

# 生物情報解析システムの紹介

2020/11/27

## 作業場所

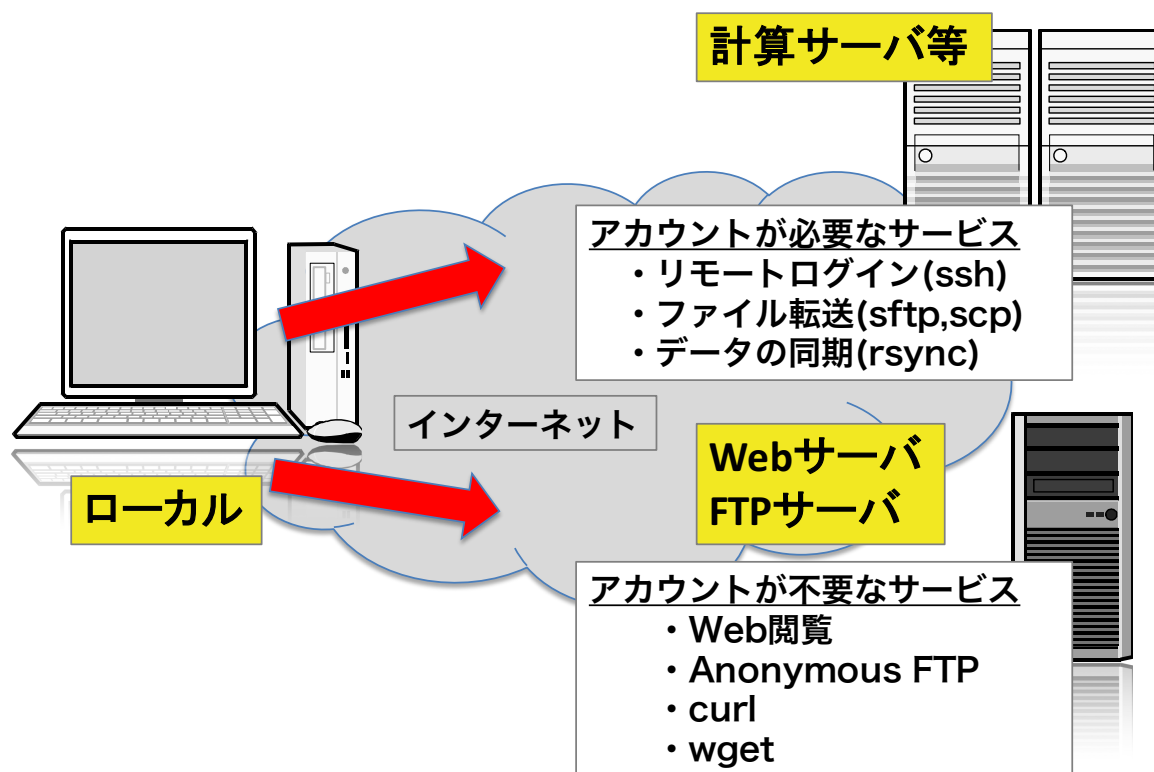
- 以降の作業は、以下のディレクトリで行います。

`~/data/8_bias/`

cd コマンドを用いてディレクトリを移動し、

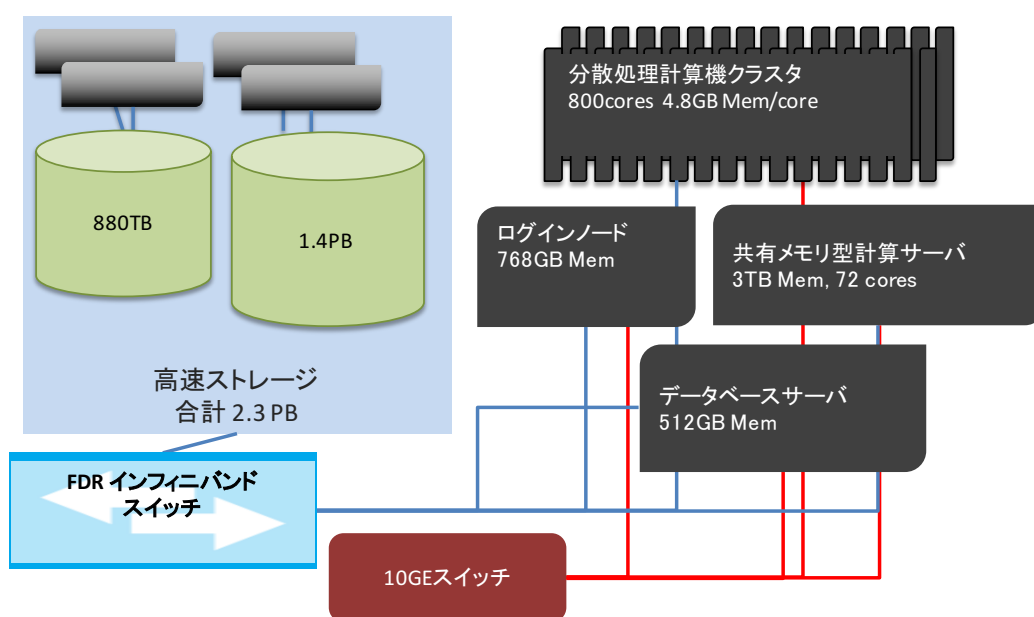
pwd コマンドを利用して、カレントディレクトリが  
上記になっていることを確認してください。

# ネットワークを介したサービス



3

## 生物情報解析システム (bias5)



# 分子生物学アプリケーション

- ・ほとんどのアプリケーションは、/bio/bin 内にあり、どのマシンからでも同様に使用可能です。
- ・/bio/bin への実行パスもログイン時に通っています。
- ・必要なアプリケーションが有りましたらご相談下さい。随時インストールします。
- ・詳細は生物情報解析システムwikiをご覧ください。  
<http://www.nibb.ac.jp/cproom/wiki/index.php>

## bias5へのログイン

bias5へのログインには、sshというコマンドを使用します。

コマンド:

```
ssh ユーザ名@ホスト名  
または  
ssh -l ユーザ名 ホスト名
```

ネットワーク経由で別の計算機にログインします。

```
$ ssh unixr@bias5.nibb.ac.jp  
unixr@bias5.nibb.ac.jp's password:  
Last login: xxx xxx xx:xx:xx 20xx from xxxxx.nibb.ac.jp  
[unixr@bias5-login ~]$
```

# bias5からのログアウト

bias5からログアウトするには、exitコマンドを使用します。

コマンド:

```
exit
```

ネットワーク経由でログインしていた計算機からログアウトします。

```
[unixr@bias5-login ~]$ exit  
logout
```

```
Connection to bias5.nibb.ac.jp closed. ←接続が解除されたメッセージが出る。  
$
```

## 実習(ssh)

sshコマンドを使用して、bias5にログインを行ってください。  
コマンドは以下のようになります。

```
ssh username@bias5.nibb.ac.jp
```

ログイン後はbias5上のホームディレクトリに移動しています。  
どのようなファイルがあるかを確認してください。

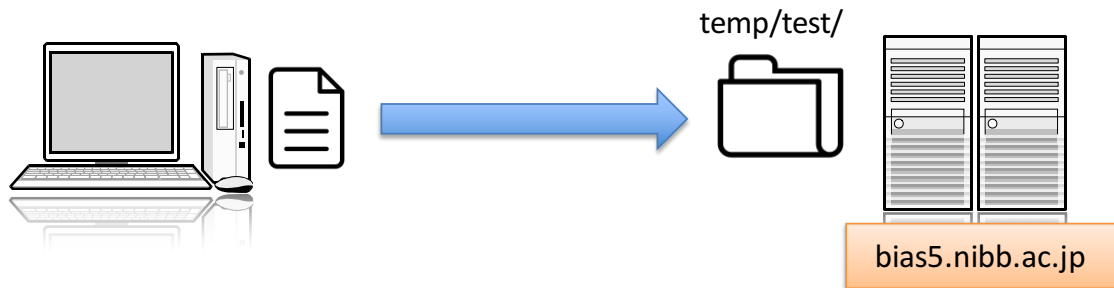
その後、ログアウトを行ってください。

```
exit
```

# リモートファイルコピー (scp)

scp コピー元 コピー先

ネットワーク経由でファイルのやりとりを行います。  
コピー元・先のいずれかにネットワーク上の場所を指定します。

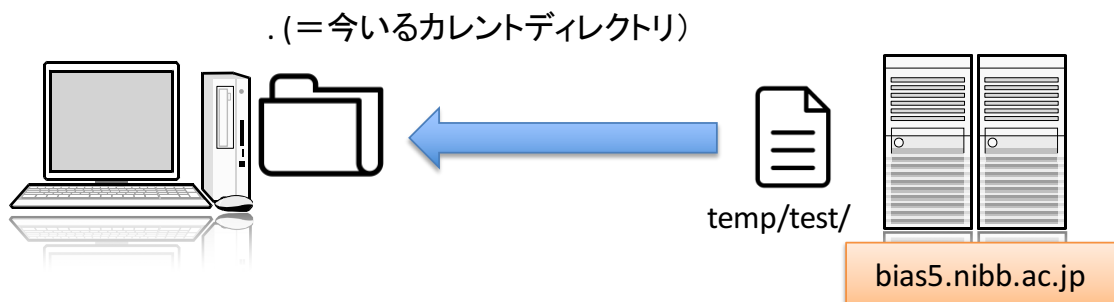


コピー先の指定: `user@host:<where_to_copy_path>`

```
$ scp copyfile username@bias5.nibb.ac.jp:temp/test/
```

# リモートファイルコピー (scp)

先ほどの例ではローカルからネットワーク上にファイルをコピーしたが、逆も可能である。



コピー先の指定: `user@host:<where_to_copy_path>`

```
$ scp username@bias5.nibb.ac.jp:temp/test/copyfile .
```

## 実習 (scp)

scpコマンドを使用して、ローカルにあるファイルをbias5にコピーしてください。コマンドは以下のようになります。

```
scp filename username@bias5.nibb.ac.jp:
```

コピーしたファイルは、bias5のカレント・ディレクトリにあります。sshコマンドを用いてbias5にログインし、lsコマンドを用いて、先程コピーしたファイルがあることを確認してください。

```
ssh username@bias5.nibb.ac.jp
```

## 実習 (scp)

今、ローカルからコピーしたファイルがbias5上にあります。このファイルに変更を加えます。ファイル名をmvコマンドで変更してください。

```
mv filename (yourname).txt
```

一旦、exitコマンドを使用して、ローカルに戻って下さい。

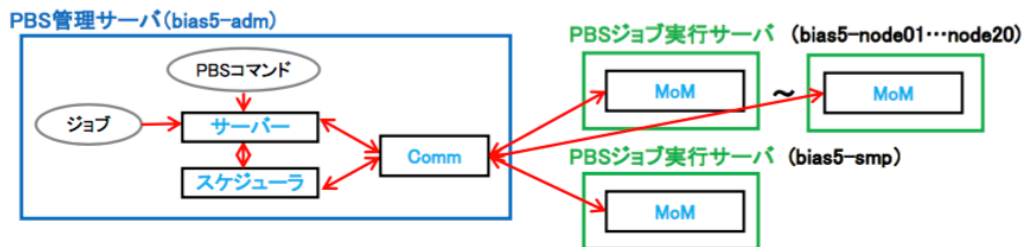
その後、scpを用いて、bias5側からローカルへ先程名前を変更したファイルをコピーしましょう。

```
scp username@bias5.nibb.ac.jp:(yourname).txt .
```

# ジョブ管理システム

大型計算機では、多くのユーザーがプログラム(ジョブ)を実行します。このような場合、連結されたハードウェアそれぞれを最適に動かしてジョブが効率よく処理されるようにするミドルウェアを「ジョブ管理システム」と呼びます。

bias5ではPBS (Portable Batch System)を採用しており、ユーザーはPBSを利用して効率よくプログラムを実行する(=ジョブを投げる)ことができます。



## qsub

ジョブの投入には qsub コマンドを使用します。

```
qsub option script
```

script 部分には、シェルスクリプトファイルを指定します。

スクリプトファイルの例：

```
#!/bin/sh
#PBS -l ncpus=8
cd ${PBS_O_WORKDIR}
bowtie2-build ecoli_genome.fa ecoli
bowtie2 -p ${NCPUS} -U ecoli.fastq -x ecoli -S ecoli.sam
```

# 実習 (qsub)

bias5上で以下のシェルスクリプト `exec_bowtie2.sh` を作成してください。(作成にはemacsを使用してください)

`exec_bowtie2.sh`

```
#!/bin/sh
#PBS -l ncpus=8
cd ${PBS_O_WORKDIR}
bowtie2-build ecoli_genome.fa ecoli
bowtie2 -p ${NCPUS} -U ecoli.fastq -x ecoli -S ecoli.sam
```

その後、qsubを実行します。

```
qsub exce_bowtie2.sh
```

qsubの実行状況は以下のコマンドで閲覧できます。何も出力が無いなら、ジョブの実行は終了しています。

```
qstat -u (your_user_name)
```

# 実習 (qsub)

作成されたファイルは `ecoli.sam` ファイルとなります。  
必要なら、scpを使用してbias5からローカル端末にコピーしてください。

(ローカル端末から実行)

```
scp (your_user_name)@bias5.nibb.ac.jp:ecoli.sam .
```

(bias5からローカル端末のカレントディレクトリにコピーされます)