

COMPUTACIÓN EN LA NUBE E INFRAESTRUCTURAS DE ALTO RENDIMIENTO

Laboratorio 7: Usando Docker en Bioinformática

Lo que más me ha gustado: La verdad es que el laboratorio me ha parecido bastante útil. Me ha interesado especialmente sobre todo la parte de BLAST con biocontainers porque ves directamente para qué sirve todo esto en bioinformática real. No es solo hacer pruebas con hello-world, sino que montas un análisis de secuencias sin tener que instalar nada en tu ordenador.

También me ha gustado crear mi propia imagen con el Dockerfile, porque ahí es cuando entiendes realmente cómo funciona todo esto de los contenedores y que no es magia (la famosa “caja negra”).

Dificultades: Lo que más me costó fue el tema de trabajar desde Windows. El gunzip no existía en PowerShell y tuve que buscarle la vuelta usando Docker para descomprimir el archivo, que no es lo más intuitivo. También al principio me liaba con los paths y con montar los volúmenes correctamente, sobre todo cuando intentaba copiar el notebook al contenedor. También tuve problemas con los permisos -u \$(id -u):\$(id -g) que en Windows no funcionan.

Qué mejoraría: Estaría bien que la práctica tuviera instrucciones más específicas para Windows, porque muchos comandos están pensados para Linux/Mac y hay que adaptarlos. También pondría ejemplos más claros de cuándo usar cada comando de Docker (ps, ps -a, images, etc.) porque al principio es un lío.

Para qué me ha servido: Ahora entiendo mucho mejor cómo funcionan los contenedores Docker y por qué se usan tanto en bioinformática. Veo la utilidad de poder reproducir análisis sin preocuparme de qué versión de Python tiene el que va a ejecutar mi código.