Пояснение к домашней работе №3 по биоинформатике

Данные были загружены отсюда:

https://trace.ncbi.nlm.nih.gov/Traces/?view=run_browser&acc=SRR24651073&display=metadata

run SRR24651073 experiment SRX20431105

Данные были загружены из командной строки:

fasterq-dump SRR24651073

Работа с Kedro:

1. Создание виртуальной среды:

```
mkdir kedro-environment && cd kedro-environment
apt install python3.10-venv
python3 -m venv .venv
source .venv/bin/activate
```

2. Установка Kedro

pip install kedro

3. Создание нового проекта

```
kedro new
cd project name>
pip install -r src/requirements.txt
```

4. Конфигурация пайплайна

Для запуска пайплайна, нужно указать расположение входных файлов в системе. В директории .../kedro-environment/helloworld/data/01_raw содержатся конфигурационные файлы, указывающие на расположение входных данных. В файле ./bwa_in/refseq_fasta_path.txt нужно указать путь до референсной последовательности, а в ./fastqc_in/ пути до двух входных .fastq файлов соответственно.

5. Использование написанного пайплайна:

1. В папке kedro-environment активировать виртуальную среду

```
source .venv/bin/activate
```

- 2. cd helloworld
- 3. kedro run -pipeline genomic_pipeline

Для визуализации:

pip install kedro-viz

Запуск:

В папке kedro-environment/helloworld:

kedro viz

В целом, схема выполнения пайплайна получилась схожей, помимо того, что она содержит некоторые вспомогательные переменные, отвечающие за выполнение/невыполнение команд и тех, которые не используются в пайплайне, но должны быть указаны согласно принципу работы фреймворка.

Также, фреймворк заточен под ML, поэтому не удалось осуществить передачу файлов напрямую из одного блока пайплайна в следующий, это пришлось осуществить путем передачи путей до нужных файлов.

