Rencontres ALPHY-GTGC Montpellier 27/01/2009

Reconstruction de réseaux phylogénétiques à structure arborée depuis un ensemble de clusters

Daniel Huson, Regula Rupp, Vincent Berry, **Philippe Gambette**, Christophe Paul









Plan

- Les réseaux phylogénétiques à structure arborée
- Reconstruction depuis des clusters
- Une approche en deux étapes
- L'ensemble minimum de conflits
- L'attachement minimum
- L'implémentation dans Dendroscope

Plan

- Les réseaux phylogénétiques à structure arborée
- Reconstruction depuis des clusters
- Une approche en deux étapes
- L'ensemble minimum de conflits
- L'attachement minimum
- L'implémentation dans Dendroscope

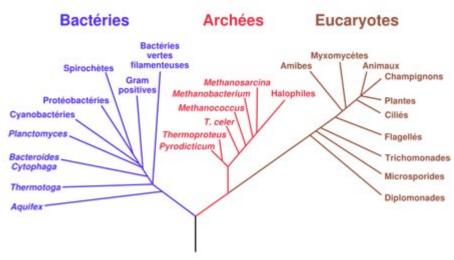
Les arbres phylogénétiques

Arbre phylogénétique



Un arbre phylogénétique est un arbre schématique qui montre les relations de parentés entre des entités supposées avoir un ancêtre commun.

Arbre phylogénétique de la vie



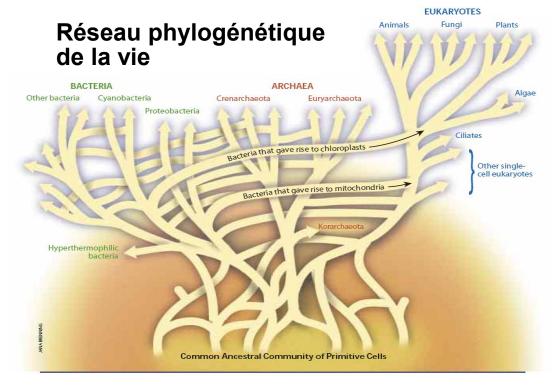
D'après Woese, Kandler, Wheelis: Towards a natural system of organisms: proposal for the domains Archaea, Bacteria, and Eucarya, Proceedings of the National Academy of Sciences, 87(12), 4576–4579 (1990)

Les réseaux phylogénétiques

Réseau phylogénétique



Un réseau phylogénétique désigne un graphe utilisé pour visualiser les relations liées à l'évolution entre des espèces ou des organismes. Il doit être employé quand interviennent des événements d'hybridations, de transferts horizontaux de gènes, ou de recombinaisons génétiques.



Doolittle: Uprooting the Tree of Life, Scientific American (Fév. 2000)

Les réseaux phylogénétiques

Réseau phylogénétique

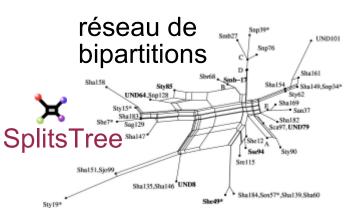


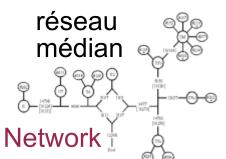
Un réseau phylogénétique désigne un graphe utilisé pour visualiser les relations liées à l'évolution entre des espèces ou des organismes. Il doit être employé quand interviennent des événements d'hybridations, de transferts horizontaux de gènes, ou de recombinaisons génétiques.

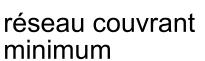


diagramme de synthèse



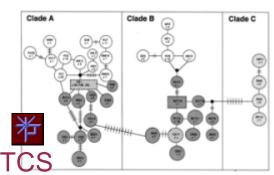






T-Rex

réticulogramme



Les réseaux phylogénétiques

Réseau phylogénétique



Un réseau phylogénétique désigne un graphe utilisé pour visualiser les relations liées à l'évolution entre des espèces ou des organismes. Il doit être employé quand interviennent des événements d'hybridations, de transferts horizontaux de gènes, ou de recombinaisons génétiques.



diagramme

réseau de bipartitions

Shal58

Shal58

Shal58

Shal58

Shal54

Shal61

Shal61

Shal69

Shal79

Shal79

Shal81

Shal79

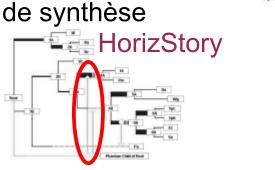
Shal81

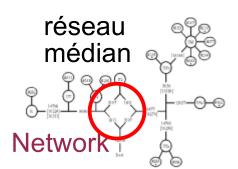
Shal84

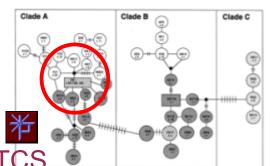


T-Rex

réticulogramme







Réseaux abstraits ou explicites

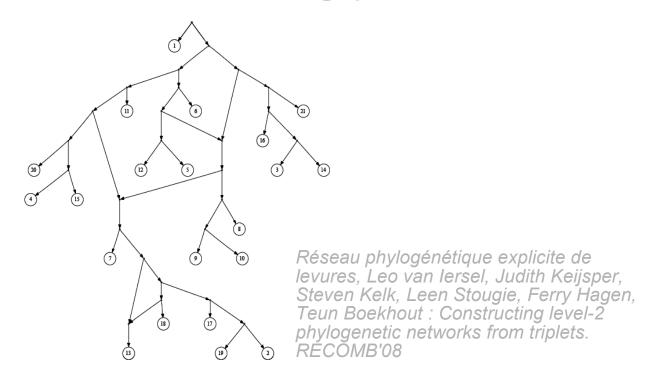
Un réseau phylogénétique explicite est un réseau phylogénétique dont tous les noeuds correspondent à des événements biologiques précis.

Un réseau phylogénétique abstrait reflète des signaux phylogénétiques sans nécessairement représenter explicitement des événements biologiques.

Réseaux abstraits ou explicites

Un réseau phylogénétique explicite est un réseau phylogénétique dont tous les noeuds correspondent à des événements biologiques précis.

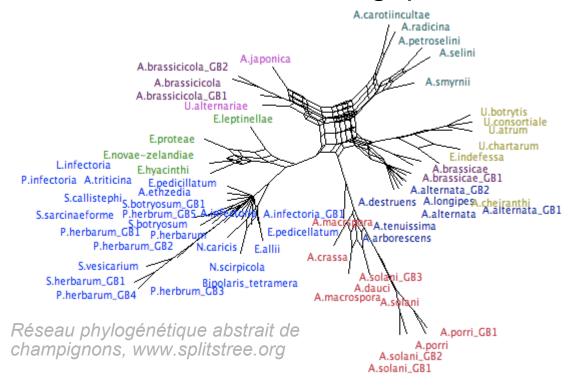
Un réseau phylogénétique abstrait reflète des signaux phylogénétiques sans nécessairement représenter explicitement des événements biologiques.



Réseaux abstraits ou explicites

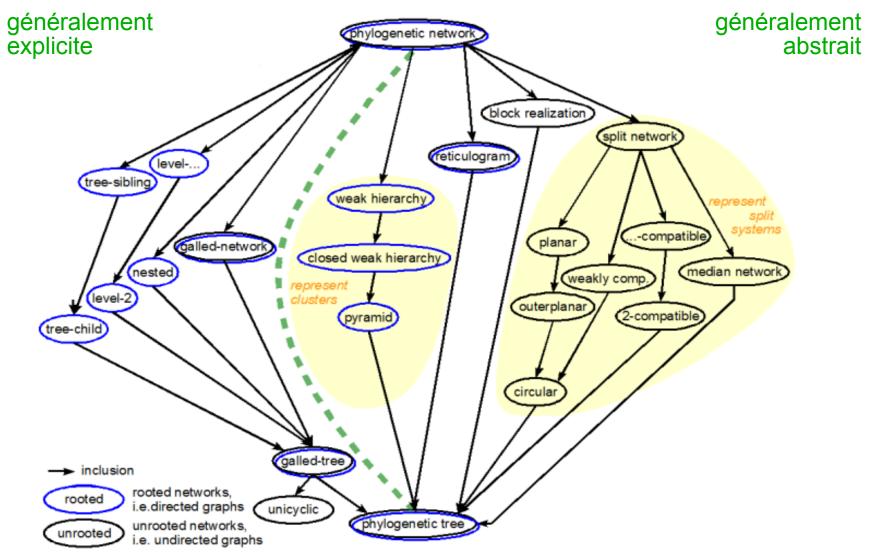
Un réseau phylogénétique explicite est un réseau phylogénétique dont tous les noeuds correspondent à des événements biologiques précis.

Un réseau phylogénétique abstrait reflète des signaux phylogénétiques sans nécessairement représenter explicitement des événements biologiques.

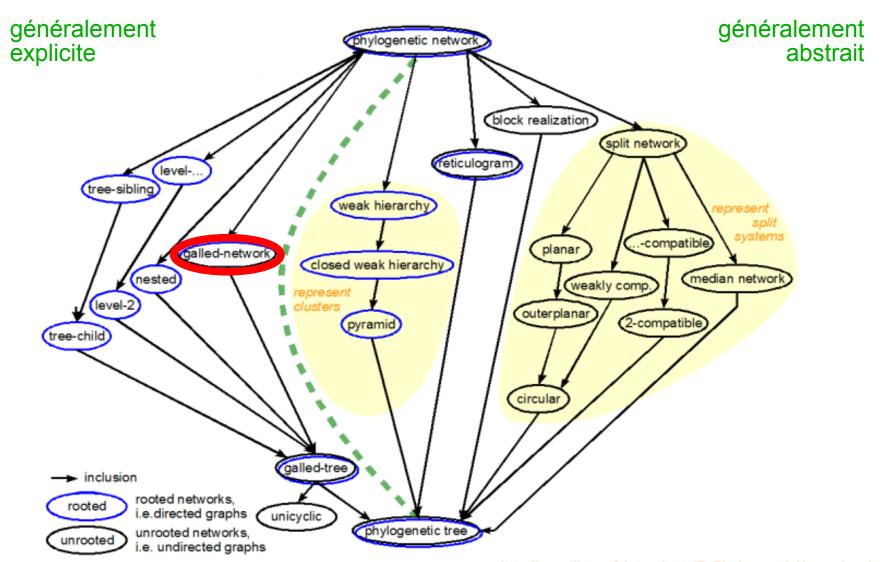


Hiérarchie de sous-classes de réseaux

Des restrictions pour obtenir des algorithmes efficaces :

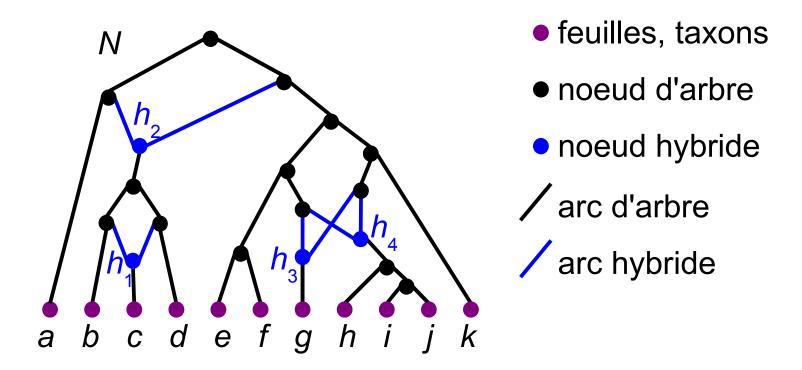


réseau à structure arborée = galled network



Définition d'un réseau à structure arborée "galled network" :

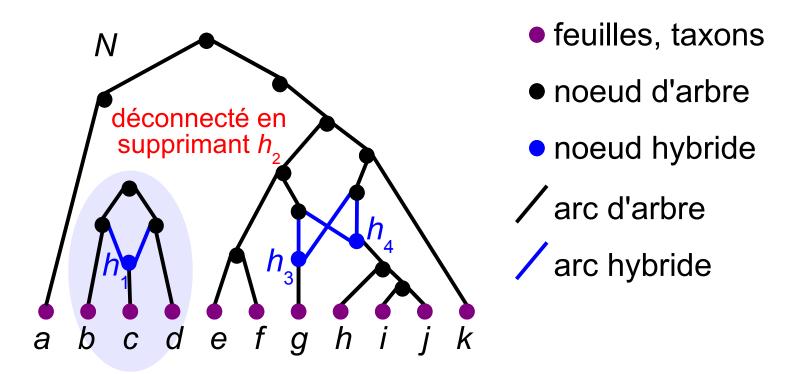
réseau phylogénétique tel que pour tout noeud hybride, sa suppression déconnecte le graphe.



Réseau enraciné : arcs orientés vers le bas

Définition d'un réseau à structure arborée "galled network" :

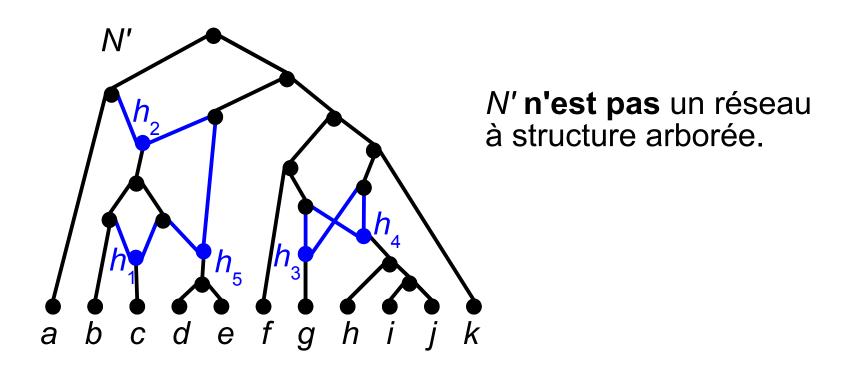
réseau phylogénétique tel que pour tout noeud hybride, sa suppression déconnecte le graphe.



Réseau enraciné : arcs orientés vers le bas

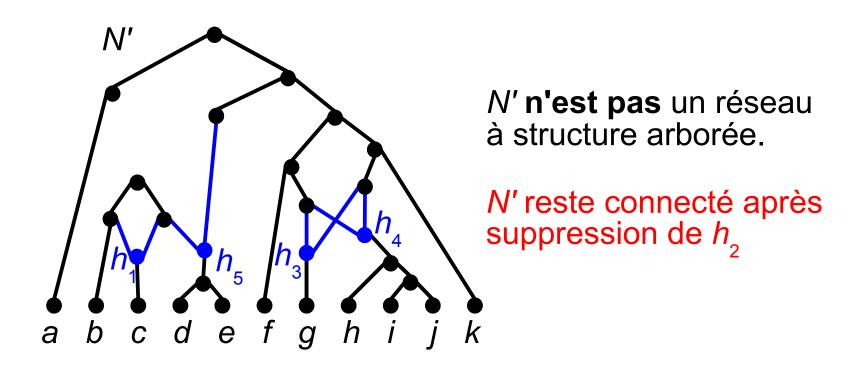
Définition d'un réseau à structure arborée "galled network" :

réseau phylogénétique tel que pour tout noeud hybride, sa suppression déconnecte le graphe.



Définition d'un réseau à structure arborée "galled network" :

réseau phylogénétique tel que pour tout noeud hybride, sa suppression déconnecte le graphe.



Plan

- Les réseaux phylogénétiques à structure arborée
- Reconstruction depuis des clusters
- Une approche en deux étapes
- L'ensemble minimum de conflits
- L'attachement minimum
- L'implémentation dans Dendroscope

Problème:

Reconstruire le **super-réseau** d'un ensemble d'arbres avec le **minimum de réticulations** est

difficile.

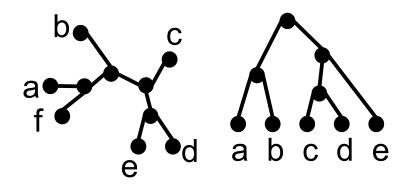
Bordewich & Semple, DAM, 2007

Idée:

reconstuire un réseau contenant tous les :

triplets quadruplets clusters splits

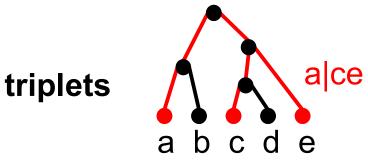
des arbres en entrée ?



Motivation algorithmique

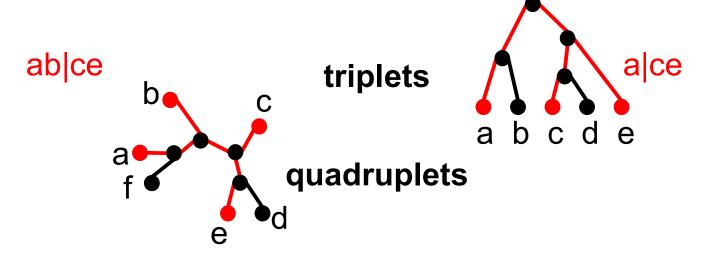
Idée:

reconstuire un réseau contenant tous les :



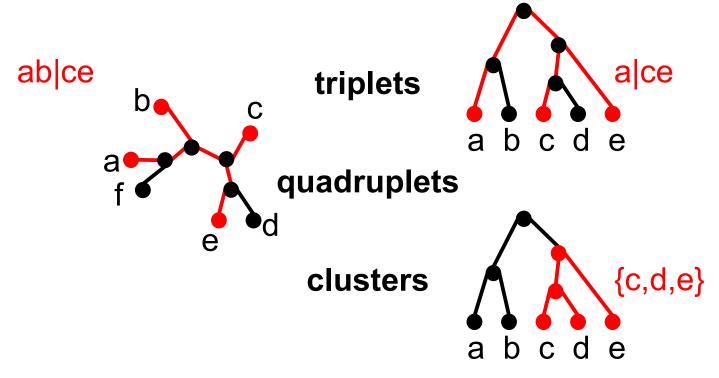
Idée:

reconstuire un réseau contenant tous les :

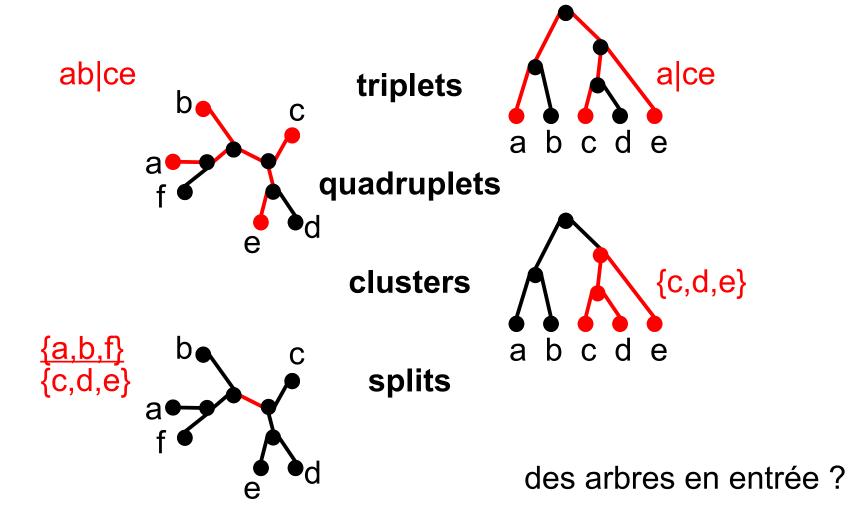


Idée:

reconstuire un réseau contenant tous les :



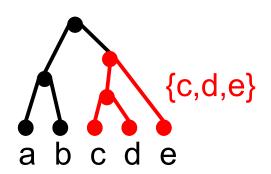
Idée: reconstuire un réseau contenant tous les:



Idée:

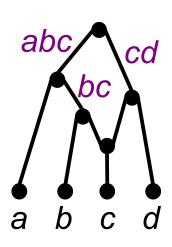
reconstuire un réseau contenant tous les





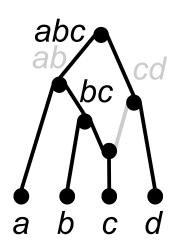
X cluster **pleinement compatible** avec N (**hardwired**) si X est l'ensemble des feuilles sous un noeud de N.

X cluster **souplement compatible** avec N (**softwired**) s'il existe un arbre T dans N sur les taxons L tel que X est l'ensemble des feuilles sous un noeud de T.



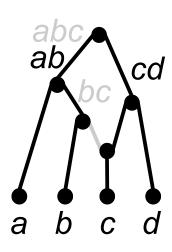
X cluster pleinement compatible avec N (hardwired) si X est l'ensemble des feuilles sous un noeud de N.

X cluster **souplement compatible** avec N (**softwired**) s'il existe un arbre T dans N sur les taxons L tel que X est l'ensemble des feuilles sous un noeud de T.



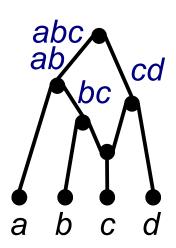
X cluster pleinement compatible avec N (hardwired) si X est l'ensemble des feuilles sous un noeud de N.

X cluster **souplement compatible** avec N (**softwired**) s'il existe un arbre T dans N sur les taxons L tel que X est l'ensemble des feuilles sous un noeud de T.



X cluster pleinement compatible avec N (hardwired) si X est l'ensemble des feuilles sous un noeud de N.

X cluster **souplement compatible** avec N (**softwired**) s'il existe un arbre T dans N sur les taxons L tel que X est l'ensemble des feuilles sous un noeud de T.

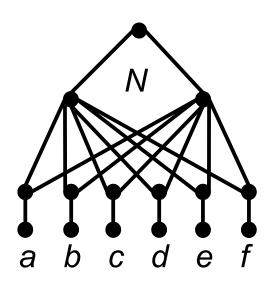


L'ensemble C(N) de tous les clusters souplement compatibles avec N peut être de taille exponentielle. Test de compatibilité souple **NP-complet.**

Clusters et réseaux à structure arborée

Test de compatibilité souple **polynomial** sur les réseaux à structure arborée.

Pour tout ensemble *C* de clusters, il existe un **réseau à structure arborée compatible** avec *C*.

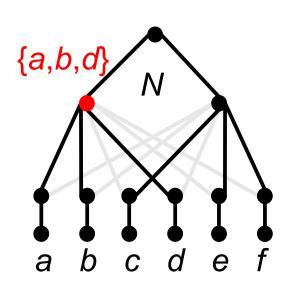


Le réseau à structure arborée *N* est compatible avec tout cluster sur {*a*,*b*,*c*,*d*,*e*,*f*}.

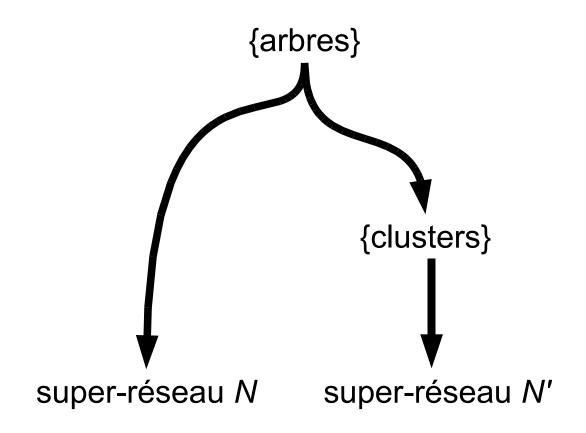
Clusters et réseaux à structure arborée

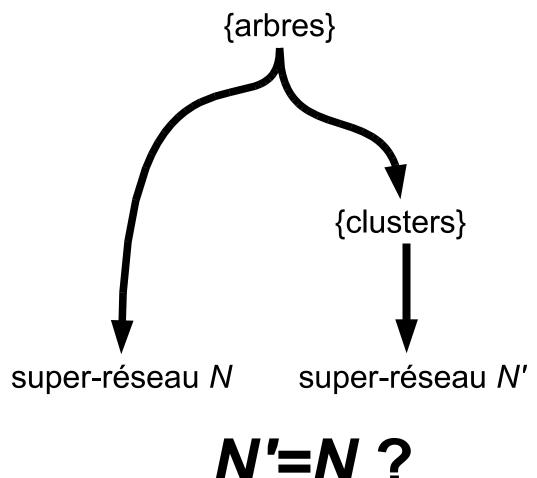
Test de compatibilité souple **polynomial** sur les réseaux à structure arborée.

Pour tout ensemble *C* de clusters, il existe un **réseau à structure arborée compatible** avec *C*.

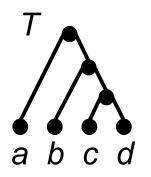


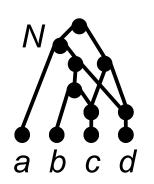
Le réseau à structure arborée *N* est compatible avec tout cluster sur {*a*,*b*,*c*,*d*,*e*,*f*}.





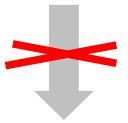
Un réseau *N* compatible avec tous les clusters d'un arbre *T* n'est pas forcément compatible avec *T*.



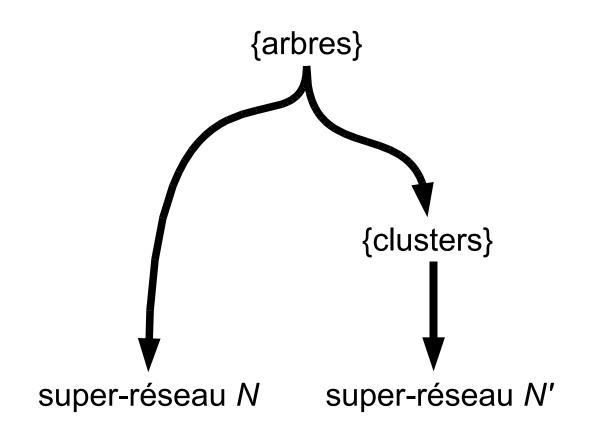


pleinement/souplement compatible avec {abcd,bcd,cd,a,b,c,d} mais pas avec T

compatible avec les clusters d'un arbre T



compatible avec T.



N plus complexe que N'

Plan

- Les réseaux phylogénétiques à structure arborée
- Reconstruction depuis des clusters
- Une approche en deux étapes
- L'ensemble minimum de réticulations
- L'attachement minimum
- L'implémentation dans Dendroscope

Une approche en deux étapes

- 1- Trouver un **ensemble minimum de conflits** parmi les clusters :
- partie sans conflits arbre,
- taxons impliqués dans des conflits sous les réticulations.

MAXIMUM COMPATIBLE SUBSET

2- Attacher les taxons impliqués dans des conflits à l'arbre avec un **nombre minimal d'arcs**.

MINIMUM ATTACHMENT PROBLEM

Une approche en deux étapes

- 1- Trouver un **ensemble minimum de conflits** parmi les clusters :
- partie sans conflits arbre,
- taxons impliqués dans des conflits sous les réticulations.

MAXIMUM COMPATIBLE SUBSET

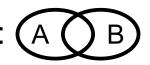
2- Attacher les taxons impliqués dans des conflits à l'arbre avec un **nombre minimal d'arcs**.

MINIMUM ATTACHMENT PROBLEM

Plan

- Les réseaux phylogénétiques à structure arborée
- Reconstruction depuis des clusters
- Une approche en deux étapes
- L'ensemble minimum de conflits
- L'attachement minimum
- L'implémentation dans Dendroscope

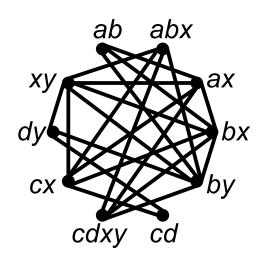
Clusters incompatibles si ni inclus ni disjoints : (



Graphe d'incompatibilité d'un ensemble de clusters :

- un cluster par sommet,
- une arête entre deux clusters incompatibles.

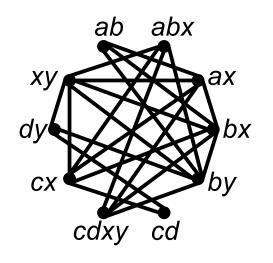
Exemple: $\{\{a,b\},\{a,b,x\},\{a,x\},\{b,x\},\{b,y\},\{c,d\},\{c,d,x,y\},\{c,x\},\{d,y\},\{x,y\}\}\}$



Problème :

pour chaque composante connexe du graphe, enlever le nombre minimum de taxons pour supprimer toutes les arêtes.

Exemple: $\{\{a,b\},\{a,b,x\},\{a,x\},\{b,x\},\{b,y\},\{c,d\},\{c,d,x,y\},\{c,x\},\{d,y\},\{x,y\}\}\}$



Problème:

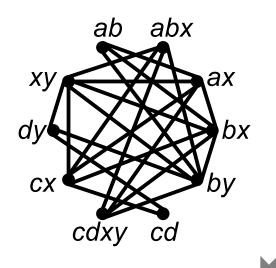
pour chaque composante connexe du graphe, enlever un nombre minimum de taxons pour supprimer toutes les arêtes.

Déclaration d'incompatibilités :(A\B,A∩B,B\A)
A B

pour tous clusters A et B incompatibles

```
({b},{a},{x}) ({x},{b},{y})
({a},{b},{x}) ({b},{x},{c,d,y})
({a},{b},{y}) ({b},{x},{c})
({a,x},{b},{y}) ({b},{x},{y})
({a,b},{x},{c,d,y}) ({b},{y},{c,d,x})
({a,b},{x},{c}) ({b},{y},{d})
({a,b},{x},{y}) ({b},{y},{x})
({a,b},{x},{y}) ({b},{y},{x})
({a,b},{x},{y}) ({b},{y},{x})
({a,b},{x},{y}) ({c},{x})
({a},{x},{b}) ({c},{x})
({a},{x},{c,d,y}) ({c},{d},{y})
({a},{x},{y}) ({d},{y},{x})
({a},{x},{y}) ({d},{y},{x})
```

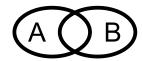
Exemple: $\{\{a,b\},\{a,b,x\},\{a,x\},\{b,x\},\{b,y\},\{c,d\},\{c,d,x,y\},\{c,x\},\{d,y\},\{x,y\}\}\}$



Problème:

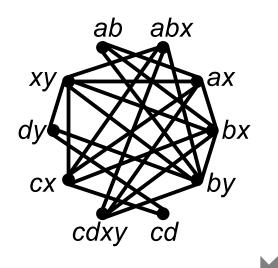
pour chaque composante connexe du graphe, enlever un nombre minimum de taxons pour supprimer toutes les arêtes.

Choisir un nombre minimum de taxons pour supprimer un élément dans chaque déclaration d'incompatibilité



({b},{a},{x})	({x},{b},{y})
({a},{b},{x})	({b},{x},{c,d,y})
({a},{b},{y})	({b},{x},{c})
({a,x},{b},{y})	({b},{x},{y})
({a,b},{x},{c,d,y})	({b},{y},{c,d,x})
({a,b},{x},{c})	({b},{y},{d})
({a,b},{x},{y})	({b},{y},{x})
({a},{x},{b})	({d},{c},{x})
({a},{x},{c,d,y})	({c},{d},{y})
({a},{x},{c})	({c},{x},{y})
({a},{x},{y})	({d},{y},{x})

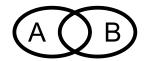
Exemple: $\{\{a,b\},\{a,b,x\},\{a,x\},\{b,x\},\{b,y\},\{c,d\},\{c,d,x,y\},\{c,x\},\{d,y\},\{x,y\}\}\}$



Problème:

pour chaque composante connexe du graphe, enlever un nombre minimum de taxons pour supprimer toutes les arêtes.

Choisir un nombre minimum de taxons (x et y) pour supprimer un élément dans chaque déclaration d'incompatibilité



({b},{a},{ x })	$(\{x\},\{b\},\{y\})$
$({a},{b},{x})$	$(\{b\},\{x\},\{c,d,y\})$
({a},{b},{ <mark>y</mark> })	$(\{b\},\{x\},\{c\})$
({a,x},{b},{ <mark>y</mark> })	$(\{b\},\{x\},\{y\})$
$({a,b},{x},{c,d,y})$	$({b},{y},{c,d,x})$
({a,b},{ <mark>x</mark> },{c})	({b},{ <mark>y</mark> },{d})
({a,b},{ <mark>x</mark> },{y})	$(\{b\},\{y\},\{x\})$
$({a},{x},{b})$	$({d},{c},{x})$
({a},{ <mark>x</mark> },{c,d,y})	({c},{d},{ y })
({a},{ x },{c})	$(\{c\},\{x\},\{y\})$
({a},{ <mark>x</mark> },{y})	$({d},{y},{x})$

Problème :

enlever un nombre minimum *k* de taxons pour supprimer toutes les incompatibilités pour un ensemble *H* de déclarations d'incompatibilité.

NP-complet dans le cas général

Steel & Hamel, AML, 1996

NP-complet sur un graphe connexe, sans taxons "jumeaux" réduction depuis le cas général

Algorithme FPT en $O(3^k k |H|)$ sur un graphe connexe, sans taxons "jumeaux"

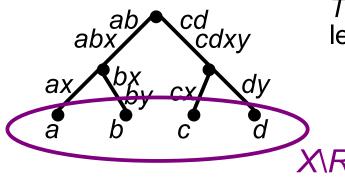
algorithme incrémental basé sur le choix du candidat de taille minimale qui résout le plus d'incompatibilités pour tenter de lui faire résoudre l'incompatibilité suivante (implémenté dans Dendroscope 2).

Plan

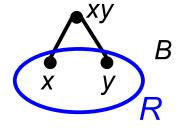
- Les réseaux phylogénétiques à structure arborée
- Reconstruction depuis des clusters
- Une approche en deux étapes
- L'ensemble minimum de conflits
- L'attachement minimum
- L'implémentation dans Dendroscope

Etape précédente :

ensemble minimum de taxons R tels que les clusters sur $X \setminus R$ sont compatibles (avec un arbre T).



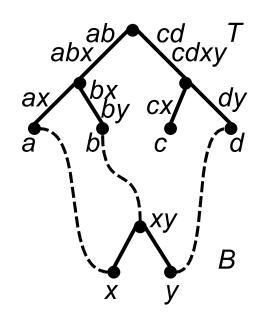
T : arbre représentant les clusters sur *X\R*



B : réseau représentant les clusters maximaux sur *R* et les singletons de *R*.

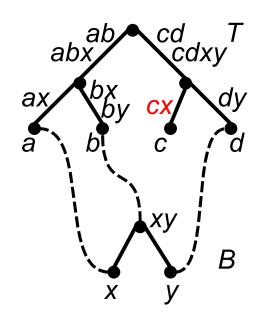
Problème:

Attacher T à B avec le minimum de liens.



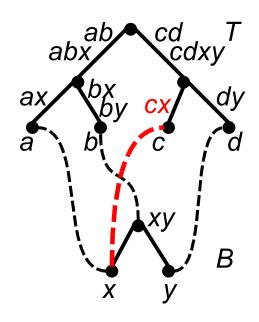
C1 - Satisfaction des clusters de T:

Pour tout arc *e* de l'arbre *T* et tout taxon *r* de *R* contenu dans un cluster de *e*, il existe un lien depuis un des descendants de *e* dans *T* vers le noeud correspondant à *r* dans *B*, ou un noeud de *B* correspondant à un cluster maximal qui contient *r*.



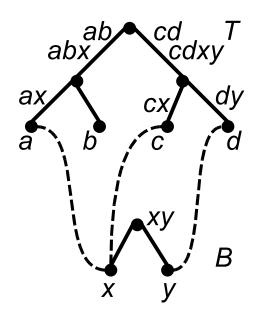
C1 - Satisfaction des clusters de T:

Pour tout arc *e* de l'arbre *T* et tout taxon *r* de *R* contenu dans un cluster de *e*, il existe un lien depuis un des descendants de *e* dans *T* vers le noeud correspondant à *r* dans *B*, ou un noeud de *B* correspondant à un cluster maximal qui contient *r*.

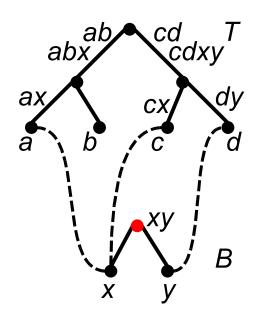


C1 - Satisfaction des clusters de T:

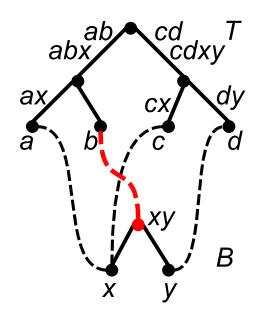
Pour tout arc *e* de l'arbre *T* et tout taxon *r* de *R* contenu dans un cluster de *e*, il existe un lien depuis un des descendants de *e* dans *T* vers le noeud correspondant à *r* dans *B*, ou un noeud de *B* correspondant à un cluster maximal qui contient *r*.



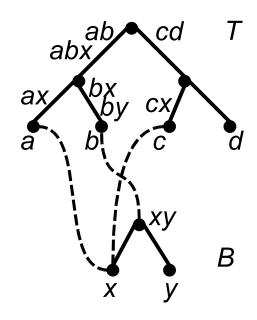
C2 - Satisfaction de la paternité des noeuds de B: Tout noeud de B correspondant à plus d'un taxon est relié à un noeud de T par un lien exactement.



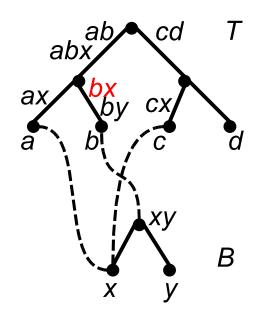
C2 - Satisfaction de la paternité des noeuds de B: Tout noeud de B correspondant à plus d'un taxon est relié à un noeud de T par un lien exactement.



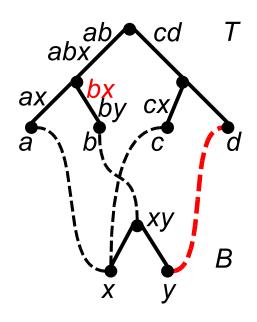
C2 - Satisfaction de la paternité des noeuds de B: Tout noeud de B correspondant à plus d'un taxon est relié à un noeud de T par un lien exactement.



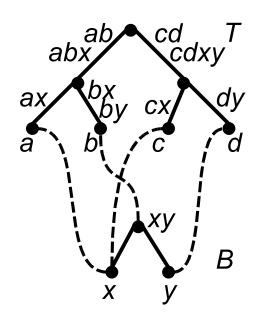
C3 – Absence de parasites des clusters de T dans B:
Pour tout arc e de T, si un cluster correspondant à e ne contient pas un taxon r de R, il existe un chemin d'un noeud qui ne descend pas de e vers le noeud associé à r.



C3 – Absence de parasites des clusters de T dans B:
Pour tout arc e de T, si un cluster correspondant à e ne contient pas un taxon r de R, il existe un chemin d'un noeud qui ne descend pas de e vers le noeud associé à r.



C3 – Absence de parasites des clusters de T dans B:
Pour tout arc e de T, si un cluster correspondant à e ne contient pas un taxon r de R, il existe un chemin d'un noeud qui ne descend pas de e vers le noeud associé à r.



Problème:

Trouver un attachement respectant les contraintes C1, C2, et C3 et de taille minimale.

Problème:

Trouver un attachement respectant les contraintes C1, C2, et C3, et de taille minimale.

NP-complet

réduction depuis SetCover

W[2]-dur, paramétré par le nombre de liens à ajouter. réduction depuis SetCover

Algorithmes:

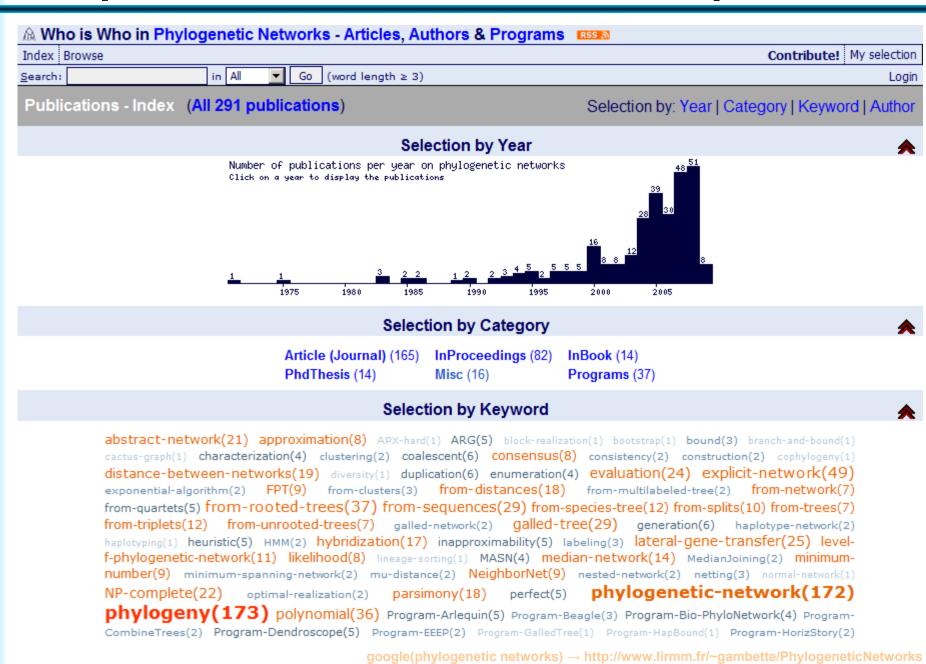
- Séparation et évaluation

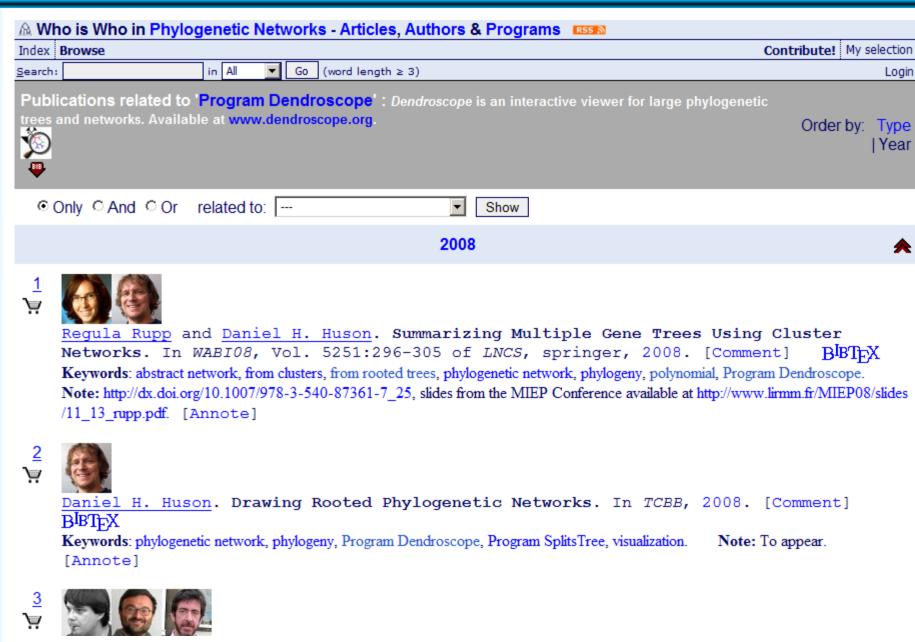
(branch-and-bound, implémenté dans Dendroscope 2)

- Programme linéaire en nombres entiers

Plan

- Les réseaux phylogénétiques à structure arborée
- Reconstruction depuis des clusters
- Une approche en deux étapes
- L'ensemble minimum de conflits
- L'attachement minimum
- L'implémentation dans Dendroscope







Site Map Accessibility Contact

Search Site

Only in current section

Log in

You are here: Home → Software → Dendroscope



Dendroscope

Download



Dendroscope

by Daniel H. Huson with contributions from Tobias Dezulian, Markus Franz, Christian Rausch, Daniel C. Richter and Regula Rupp

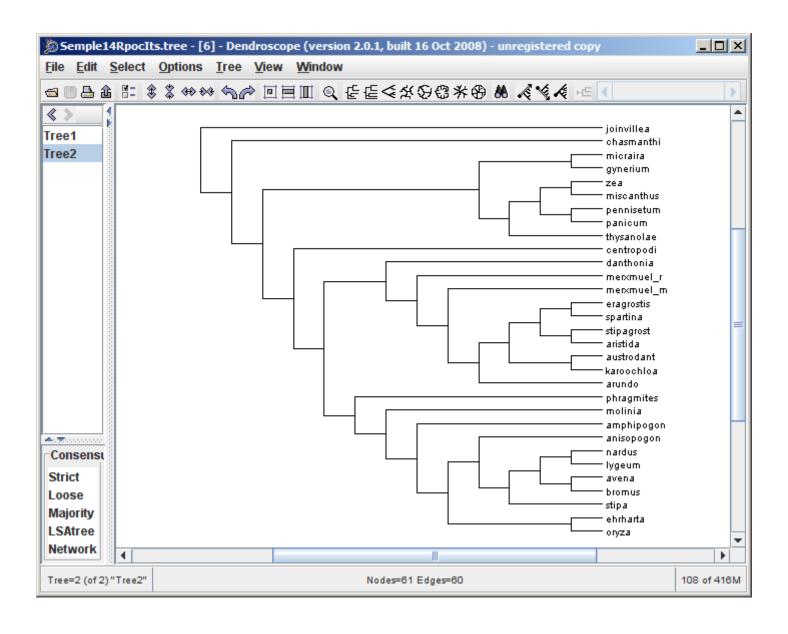
www-ab.informatik.uni-tuebingen.de/software/dendroscope

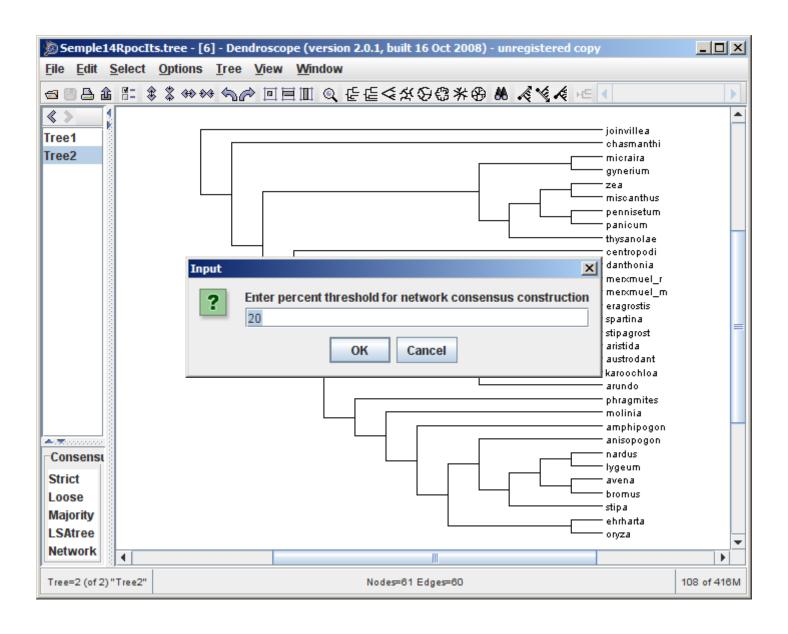
Dendroscope 2 - An interactive viewer for large phylogenetic trees and networks

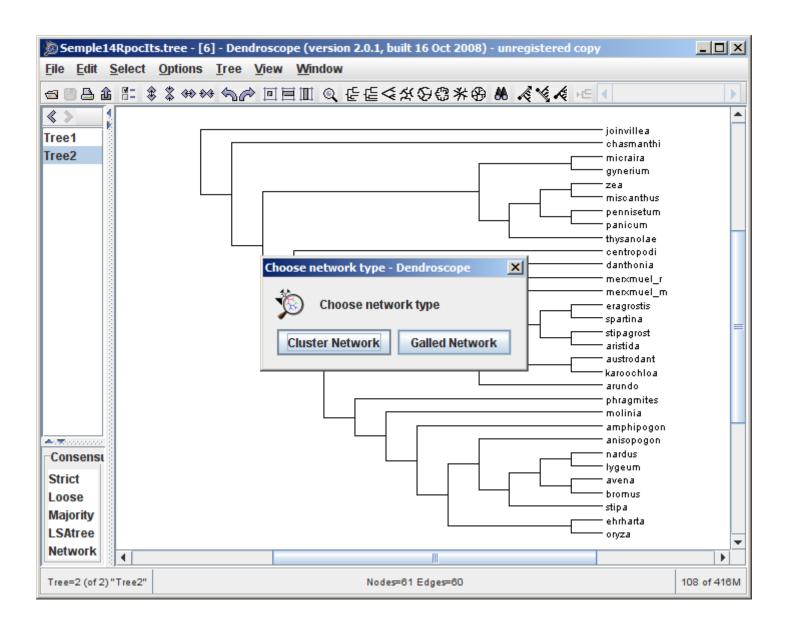
Researchers studying phylogenetic relationships need software that is able to visualize rooted phylogenetic trees efficiently, increasingly of large datasets involving hundreds of thousands of taxa. The program should be user frie all popular operating systems), facilitate interactive browsing and editing the trees and allow one to export the reformats in publication quality.

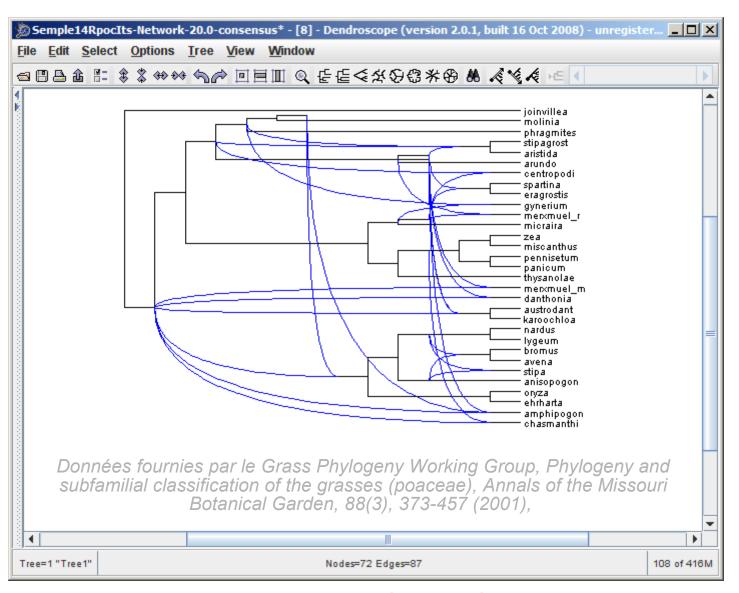
We have developed the platform independent tree and rooted network viewer Dendroscope that addresses these

Feature List:

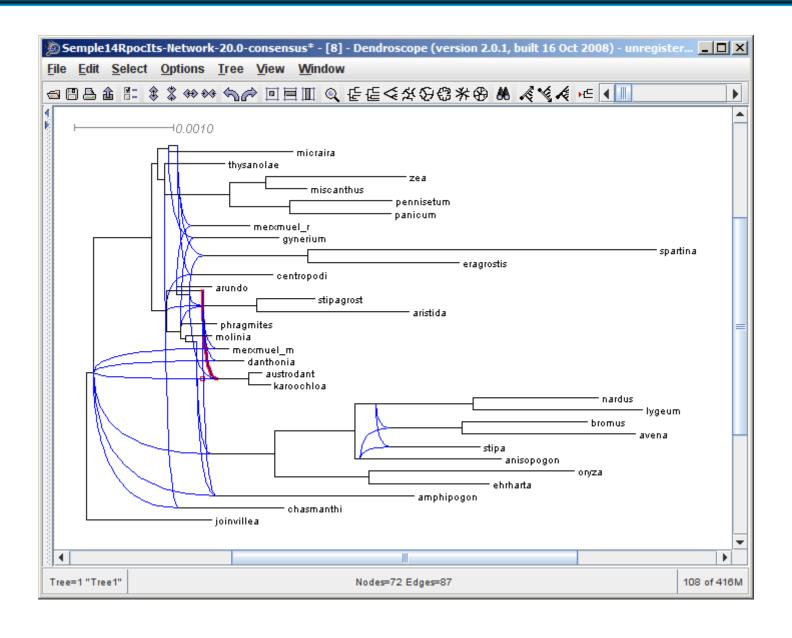






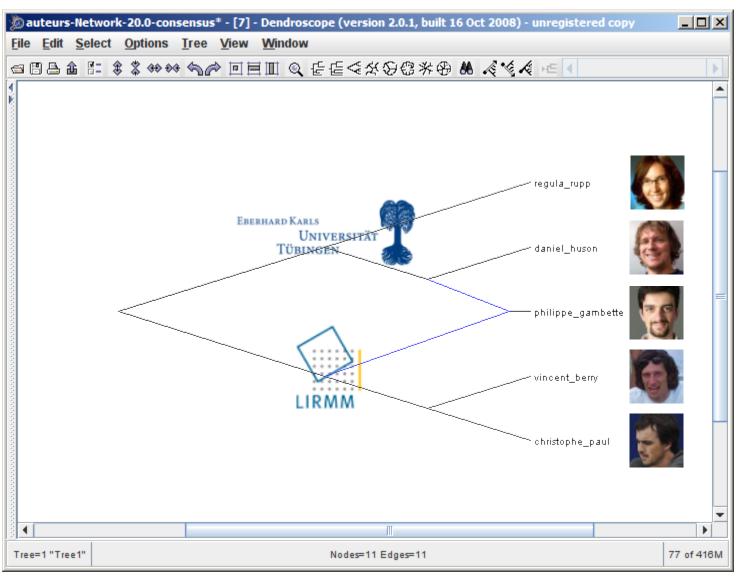


Données utilisées également par Bordewich, Linz, St John et Semple dans A reduction algorithm for computing the hybridization number of two trees, Evolutionary Bioinformatics, 3, 86-98, 2007.





Merci pour votre attention!



Réseau phylogénétique à structure arborée des clusters de co-publication

Annexe : figures (éventuellement) utiles

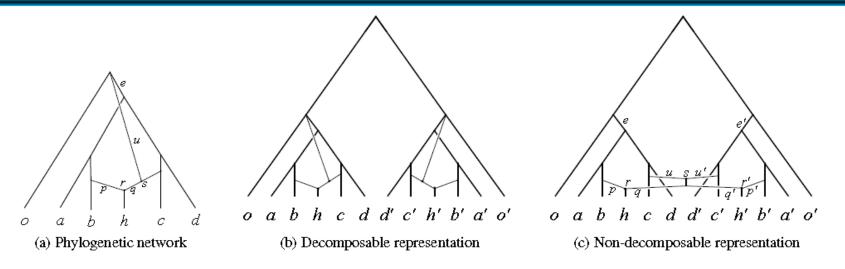
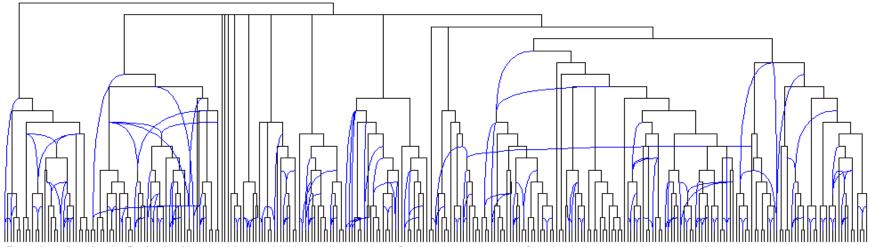


Fig. 2. (a) A minimum rooted network N that represents the clusters $C = \{\{a\}, \{b\}, \{c\}, \{d\}, \{a, b\}, \{a, b\}, \{a, b\}, \{c, d\}, \{c, d\}, \{c, d\}, \{a, b, c, d, h\}, \{a, b, c, d, h\}, \{a, b, c, d\}\}$ using two reticulate nodes r and s. Note the role of the edge labeled u is to switch off the taxon h so that the cluster $\{a, b, c, d\}$ can be represented by edge e. (b) Two copies of N embedded into a decomposable network requiring 4 reticulations to represent all clusters in C and a second set C' of corresponding ones on $\{o', a', b', c', d', h'\}$. (c) This network also represents all described clusters, but uses only 3 reticulations. However, we clearly see that this improvement is gained at an undesirable price: decomposability is abandoned and two completely unrelated parts of the phylogeny are linked together via reticulation edges.



Données de : Auch, Steigele, Huson, Henz – Horizontal gene transfer in a common set of prokariotic genes, in preparation.

Annexe : tableau (éventuellement) utile

First	Second	Common	Hybrid	time	Reticulate	time
tree	tree	taxa	nodes		nodes	
ndhF	phyB	40	14	11h	9	< 2s
ndhF	rbcL	36	13	11.8h	8	< 28
ndhF	rpoC2	34	12	26.3h	10	< 28
ndhF	waxy	19	9	320s	6	< 28
ndhF	ITS	46	> 15	2đ	23	< 28
phyB	rbcL	21	4	1s	6	< 28
phyB	rpoC2	21	7	180s	4	< 2s
phyB	waxy	14	3	1s	3	< 28
phyB	ITS	30	8	19s	9	< 28
rbcL	rpoC2	26	13	29.5h	9	< 28
rbcL	waxy	12	7	230s	4	< 28
rbcL	ITS	29	> 9	2d	15	< 28
rpoC2	waxy	10	1	1s	2	< 28
rpoC2	ITS	31	> 10	2d	14	< 2s
waxy	ITS	15	8	620s	5	< 2s

Table 1. For all possible pairs of five trees on grasses [33], we report the number of taxa shared by both trees, the number of hybridization nodes and run-time reported in [11], and the number of reticulate nodes and run-time obtained using the algorithm described in this paper.