

TransPi

Na klasteru je dostupna verzija 1.3.0. verzija TransPi-a.

Pokretanje aplikacije TransPi podijeljeno je na dva koraka. Prvi korak izvodi se kroz terminal na Isabelli, a drugi se podnosi *qsub* naredbom. U prvom koraku pokreće se "precheck" skripta kojom se instaliraju potrebne ovisnosti i konfiguriraju baze podataka po želji korisnika (interaktivno), dok se u drugom koraku pokreće glavna skripta.

Pokretanje glavne skripte ograničeno je na paralelnu okolinu **mpifull**. Aplikacija nema mogućnost širiti se na više od jednog čvora i prilikom podnošenja posla potrebno je zatražiti jedan cijeli čvor. Ukoliko se zatraži manje resursa, aplikacija će pokušati proširiti posao na cijeli čvor, doći će do preopterećenja i posao će se prekinuti.

Primjer korištenja:

Prvi korak

Preporuka je da se posao pokreće sa /shared diska zbog velikog opterećenja diska i prostora koji kreirane datoteke zauzimaju.

Nakon kreiranja direktorija projekta/posla na /shared/korisnik/ lokaciji, pokreće se precheck_TransPi.sh skripta kroz terminal Isabelle naredbama:

```
$ cd /apps/TransPi
$ bash precheck_TransPi.sh /shared/korisnik/dir_projekta
```

Interaktivni dio:

- Odabrati prvu *conda* opciju (Instalacija conde nije potrebna jer će se aktivirati sa pokretanjem skripte)
- Potvrditi TransPi instalaciju baza podataka: "y"
- Specificirati BUSCO V4 bazu podataka
- *Odabrati opciju za UNIPROT bazu podataka
- Potvrditi instalaciju nextflow-a: "y"

Konfiguracija će potrajati desetak minuta.

*UNIPROT bazu podataka moguće je preuzeti sa stranice <https://www.uniprot.org/> i/ili zamijeniti (/shared/korisnik/dir_projekta/DBs/uniprot_db) ukoliko aplikacija nije preuzela reprezentativan set podataka.

Drugi korak

Kreirati .sge skriptu unutar navedenog direktorija u prvom koraku (/shared/korisnik/dir_projekta) i podnijeti posao sa *qsub* naredbom.

Lako je moguće da će posao trajati duže od 7 dana pa korisnik mora odlučiti hoće li odabrati *long* red čekanja (poslovi do 30 dana). Ukoliko se posao prekine zbog vremenskog ograničenja (npr. nakon 7 dana) ili nekog drugog razloga, moguće ga je nastaviti dodavanjem zastavice -resume (na kraju reda u primjeru → ... -profile conda **-resume**).

Za pokretanje posla potrebno je učitati modul *java-e* i aktivirati *conda*.

Primjer skripte

```
#!/bin/bash

#$ -N
#$ -pe p28-mpifull-long 28
#$ -cwd

module load java/11
source /apps/miniforge3/bin/activate

./nextflow run /apps/TransPi/TransPi.nf --all --maxReadLen 150 --k 25,41,53 --reads '/putanja/reads/datoteka' --
outdir Results -profile conda
```