

Molecular Phylogeny V

1. Укажите версии использованных программ

- [IQ-TREE](#) multicore version 2.2.0.3 COVID-edition for Linux 64-bit built Aug 2 2022
- [FigTree](#) v1.4.4

2. Оцениваем устойчивость топологии:

как запустить построение дерева в iqtree2, но с генерацией 100 реплик обычного бутстрепа?

```
iqtree2 -s ./SUP35_aln_prank.trim.fas --bonly 100
```

3. Как соотносятся время работы обычного и ultrafast bootstrap (в расчёте на одну повторность) и полученные значения?

Достаточно приблизительной прикидки (порядка 0.1 секунды, порядка секунд, порядка десятков секунд и т.д.). Если хочется точнее, время работы можно определить с помощью команды time, также запустить без бутстрепа и вычесть базовый запуск, потом рассчитать.

Время работы с опцией -bb составило всего несколько секунд при 1000 итерациях: для опций

```
iqtree2 -s ./SUP35_aln_prank.trim.fas -bb 1000
```

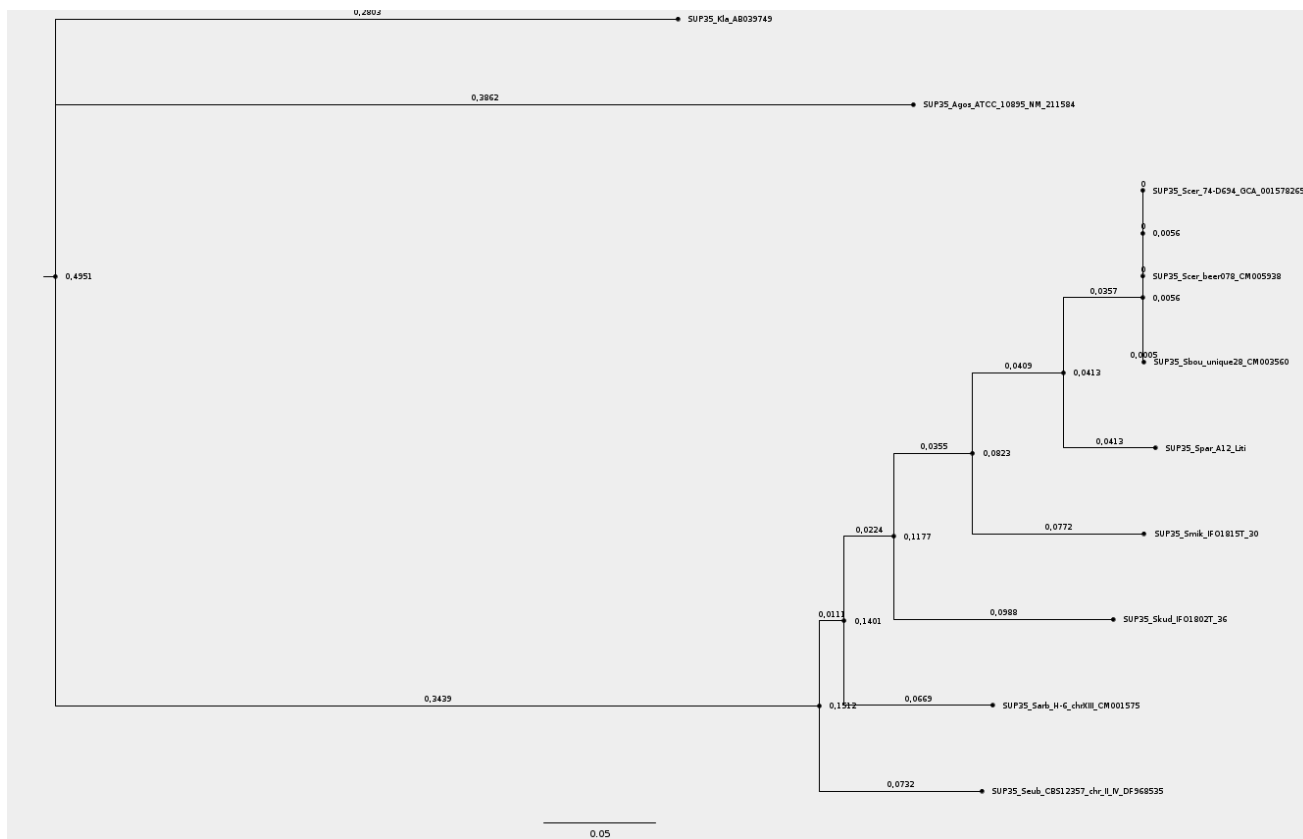
имеем время работы меньше 4 секунд (программа не дала разбивку для бутстрапа)

Время работы с обычным бутстрапом:

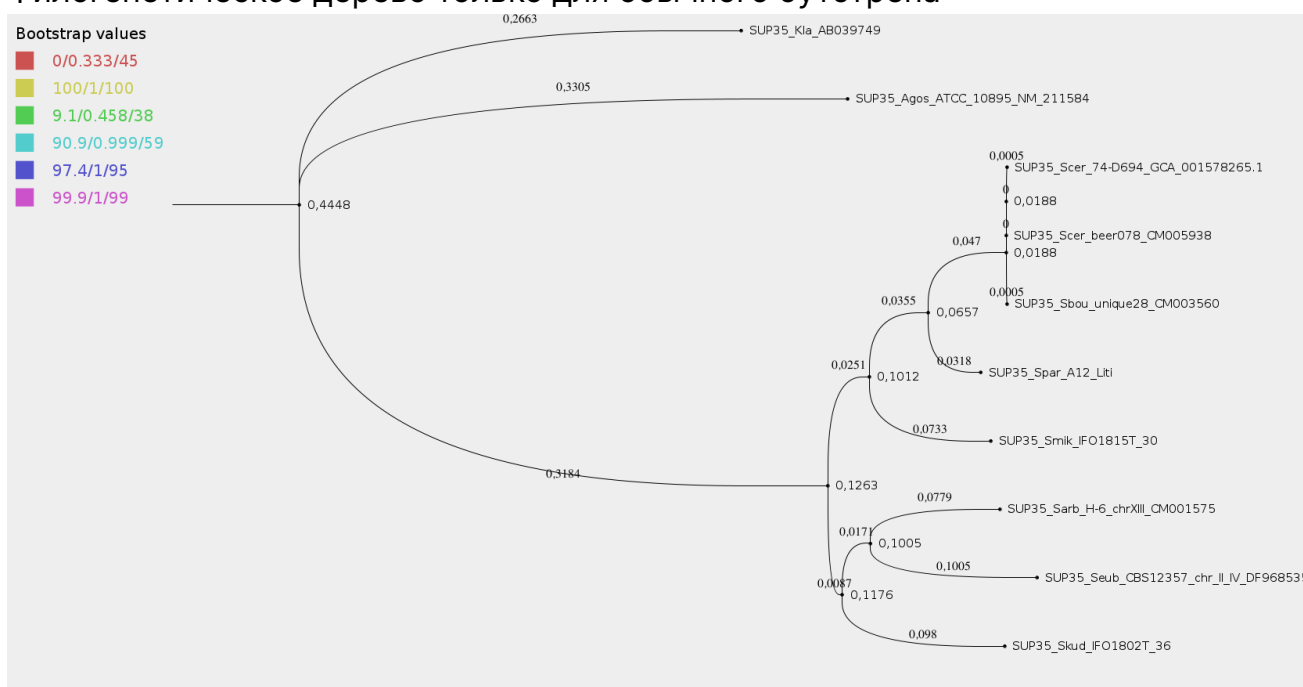
```
Total CPU time for bootstrap: 227.678 seconds.  
Total wall-clock time for bootstrap: 210.847 seconds.
```

4. Как запустить предыдущую команду, но с генерацией: 1000 ultrafast bootstrap + 1000 alrt + abayes?

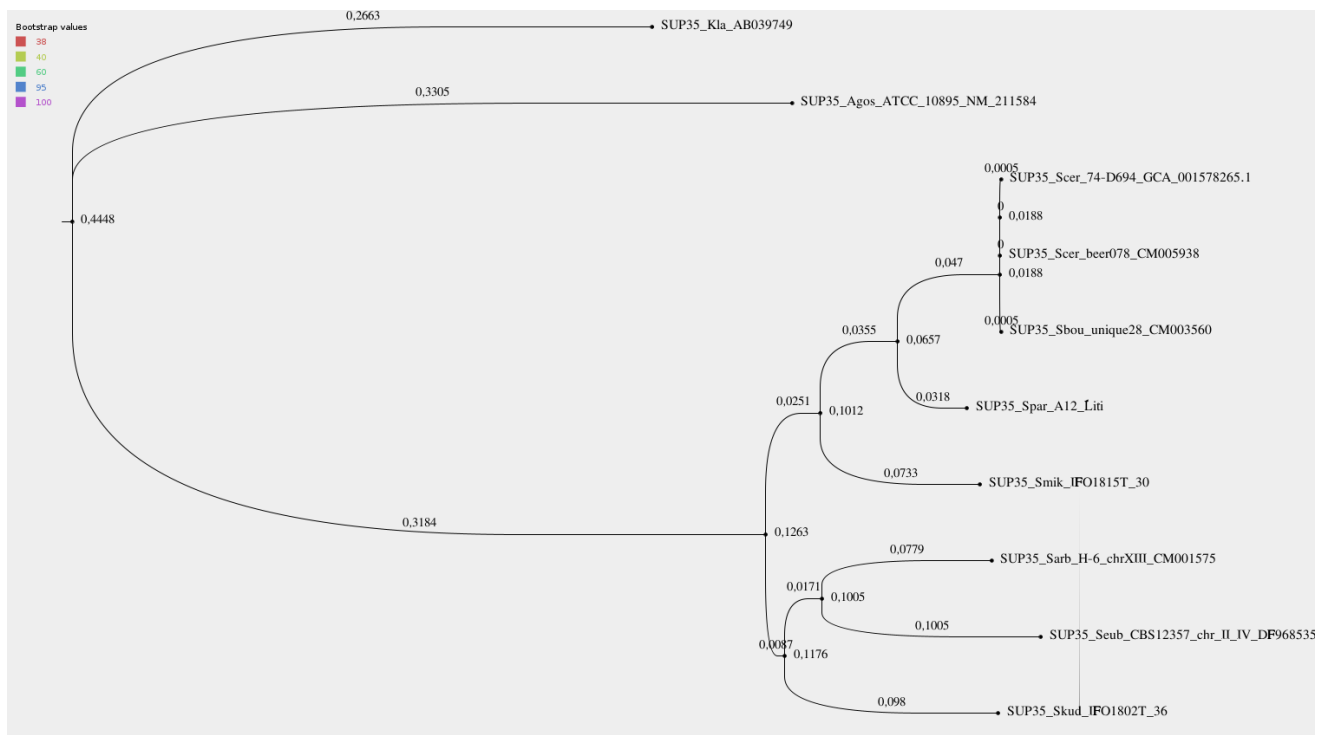
```
iqtree2 -s ./SUP35_aln_prank.trim.fas -bb 1000 -alrt 1000 -abayes
```



Филогенетическое дерево только для обычного бутстрепа



Филогенетическое дерево для ультрабыстрого бутстрепа с abayes и alrt.



Филогенетическое дерево только с бутстрепом

Какой вывод можно сделать из сравнения деревьев, полученных путём обычного бутстрепа и `ufboot` + `abayes` + `alrt`?

Поддержка для обычного бутстрепа в среднем несколько выше (если считать на итерацию, то выше даже на порядок), но при этом он занимает на **три порядка** больше времени (200+ секунд на 100 итераций против менее 4 секунд на 1000 итераций)

5. Как укоренить дерево по известной внешней кладе в IQ-TREE или другой программе?

Для укоренения деревьев используется опция `-o` со следующим синтаксисом:

```
iqtree2 -s <alignment> -o <outgroup_name>
```

По умолчанию используется (с.110) первый таксон в выравнивании.

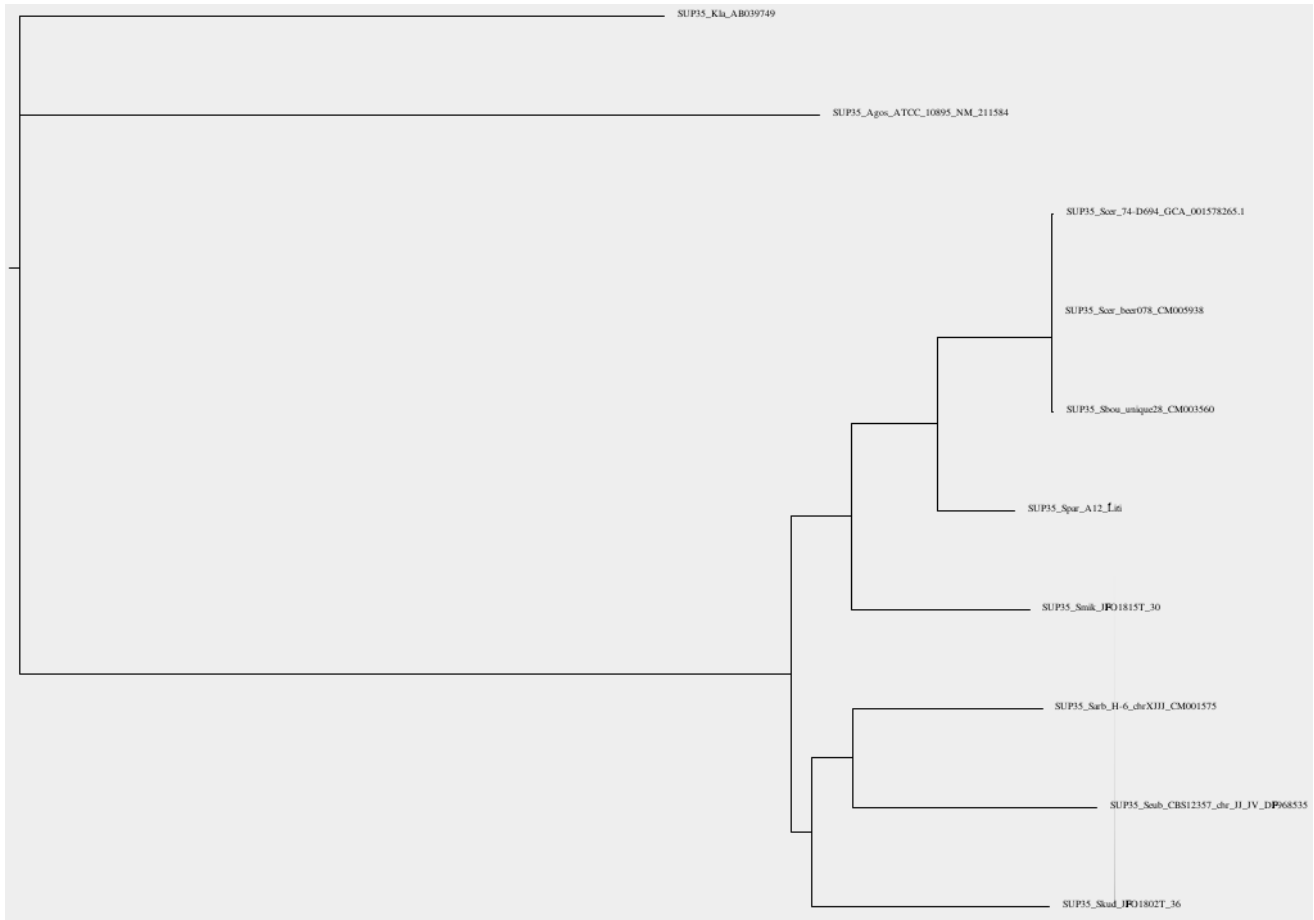
Например, в примере на семинаре:

```
iqtree2 -s SUP35_aln_prank.trim.fas -m TIM3+F+G4 -pre
SUP35_TIM3_root_outgroup -bb 1000 -alrt 1000 -abayes -o
SUP35_Kla_AB039749,SUP35_Agos_ATCC_10895_NM_211584
```

Здесь в качестве внешней группы выбрана клада, состоящая из двух последовательностей: `SUP35_Kla_AB039749,SUP35_Agos_ATCC_10895_NM_211584`. Для внешней группы следует выбирать набор последовательностей, более

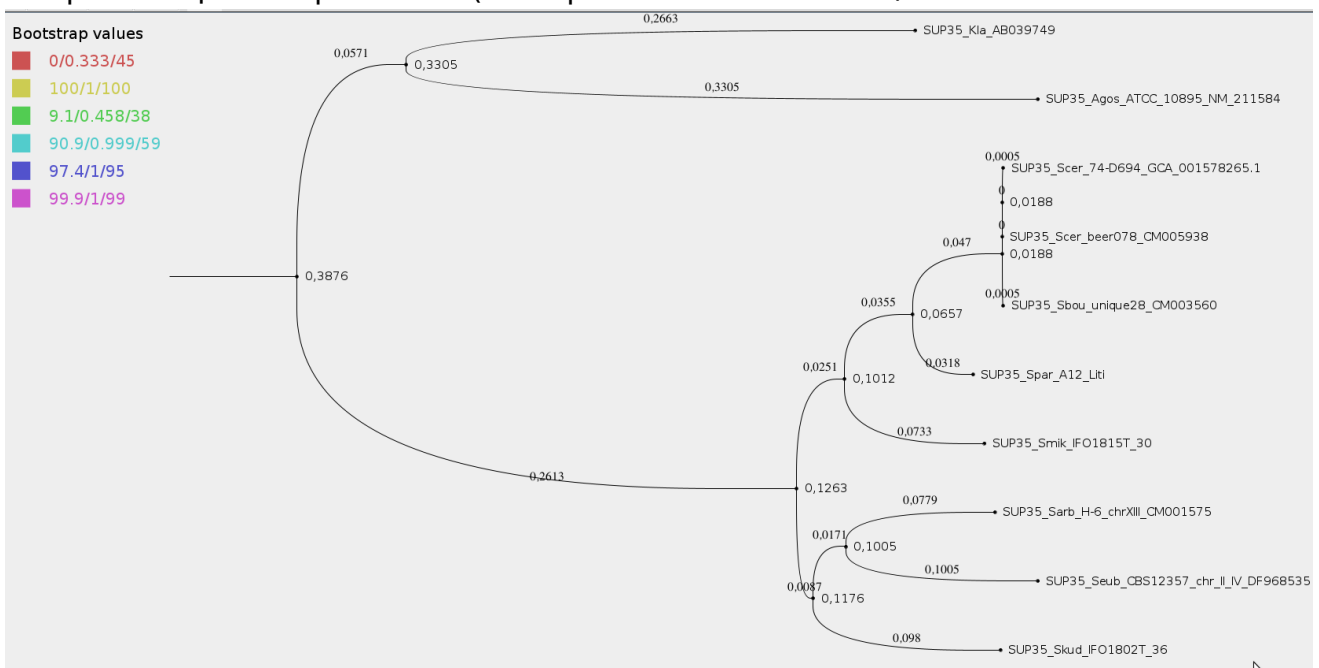
удалённый от исследуемого, чем все последовательности в исследуемом наборе друг от друга, но не слишком удалённый. В идеале - сестринскую кладу.

Построенное таким образом дерево можно видеть на рисунке ниже



6. Как укоренить дерево при помощи midpoint rooting?

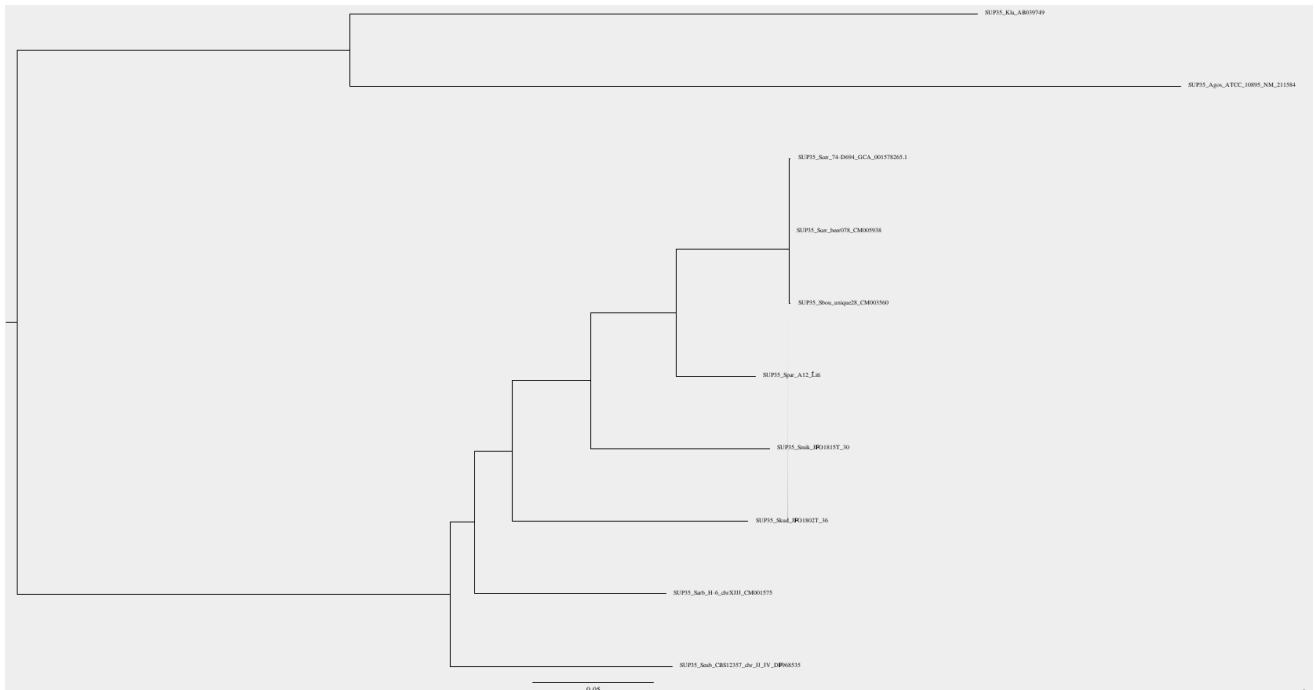
В IQ-TREE такой опции нет. Тем не менее, можно воспользоваться FigTree, чтобы построить midpoint rooting. В меню Tree в верхнем левом углу экрана следует выбрать опцию Midpoint root (или просто нажать Ctrl+M)



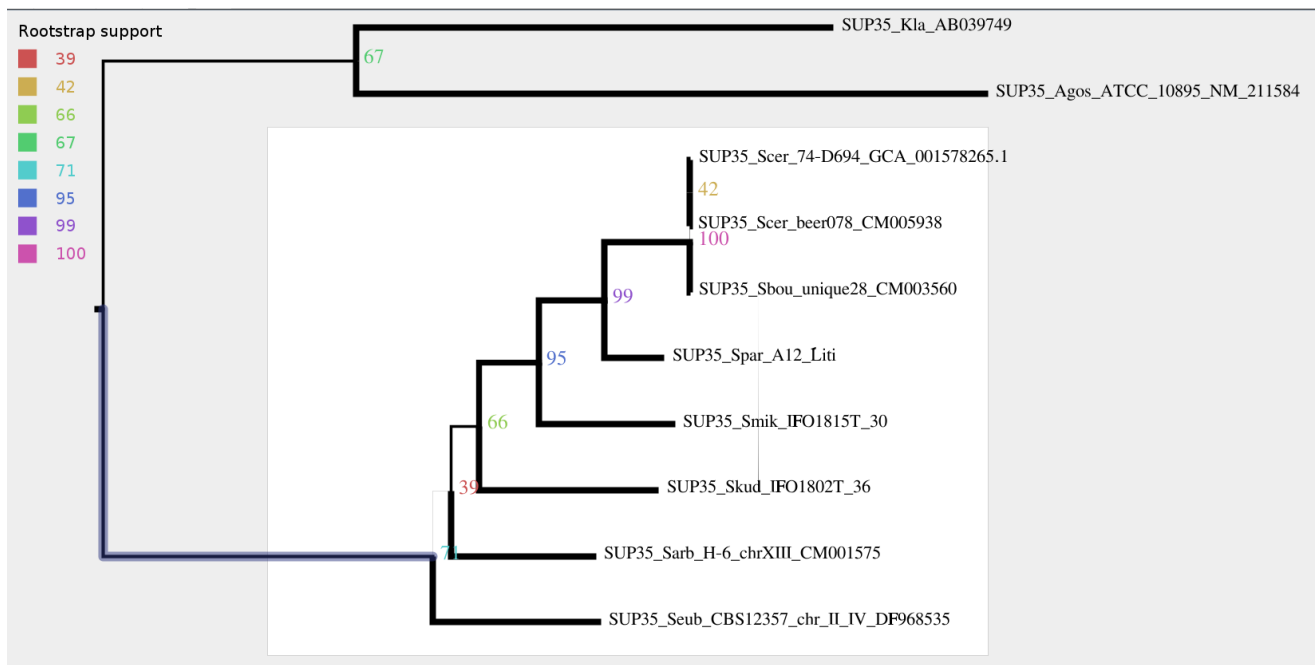
7. Как укоренить дерево с помощью необратимой (non-reversible) модели (iqtree2)?

Можно использовать опцию `-model-joint` со значением 12.12, которая осуществляет (с.81) автоматический подбор параметров необратимой 12-параметрической модели и рутстреп, т.е. сравнение поддержки разных укоренений

```
iqtree2 -s SUP35_aln_prank.trim.fas -m TIM3+F+G4 -pre  
SUP35_TIM3_root_auto --model-joint 12.12 -B 1000
```

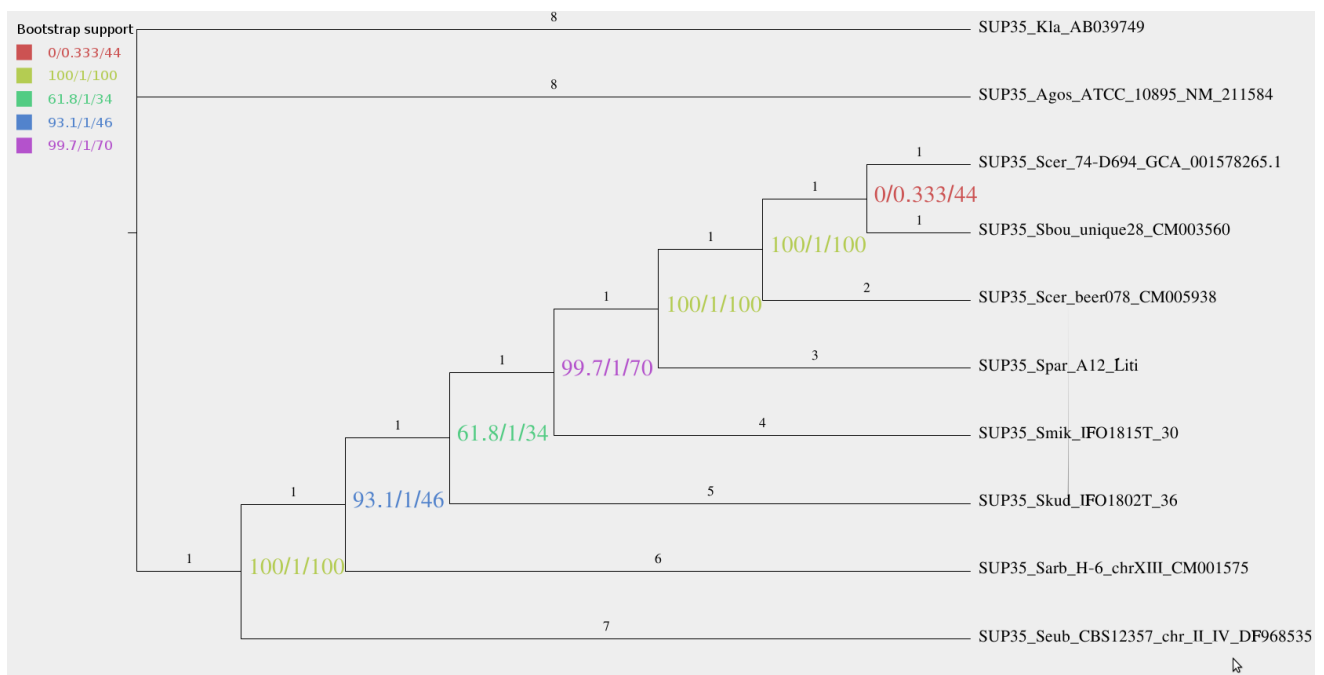


8. Визуализируйте дерево с поддержкой корня (rootstrap).
Что мы можем сказать об уверенности алгоритма в выборе корня?

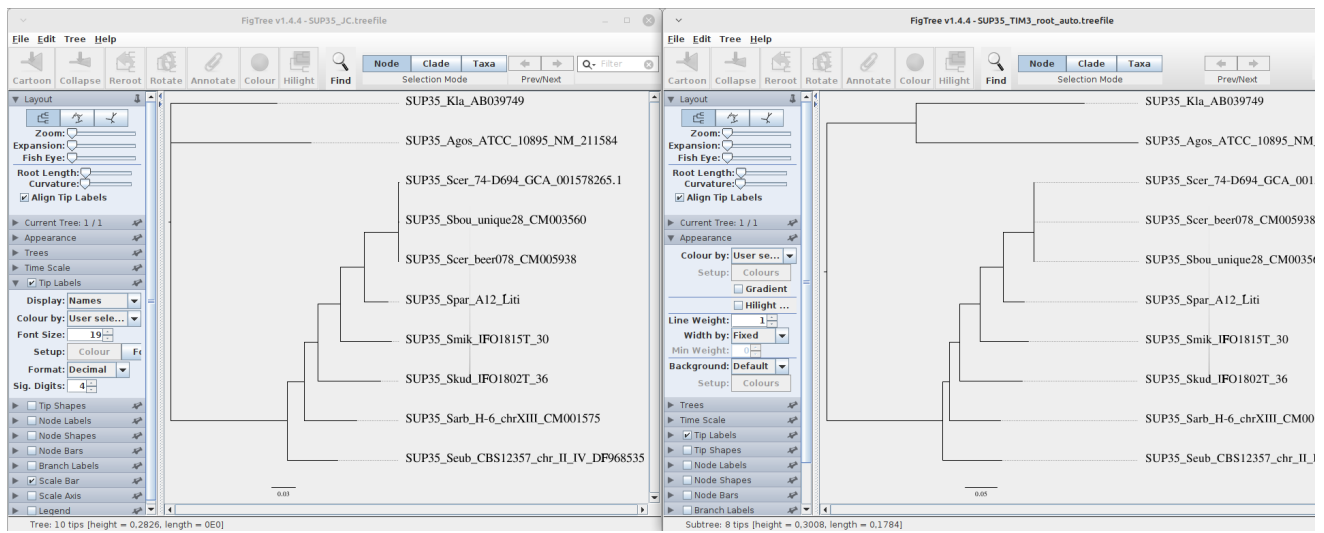


Можем сказать, что алгоритм не очень уверен “(ツ)”

9. Постройте то же самое дерево с использованием заведомо неправильной модели JC+G4 и поддержками.



10. Нарисуйте рядом и сравните деревья, построенные с моделями TIM3+F+G4 и JC (SUP35_JC.treefile и SUP35_TIM3_root_outgroup.treefile). Есть ли в них отличия по длинам ветвей, топологии или поддержке?



Кажется, что единственное отличие в топологии - порядок разделения Scer, Sbou и Spar.