

main

Controla o fluxo de execução e printa a matriz ao final. Quando a matriz fica com somente dois “nodos” não é possível realizar as operações então os nodos são só juntados. Tivemos que multiplicar a matriz por -1 pois na questão estávamos recebendo uma matriz de scores.

```
if __name__ == '__main__':
    global mat
    print ("0 - Digitar matriz\n1 - Utilizar matriz exemplo")
    op = input()
    mat,names = inputF(op)
    mat = mat*-1
    while(len(mat)>2):
        ui = uiCalculation()
        dij = smallestDij(ui)
        v = valueBranch(dij,ui)
        joinTree(names[dij[1]],names[dij[2]],v)
        newMatrix(dij,v)

    joinTree("end",names[1],[0,mat[0][0]])
    print(tree)
```

inputF

Função que retorna a matriz de entrada e nomes dos nodos. Há a opção de receber o input do teclado, ou usar a matriz de exemplo.

```
def inputF(op):  
    mat = []  
    if not op:  
        names = input()  
        names = names.split("\t")  
        print (names)  
        for i in range (len(names)):  
            linha = input()  
            mat[i] = linha.split("\t")  
    else:  
        mat = [[0,1,3,2.8],[1,0,2.8,2.7],[3,2.8,0,0.15],[2.8,2.7,0.15,0]]#exemplo  
        names = ["b", "r", "c", "g"]#exemplo  
    return [mat,names]
```

Step 1 - uiCalculation

Calcula todos u_i , somando todas distancias até um nodo e dividindo pela quantidade de nodos-2.

```
def uiCalculation():  
    tam = len(mat)  
    global ui  
    ui= np.zeros(tam)  
    for x in range(tam):  
        for y in range(tam):  
            ui[x] += mat[x][y]  
            ui[x] = ui[x]/(tam-2)  
    return ui
```

Step 1

u_i calculation

*$u_i = (\text{sum all } D_{ij}) / (n-2)$
where N is the # of Otus
in the set.*

Step 2 - smallestDij

```
def smallestDij(ui):  
    tam = len(mat)  
    x = y = start = 0  
  
    min = [mat[0][1] - ui[0] - ui[1], 0, 1]  
    while (x < tam):  
        start += 1  
        y = start  
        while (y < tam):  
            d = mat[x][y] - ui[x] - ui[y]  
            if (d < min[0]):  
                min = [d, x, y]  
  
            y += 1  
        x += 1  
    return min
```

Calcula a menor distância, usando os ui calculados no passo anterior.

Step 2

*Calculate pair with
smallest value from D.
Use $M_{ij} = D_{ij} - u_i - u_j$*

Step 3 - valueBranch

```
def valueBranch(dij,ui):  
    x = dij[1]  
    y = dij[2]  
    dist = mat[x][y]  
    v = np.zeros(2)  
    v[0] = abs((dist + (ui[x]-ui[y]))/2)  
    v[1] = abs((dist + (ui[y]-ui[x]))/2)  
    return v
```

Calcula o valor de distância de cada branch, usando o menor valor que foi calculado por smallestDij

Step 3

Create a node (ij) that
jpins pair with lowest
Mij such that
 $V_i = Dij/2 + (u_i - u_j)/2$
 $V_j = Dij/2 + (u_j - u_i)/2$

Step 4 -joinTree

Junta os nodos na árvore no formato Newick tree, usando o valores de distância dos branches, conforme os casos descritos com os comentários.

```
def joinTree(x,y,v):
    global tree
    findx = tree.find(x)
    findy = tree.find(y)
    if (x=="end"): #se é o último nodo a ser inserido
        tree = tree[:len(tree)-1]+ "," +y +":0" + ")"
    elif (findx !=-1 and findy!=-1):#se os dois estão na árvore
        tree = tree.replace(x+",",",")
        tree = tree.replace(y+",",",")
        tree = "("+x+","+y+")"+tree
    elif (findx !=-1): #se x está
        tree = tree[0:findx] + "("+ tree[findx:findx+len(x)]+": "+ str(round(v[0],4)) + "," +y +": "+
str(round(v[1],4))+ ")" + tree[findx+len(x):len(tree)]
    elif (findy !=-1): #se y está
        tree = tree[0:findy] + "("+ tree[findx:findy+len(y)]+": "+ str(round(v[1],4)) + "," +x +": "+
str(round(v[0],4))+ ")" + tree[findy+len(x):len(tree)]
    else: #se nenhum está
        tree = "("+ x+": "+ str(round(v[0],4)) + "," + y+": "+ str(round(v[1],4)) + ")"
```

Step 5 - newMatrix

Calcula a nova matriz e atualiza os nomes dos nodos. Para isso, calcula as novas distâncias relativas ao novo nodo e usa parte da matriz antiga.

```
def newMatrix(dij,v):
    global mat
    x = dij[1]
    y = dij[2]
    tam = len(mat)

    #altera os nomes dos nodos
    newName = "(" + names[x]+": "+
str(round(v[0],4))+", "+names[y]+": "+
str(round(v[1],4))+") "
    name1 = names[x]
    name2 = names[y]
    names.remove(name1)
    names.remove(name2)
    names.insert(0,newName)
```

Step 5

Calculate new distance
matrix of all other taxa to U
with
 $DxU = D(ix + Djk - Dij)/2$

```
#calcula as novas distancias
nDist = np.zeros(len(mat))
for i in range (len(mat)):
    nDist[i] = (mat[x][i] +
mat[y][i]-mat[x][y])/2
    nDist = np.delete(nDist, (x,y),0)
    #deleta as colunas/linhas que
    serão descartadas da matrix antiga
    mat = np.delete(mat, (x,y),0)
    mat = np.delete(mat, (x,y),1)
    #calcula a nova matriz, usando
    parte da antiga e as novas
    distancias nDist
    nMat= np.zeros((tam-1,tam-1))
    nMat[1:tam-1,0] = nDist
    nMat[0,1:tam-1] = nDist
    nMat[1:tam-1,1:tam-1] = mat
    mat = nMat
```

Resultado

Resultado com a matriz

	L. braziliensis	T. rangeli	T. cruzi	T. gambiae
L. braziliensis	0.000	0.010	0.300	0.280
T. rangeli	0.010	0.000	0.280	0.270
T. cruzi	0.300	0.280	0.000	0.015
T. gambiae	0.280	0.270	0.015	0.000

((brazilienses:0.0125,rangeli:0.0025):0.27,cruzi:0.015,gambiae:0)