

Cytoscape用户手册

The Cytoscape Collaboration
Translated by Gang Chen

March 3, 2009

Contents

0.1	开发	3
0.2	授权	3
0.3	2.6版本的更新	3
1	启动 Cytoscape	5
1.1	系统要求	6
1.2	入门	6
1.2.1	安装 Java	6
1.2.2	安装 Cytoscape	6
1.2.3	启动程序	7
2	Cytoscape快速入门	11
3	命令行参数	14

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

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。

- 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 × 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)。
cytoscape.sh	从命令行运行 Cytoscape 的脚本 (用于 Linux 和 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 et 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 Enviromental 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)。

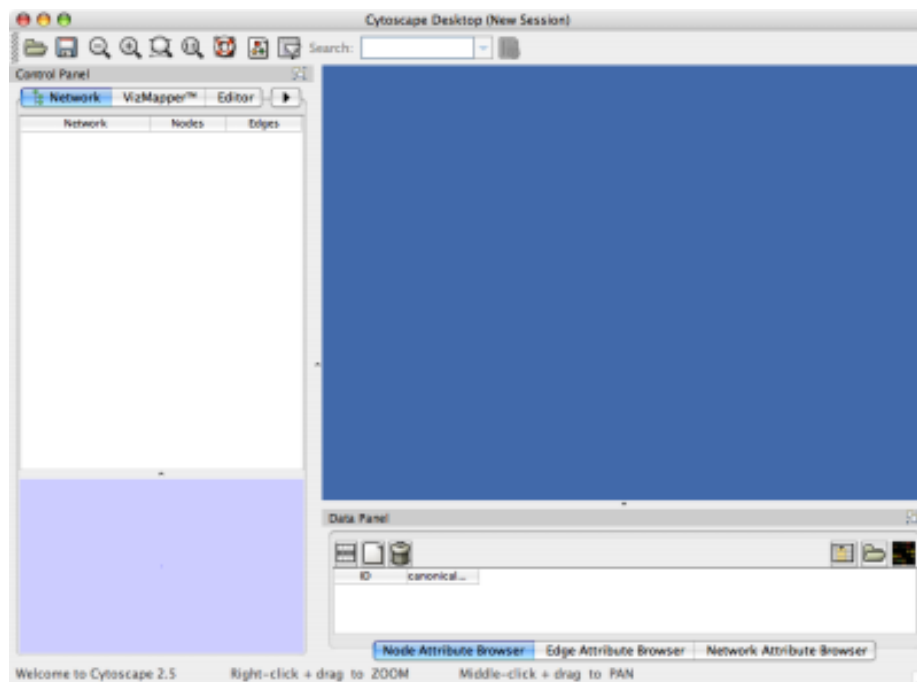


图 1.1: Cytoscape启动界面

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 (stack 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。

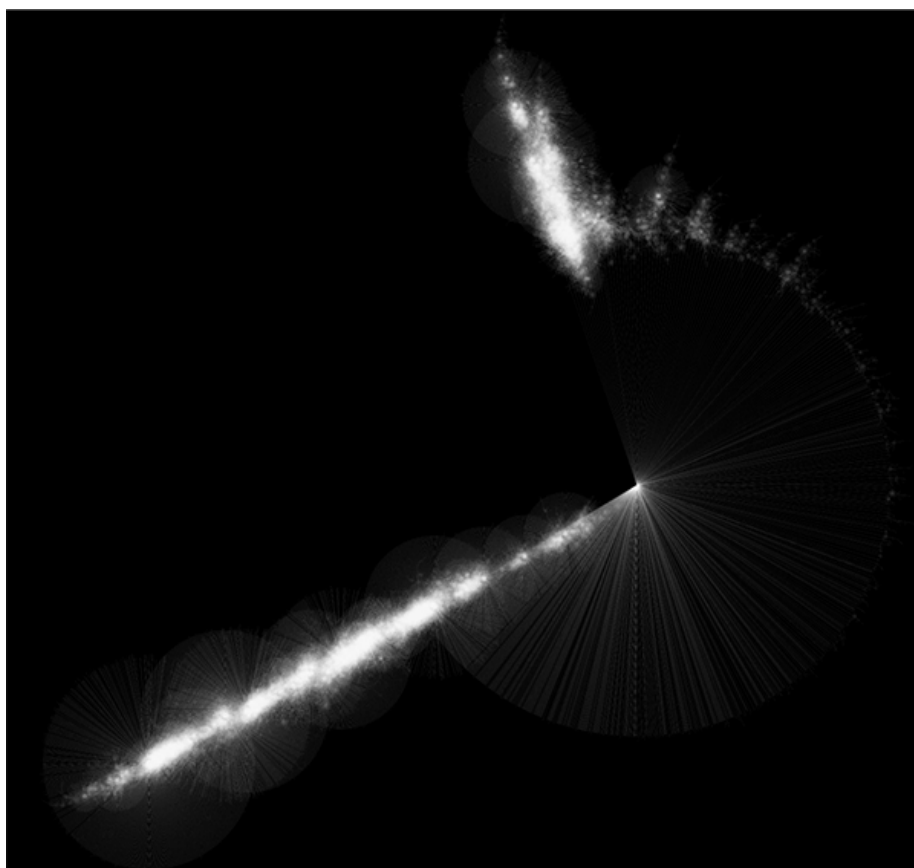


图 1.2: 随机生成的scale-free网络，含有500K个节点和500K条边：如果正确地设置了内存参数，就能看到这个庞大的网络。在这个例子中，Cytoscape 大约使用了 5GB 内存。堆栈的大小是10MB。如果要使用大内存（大于4GB），就需要64位的操作系统和64位的Java SE 5或6。

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](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

加载了网络之后，Cytoscape的界面如图 2.1 所示。

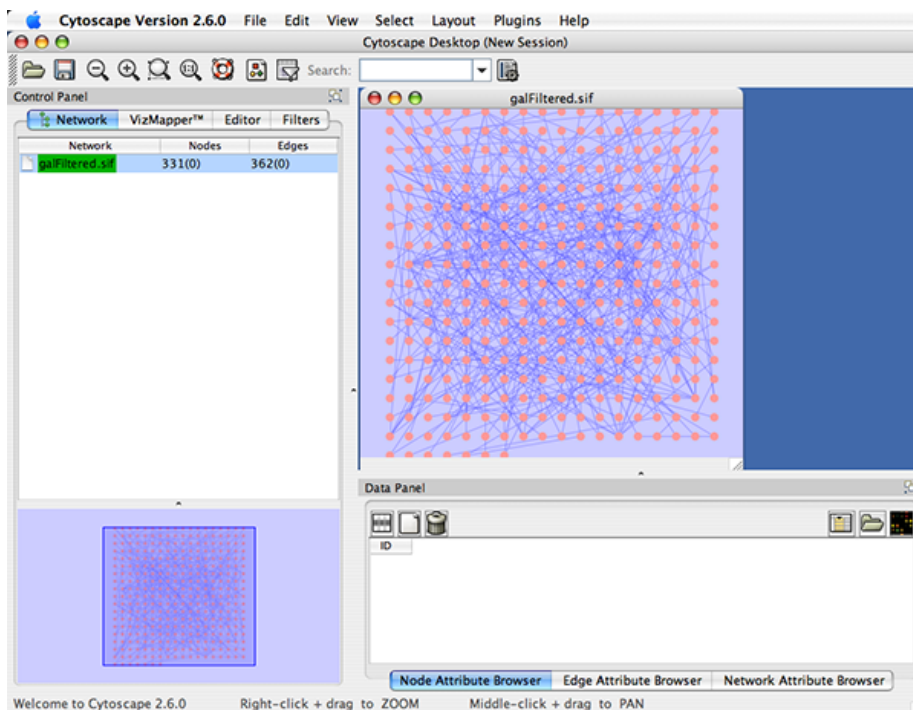


图 2.1: Cytoscape加载网络后的界面截图

主界面由多个组件构成，包括：

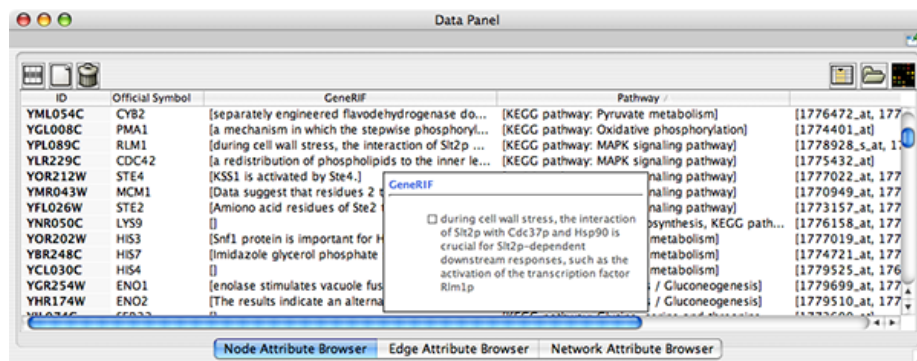
- 顶部的菜单（稍后会对各个菜单做详细介绍）。
- 工具栏，包含了各种常用功能。从菜单中也能使用这些功能。鼠标指针在这些图标上停留片刻就能看到有关的提示。
- 网络管理面板（左上方的面板）。其中有可关闭的网络全局浏览面板（左下方）。
- 网络查看主窗口，网络就显示在这个窗口中。
- 属性浏览器面板（底部的面板），显示所选择的节点和边的属性。在这个面板中还可以对这些属性的值进行修改。

网络管理和属性浏览器面板是可以拖拽的标签面板，被称为 CytoPanels 。



通过点击 CytoPanel 右上角的浮动窗口（Float Window）控件 可以将这些面板设为浮动状态。

如果选择了这个控件，例如属性浏览器面板上的这个控件，就会出现两个 Cytoscape 的窗口，一个是主窗口，另一个是名为 CytoPanel 2 的新窗口，如下图所示。当鼠标指针指向单元格时，会看到弹出信息。



在图中可以看到，CytoPanel 2 现在有一个 Dock Window 控件。如果点选这个控件，这个窗口就会回到主窗口中。

Chapter 3

命令行参数