資料　６

統合データベース支援：
バイオDBサーバー構築演習

森下　真一
中谷　洋一郎

目的

- バイオDBを構築できる人材を育てる
  - 膨大なソフト外注費（150～200万円/月）を回避
  - DBの保守・拡張が自前でできること
  - やむをえず外注する場合も、正確な仕様書を書ける力と、納入されたソフトの問題点を見抜く力を養う
- 必要スキルを1年間のカリキュラムで教え込む
- 次の1年で独創的サーバーを構築

計画

DB 構築者を養成するために以下の3つの演習を実施する。

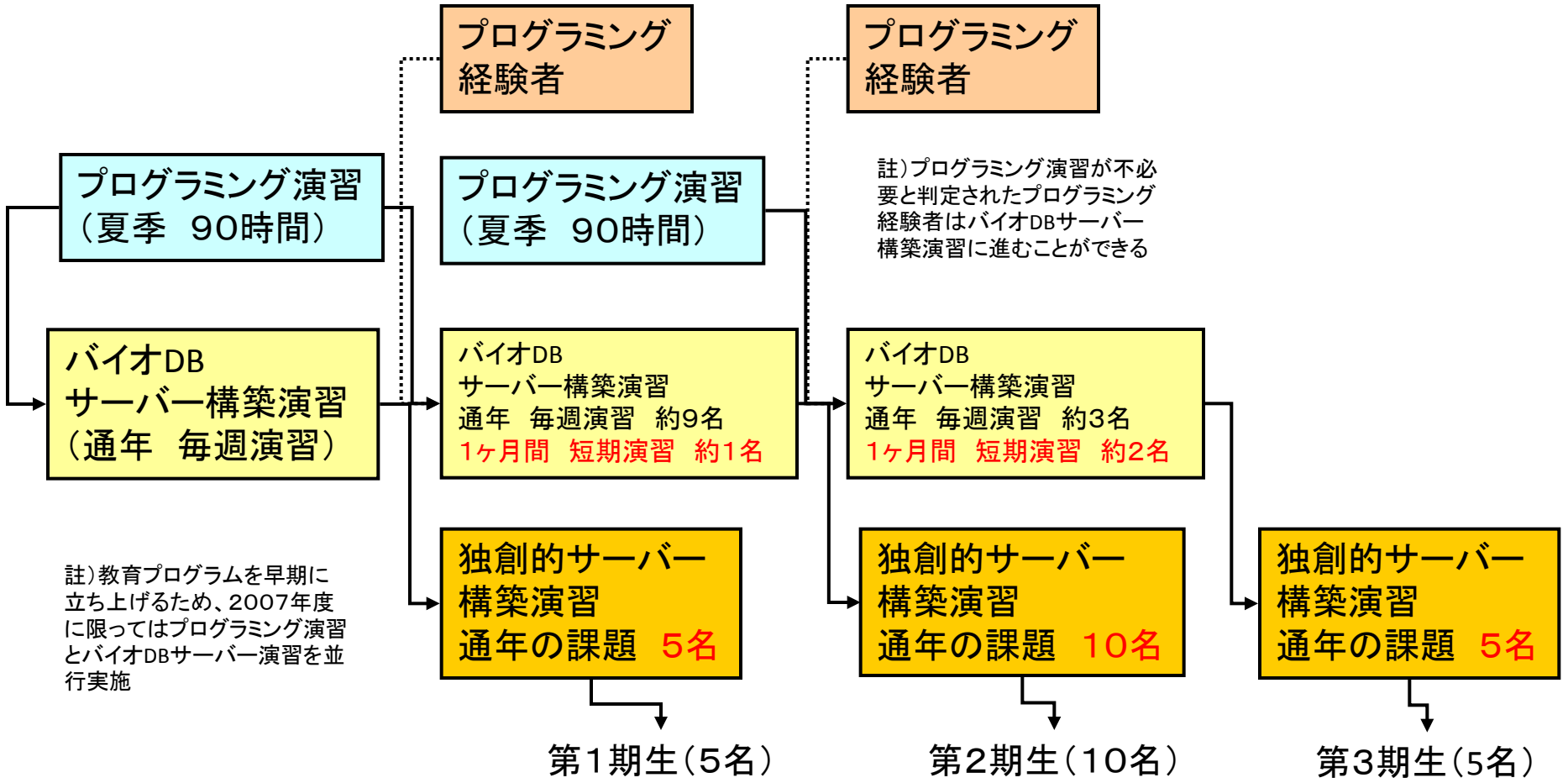
①バイオ DB サーバー構築演習
データベースサーバーのミラーサイトを構築する。OS, apache, MySQL 等の主要ソフトウエアのインストールおよびネットワークセキュリティに習熟することが目標である。参加者には各自にサーバー構築用ワークステーションを配布する。演習を完了するまでには、受講者の能力と受講可能時間に応じて最短で3ヶ月、最長で1年間の時間を予定している。

②プログラミング演習
Java および Perl プログラミングを演習した後に、アルゴリズムの知識を活かした配列処理やデータマイニングの実装を行う。上記①バイオ DB サーバー構築演習では実施がむずかしいプログラミング演習を行うことで、独自にソフトウエア構築ができる能力を身につけることをめざす。演習総時間は90時間で約2ヶ月間を予定している。

③ 独創的サーバー構築演習
大規模計算のためのクラスター利用技術を習得させ、他に類の無いバイオDBサーバーを設計、実装、公開することを目標とする。バイオDBサーバー構築演習およびプログラミング演習を修了した受講者に対して平成20年度より開講を予定しており、そのための計算機セットアップを平成19年度に準備した。

年次計画

平成19年度	20年度	21年度	22年度



演習用WS15台
（平成19年度予算申請）

註）　1期生と2期生が20年度には重なること（21年度は2，3期生）、WSが15台であること、演習スタッフ1．5名による徒弟制度であるため、各年15名の受け入れが限度である

平成２１年度受講者

- 一年コース（４月～３月）
  - 東大情報生命科学専攻から3名
  - 東大医学系研究科から1名

DBサーバー構築演習の目標設定

1: CentOS を自分のマシンにインストールする
2: ネットワークと接続する
3: セキュリティアップデートを行う
4: Web サーバーを立てる(ファイヤーウォールの設定を行う)
5: CGIを設置してみる
6: MySQL サーバーを立てる
7: 簡単なデータベースを作成する
8: Ensembl core をインストールしミラーを作成する
9: 複数種の実データをダウンロードして完全ミラーを作る
10: バックアップを作成して即時復旧できる体制を作る

２１年度バイオDBサーバー構築演習の概要

- OS (Linux) のインストール
- ネットワーク・ファイアーウォールの設定
- Web サーバーの設置・設定 (apache)
- RDBMSの設置・設定 (MySQL)
- Perl モジュールの設置・設定
- Ensembl の設置・設定
- Perl, Javaプログラミング
- CGIからのデータベース検索
- メンテナンス全般
  - 障害対応
  - ソフトウェアの Security fix やバージョンアップ等

演習日程	テーマ
4/16	イントロダクション 、CentOSのインストール
4/23	セキュリティと定期アップデート、SSHによる外部からの安全な接続
4/30	Webサーバーの設置、シェルスクリプト、Pukiwikiの設置
5/07	Perl演習
5/14	CPANを使いこなす、BioPerlのインストール
5/21	RDBMS、Perlからデータベースを扱う
5/28	PerlによるCGIプログラミング
6/04	Java演習：プログラムの書き方
6/11	Java演習：データ構造とオブジェクト
6/25	Java演習：GUIアプリケーションとデータの入出力
7/02	Java演習：データベースアプリケーション
7/09	CGIでデータベースを検索する
7/16	Ensemblデータベースをミラーする1
7/30	Ensemblデータベースをミラーする2
9/03	Ensemblデータベースをミラーする3
9/17	Ensemblデータベースをミラーする4
10/01	Ensemblデータベースをミラーする5
10/15	サーバーのバックアップ1
10/15	BLATを用いたmRNAのゲノムへのマッピング
10/29	サーバーのバックアップ2
10/29	Ensemblデータの解析、BioMartを使ったデータ取得
11/12	サーバーのバックアップ3
11/26	サーバーのバックアップ4
11/26	OpenCVを使った画像処理演習
12/10	UTGB Toolkitのインストール
12/10	JFreeChartを使用したグラフの描画
12/10	遺伝子発現データベースを使い倒す
12/24	UTGB Toolkitを使ったゲノムブラウザプログラミング
12/24	遺伝子発現データの生物学的な解釈

OSのインストール

- 講義日程：4/16
- システム・ネットワーク・ウェブ・データベース等に関する基礎的な用語の解説。
- 各自のサーバーにLinuxをインストール。
  - CDイメージをダウンロードしCentOS最新版をインストールする。

セキュリティと自動更新設定
鍵認証方式によるログイン

- 講義日程：4/23
- セキュリティーについて。
  - 脆弱性とは？
  - 脆弱性の例。
    - Buffer overflow, SQL injection, Cross site scripting, Brute force attack, DNS spoofing, …
- yum-cronによる定期的なセキュリティアップデートの設定。
- ネットワークの設定。
- SSHの設定。
  - 公開鍵認証方式によるログイン。
  - パスワードを入力しない安全な方式で外部からssh接続を行う。

Webサーバーの設置
Pukiwikiの設置

- 講義日程：4/30
- ウェブサーバーの設置。
  - Apacheのインストール。
  - 設定ファイルの編集。
  - Firewallの設定。
- Pukiwikiの設置。
  - ウェブ上で情報の共有と整理を多人数で行える。
  - Pukiwikiをダウンロードし、サーバーにインストールする。
  - Pukiwikiの基本操作、文法の解説。

Perlプログラミング演習

- 講義日程：5/7
- なぜPerlを学ぶのか？
  - “バイオインフォマティクスの分野で、最も広く使われているスクリプト言語。”
  - Ensembl のコードもPerlで書かれているためミラーサイト構築時にPerlの知識が必要。
- Perlのインストール。
- 基本的なPerl文法の解説。
  - File I/O, 正規表現, サブルーチン, ソートなど。
- ゲノム配列データをダウンロードし、Perlを使用して簡単なデータ処理を行う。

ソフトウェア・モジュールのインストール

- 講義日程: 5/14
- 他の研究者によって開発されたソフトウェア・ライブラリー・モジュールを使用することで、解析プログラム・解析パイプラインをすばやく簡単に作成することができる。
- CPANの利用。
  - CPAN の使い方 ライブラリ
  - CPAN (Comprehensive Perl Archive Network) とは何か
  - 最初の configuration
  - モジュールのインストール
  - 依存モジュールが足りない場合は
  - 自分のHOME下へのインストール
  - インストール済みモジュールのチェック
- CPANからPerlモジュールをインストールする。
  - AppConfig, DBI, DBD::SQLite, File::HomeDir, YAML, Spreadsheet::ParseExcel, Spreadsheet::WriteExcel, Cwd, SVG, PostScript::Simple, HTML::Parser, XML::Parser, IO::Zlib, Term::ReadLine, Template, Digest::SHA::PurePerl, Bundle::BioPerl
- makeによるモジュールインストール。

データベースの設置
Perlを使ったデータベース検索

- 講義日程:5/21
- データベースの設置。
  - MySQLのインストール。
  - MySQLの基本的なコマンドの解説。
  - データベースの検索。
- PerlのDBIモジュールによるデータベースアクセス。
  - Perlプログラムからの遺伝子データの検索。
  - BioPerlを使用した遺伝子系統樹解析。

PerlによるCGIプログラミング

- 講義日程：5/28, 7/9
- Perlを使ってCGIプログラムを作成
  - HTTPの解説。
  - Perlでアクセスカウンターを作成。
  - GET方式とPOST方式によるユーザーからの入力の処理。
  - Cookieの解説。
- ウェブページからユーザー入力を受け取りデータベースを検索するCGIの作成
  - BioPerlを使って、TreeFamデータベースの系統樹データを検索。
  - CGI作成用のPerlモジュール HTML::Template, HTML::FillInformを使用。

Java プログラミング演習

- 講義日程：6/4, 11, 25, 7/2

- 演習内容
  - プログラムの書き方。
    - Javaの仕組みと文法、Eclipse（Javaの開発環境）の使い方
  - データ構造とオブジェクト。
    - 配列、オブジェクト指向プログラミング、データ構造
  - GUIアプリケーションとデータの入出力
    - 文字列、オブジェクト・クラス、入出力、GUIアプリケーションの作成
  - データベースアプリケーション
    - リレーショナルデータベースとSQL, SQLite JDBCを使ってJavaからデータベースを扱う。

Ensemblミラーサイトの構築
サーバーのバックアップ

- 講義日程：7/16, 30, 9/3, 17, 10/1, 15, 29, 11/12, 26
- Ensembl ミラーサイト構築
  - 必要なモジュールのインストール
  - データのダウンロードとインストール
  - Ensemblウェブサイトの設定、起動
- TeraStationへのバックアップ
  - データベースのバックアップ
  - ”rsync”コマンドによるバックアップ

UTGB toolkitによる ゲノムブラウザー開発

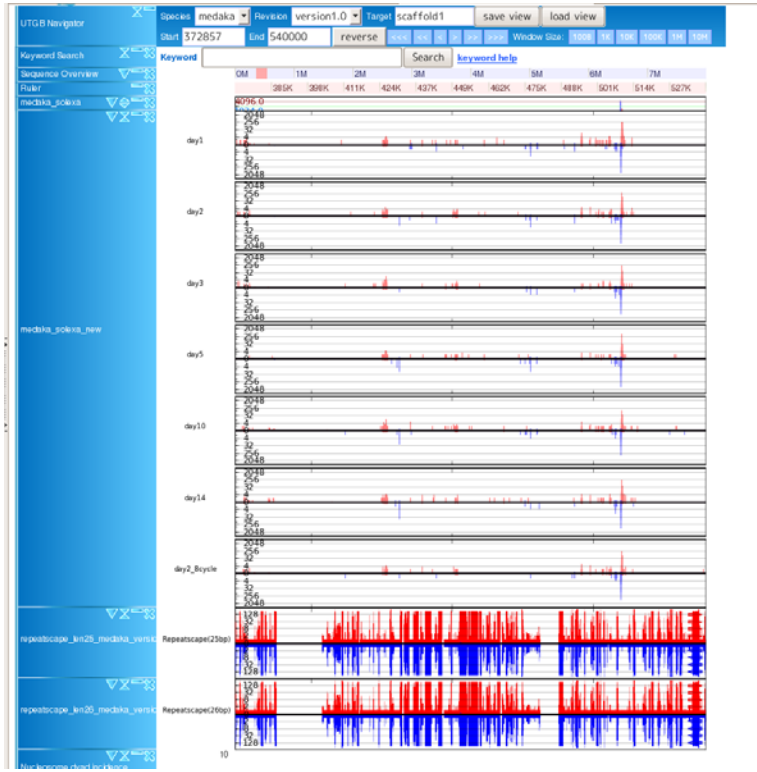
- 講義日程: 12/10, 24
- UTGB toolkitを用いて新しいタイプのゲノムデータをトラックに表示する技術を習得することが目標。
- UTGBの紹介、UTGB toolkitのインストール。
- UTGB toolkitを用いてデータを表示する。

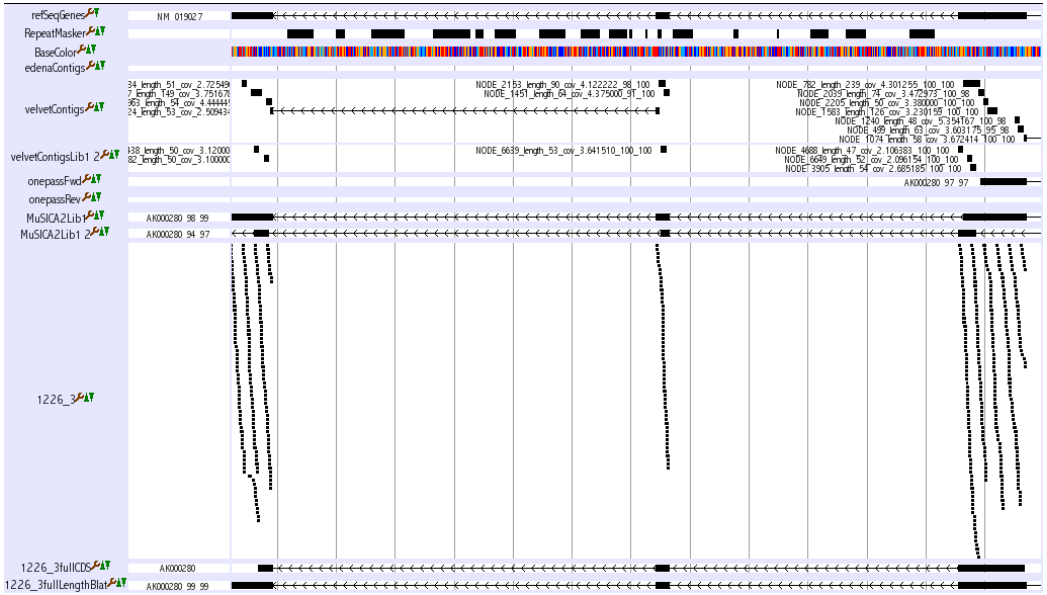
21年度講習の進捗
（受講者数：4名）

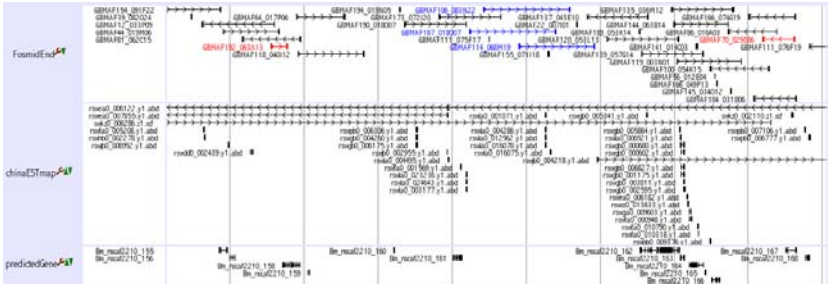
済 1. CentOS を自分のマシンにインストールする
済 2. ネットワークと接続する
済 3. セキュリティアップデートを行う
済 4. web サーバーを立てる(ファイヤーウォールの設定を行う)
済 5. CGIを設置してみる
済 6. MySQL サーバーを立てる
済 7. 簡単なデータベース作成をする
済 8. Ensembl core をインストールしミラーを作成する
9. 複数種の実データをダウンロードして完全ミラーを作る
済 10. バックアップを作成して即時復旧できる体制を作る

独創的サーバー構築演習

- 受講者が研究で使用する新規データをゲノムブラウザーに表示する。
  - 発現量データを表示するトラックの開発。
  - 配列特異性を視覚化するトラックの開発。
    - “RepeatScape”として公開。
  - Fosmid-end解析, 完全長cDNAアセンブリーの解析をブラウザーに表示。
- データ解析・論文作成に活用されている。

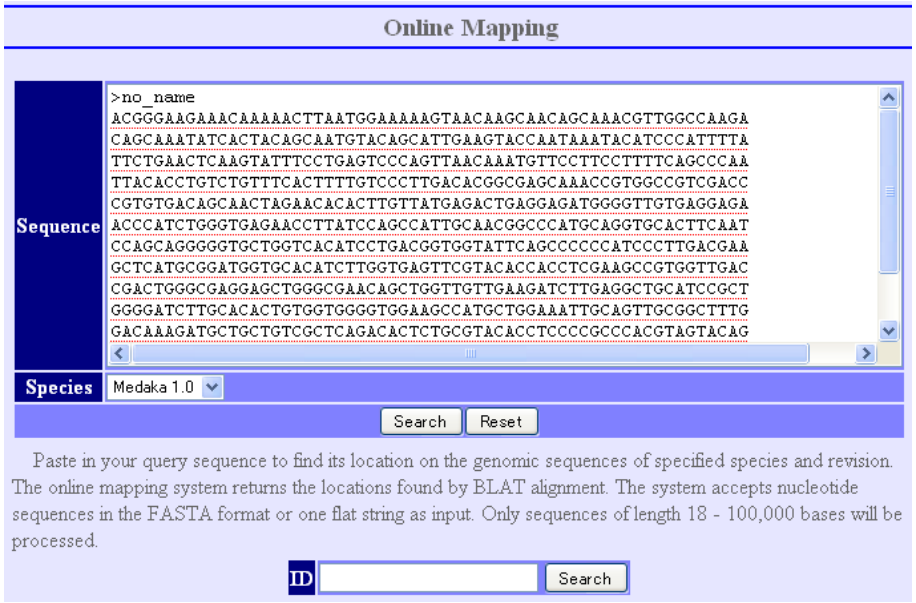


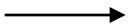




UTGB Medaka Online Mapping

- クラスターでアラインメントの計算
- ウェブブラウザーでマッピング結果を表示





昨年度までのバイオDB構築演習受講者による講義・演習

- BLATを用いたmRNAのゲノムへのアラインメントと出力結果の処理。
- Ensemblの比較ゲノムデータを使った解析とBioMartによるデータ取得方法。
- OpenCV（画像処理ライブラリー）を用いた画像解析。
- 遺伝子データベースを使い倒す（BioGPS, NCBI Gene Expression Omnibus, Mouse Genome Informatics データベースを使った発現解析）。
- 遺伝子発現データの生物学的な解釈（DAVID, Reactomeデータベースを使った発現解析）。

サーバー使用者氏名とネットワーク図

es1.gi.k.u-tokyo.ac.jp簑島（21年度受講者）
es2.gi.k.u-tokyo.ac.jp 李（21年度受講者）
es3.gi.k.u-tokyo.ac.jp 林（21年度受講者）
es4.gi.k.u-tokyo.ac.jp 福田（21年度受講者）
es5.gi.k.u-tokyo.ac.jp募集中

es6.gi.k.u-tokyo.ac.jp 仲里猛留（20年度受講者）
es7.gi.k.u-tokyo.ac.jp中谷洋一郎（講師）
es8.gi.k.u-tokyo.ac.jp 劉晅晅（20年度受講者）
es9.gi.k.u-tokyo.ac.jp 宗永雅樹（20年度受講者）
es10.gi.k.u-tokyo.ac.jp 村中真人（20年度受講者）
es11.gi.k.u-tokyo.ac.jp 呉紅艶（20年度受講者）
es12.gi.k.u-tokyo.ac.jp 近藤修平（20年度受講者）
es13.gi.k.u-tokyo.ac.jp 白井和英（20年度受講者）
es14.gi.k.u-tokyo.ac.jp 中谷洋一郎（講師）
scmd.gi.k.u-tokyo.ac.jp 中谷洋一郎（講師）、斉藤太郎（講師補助）