Bitacora prueba blastx

Elaborado por: Dra. Edith Elizondo Reyna

Como parte de la estancia posdoctoral en el Departamento de Acuicultura bajo la dirección del Dr. Miguel Ángel del Río Portilla, CICESE, Ensenada. Período 2020-2021

Analisis de secuencias de aminoacidos en camaron blanco *Litopenaeus vannamei*

Corroborar directorio de las bases de datos del blast

```
ls /LUSTRE/bioinformatica data/BD/blast/db/NT
In [ ]:
In [ ]:
        ls /LUSTRE/bioinformatica data/BD/SwissProt2/
In [ ]: |
        ls ~/
In [ ]: ls /home/elizondo/data/litopenaeus/
In [ ]:
        ls -lh /LUSTRE/bioinformatica data/BD/blast/db/SwissPro
        t/
In [ ]:
        ls
            /LUSTRE/apps/bioinformatica/ncbi-blast-2.11.0/bin/
In [ ]:
        pwd
In [ ]: cd ~/data/litopenaeus/
```

```
In [ ]: ls /LUSTRE/apps/bioinformatica/ncbi-blast-2.11.0/bin/b
lastn
```

Nos muestra las primeras secuencias que se encuentran en el archivo T1_Trinity.txt

```
In [ ]: !head T1_Trinity.txt
```

Comando que nos muestra el total de contigs en el archivo T1_Trinity.txt

```
In [ ]: !grep -c ">" T1_Trinity.txt
```

Comando que nos muestra los primeros 10 contigs del archivo T1_Trinity.txt

```
In [ ]: !grep ">" T1_Trinity.txt | head
```

Comando que nos muestra el total de contigs en el archivo T1_Trinity.txt que es equivalente a !grep -c ">" T1_Trinity.txt

```
In [ ]: !grep ">" T1_Trinity.txt | wc -l
```

Comando que muestra la cantidad de lineas, el numero total de palabras y la cantidad de bytes en el archivo T1_Trinity.txt

```
In [ ]:  !wc T1_Trinity.txt
```

Corrida en el Blast que se lleva a cabo dentro del servidor jupyter

```
In [ ]:
        %%bash
        export BLASTDB=/LUSTRE/bioinformatica data/BD/blast/db/
        SwissProt/
        cd ~/data/litopenaeus/
        date > tiempo blastx.txt
        time /LUSTRE/apps/bioinformatica/ncbi-blast-2.11.0/bin/
        blastx \
        -query T1 Trinity.txt \
        -db /LUSTRE/bioinformatica data/BD/blast/db/SwissProt/s
        wissprot \
        -out T1 Trinity.tsv \
        -evalue 1E-6 \
        -max target seqs 1 \
        -num threads 24 \
        -outfmt "6 std sskingdoms stitle staxids sscinames scom
        names sblastnames strand"
        date >> tiempo blastx.txt
```

Buenos dias, terminó el proceso, entré para darle información a Sylvia.

Vas a pode continuar con el análisis.

```
In [ ]: !head T1_Trinity.tsv
```

Corrida en el Blast que se ejecuta fuera de jupyter, usando omicas

```
In [ ]: fout = open("blastx_camaron.sh", "w")
        linea=""#!/bin/sh
        #SBATCH -p cicese
        #SBATCH --job-name=blastn
        #SBATCH -e blastx.%N.%j.err
        #SBATCH -o blastx.%N.%j.log
        #SBATCH -t 6-00:00:00
        #SBATCH -N 1
        #SBATCH -n 24
        #
        #SBATCH --exclusive
        cd $SLURM SUBMIT DIR #
        export BLASTDB=/LUSTRE/bioinformatica data/BD/blast/db/
        SwissProt/
        cd ~/data/litopenaeus/
        date > tiempo blastx 2.txt
        module load gcc-7.2
        time /LUSTRE/apps/bioinformatica/ncbi-blast-2.11.0/bin/
        blastx \\
         -query T1 Trinity.txt \\
         -db /LUSTRE/bioinformatica data/BD/blast/db/SwissProt/
        swissprot \\
         -out T1 Trinity 2.tsv \\
         -evalue 1E-6 \\
         -max target segs 1 \\
         -num threads 24 \\
         -outfmt "6 std sskingdoms stitle staxids sscinames sco
        mnames sblastnames strand"
        date >> tiempo blastx 2.txt
        fout.write(linea)
        fout.close()
In [ ]: ls
```

```
In []: Is

In []: !head -40 blastx_camaron.sh
```

Comando que nos muestra el numero de trabajo del analisis blast

```
In [ ]: !sbatch blastx_camaron.sh
In [ ]: ls
```

Comando que nos muestra la informacion de los errores generados en la corrida

```
In [ ]: !head blastx.nodo2.165806.err
```

Comando que nos muestra la informacion de

```
In [ ]: !head blastx.nodo2.165806.log
```

Comando que nos muestra el contenido del archivo de tiempo, cuando inicia y finaliza la corrida

```
In [ ]: !head tiempo_blastx.txt
In [ ]: ls /LUSTRE/bioinformatica_data/BD/blast/db/SwissProt/
In [ ]: ls /LUSTRE/bioinformatica_data/BD/blast/db/NT
In [ ]: ls /LUSTRE/apps/bioinformatica/ncbi-blast-2.6.0/bin/
In [ ]: ls /LUSTRE/bioinformatica_data/BD/blast/db/swissprot.ta
r.gz.md5
```