Ruby on Rails +10 のアイデア

--- KEGG on Rails の経験から得られた DB 構築のノウハウを中心に

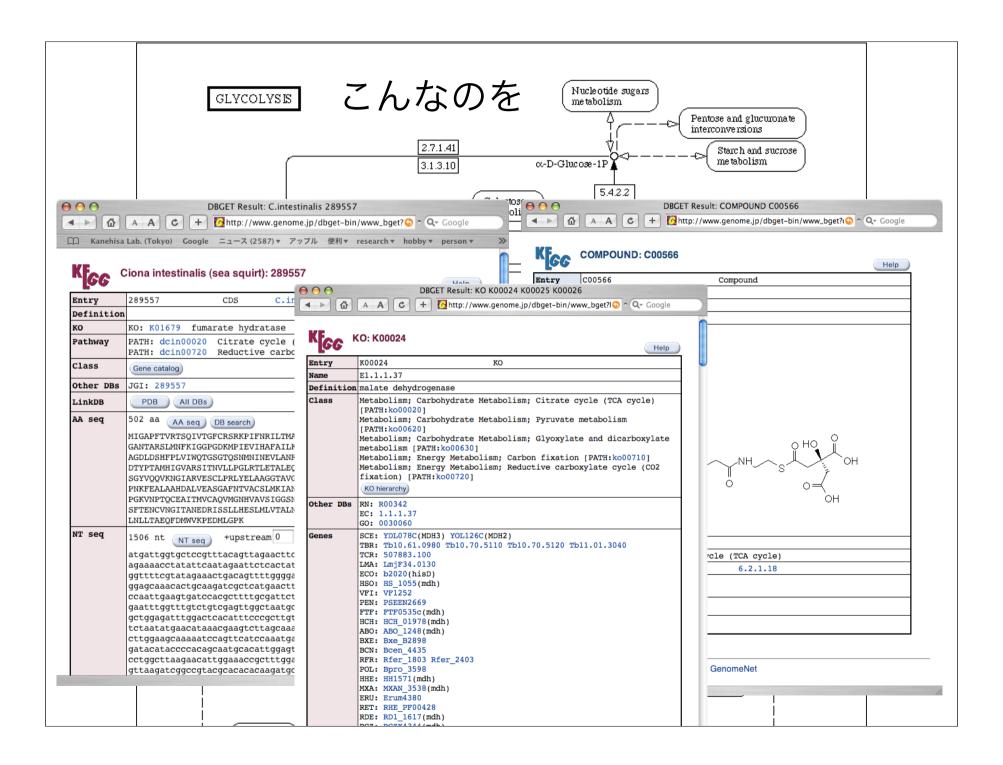
癸生川 絵里

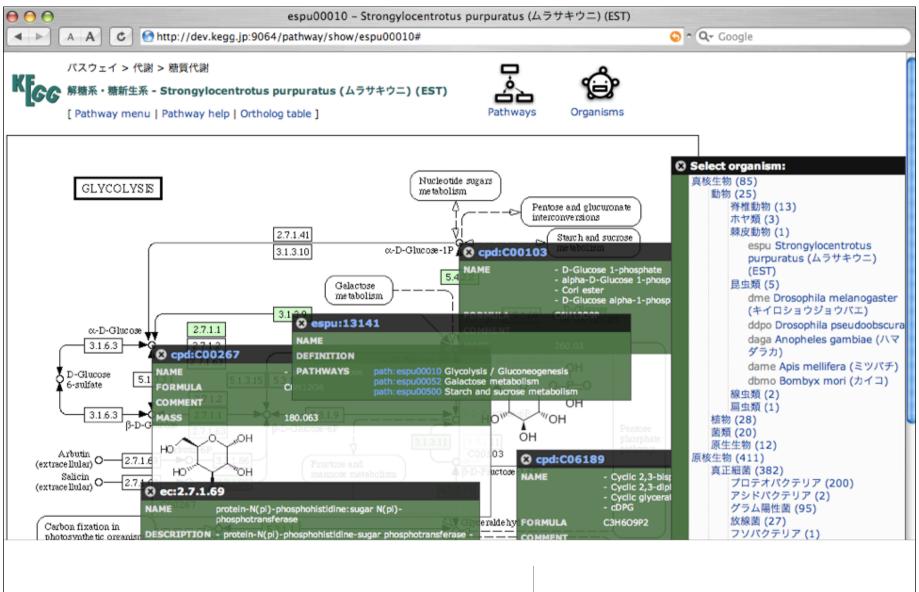
サイエンス・テクノロジー・システムズ株式会社

片山 俊明

東京大学 医科学研究所 ヒトゲノム解析センター ゲノムデータベース分野







こんな感じにしたい

E-Cell 3D には遠く及びませんが



レシピ

- 今回作るもの
 - KEGG on Rails
- 用意するもの
 - ftp://ftp.genome.jp/pub/kegg/ のミラー
 - Ruby on Rails
 - BioRuby
 - 癸生川さん

できあがったものが、ここにありm、、前のプレゼンです。♪ 3分間クッキング → 明日のハンズオンで試してみてください

KEGG on Rails 特徴概要

- KEGG を少しでも使いやすくするためのプロトタイプ(日本語化含む)
- FTP で公開されている KEGG のデータを利用
 - 公開データから KEGG の機能を再現
- Rails を利用し全データを正規化
 - 今後の開発のインフラ
- 特にパスウェイ部分について UI の改善
 - RJS による AJAX 実験場
 - ポップアップ
 - 階層型データ

Rails によるサイト構築の流れ

見た目(CSS) や UI(AJAX) などに凝る

```
% rails kegg
• DB 設計
                      % vi config/database.yml
  • スキーマを migration という仕組みで定義
                      % mysqladmin -u root create database kegg development
● 初期データをロード % ./script/general % rake db:migrate
                      % ./script/generate migration create kegg tables
  ● タブ切り、CSV、fixture、一個ずつ手で、などなど
                      % mysqlimport -u root kegg development `pwd`/linkdb.txt
モデルを生成
                      % ./script/generate scaffold pathway
                      % vi app/models/pathway.rb
● ビューを生成(HTMLのテンプレート)
                      % vi app/views/pathway/index.rhtml
コントローラを牛成(テンプレートに埋め込む値、ヘルパー)
```

% vi app/controllers/pathway controller.rb

% vi public/stylesheets/kegg.css

実際は、、

- ftp にすげ一時間がかかる
- 各データベースのフォーマットがうぜー
- えーっと habtm が多くて正規化できませんよ?
- きゃー Rails でイメージマップからのポップアップ、誰かやってないの?

rails ajax イメージマップ ポップアップ の検索結果 約 45 件中 1 - 10 件目 (0.16 秒)

- ◆ ぐはぁ、ツリー型のデータを閉じたり開いたりとか標準装備じゃないの?
- 日本語化っていうか UTF8 にしないと化けるし、、

ftp 問題

- KEGG のディレクトリ構成は取捨選択しないとミラーしにくい
 - 古いリリースがサブディレクトリに全部あったり
 - サブデータベースごとにファイル名のポリシーが違うとか。
 - KGML はディレクトリ名にバージョン番号がついてたり
 - genome とか、ただのファイルが tarfiles/ の下にあったり
 - size0 というサイズ 497801 bytes のファイルが転がっていたり
- ともあれ、丸1日~数日くらいかければ取れます
 - 選べば半日、必要なものを知っていればすぐかも

```
% lftp ftp://ftp.genome.jp/pub/kegg/
ftp> mirror -e ligand
ftp> mirror -e pathways
ftp> mirror -e genomes
ftp> mirror -e brite
ftp> lcd xml
ftp> cd xml
ftp> mirror -e KGML_v0.6.1
```

KEGG 独自フォーマット問題

- かたくなに、伝統的なフラットファイル形式を採用
 - 毎週の会議でタグが増えたり減ったりフォーマットはコロコロ変わる
 - HTML ファイルにまで DBGET 用のヘッダがついていたり

- とりあえず BioRuby でがんばる
 - KGML
 - GENES
 - GENOME
 - ENZYME
 - COMPOUND ...

```
<html>
<!---
ENTRY     zmo03070

DEFINITION     Type III secretion system - Zymomos
--->
<head>
     :
</body>
<!---
///
--->
</html>
```

habtm 問題

>> enz.save

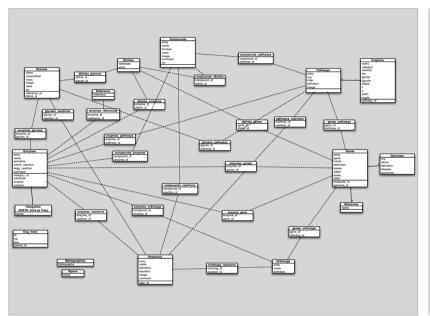
- has_and_belongs_to_many
 - ある COMPOUND は複数の ENZYME に代謝される
 - ある ENZYME は複数の COMPOUND を代謝する

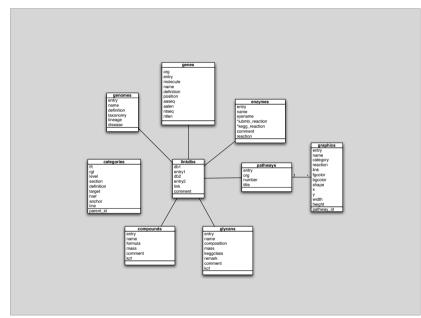
```
>> Compound.dbentry("cpd:C00005").enzymes
=> ["ec:1.13.11.20", "ec:1.14.99.3", "ec:1.14.99.9"]
>> Enzyme.dbentry("ec:1.13.11.20").compounds
=> ["cpd:C00097", "cpd:C00007", "cpd:C00606", "cpd:C00004", "cpd:C00005", "cpd:C00002
```

どっちのデータベースから先にロードすればいいのでしょうか

```
>> enz = Enzyme.create(:entry => "ec:1.13.11.20") ← 新しい ENZYME を保存するとき
>> cpd = Compound.find_by_entry("C00005") ← すでに COMPOUND があれば
>> enz.compounds << cpd ← 探してきて関係を追加できるが、、
```

しかも↑これ、実はこのまま頑張ってもすげ一遅い





LinkDB 使用前・使用後(新旧スキーマ図)

-- 複雑すぎる habtm はデータのインポートがかなり遅くなる

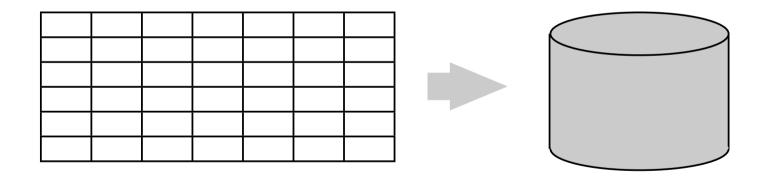


メニュー (ウェブなどで参考例を見つけきれなかったテクあり口)

- タブ区切りファイルのロード
 - **1.** 第 1 カラム目が ID ではないタブ切りファイルをロードする技
 - 2. セルに改行が含まれているエクセルファイルをやっつける技
- Rails + AJAX でポップアップ
 - 3. イメージマップを AJAX 呼び出しに変更しポップアップを牛成する技
 - 4. ポップアップの表示位置を画像からの相対座標で指定する技
 - 5. ポップアップを半透明やドラッグ可能にする技
- Rails + AJAX でツリー構造を扱う
 - 6. acts as nested set を acts as tree としても使いたい
 - **7.** サブツリーの開閉を AJAX で行う方法
- 定型のタスクは rake に集約
 - 8. タスクを namespace に分ける方法
 - 9. 複数のタスクに共通の処理はメソッドに
- ActiveRecord のモデルは Ruby のクラスでもある
 - 10.モデルにもガシガシと都合の良いメソッドを追加する

タブ区切りファイルのロード

- よくある Excel で作られた表のデータベース化の依頼とか
- 2000万件 SQL 発行するより mysqlimport (LOAD LOCAL) の方が速いとか



1. 第 1 カラム目が id ではないタブ切りファイル

- Rails のデフォルトはテーブルの第 1 カラムが id という名前の auto_increment
 - でも、ふつ一身の回りのタブ切りテキストにそんなものはついていない!
- mysqlimport する前にデータをいじって空の 1 カラム目を増やす(ありがち)

1. 第 1 カラム目が id ではないタブ切りファイル

• 巨大であるとかの理由でデータファイルをいじりたくない場合もある

```
def self.up
                                     mysql> desc hoges;
   create table :hoges do |t|
     t.column :foo, :string
                                        id | primary key
     t.column :bar, :integer
                                       foo | string
     t.column :gee, :text
                                             integer
                                       bar
   end
                                       gee
                                             text
 end
● 単純に id を最後のカラムにしたらいいんじゃん?
 def self.up
                                     mysql> desc hoges;
   create table :hoges do |t|
     t.column :foo, :string
                                       foo | string
     t.column :bar, :integer
                                       bar | integer
     t.column : gee, :text
                                       qee
                                             text
   end
                                             primary key
   remove column :hoges, :id
   add column :hoges, :id, :primary key
 end
```

注:ただし、db/migrate/*.rb が db/schema.rb にまとめられる際には技が消える orz

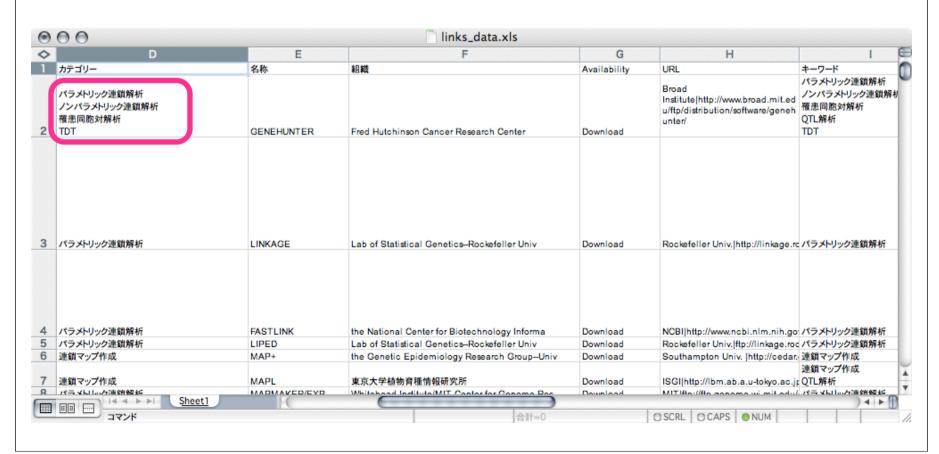
1. 第 1 カラム目が id ではないタブ切りファイル

• :id => false にしておいて add_column でいいのかも by 中尾さん

```
def self.up
  create_table :hoges, :id => false do |t|
    t.column :foo, :string
    t.column :bar, :integer
    t.column :gee, :text
  end
  add_column :hoges, :id, :primary_key
end
```

2. セルに改行が含まれる Excel ファイル

- 送られてきた Excel ファイルが、セル内に改行を含む場合
 - タブ切りで保存しても、通常の 1 行ずつ読み込む処理をするとコケる



2. セルに改行が含まれる Excel ファイル

• 最後のカラムにダミーのありえない文字列 %dummy% を入れておく

	Н	I	J	K	L	M	N	0	Р
URL		キーワード	特徴	論文名	引用数	引用数取得日	ツールアップデート日	%dummy%	
	//www.broad.mit.ed ion/software/geneh	パラメトリック連鎖解析 ノンパラメトリック連鎖解析 罹患同胞対解析 QTL解析 TDT	比較的小さな家系。 多数座位の取扱が可能。 (Lander-Green- Kruglyakアルゴリズム)	Parametric and nonpa	1729	10.05.06	05.07	D1 %dummy%	
Rockefeller l	Jniv.lhttp://linkage.ru	: パラメトリック連鎖解析	家系について汎用。 比較的少ない座位。(5座 位程度まで) (Elston-Stewartアルゴリ ズム) 複数のプログラムからなる パッケージ。 汎用バージョンとCEPH用 バージョンがある。		745	10.05.06		93 %dummv%	
		パラメトリック連鎖解析	家系について汎用。 比較的少ない座位。(5座 位程度まで) (Elston-Stewartアルゴリ ズム) 複数のプログラムからなる パッケージ。			10.05.06		05 %dummy%	
Rockefeller U	Jniv. ftp://linkage.roo	パラメトリック連鎖解析	家系について汎用。2座位。	Estimation of the recor	241	10.05.06	08.21	02 %dummy%	
	univ. http://cedar.		多数マーカー間の組み換え	Counting algorithms fo	1	10.05.06		01 %dummy%	
	m.ab.a.u-tokyo.ac.j	連鎖マップ作成 QTL解析 パラストリック連鎖解析	多数マーカー間の組み換え		0	10.05.08		04 %dummy%	

2. セルに改行が含まれる Excel ファイル

タブ切りテキストで保存して置換する

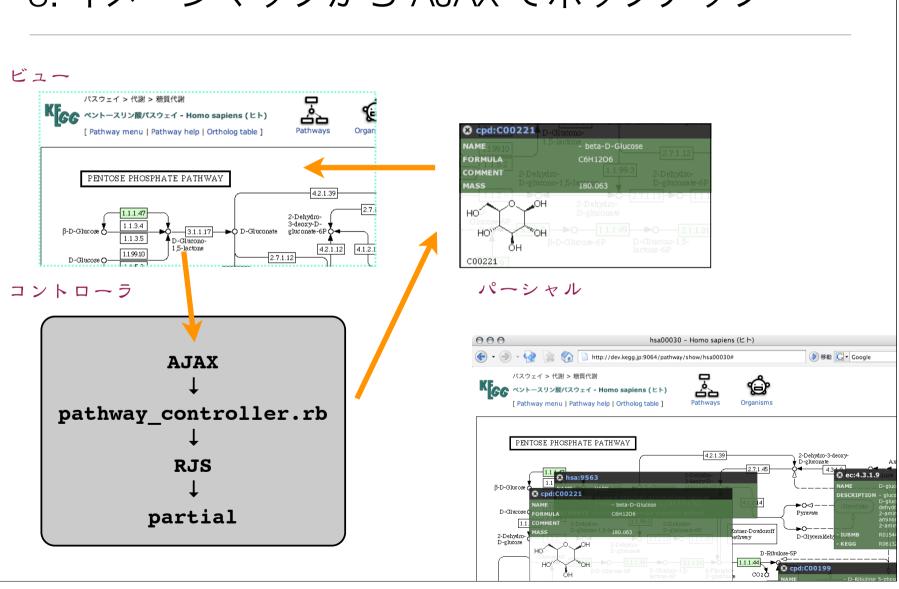
```
% perl -pe 's/[\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac}\f{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\frac{\fraccc}\frac{\frac{\frac
```

- ま、中身いじらないなら CSV のまま突っ込んでもいいわけですが、 ちまたのデータは他にもいろいろ前処理が必要だったりします
 - 日付のフォーマットレコードごとに 2002.8.21 とか 05.31.93 とか 2005/2 とか、妙にバラバラだったり
 - セルごとに漢字コードが違っていたり
 - どーやって作ったのか?!

Rails + AJAX でポップアップ

- HTML に隠し <div> で埋め込んどいて JavaScript でやればいいじゃん
 - <div> が巨大になると効率が悪い
 - JavaScript を書きたくない (^^;
 - Rails では RJS を使うと細かいチューニングも簡単
- AJAX (Asynchronous JavaScript and XML)
 - ページ (DOM) の一部を JavaScript の非同期通信で更新
 - ウェブの操作性を一変 アプリ化 (Google maps, docs, Yahoo pipes, etc.)
- RJS Template (Rails JavaScript Template?)
 - Ruby のコードから JavaScript を自動生成、誰でも AJAX が書ける

3. イメージマップから AJAX でポップアップ



3. イメージマップから AJAX でポップアップ

```
ビュー
 <div id="pathway">
 <img src="画像" usemap="#mapdata">
 <map name="mapdata">
 <area shape="rectangle" coords="100,100,200,200" href="#"</pre>
  onclick="<%= remote function(:url => {:action => 'popup', :entry => 'IID'}) %>">
 </map>
          "new Ajax.Updater('popup', '/pathway/popup?entry=hsa%3A1737', {asynchronous:true, evalScripts:true})"
 </div>
                                               パーシャル
コントローラ
 def popup
   @data = "ポップアップに表示するデータを用意"
                                                   app/views/pathway/ popup.rhtml に
                                                    @popup_id と data を変数として渡す
   @popup id = "エントリID"
   render :update do |page|
     page.insert html :bottom, "pathway", :partial => "popup"
     page[@popup_id].set_style :left => "X座標", :top => "Y座標"
   end
 end
```

4. 表示位置を相対座標で指定する技

• Prototype.js の makePositioned を利用



5. ポップアップを半透明やドラッグ可能にする技

• RJS なら <div> 単位で不透明度やドラッグ可能などの指定がたったの1行



```
<div id="child">
    moinmoin
</div>
render :update do |page|
    page["child"].set_opacity 0.9
    page.draggable "child"
end
```

注:ただし、Firefox や IE(Vistaも)では移動後不透明になるっぽい orz

Rails + AJAX でポップアップ まとめ

```
ビュー
                                 コントローラ
<div id="pathway">
                                  def popup
                                    Qdata = "ポップアップに表示するデータを用意"
<img src="<%=h @pathway image %>"
    usemap="#mapdata"
                                    @popup id = "ポップアップごとにユニークなIDをアサイン"
    border=0
                                    render :update do |page|
     id="keggmap">
                                     page['pathway'].make positioned
<map name="mapdata">
                                     x = params[:x].to i
<%- @graphics.each do |g| -%>
                                      y = params[:y].to i
<area
  shape=<%= make shape(q) %>
                                     page.insert html :bottom, "pathway",
  coords=<%= make coords(q) %>
                                                     :partial => "popup"
  href="#"
                                      page[@popup id].set style :position => "absolute"
  onclick="<%= remote function(</pre>
                                      page[@popup id].set style :left => "#{x}px",
    :update => 'popup',
                                                             :top => "#{v}px"
    :url => {:action => 'popup',
                                      page[@popup id].set opacity 0.9
            :entry => q.name,
                                     page.draggable @popup id
            :x => q.x,
                                    end
            :y => g.y
            :link => g.link}) %>"> end
<%- end -%>
                                 </map>
</div>
                                               * 閉じるボタンを付ける
                                              * @data を表にレンダリングする
Rails でのマウス座標の取り方、誰か教えてください。。
                                              </div>
```

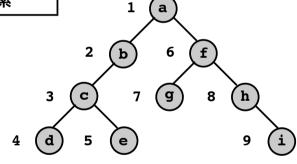
Rails + AJAX でツリー構造を扱う

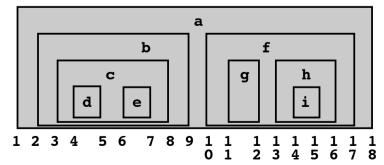
- 階層型データの3通りの表現方法
 - path /a/f/g
 - text
 - link a←f←g
 - acts_as_tree
 - nested set
 - acts_as_nested_set

id	parent_id	data	path	lft	rgt
1	null	a	/a	1	18
2	1	b	/a/b	2	9
3	2	С	/a/b/c	3	8
4	3	đ	/a/b/c/d	4	5
5	3	е	/a/b/c/e	6	7
6	1	£	/a/f	10	17
7	6	g	/a/f/g	11	12
8	6	h	/a/f/h	13	16
9	8	i	/a/f/h/i	14	15

	0	X
path	全文検索	データ量
link	探索	クエリ量
nest	クエリ量	探索

キホン的にRDBと ツリーは相性が悪い





> SELECT * WHERE CHILD.LEFT IS BETWEEN PARENT.LEFT AND PARENT.RIGHT

6. acts_as_tree と acts_as_nested_set の融合

- Rails のプラグイン (標準添付)
 - Linked list のための acts_as_tree
 - Nested set のための acts_as_nested_set
- acts_as_nested_set に acts_as_tree の機能を追加したい
 - root まで辿る ancestors などの機能がない

Linked list

acts_as_tree	メソッドの機能
tree.roots	rootノードのリスト
node.parent	親ノード
node.children	子ノードのリスト
node.root	rootノード
node.ancestors	rootノードまでのリスト
node.siblings	兄弟ノードのリスト

Nested set

acts_as_nested_set	メソッドの機能
node.root?	rootノードかどうか
node.children?	rootノードでないかどうか
node.add_children	子ノードを追加
node.children_count	子ノードの数
node.all_children	全ての子ノードのリスト
node.direct_children	直下の子ノードのリスト

6. acts_as_tree と acts_as_nested_set の融合

- acts_as_nested_set に acts_as_tree の機能を追加したい
 - 自モデルの parent_id を foreign_key で参照し、メソッドをコピペ

```
class Category < ActiveRecord::Base</pre>
  acts as nested set
  belongs to :parent, :class name => name, :foreign key => "parent id"
  def ancestors
    node, nodes = self, []
    nodes << node = node.parent until node.root?</pre>
    nodes.pop
    return nodes
  end
                                                       000
                                                                                     hsa00030 - Homo sapiens (ヒ
                                                           http://dev.kegg.jp:9064/pathway/show/hsa00030#
                                                                          ィ - Homo sapiens (ヒト)
                                                             [ Pathway menu | Pathway help | Ortholog table ]
            ココで自分のパスウェイ ID から
            親階層を取るのに使われてたり
                                                              PENTOSE PHOSPHATE PATHWAY
                                                                                              4.2.1.39
```

7. サブツリーの開閉を AJAX で行う方法

• 階層のインデントは CSS で分かりやすくできるかも

```
<div id="cateogry">
<div id="level1">
        Z Z は第1階層

<div id="level2">
        Z Z は第2階層

<div id="level3">
        Z Z は第3階層

</div>
</div>
</div>
</div></div></div><//div><//div><//div><//div>
```

```
div.level1 {
  background: #FF5C61;
  margin-left: 20px;
}

div.level2 {
  background: #FFCC5D;
  margin-left: 20px;
}

div.level3 {
  background: #BEFF5C;
  margin-left: 20px;
}
```

```
    Select pathway:
    1. 代謝
    1.1 糖質代謝

            map00010 解糖系・糖新生系

                    map00020 クエン酸回路 (TCA サイクル)
                    map00030 ペントースリン酸パスウェイ
                   map00040 ペントースとグルクロン酸の相互変換
                    map00051 フルクトースとマンノースの代謝
                    map00052 ガラクトースの代謝
                    map00053 アスコルビン酸とアルダル酸の代謝
```

```
div.level1 {
   margin-left: 20px;
   border-style: dotted;
   border-width: 0px 0px 0px 1px;
}

div.level2 {
   margin-left: 20px;
   border-style: dotted;
   border-width: 0px 0px 0px 1px;
}

div.level3 {
   margin-left: 20px;
   border-style: dotted;
   border-style: dotted;
   border-width: 0px 0px 0px 1px;
}
```

7. サブツリーの開閉を AJAX で行う方法

<%- end -%>

• 開くときは空の <div> にサブツリーの内容を replace_html する 1 1 糖質代謝 map00010 解糖系・糖新生系 map00020 クエン酸回路 (TCA サapp/controllers/pathway controller.rb map00030 ペントースリン酸パスワ map00040 ペントースとグルクロン def expand map00051 フルクトースとマンノ map00052 ガラクトースの代謝 @parent = Category.find(params[:id]) map00053 アスコルビン酸とアルタ map00500 デンプンとショ糖の代謝 map00530 アミノ糖の代謝 render :update do |page| map00520 糖ヌクレオチドの代謝 map00620 ピルビン酸の代謝 @nodes = @parent.direct children map00630 グリオキシル酸とジカル map00640 プロピオン酸の代謝 page.replace html "node #{@parent.id}", :partial => "expand" map00650 酪酸の代謝 map00660 C5-分岐二塩基酸の代謝 page.visual effect :highlight, "node #{@parent.id}", :duration => 0.5 map00031 イノシトールの代謝 map00562 イノシトールリン酸のf 1.2 エネルギー代謝 end 1.3 脂質代謝 1.4 ヌクレオチド代謝 end 1.5 アミノ酸代謝 1.6 その他のアミノ酸代謝 app/views/pathway/ expand.rhtml 17 締錙の生合成と代謝 1.8 ポリケチド・非リボソームペプチドケ <%- label, title, entry = label title entry(@parent) -%> 1.10 二次代謝物質の生合成 1.11 非生体物質の分解 <%= label %> 请伝情報処理 <%= link to remote(title, :url => {:action => "collapse", :id => @parent id }) <%- @nodes.each do |node| -%> <div id="node <%= node.id %>" class="level<%= node.level %>"> label, title, entry = label title entry(node) -%> <%= label %> if node.direct children.size == 0 -%> <%= link to remote(title, :url => {:action => "category link", :id => entry}) %> else -%> <%= link_to_remote(title, :url => {:action => "expand", :id => node.id}) %> end -%> </div>

7. サブツリーの開閉を AJAX で行う方法

● 閉じるときは <div> の中身を空っぽに replace_html する

```
1.1 糖質代謝
                                                                                                  map00010 解糖系・糖新生系
                                                                                                  map00020 クエン酸回路 (TCA サ-
app/controllers/pathway controller.rb
                                                                                                  map00030 ペントースリン酸パスワ
                                                                                                  map00040 ペントースとグルクロ:
  def collapse
                                                                                                  map00051 フルクトースとマンノ
                                                                                                  map00052 ガラクトースの代謝
     @parent = Category.find(params[:id])
                                                                                                  map00053 アスコルビン酸とアルタ
                                                                                                  map00500 デンプンとショ糖の代謝
                                                                                                  map00530 アミノ糖の代謝
    render :update do |page|
                                                                                                  map00520 糖ヌクレオチドの代謝
                                                                                                  map00620 ピルビン酸の代謝
       page.replace html "node #{@parent.id}", :partial => "collapse"
                                                                                                  map00630 グリオキシル酸とジカル
                                                                                                  map00640 プロピオン酸の代謝
       page.visual effect :pulsate, "node #{@parent.id}", :duration => 0.3
                                                                                                  map00650 酪酸の代謝
                                                                                                  map00660 C5-分岐二塩基酸の代謝
                                                                                                  map00031 イノシトールの代謝
     end
                                                                                                  map00562 イノシトールリン酸の代
                                                                                                 1.2 エネルギー代謝
  end
                                                                                                1.3 脂質代謝
                                                                                                1.4 ヌクレオチド代謝
                                                                                                1.5 アミノ酸代謝
app/views/pathway/ collapse.rhtml
                                                                                                1.6 その他のアミノ酸代謝
                                                                                                1.7 糖鎖の生合成と代謝
                                                                                                 1.8 ポリケチド・非リボソームペプチドタ
  <%- label, title, entry = label title entry(@parent) -%>
                                                                                                1.9 補酵素・ビタミン代謝
                                                                                                1.10 二次代謝物質の生合成
                                                                                                1.11 非生体物質の分解
  <%= label %>
                                                                                                遺伝情報処理
  <%= link_to_remote(title, :url => {:action => "expand", :id => @parent.id}))
                                                                                              6. 薬の開発
```

Select pathway:

定型のタスクは rake に集約

• なんども実行する作業は rake で実行

% rails hoge

- Ruby スクリプトで Makefile を書くことができる make のような
- Rails の定型作業は rake 化されている
 - スキーマ変更、テスト、tmp, log などの掃除 etc.

```
% cd hoge
% rake -T
rake db:migrate
                               # Migrate the database through scripts in db/migrate. Target specific version with VERSION=x
                               # Create a db/schema.rb file that can be portably used against any DB supported by AR
rake db:schema:dump
rake db:schema:load
                               # Load a schema.rb file into the database
rake db:sessions:clear
                               # Clear the sessions table
rake db:sessions:create
                               # Creates a sessions table for use with CGI::Session::ActiveRecordStore
rake db:structure:dump
                               # Dump the database structure to a SQL file
rake doc:app
                               # Build the app HTML Files
rake doc:plugins
                               # Generate documation for all installed plugins
rake log:clear
                               # Truncates all *.log files in log/ to zero bytes
                               # Update both configs, scripts and public/javascripts from Rails
rake rails:update
rake stats
                               # Report code statistics (KLOCs, etc) from the application
                               # Test all units and functionals
rake test
                               # Clears all files and directories in tmp/cache
rake tmp:cache:clear
rake tmp:clear
                               # Clear session, cache, and socket files from tmp/
                               # Creates tmp directories for sessions, cache, and sockets
rake tmp:create
rake tmp:pids:clear
                               # Clears all files in tmp/pids
                               # Clears all files in tmp/sessions
rake tmp:sessions:clear
                               # Clears all files in tmp/sockets
rake tmp:sockets:clear
```

8. タスクを namespace に分ける方法

• namespace ブロックで囲むだけ

end

lib/tasks/load_kegg_genes.rake

```
desk "Load KEGG GENES database"
task :load_kegg_genes => :environment do
   Bio::FlatFile.open(genes_file).each do |entry|
   Gene.create(gene2hash(entry))
   end
end
```

• lib/tasks/kegg/load_genes.rake (ディレクトリも分けるとキレイ)

```
namespace "kegg" do
  desk "Load KEGG GENES database"
  task :load_genes => :environment do
    Bio::FlatFile.open(genes_file).each do |entry|
    Gene.create(gene2hash(entry))
    end
end % rake -T
```



```
rake kegg:load all
                               # Load all KEGG databases
rake kegg:load category
                               # Load KEGG category (.keg) file
rake kegg:load compound
                               # Load KEGG COMPOUND database
                               # Load KEGG ENZYME database
rake kegg:load enzyme
rake kegg:load genes
                               # Load KEGG GENES database
rake kegg:load genome
                               # Load KEGG GENOME database
rake kegg:load glycan
                               # Load KEGG GLYCAN database
rake kegg:load kegg
                               # Load all KEGG databases
rake kegg:load pathway
                               # Load KEGG PATHWAY database from KGML
rake kegg:show config
                               # Show configurations of KEGG files
```

9. 複数のタスクに共通の処理はメソッドに

• rake ファイルの中にメソッド定義できます (make ではキビシイ)

```
namespace "kegg" do
  def save link(db1, entry1, db2, entry2, link = nil)
    #save line in linkdb(db1, entry1, db2, entry2, link)
    save line in tabfile(db1, entry1, db2, entry2, link)
    STDERR.print "."
  end
  def save line in linkdb(db1, entry1, db2, entry2, link)
    hash = {
      :db1 => db1,
      :entry1 => entry1,
      :db2 => db2,
      :entry2 => entry2,
      :link => link,
   Linkdb.create(hash)
  end
  def save line in tabfile(db1, entry1, db2, entry2, link)
   puts ['', db1, entry1, db2, entry2, link].map{|x| x.to s}.join("\t")
  end
```

9. 複数のタスクに共通の処理はメソッドに

- メソッド化しておくことで「DB 間のリンクを保存する」を抽象化
 - Linkdb.create で毎回 SQL 保存するか、タブ切りファイルに保存するか

COMPOUND

```
entry.glycans.each do |name|
    save_link("cpd", cpd, "gl", name)
end

entry.reactions.each do |name|
    save_link("cpd", cpd, "rn", name)
end

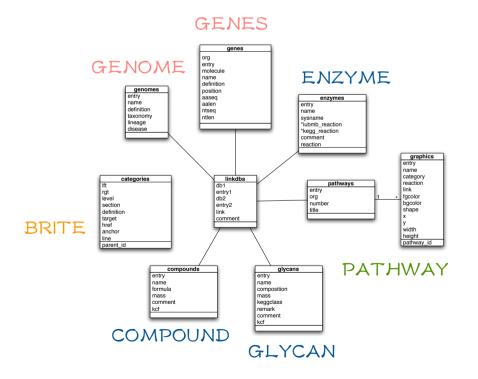
entry.pathways.each do |line|
    if name = line[/PATH:\s*(\S+)/, 1]
        save_link("cpd", cpd, "path", name)
    end
end
```

GENES

```
entry.motif.each do |dbname, list|
  case dbname
 when "Pfam"
    db = pf
 when "PROSITE"
    db = "ps"
  end
  list.each do | name |
    save link(org, gene, db, name, "motif")
  end
end
entry.orthologs.each do |line|
  if name = line[/KO:\s*(\S+)/, 1]
    save link(org, gene, "ko", name)
  end
end
```

ActiveRecord のモデルは Ruby のクラスでもある

- モデルは単なる O/R マッピングではない
 - R → O マッピングされたオブジェクトに機能(メソッド)を追加
 - 先の Category クラスに nested_set や tree の機能を追加する例など



LinkDB

Rails 標準の habtm を使うのは あきらめたので、LinkDB を利 用した代替メソッドを、各モデ ルにインプリする必要がある。

10. モデルにもガシガシとメソッドを追加する

● Linkdb(db1:entry1 → db2:entry2 の関係を保持)クラスの拡張

```
class Linkdb < ActiveRecord::Base</pre>
  def self.targets(dbentry, db2 = nil, link = nil)
    list = []
    db1, entry1 = dbentry.split(':')
    if link
      if db2
        list = self.find all by db1 and entry1 and db2 and link(db1, entry1, db2, link)
      else
        list = self.find all by db1 and entry1 and link(db1, entry1, link)
      end
    else
      if db2
        list = self.find all by db1 and entry1 and db2(db1, entry1, db2)
      else
        list = self.find all by db1 and entry1(db1, entry1)
      end
    end
    return list.map {|x| "#{x.db2}:#{x.entry2}"}
  end
                  def self.pathways(dbentry)
                                                    def self.enzymes(dbentry)
                     targets(dbentry, "path")
                                                      targets(dbentry, "ec")
                   end
                                                    end
```

10. モデルにもガシガシとメソッドを追加する

• Linkdb を他のモデルでも使う

```
class Linkdb < ActiveRecord::Base</pre>
  def self.pathways(dbentry)
                                                    Linkdb.pathways("cpd:C00023")
    targets(dbentry, "path")
  end
end
class Compound < ActiveRecord::Base</pre>
  def self.dbentry(dbentry)
    db, entry = dbentry.split(':')
    self.find_by_entry(entry)
  end
  def dbentry
                                                    cpd = Compound.dbentry("cpd:C00023")
    "cpd:#{self.entry}"
                                                    cpd.pathways
  end
  def pathways
    Linkdb.pathways(dbentry)
  end
end
```



インデックス重要

• schema で hogehoge_id となっているカラムには add_index すべし!

```
class Graphic < ActiveRecord::Base</pre>
                                            class Pathway < ActiveRecord::Base</pre>
  belongs to :pathway
                                              has many :graphics
end
                                            end
                                                                              mysql> desc graphics;
% ./script/generate migration add index to pathway id on graphics
                                                                               Field
                                                                                                  | Null | Key | Default | Extra
                                                                                        int(11)
                                                                                                       | PRI | NULL
                                                                                                                   auto increment
class AddIndexToPathwayIdOnGraphics < ActiveRecord::Migration</pre>
                                                                                        int(11)
                                                                               name
                                                                                        text
                                                                                                            NULL
  def self.up
                                                                               category
                                                                                        varchar(255)
                                                                                                   YES
                                                                                                            NULL
    add index :graphics, :pathway id
                                                                               reaction
                                                                                         varchar(255)
                                                                                                   YES
                                                                                                            NULL
                                                                               link
                                                                                        varchar(255)
                                                                                                   YES
                                                                                                            NULL
                                                                                                            NULL
                                                                               facolor
                                                                                        varchar(255) | YES
                                                                               bgcolor
                                                                                        varchar(255)
                                                                                                  YES
                                                                                                            NULL
                                                                               shape
                                                                                        varchar(255)
                                                                                                            NULL
  def self.down
                                                                                                            NUT.T.
                                                                                        int(11)
                                                                                        int(11)
                                                                                                   YES
                                                                                                            NULL
                                                                               width
                                                                                                   YES
                                                                                                            NULL
                                                                                        int(11)
end
                                                                               height
                                                                                        int(11)
                                                                                                   YES
                                                                                                            NULL
                                                                                                  YES | MUL | NULL
                                                                               pathway_id | int(11)
% RAILS ENV=production rake db:migrate
-- add_index(:graphics, :pathway id)
-> 215.8169s
== AddIndexToPathwayIdOnGraphics: migrated (215.8171s) =========================
mysql> select count(*) from graphics;
                                                    mysql> select count(*) from graphics;
+----+
 count(*)
                                                      count(*)
  4179674
                                                       4179674
1 row in set (8.96 sec)
                                                    1 row in set (0.25 sec)
```

Rails による DB 構築の利点

- ActiveRecord で RDBMS に依存しない開発が可能
 - MVC モデルの Model 部分を ActiveRecord モデルにより実装
 - MySQL, PostgreSQL, SQLite3 などに対応
 - スキーマの変更が migration の仕組みにより容易
- SQL の代わりに ./script/console が便利
- RJS でわりと簡単にイマドキな AJAX ができる
- AWS でウェブサービス化も簡単にできる
- ていうか、普通の人は Rails なしにここまでキレイに作り込めない、という

KEGG on Rails 公開してみますので プラグインなど 開発して下さい