

Informe lab_7_docker

Antonio José Manuel Martínez

Este laboratorio ha permitido adquirir una visión práctica y realista del uso de Docker como herramienta fundamental en entornos de computación científica y bioinformática. A lo largo de la práctica se ha trabajado tanto con la ejecución de contenedores preexistentes como con la creación y gestión de imágenes propias, lo que resulta especialmente relevante en contextos donde la reproducibilidad y la portabilidad del software son críticas.

Uno de los aspectos más positivos del laboratorio ha sido la progresión gradual desde ejemplos sencillos, como el uso de imágenes básicas y contenedores interactivos, hasta escenarios más complejos aplicados directamente a bioinformática, como la ejecución de BLAST mediante BioContainers. Este enfoque permite comprender claramente la diferencia entre imágenes y contenedores, así como el funcionamiento del aislamiento del entorno de ejecución, evitando problemas habituales de dependencias y versiones de software.

Resulta especialmente interesante el apartado dedicado a la creación de imágenes personalizadas, tanto de forma interactiva como mediante el uso de un Dockerfile. La posibilidad de encapsular un entorno completo de ejecución para un notebook de Python avanzado refuerza la idea de Docker como una herramienta clave para garantizar la reproducibilidad de experimentos computacionales. Además, el uso de Docker Hub para publicar y compartir imágenes añade una dimensión práctica muy cercana a flujos de trabajo reales en proyectos colaborativos.

Como aspecto negativo o mejorable, cabe destacar que la práctica puede resultar inicialmente compleja debido a la combinación de múltiples tecnologías (Docker, Git, GitHub, Docker Hub y clúster HPC), lo que exige una cierta familiaridad previa con herramientas de línea de comandos y control de versiones. No obstante, una vez superada esta curva inicial, el laboratorio resulta muy formativo y clarifica cómo se integran todas estas herramientas en un flujo de trabajo coherente.

En conjunto, este laboratorio ha sido especialmente útil para comprender el papel de Docker en bioinformática y computación en la nube, proporcionando una base sólida para su aplicación en proyectos reales y en entornos HPC, donde la portabilidad y la reproducibilidad son factores clave.