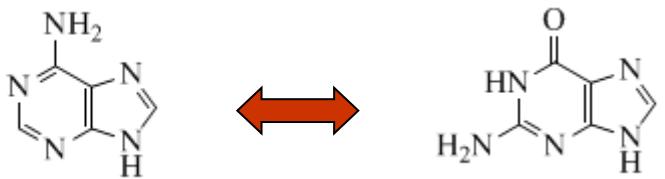
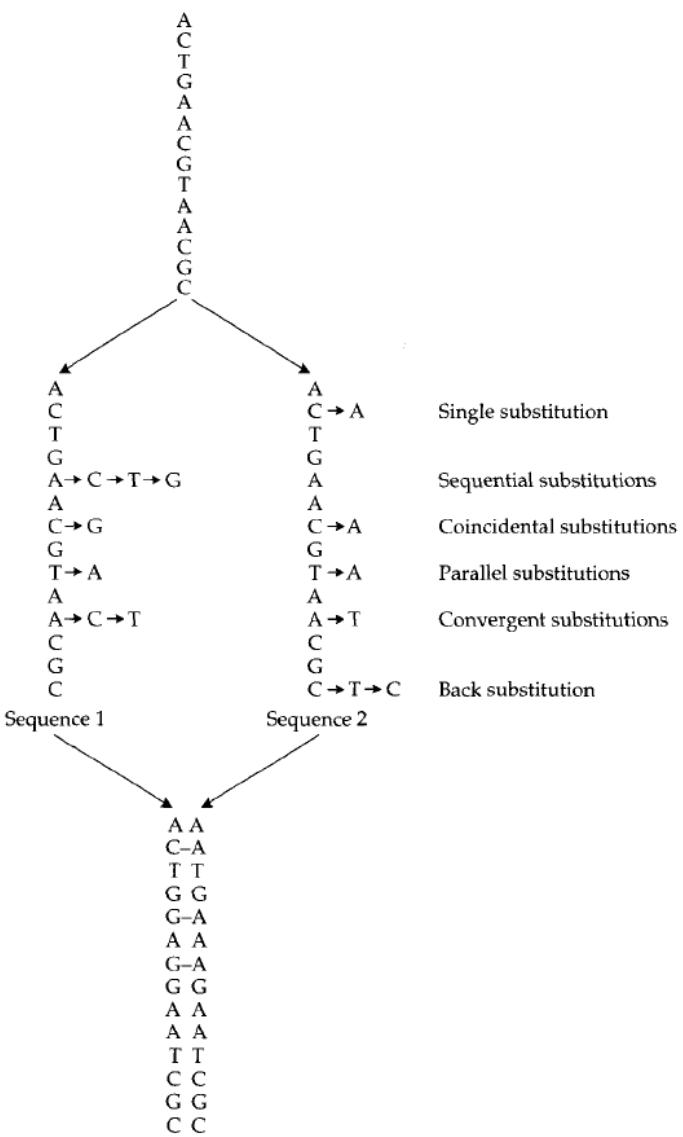


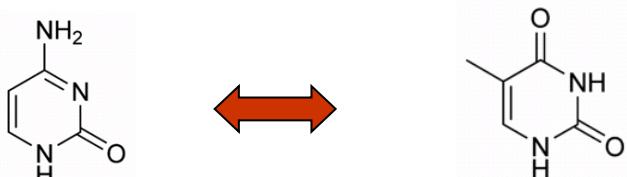
# DNA 염기치환 모형 비교

(DNA 염기치환 모형(서태건 2022) 논문의 요약 및 추가 설명입니다) ; ver.2025.01.24

## DNA서열 진화 모식도



The diagram consists of two blue arrows. The first arrow originates from the letter 'A' on the left and points towards the letter 'G' on the right. The second arrow originates from the letter 'G' on the right and points back towards the letter 'A' on the left, forming a V-shape.



C T

 Transition: 염기치환이 빠름 (염기의 입체구조가 비슷)

↔ Transversion: 염기치환이 느림

# DNA 염기치환 모형

- 매우 짧은 시간동안의 염기치환 상대적인 속도를 파라미터로 표현
- 복잡한 분자진화 현상을 단순화 하여 몇 개의 파라미터로 설명  
(예) Jukes-Cantor model (JC), Kimura's two parameter model (K2,K80), Hasegawa-Kishino-Yano model (HKY85), etc.

**JC**

|      |          | To       |          |          |          |
|------|----------|----------|----------|----------|----------|
|      |          | A        | C        | T        | G        |
| From | A        | -        | $\alpha$ | $\alpha$ | $\alpha$ |
|      | C        | $\alpha$ | -        | $\alpha$ | $\alpha$ |
| A    | $\alpha$ | $\alpha$ | -        | $\alpha$ |          |
| G    | $\alpha$ | $\alpha$ | $\alpha$ | -        |          |

치환의 상대적 속도가 동일( $\alpha$ )

**K2**

|      |          | To       |          |          |          |
|------|----------|----------|----------|----------|----------|
|      |          | A        | C        | T        | G        |
| From | A        | -        | $\alpha$ | $\alpha$ | $\beta$  |
|      | C        | $\alpha$ | -        | $\beta$  | $\alpha$ |
| A    | $\alpha$ | $\beta$  | -        | $\alpha$ |          |
| G    | $\beta$  | $\alpha$ | $\alpha$ | -        |          |

Transition의 속도( $\beta$ )와 transversion의 속도( $\alpha$ )가 다르다. 일반적으로  $\beta > \alpha$

**HKY85**

|      |                | To             |         |                |                |
|------|----------------|----------------|---------|----------------|----------------|
|      |                | A              | C       | T              | G              |
| From | A              | -              | $\pi_c$ | $\pi_T$        | $\kappa \pi_G$ |
|      | C              | $\pi_A$        | -       | $\kappa \pi_T$ | $\pi_G$        |
| A    | $\pi_A$        | $\kappa \pi_c$ | -       | $\pi_G$        |                |
| G    | $\kappa \pi_A$ | $\pi_c$        | $\pi_T$ | -              |                |

염기치환속도가 염기의 빈도(  $\pi$  )에 비례. Transition이 transversion 보다  $\kappa$ 배 빠름.

$$\mathbf{R}^{(TN)} = \begin{matrix} & \begin{matrix} A & C & G & T \end{matrix} \\ \begin{matrix} A \\ C \\ G \\ T \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} - & \pi_C & \kappa_1\pi_G & \pi_T \\ \pi_A & - & \pi_G & \kappa_2\pi_T \\ \kappa_1\pi_A & \pi_C & - & \pi_T \\ \pi_A & \kappa_2\pi_C & \pi_G & - \end{matrix} \right] \end{matrix}, \quad \mathbf{R}^{(GTR)} = \begin{matrix} & \begin{matrix} A & C & G & T \end{matrix} \\ \begin{matrix} A \\ C \\ G \\ T \end{matrix} & \left[ \begin{matrix} - & a\pi_C & b\pi_G & c\pi_T \\ a\pi_A & - & d\pi_G & e\pi_T \\ b\pi_A & d\pi_C & - & \pi_T \\ c\pi_A & e\pi_C & \pi_G & - \end{matrix} \right] \end{matrix} \quad (5)$$

Tamura Nei (1993) 모형

GTR (1986) 모형; General  
Time-Reversible

DNA 염기치환은 전후 순서를 무시하고 순서쌍만 고려하면 여섯 가지가 존재한다.<sup>2</sup> DNA 염기치환 모형은 여섯가지 염기치환의 수간적인 발생 비율을 규정한 것으로, 가장 단순한 JC 모형 (Jukes and Cantor 1969)부터 가장 복잡한 GTR 모형 (Tavaré 1986)에 이르기까지 다수의 모형이 개발되어 왔다 (자세한 내용은 Felsenstein 2004, Yang 2006에 잘 정리되어 있다).

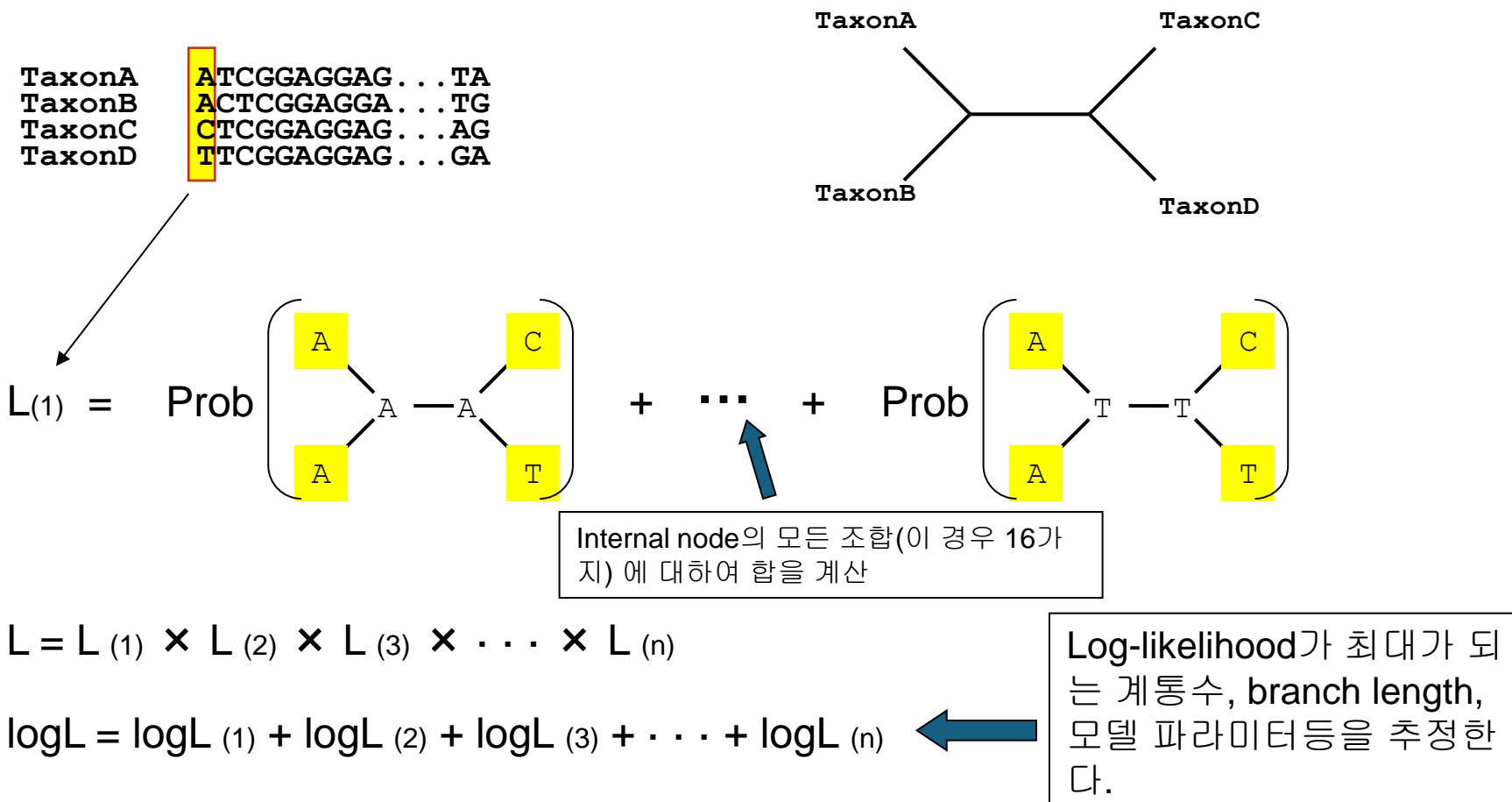
분자데이터 분석에 적용할 수 있는 DNA 염기치환 모형의 수가 증가함에 따라, 어떻게 모형들을 비교하고 가장 좋은 모형을 선택해서 데이터 분석에 이용해야 하는가하는 문제가 자연스럽게 등장한다. 염기치환 모형은 생물의 계통관계 추정뿐만 아니라, 분기연대의 추정, 자연선택의 검출 등의 데이터 분석 결과에 영향을 미친다. 부적절한 모형의 선택으로 잘못된 계통수가 도출된다든지(Sullivan et al. 1997; Riplinger and Sullivan 2008), 진화거리의 부정확한 추정으로 분기연대 추정값이 부정확해진다든지(Schenk and Hufford 2010)<sup>3</sup>하는 사례들이 다수 보고된 바 있다. 따라서 모형 선택은 객관적이고 정량적이어야 하고, 이를 위한 합리적인 방법론의 연구도 많이 수행되었다(Sullivan and Joyce 2005).

주의해야 할 점은 DNA 염기치환 모형은 복잡한 자연현상(즉, 복잡한 문자진화양상)을 어디까지나 단순화하고 근사시킨 ‘틀’에 불과하다는 것이다. 복잡한 자연현상을 모수 몇 개로 정리하고 요약하여 설명하려는 것이다. 이러한 시도는 자연현상을 쉽게 이해하고 설명하게 하는 장점도 있지만, 한편으로는 현실 세계와의 괴리가 필연적으로 존재한다는 단점도 있다. 모든 통계적 모형은 근본적으로 ‘틀린 모형 (wrong model)’이다 (Box 1976). ‘옳은 모형 (correct model)’이란 것은 존재할 수 없다.<sup>4</sup> ‘(다른 모형보다) 더 좋은 모형 (better model)’이 있을 뿐이다.

# Maximum likelihood (ML) method

- 각 계통수별로 likelihood를 계산, likelihood가 최대가 되는 계통수 및 모델파라미터를 구하는 방법

(likelihood: 데이터가 모델에 어느정도 잘 맞는가 나타내는 수치. 「데이터가 생성될 확률」과 밀접한 관계가 있음.)



# Transition probabilities

$$\mathbf{R} := \begin{matrix} & \begin{matrix} A & C & T & G \end{matrix} \\ \begin{matrix} A \\ C \\ T \\ G \end{matrix} & \left( \begin{matrix} - & \alpha & \alpha & \beta \\ \alpha & - & \beta & \alpha \\ \alpha & \beta & - & \alpha \\ \beta & \alpha & \alpha & - \end{matrix} \right) \end{matrix}$$

Transition probabilities after time t are

$$\mathbf{P}(t) := e^{t\mathbf{R}} = \begin{pmatrix} P_{AA}(t) & P_{AC}(t) & P_{AT}(t) & P_{AG}(t) \\ P_{CA}(t) & P_{CC}(t) & P_{CT}(t) & P_{CG}(t) \\ P_{TA}(t) & P_{TC}(t) & P_{TT}(t) & P_{TG}(t) \\ P_{GA}(t) & P_{GC}(t) & P_{GT}(t) & P_{GG}(t) \end{pmatrix}$$

그렇다면 여러 가지 후보 모형 중에서 더 좋은 모형을 어떻게 판단할 수 있을까? 염기치환 모형의 정량적인 비교를 위해 AIC (Akaike Information Criterion; Akaike 1974 ), BIC (Bayesian Information Criterion; Schwarz 1978)와 같은 정보량기준 (Information Criterion; IC) 혹은 이들로부터 파생된 정보량기준이 흔히 쓰인다. 정보량기준은 공통적으로 아래와 같은 행태를 띠고 있다 (Dziak et al. 2019).

$$IC := l_m - \rho \cdot p_m, \quad (1)$$

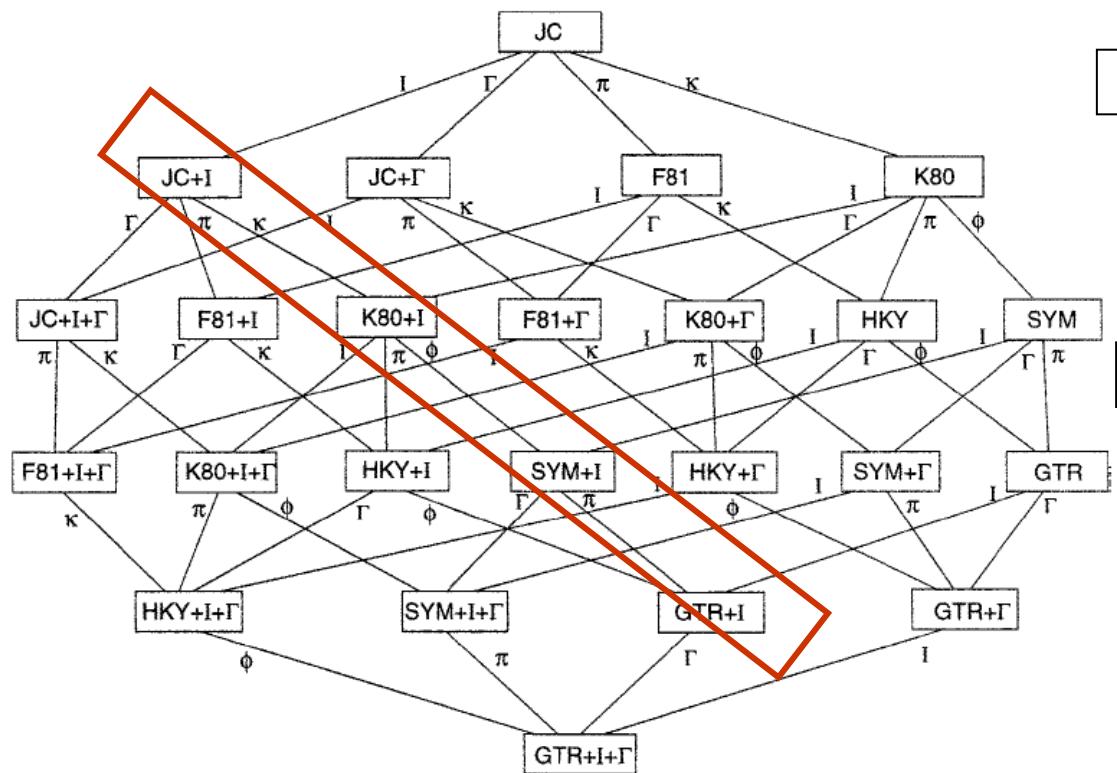
여기서  $l_m$ 은 모형  $m$  을 적용시켜 얻은 로그가능도 (log-likelihood),  $p_m$ 은 모형  $m$ 이 포함하고 있는 미지의 모수의 갯수,  $\rho$ 는 정보량기준에 의해 사전에 정해진 값이다.<sup>5</sup> 기호 ‘:=’는 좌변의 의미를 우변으로 정의 한다는 것을 말한다. 로그가능도 <sup>6</sup>는 확률들의 곱의 형태로 표현되는 가능도 (likelihood)에 로그를 취한 것으로 모형이 데이터에 얼마나 잘 적합하게 들어 맞는지 나타내는 수치이다. 로그가능도가 크면 클수록 데이터는 해당 모형에 잘 부합한다는 것을 의미한다. 일반적으로 모형의 모수 수가 증가할수록 적합도가 증가하여  $l_m$ 은 커지게 된다. 하지만, 적합도가 증가한 만큼 단점도 존재하는데, 그 단점은 모수 추정의 불확실성이 증가한다는 것이다. 즉, 모형은 기존 데이터를 잘 설명하지만, 미지의 데이터 예측에는 신뢰성이 떨어지는 문제가 발생한다. 따라서 마냥 복잡한 모형 ( $l_m$ 이 큰 모형)을 선택할 수는 없고 어느 정도 이상 복잡해지지 않도록 억제하는 ‘페널티’가 존재해야 하는데 이 역할을 하는 것이 식 (1) 우변의 두 번째

AIC:  $\rho = 2$

BIC:  $\rho = \log(n)/2$

# Likelihood 스코어를 이용한 모델 비교 (likelihood ratio test; LRT)

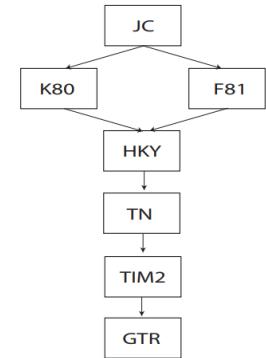
## Hierarchy of DNA models



Nested Model

(special case of nesting model)

Nesting Model



두 모델의 비교에 있어서 복잡한 모델의 파라미터를 특정한 값으로 고정시키면 단순한 모델이 될 경우 Likelihood ratio test (LRT) 를 적용할수 있다

그림 1. DNA 치환모형들 간의 관계. 가장 단순한 JC 모형부터 가장 복잡한 GTR모형에 이르기까지 203개의 모형이 존재하나 이 그림에서는 몇 개만 선별하여 표시하였다.

## 모형의 정량적인 비교

어떤 모형과 그 모형의 내포모형 (nested model)을 비교할 때 전통적으로 가능도비검정 (Likelihood Ratio Test; LRT) 이 사용된다. 내포모형을  $m_1$ , 복잡한 모형을  $m_2$ 라고 하고 각각의 모수 수를  $p_1, p_2$ 라 하자. 모형  $m_1$ 과  $m_2$  하에서 얻은 최대로그가능도를 각각  $l_1, l_2$ 라고 하면 귀무가설 (내포모형이 참이라고 가정하는 가설)하에서 로그가능도 차이의 두배는 자유도가  $(p_2 - p_1)$  인 카이제곱분포를 따른다는 것이 알려져 있다 (Stuart and Ord 1991).

$$2 \{l_2 - l_1\} \sim \chi^2_{(p_2 - p_1)}$$

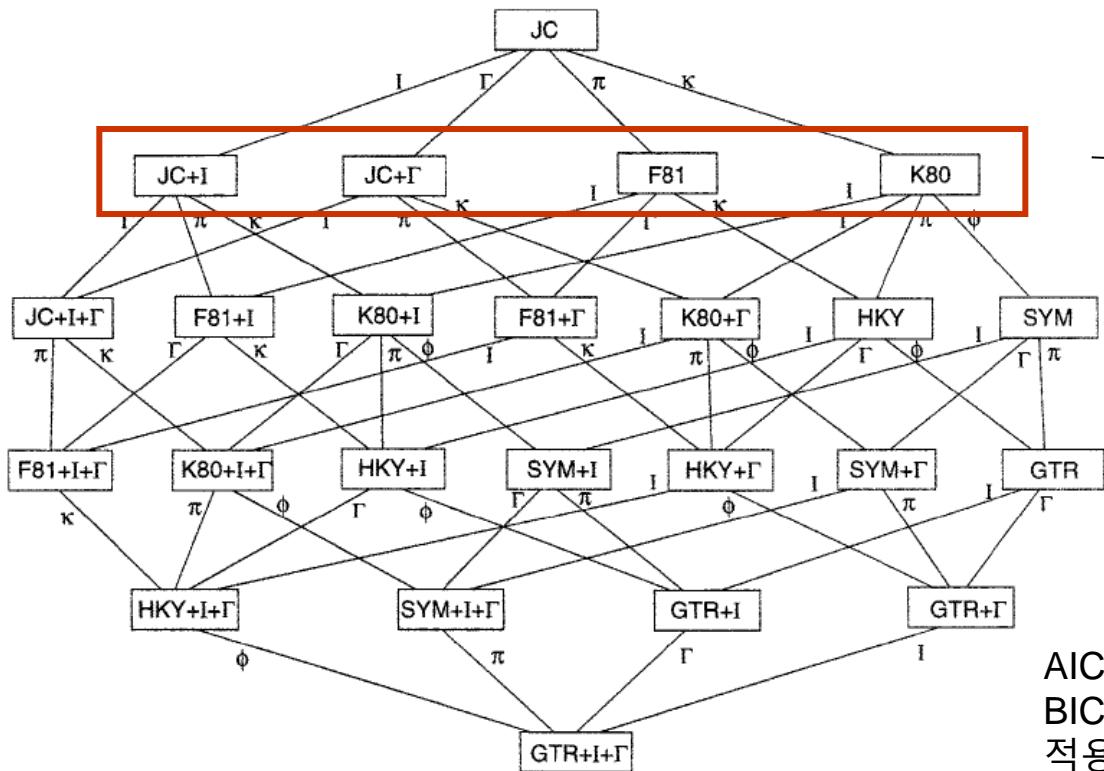
이 통계학적 사실을 DNA 치환 모형에 적용시켜, 가장 단순한 JC 모형부터 출발하여 {단순한모형, 복잡한 모형}의 순서쌍을 하나하나 검정해가는 계층적 가능도비 검정 (hierarchical Likelihood Ratio Test; hLRT) 법이 제안되었다 (Posada and Crandall 1998). 하지만, hLRT에 의해 선택되는 최적의 모형은 순서쌍을 정하는 경로에 영향을 받기도 하고, 반복적으로 시행되는 통계적 가설검정에 따른 다중검정(multiple testing)의 문제, 무엇보다도 내포모형의 관계가 아닌 경우<sup>16</sup>에는 적용 불가능하다는 등의 문제가 있어 DNA 치

---

<sup>16</sup>예를 들어 그림 1에서 F81과 K80 모형은 내포관계가 성립하지 않는다.

# Likelihood 스코어를 이용한 모델 비교 (AIC, BIC, 등)

## Hierarchy of DNA models



Likelihood ratio test (LRT) 를 적용  
할수 없는 일반적인 경우

AIC (Akaike Information Criterion)  
BIC (Bayesian Information Criterion)  
적용 가능함

AIC 와 BIC는 식 (1)에 '-2'를 곱한 형태를 가지며 아래와 같이 정의된다.

$$\text{AIC} = -2 \times \text{log-likelihood} + 2p \quad (6)$$

$$\text{BIC} = -2 \times \text{log-likelihood} + p \log n \quad (7)$$

여기에서 log-likelihood는 최대로그가능도,  $p$ 는 모수의 수,  $n$ 은 염기서열의 길이를 의미한다. 비교대상이 되는 모형중에서 가장 적은 AIC 혹은 BIC 스코어를 가지는 모형이 가장 좋은 모형으로 선택이 된다. AIC 기준으로 선택된 모형은 미지의 ‘데이터 생성 메카니즘’과 ‘가장가까운<sup>17</sup> 모형’이다. BIC 기준으로 선택된 모형은 데이터의 주변확률밀도(marginalized probability density)가 가장 큰 모형이다(Konishi and Kitagawa 2008).

AIC 정보량기준은 데이터의 수가 매우 크고 비교되는 모형이 미지의 데이터 생성 메카니즘과 어느정도 비슷할 때 좋은 퍼포먼스를 보여준다. 하지만 실제 데이터 분석에서는 데이터의 수가 작은 경우가 흔히 있고 선형회귀분석 모형의 경우 작은 데이터수의 영향을 보정하는 아래와 같은 AICc (corrected AIC)가 제안되었으며(Konishi and Kitagawa 2008) 이 정보량 기준은 DNA 치환 모형에서도 흔히 사용된다.

$$\text{AICc} = \text{AIC} + \frac{2p^2 + 2p}{n - p - 1} \quad (8)$$

## 사이트 간 진화속도의 이질성 (Rate Heterogeneity among Sites; RHAS)

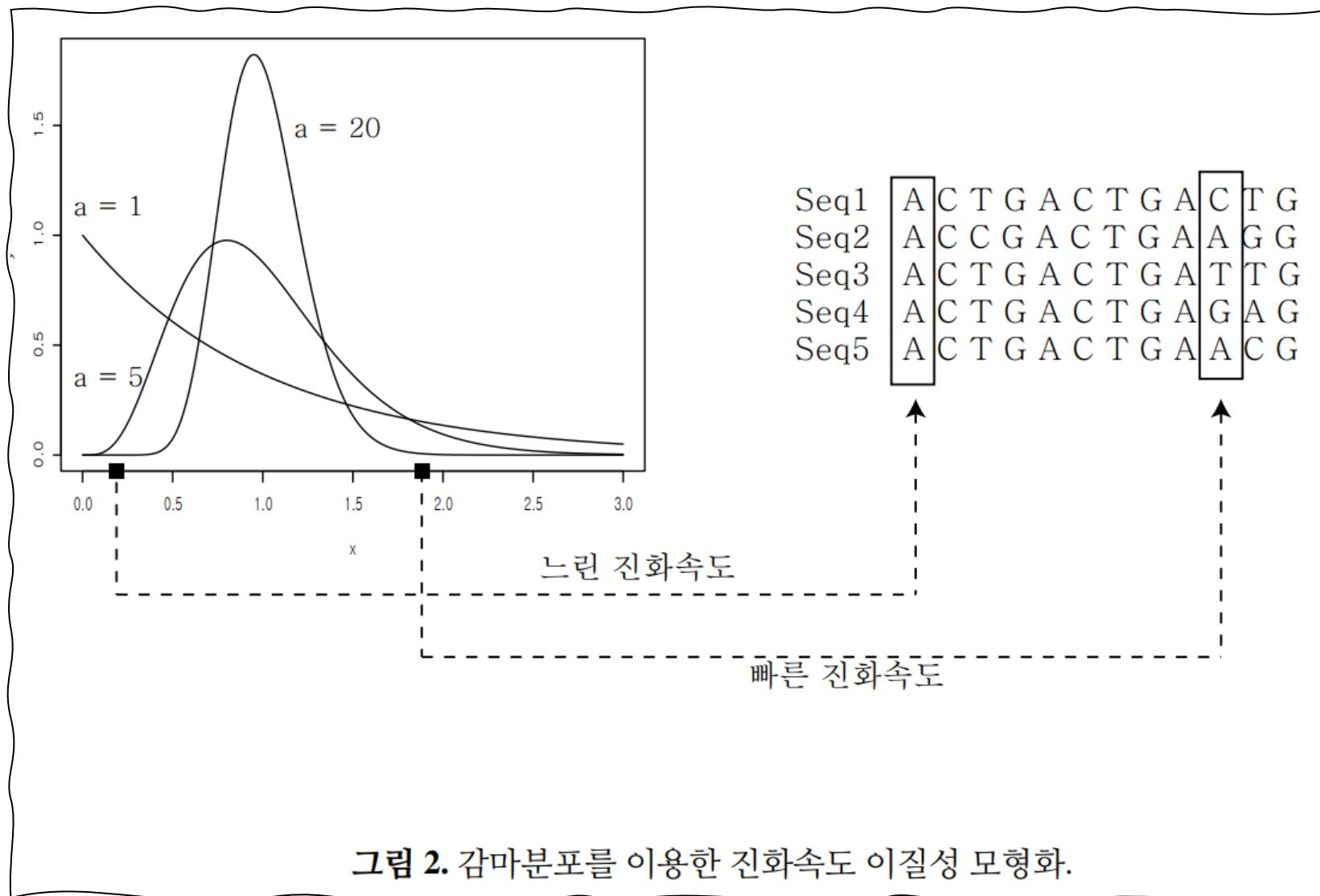


그림 2는 감마분포를 이용한 진화속도 모형화를 모식적으로 나타낸 것이다. 각 사이트의 진화속도는 기준속도의  $r$ 배를 갖게되고  $r$ 은 감마분포를 따르는 확률변수이다.  $r$ 이 우연히 작은 값을 가지면 그 사이트는 진화속도가 느려 치환이 덜 관찰될 것이고  $r$ 이 우연히 크면 진화속도가 빨라 치환이 많이 관찰될 것이다. 감마분포는  $\alpha$  모수로 형태가 결정되는데 이 모수가 크면 클수록 감마분포는 1주위에 밀도높게 분포하는 형태를 보이고 (그림 2 왼쪽) 추출되는  $r$ 도 1와 매우 유사한 값이 되어 사이트간 진화속도의 이질성이 감소한다. 극단적으로  $\alpha = \infty$ 인 경우 감마분포는 1에서 피크를 보이는 확률밀도함수를 갖게되고 이는 진화속도의 이질성 (RHAS)을 가정하지 않는 모형과 동등한 모형이 된다. 따라서 RHAS를 가정하지 않는 모형은 RHAS를 가정한 모형의 내포모형이다. 위에서 식 (2) – (5)에서 특정 모수를 고정된 값으로 치환시키면 단순한 모형이 되는 것과 비슷한 상황이지만  $\alpha$ 가 유한한 값이 아니라 무한대<sup>15</sup>이므로 비교에 있어 주의가 요구된다.

### 분자계통수 분석에서 자주 사용되는 통계 모형

감마분포(김우철 2021; 그림 9)의 확률밀도함수는 모수  $\alpha, \beta$ 가 주어졌을 때 다음과 같다.

$$f(r|\alpha, \beta) = \frac{\beta^\alpha}{\Gamma(\alpha)} r^{\alpha-1} e^{-\beta r}$$

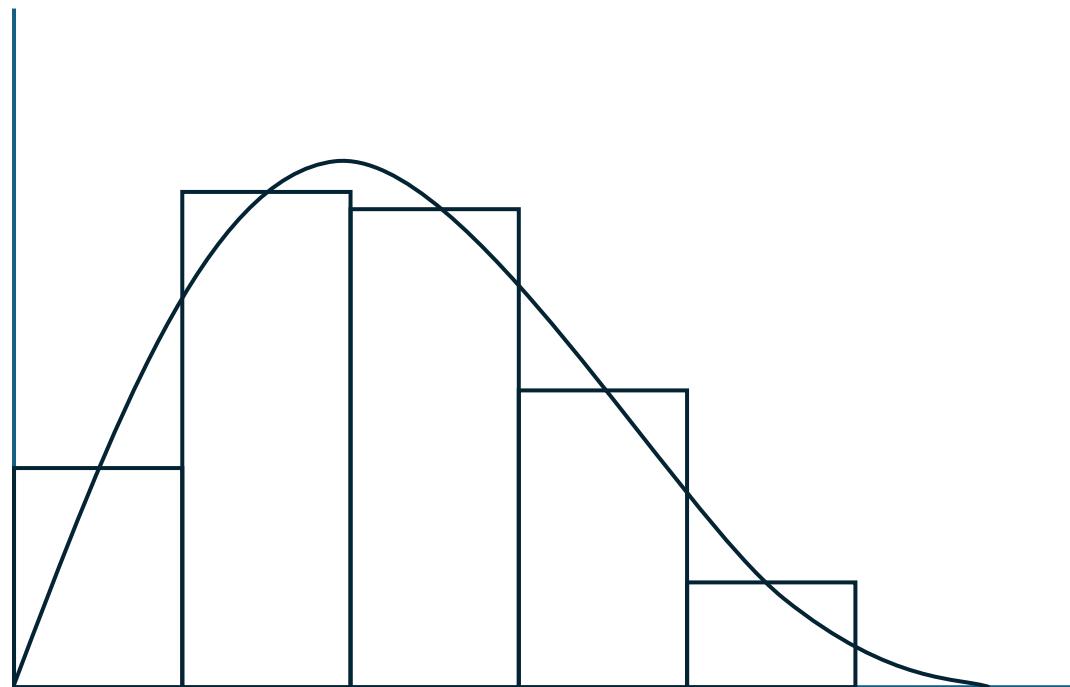
평균과 분산은 다음과 같다.

$$\text{E}[R] = \frac{\alpha}{\beta} \quad (1)$$

$$\text{Var}[R] = \frac{\alpha}{\beta^2} \quad (2)$$

계산시간을 줄이기 위해 연속형 감마분포를 이산형 감마분포로 근사한다.

(예) HKY+G5, GTR+G5 처럼 "+Gk" 형태로 나타냄

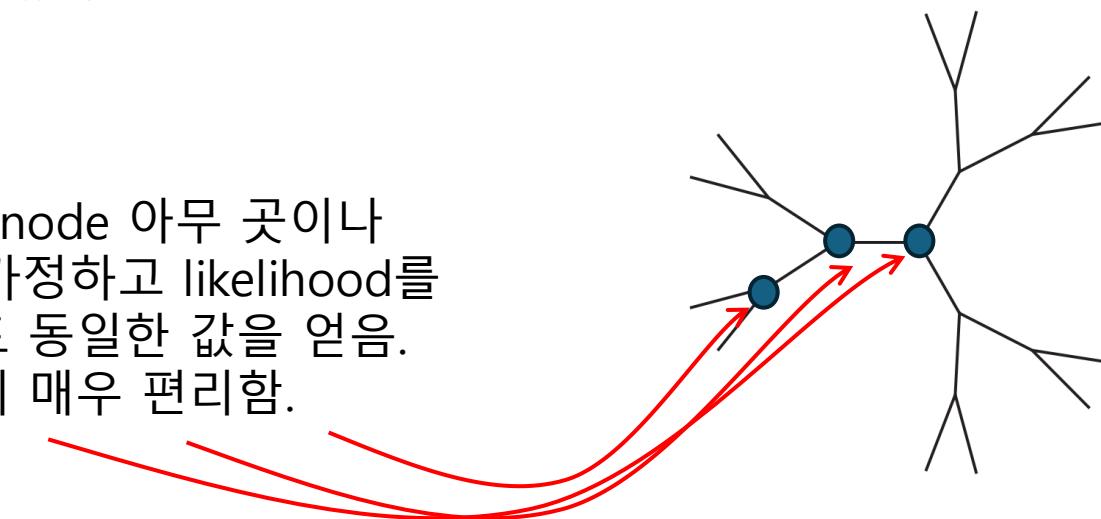


# Time-reversibility 가정

한 가지 주목할만한 가정은

시간가역성(time reversibility)이다. 시간가역성은  $\pi_i R_{ij} = \pi_j R_{ji}$ 라는 성질을 가짐을 의미한다. 시간가역성 가정은 계통수의 가능도를 계산할때 어느 노드를 공동조상으로 지정하여 계산을 해도 동일한 결과를 얻게 하여 모수의 추정을 빠르게 할 수 있는 장점이 있다. GTR모형의 GTR은 General Time Reviersible의 머릿글자로 GTR 모형의 모든 하위모형(내포모형)은 시간가역성을 가정하는 모형이 된다. 이 가정은 어디까지나 계산상의 편리함을 위한 가정일뿐 생물학적인 근거는 희박하다. 시간가역성을 가정하지 않는 모형도 소개되었으나 (Yang 1994a; Bettisworth and Stamatakis 2021) 계산시간 부담이 크기 때문에 많은 데이터 분석에서는 시간가역성을 가정하는 모형이 사용되고 있다.

Internal node 아무 곳이나  
root로 가정하고 likelihood를  
계산해도 동일한 값을 얻음.  
최적화에 매우 편리함.



또 한 가지 염두해 두어야 할 가정은 ‘얼라인 된 각각의 염기서열 사이트는 독립적이고 동일한 분포를 따르는 (independently and identically distributed) 랜덤샘플’이라는 가정이다. 이러한 가정은 여러가지 통계학 이론 적용을 가능하게 하며 특히 bootstrap 방법(Felsenstein 1985)을 적용함에 있어 정당성을 부여 해준다.

전이율행렬에 등장하는 모수(GTR모형의  $a \sim e$  그리고 HKY, TN 모형의  $\kappa$  모수들)가 계통수 전체에 서 동일하다(homogenous)는 것도 널리 사용되는 가정이다. 이러한 가정을 변형시켜 특정생물군에 다른 전이율행렬 모수를 할당하는 연구도 있으나(Galtier and Gouy 1998), 생물간의 전이율 행렬의 차이가 주요관심사가 아닌 경우에는 일반적으로 정상성(stationarity)을 가정하여 가능도를 계산한다.

동일한 진화과정을 따르는 유전자 혹은 파티션 내에서는 재조합(recombination)이 일어나지 않는다는 가정도 진화거리를 계산하는데 중요한 가정이다. 문자계통수의 가능성도 계산에서는 재조합을 고려하지 않기 때문에 재조합이 실제 일어났을 경우 문자진화 거리 추정에 편의(bias)가 발생하게 된다(Schierup and Hein 2000).

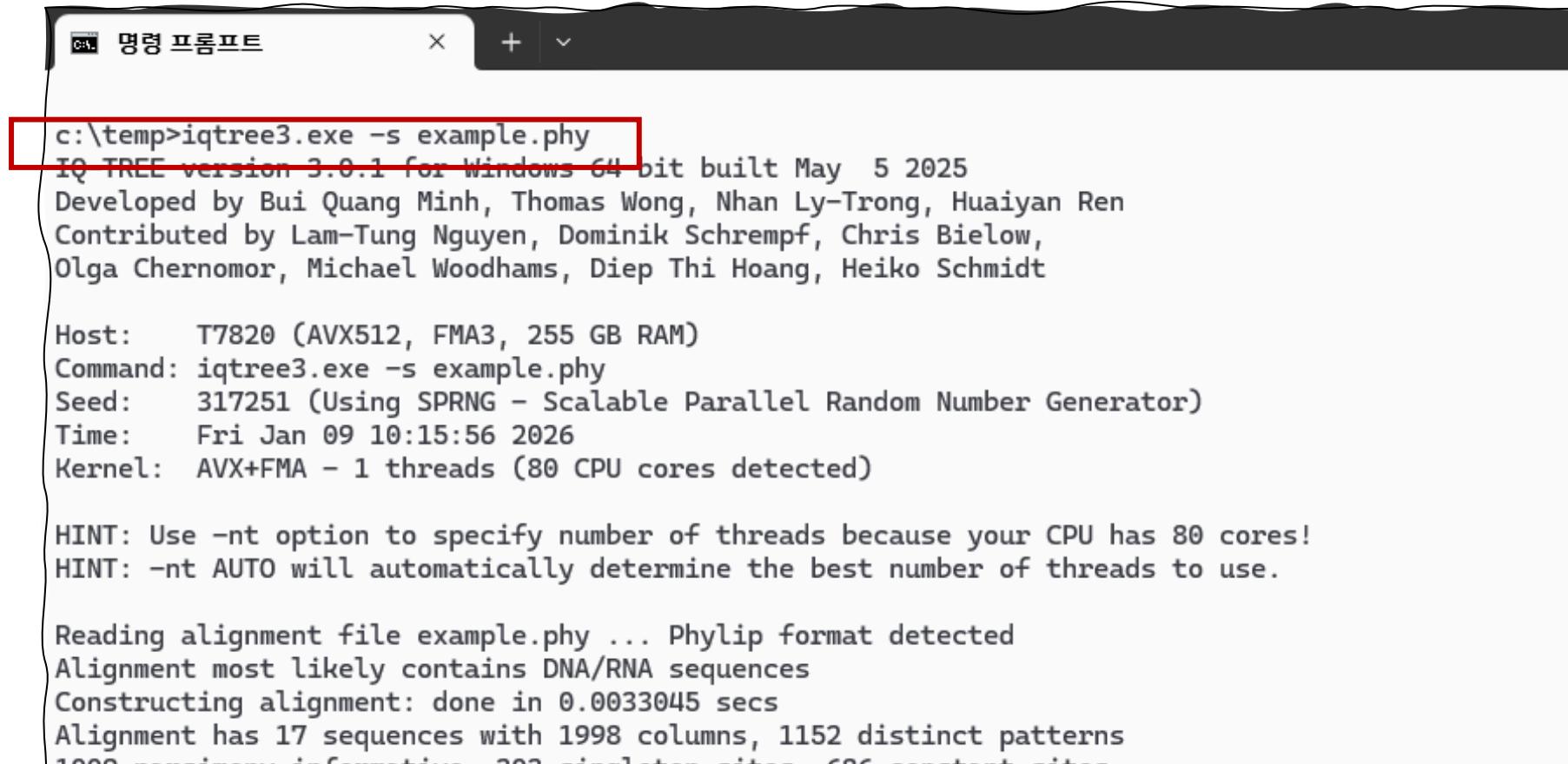
# 실습

예제파일과 IQ-TREE 실행파일(iqtree.exe와 libomp5md.dll) 을 동일한 폴더(C:\temp)에 복사한 후

그림 3과 같이 실행한다. ‘-s’ 옵션은 염기서열 데이터 파일을 지정하는 옵션이다. 염기서열 데이터를 지정하는 것 이외에 아무 옵션도 지정하지 않으면 IQ-TREE는 가능한 모든 염기치환 모형에 대해 AIC, BIC, AICc 스코어를 계산해주고 각각의 기준으로 선택된 최적의 모형을 출력해준다.

```
C:\temp> iqtree.exe -s example.phy
```

그림 3. IG-TREE에 포함된 예제파일로 모형비교를 실행



```
c:\temp>iqtree3.exe -s example.phy
IQ TREE version 3.0.1 for Windows 64 bit built May 5 2025
Developed by Bui Quang Minh, Thomas Wong, Nhan Ly-Trong, Huaiyan Ren
Contributed by Lam-Tung Nguyen, Dominik Schrempf, Chris Bielow,
Olga Chernomor, Michael Woodhams, Diep Thi Hoang, Heiko Schmidt

Host: T7820 (AVX512, FMA3, 255 GB RAM)
Command: iqtree3.exe -s example.phy
Seed: 317251 (Using SPRNG - Scalable Parallel Random Number Generator)
Time: Fri Jan 09 10:15:56 2026
Kernel: AVX+FMA - 1 threads (80 CPU cores detected)

HINT: Use -nt option to specify number of threads because your CPU has 80 cores!
HINT: -nt AUTO will automatically determine the best number of threads to use.

Reading alignment file example.phy ... Phylip format detected
Alignment most likely contains DNA/RNA sequences
Constructing alignment: done in 0.0033045 secs
Alignment has 17 sequences with 1998 columns, 1152 distinct patterns
1000 ambiguous positions, 202 singleton sites, 636 constant sites
```

그림 3업데이트:  
IQ-Tree version 3으  
로 실행한 경우

## 명령 프롬프트

X + ▾

```
Gamma shape alpha: 0.739
Parameters optimization took 1 rounds (0.057 sec)
Time for fast ML tree search: 0.338 seconds
```

NOTE: ModelFinder requires 6 MB RAM!

ModelFinder will test up to 968 DNA models (sample size: 1998 epsilon: 0.100) ...

| No. | Model      | -LnL      | df | AIC       | AICc      | BIC       |
|-----|------------|-----------|----|-----------|-----------|-----------|
| 1   | JC         | 23662.322 | 31 | 47386.644 | 47387.653 | 47560.241 |
| 2   | JC+I       | 22587.297 | 32 | 45238.594 | 45239.668 | 45417.791 |
| 3   | JC+G4      | 22258.086 | 32 | 44580.171 | 44581.246 | 44759.368 |
| 4   | JC+I+G4    | 22245.546 | 33 | 44557.092 | 44558.234 | 44741.889 |
| 5   | JC+R2      | 22280.896 | 33 | 44627.792 | 44628.935 | 44812.589 |
| 6   | JC+R3      | 22234.529 | 35 | 44539.059 | 44540.343 | 44735.056 |
| 7   | JC+R4      | 22234.316 | 37 | 44542.631 | 44544.066 | 44749.828 |
| 14  | JC+I+R2    | 22253.511 | 34 | 44575.021 | 44576.233 | 44765.418 |
| 15  | JC+I+R3    | 22236.280 | 36 | 44544.560 | 44545.919 | 44746.157 |
| 16  | JC+I+R4    | 22236.048 | 38 | 44548.095 | 44549.608 | 44760.891 |
| 26  | JC+I+G4    | 22245.546 | 33 | 44557.092 | 44558.234 | 44741.889 |
| 28  | JC+R3      | 22234.529 | 35 | 44539.059 | 44540.343 | 44735.056 |
| 48  | F81+I+G4   | 22245.390 | 33 | 44556.780 | 44557.923 | 44741.577 |
| 50  | F81+R3     | 22234.423 | 35 | 44538.847 | 44540.131 | 44734.843 |
| 70  | F81+F+I+G4 | 22019.012 | 36 | 44110.023 | 44111.382 | 44311.620 |
| 72  | F81+F+R3   | 22009.710 | 38 | 44095.420 | 44096.933 | 44308.216 |
| 92  | K2P+I+G4   | 21833.754 | 34 | 43735.507 | 43736.720 | 43925.904 |
| 94  | K2P+R3     | 21823.497 | 36 | 43718.994 | 43720.353 | 43920.591 |
| 114 | K2P+I+G4   | 21833.754 | 34 | 43735.507 | 43736.720 | 43925.904 |
| 116 | K2P+R3     | 21823.497 | 36 | 43718.994 | 43720.353 | 43920.591 |
| 136 | HKY+I+G4   | 21833.723 | 34 | 43735.446 | 43736.658 | 43925.842 |
| 138 | HKY+R3     | 21823.375 | 36 | 43718.750 | 43720.109 | 43920.347 |
| 158 | HKY+F+I+G4 | 21475.608 | 37 | 43025.216 | 43026.651 | 43232.413 |

|     |                        |           |    |           |           |           |
|-----|------------------------|-----------|----|-----------|-----------|-----------|
| 796 | TVM <sub>e</sub> +I+G4 | 21407.848 | 37 | 42889.696 | 42891.130 | 43096.892 |
| 798 | TVM <sub>e</sub> +R3   | 21401.157 | 39 | 42880.314 | 42881.907 | 43098.710 |
| 818 | TVM <sub>e</sub> +I+G4 | 21407.848 | 37 | 42889.696 | 42891.130 | 43096.892 |
| 820 | TVM <sub>e</sub> +R3   | 21401.157 | 39 | 42880.314 | 42881.907 | 43098.710 |
| 840 | TVM+I+G4               | 21407.817 | 37 | 42889.635 | 42891.069 | 43096.831 |
| 842 | TVM+R3                 | 21401.104 | 39 | 42880.208 | 42881.801 | 43098.604 |
| 862 | TVM+F+I+G4             | 21287.937 | 40 | 42655.873 | 42657.549 | 42879.869 |
| 864 | TVM+F+R3               | 21279.783 | 42 | 42643.567 | 42645.414 | 42878.762 |
| 884 | SYM+I+G4               | 21306.024 | 38 | 42688.048 | 42689.561 | 42900.844 |
| 886 | SYM+R3                 | 21300.830 | 40 | 42681.661 | 42683.337 | 42905.657 |
| 906 | SYM+I+G4               | 21306.024 | 38 | 42688.048 | 42689.561 | 42900.844 |
| 908 | SYM+R3                 | 21300.830 | 40 | 42681.661 | 42683.337 | 42905.657 |
| 928 | GTR+I+G4               | 21306.021 | 38 | 42688.043 | 42689.556 | 42900.839 |
| 930 | GTR+R3                 | 21300.830 | 40 | 42681.660 | 42683.336 | 42905.656 |
| 950 | GTR+F+I+G4             | 21148.956 | 41 | 42379.912 | 42381.673 | 42609.508 |
| 952 | GTR+F+R3               | 21147.067 | 43 | 42380.134 | 42382.071 | 42620.930 |

```
Akaike Information Criterion: GTR+F+I+G4
Corrected Akaike Information Criterion: GTR+F+I+G4
Bayesian Information Criterion: TIM2+F+I+G4
Best-fit model: TIM2+F+I+G4 chosen according to BIC
```

```
All model information printed to example.phy.model.gz
CPU time for ModelFinder: 7.891 seconds (0h:0m:7s)
Wall-clock time for ModelFinder: 8.829 seconds (0h:0m:8s)
```

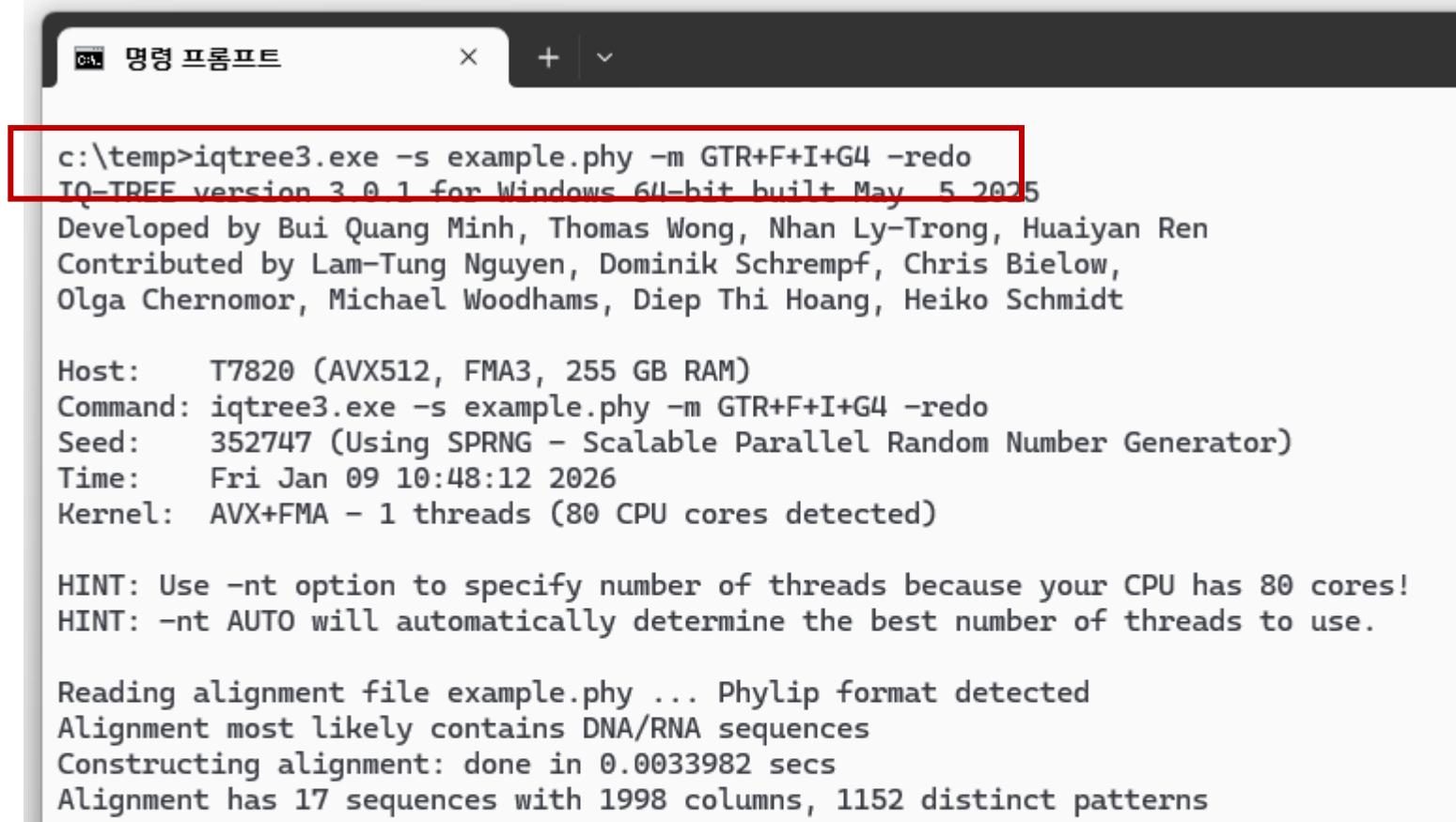
```
NOTE: 2 MR DAM (0 CR) is required!
```

미묘한 설정 차이로  
Version 3의 결과는  
version 1의 결과와 약  
간 다르다. → 큰 문  
제되지 않음

한편 AIC 혹은 AICc 기준으로 최적의 모형으로 판명된 “GTR+F+R3” 모형으로 계통수와 각종 모수 등을 추정해보자. 그림 6처럼 “-m GTR+F+R3” 옵션을 지정하여 프로그램을 실행한다. 위에서 이미 한번 IQ-TREE를 실행시켰기 때문에 여러 결과화일들이 생성되었는데 ‘-redo’ 옵션은 이들 파일에 새로운 결과를 덧씌우도록 하는 옵션이다.

```
C:\temp> iqtree.exe -s example.phy -m GTR+F+R3 -redo
```

그림 6. AIC에 의해 선택된 모형으로 IGTREE를 실행



```
c:\temp>iqtree3.exe -s example.phy -m GTR+F+I+G4 -redo
IQ-TREE version 3.0.1 for Windows 64-bit built May 5 2025
Developed by Bui Quang Minh, Thomas Wong, Nhan Ly-Trong, Huaiyan Ren
Contributed by Lam-Tung Nguyen, Dominik Schrempf, Chris Bielow,
Olga Chernomor, Michael Woodhams, Diep Thi Hoang, Heiko Schmidt

Host: T7820 (AVX512, FMA3, 255 GB RAM)
Command: iqtree3.exe -s example.phy -m GTR+F+I+G4 -redo
Seed: 352747 (Using SPRNG - Scalable Parallel Random Number Generator)
Time: Fri Jan 09 10:48:12 2026
Kernel: AVX+FMA - 1 threads (80 CPU cores detected)

HINT: Use -nt option to specify number of threads because your CPU has 80 cores!
HINT: -nt AUTO will automatically determine the best number of threads to use.

Reading alignment file example.phy ... Phylip format detected
Alignment most likely contains DNA/RNA sequences
Constructing alignment: done in 0.0033982 secs
Alignment has 17 sequences with 1998 columns, 1152 distinct patterns
```

AIC 혹은 AICc 기준으로 최적의 모형으로 판명된 “GTR+F+I+G4” 모형으로 계통수와 각종 모수 등을 추정해보자

그림 3은 생각할 수 있는 모든 모형에 대해 AIC, BIC등의 스코어를 계산한후에 최적의 모형을 선택하는 과정을 보여준다. 사용된 예제화일은 17개 종에 불과하고 염기서열의 길이도 1998염기로 짧은 편이라서 짧은 시간안에 실행이 가능하지만, 데이터의 규모가 큰 경우 모든 모형에 대해서 스코어를 계산하는 것은 비효율적이다. 예컨데 JC, K80 같은 모형은 네 종류의 염기가 모두 같다고 가정하는데 이런 가정은 너무나도 비현실적이어서 거의 대부분의 데이터분석에서는 기각되는 모형이다. 따라서 이렇게 비현실적인 모형을 제외하고, 비교적 현실을 잘 반영한다고 알려진 모형만 한정해서 모형비교를 하는 것이 효율적일 수 있다. 이럴때 아래와 같이 실행할 수 있다. ‘-m MF’는 모형비교를 하는 옵션이고 ‘-mset GTR,HKY,TN ’은 대상이 되는 모형세트를 나열하는 옵션이다. 즉 GTR, HKY, TN 모형과 그 변종들에 대해서만 모형 비교를 한다. 생성된 로그화일 (example.phy.log)을 보면 280여 개의 모형에 대해 정보량

```
C:\temp> iqtree.exe -s example.phy -m MF -mset GTR, HKY, TN -redo
```



그림 7. GTR, HKY, TN 모형에 한정해서 모형선택을 수행함.

```
명령 프롬프트 x + v

c:\temp>iqtree3.exe -seed 1 -s example.phy -m GTR+F+G4 -bb 1000 -redo
IQ TREE version 3.0.1 for Windows 64 bit built May 5 2025
Developed by Bui Quang Minh, Thomas Wong, Nhan Ly-Trong, Huaiyan Ren
Contributed by Lam-Tung Nguyen, Dominik Schrempf, Chris Bielow,
Olga Chernomor, Michael Woodhams, Diep Thi Hoang, Heiko Schmidt

Host: T7820 (AVX512, FMA3, 255 GB RAM)
Command: iqtree3.exe -seed 1 -s example.phy -m GTR+F+G4 -bb 1000 -redo
Seed: 1 (Using SPRNG – Scalable Parallel Random Number Generator)
Time: Thu Jan 15 11:08:14 2026
Kernel: AVX+FMA – 1 threads (80 CPU cores detected)

HINT: Use -nt option to specify number of threads because your CPU has 80 cores!
HINT: -nt AUTO will automatically determine the best number of threads to use.

Reading alignment file example.phy ... Phylip format detected
Alignment most likely contains DNA/RNA sequences
Constructing alignment: done in 0.0028496 secs
Alignment has 17 sequences with 1998 columns, 1152 distinct patterns
1009 parsimony-informative, 303 singleton sites, 686 constant sites
    Gap/Ambiguity  Composition  p-value
Analyzing sequences: done in 0.000103 secs
  1 LngfishAu  0.15%  passed   6.20%
  2 LngfishSA  0.00%  failed   0.62%
  3 LngfishAf  0.05%  failed   1.60%
  4 Frog     0.05%  passed   58.01%
```

모형 비교를 생략하고 일반적으로 계통수 추정에 적용할 수 있는 명령어로 기억해 두자. (bootstrap 확률 까지 같이 계산)

