

# METABOLIC

## blocked URL

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

### Opis

**METABOLIC** (METabolic And BiogeOchemistry anaLyses In miCobes) 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](https://github.com/AnantharamanLab/METABOLIC/wiki/METABOLIC-Usage#Metabolic_usage)

### Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Parallelizacija	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 zaglavja skripte
- **-in-gn** predstavlja putanje do direktorija koji sadrži datoteke s genomima / sekvencama nukleotida (**fasta** datoteke)
- **-in** predstavlja putanje 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