

# Wrapper XML de l'outil

## KaKs\_Calculator 2.0

---

[Compréhension de l'outil](#)

[Ecriture du XML](#)

[Test](#)

## Introduction

Nous avons pour projet de mettre en place un workflow sur galaxy, cependant, certains outils que nous souhaitons intégrer au workflow ne sont pas présents sur le Galaxy Tool Shed.

Voici une petite notice pour expliquer comment écrire un fichier XML (ici pour l'outil KaKs\_Calculator 2.0) afin qu'il soit ajouté au Galaxy Tool Shed. Une documentation de l'outil KaKs est disponible en anglais

([http://gensoft.pasteur.fr/docs/KaKs\\_Calculator/1.2/KaKs\\_CalculatorDOC.pdf](http://gensoft.pasteur.fr/docs/KaKs_Calculator/1.2/KaKs_CalculatorDOC.pdf)).

## 1. Compréhension de l'outil

KaKs se lance en ligne de commande. Nous allons donc entrer la commande suivant afin d'exécuter l'outil et voir son "help":

```
./kakscalculator2/bin/KaKs_Calculator -h
```

Si l'exécutable a été exporté dans le \$PATH vous pouvez lancer l'outils de la manière suivante depuis n'importe quel répertoire :

```
KaKs_Calculator -h
```

```

~$ KaKs_Calculator -h
*****
Program: KaKs_Calculator Toolbox
Version: 2.0, June. 2009
Description: A toolbox based on integrating gamma methods and sliding window strategy.
*****

Usage: Kaks_Calculator <options>
-i Axt file name for calculating Ka & Ks.
-o Output file name for saving results.
-c Genetic code table (Default = 1-Standard Code).
  1-Standard Code                2-Vertebrate Mitochondrial Code
  3-Yeast Mitochondrial Code     4-Mold Mitochondrial Code
  5-Invertebrate Mitochondrial Code 6-Ciliate, Dasycladacean and Hexamita Code
  9-Echinoderm and Flatworm Mitochondrial Code 10-Euplotid Nuclear Code
  11-Bacterial and Plant Plastid Code 12-Alternative Yeast Nuclear Code
  13-Ascidian Mitochondrial Code 14-Alternative Flatworm Mitochondrial Code
  15-Blepharisma Nuclear Code 16-Chlorophycean Mitochondrial Code
  21-Trematode Mitochondrial Code 22-Scenedesmus obliquus mitochondrial Code
  23-Thraustochytrium Mitochondrial Code
  (More information about the Genetic Codes: http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Taxonomy/Utils/wprintgc.cgi?mode=c)

-m Methods for estimating Ka and Ks and theirs references(Default = MA)
  NG Nei, M. and Gojobori, T. (1986) Mol. Biol. Evol., 3, 418-426.
  LWL Li, W.H., Wu, C.I. and Luo, C.C. (1985) Mol. Biol. Evol., 2, 150-174.
  LPB Li, W.H. (1993) J. Mol. Evol., 36, 96-99. Pamilo, P. and Bianchi, N.O. (1993) Mol. Biol. Evol., 10, 271-281.
  MLWL Tzeng, Y.H., Pan, R. and Li, W.H. (2004) Mol. Biol. Evol., 21, 2290-2298.
  MLPB Tzeng, Y.H., Pan, R. and Li, W.H. (2004) Mol. Biol. Evol., 21, 2290-2298.
  GY Goldman, N. and Yang, Z. (1994) Mol. Biol. Evol., 11, 725-736.
  YN Yang, Z. and Nielsen, R. (2000) Mol. Biol. Evol., 17, 32-43.
  MYN Zhang, Z., Li, J. and Yu, J. (2006) BMC Evolutionary Biology, 6, 44.
  MS Model Selection according to the AICc
  MA Model Averaging on a set of candidate models
  GNG Wang, DP., Zhang, S., He, FH., Zhu, J.,Hu, SN. and Yu, J.(2009) Genomics, Proteomics and Bioinformatics. In press.
  GLWL Wang, DP., Zhang, S., He, FH., Zhu, J.,Hu, SN. and Yu, J.(2009) Genomics, Proteomics and Bioinformatics. In press.
  GLPB Wang, DP., Zhang, S., He, FH., Zhu, J.,Hu, SN. and Yu, J.(2009) Genomics, Proteomics and Bioinformatics. In press.
  GMLWL Wang, DP., Zhang, S., He, FH., Zhu, J.,Hu, SN. and Yu, J.(2009) Genomics, Proteomics and Bioinformatics. In press.
  GMLPB Wang, DP., Zhang, S., He, FH., Zhu, J.,Hu, SN. and Yu, J.(2009) Genomics, Proteomics and Bioinformatics. In press.
  GYN Wang, DP., Zhang, S., He, FH., Zhu, J.,Hu, SN. and Yu, J.(2009) Genomics, Proteomics and Bioinformatics. In press.
  GMYN Wang, DP., Wan, HL., Zhang, S. and Yu, J. (2009) Biology Direct, 4:20 (16 June 2009)

Example:
./KaKs_Calculator -i test.axt -o test.axt.kaks -m GMYN //use Gamma-MYN method

For help information: KaKs_Calculator -h
Please send bugs or advice to Da-Peng Wang at wangdp@big.ac.cn or Yu-Bin Zhang at ybzhang@big.ac.cn.

```

Voici le résultat attendu

Les lettres précédées par “-” sont les options, en l'occurrence nous sommes face à un outil possédant 4 options et notre travail est de faire en sorte que Galaxy reconnaisse ces options.

## 2. Ecriture du XML

Les captures suivantes illustrent le contenu du fichier XML. Je vais expliquer quelques balises que j’ai utilisé:

- **description** : La valeur est affichée dans le menu de l'outil immédiatement après le lien hypertexte de ce dernier.
- **requirement** : Ce jeu de balises est contenu dans le jeu de balises <requirements>. Les programmes ou modules tiers dont dépend l'outil sont inclus dans ce jeu de balises. Lorsqu'un outil s'exécute, Galaxy tente de résoudre ces exigences (également appelées dépendances). Les exigences sont censées être abstraites et résolubles par plusieurs systèmes différents (par exemple, conda, le système de gestion des dépendances Galaxy Tool Shed ou des modules d'environnement).
- **command** : Spécifie la commande à exécuter. La valeur résultante sera trouvée dans le champ «Info» du jeu de données d'historique.

- **<param format="axt" name="input" type="data" label="Axt alignment files :"  
multiple="true" display="checkboxes"/>** : Cette balise permet de sélectionner un ou plusieurs fichiers afin de les transmettre à la variable de ligne de commande appropriée soit "\$input" dans notre cas.
- **<param name="c" type="select" label="Genetic code table (Default = 1-Standard Code):"** : Cela va créer une liste de cases à cocher permettant à l'utilisateur de sélectionner une ou aucune option parmi toutes celles présentent entre «Standard Code» et «Thraustochytrium Mitochondrial Code». Selon la sélection, la valeur de \$c sera modifiée.
- **<data format="tabular" name="output"/>** : Cette balise permet d'avoir un fichier de sortie sous forme de tableau.
- **Les balises <tests>, <help> et <citations>** sont nécessaires si vous souhaitez publier vos outils sur le Toolshed. <tests> permet à planeo de vérifier si votre outils fonctionne correctement, <help> comprend tous les détails nécessaires sur la façon d'utiliser l'outil et <citations> représente les informations de citation de l'outil en utilisant soit une entrée DOI soit une entrée BibTeX

Voici un [lien](#) vers le Galaxy Tool Shed où vous pourrez retrouver "kaks\_calculator" et jeter un coup d'oeil au fichier XML

```

<tool id="kaks_tool" name="kaks_calculator" version="2.0.1">
<description> A toolbox based on integrating gamma methods and sliding window strategy </description>

  <requirements>
    <requirement type="package" version="2.0.1">kakscalculator2</requirement>
  </requirements>

<command>KaKs_Calculator '-i' $input '-c' $c '-m' $m '-o' $output </command>

<inputs>
  <param format="axt" name="input" type="data" label="Axt alignment files : " multiple="true" display="checkboxes"/>

  <param name="c" type="select" label="Genetic code table (Default = 1-Standard Code):">
    <option value="1">Standard Code</option>
    <option value="2">Vertebrate Mitochondrial Code</option>
    <option value="3">Yeast Mitochondrial Code</option>
    <option value="4">Mold Mitochondrial Code</option>
    <option value="5">Invertebrate Mitochondrial Code</option>
    <option value="6">Ciliate, Dasycladacean and Hexamita Code</option>

    <option value="10">Euplotid Nuclear Code</option>
    <option value="11">Bacterial and Plant Plastid Code</option>
    <option value="12">Alternative Yeast Nuclear Code</option>
    <option value="13">Ascidian Mitochondrial Code</option>
    <option value="14">Alternative Flatworm Mitochondrial Code</option>
    <option value="15">Blepharisma Nuclear Code</option>
    <option value="16">Chlorophycean Mitochondrial Code</option>

    <option value="21">Trematode Mitochondrial Code</option>
    <option value="22">Scenedesmus obliquus mitochondrial Code</option>
    <option value="23">Thraustochytrium Mitochondrial Code</option>
  </param>

  <param name="m" type="select" label="Methods for estimating Ka and Ks and theirs references (Default = MA) :">
    <option value="NG">NG (Nei, M. and Gojobori, T. (1986) Mol. Biol. Evol., 3, 418-426.)</option>
    <option value="LWL">LWL (Li, W.H., Wu, C.I. and Luo, C.C. (1985) Mol. Biol. Evol., 2, 150-174.)</option>
    <option value="LPB">LPB (Li, W.H. (1993) J. Mol. Evol., 36, 96-99. Pamilo, P. and Bianchi, N.O. (1993) Mol. Biol. Evol., 10, 271-281.</option>
    <option value="MLWL">MLWL (Tzeng, Y.H., Pan, R. and Li, W.H. (2004) Mol. Biol. Evol., 21, 2290-2298.)</option>
    <option value="MLPB">MLPB (Tzeng, Y.H., Pan, R. and Li, W.H. (2004) Mol. Biol. Evol., 21, 2290-2298.)</option>
    <option value="GY">GY (Goldman, N. and Yang, Z. (1994) Mol. Biol. Evol., 11, 725-736.)</option>
    <option value="YN">YN (Yang, Z. and Nielsen, R. (2000) Mol. Biol. Evol., 17, 32-43.)</option>
    <option value="MYN">MYN (Zhang, Z., Li, J. and Yu, J. (2006) BMC Evolutionary Biology, 6, 44.)</option>
    <option value="MS">MS (Model Selection according to the AICc)</option>
    <option value="MA">MA ( Model Averaging on a set of candidate models) </option>
    <option value="GNG">GNG (Wang, DP., Zhang, S., He, FH., Zhu, J.,Hu, SN. and Yu, J.(2009) Genomics, Proteomics and Bioinformatics. In press.) </option>
    <option value="GLWL">GLWL (same)</option>
    <option value="GLPB">GLPB (same)</option>

    <option value="GLWL">GLWL (same)</option>
    <option value="GLPB">GLPB (same)</option>
    <option value="GMLWL">GMLWL (same)</option>
    <option value="GYN">GYN (same)</option>
    <option value="GMYN">GMYN (Wang, DP., Wan, HL., Zhang, S. and Yu, J. (2009) Biology Direct, 4:20 (16 June 2009)) </option>
  </param>

</inputs>

<outputs>
<data format="tabular" name="output"/>
</outputs>

<tests>
  <test>
    <param name="input" value="example.axt" />
    <param name="c" value="1"/>
    <param name="m" value="NG"/>
    <output name="output" file="out" />
  </test>
</tests>

<help>
-Please send bugs or advice to Da-Peng Wang at wangdp@big.ac.cn or Yu-Bin Zhang at ybzhang@big.ac.cn.

-More information about the Genetic Codes: http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Taxonomy/Utils/wprintgc.cgi?mode=c

-Git: https://github.com/kullrich/kakscalculator2
</help>

< Citations>
< citation type="doi">10.1016/S1672-0229(10)60008-3</ citation>

    < citation type="doi">10.1186/1745-6150-4-20</ citation>

    < citation type="doi">S1672-0229(08)60040-6</ citation>
</ Citations>
</ tool>

```

Captures d'écran du XML de kaks\_calculator

### 3. Test

Avant de mettre l'outil sur le Galaxy Tool Shed je l'ai testé sur l'instance Galaxy de l'IPG.

Pour ce faire, je vous conseille de suivre ce [tutoriel](#) car je l'ai moi même utilisé (dans notre cas les points 2, 4 et 5 paraissent les plus pertinents).

### 4. Aperçu

**kaks\_calculator** A toolbox based on integrating gamma methods and sliding window strategy (Galaxy Version 2.0.1) ☆ Favorite ▼ Options

**Axt alignment files :**

- 166: example.axt
- 162: exemple\_fichier.axt

**Genetic code table (Default = 1-Standard Code):**

Standard Code

**Methods for estimating Ka and Ks and theirs references (Default = MA) :**

NG (Nei, M. and Gojobori, T. (1986) Mol. Biol. Evol., 3, 418-426.)

☒ Execute

-Please send bugs or advice to Da-Peng Wang at wangdp@big.ac.cn or Yu-Bin Zhang at ybzhang@big.ac.cn.

-More information about the Genetic Codes: <http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Taxonomy/Utils/wprintgc.cgi?mode=c>

-Git: <https://github.com/kullrich/kakscalculator2>

**Citations (APA)** **BibTeX**

Wang, D., Zhang, Y., Zhang, Z., Zhu, J., & Yu, J. (2010). KaKs\_Calculator 2.0: A Toolkit Incorporating Gamma-Series Methods and Sliding Window Strategies. *Genomics, Proteomics & Bioinformatics*, 8(1), 77-80. [https://doi.org/10.1016/s1672-0229\(10\)60008-3](https://doi.org/10.1016/s1672-0229(10)60008-3) [Link]

Capture d'écran de l'outil "kaks\_calculator" installé via le Galaxy Tool Shed

D'autres exemples de fichiers XML peuvent être retrouvés dans le répertoire suivant : [https://github.com/karubiotools/galaxy\\_ipg\\_tools](https://github.com/karubiotools/galaxy_ipg_tools)