

Az utóbbi időben az ökológia és az evolúció több területén a kutatók elkezdték megváltoztatni az adatok elemzésének és a biológiai következtetések levonásának módszerét. A hagyományos nullhipotézis-tesztelési megközelítés helyett egy modellválasztásnak nevezett módszert alkalmaznak, amelyben több egymással versengő hipotézist egyszerre vetnek össze az adatokkal. A modellválasztás felhasználható egy egyetlen legjobb modell azonosítására, ezáltal egy adott hipotézis alátámasztására, vagy következtetések levonására egy teljes versengő modellekből álló halmaz súlyozott támogatásának alapján. A modellválasztás széles körben elfogadott és jól kidolgozott bizonyos területeken, leginkább a molekuláris rendszertanban és a jelölés-visszaszállítási elemzésben. Jelenleg azonban egyre több támogatást nyer más területeken is, a molekuláris evolúciótól a tájökológiáig. Itt felvázoljuk a modellválasztás lépéseit, és kiemelünk néhány módszert, amelyeket jelenleg alkalmaznak. Ezzel a megközelítéssel az ökológia és az evolúció kutatói értékes alternatívát találnak a hagyományos nullhipotézis-teszteléshez, különösen akkor, ha több hipotézis is valószínű.

Két alapvető megközelítést alkalmaztak a biológiai következtetések levonására. A domináns paradigma egy nullhipotézis (jellemzően biológiai szempontból kevés jelentőségű) létrehozása, és annak vizsgálata, hogy a hipotézis elvethető-e a megfigyelt adatok fényében. Elutasítás akkor történik, ha a megfigyelt adatokból generált tesztstatisztika túllépi egy tetszőleges valószínűségi küszöbértéket (általában $P < 0,05$), amit a biológiailag jelentősebb alternatív hipotézis hallgatólagos támogatásaként értelmeznek. Ezért a tényleges érdeklődésre számot tartó hipotézis (az alternatív hipotézis) csak abban az értelemben fogadható el, hogy a nullhipotézis elutasításra kerül. Ezzel szemben a modellválasztás lehetőséget kínál arra, hogy következtetéseket vonjunk le több egymással versengő hipotézisből. A modellválasztás a valószínűségelméleten alapul, amely egy robusztus keretrendszer, amely támogatja a legtöbb modern statisztikai megközelítést. Ezenkívül ez a megközelítés gyorsan egyre nagyobb támogatottságra tesz szert az ökológia és az evolúció számos területén, mint a nullhipotézis-tesztelés előnyben részesített alternatívája. A modellválasztás támogatói szerint ennek három fő előnye van. Először is, a gyakorló szakemberek nem korlátozódnak egyetlen modell értékelésére, amelynek szignifikanciáját valamilyen önkényes valószínűségi küszöbértékhez viszonyítva mérik. Ehelyett a versengő modelleket egymással hasonlítják össze azáltal, hogy értékelik az egyes modellek relatív támogatottságát a megfigyelt adatokban. Másodszor, a modellek rangsorolhatók és súlyozhatók, ezáltal kvantitatív mérőszámot adva az egyes versengő hipotézisek relatív támogatottságáról. Harmadszor, azokban az esetekben, amikor a modellek hasonló szintű támogatottságot élveznek az adatokban, a modellek átlagolásával robusztus paraméterbecslések és előrejelzések készíthetők.

A hipotézisek modellekké alakításához meg kell határozni a változókat és ki kell választani azokat a matematikai függvényeket, amelyek leírják azokat a biológiai folyamatokat, amelyek révén ezek a változók összefüggenek egymással (2. keretes szöveg).

Miután meghatároztuk a jelölt modellek halmazát, minden modellt illeszteni kell a megfigyelt adatokhoz. Az elemzés úgy folytatódik, hogy a jelöltkészletben szereplő modelleket a MAXIMUM LIKELIHOOD vagy a LEAST SQUARES módszerrel illesztik a megfigyelt adatokhoz.

A legjobb modell vagy a legjobb modellek kiválasztása

A modellkiválasztást gyakran alkalmazzák annak érdekében, hogy a jelöltek közül kiválasszák azt a modellt, amelyet az adatok leginkább alátámasztanak (ez az úgynevezett „legjobb modell”). Más szavakkal, ez a módszer segítségével lehet meghatározni azt a hipotézist, amelyet a megfigyelések leginkább alátámasztanak. Két alapvetően különböző megközelítést alkalmaznak gyakran az ökológiában és az evolúcióban (3. keretes szöveg). Az egyik egy sor nullhipotézis-teszt alkalmazása, például a LIKELIHOOD RATIO TESTS a filogenetikai elemzésben vagy az F-teszt a többváltozós regressziós elemzésben, a jelöltkészletből kiválasztott modellek párjainak

összehasonlítására. Ez a megközelítés azonban általában a beágyazott modellekre korlátozódik (azaz az egyszerűbb modell a bonyolultabb modell speciális esete), és egyes esetekben nem optimális modellekhez vezet, amelyek a modellek összehasonlításának hierarchikus sorrendjétől függenek [8]. Ezenkívül az ilyen tesztek nem használhatók a különböző modellek relatív támogatásának számszerűsítésére. Ezzel szemben a modellválasztási kritériumok felhasználhatók a versengő modellek rangsorolására és az egyes modellek relatív támogatottságának log-likelihood pontszámok, mint illeszkedés hiányának mérőszáma) és egy kifejezés, amely gyakorlatilag bünteti a nagyobb komplexitású modelleket. Az ökológiában és az evolúcióban gyakran használt két kritérium az AKAIKE INFORMÁCIÓS KRITÉRIUM (AIC) [9] és a SCHWARZ KRITÉRIUM (SC; más néven Bayes-féle információs kritérium vagy BIC) [10]. A modellválasztási kritériumok alkalmazása lehetővé teszi, hogy egyszerre több modellből is következtetéseket lehessen levonni, így a kutatók a hasonlóan alátámasztott modellek „legjobb halmazát” vehetik figyelembe.

Legkisebb négyzetek: egy modellnek az adatokhoz való illesztésének módszere a megfigyelt és a becsült értékek közötti négyzeteskülönbségek minimalizálásával.

Maximum likelihood: egy modellnek az adatokhoz való illesztésének módszere, amelynek során maximalizálják a kifejezett valószínűségi függvényt, amely meghatározza a modell ismeretlen paramétereinek valószínűségét, figyelembe véve a modell formáját és az adatokat. A valószínűségi függvény maximumához kapcsolódó paraméterértékeket az adott modell maximum likelihood becsléseinek nevezik.

Akaike információs kritérium (AIC): a várható Kullback–Leibler-információ [3] becslése, amely a megfigyelt adatokat (teljes valóságot) generáló folyamat közelítésére használt modell alkalmazásával veszik el. **Az AIC két összetevőből áll: a negatív log-valószínűségből, amely a modell és a megfigyelt adatok közötti eltérést méri, és a torzítás korrekciós tényezőből, amely a modell paramétereinek számának függvényében növekszik.**

Akaike-súly: a modell relatív valószínűsége az adatok alapján. Az Akaike-súlyokat a jelölt modellek halmazán normalizálják, hogy összege egy legyen, és valószínűségként értelmezik őket. Az Akaike-súly 1-hez közeli modellt az adatok egyértelműen alátámasztják, míg a megközelítőleg egyenlő súlyú modellek hasonló mértékű alátámasztást élveznek az adatokban. Az Akaike-súlyok alapját képezik a modellek átlagolásának (4. keretes szöveg).

Paraméterbecslés és modellátlagolás

A modellválasztás mögött gyakran az a motiváció áll, hogy becsüljék meg a biológiai szempontból különösen érdekes modellparamétereket (pl. a túlélési arányt a jelölés-visszaszállítási tanulmányokban, vagy az átmenet:transzverzió arányokat a filogenetikai tanulmányokban), vagy hogy azonosítsanak egy modellt, amely felhasználható előrejelzésre. Ha egy modell egyértelműen támogatott, akkor a modellből származó maximális valószínűségi paraméterbecslések vagy előrejelzések használhatók. Azonban néha a megfigyelt adatokban több modell is közel azonos mértékben támogatott. modellek [azaz az Akaike információs kritérium (AIC) értékei szinte egyenlőek], ami megnehezíti az egyik modell másik helyett történő kiválasztását. A MODELLÁTLAGOLÁS megoldást kínál erre a problémára (4. keretes szöveg). A modellátlagolással kapott paraméterbecslések vagy előrejelzések abban az értelemben robusztusak, hogy csökkentik a MODELLVÁLASZTÁSI ELŐÍTÉLETET és figyelembe veszik a MODELLVÁLASZTÁSI BIZONYTALANSÁGOT.