

# Configuração do arquivo controle `codeml.ctl` para a *Atividade 4: Investigando a variabilidade das pressões seletivas entre sítios*

```
seqfile = seqfile.txt      * sequence data filename
treefile = teeM3.txt ← * SET THIS for tree file with
outfile = results.txt     * main result file name

noisy = 9                 * lots of rubbish on the screen
verbose = 1              * detailed output
runmode = 0              * user defined tree
seqtype = 1              * codons
CodonFreq = 2            * F3X4 for codon frequencies

model = 0                 * one omega ratio for all branches
NSsites = 3 ← * RESET THIS for for all models

icode = 0                 * universal code

fix_kappa = 1            * kappa fixed
kappa = 3.69796 ← * RESET THIS for all models

fix_omega = 0            * omega to be estimated
omega = 5                * initial omega

ncatG = 3 ← * RESET THIS for models M3, M7 and M8
fix_blength = 2         * fixed branch lengths from tree file

* Model M0 settings:
  * treefile = treeM0.txt      * SET THIS for
  * NSsites = 0                * SET THIS for M0
  * kappa = 3.49676            * SET THIS to fix kappa ...

* Model M3 (k=3) settings:
  * treefile = treeM3.txt      * SET THIS for tree file ...
  * NSsites = 3                * SET THIS for M3
  * kappa = 3.69796            * SET THIS to fix kappa ...
  * ncatG = 3                  * SET THIS for model M3
```

Mude o valor da opção `treefile =` para modificar a árvore que será usada pelo CODEML.

Coloque `model = 0, 1, 2, 3, 7, ou 8` para especificar os modelos de sítio M0, M1a, M2a, M3, M7, e M8.

Especifique os valores abaixo na opção `kappa =`. Estes valores já são as MLEs do parâmetro  $k$  (economiza tempo).

Coloque `ncatG = 3` para o modelo M3 e mude a opção `ncatG` para 10 nos modelos M7 e M8. Outros modelos vão ignorar esta opção.

Estes comentários listam as configurações necessárias para rodar cada modelo de sítio.

**OBS:** As configurações para os outros modelos (M1a, M2a, M7 e M8) estão no arquivo controle `codeml.ctl`

As árvores usadas em cada modelo já estão com as MLEs para os comprimentos de ramos (para economizar tempo).