Básicos UNIX y conda

Ph D. Stephanie Hereira Pacheco

CTBC-UATX

2023-02-13

class: inverse, center, middle

¿Qué necesitaremos para la clase de hoy?

Para la clase de hoy vamos a necesitar:

- Tener acceso a una terminal, los usuarios de linux y macOS ya cuentan con ella, para los usuarios de windows preferiblemente VirtualBox.
- Tener instalado conda, para esto depende de tu sistema operativo:

```
#macOS
wget https://repo.anaconda.com/miniconda/Miniconda3-latest-MacOSX-x86_64.sh -0 ~/miniconda.sh
```

```
bash ~/miniconda.sh -b -p $HOME/miniconda
```

```
#Linux
bash Miniconda3-latest-Linux-x86_64.sh
```

bash Anaconda-latest-Linux-x86_64.sh



¿Qué es UNIX? - Generalidades

¿Qué es UNIX?

- Es un sistema operativo desarrollado por Ken Thompson y Dennis Ritchie en 1969.
- Fue desarrollado con el objetivo de escribir programas para una sola tarea y que colaboren entre sí además de manejar un flujo de texto que pueda funcionar en una interfaz universal.
- Hasta 1991 era reservado para las supercomputadoras. Luego se implementó un equivalente de libre acceso para Linux (GNU/Linux) y otro basado en él que fue el de macOS.
- Algunos conceptos:

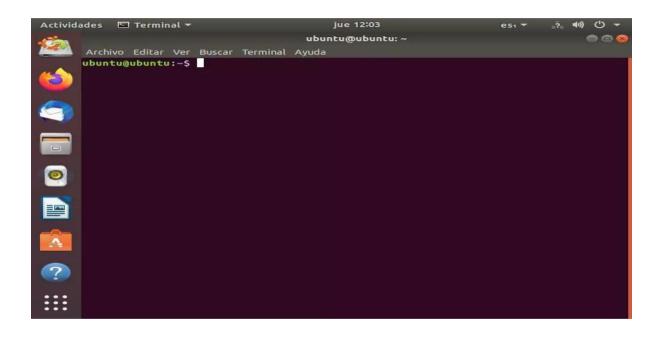
Sistemas de archivos, terminal y códigos.

Sistemas de archivos

- UNIX propone una organización de datos vía archivos y directorios.
- La raíz del sistema es "/" llamado "root". Cualquier directorio o archivo será refernciado a partir de esta raíz.
- Varios ejemplos de directorios comunes son:
 - /etc que contiene los archivos referentes a las configuraciones de los programas
 - /bin y /usr/bin/ contienen los archivos binarios de uso común.
 - /home que contiene los directorios del usuario.
 - ./ ó . la ubicación de nuestro directorio actual.
 - ../ la ubicación del directorio anterior.



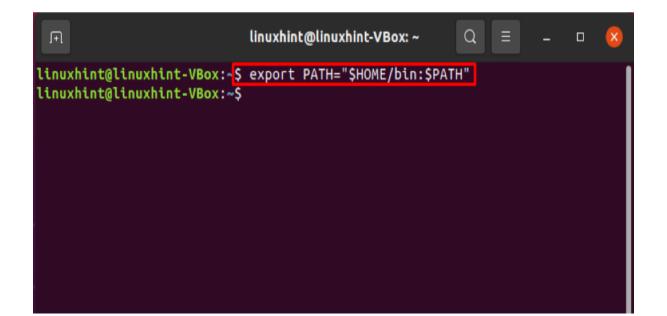
Terminal



- La Terminal es una consola que nos permite ejecutar todo tipo de **códigos** mediante **comandos** (secuencias de palabras o instrucciones).
- Nos muestra en qué directorio nos encontramos y si estamos en un ambiente de conda o no (Esto lo veremos más adelante con mpasidetalle).

Terminal

- PATH es una variable del entorno que almacena una lista de directorios en los cuales Linux debe buscar un comando para poder ejecutarlo.
- Una variable de entorno es una variable que es definida en todo el entorno de ejecución de la shell.



Terminal - Cambiando el PATH

Cambio temporal

export PATH="\$HOME/bin:\$PATH"

Cambio permanente

```
nano ~/.bashrc
#colocamos la línea dentro del archivo
export PATH="$HOME/bin:$PATH"
```

Comandos

Los comandos se ejecutan de la siguiente manera:

```
comando [opciones] [argumentos]
```

- Opciones: Cambia el funcionamiento orifinal del comando.
- Argumento: Información que necesita el comando para realizar su tarea.

Corramos el siguiente comando:

```
ls -l
```

Ahora este:



cd

Este comando nos permite movernos entre directorios "change directory".

```
cd ../ #Referencia relativa
```

cd /home/usr/Documents #referencia absoluta

cd #regresamos al HOME

Is, mkdir, rmdir

ls #lista el contenido de nuestro directorio

mkdir Nuevo_directorio #crear un directorio

rmdir Nuevo_directorio #crear un directorio

rm -r Nuevo_directorio #crear un directorio

COMANDO	FUNCIÓN
ср	Hacer una copia del directorio o archivo
mv	Mover un directorio o archivo / renombrar
cat	Visualizar o listar e imprimir elementos de archivo
zcat	Visualizar o listar e imprimir de archivo de extensión .gz
less	Visualizar arhivo de a poco
head	Visualizar las primeras 10 líneas
tail	Visualizar las últimas 10 líneas
WC	Cuenta palabras
sudo	Permite correr programas con permisos de superusario

COMANDO	FUNCIÓN
history	Despliega el historial de comandos
ln -s	Crear una liga simbólica
clean	Borra comandos en tu ventana
wget	Descagar archivos de internet
ps/ps aux	Procesos activos del sistema
kill	Matar un proceso activo
gzip/gunzip	Comprimir o descomprimir un archivo .gz
tar	Comprimir y descomprimir archivos de extensión .tar
grep/awk	Buscar un patrón dado en un archivo

Permisos de archivo

Al poner este comando en nuestra terminal podemos ver:

```
ls -l
```

```
jpp@jpp: /boot
 op@jpp:/boot$ ls -la
                           4096 2011-05-13 08:52 .
rwxr-xr-x 3 root root
                           4096 2011-05-04 09:27 ...
                         700761 2011-03-18 16:33 abi-2.6.35-28-generic
                         730039 2011-04-11 01:24 abi-2.6.38-8-generic
                         122616 2011-03-18 16:33 config-2.6.35-28-generic
                         130313 2011-04-11 01:24 config-2.6.38-8-generic
            l root root 11008098 2011-04-15 08:58 initrd.img-2.6.35-28-generic
           1 root root 13134896 2011-05-13 08:52 initrd.img-2.6.38-8-generic
                        160988 2010-10-22 09:08 memtest86+.bin
                         163168 2010-10-22 09:08 memtest86+ multiboot.bin
           1 root root 2344143 2011-03-18 16:33 System.map-2.6.35-28-generic
           1 root root 2654256 2011-04-11 01:24 System.map-2.6.38-8-generic
                           1336 2011-03-18 16:35 vmcoreinfo-2.6.35-28-generic
                           1368 2011-04-11 01:26 vmcoreinfo-2.6.38-8-generic
rw-r--r-- 1 root root 4342384 2011-03-18 16:33 vmlinuz-2.6.35-28-generic
rw------ 1 root root 4523936 2011-04-11 01:24 vmlinuz-2.6.38-8-generic
pp@jpp:/boot$
```

Un archivo puede tener derechos de:

- lectura (r)
- escritura (w)

Para un directorio puede tener derechos de:

- lectura (r)
- escritura (w)



Cambiando permisos: chmod

 Añadir permisos de ejecución para el usuario

```
chmod u+x
```

 Añadir permisos de ejecución para el grupo y demás

```
chmod g+w
chmod o-x
```

 Añadir permiso a programa de ejecutarse Añadir permisos de lectura total y totales

```
chmod 755 archivo
chmod 777 archivo
```

```
0 = --- = sin acceso
1 = --x = ejecución
2 = -w- = escritura
3 = -wx = escritura y ejecución
4 = r-- = lectura
5 = r-x = lectura y ejecución
6 = rw- = lectura y escritura
7 = rwx = lectura, escritura y ejecución
```

WILCARD *

El wildcard o comodín es el más conocido y útil, representa cualquier combinación posible, es decir, **todo**. Por ejemplo si ponemos:

```
cp * /home/
```

Estamos indicando que queremos copiar todos los elementos del directorio donde nos encontramos para el HOME.

REDIRECCIÓN > Y >>

Los caracteres > y >> permiten redirigir la salida estándar. Podemos redirigir la saida a un archivo de la siguiente manera:

```
ls > mi_lista.txt
```

Permite hacer un nuevo archivo o reescribir uno existente:

```
ls >> mi_lista.txt
```

USO DE PIPE

- El concepto Pipe procede de la palabra inglesa "pipeline", cuya traducción es "tubería".
- En informática, un pipe es un flujo de datos que circula entre dos procesos que, o bien están estrechamente vinculados, o no tienen un origen común. Esto quiere decir que el resultado arrojado por un programa servirá como entrada para otro programa.

```
Comando-1 | Comando-2 | ... | Comando-N
```

Ejemplo:

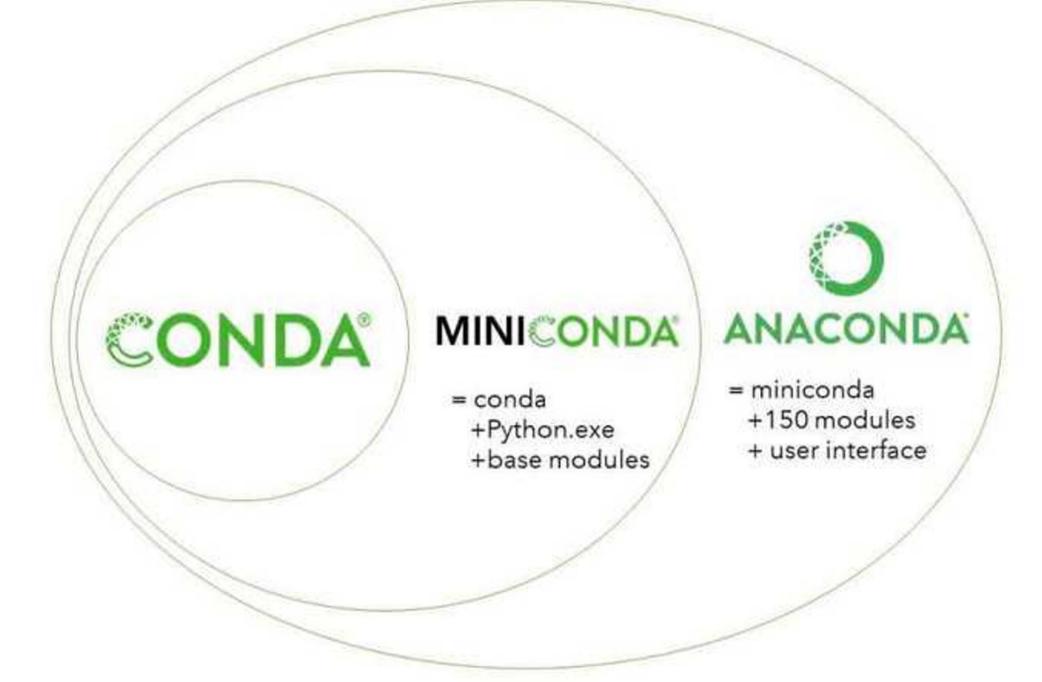
cat archivo.txt |wc -l



¿Qué es conda?

De acuerdo a la definición oficial:

- conda: A package manager helps you find and install packages.
- conda: Un administrador de paquetes que ayuda a encontrar e instalar paquetes.
- Se obtiene mediante Anaconda o Miniconda.
- La instalación dependerá del sistema operativo a utilizar.
- Aunque conda está disponible para Windows, macOS y Linux, no todos los paquetes disponibles para bioinformática son compatibles entre los tres sistemas, siendo la prioridad de paquetes Linux > macOS y en algunos casos, al final, Windows.



¿Por qué Conda?

- Es fácil de usar
- Es multiplataforma
- Se lleva bien con Python
- Maneja entornos o ambientes

Entornos virtuales o ambientes

• Es una ubicación del PATH, aislada del sistema, que previene conflictos de versiones.

- Instalando conda

bash Miniconda3-latest-Linux-x86_64.sh

- Revisando versión

conda info

- Ambientes creados

conda env list

- Agregar canales

```
conda config --add channels r
conda config --add channels conda-forge
conda config --add channels bioconda
```

- Creando entorno

```
conda create -n test3.6 python=3.6 pandas=1.0
```

Removiendo un entorno

mamba

```
conda install -yc conda-forge mamba

mamba create -y -n testpy3.6 python=3.6 pandas=1.0

mamba create -y -n testR3.6 r-base=3.6

mamba create -n picrust2 -c bioconda -c conda-forge picrust2=2.5.0
```

- Activar un ambiente o conda

conda activate qiime2

- Desactivar un ambiente o conda

conda deactivate qiime2

Referencias

- https://mamba.readthedocs.io/en/latest/user_guide/mamba.html
- https://comunidadbioinfo.github.io/cdsb2022/introducci%C3%B3n-aconda..html
- https://omicstutorials.com/getting-started-in-linux-bioinformatics/
- https://docs.conda.io/projects/conda/en/latest/user-guide/install/linux.html