資料11－2

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。

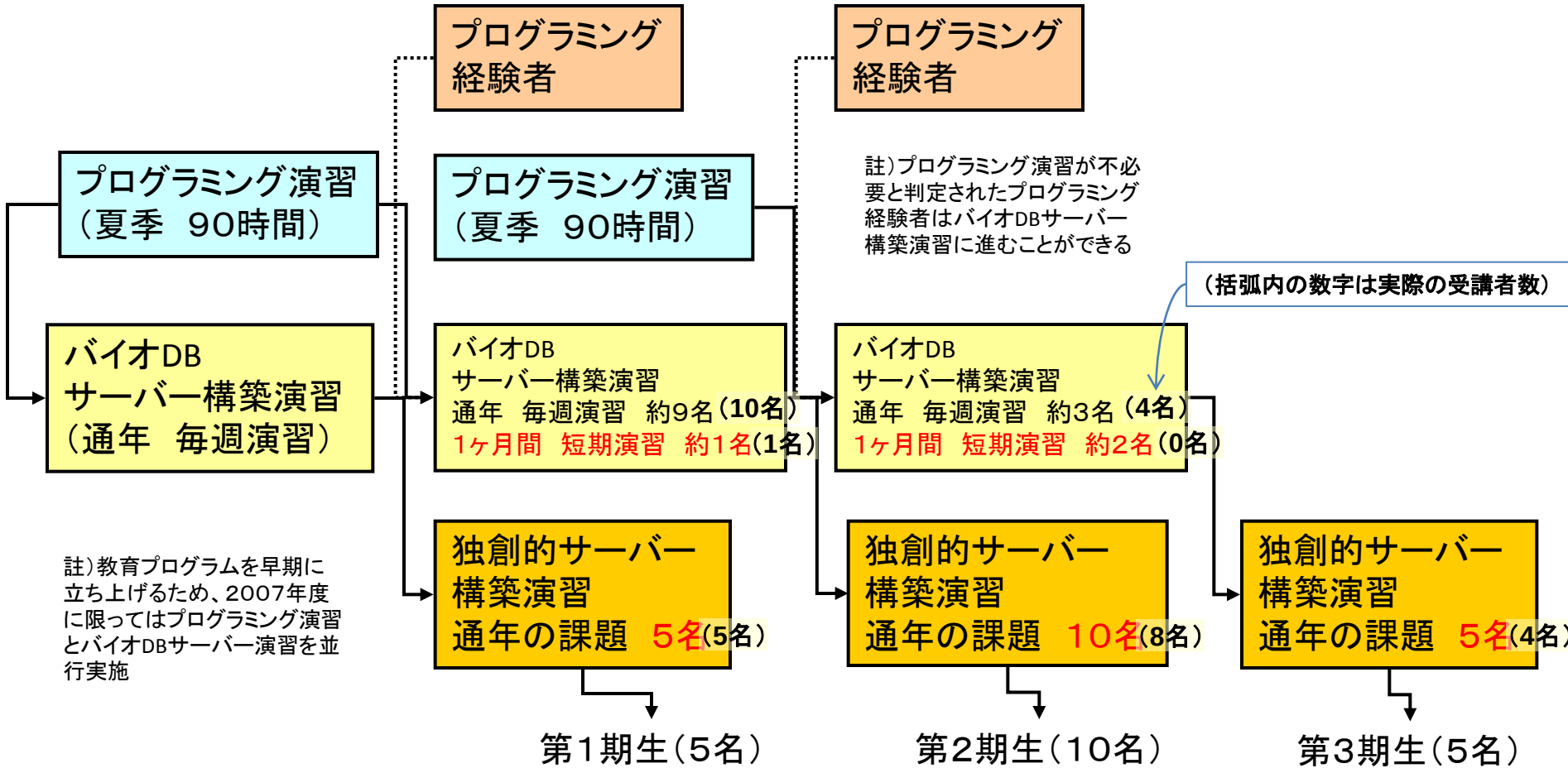
①バイオ DB サーバー構築演習
データベースサーバーのミラーサイトを構築する。OS, apache, MySQL 等の主要ソフトウエアのインストールおよびネットワークセキュリティに習熟することが目標である。参加者には各自にサーバー構築用ワークステーションを配布する。演習を完了するまでには、受講者の能力と受講可能時間に応じて最短で3ヶ月、最長で1年間の時間を予定している。

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

受講者数

バイオDBサーバー構築演習	独創的サーバー構築演習
• **平成19年度受講者**	**平成20年度受講者**
– 東大情報生命科学専攻から5名	– 東大情報生命科学専攻から5名
• **平成20年度受講者**	**平成21年度受講者**
– 東大情報生命科学専攻から8名 – DBCLSから2名 – 自治医大から1名	– 東大情報生命科学専攻から6名 – DBCLSから2名
• **平成21年度受講者**	**平成22年度受講者**
– 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	– 東大情報生命科学専攻から4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を設置する
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

バイオDBサーバー構築演習の概要（平成21年度の例）

- 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、セキュリティ設定、ネットワーク設定

- 演習受講者にサーバーを1台ずつ割り当て、OSインストールから演習する。
- OSインストール
  - 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。
- セキュリティ設定
  - 脆弱性について基礎的な事項を学習（buffer overflow等）。
  - Yum-cronによる定期的なセキュリティアップデート。
- ネットワーク設定
  - 公開鍵認証方式によるssh接続の設定。
  - ファイアウォールの設定。

Webサーバーの設置、Pukiwikiの設置、シェルスクリプトプログラミング

- 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の設置し、ウェブ上で情報の共有と整理を多人数で行う。また演習ノートをPukiwikiで作成する。
  - 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。
- シェルスクリプトプログラミング
  - 文法の解説。
  - シェルスクリプトを使ったCGIプログラムの作成。

Perlプログラミング、CGIプログラミング

- EnsemblのコードはPerlで書かれておりミラーサイト構築に必要となるため、Perlは時間をかけて詳しく解説した。
  - 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, ソート等。
  - 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。
  - CPAN (Comprehensive Perl Archive Network)によるソフトウェア・モジュールのインストールを解説。
    - BioPerlのインストール。
    - Makeによるインストールも解説。
- CGIプログラミング
  - HTTP, CGI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。

データベースの設置、Perlを使ったデータベース検索

- 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。
  - 遺伝子データ（TreeFam, Ensemblのデータを使用）をサーバーにダウンロードしMySQLで検索する。
- Perlを使ったデータベース検索CGIの作成。（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。）
  - PerlのDBIモジュールを使ってデータベースにアクセスし遺伝子データを検索。
  - BioPerlを使用した遺伝子系統樹解析。
  - CGI作成用のPerlモジュール HTML::Template, HTML::FillInformを使用し、データベースを検索し検索結果を画像で表示するCGIを作成。

Java プログラミング演習

- 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

- Ensembl ミラーサイト構築。
  - yum, CPANを使って必要なモジュール・外部プログラムをインストール。
  - Ensembl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。
  - TeraStationをサーバーにマウントする。
  - “mysqldump”によるデータベースのバックアップとデータ復旧。
  - ”rsync”コマンドによるバックアップとデータ復旧。

バイオDBサーバー構築演習の進捗

平成19年度	平成20年度	平成21年度	
済	済	済	1. CentOS を自分のマシンにインストールする
済	済	済	2. ネットワークと接続する
済	済	済	3. セキュリティアップデートを行う
済	済	済	4. web サーバーを立てる
済	済	済	5. CGIを設置する
済	済	済	6. MySQL サーバーを立てる
済	済	済	7. 簡単なデータベース作成をする
済	済	済	8. Ensembl core をインストールしミラーを作成
			9. Ensemblの完全ミラーを作る
		済	10. バックアップを作成する

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。
  - バイオデータの解析演習。
  - 大規模並列計算演習。
    - Sun Grid Engineを用いた並列計算。
  - ウェブアプリケーション開発演習。
    - ゲノムブラウザーによる解析データの視覚化。
  - 受講者の研究結果をデータベースとして実装・公開することが目標。

バイオデータの解析演習

受講者が実際の研究で使用するツール・データの解説と簡単な演習を行った。

- 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。
- JFreeChartを使用したグラフの描画。
- 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）。

Sun Grid Engineを用いた並列計算

次世代シーケンサーの大量データを解析するために、SGEを使った並列計算を習得することが目標。

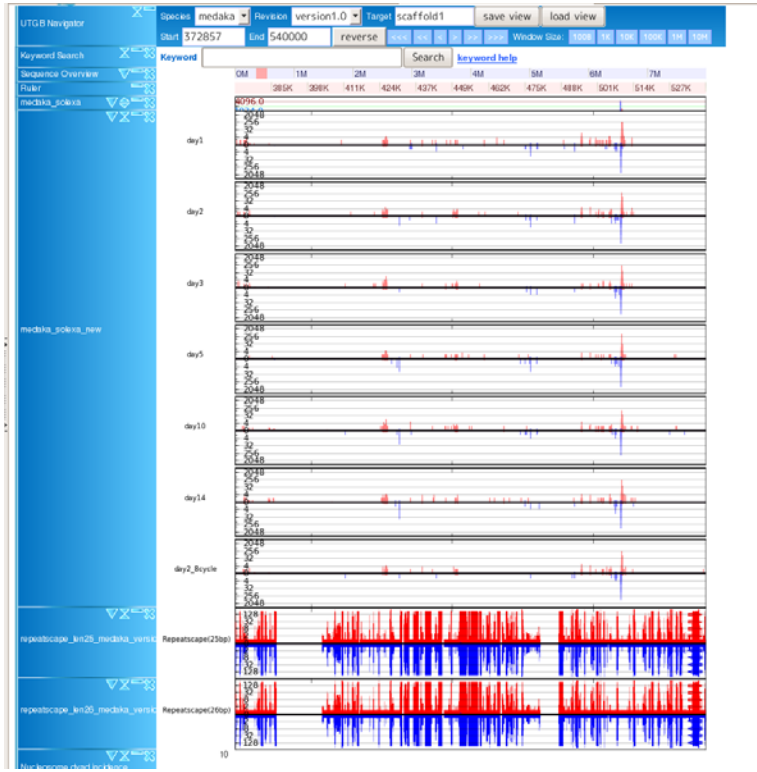
- SGEの使用法を解説
  - 並列ジョブの投入。
  - 実行/エラー状態の確認。
  - ジョブのキャンセル。
  - ジョブ間の依存関係の指定。
  - 必要なリソースを指定して実行。
  - キューの作成、エラー処理。
- SGEを使って、次世代シーケンサーで読んだリード配列をゲノムにマッピング。

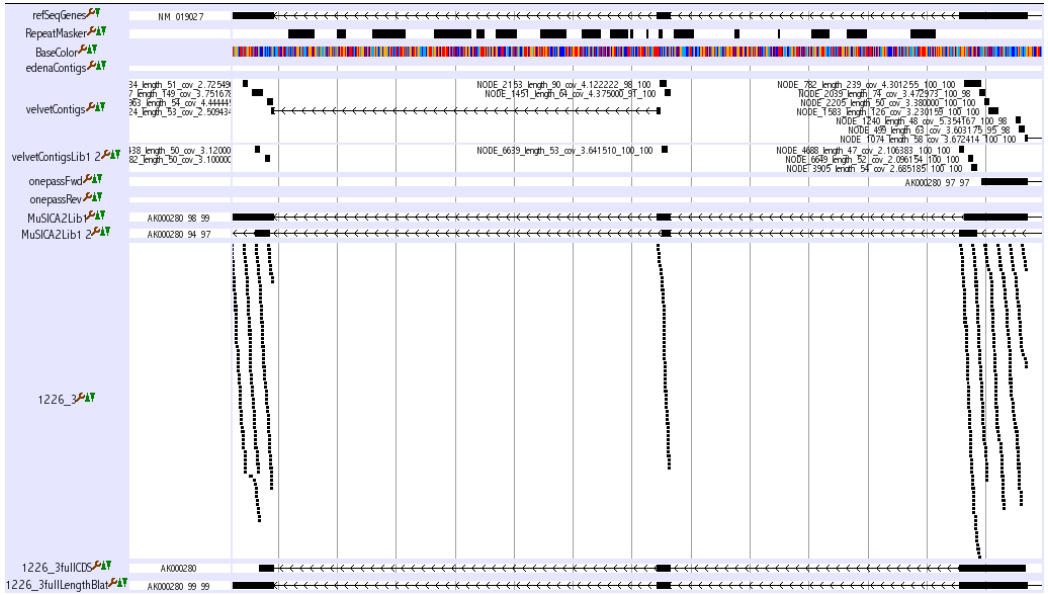
ウェブアプリケーション開発演習

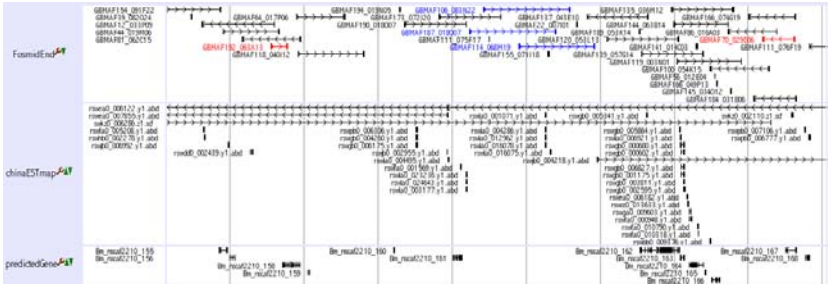
- UTGB toolkitを用いて新しいタイプのゲノムデータをトラックに表示する技術を習得することが目標。
  - GWT(Google Web Toolkit)によるwebアプリケーション開発。
  - ユーザーインターフェイスの作成。
  - AJAXによるデータ通信。
  - JDBCによるデータベース検索。
  - UTGBの紹介、UTGB toolkitのインストール。
  - UTGB toolkitを用いてデータを表示する。

データベースの実装・公開

- 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。

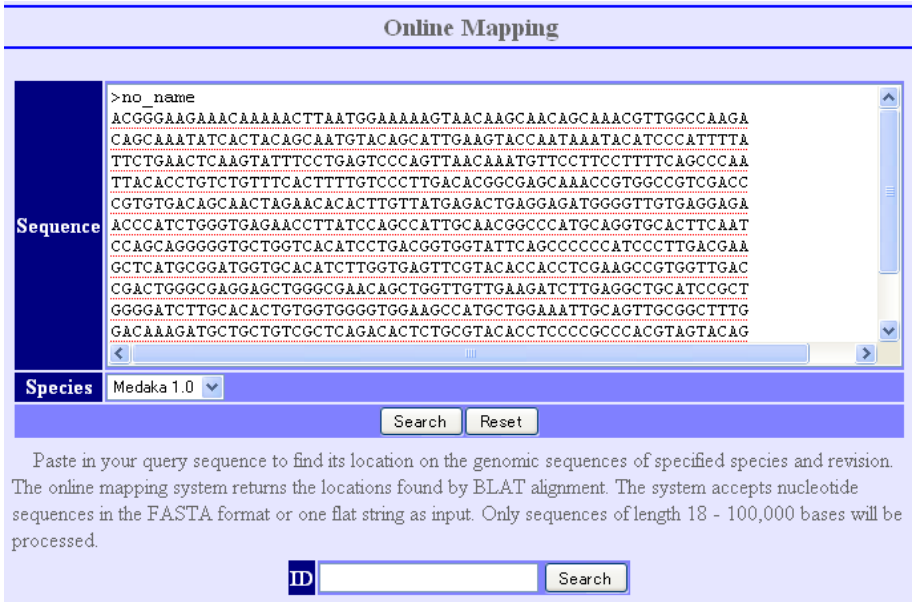


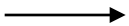




UTGB Medaka Online Mapping

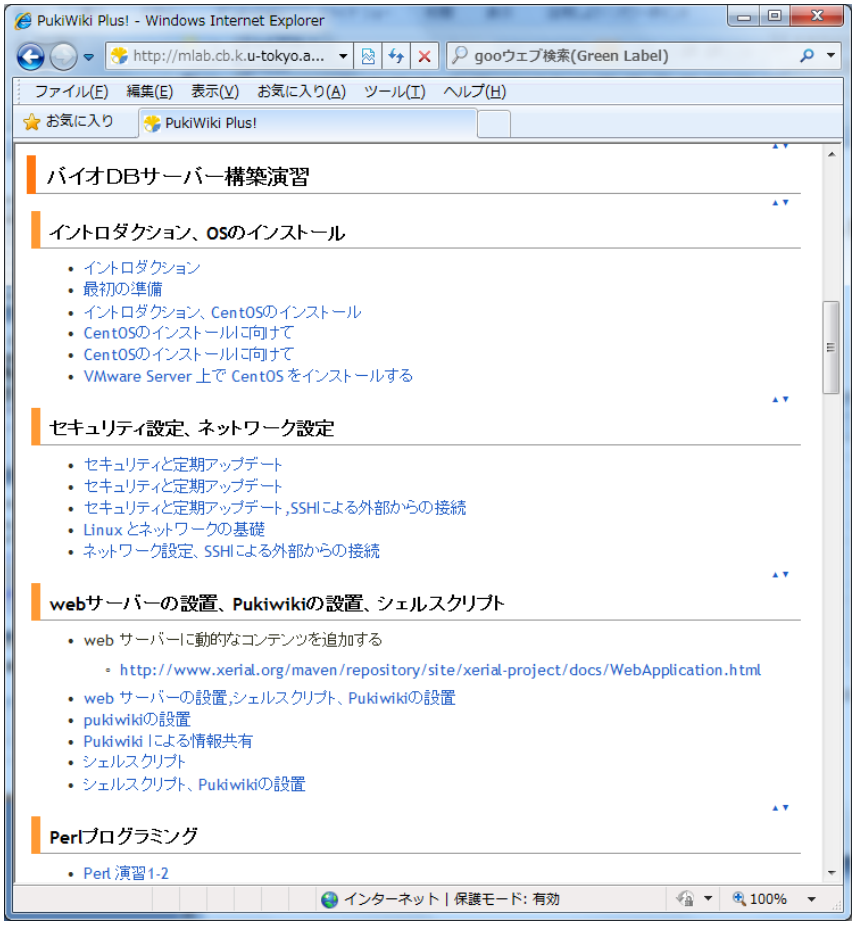
- クラスターでアラインメントの計算。
- ウェブブラウザーでマッピング結果を表示。



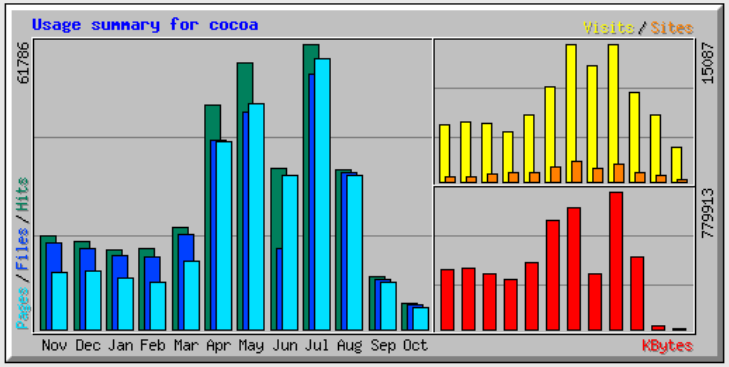


演習ノートをウェブ上で公開

過去の演習ノートの整理・改善を行った。



演習ノートのアクセス統計



Summary by Month

Month	Daily Avg				Monthly Totals					
	Hits	Files	Pages	Visits	Sites	KBytes	Visits	Pages	Files	Hits
Oct 2010	365	347	321	250	300	5829	3764	4820	5217	5482
Sep 2010	379	357	337	246	630	16046	7380	10125	10730	11387
Aug 2010	1114	1096	1073	315	978	406870	9778	33287	34006	34536
Jul 2010	1993	1782	1891	486	1906	779913	15087	58623	55244	61786
Jun 2010	1161	580	1108	420	1452	316922	12628	33258	17428	34858
May 2010	1861	1515	1575	483	2230	689661	15002	48825	46988	57704
Apr 2010	1622	1362	1354	344	1636	614311	10320	40644	40863	48669
Mar 2010	715	658	479	235	1024	375322	7287	14878	20401	22188
Feb 2010	627	562	364	194	956	286172	5440	10212	15742	17572
Jan 2010	558	516	359	206	795	314117	6397	11144	16014	17301
Dec 2009	610	567	412	210	589	343869	6512	12779	17606	18910
Nov 2009	672	627	407	206	611	338368	6192	12217	18811	20181
Totals						4487401	105787	290812	299050	350574

受講者の進路
（卒業生の就職先、または現在の所属）

- DBCLS：２名
- 研究員：２名
- 博士課程在学中：５名
- 修士課程在学中：３名
- 就職：６名
  - IBM, JR東日本, 日立, 野村総研など
- 不明、その他：３名