

EMBOSS

Иван Русинов

EMBOSS

European Molecular Biology Open Software Suite

Пакет консольных биоинформатических программ.

- ▶ унифицированный интерфейс
- ▶ общий формат для задания адреса последовательностей (USA)
- ▶ есть программы для большинства повседневных задач, возникающих при работе с биологическими последовательностями
- ▶ пакет перестал развиваться в 2013, программы устаревают

Помощь по программам

Можно получить справку в командной строке:

Краткое описание основных опций:

```
kodomo:~$ any-emboss-util -help
```

Описание всех имеющихся опций:

```
kodomo:~$ any-emboss-util -help -verbose
```

Подробное описание команды:

```
kodomo:~$ tfm any-emboss-util
```

Поиск программы по описанию:

```
kodomo:~$ wosname "alignment"
```

У всех программ есть man, по объему это примерно -help

```
kodomo:~$ man any-emboss-util
```

Или можно читать описания в интернете:

<http://emboss.open-bio.org/> путанный официальный сайт

<http://emboss.sourceforge.net/> лучше организован, но у меня постоянно висит

Унифицированный адрес последовательности (USA)

Uniform Sequence Address

```
format::dbORfile:entry[start:end:reverse]
```

Список форматов можно узнать здесь:

<http://emboss.sourceforge.net/docs/themes/SequenceFormats.html>

Список баз данных можно узнать с помощью команды `showdb`. По факту, на kodomo есть локальная копия Swiss-Prot, и настроено скачивание записей из ENA/DDBJ и UniProtKB (TrEMBL).

В именах файлов и записей можно использовать маски. Не забывайте про экранирование!

Полный формат USA можно узнать здесь:

<http://emboss.sourceforge.net/docs/themes/UniformSequenceAddress.html>

Аргументы командной строки

- ▶ аргументы называются qualifiers
- ▶ бывают пяти типов: standard, additional, advanced, associated и general
- ▶ всегда задаются в виде опций, начинающихся с *одного* символа -
- ▶ название опции можно сокращать, пока понятно, какая опция имеется в виду
- ▶ нельзя склеивать названия нескольких опций после одного -
- ▶ почти все опции требуют один аргумент
- ▶ у опций типа boolean аргумент можно опускать, имея в виду "Y"

Standard qualifiers

Обязательные аргументы

- ▶ если не заданы, будут запрошены с STDIN в процессе исполнения
- ▶ иногда могут задаваться в виде позиционных аргументов (т.е. без указания названия опции), в этом случае название опции заключено в [] на странице `-help`
- ▶ иногда для них есть значение по умолчанию, которое можно активировать опцией `-auto`

Пример:

```
kodomo:~$ infoseq -sequence "seq.fasta"
```

или (то же самое):

```
kodomo:~$ infoseq "seq.fasta"
```

Additional qualifiers

Дополнительные аргументы

- ▶ если не заданы, будут использованы значения по умолчанию (если не задана опция `-options`, иначе будут запрошены с `STDIN`)
- ▶ значения по умолчанию указаны в [] на странице `-help`

Пример:

```
kodomo:~$ infoseq seq.fasta -outfile "report.txt"
```

Advanced qualifiers

"Расширенные" аргументы

- ▶ предполагается, что они редко потребуются рядовым пользователям
- ▶ отображаются на странице `-help` без опции `-verbose`

Пример:

```
kodomo:~$ infoseq seq.fasta -delimiter ";"
```


Associated qualifiers

"Ассоциированные" аргументы

- ▶ уточняют значения других аргументов
- ▶ не отображаются на странице `-help` без опции `-verbose`
- ▶ на странице `-help -verbose` указано, какой аргумент они уточняют

Пример:

```
kodomo:~$ infoseq seq.fasta -squick "Y"
```

General qualifiers

Общие аргументы

- ▶ есть у всех программ EMBOSS
- ▶ не отображаются на странице `-help` без опции `-verbose` (за исключением самой опции `-help`)
- ▶ служат либо для получения служебной информации о программе, либо для переключения режима взаимодействия с программой

Пример:

```
kodomo:~$ infoseq -help "Y" -verbose "N"
```

Перенаправление потоков

- filter** общий аргумент, делает все, что нужно
- stdout** общий аргумент, только подменяет значение по умолчанию для `-outseq` на `STDOUT`, если `-outseq` – это обязательный аргумент, то программа его все равно спросит
- stdout** специальное значение параметра (не опция!), в этом случае вместо файла вывод будет перенаправлен на `STDOUT`
- auto** общий аргумент, не изменяет потоков, но отключает все сообщения и заставляет программу использовать значения по умолчанию даже для обязательных аргументов; помогает решить проблему с `-stdout`

Проблемы с сообщениями

Все сообщения, в том числе `-help`, программы EMBOSS выводят на `STDERR`, а не `STDOUT`

Слить `STDOUT` и `STDERR` и перенаправить в файл:

```
kodomo:~$ seqret -help &> "seqret_help.txt"
```

Слить `STDOUT` и `STDERR` и передать следующей команде:

```
kodomo:~$ seqret -help -verbose |& less
```

Убить `STDERR` (перенаправить в черную дыру):

```
kodomo:~$ seqret "seqs.fasta" stdout 2> "/dev/null" | less
```

Отключить сообщения на уровне команды EMBOSS:

```
kodomo:~$ seqret -filter "seqs.fasta" | less
```

или

```
kodomo:~$ seqret -auto "seqs.fasta" "out.fasta"
```

Разбиение fasta на отдельные файлы

Для этого есть `seqretsplit`, вот только задание имен выходных файлов совсем не интуитивное (да еще и глюков полно).

Имя выходных файлов имеет вид `DIR/NAME.FORMAT`

DIR по умолчанию – текущая папка; можно задать с помощью ассоциированной опции `-osdirectory`

NAME идентификатор последовательности (поменять нельзя)

FORMAT всегда fasta; причем можно изменить фактический формат выходных файлов (например, с помощью `USA` и `-outseq`), но расширение от этого не изменится 😞

Интерфейсы

Не все любят CLI, поэтому для программ EMBOSS есть несколько других интерфейсов.

- ▶ Jemboss – оконный GUI, написан на Java, поэтому кросс-платформенный
- ▶ веб-интерфейс на сайте EBI: <https://www.ebi.ac.uk/Tools/emboss/>

Больше всяких подобных проектов можно искать на сайте EMBOSS, но они почти все уже мертвы.

<http://emboss.open-bio.org/html/use/ch07.html>