Biologia: BioKepler

- Krótki opis usługi
- Aktywowanie usługi
- Pierwsze kroki
    - Instalacja oprogramowania x2go
    - Konfiguracja klienta x2go:
    - Dalsza konfiguracja:
    - Łączenie ze środowiskiem pracy użytkownika BioKepler (na zasobach chmurowych)
    - Uruchomienie oprogramowania BioKepler (poprzez ikonę kepler.sh).
    - Załadowanie i uruchomienie przykładowego scenariusza
- Zaawansowane użycie
- Gdzie szukać dalszych informacji?

Krótki opis usługi

Usługa jest przeznaczona dla biologów i bioinformatyków.

Usługa **BioKepler** składa się z kilku elementów: dostarczane jest całe wirtualne środowisko pracy dostępne poprzez zdalny desktop: maszyna wirtualna uruchomiona na zasobach chmurowych, a na niej zainstalowany zestaw popularnych narzędzi i aplikacji bioinformatycznych oraz oprogramowanie BioKepler. BioKepler jest modułem platformy zarządzania naukowymi scenariuszami obliczeniowymi - **Keplera**, który służy do uruchamiania zestawu narzędzi bioinformatycznych w rozproszonych środowiskach obliczeniowych takich jak PLGrid. Użytkownik może tworzyć całe scenariusze obliczeniowe (ang. *workflows* lub *pipelines*), składające się z wielu kroków, a poszczególne komponenty mogą być uruchamiane na różnych zasobach obliczeniowych.

Przykładowe komponenty BioKeplera (tzw. aktorzy): 2bwt-builder, DynamicTrim.pl, RNA_parse.pl SOAPdenovo31mer, blast_rRNA.pl, blastall, bowtie, bowtie-build, bowtie2-build, breakdancer-max, bwa_align bwa_index, cd-hit cd-hit-454, cd-hit-est, clustalw, clustalx, cuffdiff, cytoscape, faa_stat.pl, fastq2fasta.py, fraggene_scan.pl, fraggene_scan_parse.pl, hmm_rRNA.pl, hmmsearch.pl, hmmsearch_parse.pl, kegg.pl, kegg_parse.pl, metagene.pl, mother, muscle orf_2_tbl.pl, orf_finder, qc_filter.pl, qc_filter_fastq.pl, qiime rasmol, rpsblast.pl, rpsblast_parse.pl, samtools, soap, ssake, tRNAscan-SE.pl, tophat, uchime, velvetg, velveth

Środowisko **Kepler**, w którym scenariusze są tworzone graficznie poprzez łączenie aktorów (elementarnych cegiełek wykonujących określone zadanie) przy użyciu kabli (które transportują dane), ma wbudowaną bibliotekę ponad 400 aktorów (np. 'wyrażenie matematyczne', 'czytnik danych tabelarycznych', 'kod Java', 'skrypt Python', 'narysuj wykres'). Gotowe scenariusze mogą być uruchamiany w trybie graficznym bądź z linii komend.

Aktywowanie usługi

Aby skorzystać z usługi **BioKepler**, należy mieć aktywne konto w Infrastrukturze PLGrid oraz aktywną afiliację.

Do usługi **BioKepler** może uzyskać dostęp każdy użytkownik PLGrid, który jest użytkownikiem usługi **Molecular Biology Data Analysis Toolkit** . W celu uzyskania dostępu do tej usługi należy po zalogowaniu się w Portalu PLGrid w lewym menu wybrać zakładkę ***Usługi***. Po przejściu do tej zakładki należy kliknąć zielony przycisk ***Zarządzaj usługami***, znajdujący się w prawym górnym rogu. Spowoduje to przejście do Katalogu Aplikacji i Usług (KAiU), gdzie należy wyszukać usługę **Molecular Biology Data Analysis Toolkit**, a następnie o nią aplikować.

Przyznanie usługi następuje automatycznie. Gdy usługa zostanie przyznana, pojawi się na liście usług w portalu PLGrid ze statusem *„active”* Status usługi będzie również widoczny w KAiU jako *"Status użytkownika: Usługa aktywna — usługa dostępna dla użytkownika*".

Pierwsze kroki

Poniżej przedstawione są następujące kroki:

- instalacja oprogramowania **x2go**
- konfiguracja **x2go**
- łączenie ze środowiskiem pracy użytkownika BioKepler (na zasobach chmurowych)
- uruchomienie oprogramowania BioKepler
- załadowanie i uruchomienie przykładowego scenariusza (ang. Workflows)

Instalacja oprogramowania x2go

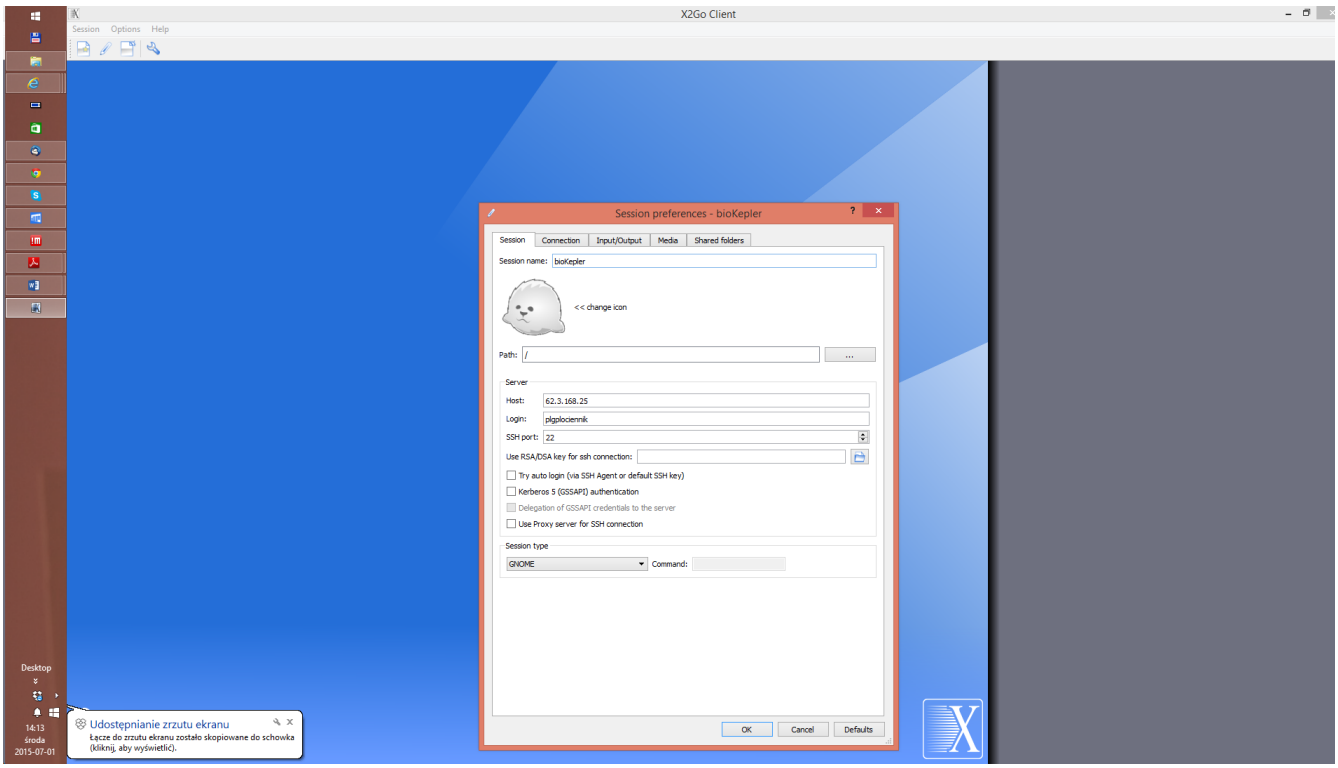
1. Pobranie oprogramowanie x2go (klient) ze strony: http://wiki.x2go.org/doku.php/doc:installation:x2goclient - na odpowiednią platformę.
2. Instalacja klienta x2go

Konfiguracja klienta x2go:

1. Session name: `BioKepler`
2. Host: `62.3.168.25`
3. login: `plgusername`

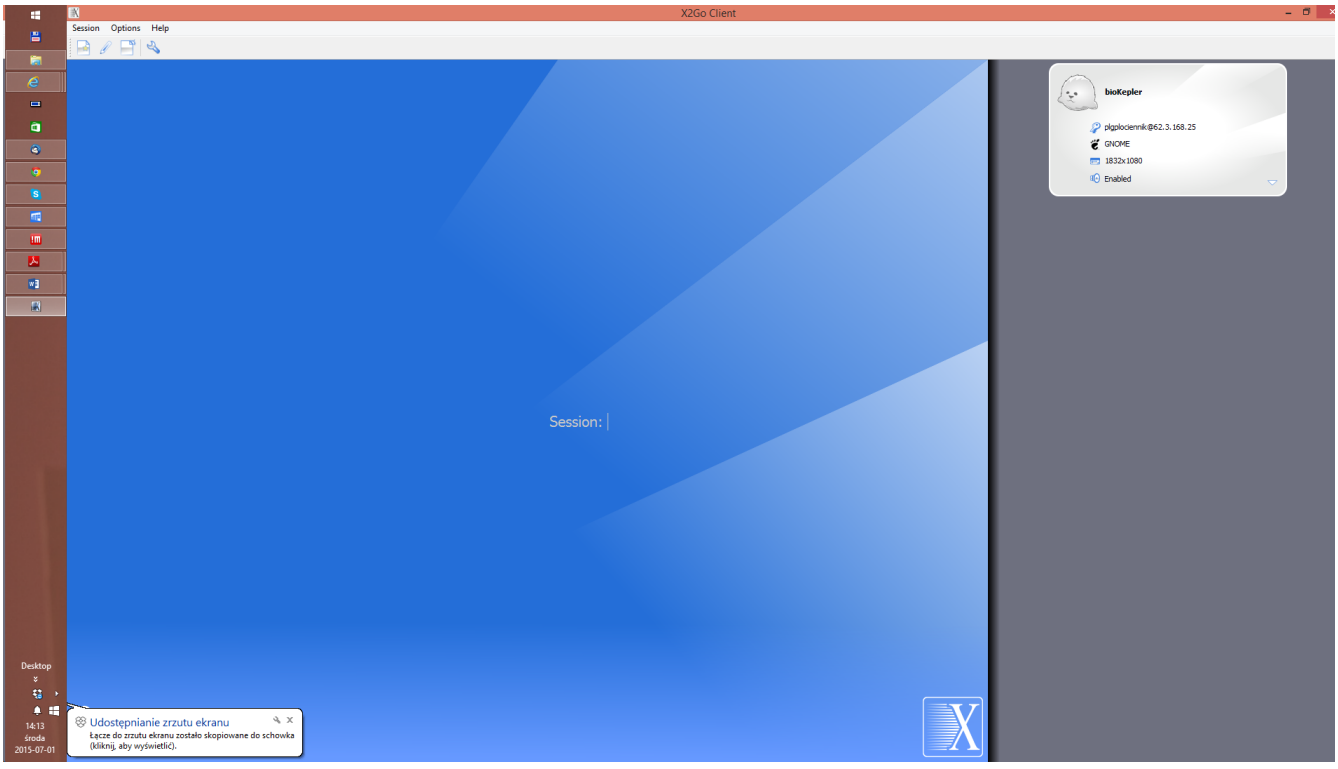
4. sessiontype: `GNOME`
5. "OK" doda nową sesję do listy dostępnych sesji na pasku po prawej stronie

Uwaga: można stworzyć sobie poprzez X2Go kilka sesji, na raz może być aktywna tylko jedna z nich.



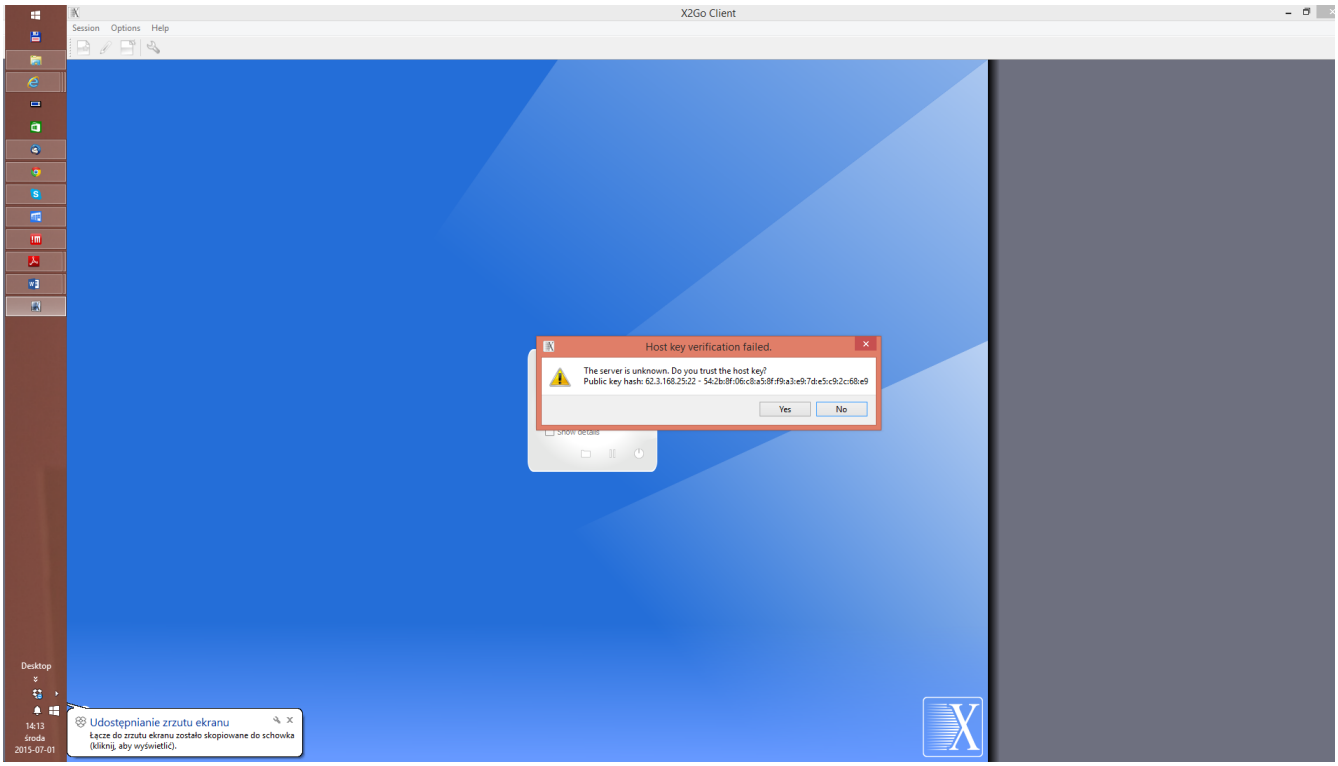
Dalsza konfiguracja:

1. Zmiana rozmiaru zdalnego desktopu: wg. preferencji

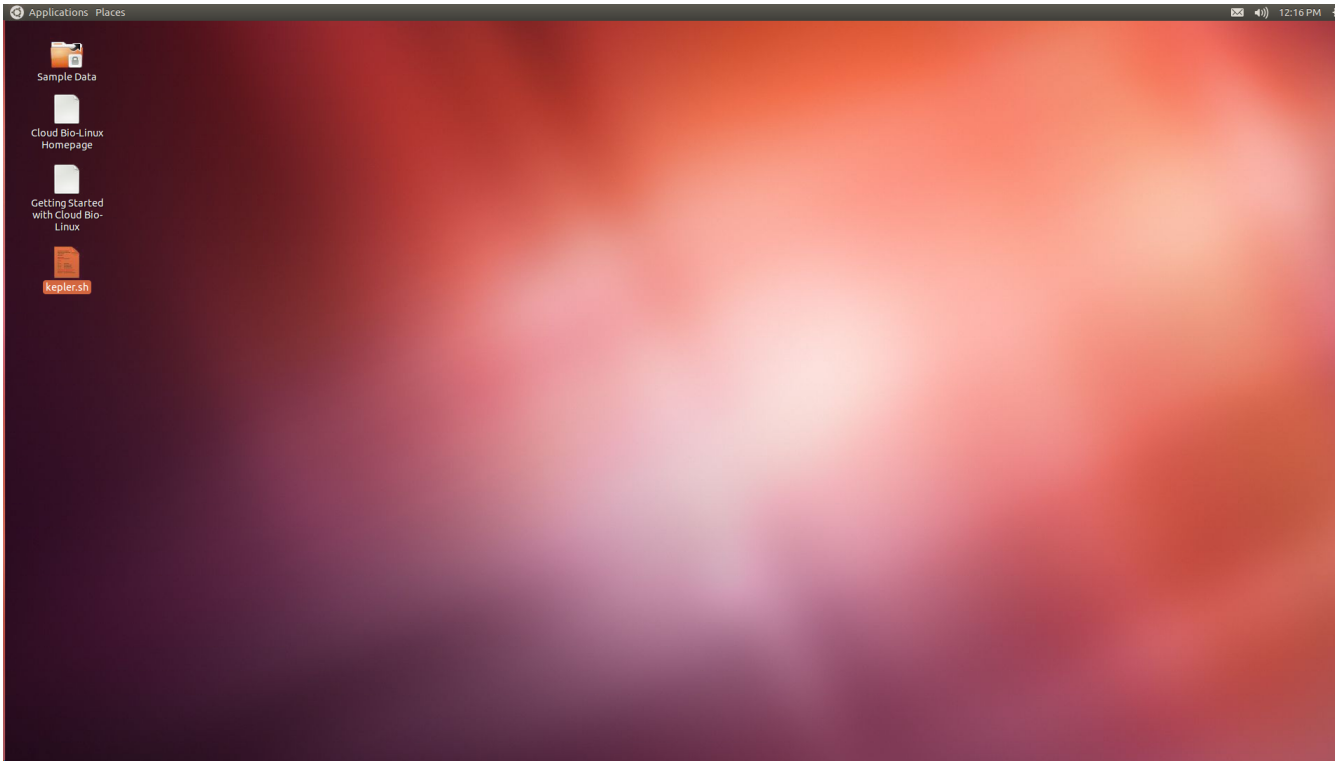


Łączenie ze środowiskiem pracy użytkownika BioKepler (na zasobach chmurowych)

1. Wybór skonfigurowanej sesji
2. podanie hasła
3. potwierdzenie zaufania dla kluczy



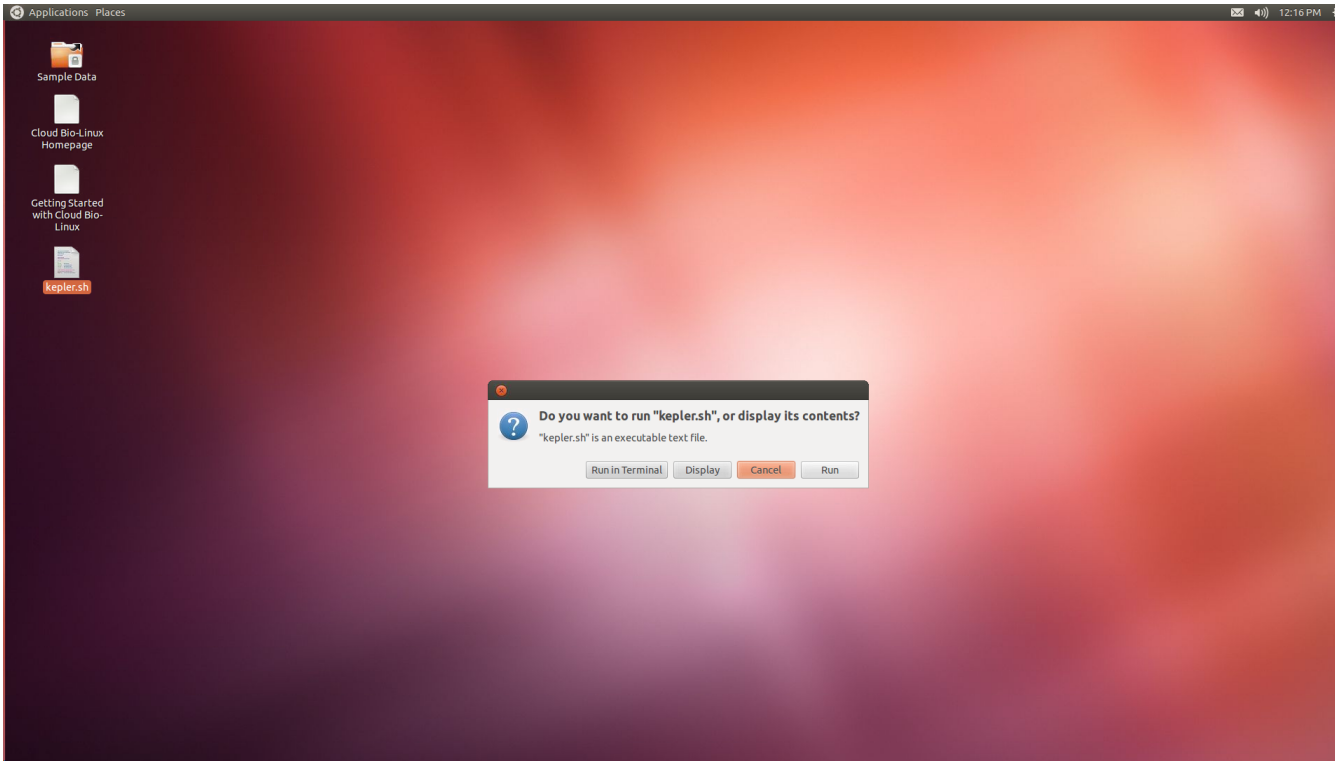
Po połączeniu ze zdalnym środowiskiem pracy, powinien pojawić się zdalny pulpit, na której między innymi znajduje się ikona do narzędzia BioKepler: kepler.sh



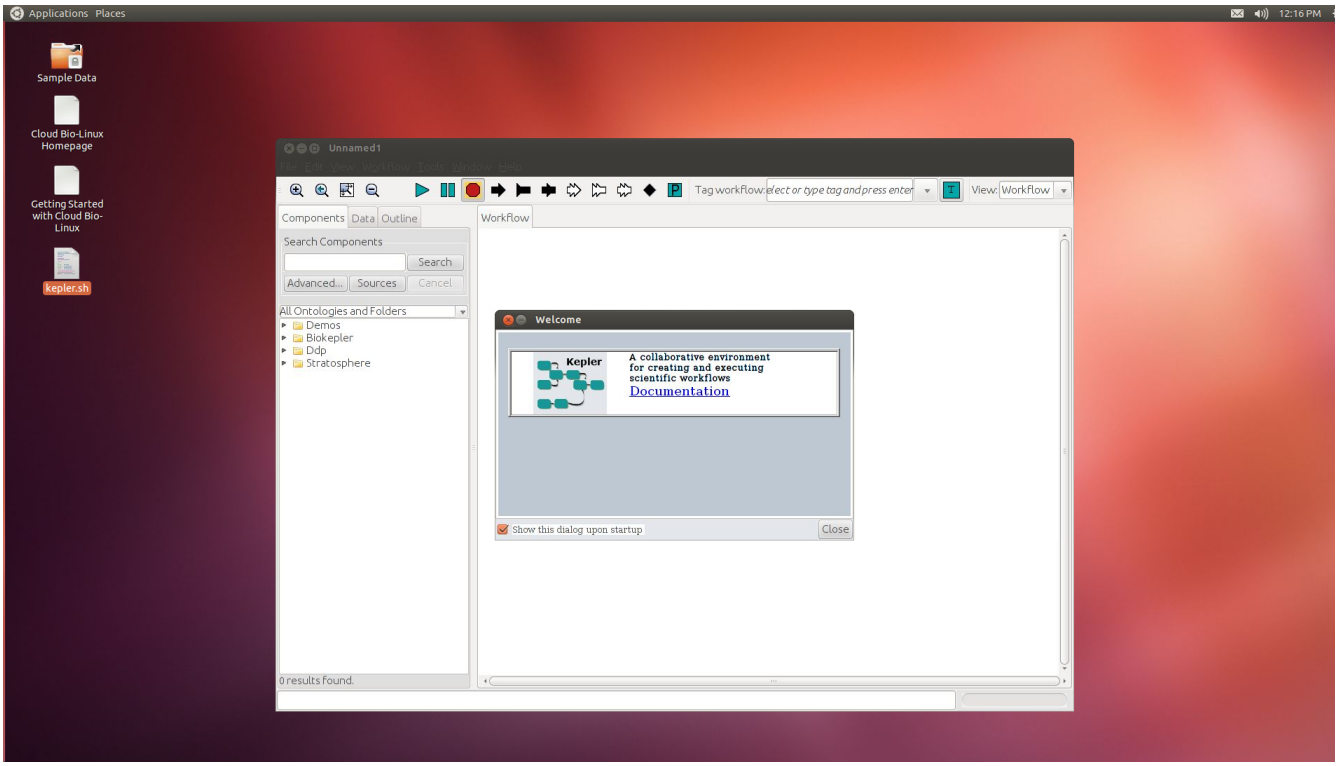
Uruchomienie oprogramowania BioKepler (poprzez ikonę kepler.sh).

"Run in terminal" da możliwość obserwowania komunikatów w konsoli.

Pierwsze uruchomienie BioKeplera będzie trwało dłużej ze względu na automatyczne tworzenie katalogów i kopiowaniu plików do katalogu domowego..



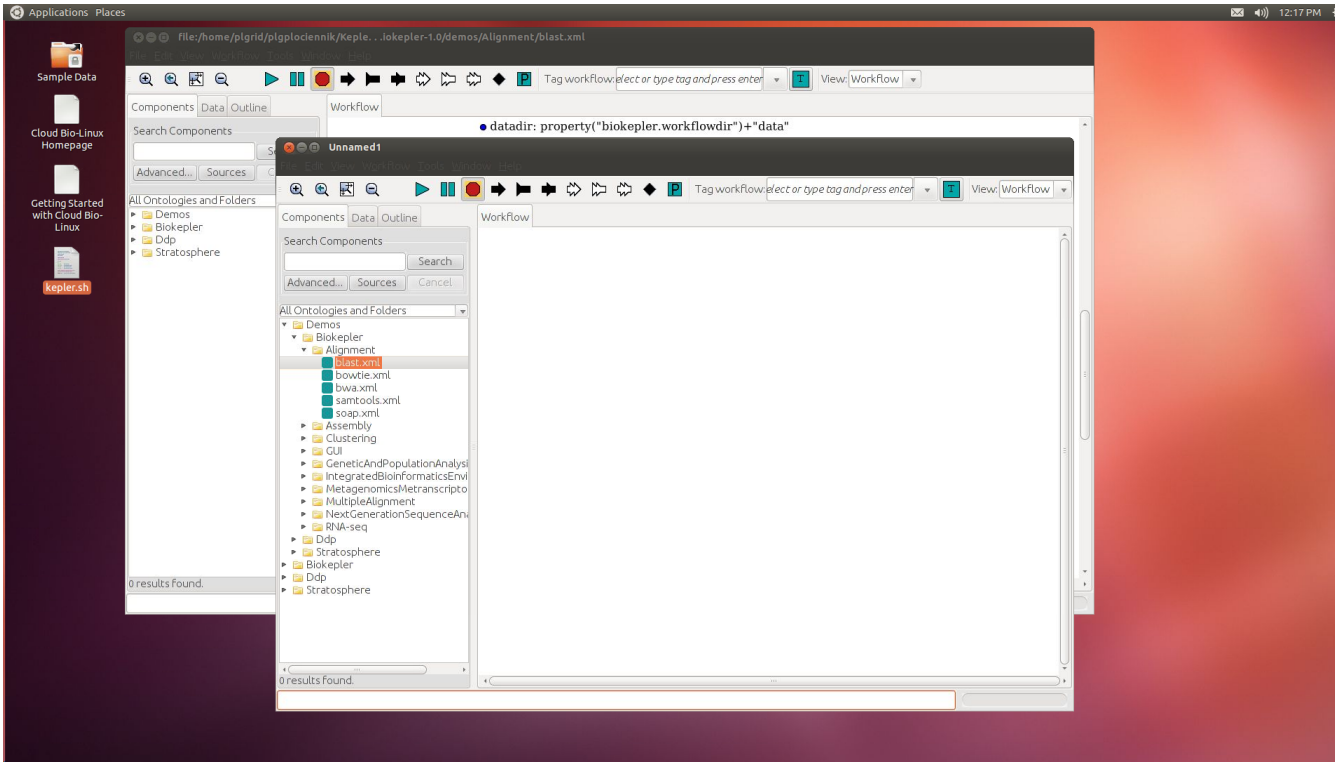
Po uruchomieniu pojawi się ekran powitalny aplikacji, który należy zamknąć(można zaznaczyć na dole okna, żeby nie pojawiał się przy następnych uruchomieniach).



Załadowanie i uruchomienie przykładowego scenariusza

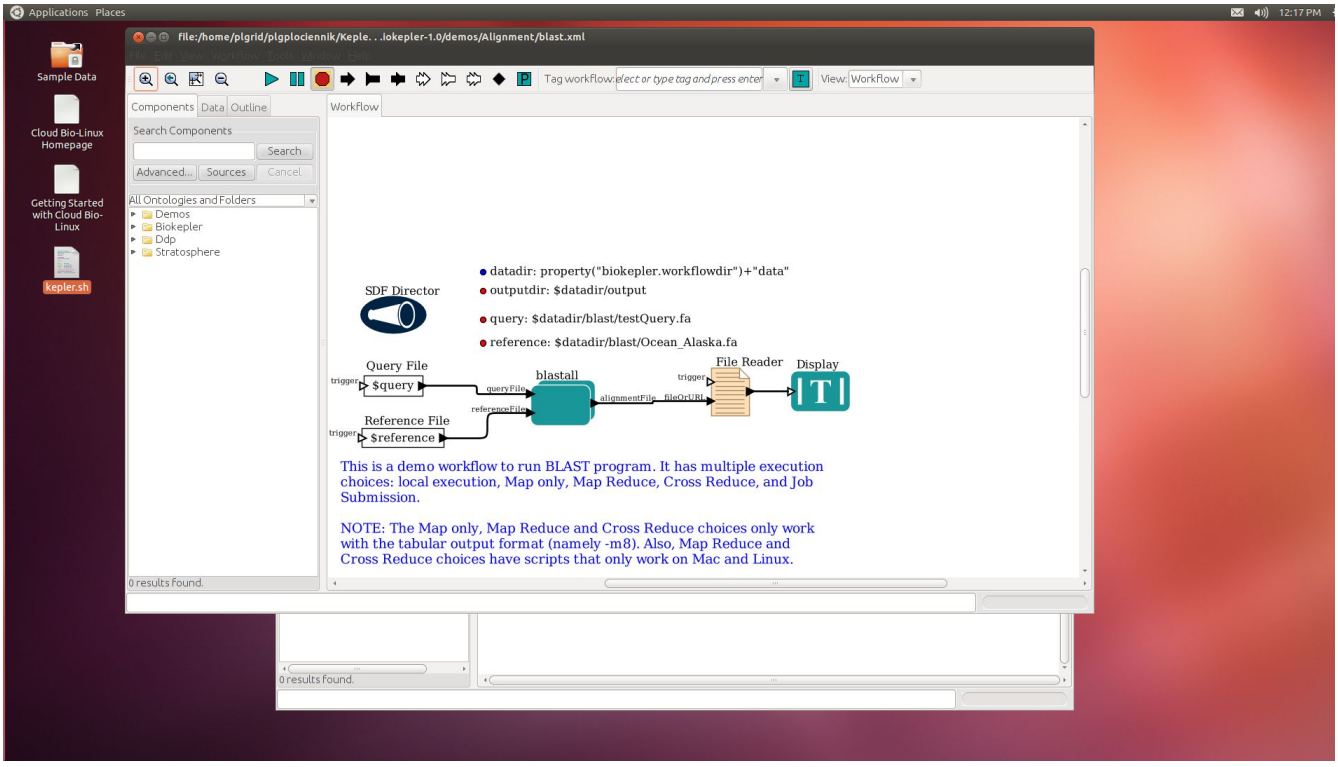
Z zakładki po lewej stronie przestrzeni roboczej (dashboard) można wybrać gotowe scenariusze lub utworzyć samemu nowy scenariusz. Dla przykładu wpisując "blast" lub wybierając "Demos BioKepler Alignment Blast.xml"

i klikając podwójnie na ikonę można otworzyć przykładowy workflow

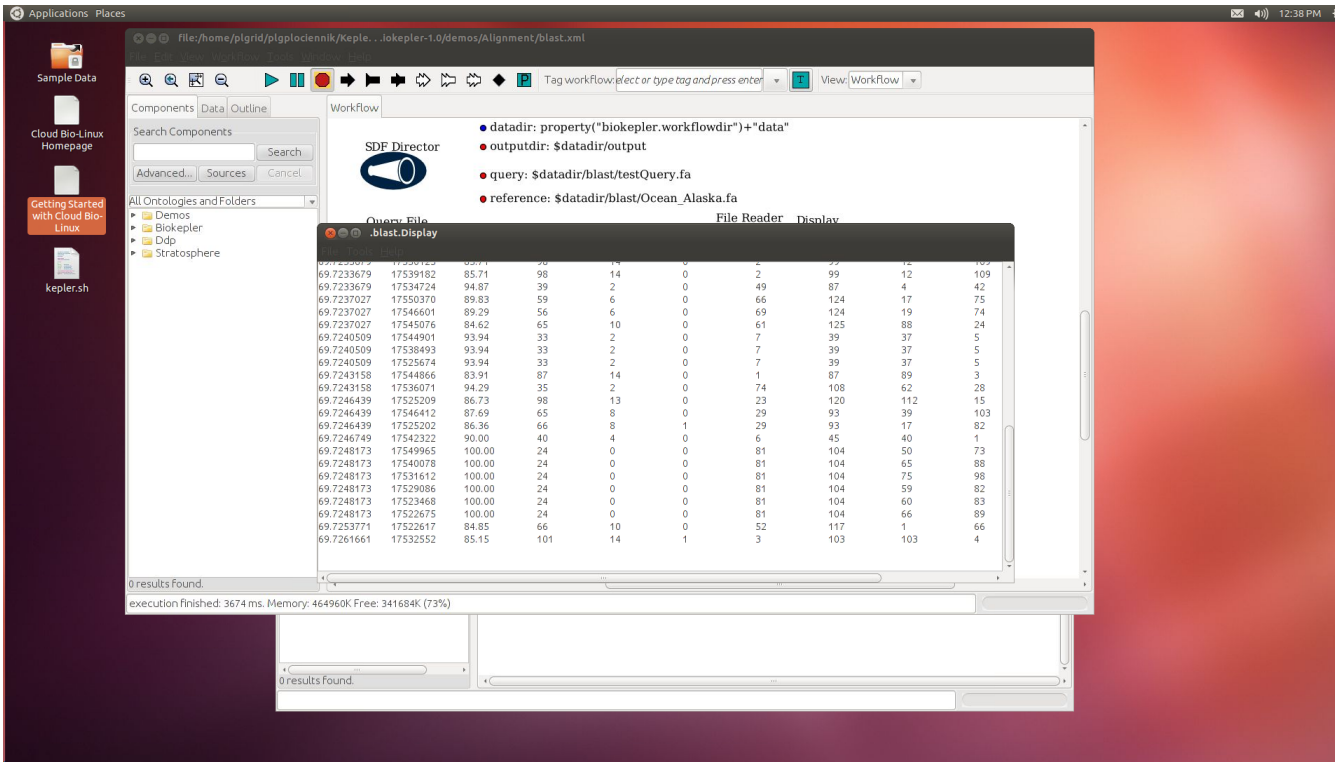


Ponieważ workflow jest prekonfigurowany i są dostępne przykładowe dane wejściowe, można od razu przejść do uruchomienia scenariusza.

Można to osiągnąć poprzez naciśnięcie ikony "press"



Wynik uruchomienia tego scenariusza powinien się pojawić w osobnym oknie (blast.Display)

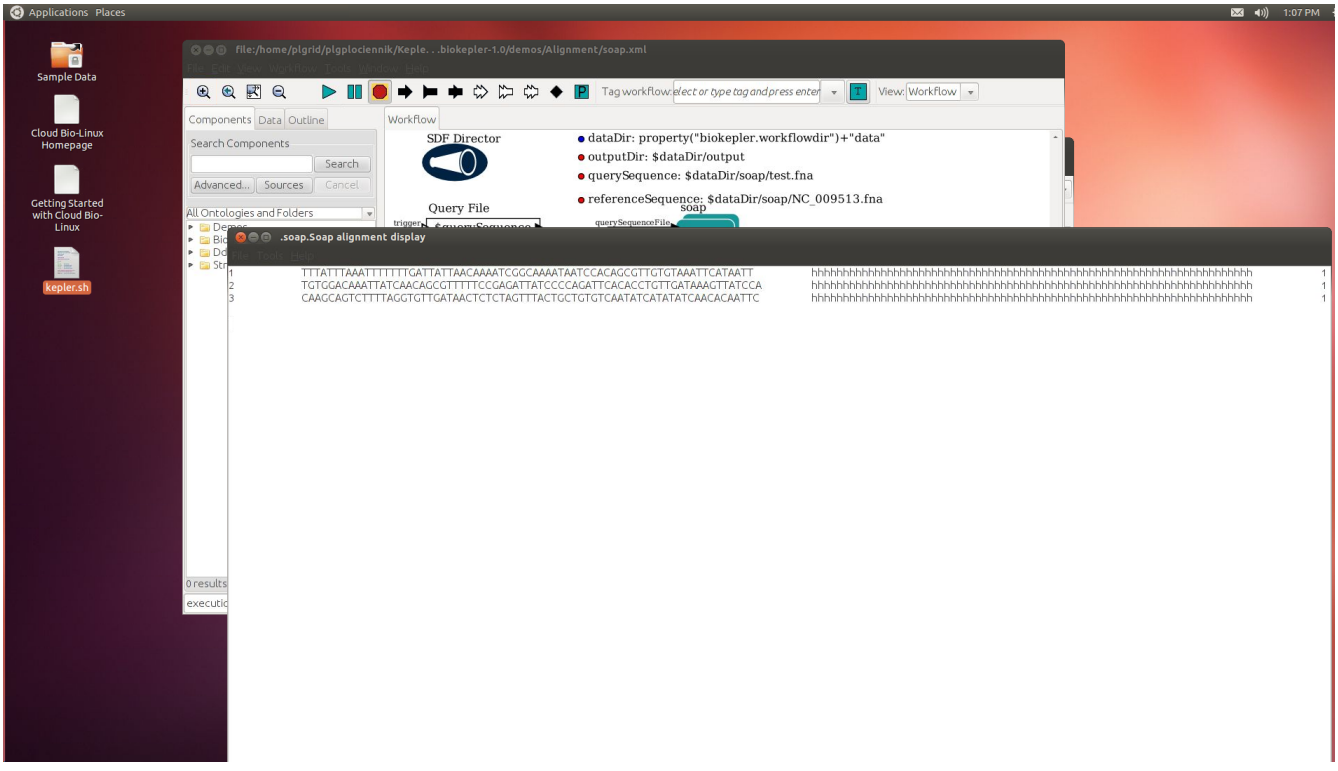


Zaawansowane użycie

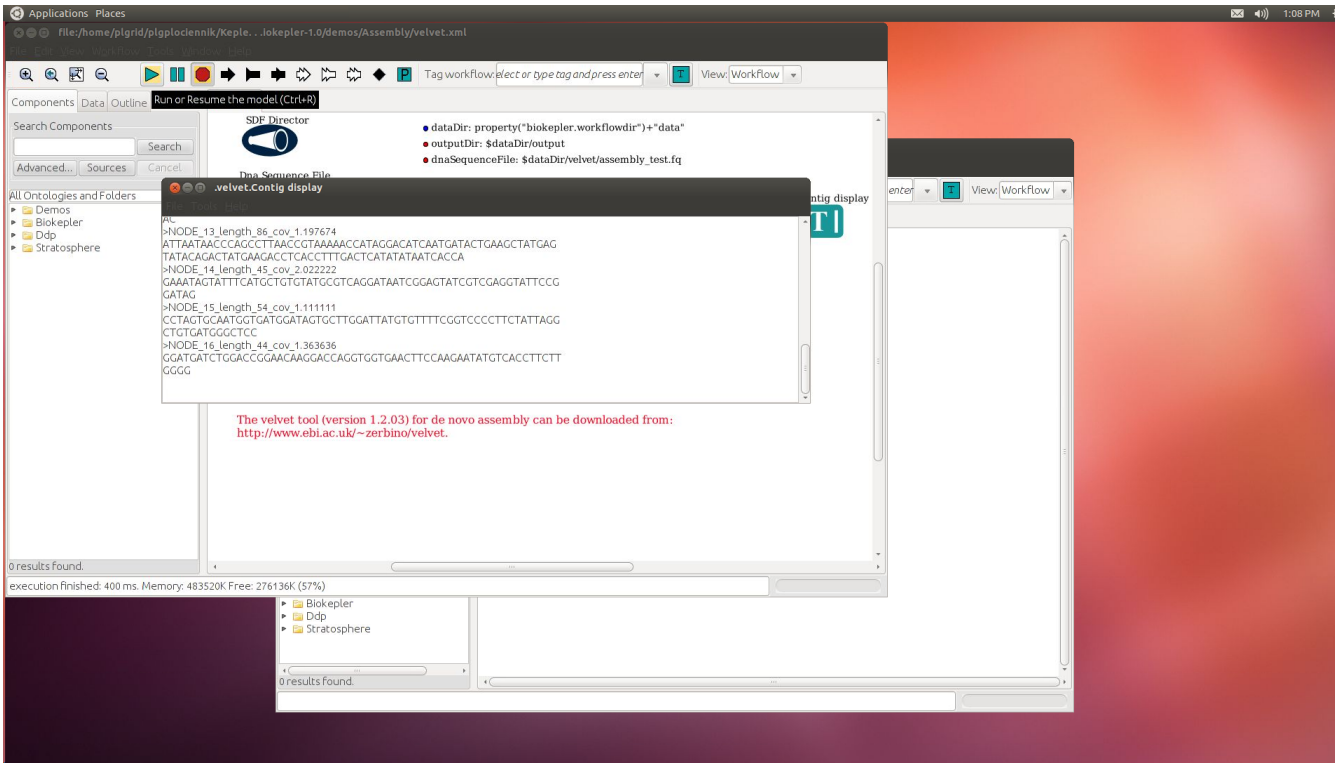
Analogicznie do przykładu przedstawionego w sekcji pierwsze kroki, można uruchomić kilkanaście innych gotowych scenariuszy.

Poniżej przykładowe wyniki uruchomień przykładowych scenariuszy:

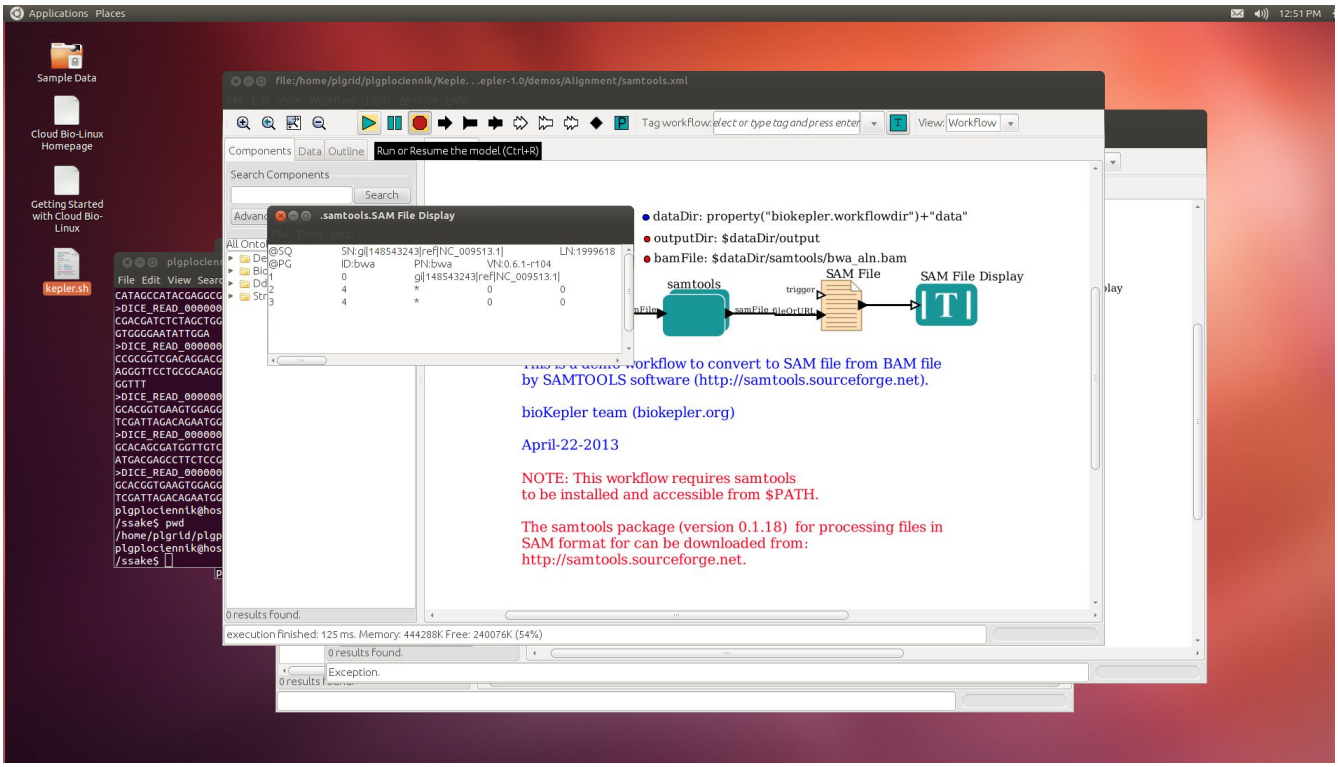
Soap



Assembly/velvet

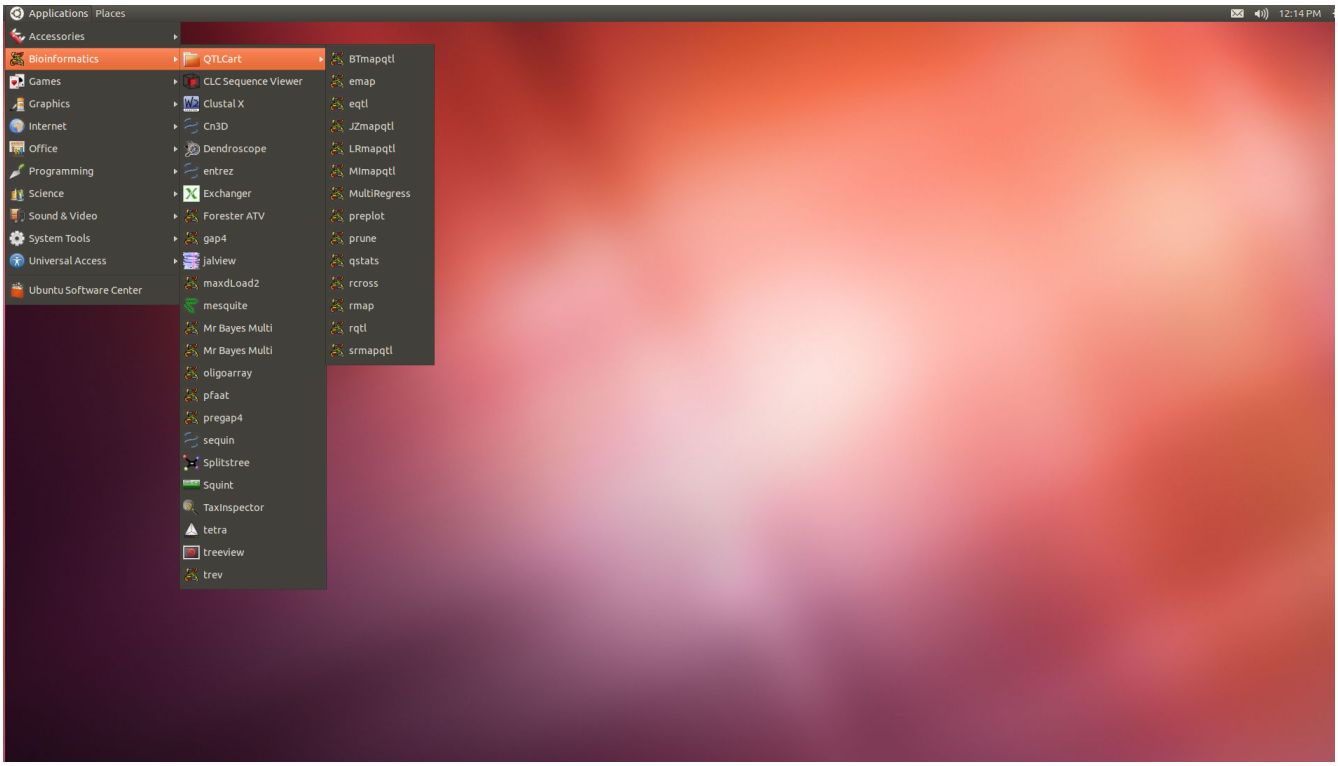


SAMTOOLS



Zestaw kilkuset najczęściej używanych programów domenowych jest dostępnych na ścieżce uruchomieniowej, może być również wykorzystany poprzez BioKeplera.

Część narzędzi bioinformatycznych jest również dostępnych z poziomu menu (na przykład: Dendroscope, cn3d, sequin, splitstree, tetra, trev, squint, etc)



W sprawie konstruowania innych scenariuszy/pomocy przy konfigurowaniu obecnych prosimy kontaktować się przez helpdesk PLGrid.

Gdzie szukać dalszych informacji?

Szczegółowe informacje o użytkowaniu infrastruktury PLGrid znajdują się w Podręczniku Użytkownika.

Szczegółowa dokumentacja programu BioKepler znajduje się na stronie: http://www.biokepler.org/userguide

Szczegółowa dokumentacja platformy Kepler znajduje się w pliku: dokumentacja.pdf

Informacje o usługach dziedzinowych *Biologia* dostępne są na stronie: http://biologia.plgrid.pl/

Uzyskanie informacji/helpdesk PLGrid: dokumentacji o pomocy