
Guia do usuário: Viabilidade celular

Kayllany L. S. Oliveira, Daniel C. Vieira, José G. C. Pereira, João V. S. Guerra

November 13, 2024

Table of Contents

1	Introdução	3
2	Requisitos	3
3	Acessando o HPCC Marvin	3
4	Preparando o Repositório <code>ParasiteCoLocalization</code>	3
4.1	Instalando PyEnv no HPCC Marvin	3
4.2	Instalando as Dependências do Python	4
4.3	Enviando Imagens para o HPCC Marvin	4
4.4	Executando o Pipeline no HPCC Marvin	4
4.4.1	Monitoramento do Job SLURM	4
5	Visualizando os Resultados	5
6	Ajustando o pipeline <code>parasitecolocalization.cppipe</code>	5
7	Glossário	5

1 Introdução

Este guia do usuário fornece instruções detalhadas sobre como executar a análise de viabilidade celular. O objetivo deste guia é auxiliar os usuários a configurar e executar o pipeline de análise, bem como a interpretar os resultados obtidos.

2 Requisitos

Para executar a análise de viabilidade celular, você precisará dos seguintes requisitos:

- **Acesso ao GitHub do CNPEM:** Você deve ter acesso ao repositório do projeto (<https://github.com/cnpem/CellViability>) no GitHub do CNPEM (<https://github.com/cnpem/>) para baixar os arquivos necessários. Se não tiver acesso, entre em contato com a Equipe de Dados Biológicos (edb@lnbio.cnpem.br).
- **Acesso ao HPCC Marvin:** Você deve ter acesso ao HPCC Marvin para executar o pipeline de análise. Se você não tiver acesso, acesse <https://marvindocs.cnpem.br/primeiros-passos/index.html>.

3 Acessando o HPCC Marvin

Para acessar o HPCC Marvin, comece abrindo o terminal. Se estiver usando Windows, abra o PowerShell; se estiver usando Linux ou MacOS, abra o Terminal. Para acessar o HPCC Marvin, use o comando:

```
ssh <seu.login.cnpem>@marvin.cnpem.br
```

Após inserir o comando, será solicitado que você insira sua senha, digite sua senha institucional.

4 Preparando o Repositório ParasiteCoLocalization

Para clonar o repositório [CellViability](#), execute o seguinte comando no terminal:

```
git clone https://github.com/cnpem/CellViability.git
```

O comando acima cria uma pasta chamada `CellViability` no diretório atual. Esta pasta contém todos os arquivos necessários para a execução da análise de viabilidade celular, incluindo o script `run.sh`, que automatiza a execução da análise via SLURM.

Após clonar o repositório `CellViability`, acesse o diretório do projeto com o comando:

```
cd CellViability
```

4.1 Instalando PyEnv no HPCC Marvin

O PyEnv é uma ferramenta que permite instalar e gerenciar várias versões do Python em um ambiente virtual. Para instalar o PyEnv no HPCC Marvin, execute os seguintes comandos no terminal:

```
curl https://pyenv.run | bash
echo 'export PATH="$HOME/.pyenv/bin:$PATH"' >> ~/.bashrc
echo 'eval "$$(pyenv init -)'" >> ~/.bashrc
echo 'eval "$$(pyenv virtualenv-init -)'" >> ~/.bashrc
source ~/.bashrc
```

Para instalar uma versão específica do Python, execute o seguinte comando:

```
pyenv install 3.8.19
```

Para definir a versão do Python como padrão neste diretório, execute o seguinte comando:

```
pyenv local 3.8.19
```

Caso deseje utilizar outra versão do Python, você pode selecionar a versão desejada para a sessão atual com o comando:

```
pyenv shell <versão_desejada>
```

4.2 Instalando as Dependências do Python

Para instalar as dependências do Python, execute o seguinte comando no terminal:

```
pip install -r requirements.txt
```

4.3 Enviando Imagens para o HPCC Marvin

Para enviar as imagens para o HPCC Marvin, você pode usar o comando `scp` em qualquer terminal.

```
scp /caminho/para/suas/imagens/*.tiff  
↪ <seu.login.cnpem>@marvin.cnpem.br:/caminho/para/CellViability/data
```

Caso você esteja usando o Windows, você pode usar o <https://winscp.net/eng/download.php> para transferir arquivos de e para o HPCC Marvin. Para isso, siga as instruções abaixo:

1. Abra o WinSCP e insira o endereço do servidor (`marvin.cnpem.br`), seu nome de usuário e senha.
2. Navegue até o diretório `CellViability/data` no HPCC Marvin.
3. Arraste e solte os arquivos de imagem do seu computador para o diretório `CellViability/data` no HPCC Marvin.

4.4 Executando o Pipeline no HPCC Marvin

Após enviar as imagens para o HPCC Marvin, você pode executar o pipeline de análise de viabilidade celular. O script `run.sh` executa o pipeline de análise via SLURM, que é o sistema de gerenciamento de tarefas usado no HPCC Marvin. Para isso, execute o script `run.sh` no diretório `CellViability`.

```
sbatch run.sh -m marvin
```

O comando acima retorna o ID do job SLURM, que você pode usar para monitorar o progresso da análise.

4.4.1 Monitoramento do Job SLURM

Para monitorar o progresso do job SLURM, você pode usar o comando `squeue` no terminal. O comando `squeue` exibe informações sobre os jobs SLURM em execução no HPCC Marvin.

```
squeue -u <seu.login.cnpem>
```

Se o job estiver em execução, o estado será exibido como R (em execução). Se o job estiver aguardando na fila, o estado será PD (pendente).

Caso deseje cancelar o job SLURM, você pode usar o comando `scancel` no terminal. O comando `scancel` cancela um job SLURM em execução no HPCC Marvin.

```
scancel <job_id>
```

Por fim, você pode verificar o arquivo de log gerado pelo SLURM (`slurm_<job_id>.out`) para obter informações sobre o seu job.

5 Visualizando os Resultados

Após a conclusão da análise, os resultados serão armazenados no diretório `results/`, que incluem os seguintes arquivos:

- `summary.csv`: Este arquivo contém um resumo dos resultados da análise por poço, incluindo contagem total de células.

	Metadata_Well	TotalCells
0	A1	487.0
1	A2	217.0
2	A3	863.0
3	A4	58.0
4	A5	180.0
5	A6	54.0
6	A7	296.0
7	A8	227.0
8	A9	35.0
9	A10	19.0
10	A11	77.0

- `plate_map/`: Este diretório contém os mapas interativos da placa de 384 poços (Figura 1), contendo:
 - `number_of_cells.html`: contagem total de células por poço.

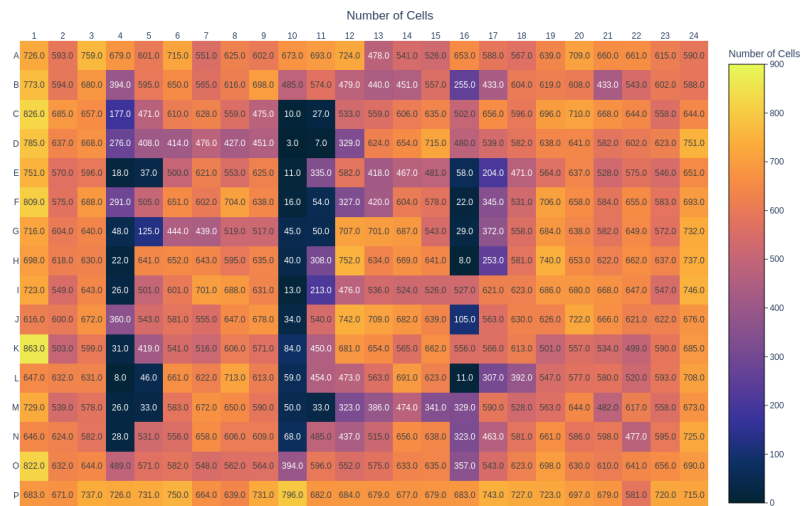


Figure 1: Exemplo de mapa interativo da placa de 384 poços.

6 Ajustando o pipeline `parasitecolocalization.cppipe`

7 Glossário

Here is an Example (Ex) of acronym usage.

Ex Example	5
-----------------------------	---