

biocluster开发流程规范

——何胜 2016.7.18



- tool&agent开发和测试
 - 软件安装
 - files
 - packages
 - tool&agent开发
 - api
 - 测试
 - 常见问题
- module&workflow开发和测试
 - workflow
 - module
 - 常见问题

- controller网页接口开发和测试
 - 网页投递流程与mongo数据库
 - 即时 (instant) 模式
 - 投递 (submit) 模式
 - 测试
 - 开启端口
 - post数据
 - 常见问题



- ~/app/ # app目录下用于安装所有软件
- bioinfo #生信软件安装目录
- database #数据库存放目录
- gcc #gcc编译器目录
- install_packages #软件安装包存放目录
- library #库文件目录
- program #其他软件程序安装目录(包括python、perl、R、java等)
- 软件安装流程:
 - 安装包下载到install_packages,当前路径解压
 - 咨询邱萍(余果)安装到特定目录下编译安装
 - 不要添加任何环境变量
- python包的安装:
 - 尽量使用源码编译,安装包也放在install_packages



常见软件/包的安装方式:

- 普通软件
 - cd 到软件目录,请务必仔细阅读README文件,很多情况不遵循下面的安装方式
 - ./configure -h #运行配置程序,查看所有可配置选项
 - ./configure --prefix=/to/your/target/dir # 配置安装时的目的路径等等,检查安装可行性(有时需要在目的文件夹运行软件安装包中的configure程序),生成make 文件
 - make #编译程序,生成可执行文件
 - make install # 安装软件程序到目标目录
- python包的安装:
 - 1. 在源码安装包解压后,在目录下使用python set_up.py install进行安装,安装到当前python的第三方包处
 - 2. 直接使用pip install 包名,自动安装完



常见软件/包的安装方式:

- 普通软件
 - cd 到软件目录,请务必仔细阅读README文件,很多情况不遵循下面的安装方式
 - ./configure -h #运行配置程序,查看所有可配置选项
 - ./configure --prefix=/to/your/target/dir # 配置安装时的目的路径等等,检查安装可行性(有时需要在目的文件夹运行软件安装包中的configure程序),生成make 文件
 - make #编译程序,生成可执行文件
 - make install # 安装软件程序到目标目录
- python包的安装:
 - 1. 在源码安装包解压后,在目录下使用python set_up.py install进行安装,安装到当前python的第三方包处
 - 2. 直接使用pip install 包名,自动安装完



- perl包安装:
 - cd到包解压目录,看说明,一般情况如下
 - perl Makefile.PL
 - make test # 可选
 - make install
 - 或者直接使用cpan-i包名,自动安装
- R包的安装:
 - R CMD INSTALL --byte-compile(可选) R模块的压缩包
 - 或者,进入R的控制台:
 - install.packages("包名称", dependencies=TRUE)
 - install.packages("安装压缩包", repos=NULL, type="source")

tool&agent开发和测试—files



只有当文件会作为tool的输入文件时需要写file类型命名:文件名:blast_xml.py>>类名:BlastXmlFile

```
def check(self):
                                                                                                 重写dhedk方法
from biocluster.iofile import File
                                                                         检测文件是否满足要求,发生错误时应该触发FileError异常
from biocluster.core.exceptions import FileError
from Bio.Blast import NCBIXML
                                                                         if super(BlastXmlFile, self).check():
class BlastXmlFile(File):)
                                                                             blastxml = NCBIXML.parse(open(self.path))
  定义blast+比对输出类型为5结果文件的xml格式, 测试blast+为2.3.0版本
                                                                             try:
                                                                                 blastxml.next()
                                                                             except ValueError:
     super(BlastXmlFile, self).__init__()
                                                                                 raise FileError('传入文件类型不正确,无法解析,请检查文件是否正确,或者生成文
  def get_info(self):
                                                                             except Exception as e:
                                                                                 raise FileError('未知原因导致blastxml文件解析失败:{}'.format(e))
     获取文件属性
                                                                             return True
     super(BlastXmlFile, self).get_info()
     blast_info = self.get_xml_info()
     self.set property('query num', blast info[0])
                                                                       def convert2table(self, outfile):
     self.set property('hit num', blast info[1])
                                                                            """调用packages中的xml2table方法来转换到table格式"""
     self.set property('hsp num', blast info[2])
                                                                            from mbio.packages.align.blast.xml2table import xml2table
  def get xml info(self):
                                                                            xml2table(self.path, outfile)
     获取blast结果xml的信息
     :return
```

tool&agent开发和测试—files—测试



测试: 本地可直接测试基本功能

```
if __name__ == '__main__': # for test
    a = BlastXmlFile()
    # a.set_path('C:\\Users\\sheng.he.MAJORBIO\\Desktop\\annotation\\annotation\\NR\\transcript.fa_vs_nr.blasttable.xls')
    a.set_path('C:\\Users\\sheng.he.MAJORBIO\\Desktop\\annotation\\annotation\\NR\\transcript.fa_vs_nr.xml')
    a.check()
    a.get_info()
    a.convert2table('C:\\Users\\sheng.he.MAJORBIO\\Desktop\\test.xls')
```

tool&agent开发和测试—packages



使用相对自由的功能函数

- 1. tool中的实际计算函数,必须占用较少的资源
- 2. tool/module中常被公用的处理功能函数

注意:

- packages如果消耗资源很多,尽量写成脚本文件放在软件安装处
- 不要使用绝对路径,config对象提供app目录的路径
- 需要使用r模板之类的文件(当python需要执行大段R代码或者其他语言的代码,而该代码中需要python处理数据信息时,务必使用模板库,例如mako,保证代码整洁可读),使用os.path.realpath(__file__)获取当前文件夹路径,同样不要使用绝对路径
- packages作为相对自由的函数,可以在python控制台中直接测试, import函数对象,测试函数功能



```
class BlastAgent(Agent):
   ncbi blast+ 2.3.0 注意: 在outfmt为6时不按照ncbi格式生成table,而是按照特殊的表头类型,参见packages.align.blast.xml2table
   version 1.0
   author: shenghe
   last modify: 2016.6.15
   def init (self, parent):
       super(BlastAgent, self). init (parent)
       self. fasta type = {'Protein': 'prot', 'DNA': 'nucl'}
       self._blast_type = {'nucl': {'nucl': ['blastn', 'tblastn'],
                                  'prot': ['blastx']},
                          'prot': {'nucl': [],
                                  'prot': ['blastp']}}
       self._database_type = {'nt': 'nucl', 'nr': 'prot', 'kegg': 'prot', 'swissprot': 'prot', 'string': 'prot'}
       options = [
           {"name": "query", "type": "infile", "format": "sequence.fasta"}, # 输入文件
           {"name": "query_type", "type": "string"}, # 輸入的查询序列的格式, 为nucl或者prot
           {"name": "database", "type": "string", "default": "nr"},
           {"name": "outfmt", "type": "int", "default": 5}, # 輸出格式, 数字遵从blast+
           {"name": "blast", "type": "string"}, # 设定blast程序有blastn, blastx, blastp, tblastn, 此处需要严格警告使用者必须选择正确的比对程序
           {"name": "reference", "type": "infile", "format": "sequence.fasta"}, # 参考序列 选择customer 时启用
           {"name": "reference_type", "type": "string"}, # 参考序列(库)的类型 为nucl或者prot
           {"name": "evalue", "type": "float", "default": 1e-5}, # evalue值
           {"name": "num threads", "type": "int", "default": 10}, # cpu#
           {"name": "num_alignment", "type": "int", "default": 500}, # 序列比对最大输出条数。默认500
           {"name": "outxml", "type": "outfile", "format": "align.blast.blast xml"}, # 輸出格式为6时輸出
           {"name": "outtable", "type": "outfile", "format": "align.blast.blast table"}, # 輸出格式为5时輸出
       self.add option(options)
       self.step.add_steps('blast')
       self.on('start', self.step start)
       self.on('end', self.step_end)
```

```
def step_start(self):
self.step.blast.start()
self.step.update()
def step_end(self):
self.step.blast.finish()
self.step.update()
```



- 目录与命名: tool需要建立或放在相对应的目录,文件名称小写,下划线分割单词,Agent/Tool的命名使用驼峰命名法,单词首字母大写加上父类名称,例如: distance_calc.py >> DistanceCalcAgent/Tool
- add_option: option为一个列表,包含元素为字典,字典的键为name、type、default(infile/outfile之外可有)、format(infile/outfile类型独有)
 - type: 为字符串类型。有int, float, string, infile, outfile
 - format: files目录下的路径,可以为多个不同的文件类型,用逗号分隔,例如: align.blast.blast_table, align.blast.blast_xml
- step: tool运行的步骤状态,通过add_steps的方式添加,可同时添加多个,具体步骤(step)对象有start和finish的方法,用于添加步骤信息,主步骤的update方法用于发送前端步骤信息。
- on: 使用绑定,第一个参数为事件名称,第二个为绑定函数对象,第 三个为函数参数,函数参数的使用不同于一般参数,后续细讲



```
def check options(self):
   if not self.option("query").is_set:)
       if self.option('query_type') not in ['nucl', 'prot']:
       raise OptionError('query type查询序列的类型为nucl(核酸)或者prot(蛋白):{}'.format(self.option('query type')))
       if self._fasta_type[self.option('query').prop['seq_type']] != self.option('query_type'):
           raise OptionError(
              '文件检查发现查询序列为:{}, 而说明的文件类型为:{}'.format(
                  self. fasta type[self.option('query').prop['seq type'], self.option('query type')]))
   if self.option("database") == 'customer_mode':)
       if not self.option("reference").is set:
          raise OptionError("使用自定义数据库模式时必须设置reference")
       if self.option('reference type') not in ['nucl', 'prot']:
           raise OptionError('reference_type参考序列的类型为nucl(核酸)或者prot(蛋白):{}'.format(self.option('query_type')))
           if self._fasta_type[self.option('reference').prop['seq_type']] != self.option('reference type'):
              raise OptionError(
                  '文件检查发现参考序列为:{}, 而说明的文件类型为:{}'.format(
                     self._fasta_type[self.option('reference').prop['seq_type'], self.option('reference_type')]))
   elif self.option("database").lower() not in ["nt", "nr", "string", 'kegg', 'swissprot']:
       raise OptionError("数据库%s不被支持" % self.option("database"))
       self.option('reference_type', self._database_type[self.option("database").lower()])
   if not 15 > self.option('outfmt') > -1:)
       raise OptionError('outfmt遵循blast+输出规则,必须为0-14之间: {}'.format(self.option('outfmt')))
   if not 1 > self.option('evalue') >= 0:
       raise OptionError('E-value值设定必须为[0-1)之间: {}'.format(self.option('evalue')))
   if not 0 < self.option('num alignment') < 1001:</pre>
       raise OptionError('序列比对保留数必须设置在1-1000之间:{}'.format(self.option('num_alignment')))
   if self.option('blast') not in self._blast_type[self.option('query_type')][self.option('reference_type')]:
       raise OptionError(
           ・程序不试用于提供的查询序列和库的类型,请仔细检查,核酸比对核酸库只能使用blastn或者tblastn,\
           核酸比对蛋白库只能使用blastp, 蛋白比对蛋白库只能使用blastp, 或者没有提供blast参数')
   return True
```

- 重写check_options方法: 检查tool运行时传入的参 数是否合理和逻辑关系, 以确保tool能够正确运行
- 不可消耗过多资源和大量计算
- 检查出错raise OptionError("错误信息")



注意:

- self.option("参数名")如果是infile,可以有is_set的属性,检查是否提供该文件。
- self.option("参数名")如果是infile/outfile(结束后设定),返回的是文件对象,具有prop的属性是一个字典。由file中的set_property添加,已有size和md5。path属性为文件路径。
- self.option("参数名")不是文件时直接返回该值,值为设定的类型
- infile在参数传入时自动调用了check方法,但是并没有自动调用get_info方法(如果 check中调用了get_info则另当别论),以节省不必要的计算资源浪费。所以在使用 prop属性前,务必确认,get_info已经被调用



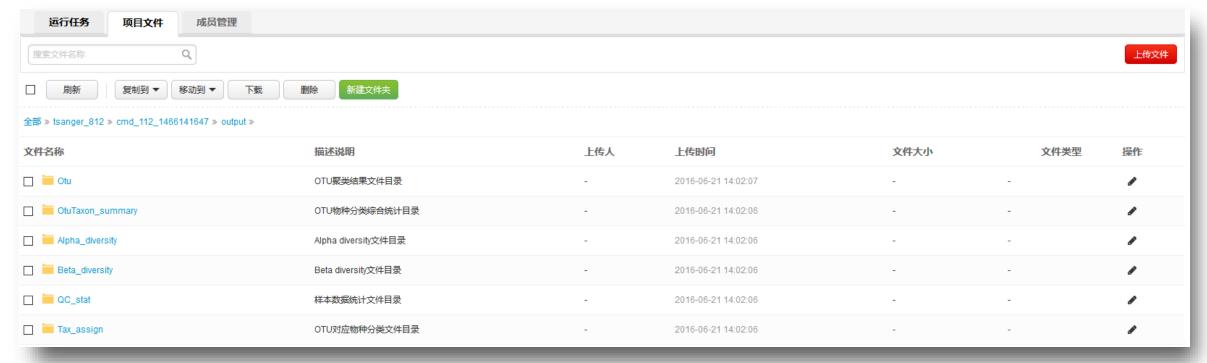
资源设定:必须重写set_resource,cpu至少为1,memory设置为自由容量单位,如"100M"或者"10G"。软件需要测试,了解资源消耗。如果和输入文件大小等有关,请进行测试,估算资源消耗随文件大小变化的规律。

java等程序可以指定程序需求资源,此处资源请求不得少于程序运行设置。

```
def set_resource(self):
   self. cpu = 10
   self. memory = ''
def end(self):
   result dir = self.add upload dir(self.output dir)
   result dir.add relpath rules([
  ----[".", "", "结果输出目录"],
   result_dir.add_regexp_rules([
      [r".+_vs_.+\.xml", "xml", "blast比对输出结果, xml格式"],
      -[r".+_vs_.+\.xls", "xls", "blast比对输出结果,表格(制表符分隔)格式"],
      ·[r".+_vs_.+\.txt", "txt", "blast比对输出结果,非xml和表格(制表符分隔)格式"],
     - [r".+_vs_.+\.txt_\d+\.xml", "xml", "Blast比对输出多xml结果,输出格式为14的单个比对结果文件,主结果文件在txt文件中"],
      [r".+_vs_.+\.txt_\d+\.json", "json", "Blast比输出对多json结果,输出格式为13的单个比对结果文件,主结果文件在txt文件中"],
   super(BlastAgent, self).end()
```



上传结果与上传结果文件信息:文件被上传到特定网盘位置。用于网页显示结果文件,提供下载。



实际路径:

/mnt/ilustre/192.168.12.102/rerewrweset/files/m_160/10000411/tsanger_822/cmd_112_1466478373/output 网盘文件目录、用户id、project_sn、task_id、stage_id(一个任务下的子id没有实际使用)



- add_upload_dir(目录) #添加需要上传的目录,返回上传对象
- add_relpath_rules #上传对象添加目录下完整相对路径信息规则
- add_regexp_rules #上传对象添加目录下正则表达式匹配路径信息规则

注意:

- 列表的第一个元素为匹配名称规则,第二个元素为文件类型(没有实际意义,文件夹时为空),第三个元素为文件描述
- 先匹配正则表达式规则,后匹配完整路径规则,所有文件对一个规则进行匹配,整体结果是后匹配上生效

tool&agent开发和测试—tool&agent开发—tool



- 软件目录: 使用self.config.SOFTWARE_DIR表示app目录
- 设置环境变量: set_environ, 当软件运行需要特定的其他软件或者库文件时, 需要设置环境变量, 具体参考软件说明。设置方法例如: self.set_environ(LD_LIBRARY_PATH=self.config.SOFTWARE_DIR + 'gcc/5.1.0/lib64')
- 工作目录: self.work_dir(工作目录), self.output_dir(输出结果目录)
- run: 重写run方法, run函数中运行tool计算的实际部分

tool&agent开发和测试—tool&agent开发—tool



```
blast_command = self.add_command("blast", cmd)¤¬
blast_command.run()¤¬
self.wait()¤¬
if blast_command.return_code == 0:¤¬
```

- 命令字符串应该从app目录后起,add_command自动添加app前的目录
- add_command方法返回command对象,对象的run方法运行命令。
- self.wait()运行等待所有command运行结束。
- self.wait()参数为command名称,可以为多个,等待特定commands完成。
- command对象需要检查return_code是否为0,绝多数情况,程序正常结束结果为0

注意:

- 尽量使用add_command而不是使用其他方式(subprocess等)运行命令
- 在命令中有'|','、'、','等号时不可使用add_command,可以使用subprocess方法或者其他多进程方法,同样需要检查是否正确结束。
- packages函数的使用计算量小的可以直接执行,也可以单开进程和线程运行,大计算量的写成脚本用add_command的方式运行脚本

tool&agent开发和测试—tool&agent开发—tool



- 结果文件可能成为其他tool等的输入,使用self.option('name', file_path)赋值,请勿使用self.option('name').set_path(file_path),前者具有文件检查的功能。
- run的结束必须为set_error("错误信息")或者是end(),一般情况在判断程序是否正常结束后选择。
- 结果文件必须拷贝到输出目录下,大文件放到结果目录务必使用链接的方式(os.link)
- 结果文件尽量按用户可识别文件格式标识后缀,例如,制表符分隔的表格文件以.xls为后缀

tool&agent开发和测试—api



database:将tool等的结果数据导入mongo数据库,后续细讲to_file:将mongo数据库中的数据转成tool实际计算需要的文件,后续细讲web:向web端传递任务信息(step, upload_dir信息等)

tool&agent开发和测试—测试



- 只能运行workflow: 只有workflow可以接收参数
- sheet对象: workflow的参数形式
- 使用singleworkflow:接收sheet参数,根据type运行模块
- 结果目录: ~/workspace/日期/Single_json中的id,
- 错误信息查看:主目录和tool目录下的log.txt,tool目录下的.err文件和.out 文件,还有屏幕。查错请在log中写入适当的信息

```
"id":"blast001",

"type": "tool",

"name": "align.ncbi.blast",

"options":{

"query":"/mnt/ilustre/users/sanger/sgBioinfo/shenghe/test_file/small_trinity.fasta",

"query_type":"nucl",

"database":"string",

"blast": "blastx"

}

wsheet = Sheet("path/to/single_blast_1.json")

wf = SingleWorkflow(wsheet)

wf.run()
```

tool&agent开发和测试—测试



使用logger:

- 日志对象,用于向屏幕和特定文件以特定的格式写入运行信息
- 信息分四个等级: debug、info、warning、error
- 一般情况下只用info
- 记录程序运行状态进度,用于调试打印关键值

tool&agent开发和测试—常见问题



- 不要改变传入的参数对象
- 在使用文件属性时确认已经get_info
- add_command会自动添加路径到app目录,这个路径尾部没有'/'
- 所有路径, self.workdir, self.config.SOFTWARE_DIR等尾部都没有'/',使用'+'时需要注意,最好使用os.path.join()



- add_tool/add_module方法:给workflow添加一个子tool(实际是agent)/module,并返回该对象,对象在set_options(字典:参数名为键,参数值为值,值可以为文件对象,即其他tool的outfile)后可以通过该对象的run方法,运行该tool(agent)/module
- run方法: super父类(即workflow)的run方法必需在run的结尾处,因为该方法是阻塞的。

强调: tool等的run方法是不阻塞的



- 依赖:
 - on: 方法参数有三个,第一个为事件名称,第二个是绑定处理函数对象,第三个是函数对象的参数,必须为简单的python对象。处理函数不能直接获取到参数,需要处理函数的第一个参数接收一个字典对象,字典的键为data的值为参数,而bind_object键的值为绑定的对象,依赖必须在tool/module/workflow运行之前
 - on_rely: 至少两个tool等的end事件触发一个函数对象,与on一样的方式获取参数



- database: 需要使用api/database下的对象将结果文件写入mongo库
 - 继承于biocluster.api.database.base Base
 - self.db为需要写入的mongo数据库对象
 - *self.bind_object*有可能是运行的*workflow*对象,也可能是只有*workflow*一些基本属性的假对象。
 - 故只可以使用假对象的属性:
 - *id* # *task_id*
 - name #名称
 - workdir #工作目录
 - fullname #全称(加上父模块名称)
 - output #模块输出目录
 - *sheet* # workflow参数对象完整还原,主要信息可以在sheet中找到, 例如: project_sn, options等等



• database:

- 写入数据库函数必须提供一个参数, main(控制主表和detail表的写入)
- 主表:一个结果文件(结果表)的基本信息
- detail表:结果文件的拆分存放的内容表
- 函数必须返回主表id(ObjectId)



End:

- end: 在end之前需要将各个调用的子模块的结果放到worflow的output中,重写end方法时,需要在结尾super父类的end
- upload_dir: 需要上传文件,同样需要将结果文件上传,上传文件并不在 workflow 中运行,而是另外将上传信息写入mysql数据库中,由特定进程上传文件,可以使用clone_upload_dir_from(obj)克隆子模块的上传文件夹/文件信息
- 关于代码截停: IMPORT_REPORT_DATA, IMPORT_REPORT_AFTER_END 的参数同时为真,会使api-database对象的函数调用被不执行,在程序结束后再通过记录执行入库操作,一般情况下不需要使用,只有在入库数据量特别大时使用。
- 由于代码截停,入库操作函数返回值不可再workflow中使用,否则造成错误,但是可以在其他后续入库操作中使用。

module&workflow开发和测试—module



module和workflow的编写基本一致:

- 不同的地方在于super父类的run方法和tool一样,在run的开始
- 不需要写入数据库操作

module&workflow开发和测试—测试



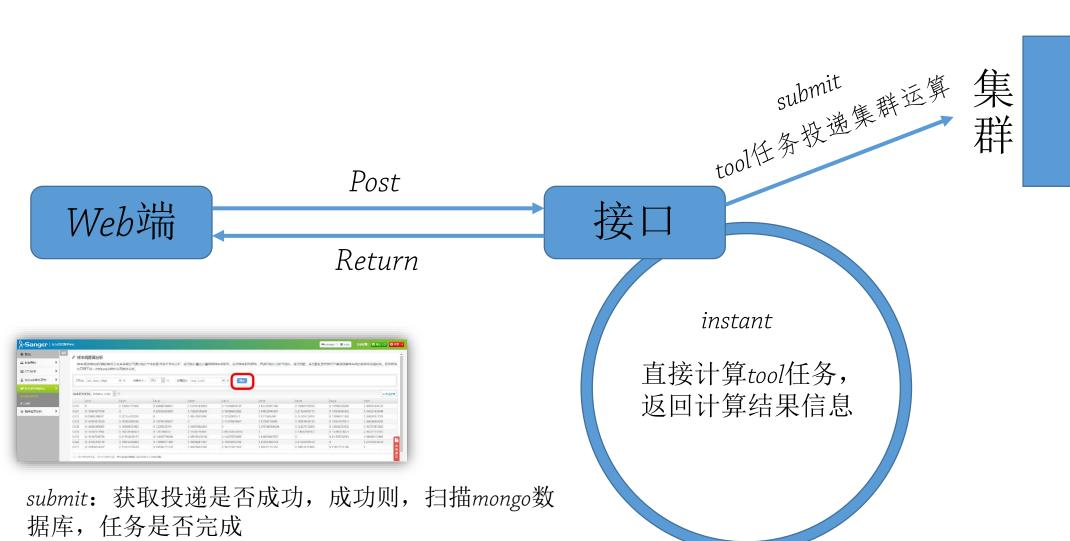
与tool同样的测试方式

module&workflow开发和测试—常见问题



controller网页接口开发和测试—网页投递流程与mongo数据库





放回计算结果信息,和结果在数据库存放

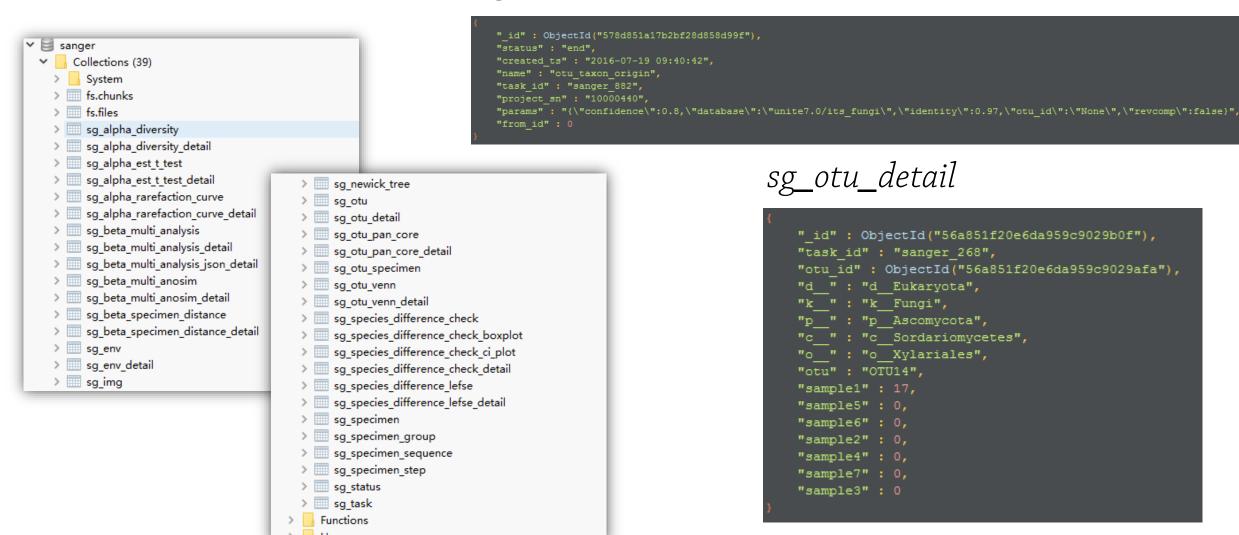
信息

controller网页接口开发和测试—网页投递流程与mongo数据库



mongo数据库:

sg_otu



sg_otu_detail

```
" id" : ObjectId("56a851f20e6da959c9029b0f"),
"task id" : "sanger 268",
"otu id" : ObjectId("56a851f20e6da959c9029afa"),
"d " : "d Eukaryota",
"k " : "k Fungi",
   ": "p Ascomycota",
"c " : "c Sordariomycetes",
"o ": "o Xylariales",
"otu": "OTU14",
"sample1" : 17,
"sample5" : 0,
"sample6" : 0,
"sample2" : 0,
"sample4" : 0,
"sample7" : 0,
"sample3": 0
```

controller网页接口开发和测试—即时(instant)模式—controller



controller:

- 对象继承自MetaController(只限于meta开发)
- Metacontroller是对post进来的内容进行了meta分析信息的检查,并获取基础信息: taskId、projectSn、memberId
- Metacontroller继承自webroot\mainapp\controllers\core\basic.py, basic提供了即时运行的基本设置
- super父类的post方法。返回值必须为空,否则返回前端success:false
- 检查模块需要的参数和参数逻辑。
- 设置运行workflow需要的sheet中的部分参数, self.task_name(name), self.options(options), self.to_file(to_file)。
- 使用run方法
- return returnInfo

注意:将写数据库必要的参数放在options中传入workflow

controller网页接口开发和测试—即时(instant)模式—controller



params:

- params需要将前端传入的参数打包成字符串存入mongo,主要用于参数比对,避免重复运行相同的任务,键参数名需要排序,不可有空格
- 一般情况下使用json.dumps(params_json, sort_keys=True, separators=(',', ':'))
- 特殊情况下,例如: group信息,内部同样需要排序

controller网页接口开发和测试—即时(instant)模式—workflow



与一般的workflow不同的是主表的id需要使用self.add_return_mongo_id()的方法,参数有三个:表名,id,说明描述

controller网页接口开发和测试—投递(submit)模式



controller:

- 没有任何继承
- post函数需要身份验证修饰器check_sig
- 检查参数和逻辑
- 需要获取*task_id*
- get_new_id #渊源为前端从交互分析发起的任务不认为是一个任务,而是基于原有任务的任务,后端为了区分,必须为新的任务生成新的id
- 获取member_id和project_sn生成特定的文件上传目标目录
- 写主表(包括params, 状态status为start)
- 写入mysql表任务信息(sheet信息等)
- return 投递成功信息

workflow:不需要写入主表,其他与即时模块相同

controller网页接口开发和测试—测试



- webroot\main.py(main_wsgi.py)
- 新的controller模块需要添加到main.py在main.py测试通过后,加入main_wsgi.py,例如:

from mainapp.controllers.instant.meta.beta.anosim import Anosim 在url中添加url指向

"/meta/beta/anosim", "Anosim"

- 开启信息接收端口: 1-65536, 自选较大的端口号,不可使用已被占用的端口号,例如80,22,24,3366,27017等,相互协调,不可重选例如: python main.py 8090
- 向端口发送测试数据: bin\webapitest.py

例如: python webapitest.py post meta/beta/anosim -c client01 -n

"otu_id;level_id;distance_algorithm;permutations;group_id;<mark>group_detail</mark>" -d

"56ce51860e6da9cf6bd716f3;8;pearson;999;56ce50430e6da9cf6bd716e9;/mnt/ilustre/users/sanger/sheng.he_test/group_test_post.txt" -b http://192.168.12.102:8090

controller网页接口开发和测试—常见问题



• 0