TD - Introduction à Linux et à l'Environnement Conda

Ghislain Bidaut, Plateforme Cibi, CRCM, Aix-Marseille Université

24/03/2022

1 Familiarisation avec l'environnement Linux

1.1 Découverte du terminal

- Entrez les commandes

```
cd
pwd
cd /tmp
cd -
pwd
```

- Créer le dossier `activite_linux` dans votre répertoire personnel.
- Créer deux fichiers vides `activite_1.txt` et `activite_2.txt` **dans** ce dossier.
- Créer deux fichiers vide en remplaçant les '_' des fichiers précédents par des espaces. Est-ce une bonne idée ?
- Afficher le contenu du dossier `activite_linux` en explorant les différentes options de la commande. Enregistrer ce contenu dans un fichier contenant uniquement une ligne par nom de fichier.
- Ajouter les alias suivants de manière permanente dans votre environnement

```
cp = 'cp -i'
rm = 'rm -i'
mv = 'mv -i'
```

- Lister les 30 dernières commandes.
- Utiliser la commande `find` pour trouver les fichiers portant l'extension `.txt` dans votre répertoire utilisateur.

1.1.1 Solution

```
cd
mkdir activite_linux
cd activite_linux
touch activite_1.txt
touch activite_2.txt
touch "activite 1.txt"
touch "activite 2.txt"

# Différéntes commandes
ls
ls -l
ls -la
ls -lat

ls -l1 > liste_contenu_dossier.txt

# Ajout des lignes suivantes dans .bashrc
cp = 'cp -i'
rm = 'rm -i'
mv = 'mv -i'

# 30 dernières commandes
history 30

# touver les fichiers texte
find . -name '*txt'
```

1.2 Manipulation d'un fichier à plusieurs colonnes

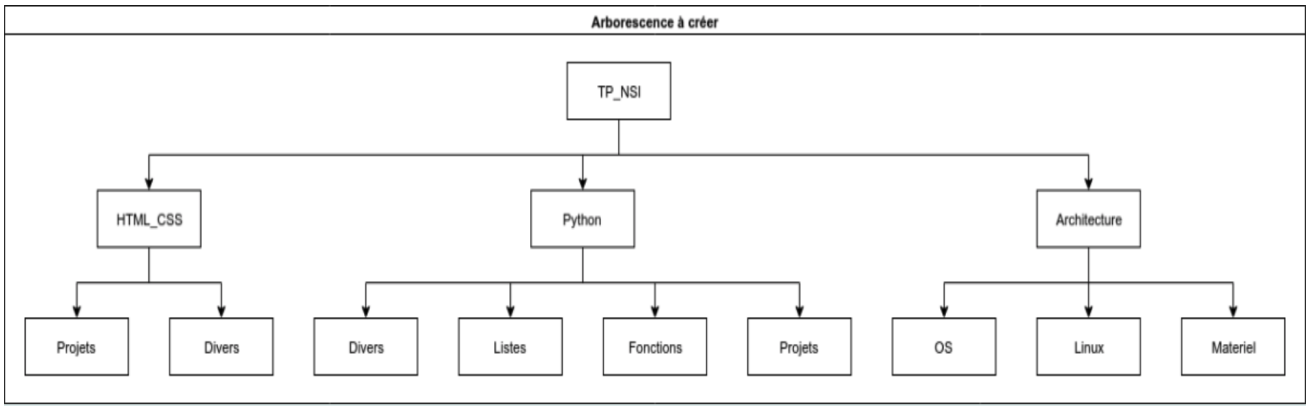
- Télécharger le fichier d'annotations de la levure à l'adresse ftp://ftp.ensemblgenomes.org/pub/release-37/fungi/gtf/saccharomyces_cerevisiae/Saccharomyces_cerevisiae.R64-1-1.37.gtf.gz (ftp://ftp.ensemblgenomes.org/pub/release-37/fungi/gtf/saccharomyces_cerevisiae/Saccharomyces_cerevisiae.R64-1-1.37.gtf.gz)
- Décompresser ce fichier
- Afficher les 5 premières lignes
- Extraire les 4 premières colonnes dans un fichier texte. Parcourir ce fichier avec la commande `less`.
- Extraire uniquement les lignes correspondant aux gènes et les stocker dans un fichier `SC_genes.txt` (indice: utiliser `grep -P`).
- Extraire de `SC_genes.txt` la colonne contenant les identifiants de gènes (exemple `"YDL248W"`). Il faut que les guillemets (") soient supprimés.
- Créer un fichier texte contenant le nom des gènes présents, leur chromosome, leur position chromosomique (début-fin) et le *strand*. En créer une version supplémentaire trié par nom de gène.

1.2.1 Solution

```
wget ftp://ftp.ensemblgenomes.org/pub/release-37/fungi/gtf/saccharomyces_cerevisiae/Sac
charomyces_cerevisiae.R64-1-1.37.gtf.gz
gunzip Saccharomyces_cerevisiae.R64-1-1.37.gtf.gz
head -n 5 Saccharomyces_cerevisiae.R64-1-1.37.gtf
cut -f 1-4 Saccharomyces_cerevisiae.R64-1-1.37.gtf > SC_First5cols.txt
less SC_First5cols.txt
grep -P '\tgene\t' Saccharomyces_cerevisiae.R64-1-1.37.gtf  > SC_genes.txt
cut -f 9 SC_genes.txt | cut -f 1 -d ';'  | cut -f 2  -d ' ' | sed s/\"//g > SC_GeneSymb
ols.txt
cut -f 1,4-5,7 SC_genes.txt > SC_Genes_Data.txt
paste SC_GeneSymbols.txt SC_Genes_Data.txt > SC_genes_data_final.txt
sort -f SC_genes_data_final.txt > SC_genes_data_final_sorted.txt
```

1.3 Création d'un script bash

- Ouvrir l'éditeur de fichiers `gedit` (ou votre éditeur préféré).
- Ecrire un script `bash` appelé `creation_arborescence.sh` qui recrée l'arborescence suivante de manière automatisée.
- Commenter ce script en détaillant les opérations.



- Adapter les permissions sur ce script pour le lancer avec la commande

```
./creation_arborescence.sh
```

- Vérifier le résultat final avec `tree` .

1.3.1 Solution

```
# Mettre le code suivant dans le script 'creation_arborescence.sh'

#!/bin/bash

mkdir TP_NSI
cd TP_NSI

# Création arborescence HTML_CSS
mkdir HTML_CSS
mkdir HTML_CSS/Projets
mkdir HTML_CSS/Divers

# Création arborescence Python
mkdir Python
mkdir Python/Divers
mkdir Python/Listes
mkdir Python/Fonctions
mkdir Python/Projets

# Création arborescence Architecture
mkdir Architecture
mkdir Architecture/OS
mkdir Architecture/Linux
mkdir Architecture/Materiel

Puis chmod +x creation_arborescence.sh
```

2 Installation complète d'un environnement Conda RNA-Seq

2.1 Installation de l'environnement Conda

- Connectez vous au cluster de l'IFB (IFB-Core).

(*Optionnel*: créez un **alias** pour cette commande)

```
ssh user@core.cluster.france-bioinformatique.fr
```

- Installer **miniconda** dans votre environnement.
- Installer les dépôts `bioconda` et `conda-forge` .
- Créer un environnement `ngs` .
- Vérifier que cet environnement ait été correctement installé.
- Activer cet environnement.
- Installation des outils suivants: `fastqc` , `multiqc` , `samtools` , `subread` , `star` , `trimmomatic` .
- Tester ces outils et regarder leurs options de ligne de commande. En particulier, comment spécifie t-on les entrées-sorties ?
- Enregistrer la configuration de cet environnement dans un fichier `RNAseq_env.yml` .
- Désactiver l'environnement `ngs` .
- Effacer l'environnement `ngs` .

- Le recréer sous le nom `rnaseq` à partir du fichier `RNAseq_env.yml` .

2.1.1 Solution

```
wget https://repo.anaconda.com/miniconda/Miniconda3-latest-Linux-x86_64.sh
chmod +x ./Miniconda3-latest-Linux-x86_64.sh
./Miniconda3-latest-Linux-x86_64.sh

Miniconda3 will now be installed into this location:
/home/bidaut/miniconda3

  - Press ENTER to confirm the location
  - Press CTRL-C to abort the installation
  - Or specify a different location below

[/home/bidaut/miniconda3] >>> ENTER


Do you wish the installer to initialize Miniconda3
by running conda init? [yes|no] yes

# (fermer shell puis le relancer)

conda config --add channels defaults
conda config --add channels bioconda
conda config --add channels conda-forge

conda create -n ngs
conda env list
conda activate ngs
conda install fastqc multiqc samtools subread star trimmomatic

fastqc -h
multiqc -h
samtools
featureCounts
STAR-h
trimmomatic

conda env export > RNAseq_env.yml
conda deactivate
conda env remove -n ngs
conda env create -n rnaseq -f RNAseq_env.yml
```

3 Utilisation du cluster de calcul

- Connectez vous au cluster de l'IFB (IFB-Core).
- Créer un script **Bash** permettant de lister les fichiers de votre répertoire en format long.
- Y ajouter les variables `SBATCH` suivantes:
    - Utilisation du nom de job: `lsformation`
    - Envoi d'un mail pour signaler le début et la complétion du job.
    - Utilisation de la partition `fast`
    - Limiter la durée du script à 10 minutes
    - Demander 1Go de mémoire vive
    - Demander 1 CPU (Cœur)

- Soumettre ce script à Slurm (commande `sbatch`) sur le compte `form_2022_09` .
- Le “surveiller” avec `squeue` .
- Examiner le résultat de sortie.