Cytoscape用户手册

The Cytoscape Collaboration Translated by Gang Chen

March 3, 2009

Contents

Cytoscape 2.6用户手册

本文档遵守Creative Commons License, 2006

作者: The Cytoscape Collaboration

中文翻译:Gang Chen jchengang@gossipcoder.com;

Cytoscape项目由以下单位合作:

- 加州大学圣地亚哥分校
- 系统生物学研究中心
- Memorial Sloan-Kettering癌症研究中心
- Pasteur研究中心
- 安捷伦科技公司
- 加州大学旧金山分校

Cytoscape的资金来自NIH的美国国家通用医学研究中心(NIGMS),资金编号为:GM070743-01。整体资金通过来自Unilever PLC的合同提供。

引言

Cytoscape 项目致力于为用户提供一个开源的网络显示和分析软件。软件的核心部分提供了网络显示、布局、查询等方面的基本功能。软件的核心可以通过插件架构进行扩展,这样就能快速地开发出新的功能。

Cytoscape源自系统生物学,用于将生物分子交互网络与高通量基因表 达数据和其他的分子状态信息整合在一起。虽然Cytoscape也能适用于 其他分子构件和相互作用,但其最强大的功能还是用于大规模蛋白质- 蛋白质相互作用、蛋白质-DNA和遗传交互作用的分析。各种物种,包括 人类,的这方面的实验数据都在迅速增加。通过Cytoscape,用户可以在可视化 的环境下将这些生物网络跟基因表达、基因型等各种分子状态信息整合 在一起,还能将这些网络跟功能注释数据库链接在一起。

Cytoscape 的核心是网络(图),其中的节点(node)是基因、蛋白质或分子,其中的连接则是这些生物结构之间的相互作用。

0.1 开发

Cytoscape 是 Institute for Systems Biology (Leroy Hood 实验室)、加州大学圣地亚哥分校(Trey Ideker 实验室)、Memorial Sloan-Kettering 癌症研究中心(Chris Sander 实验室)、Pasteur研究院(Benno Schwikowski实验室)、安捷伦科技(Annette Adler实验室)和加州大学旧金山分校(Bruce Conklin实验室)的合作项目。

详情请访问http://www.cytoscape.org。

0.2 授权

Cytoscape 受 GNU LGPL (Lesser General Public License) 的保护。在本手册的附录中能找到该授权,同时可以访问 http://www.gnu.org/copyleft/lesser.txt。 Cytoscape 还是用了其他的一些开源程序库,详情见本手册的致谢。

0.3 2.6版本的更新

 ${
m Cytoscape}\ 2.6$ 中增加了很多新功能,在性能和软件的易用性上也有提升。包括:

- Web Service Client Manager框架能将Web服务客户端集成到Cytoscape中。
- 通过Web服务客户端插件,可以从PathwayCommons、IntAct和NCBI Entrez Gene下载网络数据。

CONTENTS 4

● 通过Web服务插件,可以从BioMart导入注释信息。这主要是用于ID的翻译和名称映射。

- Cytoscape主题。 Dynamic filters.
- 动态过滤。 Network Manager supports multiple network selection.
- 网络管理器支持多网络选取。 Label Positioning has been improved.
- 改进了标签的位置。 Session saving occurs in memory.
- 将会话保存在内存中。 XGMML Improvements.
- 改进了XGMML。 Network loading improvements.
- 网络加载得到了改进。
- Linkout integrated with attribute browser.
- 通过可视化属性,引入了更多的Visual Style。
- 修复了不计其数的bug。

Chapter 1

启动 Cytoscape

Cytoscape 是一个Java程序,能在 Linux 、 Windows 和 Mac OS X 上运行。对于其他能安装Java 5的操作系统平台,比如以Solaris和FreeBSD为代表的UNIX,Cytoscape也能运行,但官方并对此提供支持。

1.1 系统要求

Cytoscape 对系统的具体要求取决于所加载、查看和操作的网络的大小。

	小型网络查看	大型网络分析和查看
处理器	1GHz	尽可能的快
内存	512MB	2GB以上
显卡	板载集成显卡	高端独立显卡
显示器	$XGA(1024 \times 768)$	高分辨率或双显示器

表 1.1:

1.2 入门

1.2.1 **安装** Java

如果计算机上还没有安装 Java, 那么首先要下载并安装 Java SE 5 或 6。Cytoscape 从2.5版 开始就不能在 Java 1.4 上运行。必须安装 Java SE 5 或 6 !!! Java SE 5 和 Java SE 6可以从这里下载:

- Java SE 5
- Java SE 6

一般情况下, Java SE 6 的运行速度要快一些。所以, 如果您的计算机兼容 Java SE 6 的话,请尽量使用 Java SE 6。

1.2.2 安装 Cytoscape

Cytoscape 供下载的版本很多,安装方法也不尽相同。所有的版本都可以从 http://cytoscape.org 网站下载。

- Windows、Mac OS以及Linux平台上的自动安装包
- 压缩发行版
- 从源代码编译
- 从Subversion源中提取最新版的软件

Cytoscape的安装目录 (无论是什么平台)中包含表 1.2 中的文件。

文件	描述
cytoscape.jar	Cytoscape 的主程序(Java 压缩包)。
avetogaana sh	从命令行运行 Cytoscape 的脚本 (用于 Linux 和
cytoscape.sh	Mac OS X).
cytoscape.bat	运行Cytoscape的脚本(用于 Windows)。
LICENSE.txt/html	Cytoscape GNU LGPL 授权。
lib/	Cytoscape运行所需的jar库。
docs/	各种格式的用户手册。也就是你正在阅读的东西。
plugins/	jar格式的Cytoscape插件。
sampleData/	
	galFiltered.gml - 分子相互作用网络数据示例*。
	galFiltered.sif – Simple Interaction 格式的同一个网络*
	galExpData.pvals – 基因表达矩阵文件示例*。
	galFilteredAttrTable.xls — 微软 Excel 格式的节点属性
	文件示例。
	galFiltered.sif – 用上面的数据库和多个注释数据库创建
	的会话示例*。
	BINDyeast.sif – BIND数据库中酵母的蛋白质相互作用
	网络,2006年12月**。
	BINDhuman.sif – BIND数据库中人类的蛋白质相互作
	用网络,2006年12月**。
	yeastHighQuality - 分子生物相互作用的示例文件***。
	interactome_merged_networkTable.gz — 制表符分割格
	式的人类相互作用网络****。
	sampleStyle.props – 附加的 Visual Sytle 示例。

表 1.2: *来自 Ideker er al, Science 292:929 (2001); **来自 http://www.blueprint.org/bind/bind_downloads.html; ***来自 Mering et al, Nature, 417:399 (2002) Lee et al, Science 298:799 (2002); ****来自 Cytoscape 教程网页。原始数据可以从 http://cytoscape.org/cgi-bin/moin.cgi/Data_Sets/上 由Andrew Garrow、Yeyejide Adeleye和Guy Warner (Unilever, Safety and Environmental Assurance Center)创建的"A merged human interactome"中下载。

1.2.3 启动程序

双击安装程序创建的图标,或是在命令行中运行 cytoscape.sh (Linux或Mac OS X),也可以双击 cytoscape.bat(Windows)就能启动 Cytoscape。还可以在命令行中将这个jar文件以命令行参数的形式传递给命令 java -Xmx512M -jar cytoscape.jar -p plugins。 -Xmx512M 标志是告诉 java 给 Cytoscape 分配较多的内存,-p plugins 则是告诉 Cytoscape 加载 plugins 目录中所有的插件。插件对于 Cytoscape 是非常重要的,诸如布局(layout)、过滤器(filter)和属性浏览器之类的功能都是由插件提供的。关于命令行参数的详细信息请阅读命令行参数一章。在 Windows 中,只需要双击 jar 文件就能启动 Cytoscape。不过,这样就不能使用命令行参数了(比如制定插件目录的位置)。

成功地启动 Cytoscape后,就会看到如图 1.1 所示的窗口(图 1.1 来自 Mac OS 10.4)。

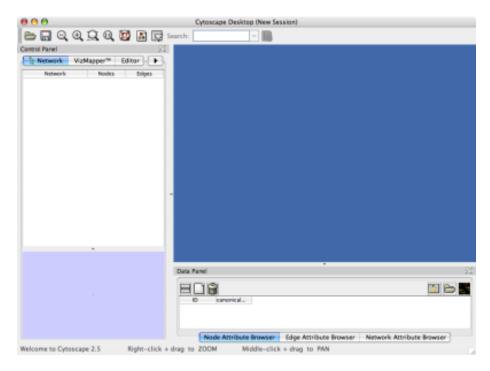


图 1.1: Cytoscape启动界面

注意内存使用量

随着用用户所加载的网络的规模的增加, Cytoscape所需的内存也会增加。内存的使用量取决于网络对象(节点和边)的数量以及属性的数量。表 1.3 和 1.4是对内存需求量的粗略估计。

对象的数量(节点和边)	建议内存
0 - 70,000	512M (默认值)
70,000 - 150,000	800M

表 1.3: 无视图情况下的建议内存大小

对象的数量(节点和边)	建议内存
0 - 20,000	512M (默认值)
20,000 - 70,000	800M
70,000 - 150,000	1G

表 1.4: 有视图情况下的建议内存大小

Cytoscape的整体内存需求

可以通过命令行参数增加Cytoscape的内存大小。例如,如果要给Cytoscape分配1G的内存,可以在命令行输入:

java -Xmx1GB -jar cytoscape.jar -p plugins

堆栈尺寸 (stact size)

这是另一个跟内存分配有关的选项。Cytoscape的部分功能需要较大的堆栈空间(某些操作所需的临时内存,比如Layout)。由于这个堆栈的大小是独立于前面的Xmx值的,所以有时候Layout算法会因为内存不足而失败。为了避免这种情况,可以用-Xss制定更大的堆。如果对大型网络布局时失败,可以尝试下面的命令:

java -Xmx1GB -Xss10M -jar cytoscape.jar -p plugins

选项-Xss10M的意思就是将堆的尺寸设置为10MB。在大部分情况下,这能解决由于内存不足导致的Layout问题。

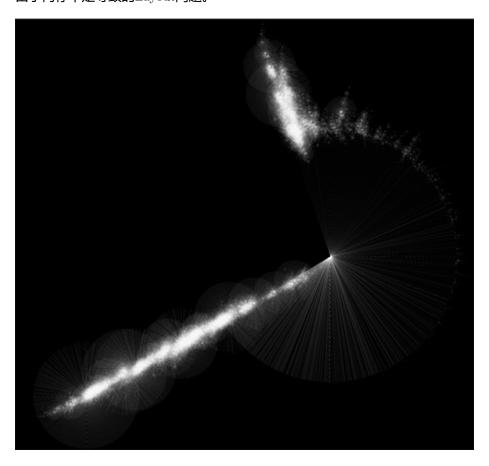


图 1.2: **随机生成的**scale-free**网络,含有**500K**个节点和**500K**条边:**如果正确 地设置了内存参数,就能看到这个庞大的网络。在这个例子中,Cytoscape 大约使用了 5GB 内存。堆栈的大小是10MB。如果要使用大内存(大于4GB),就需要64位的操作系统和64位的Java SE 5或6。

注意:有些web服务客户端是多线程程序,其中没有线程都是使用-Xss选项所指定的内存大小。如果web服务客户端应为内存不足而失败,请调低堆栈的大小,然后再试一次。

更多的信息请参看http://cytoscape.org/cgi-bin/moin.cgi/How to increase memory 20for Cytoscape

注意目录位置

为了能让程序正常运行,在解压后,所有的文件位置都不能随便改动。Cytoscape的核心程序会按照默认的目录结果去查找其所需的库。如果你确实手痒痒想自己改一下,可以通过修改\$CLASSPATH或是cytoscape.jar的manifest文件,这样在任何地方都能启动Cytoscape。

Chapter 2

Cytoscape快速入门

Chapter 3

命令行参数