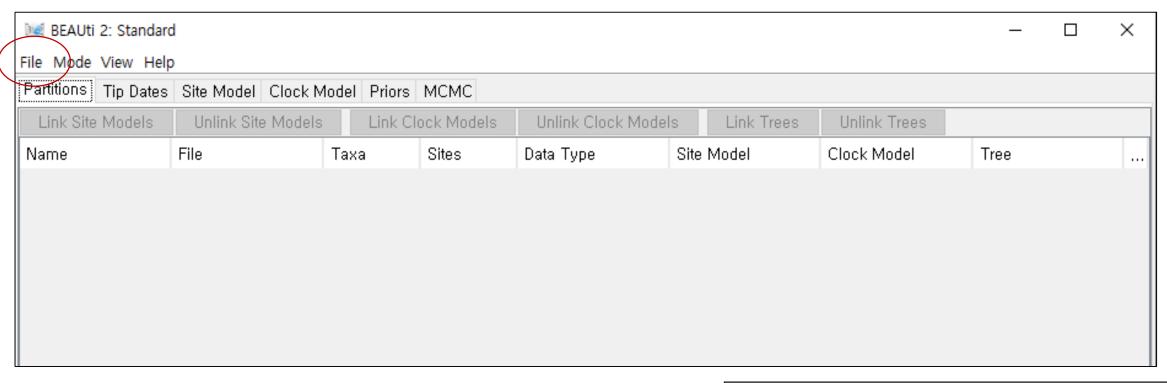
BEAST 프로그램 사용법 초간단 설명

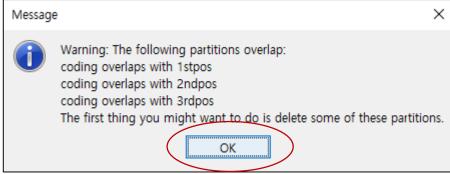
(한국진화학회 2024 겨울학교 자료)

극지연구소 서태건

- 베이지안 분기연대 추정 초간단 실습
- https://taming-the-beast.org/tutorials/Introduction-to-BEAST2/ 의 내용 일부 + α (본 자료에서는 prior가 약간 다르기 때문에 결과가 정확히 일치하지는 않지만 큰 차이는 없음)
- ① BEAUti 프로그램으로 설정파일 만들고, 이를 ②Beast 프로그램으로 읽어 들여 MCMC를 실행함. 결과 파일을 ③Tracer, TreeAnnotator, Densitree, FigTree 프로그램을 이용하여 확인함.

(1) BEAUti를 실행시키고 File/import alignment / 클릭, primate-mtDNA.nex (examples₩nexus 폴더에 있음) 읽어 들인다. 파티션 중복 정의 (후술함)에 따른 경고 메시지는 무시하고 OK 누름





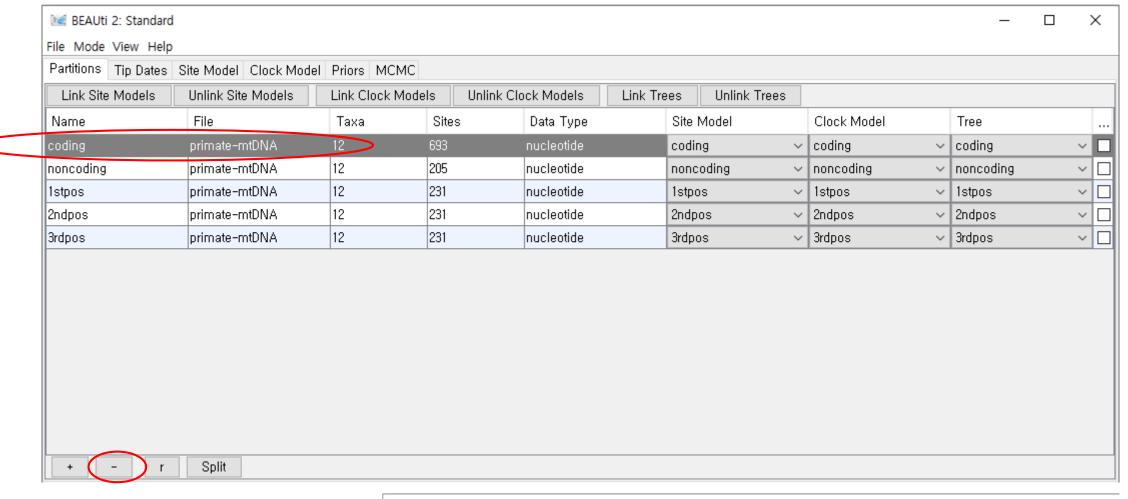
(primate-mtDNA.nex 파일 내부. {begin taxa; end;}, {begin characters; end;} 블록의 정의 방식을 눈여겨 보자. Nexus format에 대한 자세한 사항은 PAUP 프로그램 설명서 참조. http://phylosolutions.com/paup-documentation/paupmanual.pdf)

```
#NEXUS
[!Data from:
            Hayasaka, K., T. Gojobori, and S.
Horai. 1988. Molecular phylogeny
                       and evolution of primate
mitochondrial DNA, Mol. Biol. Evol.
                       5:626-644.
begin taxa;
            dimensions ntax=12;
            taxlabels
Lemur catta
Homo sapiens
Pan
Gorilla
Pongo
Hylobates
Macaca fuscata
M. mulatta
M. fascicularis
M._sylvanus
Saimiri sciureus
Tarsius syrichta
end;
```

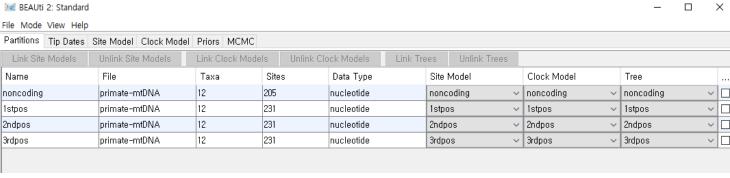
```
begin characters;
      dimensions nchar=898;
      format missing=? gap=- matchchar=. datatype=dna;
      options gapmode=missing;
      matrix
           1234567890123456789012345678901234567.... ]
Lemur catta
           AAGCTTCATAGGAGCAACCATTCTAATAATCGCA...
Homo sapiens
           Pan
Gorilla
           Pongo
Hylobates
           Macaca fuscata
M._mulatta
           M._fascicularis
           .....TCC..T....T..C..T...G.T...C...
M. sylvanus
Saimiri sciureus
           ...T....T.....C....C...T....T..C...
Tarsius syrichta
end;
```

(primate-mtDNA.nex 파일 내부. {begin assumptions; end;} 블록에서 데이터 파티션을 정의함. coding 파티션과 1stpos, 2ndpos, 3rdpos파티션이 중복되어 있기때문에 파일 읽어 들일때 경고 발생(뒤에서 해결할 예정)

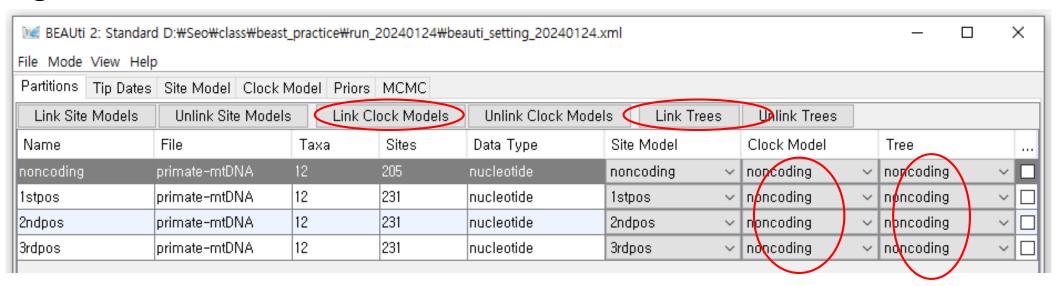
```
begin assumptions;
      charset coding = 2-457 660-896;
      charset noncoding = 1 458-659 897-898;
      charset 1stpos = 2-457\3 660-896\3;
      charset 2ndpos = 3-457\3 661-896\3;
      charset 3rdpos = 4-457\3 662-.\3;
      exset coding = noncoding;
      exset noncoding = coding;
(생략)
end;
#
      taxset hominoids = Homo_sapiens Pan Gorilla Pongo Hylobates;
```



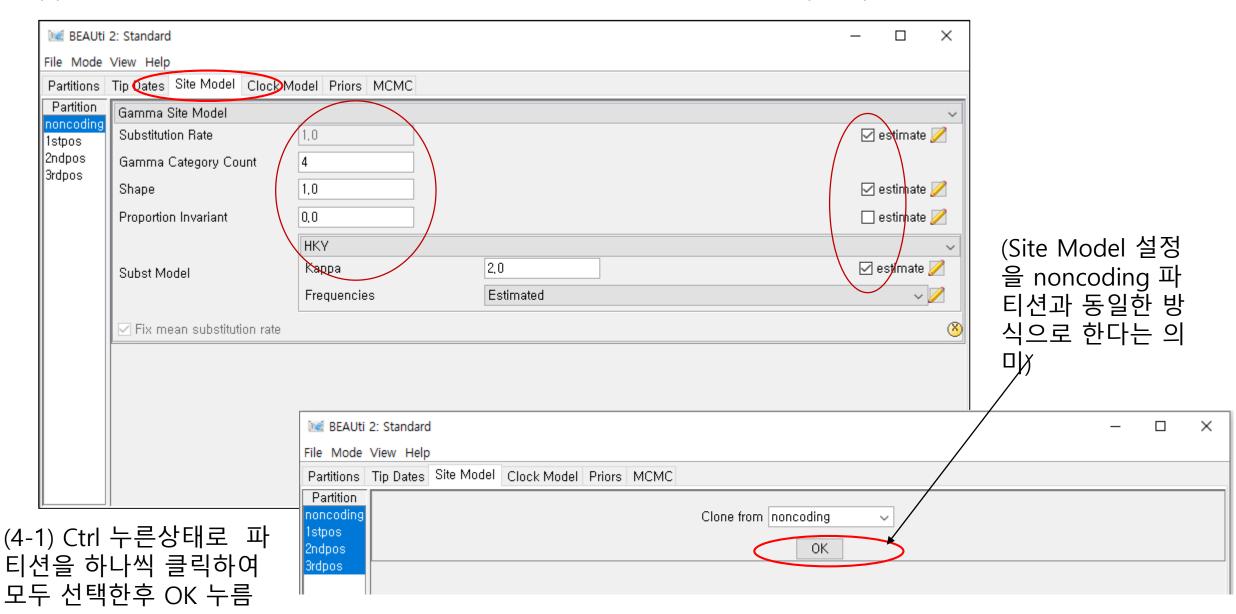
(2) 첫째 행을 클릭하고 하단의 '-' 버튼을 눌러 삭제한다. 이로써 파 티션 중복 문제 해결.



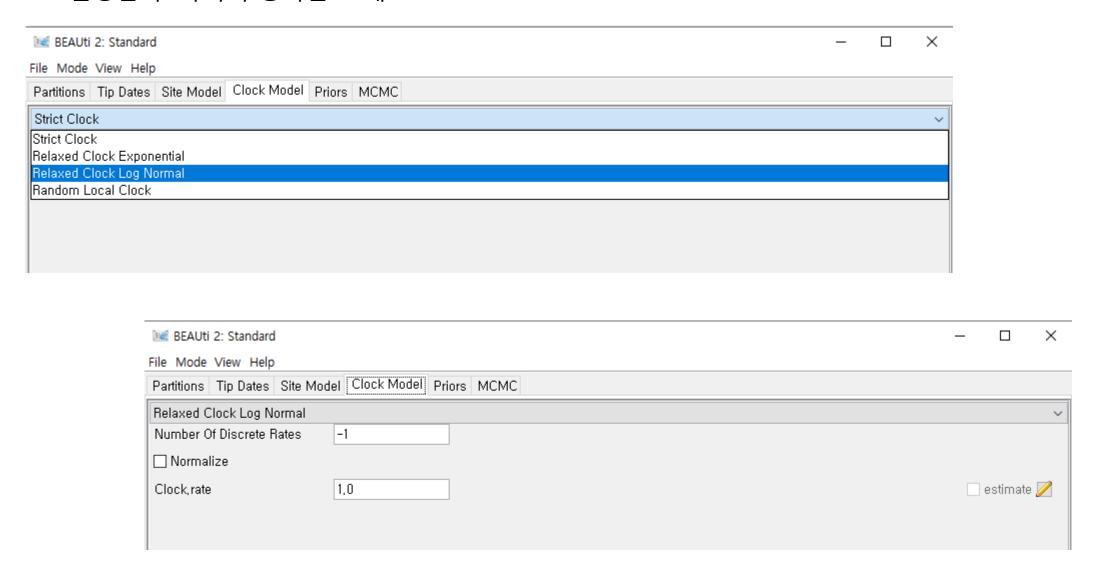
(3) 상단의 Link Clock Models, Link Trees 탭을 클릭하여 동일하게 세팅. 클릭하면 자동으로 세팅되어야 하나 안되는 경우도 많아(프로그램 버그인듯) 자동으로 설정되지 않으면 수동으로 설정.



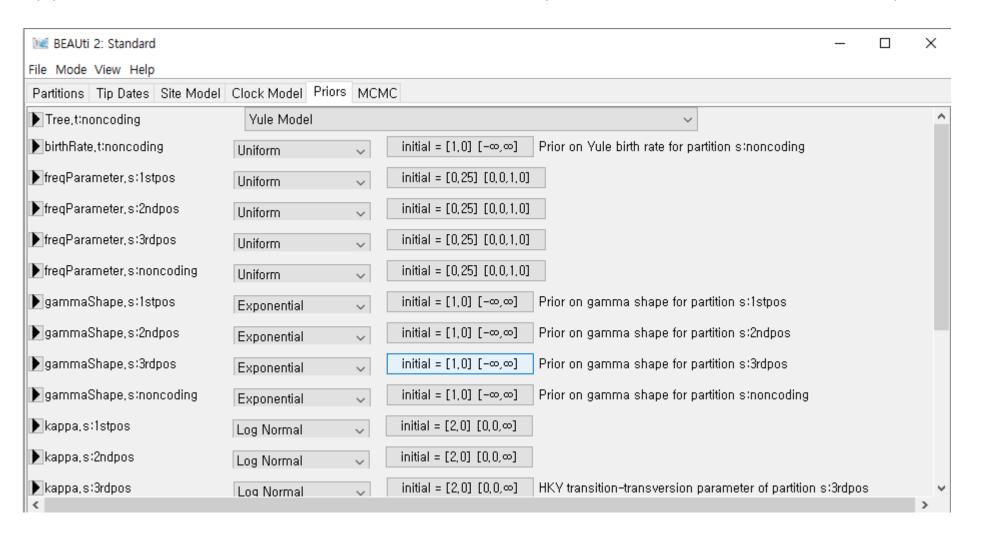
(4) 각 파티션 별로 Site Model 설정. DNA 치환 모형에 관해서는 서태건(2022) 참조.

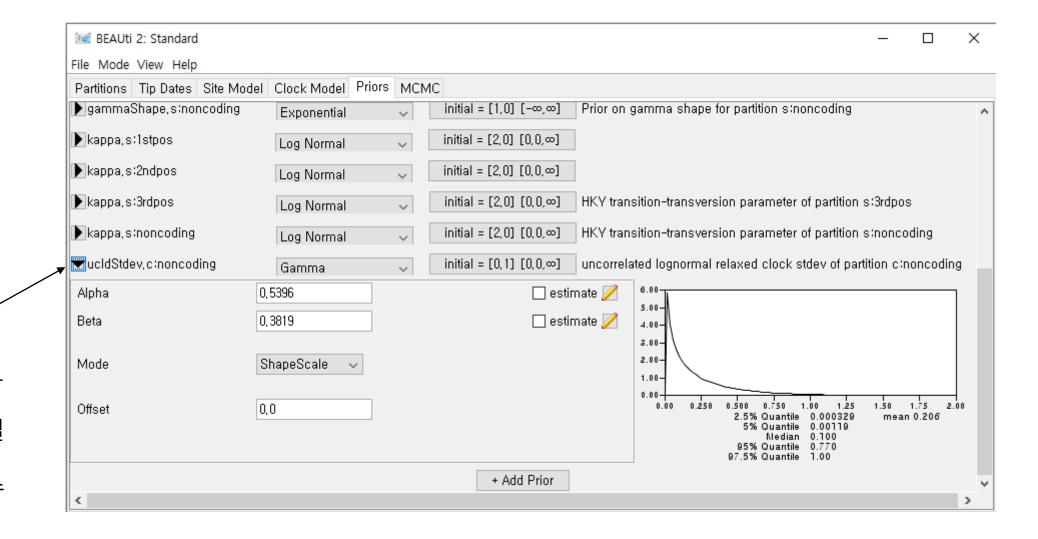


(5) Clock Model 탭을 클릭하여 진화속도 변화 모형을 설정한다. 일단은 Relaxed Clock LogNormal 로 설정한다. 나머지 항목은 그대로.



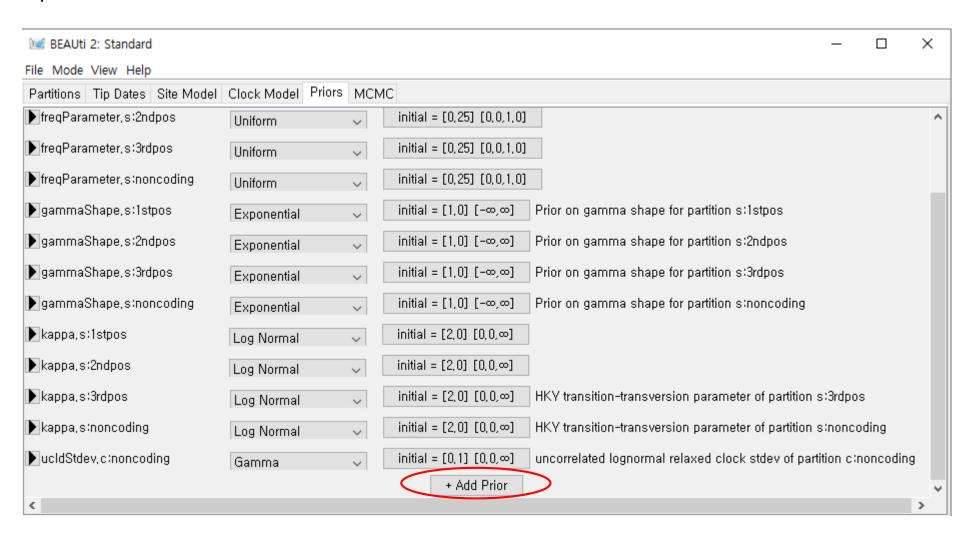
(6) Priors 탭을 눌러 각종 사전분포를 설정한다 (잘 모르면 디폴트 설정에 맡긴다)



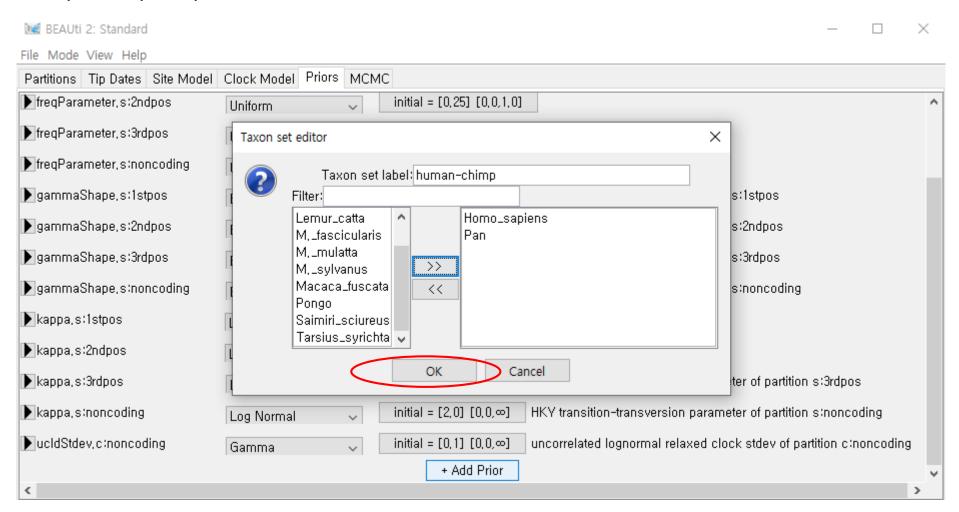


(화살표를 누르면 사전분포에 대한 자세한 설명 및 그래프형태까지 볼 수있다)

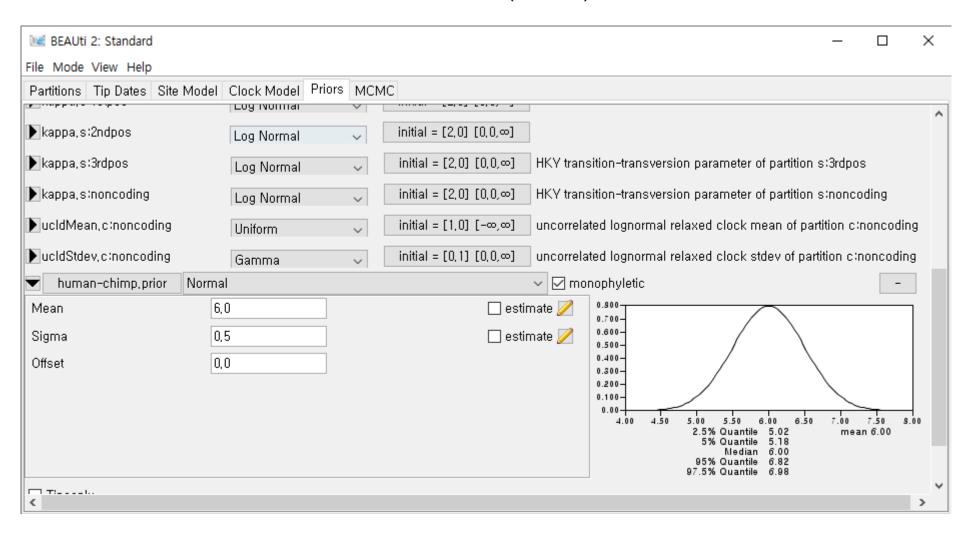
(7) 하단의 『+Add Prior』를 눌러 Human-Chimp 사이의 Time calibration 정보를 입력한다.

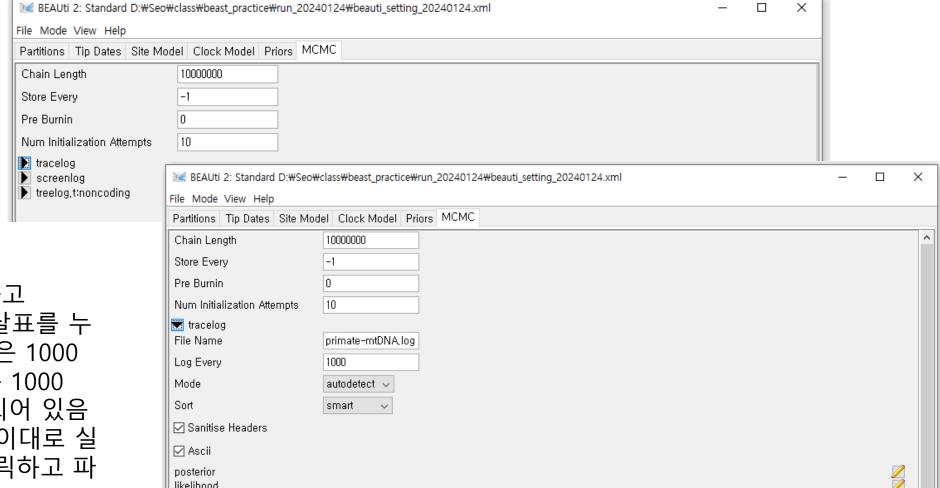


(7 계속) Human, Chimp 공동조상 노드 이름을 적당히 지정하고 해당 taxa들을 선택한다. OK 누른다.



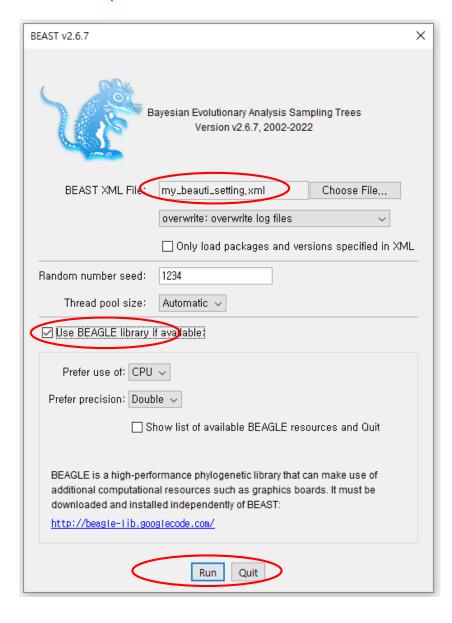
(7 계속) Human-Chimp 노드의 시간에 대한 사전 분포를 입력한다. 일단은 Normal 분포로, 시간은 6.0 ± 0.5 MYA(Million Years Ago)로 설정한다. 우측의 그래프를 보면 이렇게 설정해도 분포의 꼬리가 현재시점 (time 0)에 닿지 않음을 알 수 있다.



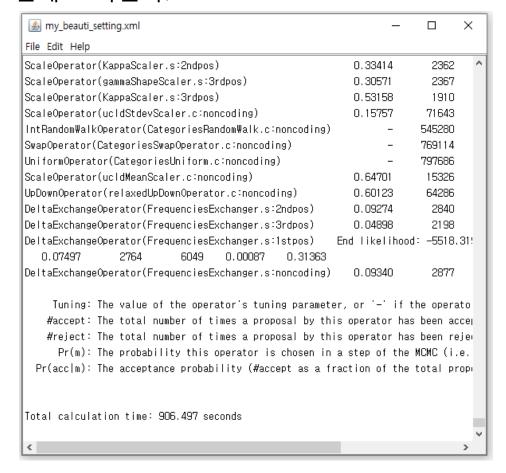


(8) MCMC 탭을 클릭하고 tracelog 앞에 있는 화살표를 누른다. Total generation은 1000만, sampling interval은 1000generation으로 설정되어 있음을 알 수 있다. 일단은 이대로 실행한다. File/Save를 클릭하고 파일 이름을 적당히 (my_beauty_setting.xml) 지정하고 저장한다.

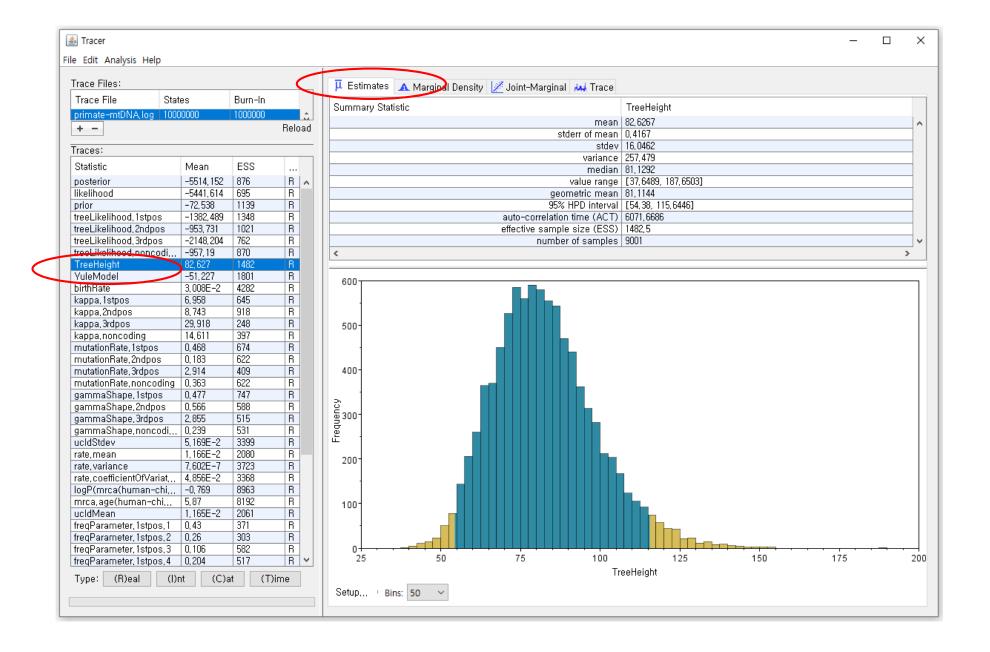
주의: (9)를 실행하기 전에 반드시 BEAUti 프로그램을 종료(파일을 저장하느냐 다시 물어 옴)하여 *.xml 파일을 저장한다 (단순히 save 버튼만으로는 저장이 잘 안되는 경우가 있음)



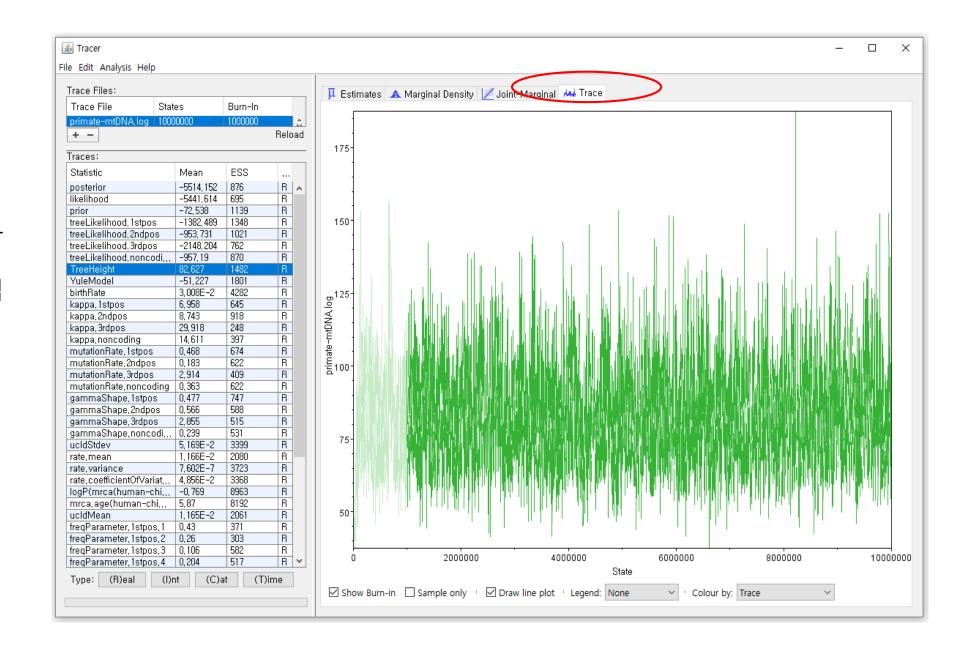
(9) Beast.exe를 실행하고 생성된 *.xml 파일을 선택한 후 좌측과 같이 설정하고 Run 누른다. MCMC 실행이 종료되면 아래와 같은 내용이 화 면에 표시된다.



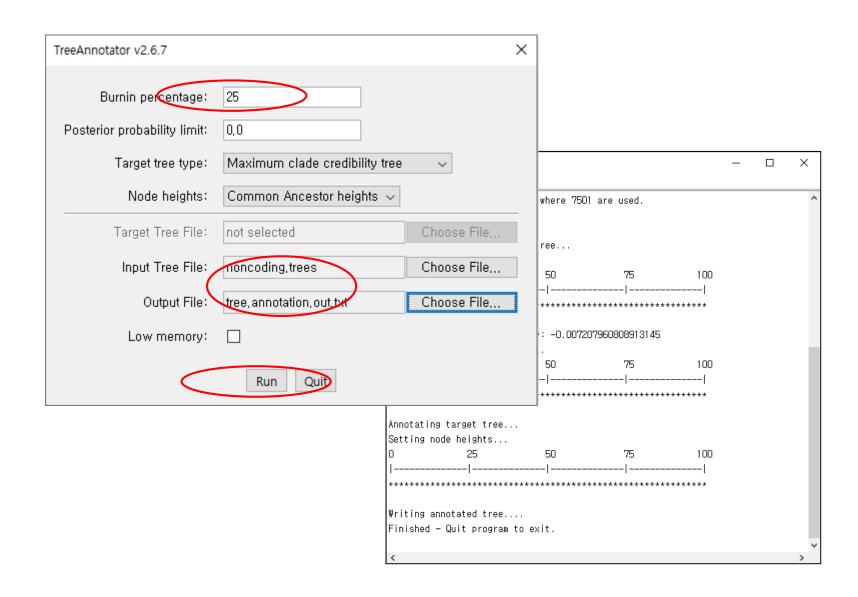
(10) Tracer 프로그 램 실행하여 primate-mtDNA.log 파일 읽어들인다 (File/Import Trace File에서 선택). TreeHeight는 공동 조상의 분기연대를 의미한다 (MYA).



(10 계속)
Trace 탭을 눌러 posterior sample의 궤적을 보면 랜덤하게 보임. ESS도충분히 커 보임



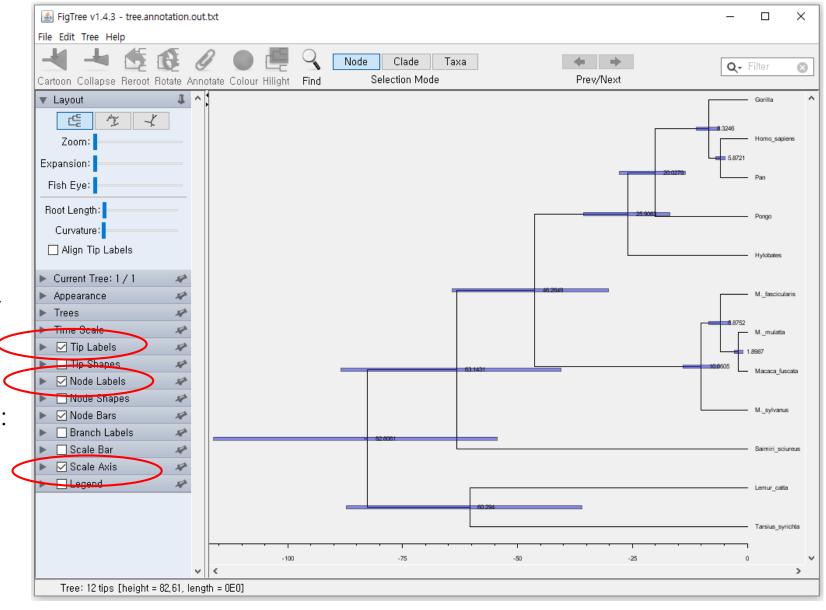
(11) TreeAnnotator (BEAST 프로그램 폴더에 있음)를 실행하고 인풋으 로 noncoding.trees 파일 을, 아웃풋으로 적당한 이 름(tree.annotation.out.txt) 을 지정하고 Run 누른다.



(12) TreeAnnotator 실행 결과로 생성된 파일 (tree.annotation.out.txt) 을 FigTree로 읽어들인다 (File/Open 으로 선택).

*** 분기연대 사후분포의 95% CI (credibility interval) 를 보는 방법 ***

- (a) Tip Labels 체크 (폰트사이 즈 조절 가능)
- (b) Node Labels 체크/Display : height 선택
- (c) Node Bars 체크/Display: Height_95%_HPD 선택
- (d) Scale Axis 체크/Reverse axis : 체크



(13) DensiTree (BEAST 프로그램 폴더에 있음) 를 실행하고 noncoding.trees 파일 읽어 들인다(File/Load 에서 선택).

우하 'Burn In' 클릭 25% 설정; 'Grid' 클릭 Full grid 선택;

