Formation intégration d'outils sous Galaxy

24/02/2015

Cyril Monjeaud & Yvan Le Bras

Plateforme Bio-informatique GenOuest

CNRS UMR 6074 IRISA-INRIA, Campus de Beaulieu, 35042 Rennes Cedex

PLAN

L'arborescence du serveur Galaxy

L'ajout d'outil dans Galaxy

Les descripteurs et la syntaxe

TPO. L'environnement de travail

TP1-5. Intégration d'outils "simples"

TP6. Intégration d'un outils "complexe"

Présentation du toolshed

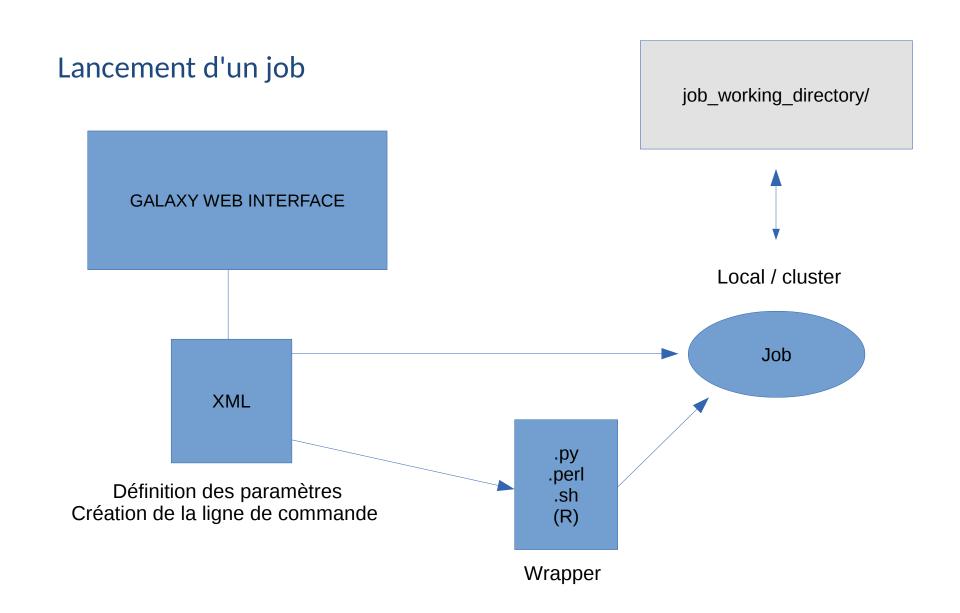
TP7. Déploiement d'un toolshed

TP8. Intégration d'un outil dans un toolshed

TP9. Intégration d'un outil avec une dépendance

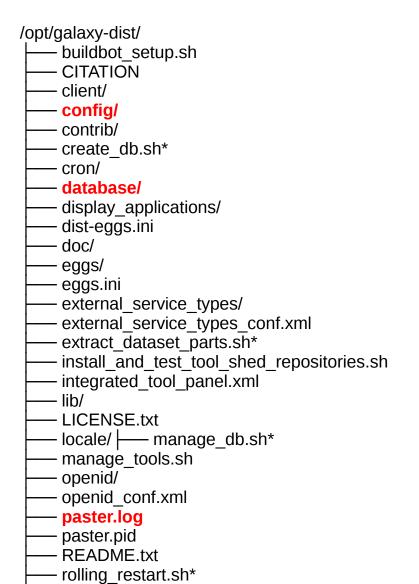
Présentation du système de gestion des banques (by Anthony Brétaudeau)

TP10. Intégration d'un outil utilisant des banques (by Anthony Brétaudeau)





La racine du server galaxy-dist/



run demo sequencer.sh -run functional tests.sh -> run tests.sh* run reports.sh* run.sh* run.sh.orig* - run tests.sh* - run_tool_shed.sh* - scripts/ - set metadata.sh* static/ templates/ test/ test-data/ tool-data/ tool list.py tools/

- <u>run.sh</u>
 - permet de lancer le serveur Galaxy
- paster.log
 - fichier de log de Galaxy
- config/
 - · configuration générales
 - liste des outils
 - lancement des jobs, etc.
- tools/
 - contient les outils de l'instance locale
- database/
 - contient les données (inputs / outputs)

Le dossier galaxy-dist/config/

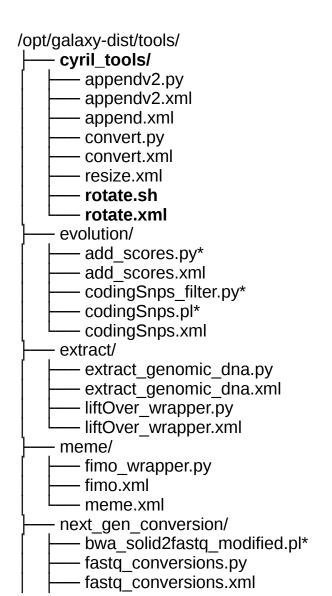
tool_shed.ini.sample
tool_sheds_conf.xml
tool_sheds_conf.xml.sample
workflow_schedulers_conf.xml.sample

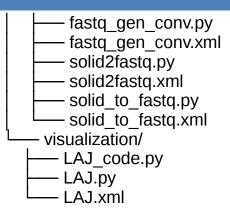
```
/opt/galaxy-dist/config/
     data manager conf.xml.sample
     datatypes conf.xml.sample
     demo sequencer wsgi.ini.sample
     disposable email blacklist.conf.sample
     external service types conf.xml.sample
     galaxy.ini
     galaxy.ini.sample
     job conf.xml
     job_conf.xml.sample advanced
     job conf.xml.sample basic
     job metrics conf.xml.sample
     job resource params conf.xml.sample
     migrated tools conf.xml
     migrated tools conf.xml.sample
     object store conf.xml.sample
     openid conf.xml.sample
     plugins/
     reports wsgi.ini.sample
     shed data manager conf.xml
     shed data manager conf.xml.sample
     shed tool conf.xml
     shed tool conf.xml.sample
     shed tool data table conf.xml
     shed tool data table conf.xml.sample
     tool conf.xml
     tool conf.xml.main
     tool conf.xml.sample
```

tool data table conf.xml.sample

- galaxy.ini
 - configuration générale du serveur Galaxy
- tool conf.xml
 - liste des outils locaux de Galaxy
- shed tool conf.xml
 - · liste des outils installés via un toolshed
- job conf.xml
 - définition du lancement des jobs
 - environnement embarqué
 - exécution en local
 - exécution sous docker
 - exécution sur un cluster
 - drmaa
 - pbs

Le dossier galaxy-dist/tools/





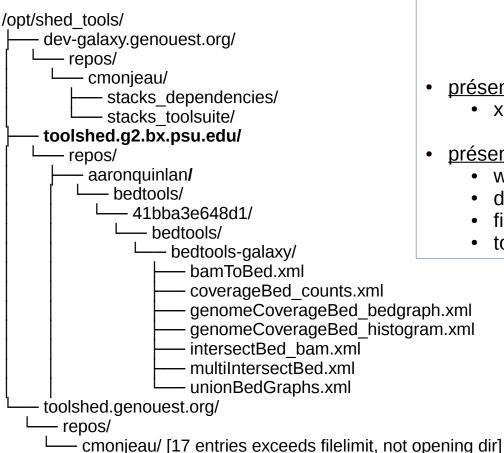
- trié en sous-dossier
- présence d'un descripteur par outil
 - xml
- présence (facultative) d'un wrapper associé
 - bash
 - python
 - perl
 - R

Le dossier galaxy-dist/database/

- files/
 - localisation des fichiers (entrées / sorties)
 - rangés en sous-dossiers
 - 000/
 - 001/
 - etc.
 - nom de fichier : dataset_001.dat
- job working dir/
 - lieu de l'exécution des jobs
 - Dossier temporaire (utilisé pour multi-output)

```
/opt/galaxy-dist/database/
     citations/
         data/
                                                          tmp/
           - container file/
         locks/
     compiled templates/ [36 entries exceeds filelimit, not opening dir]
     files/
        000/ [99 entries exceeds filelimit, not opening dir]
        001/ [74 entries exceeds filelimit, not opening dir]
     info.txt
     job_working_directory/
     --- 000/
     object store cache/
     pbs/
     tmp/ [96 entries exceeds filelimit, not opening dir]
     whoosh indexes/
```

Le dossier /opt/shed tools

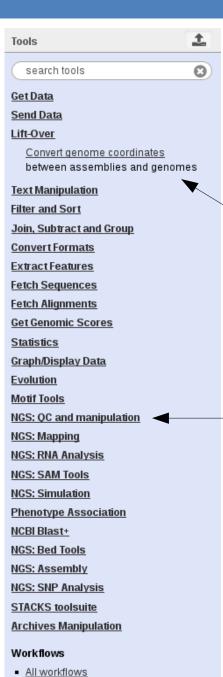


- architecture spécialisée
 - Source du toolshed
 - "repos"
 - owner du repository
 - nom du repository
 - revision du repository
 - nom du repository
 - fichiers
- <u>présence d'un descripteur par outil</u>
 - xml
- présence (facultative) de fichiers
 - wrappers
 - datatypes.xml.sample
 - fichiers .loc.sample
 - tool data table conf.xml.sample

L'ajout d'outil dans Galaxy

Que faut-il faire pour ajouter un outil?

- Ajout d'un outil local :
 - création / récupération de l'outil
 - descripteur
 - [wrapper]
 - · ajout des fichiers dans le dossier tools/
 - ajout du chemin du descripteur dans config/tool_conf.xml
 - · Redémarrage du serveur
- <u>Ajout d'un outil présent dans un toolshed :</u>
 - chercher son outil dans le toolshed (via admin)
 - suivre la procédure
 - Au final :
 - les fichiers sont téléchargés
 - le descripteur de l'outil est ajouté dans le fichier config/shed_tool_conf.xml



tool_conf.xml

tools/descripteur.xml

<label id="monlabel" text="MonTitre" />
<section id="masection" name="MonTitreDeSection">
<tool file="tools/descripteur.xml" />
</section>

shed_tool_conf.xml

Les descripteurs & la syntaxe

http://wiki.galaxyproject.org/Admin/Tools/ToolConfigSyntax

Un descripteur?

- Fichier xml (balises)
- But : création d'une ligne de commande
- Contenu :
 - Description de l'outil
 - · définition des données "input"
 - data (présent dans l'historique de Galaxy)
 - boolean
 - integer
 - float
 - select
 - · définir les données "output"
 - data (présent dans l'historique de Galaxy)
 - · champ d'aide
- Apparaître sous la forme d'un formulaire -> interaction avec l'utilisateur

Balises les plus importantes

| </help>

```
<tool id="logol_wrapper" name="Logol">
                                                                                                                 Motif
   <description>Biological patterns matching</description>
                                                                                                                    Logol Biological patterns matching
   <command interpreter="bash">
          logol.sh $options.input.options input selector $option input.input model $type > $match
                                                                                                                 Workflows
   </command>

    All workflows

   <inputs>
       <conditional name="options input">
             <param name="options_input_selector" type="select" label="Logol pattern type">
               <option value="model" selected="True">Logol pattern model
               <option value="grammar">Logol pattern grammar</option>
             </param>
             <when value="model">
              | <param name="input model" type="data" format="lgd" label="Logol pattern model" help="Pattern model designed by LogolDesigner" />
             </when>
       </conditional>
       <param name="type" type="select" format="text" label="type">
          <option value="dna">DNA</option>
          <option value="rna">RNA</option>
          <option value="protein">PROTEIN</option>
      </param>
      <param name="max" type="integer" value="100" label="Maximum number of result matches"/>
       <param name="fasta" type="boolean" label="Add fasta conversion to result archive" checked="False" value="False"/>
   </inputs>
   <outputs>
        <data format="text" name="match" label="match : ${tool.name} on ${on string}" />
   </outputs>
   <help>
```

Tools

logol

0

```
<tool id="logol wrapper" name="Logol">
   <description>Biological patterns matching</description>
   <command interpreter="bash">
          logol.sh $options.input.options input selector $option input.input model $type > $match
   </command>
   <inputs>
       <conditional name="options input">
             <param name="options_input_selector" type="select" label="Logol pattern type">
               <option value="model" selected="True">Logol pattern model
               <option value="grammar">Logol pattern grammar</option>
             </param>
             <when value="model">
              | <param name="input model" type="data" format="lgd" label="Logol pattern model" help="Pattern model designed by LogolDesigner" />
             </when>
       </conditional>
       <param name="type" type="select" format="text" label="type">
          <option value="dna">DNA</option>
          <option value="rna">RNA</option>
          <option value="protein">PROTEIN</option>
      </param>
      <param name="max" type="integer" value="100" label="Maximum number of result matches"/>
       <param name="fasta" type="boolean" label="Add fasta conversion to result archive" checked="False" value="False"/>
   </inputs>
   <outputs>
        <data format="text" name="match" label="match : ${tool.name} on ${on string}" />
   </outputs>
   <help>
   </help>
</tool>
```

```
Tools

logol

Motif

Logol Biological patterns matching

Workflows

■ All workflows
```

```
<tool id="logol wrapper" name="Logol">
                                                                                     Cheetah : possibilité de faire du code python
   <description>Biological patterns matching</description>
   <command interpreter="bash">
         logol.sh $options.input.options_input_selector $option_input.input_model $type > $match
   </command>
   <inputs>
      <conditional name="options input">
             <param name="options_input_selector" type="select" label="Logol pattern type">
               <option value="model" selected="True">Logol pattern model
              <option value="grammar">Logol pattern grammar</option>
             </param>
             <when value="model">
              | <param name="input model" type="data" format="lgd" label="Logol pattern model" help="Pattern model designed by LogolDesigner" />
             </when>
      </conditional>
      <param name="type" type="select" format="text" label="type">
         <option value="dna">DNA</option>
         <option value="rna">RNA</option>
          <option value="protein">PROTEIN</option>
      </param>
      <param name="max" type="integer" value="100" label="Maximum number of result matches"/>
      <param name="fasta" type="boolean" label="Add fasta conversion to result archive" checked="False" value="False"/>
   </inputs>
   <outputs>
        <data format="text" name="match" label="match : ${tool.name} on ${on string}" />
   </outputs>
   <help>
   </help>
</tool>
```

1 ligne de commande :

- retour ligne = espace

- conditionnelle = #if ... #endif

- commentaires = ##mon commentaire

```
Pattern model designed by LogolDesigner
<tool id="logol wrapper" name="Logol">
                                                                                                                  Type of personal data file:
    <description>Biological patterns matching</description>
                                                                                                                   DNA V
    <command interpreter="bash">
                                                                                                                   Target sequence(s) to analyse:
                                                                                                                   Personal fasta sequence 🗸
           logol.sh $options.input.options input selector $option input.input model $type > $match
                                                                                                                   Read from file: 🗅 省
    </command>
                                                                                                                   21: fasta: Check_sense on data 17
                                                                                                                  Fasta sequence to analyse
    <inputs>
                                                                                                                  Maximum number of result matches:
        <conditional name="options input">
               <param name="options input selector" type="select" label="Logol pattern type">
                                                                                                                  Add fasta conversion to result archive:
                 <option value="model" selected="True">Logol pattern model
                                                                                                                   Add gff conversion to result archive:
                 <option value="grammar">Logol pattern grammar</option>
                                                                                                                  Search sequence in both directions:
               </param>
               <when value="model">
                                                                                                                  Maximum size of a match:
                <param name="input model" type="data" format="lgd" label="Logol pattern model" />
                                                                                                                  Maximum size of a spacer:
               </when>
        </conditional>
                                                                                                                   Maximum size of a word:
        <param name="type" type="select" format="text" label="type">
                                                                                                                   Minimum size of a word:
           <option value="dna">DNA</option>
                                                                                                                  Allow sequence cut (if several models are defined in rule, all models will look for pattern in same sequence range:
           <option value="rna">RNA</option>
            <option value="protein">PROTEIN</option>
       </param>
       <param name="max" type="integer" value="100" label="Maximum number of result matches"/>
        <param name="fasta" type="boolean" label="Add fasta conversion to result archive" checked="False" value="False"/>
    </inputs>
    <outputs>
          <data format="text" name="match" label="match : ${tool.name} on ${on string}" />
   </outputs>
    <help>
   </help>
</tool>
```

Logol pattern type:

Logol pattern model

Logol pattern model:

```
<tool id="logol wrapper" name="Logol">
   <description>Biological patterns matching</description>
   <command interpreter="bash">
         logol.sh $options.input.options input selector $option input.input model $type > $match
   </command>
   <inputs>
      <conditional name="options input">
             <param name="options_input_selector" type="select" label="Logol pattern type">
               <option value="model" selected="True">Logol pattern model
              <option value="grammar">Logol pattern grammar</option>
             </param>
             <when value="model">
              | <param name="input model" type="data" format="lgd" label="Logol pattern model" help="Pattern model designed by LogolDesigner" />
             </when>
      </conditional>
                                                                                                            Maximum number of result matches:
      <param name="type" type="select" format="text" label="type">
          <option value="dna">DNA</option>
                                                                                                            Add fasta conversion to result archive:
         <option value="rna">RNA</option>
          <option value="protein">PROTEIN</option>
      </param>
      <param name="max" type="integer" value="100" label="Maximum number of result matches"/>
      <param name="fasta" type="boolean" label="Add fasta conversion to result archive" checked="False" value="False"/>
   </inputs>
   <outputs>
        <data format="text" name="match" label="match : ${tool.name} on ${on string}" />
   </outputs>
   <help>
   </help>
</tool>
```

```
<tool id="logol wrapper" name="Logol">
   <description>Biological patterns matching</description>
   <command interpreter="bash">
          logol.sh $options.input.options input selector $option input.input model $type > $match
   </command>
                                                                                                          Logol pattern type:
   <inputs>
                                                                                                           Logol pattern model
       <conditional name="options_input">
                                                                                                          Logol pattern model:
              <param name="options_input_selector" type="select" label="Logol pattern type">
               <option value="model" selected="True">Logol pattern model
                                                                                                          Pattern model designed by LogolDesigner
               <option value="grammar">Logol pattern grammar</option>
              </param>
              <when value="model">
              | <param name="input model" type="data" format="lgd" label="Logol pattern model" help="Pattern model designed by LogolDesigner" />
              </when>
       </conditional>
       <param name="type" type="select" format="text" label="type">
          <option value="dna">DNA</option>
          <option value="rna">RNA</option>
          <option value="protein">PROTEIN</option>
      </param>
      <param name="max" type="integer" value="100" label="Maximum number of result matches"/>
       <param name="fasta" type="boolean" label="Add fasta conversion to result archive" checked="False" value="False"/>
   </inputs>
   <outputs>
        <data format="text" name="match" label="match : ${tool.name} on ${on string}" />
   </outputs>
   <help>
   </help>
</tool>
```

</tool>

```
<tool id="logol wrapper" name="Logol">
   <description>Biological patterns matching</description>
   <command interpreter="bash">
          logol.sh $options.input.options input selector $option input.input model $type > $match
   </command>
   <inputs>
      <conditional name="options input">
             <param name="options input selector" type="select" label="Logol pattern type">
               <option value="model" selected="True">Logol pattern model
               <option value="grammar">Logol pattern grammar
             </param>
             <when value="model">
              | <param name="input model" type="data" format="lgd" label="Logol pattern model" help="Pattern model designed by LogolDesigner" />
             </when>
      </conditional>
      <param name="type" type="select" format="text" label="type">
          <option value="dna">DNA</option>
          <option value="rna">RNA</option>
          <option value="protein">PROTEIN</option>
      </param>
      <param name="max" type="integer" value="100" label="Maximum number of result matches"/>
      <param name="fasta" type="boolean" label="Add fasta conversion to result archive" checked="False" value="False"/>
   </inputs>
   <outputs>
        <data format="text" name="match" label="match : ${tool.name} on ${on string}" />
   </outputs>
   <help>
   </help>
```

```
0.0
History
16: log: Get.seqs on
data 1, data 14, and
14: accnos: Listseqs
<u>on data 12</u>
13: log: List.seqs on
                       @ # X
data 12
<u> 12: names:</u>
Unique.seqs on data 5
11: fasta: Unique.seqs
                      ● # ×
10: log: Unique.seqs
on data 5
9: Summary.tax on
                        ● # ×
data 2: summary
8: Summary.tax on
                        ● # ×
data 2: logfile
7: Strip headers on
6: KMeans cluster on 💿 🥒 🗶
5: fasta: Check sense
<u>on data 1</u>
4: simplified
                        @ # X
tax.summary:
Remove unclassified on data 3
3: tax.summarv:
Classify.seqs on data
2: taxonomy:
                        ● # ×
Classify.seqs on data
1: UCSC Main on
                        ● 🖋 🗙
Human: knownGene
(chrY:1-59373566)
452 sequences
format: fasta, database: hq19
B 6 2 H
 >hg19_knownGene_uc011nae.2 range=chrY
GTTTTAGGAAGAGTGTCCCGCAGAGACCCGGCGGGAGC
TGGGATTCCAGCGGCTGGAAGgtgagtgtgtctacccc
gcaagtcccctacgggggacgtggcgggtgccgtctgt
ctqqqaatcaqqaacccqcqcttccqtcattqaqqctc
 ctgggacccttagctgggggcacgggcagggggttcag
```

/help></tool>

```
<tool id="logol wrapper" name="Logol">
    <description>Biological patterns matching</description>
                                                                                                                                                                                                     2 0
                                                                                                                                                                               History
    <command interpreter="bash">
                                                                                                                                                                               16: log: Get.seqs on
                                                                                                                                                                                                @ # X
                                                                                                                                                                               data 1, data 14, and
                                                                                                                                                                               data 12
            logol.sh $options.input.options input selector $option input.input model $type > $match
                                                                                                                                                                               14: accnos: Listseqs
    </command>
                                                                                                                                                                               on data 12
                                                                                                                                                                               13: log: List.seqs on
                                                                                                                                                                                                @ # X
    <inputs>
                                                                                                                                                                               data 12
                                                                                                                                                                               12: names:
        <conditional name="options input">
                                                                                                                                                                               Unique.segs on data 5
                <param name="options input selector" type="select" label="Logol pattern type">
                                                                                                                                                                               11: fasta: Unique.seqs
                                                                                                                                                                                                ● & ×
                                                                                                                                                                               <u>on data 5</u>
                  <option value="model" selected="True">Logol pattern model
                                                                                                                                                                               10: log: Unique.seqs
                                                                                                                                                                                                @ # X
                                                                                                                                                                               on data 5
                  <option value="grammar">Logol pattern grammar</option>
                                                                                                                                                                               9: Summary.tax on
                                                                                                                                                                                                 ● # ×
                                                                                                                                                                               data 2: summary
                </param>
                                                                                                                                                                               8: Summary.tax on
                                                                                                                                                                                                ● & ×
                                                                                                                                                                               data 2: logfile
                <when value="model">
                                                                                                                                                                                                 ● # ×
                                                                                                                                                                               data 6
                 sparam name="input model" type="data" format="lgd" label="Logol pattern model" help="Pattern model designed by LogolDesigner" />
                                                                                                                                                                               6: KMeans cluster on
                                                                                                                                                                                                @ # X
                </when>
                                                                                                                                                                               5: fasta: Check_sense 🌑 🥒 🗶
        </conditional>
                                                                                                                                                                               <u>on data 1</u>
                                                                                                                                                                                                ● # ×
        <param name="type" type="select" format="text" label="type">
                                                                                                                                                                               tax.summary:
                                                                                                                                                                               Remove unclassified on data 3
            <option value="dna">DNA</option>
                                                                                                                                                                               3: tax.summarv:
                                                                                                                                                                               Classify.seqs on data
            <option value="rna">RNA</option>
            <option value="protein">PROTEIN</option>
                                                                                                                                                                               2: taxonomy:
                                                                                                                                                                                                 ● # X
                                                                                                                                                                               Classify.seqs on data
        </param>
                                                                                                                                                                               1: UCSC Main on
                                                                                                                                                                                                ◎ 🖋 🗙
        <param name="max" type="integer" value="100" label="Maximum number of result matches"/>
                                                                                                                                                                               Human: knownGene
                                                                                                                                                                               (chrY:1-59373566)
                                                                                                                                                                               452 sequences
        <param name="fasta" type="boolean" label="Add fasta conversion to result archive" checked="False" value="False"/>
                                                                                                                                                                               format: fasta, database: hg19
                                                                                                                                                                               ₿ 6 2 11
    </inputs>
                                                                                                                                                                               >hg19_knownGene_uc011nae.2 range=chrY:
    <outputs>
                                                                                                                                                                               GTTTTAGGAAGAGTGTCCCGCAGAGACCCGGCGGGAGC
                                                                                                                                                                               TGGGATTCCAGCGGCTGGAAGgtgagtgtgtctacccc
          <data format="text" name="match" label="match : ${tool.name} on ${on_string}" />
                                                                                                                                                                               gcaagtcccctacgggggacgtggcgggtgccgtctgt
                                                                                                                                                                                ctgggaatcaggaacccgcgcttccgtcattgaggctc
    </outputs>
                                                                                                                                                                                ctgggacccttagctgggggcacgggcagggggttcag
    <help>
```

</tool>

```
<tool id="logol wrapper" name="Logol">
                                                                                                                               Syntax
    <description>Biological patterns matching</description>
                                                                                                                               The filter tool allows you to restrict the dataset using simple conditional statements
                                                                                                                              Columns are referenced with c and a number. For example, c1 refers to the first column of a tab-delimited file
    <command interpreter="bash">
                                                                                                                              Make sure that multi-character operators contain no white space (e.g., <= is valid while < = is not valid)
                                                                                                                               When using 'equal-to' operator double equal sign '==' must be used ( e.g., c1=='chr1' )
            logol.sh $options.input.options input selector $option input.input model $type > $match
                                                                                                                              Non-numerical values must be included in single or double quotes (e.g., c6=='+')
                                                                                                                              Filtering condition can include logical operators, but make sure operators are all lower case (e.g., {c1!='chrX' and c1!='chrY')
    </command>
    <inputs>
                                                                                                                              Example
        <conditional name="options input">
                                                                                                                               c1=='chr1' selects lines in which the first column is chr1
                                                                                                                              c3-c2<100*c4 selects lines where subtracting column 3 from column 2 is less than the value of column 4 times 100</p>
                 <param name="options input selector" type="select" label="Logol pattern type">
                                                                                                                              len(c2.split(',')) < 4 will select lines where the second column has less than four comma separated elements
                                                                                                                              c2>=1 selects lines in which the value of column 2 is greater than or equal to 1
                    <option value="model" selected="True">Logol pattern model
                                                                                                                              Numbers should not contain commas - c2<=44.554.350 will not work, but c2<=44554350 will
                                                                                                                              Some words in the data can be used, but must be single or double quoted (e.g., c3=='exon')
                   <option value="grammar">Logol pattern grammar</option>
                 </param>
                 <when value="model">
                  | <param name="input model" type="data" format="lgd" label="Logol pattern model" help="Pattern model designed by LogolDesigner" />
                 </when>
        </conditional>
        <param name="type" type="select" format="text" label="type">
             <option value="dna">DNA</option>
             <option value="rna">RNA</option>
             <option value="protein">PROTEIN</option>
        </param>
        <param name="max" type="integer" value="100" label="Maximum number of result matches"/>
        <param name="fasta" type="boolean" label="Add fasta conversion to result archive" checked="False" value="False"/>
    </inputs>
    <outputs>
           <data format="text" name="match" label="match : ${tool.name} on ${on string}" />
    </outputs>
    <help>
    </help>
```

Oouble equal signs, ==, must be used as "equal to" (e.g., c1 == 'chr22')

1 TIP: If your data is not TAB delimited, use Text Manipulation->Convert

1 TIP: Attempting to apply a filtering condition may throw exceptions if the data type (e.g., string, integer) in every line of the column a line, that line is skipped as invalid for the filter condition. The number of invalid skipped lines is documented in the resulting histor

TPO: l'environnement de travail

Genocloud

Cf document annexe

TP1->5: intégration d'outils « simples »

Transformation d'image

Quelques infos à savoir

- Ajout d'un nouvel outil, redémarrage nécessaire :
 - sh /opt/galaxy-dist/run.sh –stop-daemon
 - sh /opt/galaxy-dist/run.sh –daemon
- Modification du descripteur d'un outil :
 - Dans l'onglet admin « reload a tool configuration »
- Modification du wrapper :
 - · Rien à faire
- Si le descripteur xml n'est pas valide, l'outil ne sera pas chargé :
 - consultation du fichier paster.log : cat /opt/galaxy-dist/paster.log | grep mon_outil

La commande "convert"

- Utilisation de la commande "convert"
- Nécessite le package imagemagick (apt-get install imagemagick)
- Utile pour le traitement d'image
- Dans cette partie :
 - Outil de redimensionnement d'images convert input_file -resize percentage output_file
 - Outil de rotation d'images
 convert input_file -rotate angle output_file
 - Outil de collage d'images
 convert -append input_file1 input_file2 ... output_file
 - Outil de conversion d'images convert input_file1 output_file

TP1: outil de redimensionnement d'images

convert input_file -resize percentage output_file

- 2 paramètres d'entrée
 - data
 - integer (0-100)
- 1 paramètre de sortie
 - data

Note des formateurs :

```
<command>
    mon_programme ${ma_variable} -monoption ${ma_variable2}
</command>
```

TP2 : outil de rotation d'images

convert input_file -rotate angle output_file

- 2 paramètres d'entrée
 - data
 - integer (0-360)
- 1 paramètre de sortie
 - data
- utilisation d'un wrapper

Le multi-input files

1

- <param name="gene files list" type="data" multiple="true" format="txt" label="Gene list file" />
 - Passage directement de \$gene files list dans la ligne de commande
 - Récupération d'une chaine de caractère du type :

/opt/galaxy-dist/database/files/000/dataset_001.dat,/opt/galaxy-dist/database/files/000/dataset_002.dat

2

<command>
 ma_commande
 #for \$gene in \$ma_liste
 \${gene.input_file}
 #end for
</command>

• Création d'une commande de type :

ma_commande /opt/galaxy-dist/database/files/000/dataset_001.dat /opt/galaxy-dist/database/files/000/dataset_001.dat

Le multi-input files

- Passage de \$gene_files_list_config dans la ligne de commande
- \$gene_files_list_config = **chemin vers un fichier** != chaîne de caractère
 - Contenu du fichier :
 - /opt/galaxy-dist/database/files/000/dataset_001.dat::nom1
 - /opt/galaxy-dist/database/files/000/dataset_002.dat::nom2

TP3: outil de collage d'images (version 1)

convert -append input_file1 input_file2 input_file3 ... output_file

- x paramètres d'entrée
 - data
 - nombre inconnu
- 1 paramètre de sortie
 - data
- Utilisation de la balise repeat

TP4 : outil de collage d'images (version 2)

convert -append input_file1 input_file2 input_file3 ... output_file

- x paramètres d'entrée
 - data
 - nombre inconnu
- 1 paramètre de sortie
 - data
- Utilisation de l'attribut
 - multi="true"

Utilisation du multi-output files avec nombre de fichiers inconnus

<tool id="monid" name="myname" force history refresh="true" > <outputs> <data format="txt" name="output" label=" log.txt" /> </outputs> --output \$output --output id \$output.id --new_file_path \$ __new_file_path___

- \$__new_file_path__ correspond à un répertoire temporaire définit dans galaxy.ini
- Dans le wrapper, les fichiers de sorties doivent être envoyé dans ce répertoire
 - new_file_path/primary_output.id_name_visible_txt

Utilisation du multi-output files avec nombre de fichiers inconnus

```
    <tool id="monid" name="myname" force_history_refresh="true" >
    <outputs>
    <data format="txt" name="output" label=" log.txt" >
    <discover_datasets pattern="__designation_and_ext__" directory="my_dir" visible="true" />
    </data>
    <outputs>
```

- Récupération de tous les fichiers présents dans le dossier "my_dir" (format de fichier définit selon l'extension):
 - discover_datasets pattern="__designation_and_ext__"
- Récupération de tous les fichiers présents dans le dossier "my_dir" et forcer le format :

```
discover_datasets pattern="__designation_and_ext__" ext="tabular"
```

• Récupération de certains fichiers grâce à des expressions régulières (beurk mais pouvant être pratique):

```
discover datasets pattern="(?P<designation&gt;.+)\.tsv" ext="tabular"
```

TP5: outil de conversion d'une image en pdf, tiff, jpg

convert -append input_file1 input_file2 input_file3 ... output_file

- 1 paramètres d'entrée
 - data
- x paramètres de sortie
 - data

TP6 : intégration d'un outil « complexe»

Outil complexe?

- · Outil complexe:
 - Multi-input
 - Multi-output
 - Conditions faisant varier le formulaire
- Intégration d'un outil « ultimate_tool » :
 - Redimensionner une image png
 - Tourner une images png
 - Coller plusieurs images png ensemble
 - Convertir une images png: jpg, pdf au choix.
- Nouveau :
 - Utilisation de la balise <conditionnal> pour les différentes "options"
 - Utilisation du type « boolean » pour les formats.

La balise conditionnal

```
command interpreter="python">
  #if $source.source select=="database"
    blat wrapper.py 0 $source.dbkey $input query $output1 $iden $tile size $one off
 #else
    blat wrapper.py 1 $source.input target $input query $output1 $iden $tile size $one off
 #end if
</command>
<conditional name="source">
  <param name="source select" type="select" label="Target source">
    <option value="database">Genome Build
    <option value="input_ref">Your Upload File
  </param>
  <when value="database">
    <param name="dbkey" type="genomebuild" label="Genome" />
  </when>
  <when value="input_ref">
    <param name="input_target" type="data" format="fasta" label="Reference sequence" />
  </when>
</conditional>
```

La commande "convert"

- Utilisation de la commande "convert"
- Nécessite le package imagemagick
- Utile pour le traitement d'image
- Dans cette partie :
 - Outil de redimensionnement d'images convert input_file -resize percentage output_file
 - Outil de rotation d'images
 convert input_file -rotate angle output_file
 - Outil de collage d'images
 convert -append input_file1 input_file2 ... output_file
 - Outil de conversion d'images convert input_file output_file



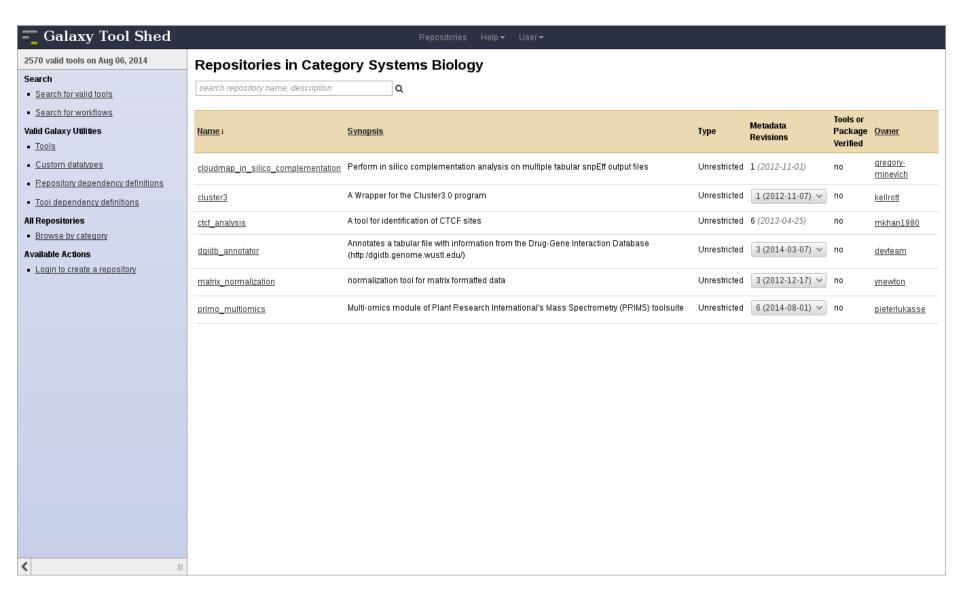
Le toolshed Galaxy

- Appstore d'outils pour Galaxy
 - centralisation des outils
 - intégration rapide dans son instance
- Contient des répertoires contenant :
 - des outils / wrappers
 - des datatypes
 - des workflows
 - des data managers
- Plusieurs types de repositories
 - Unrestricted
 - Tool dependencies
 - Repositories dependencies

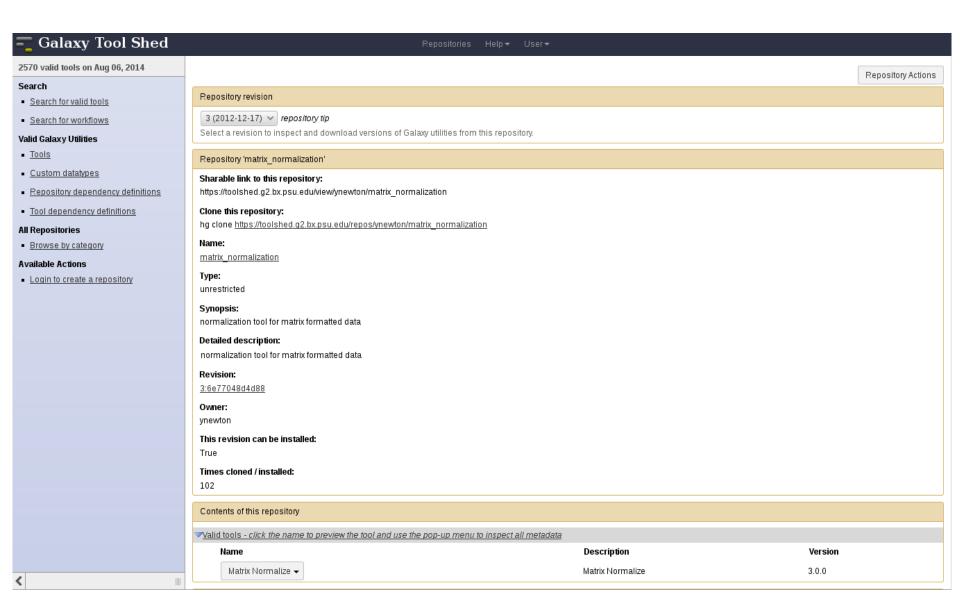
Le toolshed Galaxy

- Deux toolsheds principaux
 - toolshed main -> https://toolshed.g2.bx.psu.edu
 - toolshed test -> https://testtoolshed.g2.bx.psu.edu/
- Possibilité pour chacun de déployer son toolshed
 - Administration
 - Développement
 - Sécurité

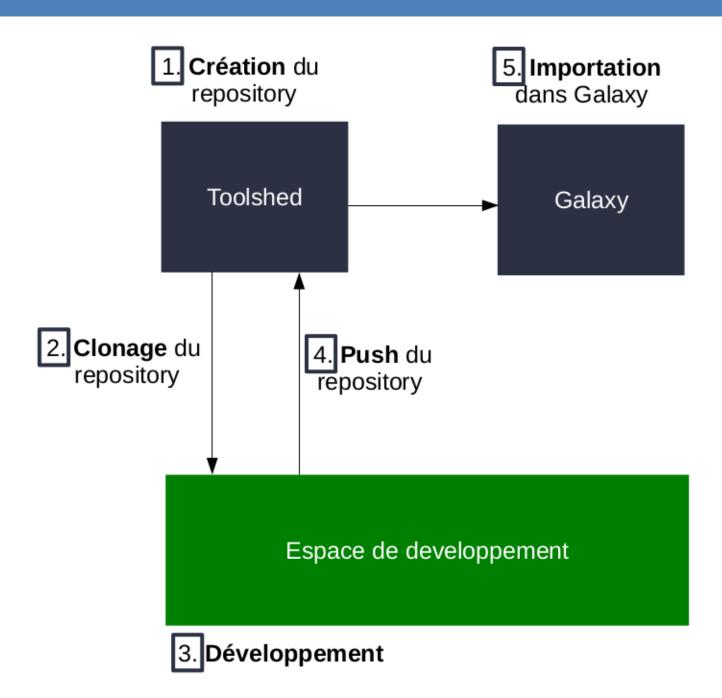
Exemple de catégorie "Systems Biology"



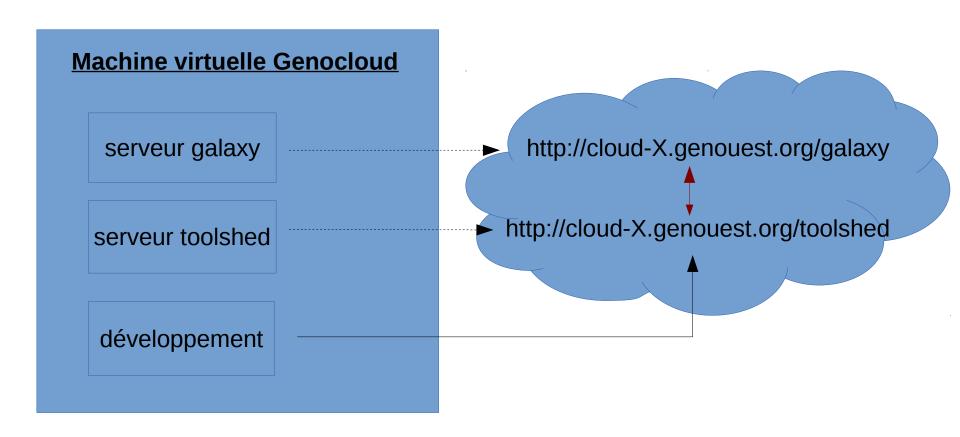
Exemple d'outil "matrix_normalization"





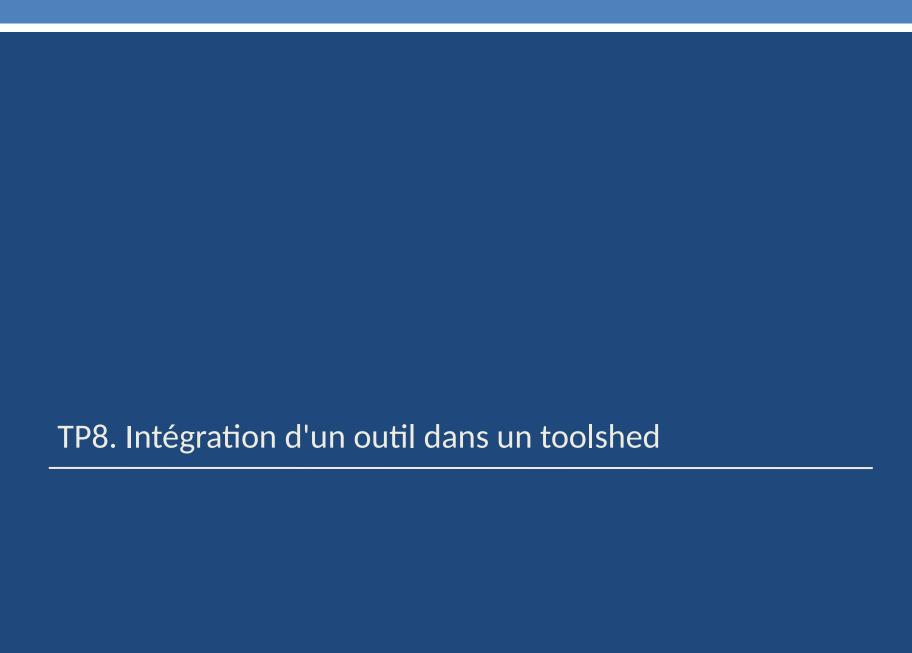


Environnement



Installation de l'environnement

cf. document annexe



Lors d'une intégration

- A chaque « hg push » sur le dépôt = une révision
- A chaque installation d'une révision = un clone compté en plus
- Évitez lors du développement de multiplier les « hg push » :
 - Passez par le fichier tool_conf.xml
 - Premier « hg push » seulement lorsque l'outil est fonctionnel
- Pour installer votre outil du toolshed:
 - Admin > Search and browse tool shed repositories
 - Selectionnez votre tool shed
 - Naviguez et installez

Lors d'une modification

- Pour la mise à jour de votre outil issus du toolshed
 - Admin > Managed installed tool shed repositories
 - Sur la flèche : Update tool shed status
 - Sur la flèche : Install lastest revision / Get updates
- Pour « recharger » votre outil présent dans tool_conf.xml
 - Admin > Reload a tool's configuration
 - Selectionnez votre outil
 - Reload

Intégration de l'outil "resize" de ce matin

- Quatre commandes sur le terminal:
 - hg clone
 - cp
 - hg add
 - hg commit
 - hg push
 - Suppression dans le tool_conf.xml
 - Installation via le toolshed

TP9. Intégration d'un outil avec sa dépendance

https://wiki.galaxyproject.org/ToolDependenciesTagSets

Les dependencies : étape 1/3

- · Intégration d'un package spécial dans le toolshed
 - type = tool dependencies
- · Le repository nommé « commet dependencies » contient uniquement un fichier tool_dependencies.xml définissant un package
- · Dans ce fichier s'applique une succession d' «actions» :

```
<?xml version="1.0"?>
<tool dependency>
  <package name="galaxy_commet" version="24.7.14">
    <install version="1.0">
    <actions>
        <action type="download_by_url">http://github.com/pierrepeterlongo/commet/archive/master.zip</action>
        <action type="shell_command">make</action>
        <!-- move directories into $INSTALL DIR -->
       <action type="move_directory_files">
           <source directory>bin</source directory>
           <destination_directory>$INSTALL_DIR/bin</destination_directory>
       </action>
       <!-- move files into $INSTALL DIR -->
       <action type="move_file">
           <source>dendro.R</source>
           <destination>$INSTALL DIR/Rscript</destination>
       </action>
       <!-- create env.sh -->
       <action type="set_environment">
          <environment_variable name="PATH" action="prepend to">$INSTALL DIR/bin/environment variable>
          <environment_variable name="RSCRIPTS" action="set to">$INSTALL DIR/Rscript//environment variable>
     </action>
    </actions>
    </install>
  </package>
                             Création d'un fichier env.sh embarqué par l'outil lors de l'exécution
</tool_dependency>
```

Les dependencies : étape 2/3

 Au sein du repository contenant l'outil Galaxy développé doit s'ajouter un fichier tool_dependencies.xml

• Installation du package lors de l'installation de l'outil

Les dependencies : étape 3/3

Au sein du descripteur de l'outil :

```
<requirements>
  <requirement type="package" version="24.7.14">galaxy_commet</requirement>
</requirements>
```

Nécessaire pour l'embarquement automatique de l'environnement

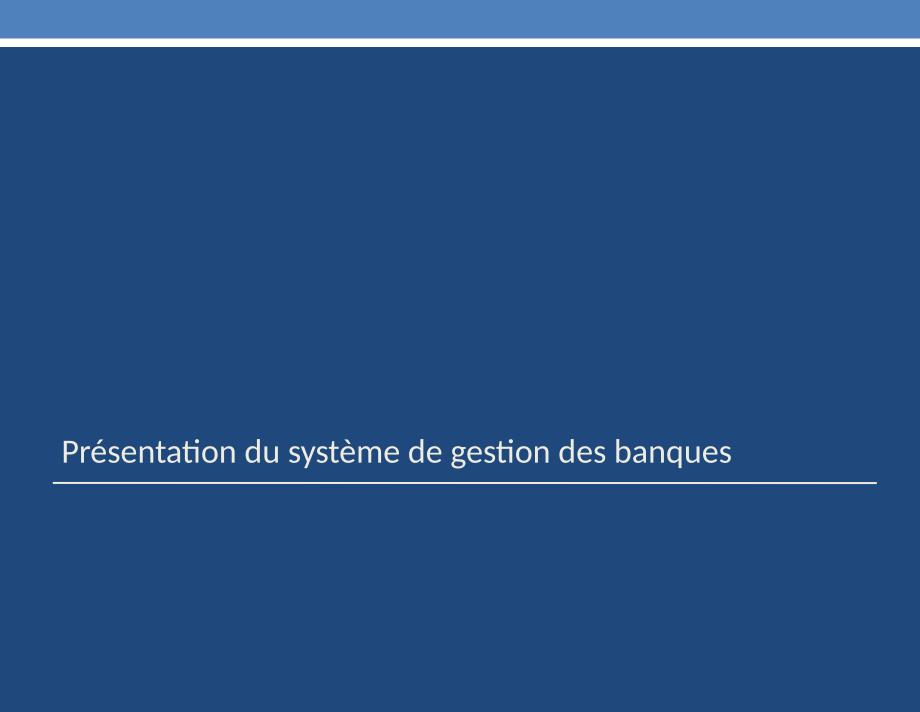
Intégration de la dépendance de l'outil "resize"

- Désinstaller imagemagick
 - apt-get remove imagemagick
- Essayer l'outil : échec assuré
- Création de la dépendance imagemagick
 - Création du package imagemagick (tool_dependencies)
 - Modification de l'outil pour :
 - installer le package lors de son installation
 - Prendre un environnement précis lors de l'exécution

Le package imagemagick

- Création d'un nouveau repository
 - De type tool_dependencies
 - Contiendra les règles pour l'installation
- Téléchargement des sources :
 - http://www.imagemagick.org/download/ImageMagick.tar.gz
- Exécution de configure :
 - ./configure
- Compilation :
 - make install
- Ajout des librairies dans le système
 - Idconfig /usr/local/lib
- Ajout de /usr/local/bin dans le \$PATH -> creation d'un env.sh

Actions



Powered by Anthony Brétaudeau

TP10: Intégration d'un outil utilisant des banques

Powered by Anthony Brétaudeau (again)