



José Antonio Urbán Aragón
Bioinformatics Club
Marzo 19, 2020

Problemas con las versiones y el OS para la reproducibilidad

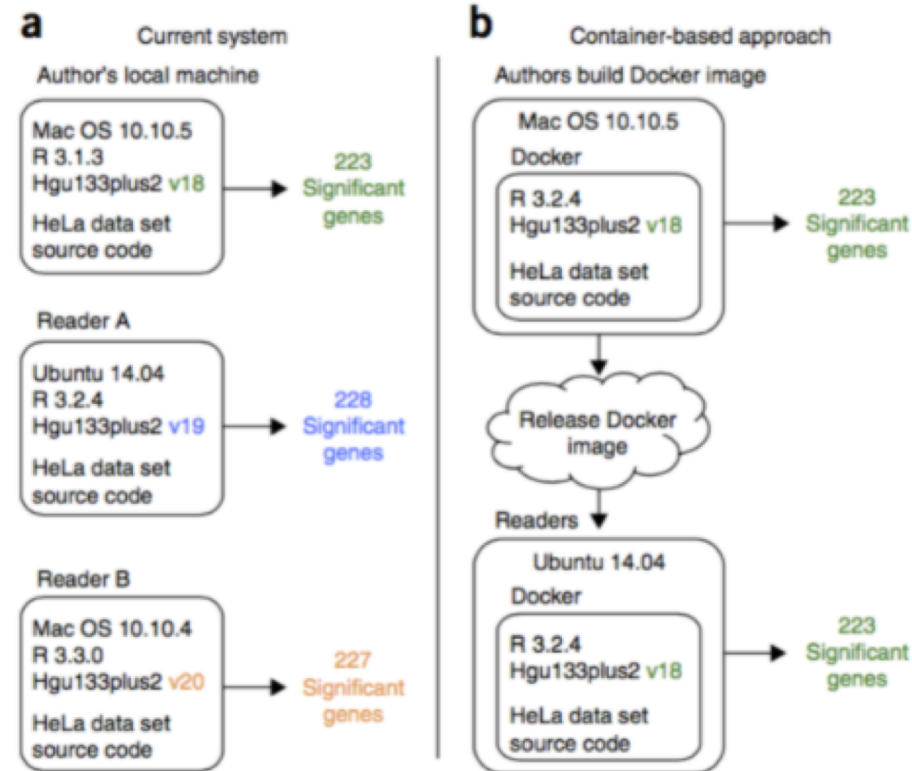


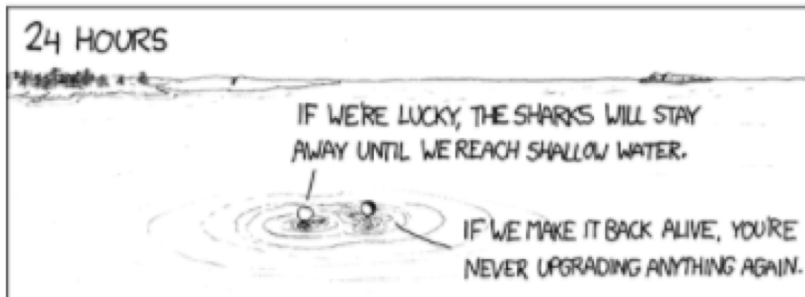
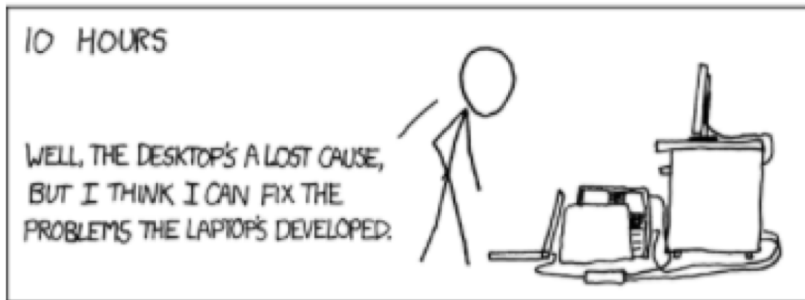
Figure 2 Research computing versus container-based approaches for differential gene expression analysis of HeLa cells. (a,b) Numbers of significantly differentially expressed genes identified using different versions of software packages (a) and a container-based approach with a defined computing environment (b). $n = 3$ biological replicates per group (wild-type or double-knockdown HeLa cells).

Figura tomada de Beaulieu-Jones et al Greene (2017)

Constante renovación de versiones -> Problemas de reproducibilidad de los análisis

Tomada de https://github.com/AliciaMstt/BioinfinvRepro/blob/master/Unidad4/Unidad4_Intro_software_bioinformatico.md

AS A PROJECT WEARS ON, STANDARDS
FOR SUCCESS SLIP LOWER AND LOWER.



- Programas que se renuevan constantemente.
- Se pueden romper dependencias al OS u otro *software* con las actualizaciones.
- Pérdidas de tiempo considerables.

Solución: Sistema de Contenedores de Software como Docker

Contenedor: versión de Linux reducida a sus componentes más básicos.

Imagen: software que cargamos en el contenedor.

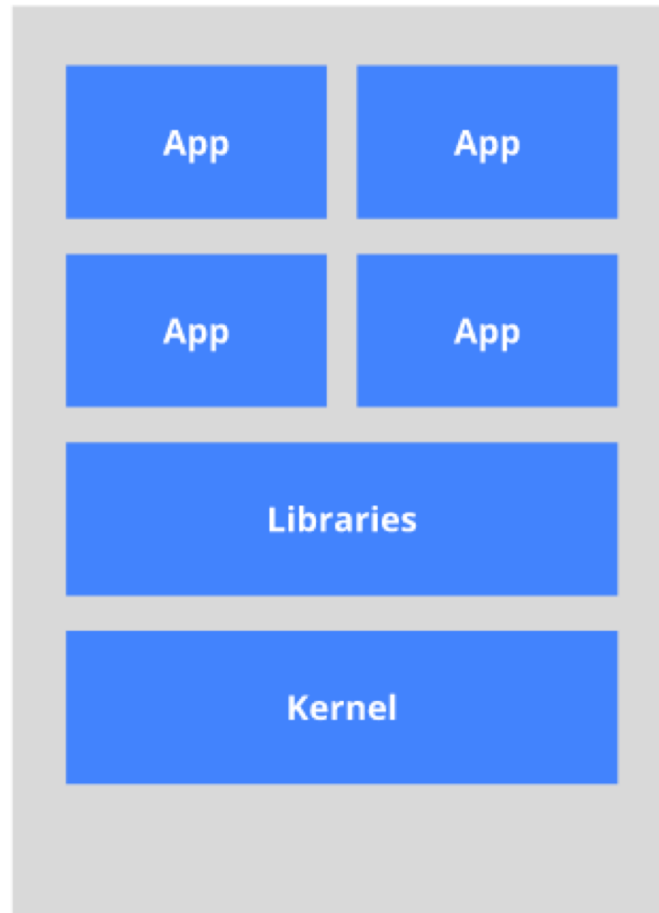
Dockerfile: script que describe e instala el software que pondremos en una imagen.

¿Por qué usar contenedores de software?

Why containers?

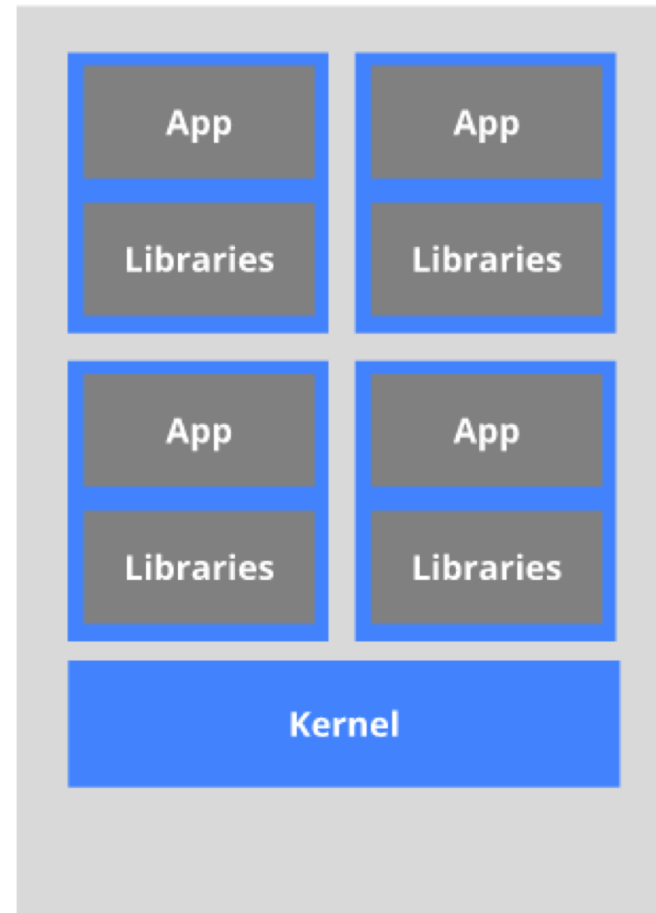
Looking for reasons why you should be using containers?

The old way: Applications on host



*Heavyweight, non-portable
Relies on OS package manager*

The new way: Deploy containers



*Small and fast, portable
Uses OS-level virtualization*

<https://docs.docker.com/get-started/>

¿Pudieron bajar Docker?

```
$ docker run hello-world
Unable to find image 'hello-world:latest' locally
latest: Pulling from library/hello-world
78445dd45222: Pull complete
Digest: sha256:c5515758d4c5e1e838e9cd307f6c6a0d620b5e07e6f927b07d05f6d12a1ac8d7
Status: Downloaded newer image for hello-world:latest

Hello from Docker!
This message shows that your installation appears to be working correctly.

To generate this message, Docker took the following steps:
1. The Docker client contacted the Docker daemon.
2. The Docker daemon pulled the "hello-world" image from the Docker Hub.
3. The Docker daemon created a new container from that image which runs the
   executable that produces the output you are currently reading.
4. The Docker daemon streamed that output to the Docker client, which sent it
   to your terminal.

To try something more ambitious, you can run an Ubuntu container with:
$ docker run -it ubuntu bash

Share images, automate workflows, and more with a free Docker ID:
https://cloud.docker.com/

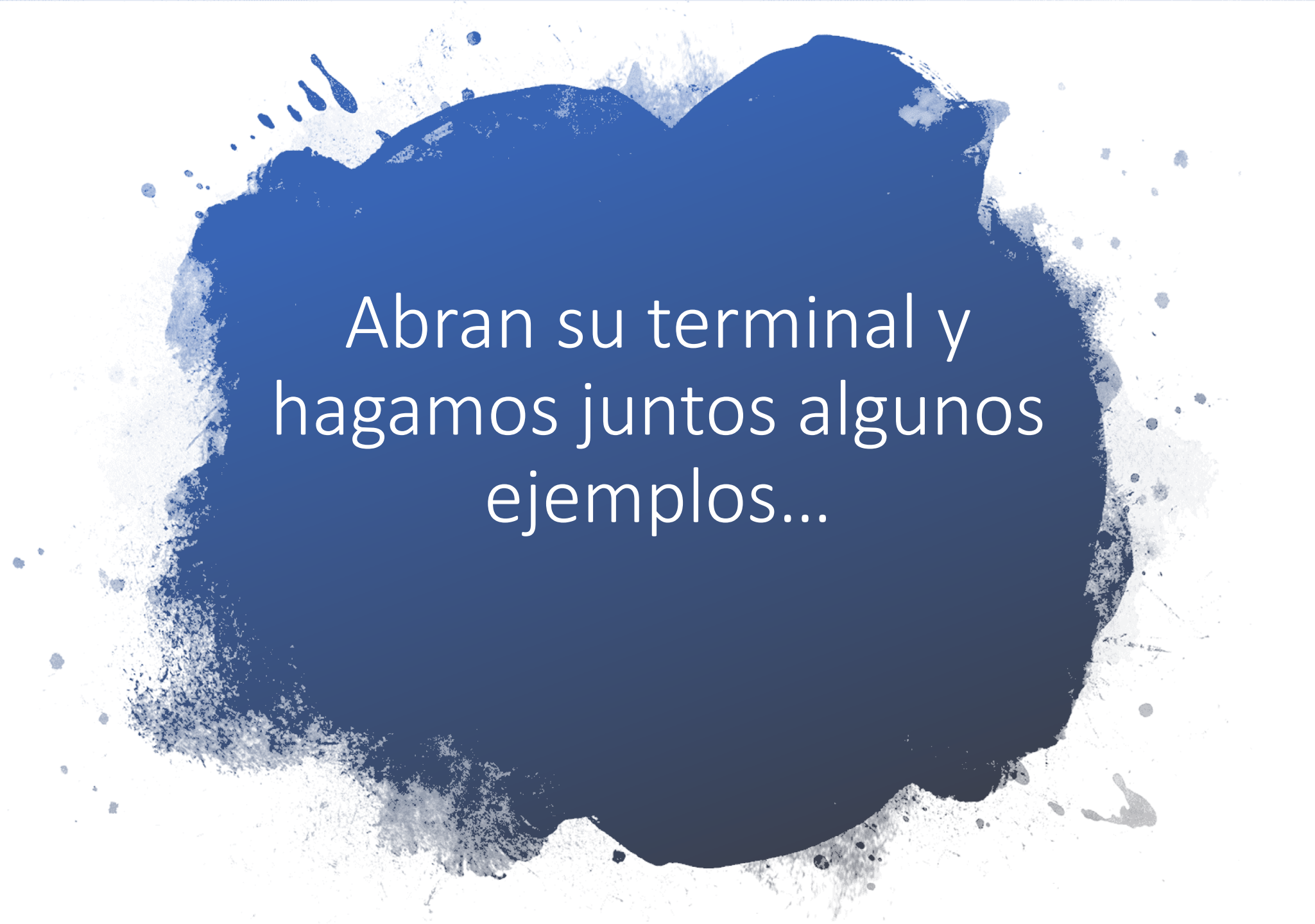
For more examples and ideas, visit:
https://docs.docker.com/engine/userguide/
```

Funcionamiento básico de Docker

Las opciones más importantes de Docker son:

- `pull` una imagen (solo la primera vez)
- `run` la imagen dentro de un contenedor (para crearlo, solo la primera vez)
- `exit` para salir del contenedor
- `stop` para detener un contenedor
- `restart` para reactivar un contenedor
- `exec` para entrar a un contenedor activo
- `rm` borrar un contenedor (debes `stop` primero).
- `rmi` borrar una imagen.

Tomado de https://github.com/AliciaMstt/BioinfinvRepro/blob/master/Unidad4/Unidad4_Intro_software_bioinformatico.md



Abran su terminal y
hagamos juntos algunos
ejemplos...

Agradecimientos

- Asistentes del BC
- Dr. Rafael Palacios y todo el junior faculty del LIIGH por su apoyo para llevar a cabo el BC.
- Dra. Alicia Mastretta por enseñarme a usar Docker y su material didáctico abierto.