huolehtivat fragmenttitietokannasta. Mika Miettinen, Pasi Rastas ja Jari

Tuominiemi toteuttavat isotopomeerijakauman laskemiseen käytettävän menetelmän. Jari Tuominiemi vastaa lisäksi käyttöliittymästä.

3 Toteutusaikataulu

3.1 Prosessimalli

Projekti etenee spiraalimallin [Pre00, s. 35–37] mukaisesti. Työryhmä pyrkii kahteen iteraatioon, joista kukin koostuu vaatimusanalyysista, suunnittelusta, toteutuksesta ja testauksesta.

3.2 Aikataulu

Projekti koostuu kahdesta spiraalimallin iteraatiosta, joista kunkin kesto on noin kuusi viikkoa. Asiakkaalle pidetään kunkin iteraatiokierroksen lopussa demotilaisuus. Toinen demotilaisuus tapahtuu projektin luovutuksen yhteydessä. Projektin aikataulu näkyy taulukossa 3.

4 Koodiriviarvio

Työn kokeilevasta luonteesta johtuen lopullista koodirivimäärää ei pystytty tarkkaan arvioimaan. Spiraalimallin ensimmäisen iteraation aikana ryhmä toteuttaa Matlabilla prototyypin lopullisesta ohjelmistosta. Tästä ensimmäisestä versiosta puuttuu joitakin ominaisuuksia, ja sen koodirivien lukumääräksi ryhmä arvioi noin tuhat riviä Matlab-koodia.

Toisessa iteraatiossa ryhmä kehittää ensimmäisen version perusteella lopullisen ohjelmiston myöhemmin päätettävillä työkaluilla. Tämän version arvioitu koodirivimäärä on 2000-2500 riviä.

Vaihe	Alkaa	Valmis	Kesto
Projektisuunnitelma		10.9	2 vk.
1. vaatimusanalyysi	10.9	17.9	1 vk.
1. suunnittelu	17.9	1.10	2 vk.
1. toteutus	1.10	15.10	2 vk.
1. testaus	15.10	22.10	1 vk.
1. demotilaisuus	17.10		
2. vaatimusanalyysi	22.10	29.10	1 vk
2. suunnittelu	29.10	12.11	2 vk.
2. toteutus	12.11	26.11	2 vk.
2. testaus	26.11	5.12	1 vk.
Projektin luovutus	5.12		

Taulukko 3: Projektin aikataulu

5 Riskit ja niihin varautuminen

5.1 Huomioonotettavat riskit

Ryhmä ei käytä mitään tiettyä riskinhallintastrategiaa, mutta pyrkii kuitenkin varautumaan kaikkiin todennäköisiin riskeihin. Riskit, joihin projektiryhmä varautuu ja näiden arvioitu todennäköisyys käyvät ilmi taulukosta 4.

5.2 Riskien kuvaus

Seuraavassa käsitellään huomioonotettavien riskien ennakointi ja toiminta kunkin riskin toteutuessa.

5.2.1 Asiakas tavoittamattomissa

Riskin kuvaus Asiakasta ei tarvittaessa tavoiteta.

Riski	Todennäköisyys
Asiakas tavoittamattomissa	matala
Ryhmän jättäminen	matala
Sairastuminen	matala
Laitteisto-ongelmat	matala
Epätasainen työnjako	matala
Ohjelmointivaikeudet	keskimääräinen
Laskentamenetelmään liittyvät vaikeudet	korkea
Laskentamenetelmä muuttuu	matala

Taulukko 4: Projektissa huomioonotettavat riskit

Riskin ennakointi Mahdolliset epäselvyydet ohjelmiston vaatimuksissa tai itse laskentamenetelmässä on käsiteltävä mahdollisimman pian heti niiden ilmetessä.

Toiminta riskin toteutuessa Jos asiakasta ei ratkeamattomien epäselvyyksien ilmetessä saada kiinni, ryhmä keskittää työnsä muihin asioihin ja yrittää tavoittaa asiakkaan myöhemmin.

5.2.2 Ryhmän jättäminen

Riskin kuvaus Yksi ryhmän jäsenistä päättää jättää ryhmän ja jättää työnsä kesken.

Riskin ennakointi Kutakin kokonaisuutta on tekemässä vähintään kaksi henkilöä, jotta yhden ryhmän jäsenen keskeytys ei vaaranna koko projektin valmistumista.

Toiminta riskin toteutuessa Kukin ryhmän jäsen on velvollinen ilmoittamaan muille mikäli epäilee, että joutuu piakkoin jättämään kurssin kesken. Ryhmäkoon muuttuessa muu ryhmä kokoontuu jakamaan tehtävät uudestaan.

5.2.3 Sairastuminen

Riskin kuvaus Ryhmän jäsen sairastuu ja joutuu vähentämään työpanostaan merkittävästi.

Riskin ennakointi Kuten kohdassa 5.2.2.

Toiminta riskin toteutuessa Jokainen ryhmän jäsen on velvollinen ilmoittamaan muille poissaolostaan ja sen arvioidusta kestosta mahdollisimman pian. Jos poissaolo on pitkäaikainen, ryhmä kokoontuu jakamaan tehtävät uudestaan. Muussa tapauksessa tehtäviä järjestetään uudestaan siten että poissaolo ei estä projektin etenemistä.

5.2.4 Laitteisto-ongelmat

Riskin kuvaus Tietojenkäsittelytieteen laitoksen laitteistoa koskevat ongelmat. Käytännössä lähinnä laitoksen tiedostopalvelimen toimintahäiriö.

Riskin ennakointi Kukin ryhmän jäsen pitää työtiedostoistaan kahta kopiota, toista jossain muualla kuin laitoksen tiedostopalvelimella.

Toiminta riskin toteutuessa Ongelman huomaava henkilö ilmoittaa siitä ryhmän muille jäsenille ja ryhmä päättää toimintatavoista.

5.2.5 Epätasainen työnjako

Riskin kuvaus Ryhmän sisäinen työnjako huomataan epätasaiseksi.

Riskin ennakointi Ryhmän jäsenille ei ole määritelty kiinteitä rooleja.

Toiminta riskin toteutuessa Jos jokin osa-alue osoittautuu selvästi odotettua vaikeammaksi ja jokin toinen toinen vastaavasti helpommaksi, ryhmä suorittaa työnjaon uudestaan.

5.2.6 Ohjelmointivaikeudet

Riskin kuvaus Jokin käytettävistä ohjelmointivälineistä (esimerkiksi Matlab) aiheuttaa yllättäviä ongelmia.

Riskin ennakointi Jokaisen ryhmän jäsenen pitäisi oma-aloitteisesti tutustua käyttämiinsä välineisiin mahdollisimman ajoissa.

Toiminta riskin toteutuessa Ongelmien ilmaantuessa yhteydenotto muihin jäseniin sähköpostilistan avulla.

5.2.7 Laskentamenetelmään liittyvät vaikeudet

Riskin kuvaus Itse laskentamenetelmään tai siihen liittyviin asioihin (esimerkiksi käytettäviin matemaattisiin käsitteisiin) liittyvät ongelmat.

Riskin ennakointi Mahdollisimman hyvä tutustuminen asiaan liittyvään materiaaliin.

Toiminta riskin toteutuessa Ongelmatilanteissa yhteydenotto sähköpostilistalle. Äärimmäisessä tapauksessa yhteydenotto asiakkaisiin (lähinnä Ari Rantaseen tai Juho Rousuun).

5.2.8 Laskentamenetelmä muuttuu

Riskin kuvaus Isotopomeerijakauman laskemiseen käytettävässä menetelmässä huomataan virhe ja sitä joudutaan muuttamaan.

Riskin ennakointi Valittu projektimalli sopii tilanteisiin, joissa vaatimukset (ja menetelmät) voivat myöhemmin muuttua. Asiakkaat tiedottavat ryhmälle, mikäli laskentamenetelmässä huomataan virhe.

Toiminta riskin toteutuessa Laskentamenetelmän muuttuessa ryhmä suorittaa työnjaon tarvittaessa uudestaan. Jos muutos ei ole suuri voidaan tarvittavat korjaukset tehdä ilman muutoksia työnjaossa.

Lähteet

Pre00 Pressman, R. S., *Software Engineering: A Practitioner's Approach, Fifth Edition*. McGraw-Hill Book Company, 2000.

Ran02 Rantanen, A. et al., Computing Positional Isotopomer Distributions from Tandem Mass Spectrometric Data. *Metabolic Engineering*, hyväksytty.