

Structure_threader

Korištenje

Na klasteru je instalirana pomoćna aplikacija `structure_threader` koja omogućava paralelno izvođenje aplikacija:

- `structure 2.3.4`
- `fastStructure 1.0`
- `Maverick 1.0.5`

Dostupne verzije i pripadajući moduli:

Verzija	Module
1.3.10	bioinfo/structure_threader/1.3.10
1.3.7	bioinfo/structure_threader/1.3.7

Primjer korištenja:

run-structure-isabella.sge

```
#$ -N structure
#$ -pe *mpisingle 8
#$ -cwd

module load bioinfo/structure_threader/1.3.7

str_bin=$(which structure)
structure_threader_exec=$(which structure_threader)

${structure_threader_exec} run -i smalldata/Reduced_dataset.structure -o results -st ${str_bin} -K 3 -t $NSLOTS
-R 5 --params smalldata/mainparams
```

run-faststructure-isabella.sge

```
#$ -N faststructure
#$ -pe *mpisingle 8
#$ -cwd

module load bioinfo/structure_threader/1.3.7

str_bin=$(which fastStructure)
structure_threader_exec=$(which structure_threader)

${structure_threader_exec} run -i smalldata/BigTestData.str -o results_fs -fs ${str_bin} -K 4 -t $NSLOTS --ind
smalldata/indfile.txt
```

Ulazni podatci iz primjera su dostupni na https://github.com/StuntsPT/Structure_threader/tree/master/tests/smalldata



Važno

Nužno je koristiti paralelne okoline ***mpisingle** jer je aplikacija paralelizirana dijeljenjem memorije (shared memory parallel model)



Napomena

Aplikacija je instalirana i konfigurirana u Python virtualnom okruženju kojeg korisnik može proširiti sa svojim proizvoljnim Python aplikacijama. Nakon učitavanja modula, korisnik dodatne aplikacije instalira s:

```
pip install
```

```
pip3 install --prefix $LOCALPKGS potrebn-python-pkg
```

Instalacija

structure_threader je Python wrapper koji sa sobom donosi glavne aplikacije pa njih nije potrebno posebno instalirati. Distribuira se kroz Python paketni sustav PyPI. Na klasteru je instaliran u zasebnom Python virtual environmentu.

Izvorni kod aplikacije je dostupan na: https://github.com/StuntsPT/Structure_threader

Naredbe instalacije

```
python3 -m venv /apps/virtenv/structure_threader1.3.10
source /apps/virtenv/structure_threader1.3.10/bin/activate
pip3 install -U pip
pip3 install structure_threader
```