

①

2) Neighbor Joining

	A	B	C	D	E	F
A	0	2	4	6	6	8
B	2	0	4	6	6	8
C	4	4	0	6	6	8
D	6	6	6	0	4	8
E	6	6	6	4	0	8
F	8	8	8	8	8	0

1) Première étape

a) Calcul des u_i

Par définition, pour n espèces :

$$u_i = \frac{\sum_k d_{i,k}}{n-2}$$

Donc :

$$u_A = \frac{2+4+6+6+8}{4} = \frac{26}{4} = 6,5$$

De même : $u_B = 6,5$ $u_C = 7$ $u_D = 7,5$

$u_E = 7,5$ et $u_F = 10$

b) Calcul des $Q_{i,j}$

On cherche à trouver le couple (i,j) tel que :

$$Q_{i,j} = d_{i,j} - u_i - u_j \text{ est minimal}$$

$$Q_{A,B} = d_{A,B} - u_A - u_B = 2 - 6,5 - 6,5 = -11 \quad (*)$$

$$Q_{A,C} = 4 - 6,5 - 7 = -9,5$$

$$Q_{A,D} = 6 - 6,5 - 7,5 = -8$$

$$Q_{A,E} = 6 - 6,5 - 7,5 = -8$$

$$Q_{A,F} = 8 - 6,5 - 10 = -8,5$$

$$Q_{B,C} = 4 - 13,5 = -9,5$$

$$Q_{B,D} = 6 - 14 = -8$$

$$Q_{B,E} = 6 - 14 = -8$$

$$Q_{B,F} = 8 - 16,5 = -8,5$$

$$Q_{C,D} = 6 - 14,5 = -8,5$$

$$Q_{D,E} = 4 - 15 = -11 \quad (*)$$

$$Q_{C,E} = 6 - 14,5 = -8,5$$

$$Q_{D,F} = 8 - 17,5 = -9,5$$

$$Q_{C,F} = 8 - 17 = -9$$

$$Q_{E,F} = 8 - 17,5 = -9,5$$

↳ $Q_{A,B}$ est minimal, on choisit de regrouper A et B
(on aurait aussi pu regrouper D et E)

②

c) Mise à jour des distances

On calcule la distance du nouveau cluster aux autres espèces k par :

$$d_{AB,k} = \frac{d_{A,k} + d_{B,k} - d_{AB}}{2}$$

donc : $d_{AB,C} = \frac{d_{A,C} + d_{B,C} - d_{AB}}{2} = \frac{4+4-2}{2} = 3$

$$d_{AB,D} = \frac{12-2}{2} = 5$$

$$d_{AB,E} = 5$$

$$d_{AB,F} = \frac{16-2}{2} = 7$$

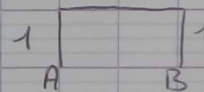
d) Calcul de la longueur des branches

Soit (i,j) le nouveau cluster les longueurs des branches sont :

$$d_{i,ij} = \frac{d_{ij}}{2} + \frac{u_i - u_j}{2} \quad \text{et} \quad d_{j,ij} = \frac{d_{ij}}{2} + \frac{u_j - u_i}{2}$$

On a donc :

$$d_{A,AB} = \frac{2}{2} + 0 = 1 \quad \text{et} \quad d_{B,AB} = 1$$



2) Deuxième étape (n=5)

	AB	C	D	E	F
AB	0	3	5	5	7
C	3	0	6	6	8
D	5	6	0	4	8
E	5	6	4	0	8
F	7	8	8	8	0

a) Calcul des u_i

$$u_{AB} = \frac{3+5+5+7}{(5-2)} = 6,67$$

$$u_C = 7,67$$

$$u_D = 7,67$$

$$u_E = 7,67$$

$$u_F = 10,33$$

b) Calcul des $Q_{i,j}$

$$Q_{AB,C} = d_{AB,C} - u_{AB} - u_C = 3 - 6,67 - 7,67 = -11,33$$

$$Q_{AB,D} = 5 - 6,67 - 7,67 = -9,33$$

$$Q_{AB,E} = 5 - 6,67 - 7,67 = -9,33$$

$$Q_{AB,F} = 7 - 6,67 - 10,33 = -10$$

$$Q_{D,E} = -9,33$$

$$Q_{D,F} = -10$$

$$Q_{E,F} = -10$$

$$Q_{C,D} = 6 - 7,67 - 7,67 = -9,33$$

$$Q_{C,E} = 6 - 7,67 - 7,67 = -9,33$$

$$Q_{C,F} = 8 - 7,67 - 10,33 = -10$$

↳ On regroupe (AB) et C.

③

c) Mise à jour des distances

$$d_{ABC,D} = \frac{d_{AB,D} + d_{C,D} - d_{ABC}}{2} = \frac{5+6-3}{2} = 4$$

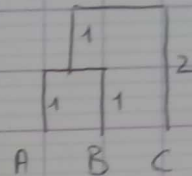
$$d_{ABC,E} = 4$$

$$d_{ABC,F} = 6$$

d) Longueur des branches

$$d_{AB,ABC} = \frac{d_{AB,ABC}}{2} + \frac{u_{AB} - u_C}{2} = \frac{3}{2} - \frac{1}{2} = 1$$

$$d_{C,ABC} = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} = 2$$



3) 3^{ème} étape (n=4)

ABC	D	E	F
ABC	0	4	4
D	4	0	4
E	4	4	0
F	6	8	8

$$a) u_{ABC} = \frac{4+4+6}{2} = 7$$

$$u_D = 8$$

$$u_E = 8$$

$$u_F = 11$$

b) Q_{ij}

$$Q_{ABC,D} = 4 - 15 = -9$$

$$Q_{ABC,E} = 4 - 15 = -9$$

$$Q_{ABC,F} = 6 - 18 = -12 \text{ (X)}$$

$$Q_{D,E} = 4 - 16 = -12 \text{ (X)}$$

$$Q_{D,F} = 8 - 19 = -11$$

$$Q_{E,F} = -11$$

↳ On choisit par exemple (ABC, F)

c) Distances

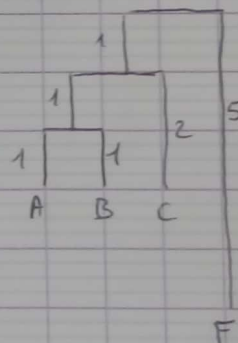
$$d_{ABCF,D} = \frac{4+8-6}{2} = 3$$

$$d_{ABCF,E} = 3$$

d) Branches

$$d_{ABC,ABCF} = \frac{6}{2} + \frac{7-11}{2} = 1$$

$$d_{F,ABCF} = \frac{6}{2} + \frac{11-7}{2} = 5$$



4) 4^{ème} étape (n=3)

ABCF	D	E
ABCF	0	3
D	3	0
E	3	4

$$a) u_{ABCF} = 6 \quad u_D = 7 \quad u_E = 7$$

$$b) Q_{ABCF,D} = 3 - 13 = -10$$

$$Q_{ABCF,E} = 3 - 13 = -10$$

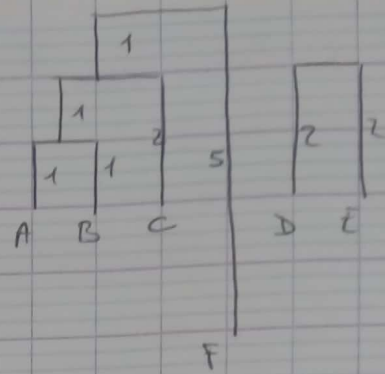
$$Q_{D,E} = 4 - 14 = -10 \text{ (X)}$$

↳ On prend par exemple (D, E)

④

$$c) d_{ABCF, DE} = \frac{3+3-4}{2} = 1$$

$$d) \begin{cases} d_{D, DE} = \frac{4}{2} + 0 = 2 \\ d_{E, DE} = 2 \end{cases}$$

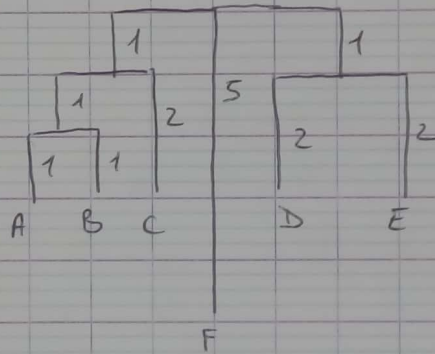


5) Dernière étape

$$d_{ABCF, ABCDEF} = \frac{3+3-4}{2} = 1$$

$$d_{DE, ABCDEF} = \frac{4}{2} + 0 = 2$$

La résolution est finie, il suffit de connecter les deux clusters restant avec une branche de longueur $D_{ABCF, DE} = 1$



□