

METABOLIC

blocked URL

- blocked URL
 - Opis
 - Službena dokumentacija
 - Verzije
 - Primjeri
 - Primjer korištenja

Opis

METABOLIC (METabolic And Biogeochemistry anaLyses In miCrobies) je bioinformatička aplikacija otvorenog koda.

Aplikacija je zajedno sa svojim ovisnostima instalirana u Conda virtualno okruženje te kontejnerizirana. Može se širiti unutar granica čvora.

Službena dokumentacija

- https://github.com/AnantharamanLab/METABOLIC/wiki/METABOLIC-Usage#Metabolic_usage

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Paralelizacija	Supek	Padobran
4.0	scientific/metabolic/4.0	CPU	Dijeljena memorija	✗	✓

Primjeri



Ako primijetite sporo izvođenje na **Padobranu**, preporučuje se korištenje privremenog direktorija TMPDIR. Naime, ponekad *input/output* (čitanje/pisanje) može biti usko grlo u izvođenju posla.

Prije pokretanja aplikacije iz privremenog direktorija, potrebno je tamo premjestiti sve potrebne input datoteke, npr.:

```
cp -r * ${TMPDIR} && cd ${TMPDIR}
```

Po završetku izvođenja, potrebno je vratiti nazad željene output datoteke, npr.:

```
cp -r * ${PBS_O_WORKDIR}
```

Primjer korištenja

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=1:ncpus=32:mem=16gb
#PBS -j oe

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/metabolic/4.0

cp -r * ${TMPDIR} && cd ${TMPDIR}

metabolic METABOLIC-G.pl -t ${NCPUS} -in-gn
Guaymas_Basin_genome_files -o output

cp -r * ${PBS_O_WORKDIR}
```

- **-t** predstavlja broj traženih procesorskih jezgara iz zaglavlja skripte
- **-in-gn** predstavlja putanju do direktorija koji sadrži datoteke s genomima / sekvencama nukleotida (**fasta** datoteke)
- **-in** predstavlja putanju do direktorija koji sadrži datoteke s proteinima / sekvencama aminokiselina (**faa** datoteke)
 - u primjeru gore, nalazi se u radnom direktoriju
- **-o** predstavlja direktorij koji će se automatski kreirati te u koji će se pohranjivati izlazni podaci aplikacije
 - u primjeru gore, nalazi se u radnom direktoriju

blocked URL