









Commandes Unix: pour les débutants

Denis Puthier Claire Toffano-Nioche Julien Seiler Gildas Le Corquillé

TAGC/ Inserm U1090, denis.puthier@univ-amu.fr I2BC, claire.toffano-nioche@u-psud.fr IGBMC, seileri@igbmc.fr UPMC/CNRS, lecorquille@sb-roscoff.fr

Et tout le staff!!

ACCÈS RAPIDE: http://bit.ly/presentation linux quick 2020

École de bioinformatique AVIESAN-IFB 2019



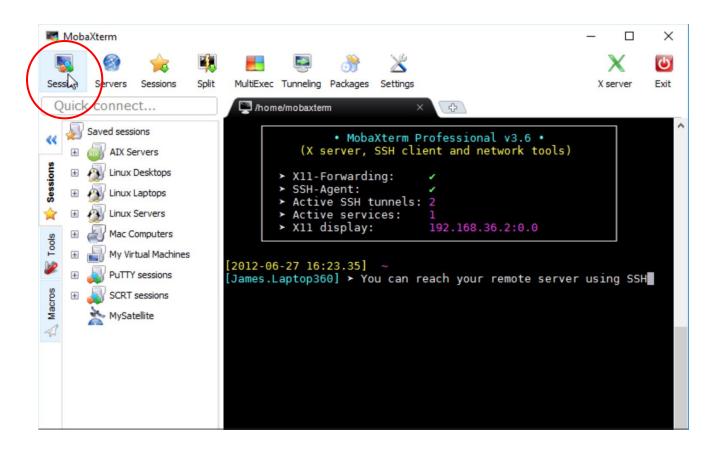




La connexion ssh vers le cluster

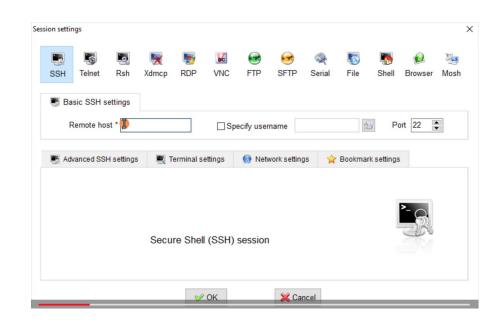
- ssh (secure shell)
 - Protocole sécurisé
 - les informations passant sur le réseau sont protégées (chiffrées)
 - Plusieurs outils pour la connexion
 - Via un terminal
 - Linux ou MacOSX
 - Windows 10 (Bash on Ubuntu on Windows)
 - Via une application réseau comme MobaXterm
 - Windows
 - Permet l'accès à un terminal

Se connecter depuis Windows avec MobaXterm (1)



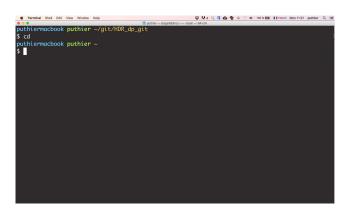
Se connecter depuis Windows avec MobaXterm (2)

- Session ssh
- 2. Remote host core.cluster.france-bioinformatique.fr
- UsernameIndiquez votre login
- 4. Pressez OK



Se connecter depuis Mac OSX ou Linux

- MacOSX
 - Finder > Applications > Utilities > Terminal
 - Tapez la commande ci-dessous
- I inux
 - La localisation du terminal varie selon les bureaux (Faites-vous aider si vous ne trouvez pas).
 - Utilisez la commande ci-dessous



```
$ # Connection en ssh au serveur ABiMS
$ # Remplacez [login] par votre compte utilisateur
$ # Tapez votre mot de passe
$ ssh -Y [login]@core.cluster.france-bioinformatique.fr
```

Remarques:

- Le caractère # indique un commentaire, qui sera ignoré par le shell.
- Le \$ en rose représente l'invite de commande, qui varie selon les configurations.
- La commande à taper dans votre terminal commence juste après l'invite de commande: ssh ...
- L'argument -Y permet d'ouvrir des fenêtres graphiques à distance (e.g. éditeurs)

L'écran d'accueil

- Prompt (invite de commande)
 - login@hostname current working directory

```
[dputhier@clust-slurm-client ~]$
```

Comment converser avec le terminal?

```
[stage36@nz ~]$ Bonjour mon nom est denis. Et toi ?
-bash: Bonjour: command not found
[stage36@nz ~]$
```

- Réponse : lui parler en langage BASH (Bourne Again Shell) *
 - Le langage BASH est un des nombreux dialectes Shell (bsh, ksh, csh, zsh,...).
 - Tous ces langages Shell sont extrêmement similaires.
 - Ce langage repose notamment sur un ensemble de commandes.
 - Ces commandes modulaires permettent de réaliser des tâches.
 - Ces tâches permettent de piloter un ordinateur à distance.

^{*} Référence (calembour) au premier langage Shell écrit par Stephen Bourne (bsh) :)

Charger l'environnement logiciel



- Les administrateurs du cluster ont effectué les installations via le gestionnaire de logiciels *Conda*.
 - Permet l'installation facile des programmes et de leurs dépendances.
 - Le dépôt Bioconda met à disposition de nombreux outils bioinformatiques.
- La commande module va charger l'environnement Conda dans votre session
- \$ module avail -1 # Afficher la liste des environnements disponibles
- \$ # Charger fastqc dans votre environnement
- \$ module load fastqc/0.11.8 # La version est facultative
- \$ # module unload fastqc/0.11.8 # On peut aussi décharger

Prototype(s) d'une commande (1)

- Une **commande** réalise **une tâche** (trier, sélectionner, ouvrir, aligner des reads,...).
- Elle dispose d'un certain nombre d'**arguments** qui peuvent être facultatifs et qui peuvent **modifier** son **mode de fonctionnement**.
 - Les noms des arguments ne sont pas standardisés
- Ces arguments peuvent ou non prendre des valeurs.
- De manière générale une instruction dans le terminal commence toujours par le nom d'une commande
- Dans le premier exemple ci-dessous on dira 'moins v'.

```
$ # Exemple d'argument sans valeur associée
$ # v pouvant signifier verbose, version (ou autre suivant la commande).
$ fastqc -v # quelle est la version du logiciel fastqc sur ce serveur ?
```

\$ # Exemple d'argument avec valeur associée
\$ man -k pdf # rechercher toutes les commandes qui traitent du format pdf

Prototype(s) d'une commande (2)

- De manière générale, les arguments peuvent être utilisés sous leurs formes courtes ou sous leurs formes longues (plus explicites/lisibles mais plus longues à taper...).
- Les formes longues sont généralement précédées de deux tirets (dans l'exemple ci dessous on dira 'moins-moins help)

```
$ fastqc -h
# La commande précédente est équivalente mais un peu plus lisible
$ fastqc --help
```

Demander de l'aide (help) sur fastqc avec l'argument -h

Trouver de l'aide!



Appeler la police, appeler son collègue, chercher sur internet ou utiliser la commande man (manuel)

```
# Demo
$ man ls  # obtenir de l'aide sur la commande ls
$ man man  # obtenir de l'aide sur la commande man ...
```

Raccourcis dans l'aide:

/color : pour chercher le terme 'color'.

n: (next) pour chercher la prochaine occurrence de 'truc'.

p: (previous) pour chercher l'occurrence précédente de 'truc'.

q: pour quitter l'aide.

Zoom sur la commande ls

La commande ls et ses arguments

- La commande 1s peut prendre un certain nombre d'arguments.
- Parmis les arguments principaux:
 - −1 (long) donne beaucoup d'informations sur les fichiers.
 - -a (all) montre tous les fichiers y compris ceux qui sont cachés*.
 - −t (time) trie par date de modification.
 - -h (human-readable) affiche les tailles des fichiers en unités lisibles
 - o −r (reverse) inverse l'ordre du tri.
- On peut combiner les arguments
 - o ls -1 -a
 - o ls -la

^{*} Sous Linux les noms des fichiers cachés commencent par un point (e.g '.bashrc').

La commande ls et ses arguments

```
$ # Demo
$ cd /shared/bank/homo sapiens/hg38/fasta # On se déplace dans le dossier
$ ls # On liste les fichiers
$ ls -l # Information détaillée sur les fichiers (taille, date modif,...)
$ # Vu détaillée des fichiers et taille en Ko,Mo,Go,To...
$ 1s -1h
$ # Vu détaillée des fichiers, taille en Ko, Mo, Go, To..., trie par date
$ ls -tlh
$ # Vu détaillée des fichiers, taille en Ko, Mo, Go, To..., trie par date
$ # du plus ancien au plus récent
$ ls -rtlh
```

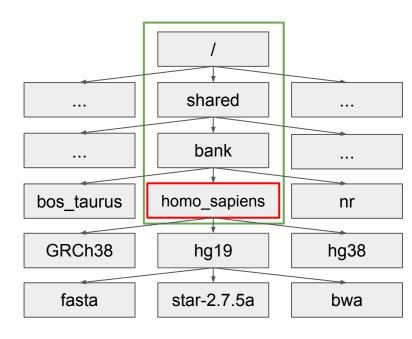
^{*} Le comportement par défaut est de trier par ordre alphabétique en tenant compte de la casse (i.e majuscule minuscule).

^{**} ATTENTION aux espaces, nécessaires entre la commande et ses arguments. La commande ls-l n'existe pas!

Arborescence de fichiers

L'arborescence du système de fichier

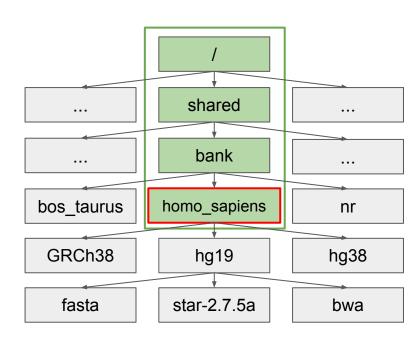
- Le système de fichier peut être vu comme un arbre dont les feuilles sont des dossiers et fichiers. On peut se déplacer dans cet arbre.
- Cet arbre contient une racine, le dossier /
- Le dossier / contient notamment
 - un dossier shared *
 - qui lui même contient un dossier bank
 - qui lui même contient un dossier homo_sapiens
 - ...
- Chemin du dossier
 - /shared/bank/homo_sapiens



Faire référence à un dossier ou fichier ?

- 1) En spécifiant un chemin depuis la racine.
 - o On parle de chemin absolu

\$ cd /shared/bank/homo_sapiens

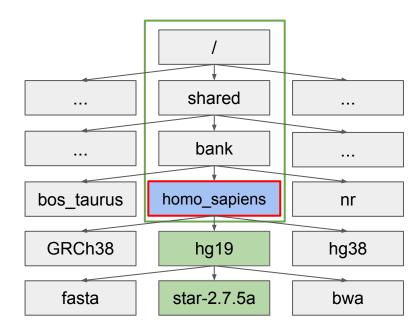


Faire référence à un dossier ou fichier ?

- 2) En spécifiant un chemin depuis le répertoire courant.
 - Le répertoire courant est celui dans lequel
 l'utilisateur se trouve à un instant t.
 - Le chemin sera relatif au répertoire courant.

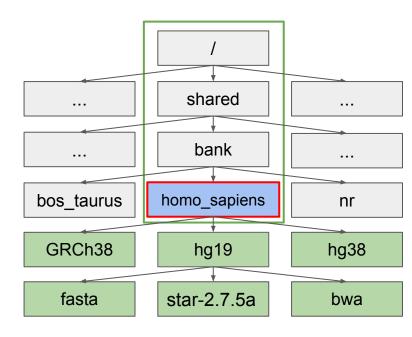
```
# Depuis homo_sapiens on peut aller dans
hg19 puis star

$ cd hg19/star-2.7.5a
# ou cd ./hg19/star-2.7.5a
# Avec "." pour indiquer le répertoire
# courant.
$ cd - # le répertoire précédent
$ cd ./hg19/star-2.7.5a
```



Afficher l'arbre des sous-dossiers du dossier courant

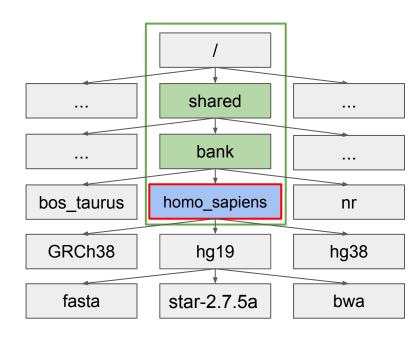
```
$ cd /shared/bank/homo sapiens
$ tree -d # List directories only
I-- GRCh38
  |-- bwa
  -- fasta
  |-- gff3
  -- gnomad
    |-- 2.1
       |-- exomes
       `-- genomes
     `-- 3.0
       `-- genomes
  |-- gtf
  |-- star -> star-2.6.1a
  |-- star-2.6.1a
  `-- star-2.7.5a
|-- hg19
```



Faire référence à un dossier ou fichier ?

- 3) Depuis le répertoire courant on peut avoir besoin de **remonter dans l'arborescence**.
 - L'opérateur '...' permet de remonter d'un niveau

```
# e.g pour aller dans le dossier
shared depuis le dossier
homo_sapiens
$ cd ../../
```

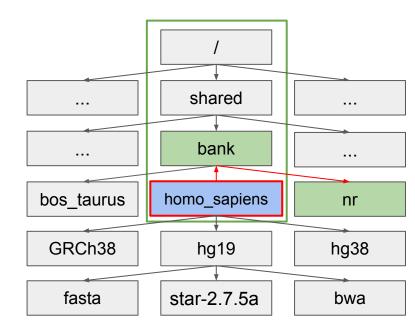


Faire référence à un dossier ou fichier ?

Chemin relatif

```
$ cd /shared/bank/homo_sapiens

# E.g pour aller dans le dossier
nr depuis le dossier homo_sapiens
$ cd ../nr
```



Autocompletion

- Si vous voulez briller en société ou en famille en donnant l'impression de taper vite, utilisez l'auto-complétion
 - De manière plus générale c'est essentiel pour taper un chemin sans se tromper.



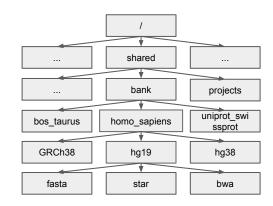
- E.g. Aller dans le répertoire
 - /usr/local/bin

Vous n'avez pas fini d'entendre

<TAB><TAB>

L'arborescence: Demo

On utilise ci-dessous la commande pwd (print working directory) et la commande cd (change directory). *



```
$ cd /shared/bank/homo sapiens/hg38/star-2.7.5a # On se déplace dans le dossier star
                                     # On imprime le chemin vers le répertoire courant
$ pwd
$ cd ..
                                     # On remonte d'un répertoire (hg38)
$ cd ../..
                                     # On se déplace dans le dossier bank
                                     # /shared/bank
$ pwd
$ cd ../projects
                                     # On se retrouve 1 cran plus haut puis projects
                                     # On voit le contenu du dossier "projects"
$ 1s
$ 1s ./
                                     # On voit le contenu du répertoire courant "./"
$ cd ../b<TAB>/u<TAB><TAB>p<TAB><TAB> <TAB> # Aller dans uniprot swissprot
                                     # On se retrouve dans /shared/bank/uniprot swissprot
$ pwd
```

^{*} Utilisez la **complétion** pour les noms les noms de fichier (**touche <TAB>**) et éventuellement les noms de commandes

L'arborescence quelques astuces

- Si vous êtes l'utilisateur *cnorris*. Le dossier qui stocke vos documents est par défaut /shared/home/cnorris *
 - i.e 'dossier utilisateur' ou dossier **home**.
 - Il est symbolisé par ~ (tilde).
 - AltGr + 2 (PC), Alt + n + espace (OSX)

```
GRCh38
                   hq19
                                     hq38
 fasta
                   star
                                     bwa
```

bos taurus

shared

bank

homo sapiens

projects

uniprot swi

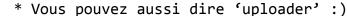
```
$ whoami
                 # votre login
$ cd /
                 # On est à la racine
$ pwd
                 # /
$ 1s ~
                 # On liste le contenu du home
$ mkdir ~/tmp
                 # On crée un répertoire 'tmp' dans le home (make directory)
$ cd ~/tmp
                 # On se déplace dans le dossier tmp nouvellement créé
$ cd
                 # Equivalent de cd ~
                 # n'est pas la même chose que ~/tmp, il est vidé automatiquement
$ cd /tmp
```

²⁴

Où stocker vos fichiers/dossiers?

- Varie selon les plateformes.
 - Se renseigner.
- A l'IFB
 - Votre "maison": ~ (e.g. /shared/home/cnorris)
 - Ce dossier est très limité en stockage
 - Pour les fichiers et dossiers très peu volumineux
 - Pas pour faire des analyses
 - Utiliser la commande cd (sans argument) pour vous rendre dans ce dossier
 - Le chemin vers le dossier home est symbolisé par ~
 - Quota de 5Go
 - Votre dossier projet (e.g /shared/projects/facts)
 - C'est le dossier dans lequel vous devez téléverser* vos données
 - C'est LE dossier pour lancer vos analyses ...





Créer des répertoires

On utilisera la commande mkdir (make directory).

```
$ cd /shared/projects//# remplacer /
                   # On crée le dossier
$ mkdir chip-seq
$ 1s -1
                       # Vérifier la création du dossier
$ cd chip-seq
                       # Equivalent de cd ./chip-seq *
                  # On crée deux dossiers d'un coup
$ mkdir bam fastq
$ 1s -1
                       # On a bien deux dossiers
$ cd fastq
                       # On se déplace dans fastq
$ cd ../..
                       # On remonte de deux niveaux
$ mkdir -p rna-seq/output/bam # On créé un chemin vers un dossier 'bam'
$ 1s -R
                       # On liste Récursivement les dossiers
 tree
```

^{*} L'utilisation de ./ est souvent facultative.

Exercices

- 1. Déplacez-vous dans votre dossier projet
- 2. Créez un répertoire annotations dans votre dossier projet
- 3. Déplacez-vous dans le dossier annotations
- Dans ce dossier créez un dossier hg38 et son sous-dossier gff (hg38/gff)
- 5. Déplacez-vous dans le répertoire hg38/gff
- 6. Déplacez-vous dans annotations.
- Créez un sous-dossier mm10 et son sous-dossier gff (mm10/gff)
- 8. Déplacez-vous dans mm10/gff
- 9. Depuis ce dossier listez le contenu du dossier hg38

Solution de l'exercice

```
$ cd /shared/projects/<project>/
                                         # remplacer 
$ mkdir annotations
                                         # On crée le dossier
$ cd annotations
                                         # On se déplace
                                         # Où sommes nous ?
$ pwd
$ # On crée le dossier gff dans hg38
$ mkdir -p hg38/gff
$ cd hg38/gff
                                         # On se déplace
$ cd ../..
                                         # On se déplace dans annotations
$ # On crée le dossier gff dans mm10
$ mkdir -p mm10/gff
$ cd mm10/gff
$ ls ../../hg38
                                         # On voit un dossier gff
```

A propos du serveur: Un maître et des esclaves

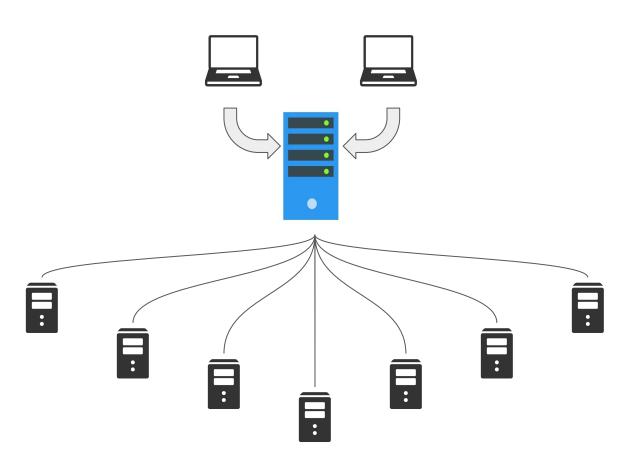
Le cluster de calcul

- Regroupement de machines
 - Machines: "noeuds/node"
- Gestion transparente pour les utilisateurs
- Connexion depuis le monde entier
 - Nécessité de se connecter à distance
- Accès partagé
 - De nombreux utilisateurs
 - Nécessité d'adopter des règles.
 - Gestion des ressources de calcul
 - Gestion des ressources de stockage





Maître et esclaves





Master



Esclave



Users

Ne pas surcharger le maître de tâches

- Le maître a beaucoup de travail. Il s'occupe des esclaves
 - Ne pas le déranger
 - Si le maître est trop sollicité, il ne peut plus s'occuper des esclaves
 - Seules les commandes peu gourmandes en ressources (e.g ls, cd) sont acceptées sur le maître, dont le nom est, ici, clust-slurm-client.
 - Les commandes plus gourmandes doivent être lancées sur l'un des noeuds esclaves.

Demander à un noeud de travailler

- Un programme disponible sur le maître (SLURM) permet de réserver des ressources (des processeurs sur des noeuds).
- Quand la tâche est réalisée les ressources sont libérées

SLURM: la commande srun

On réserve un processeur sur un noeud par défaut.

\$ srun -p fast --cpus=1 --men=2GB hostname

\$ srun -p fast --cpus=1000 hostname

Utiliser srun.

Cpu-node-10.ifb.local

Le noeud qui m'a été assigné par srun, le vôtre est différent



```
$ hostname
clust-slurm-client.ifh.local
# On lance 'hostname' en réservant un processeur sur un noeud:
$ srun hostname
cpu-node-71.ifb.local
# Les paramètres implicites sont:
```

Ca ne fonctionne pas: srun: error: CPU count per node can not be satisfied

Info: le serveur IFB-core-cluster

- Hébergé à l'IDRIS (<u>http://www.idris.fr/</u>)
- Capacité actuelle 1904 coeurs physiques
 - soit 3808 coeurs "hyperthreadés"
- Plus d'info
 - https://ifb-elixirfr.gitlab.io/cluster/doc/cluster-desc/

Manipuler des fichiers

Télécharger et décompresser un fichier

- Pour le téléchargement, on pourra utiliser par exemple la commande wget.
- Pour la décompression on utilisera la commande gunzip si le fichier a été compressé avec l'algorithme gzip (extension .gz)

Le fichier hg38_exons.bed

Contient les coordonnées (début/fin) des exons humains au format BED.

```
Le format bed (Bed6) (http://genome.ucsc.edu/FAO/FAOformat.html#format1)
Format tabulé (les colonnes sont séparées par des tabulations)
Chromosome Start End Name Score Strand (Others...)
chr1
                                      VCAM1|ENST00000370115|protein_coding
       100719763
                       100719924
                                      UBE4B|ENST00000253251|protein_coding
chr1
       10072027
                       10072214
chr1
       10072027
                       10072214
                                      UBE4B|ENST00000343090|protein_coding
                                      UBE4B|ENST00000377153|protein_coding
chr1
       10072027
                       10072214
chr1
                                      VCAM1|ENST00000370119|protein_coding
       100720475
                       100720565
                                      VCAM1|ENST00000294728|protein_coding
chr1
       100720475
                       100720751
                                      VCAM1|ENST00000347652|protein_coding
chr1
       100720475
                       100720751
                                       VCAM1 | ENST00000370115 | protein_coding
chr1
       100720475
                       100720751
```

^{*} Positions Start et End sont toujours données par rapport au sens 5'/3' du brin +. Les coordonnées sont 'zero-based, half-open'.

Visualiser le contenu d'un fichier

- On utilisera less ou more (*) pour parcourir le fichier ligne à ligne (logiciels de type 'pager').
- On utilisera head ou tail pour voir les n premières ou n dernières lignes d'un fichier.
- La commande cat permet de renvoyer tout le contenu d'un fichier sur la sortie standard (l'écran).
 <ctrl> + c (cancel) pour arrêter.
- Les raccourcis clavier dans less sont les mêmes que pour la commande man.

Raccourcis dans less:

- ↑ : se déplacer vers le haut.
- ↓ : se déplacer vers le bas.
- > : Aller à la première ligne.
- < : Aller à la dernière ligne.

/chr: pour chercher le terme 'chr' (puis touche 'enter').

- **n** : (**n**ext) pour chercher la prochaine occurrence de 'truc'.
- p: (previous) pour chercher l'occurrence précédente de 'truc'.
- **q** : pour **q**uitter.

^(*) Less does more or less the same as more, but rather more than less, I like less more than more (Jacques van Helden)

Exercices

- Utilisez la commande head pour regarder les 10 premières lignes du fichier hg38_exons.bed
- Utilisez la commande tail pour regarder les 10 dernières lignes du fichier hg38_exons.bed
- 3. Promenez-vous dans le fichier hg38_exons.bed en utilisant la commande less. Quittez less.
- 4. Renvoyer le contenu du fichier à l'écran avec cat.

Truc: si la lecture vous fatigue, utilisez <ctrl> + c (cancel) pour arrêter le défilement.

Solutions

- Utilisez la commande head pour regarder les 10 premières lignes du fichier hg38_exons.bed
- Utilisez la commande tail pour regarder les 10 dernières lignes du fichier hg38_exons.bed
- Promenez-vous dans le fichier hg38_exons.bed en utilisant la commande less.
 Quittez less.
- 4. Renvoyer le contenu du fichier à l'écran avec cat.

Truc: si la lecture vous fatigue, utilisez <ctrl> + c (cancel) pour arrêter le défilement.

```
# Solution
$ head -n 10 hg38_exons.bed
$ tail -n 10 hg38_exons.bed
$ less hg38_exons.bed # q to quit
$ cat hg38_exons.bed
```

Compter les lignes d'un fichier

Utiliser la commande wc (word count) avec l'argument -1 (line).

```
$ srun wc -1 hg38_exons.bed # 1261870 exons
```

Extraire des colonnes

- Pour extraire des colonnes on utilisera la commande cut avec l'argument -f
 (field)
- Les colonnes du fichiers doivent nécessairement être séparées par une tabulation (sinon utiliser l'argument -d pour 'delimiter')

Truc: si la lecture vous fatigue, utilisez <ctrl> + c (cancel) pour arrêter le défilement.

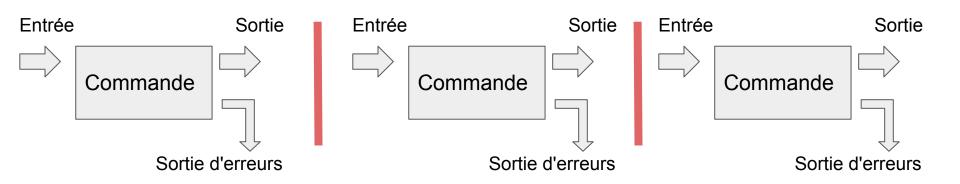
```
$ srun cut -f 1 hg38_exons.bed # extraire la colonne 1
$ srun cut -f 1,2 hg38_exons.bed # extraire les colonnes 1 et 2
$ srun cut -f 2,1 hg38_exons.bed # cut ignore malheureusement
# l'ordre indiqué
$ srun cut -f 3-5 hg38_exons.bed # extraire la colonne 3 jusqu'à 5
$ srun cut -f 3- hg38_exons.bed # extraire depuis la colonne 3
# jusqu'à la fin de la ligne
```

Trier un fichier

- Il faut utiliser la commande sort (tri alphabétique par défaut).
 - -k (key): e.g
 - -k1, 1 utiliser les caractères de la kolonne 1 à 1 pour le tri.
 - -k2, 2nr utiliser les caractères de la colonne 2 à 2 pour faire un tri numérique (entiers) en inversant l'ordre (reverse).
 - -k2, 2g (--general-numeric-sort) pour effectuer, sur la colonne 2, un tri sur des valeurs décimales.
 - \$ # Tri alphabétique en considérant tous les caractères de chaque ligne
 - \$ srun sort hg38_exons.bed
 - # Tri par chromosome (colonne 1)
 - \$ srun sort -k1,1 hg38_exons.bed
 - # Trier le fichier sur la colonne 1 (chromosomes, tri alphabétique)
 - # puis par colonne 2 (starts, tri numérique):
 - \$ srun sort -k1,1 -k2,2nr hg38_exons.bed # Trier les lignes par coordonnées

Redirections

Enchaînement de commandes



- Entrée standard (stdin): un fichier ou du texte (un flux de texte).
- Sortie standard (stdout, "output 1"): renvoyée à l'écran par défaut et transférée via le tube.
- Erreur standard (stderr, "output 2"): renvoyée à l'écran par défaut et non transférée via le tube.
- Opérateurs de redirection
 - I : le caractère "pipe" passe le flux de texte stdin à une autre commande
 - o > file.txt: stocke le flux stdout en créant (ou écrasant) le fichier file.txt
 - o >> file.txt: stocke le flux stdout en ajoutant des lignes dans le fichier file.txt
 - 2> log.txt: stocke le flux stderr dans un fichier nommé log.txt
 - o 1> file.txt 2> log.txt: stocke stdout dans un fichier et stderr dans un autre

Exercices





- Hommage à Marseille
 - Une bouteille de pastis à gagner
 - Utilisez les commandes head pour visualiser les 51 premières lignes du fichier hg38_exons.bed et renvoyer le résultat dans less
- Hommage au finistère
 - Un bouteille de chouchen à gagner !
 - Utilisez les commandes head et tail pour récupérer la 29ème ligne du fichier hg38_exons.bed.

Solution

```
# On utilise head puis un tube qui renvoie vers less.
# Tapez q pour quitter.
$ head -n 51 hg38_exons.bed | less
# On récupère les 29 premières lignes avec head,
# puis on extrait de ce flux de texte la dernière ligne avec tail
$ head -n 29 hg38_exons.bed | tail -n 1
```

Demo: enchaînements de commandes

```
$ # Obtenir la liste non redondante de chromosomes présents dans le fichier
$ srun cut -f1 hg38 exons.bed | srun sort | srun uniq
# Nombre de chromosomes différents
$ srun cut -f1 hg38 exons.bed | srun sort | srun uniq | wc -1
$ # Obtenir la liste des chromosomes présents dans le fichier et
$ # le nombre d'occurrence de chacun d'entre eux
$ srun cut -f1 hg38 exons.bed | srun sort | srun uniq -c # '-c=count'
$ # La liste des chromosomes présents dans le fichier et leur nombre trié
$ # par ordre décroissant (-r: reverse, -n: numeric, -k: 'kolonne')
$ srun cut -f1 hg38 exons.bed | srun sort | srun uniq -c | srun sort -nr -k 1,1
```

Note: La commande uniq permet d'éliminer les doublons dans un flux de texte trié.

Exercices I

- En quoi la commande less diffère-t-elle de la commande more ? (15 pts)
- En utilisant la command grep indiquez : (5 pts)
 - Combien y-a-t-il d'exons sur le chromosome 22 ?
 - Combien de lignes correspondant aux exons présents sur le chromosome chr22 contiennent le terme lincRNA?

Exercices I

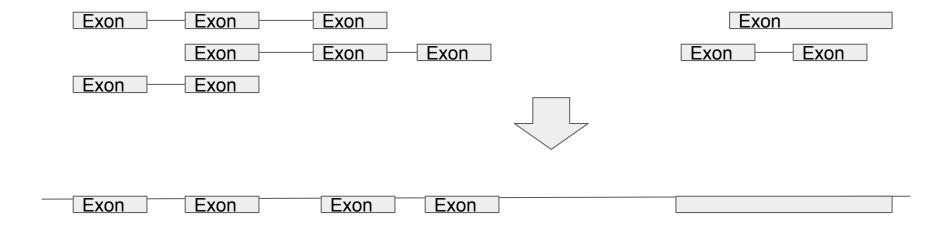
En utilisant la command grep

- Q1: less does more or less the same as more, but rather more than less, I like more less than more
- Combien y-a-t-il d'exons sur le chromosome 22 ?
- Combien de lignes correspondant aux exons présents sur le chromosome chr22 contiennent le terme lincRNA?

```
$ srun grep "chr22" hg38_exons.bed | wc -1  # n = 27854
$ srun grep "chr22" hg38 exons.bed | srun grep "lincRNA" | wc -1 # 846
```

Exercice II

- What is the genome fraction covered by exons?
 - We must perform the operation below



We will need bedtools

Bedtools

- A software to perform arithmetic operations on genomic coordinates.
 - http://bedtools.readthedocs.org/en/latest/content/overview.html
- Some example usages:
 - Extend/slop regions.
 - Compare regions (intersect).
 - Merge regions.
 - Format conversion.
 - 0 ...
- The **bedtools** command is associated with a set of **sub-commands**.

Exercice with bedtools

- Use bedtools with -h argument.
 - What do you see ?
- Ask for some help about the merge command (bedtools merge -h)
 - Looks at the arguments.
 - Read the note at the end of the command. Why is it important?

Exercice with bedtools

- Use bedtools with -h argument.
 - O What do you see ?
- Ask for some help about the merge command (bedtools merge -h)
 - Looks at the arguments.
 - Read the **note** at the end of the command. Why is it important?

```
Solution
```

```
$ module load bedtools/2.29.2
$ bedtools -h  # l'ensemble des sous commandes
$ bedtools merge -h # utiliser l'argument -i
# la note indique que les régions génomiques doivent être triées au préalable.
```

Exercice

Use bedtools sort and bedtools merge to merge overlapping regions/exons.

Exercice

Use bedtools sort and bedtools merge to merge overlapping regions/exons.

```
$ srun bedtools sort -i hg38_exons.bed | srun bedtools merge
```

How to save results to a file?

- Use the > redirection operator.
 - Erase file if it exists.
- >> can be used to add lines to an existing file.

```
$ srun bedtools sort -i hg38_exons.bed | srun bedtools merge >
hg38_exons_merged.bed
$ ls  # A new file was created
```

Some arithmetic with awk

Awk

- Awk is a command available on most linux system.
- Awk has its own language.
- Awk allows to perform oneliners (and more)
- The prototype of a awk command is the following:

```
awk 'BEGIN{action}condition{action}END{action}' fichier
```

Each set of brace is associated to a particular task:

```
BEGIN{before opening the file}
{for each line}
END{after rading all lines}
```

Awk

- Awk has special variables.
- Examples:

```
FS: Field Separator.

OFS: Output Field Separator.

NR: Number of Row.

NF: Number of Field.

$0: The current line

$1,$2,$3 (...): columns 1,2 ou 3 (...) of the current line
```

Exemple

```
# print columns 2 and 1; \t is the tabulation character
$ srun awk 'BEGIN{FS="\t"}{print $2,$1}' hg38 exons.bed
# print columns 2 and 1 with tabulated output
$ srun awk 'BEGIN{FS=0FS="\t"}{print $2,$1}' hg38 exons.bed
# print columns 2 and 1 with tabulated output and line number
$ srun awk 'BEGIN{FS=0FS="\t"}{print NR,$2,$1}' hg38 exons.bed
# Compute start - end for each line
$ srun awk 'BEGIN{FS=0FS="\t"}{print $3-$2}' hg38 exons.bed
# Apply a condition and print the 3 first column
$ srun awk 'BEGIN{FS=0FS="\t"}$1=="chr1"{print $1,$2,$3}' hg38 exons.bed
```

Exercice

Calculer la somme des fragments (awk)

Exercice: Calculer la somme des fragments (awk)

```
# Calculer à chaque ligne la somme cumulée de la taille des fragments
# Notez que les ";" permettent de séparer des instructions
# s est une variable que l'on déclare à 0
$ srun awk 'BEGIN{FS="\t"; s=0}{s=s+$3-$2; print s}' hg38_exons_merged.bed
# Ou encore
srun awk 'BEGIN{FS="\t"; s=0}{s=s+$3-$2}END{print s}' hg38_exons_merged.bed
# A vos calculettes (vous pouvez utiliser R).
```

Aller plus loin avec awk

• Le prototype d'une commande awk peut être un peu étendu en ajoutant des 'patterns' (sélecteurs ou critères).

```
awk 'BEGIN{} condition {} END{}' fichier
```

 Le critère pourra être une expression régulière (voir plus loin) ou une expression logique

```
# exemples: test si a égal b. Imprime si vrai.
awk 'a == b {} END{}' fichier

# Exemple: imprime si la colonne 1 vérifie une expression régulière.
awk '$1 ~/regExp/ {print}' fichier
```

Exemples avec des patterns

```
# La première ligne
$ srun awk 'NR == 1 {print}' hg38_exons_merged.bed

# La ligne 2 à 10
$ srun awk '{OFS="\t"} NR >= 2 && NR <= 10 {print NR, $0}' hg38_exons_merged.bed

# Les lignes dont la colonne 1 contient la chaîne 'chr19'.
$ srun awk ' $1 ~/chr19/ {print}' hg38_exons_merged.bed
```

Expressions régulières

Permettent de décrire un motif dans une chaîne de caractères.

	un caractère quelconque
[a-z]	une lettre minuscule (interval, ex : [u - w])
[A-Z]	une lettre majuscule (interval, ex : [U - W])
[ABc]	A ou B ou c
[^ABab]	Toute lettre différente de a et b.
۸	Début de ligne.
\$	Fin de ligne
X*	0 à n fois le caractère x.
X+	1 à n fois le caractère x.
x{n,m}	Le caractère x répété n à m fois.

Exemples

\.txt\$	Toute chaîne finissant par ".txt"
^[A - B]	Une chaîne débutant par une majuscule.
^.{4,6}\.txt\$	Quatre à 6 caractères suivis de ".txt"
^[A - Z].*\.txt\$	Une chaîne débutant par une majuscule et finissant par ".txt"
^\$	Une chaîne de caractères vide.
^[^0 - 9]*\.sh\$	Une chaîne ne contenant pas de chiffres et se terminant par ".sh"

Exercice

• En utilisant awk et un pattern, construire une expression régulière permettant de récupérer, dans le fichier hg38_exons_merged.bed, les lignes dont la colonne 1 contient chr1, chr2 et chr9 (et rien d'autre quoi que puisse contenir le fichier).

Solutions

```
# awk chr1, chr2 et chr9 (et rien d'autre !)
$ srun awk ' $1 ~/^chr[129]$/ {print}' hg38_exons_merged.bed
```

Les raccourcis clavier du terminal

Ctrl + a Début de ligne

Ctrl + e Fin (end) de ligne

Ctrl + c Annuler (cancel)

Ctrl + u Déléter avant le curseur

Ctrl + k Déléter après curseur

Ctrl + I Effacer le terminal (clear)

Ctrl + r Rechercher dans les commandes précédentes

Alt + → Déplacement mot à mot

SLURM/SGE: mode non interactif

Interactif	Non interactif / Mode batch		
[A Roscoff] Job limité à : - 2 jours - 2 processeurs (sauf pendant eba) - Faible priorité	Presque pas de limites : - Pas de limite de temps - Possibilité de réserver jusqu'à 32 / 48 voir 128 "cpu" - Haute priorité des instructions traitées		
"Manuel"	"Automatisable" : Possibilité de soumettre via un script (<i>e.g.</i> 20000 jobs)		
Vous pouvez surveiller vos calculs via les sorties standard voir intervenir s'ils plantent ou s'ils demandent une intervention (confirmation ou ajustement)	Vous perdez la main donc vous devez "rediriger" les sorties de vos programmes dans des fichiers		
"Qui tue le père tue le fils" : quand le terminal est fermé il met fin à tous les processus lancés	Les calculs/jobs sont lancés, vous perdez la main dessus mais l'ordonnanceur le surveille pour vous		

72

Slurm utilisation avancée

- SLURM user guide
 - https://ifb-elixirfr.gitlab.io/cluster/doc/slurm_user_guide/#submit-a-job-usingsbatch
- Un petit tutoriel vidéo de 5 minutes pour bien appréhender le cluster de l'IFB et SLURM (Julien Seiler et David Benaben)
 - https://asciinema.org/a/zZrSazw5Fh7YmpHvUfvVQnzNi

Pour aller plus loin

- Supports de cours :
 - ABiMS : <u>Linux Initiation</u>, <u>Linux Avancé</u>, <u>Cluster</u>

- Agenda
 - ABiMS: http://abims.sb-roscoff.fr/training/courses
 - Genotoul : http://bioinfo.genotoul.fr/index.php/training-2/training/
 - 0 ...

Merci pour votre attention.

Remerciements à toutes l'équipe pédagogique et technique pour le support

Bonus

Les diapos suivantes vous permettent, si vous le désirez, d'approfondir votre pratique de la ligne de commande Unix

A propos de CONDA®

- C'est un gestionnaire de d'outils et packages
 - o Tous les langages sont supportés : Python, R, Ruby, Java, Javascript, C, ...
- Les outils viennent pré-compilés avec toutes les library systèmes et dépendances.
 Cela évite ainsi les problèmes d'installation
- Il permet la création d'environnement qui isole le ou les outils des autres. On peut ainsi disposer de plusieurs versions d'un outil et éviter les conflits de versions de dépendances.
- Les environnements sont <u>exportables</u> pour la reproductibilité

```
# Création d'un environnement conda (ici avec installation
# de star, salmon, deseq2
$ conda create -n rnaseq star==2.5.3 salmon bioconductor-deseq2
```

Le terminal...

Demo

Tapez 'ls' dans le terminal (lister les fichiers)

```
[stage36@nz ~]$ ls
mybackup STDIN.e1262930 STDIN.o1262930 tmp
[stage36@nz ~]$
```

lister les fichiers

\$ 1s

Configurer le ~/.bashrc

```
# We declare a new command 'll'. Equivalent to 'ls -l'
alias ll="ls -l"
# When using the 'ls' command, file and directory names will be colored.
# NB use ls --color=none or \ls to cancel this behaviour
alias ls="ls --color"
# When using the 'ls' command, file and directory names will be colored.
alias grep="grep --color"
# If the rm command is used the system will ask before... (but don't use it please)
alias rm="rm -i"
# Changing the prompt display (don't worry it this line seems obscure to you)
export PS1="\[\033[01;34m\]\h\[\033[00m\]\[\033[01;32m\]\[\033[01;32m\]\u
[\033[00;33m\]\w\n\[\033[01;30m\e[0m\e[1;00m\]\] "
```

Using emacs

- Emacs est un éditeur qui permet de modifier un fichier dans le terminal.
- Certains lui préfèreront
 - o vi
 - o Nano, ...
- Some basic emacs commands
 - <ctrl> x + <ctrl> f (open a file)
 - <ctrl> x + <ctrl> s (save)
 - <ctrl> x + <ctrl> c (cancel/quit)
 - <ctrl> + g (si vous êtes perdus)
 - o See emacs refcard
- \$ cp ~/.bashrc ~/.bashrc_back # backup your bashrc
- \$ emacs ~/.bashrc # open ~/.bashrc with emacs
- \$ source ~/.bashrc

Quels dossiers utiliser?



- Votre dossier scratch (e.g /shared/scratch/facts)
 - Le dossier pour lancer vos analyses qui vont générer des données intermédiaires volumineux et ... relativement inutiles

- Pros and Cons
 - **Bâton:** les fichiers plus vieux que X jours seront effacés automatiquement
 - Carotte: les disques de l'espace scratch sont beaucoup plus performants (SSD)

