UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Instituto de Ciências Exatas – ICEx
Programa de Pós-graduação em Matemática

Evandro Pereira de Souza

UM ESTUDO DO PROCESSO EVOLUTIVO DE MORAN EM GRAFOS

Belo Horizonte
2019

Evandro Pereira de Souza

UM ESTUDO DO PROCESSO EVOLUTIVO DE MORAN EM GRAFOS

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Matemática da Universidade Federal de Minas Gerais, como requisito parcial para obtenção do título de mestre em matemática.

Orientador: Prof. Dr. Armando Gil Magalhães Neves

Belo Horizonte
2019

Souza, Evandro Pereira de

S729u Um estudo do processo evolutivo de moran em grafos [manuscrito] / Evandro Pereira de Souza. – 2019.
56 f il.

Orientador: Armando Gil Magalhães Neves.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Minas Gerais, Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Matemática.
Referências: f. -55=56-.

1. Matemática – Teses. 2. Cadeias de Markov – Teses. 3. Teoria evolutiva em Grafos – Teses..4.Análise assintótica.– Teses.I.Neves , Armando Gil Magalhães.II. Universidade Federal de Minas Gerais, Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Matemática. III.Título.

CDU 51 (043)

Ficha catalográfica elaborada pela bibliotecária Belkiz Inez Rezende Costa
CRB 6/1510 – Insituto de Ciências Exatas da UFMG

Universidade Federal de Minas Gerais
Departamento de Matemática
Programa de Pós-Graduação em Matemática

FOLHA DE APROVAÇÃO

Um estudo do processo evolutivo de Moran em grafos

EVANDRO PEREIRA DE SOUZA

Dissertação defendida e aprovada pela banca examinadora constituída pelos Senhores:

Armando G. M. Neves

Prof. Armando Gil Magalhães Neves
UFMG

Prof. Carlos Henrique Costa Moreira
UFMG

Eliza Maria Ferreira

Profa. Eliza Maria Ferreira
UFLA

Pós-doc. Jorge Guerra Pires
FIOCRUZ

Belo Horizonte, 14 de março de 2019.

Av. Antônio Carlos, 6627 – Campus Pampulha - Caixa Postal: 702
CEP-31270-901 - Belo Horizonte – Minas Gerais - Fone (31) 3409-5963
e-mail: pgmat@mat.ufmg.br - home page: http://www.mat.ufmg.br/pgmat

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001; e com o apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - Brasil (CNPq).

Como são profundas as riquezas, a sabedoria e o conhecimento de Deus! Como são insondáveis os seus julgamentos, e impenetráveis os seus caminhos! Pois "quem chegou a conhecer a mente de Jeová, ou quem se tornou seu conselheiro"?

– Romanos 11:33, 34.

Tradução do Novo Mundo da Bíblia Sagrada

Agradecimentos

Em primeiro lugar, agradeço ao meu Pai celestial, Jeová, pela vida e por me dar tantas coisas que me faltaria espaço para mencioná-las.

Agradeço aos meus pais e amigos pelas coisas que me ensinaram ao longo da vida e pelos bons momentos que passamos juntos.

Agradeço encarecidamente ao professor Armando G. M. Neves pela amizade e paciência e pelo suporte e aprendizado que me deu ao longo da graduação e do mestrado.

Agradeço à CAPES e ao CNPq pelo apoio financeiro na graduação e no mestrado.

Resumo

Neste trabalho, estudaremos o processo de Moran [10]: um modelo estocástico que foi desenvolvido em 1958 para descrever a evolução temporal da composição genética de uma população finita e haploide com reprodução assexuada supondo que não ocorrem mutações durante a reprodução. Abordaremos duas extensões desse processo: uma na Teoria de Jogos Evolutivos e outra na Teoria Evolutiva em Grafos. No contexto da Teoria de Jogos, Taylor et al [14] estabeleceram uma classificação completa dos cenários evolutivos do processo de Moran com duas estratégias. Vamos estudar brevemente essa classificação e as formas características do gráfico da probabilidade de fixação para cada um dos cenários evolutivos. Analisaremos também o comportamento da probabilidade de fixação quando o tamanho da população tende para o infinito. No contexto da Teoria Evolutiva em Grafos, discutiremos alguns dos resultados publicados em [9] e [2]. Em particular, generalizaremos para o caso de aptidões dependentes da frequência e unificando os casos BD (nascimento-morte) e DB (morte-nascimento) a solução encontrada por Broom e Rychtář para o processo de Moran no grafo estrela. Finalmente, faremos algumas considerações sobre o comportamento assintótico da solução que apresentaremos.

Palavras-chave: Cadeias de Markov, Processos de nascimento e morte, Teoria de Jogos Evolutivos, Teoria Evolutiva em Grafos, Análise assintótica.

Abstract

We discuss the Moran process [10]: a stochastic model developed in 1958 for the genetic evolution of a haploid population with asexual reproduction, assuming no mutations, and fixed finite size. In this work, we deal with two extensions of this process: in Evolutionary Game Theory and in Evolutionary Graph Theory. In the context of game theory, Taylor et al. [14] present a classification of the evolutionary scenarios for the Moran process with two strategies. We briefly study this classification and the characteristic shapes for the graph of the fixation probability for each evolutionary scenario. We also analyze the behavior of fixation probability when the population size tends to infinity. In the context of Evolutionary Graph Theory, we discuss some of the results published in [9] and [2]. In particular, we generalize for the case of frequency dependent fitnesses and unifying the BD (birth-death) and DB (death-birth) cases the solution found by Broom and Rychtář for the Moran process in the star graph. Finally, we also make some considerations on the asymptotic behavior of the solution that we present.

Keywords: Markov chains, Birth death processes, Evolutionary Game Theory, Evolutionary Graph Theory, Assymptotic analysis.

Lista de Símbolos

Sumário

Introdução

Em Biologia, o conceito de Evolução se baseia em três princípios básicos: reprodução, seleção e mutação. Por exemplo, em ambientes sob condições apropriadas, entidades biológicas como vírus, células e organismos multicelulares fazem cópias de si mesmos. Nesse processo, as informações armazenadas em seu material genético (DNA ou RNA), responsáveis por determinar suas características, são repassadas aos seus descendentes. No entanto, esse processo não é perfeito. Mutações podem causar erros na transferência das informações levando ao surgimento de variações de uma mesma característica na população, ou seja, de novos tipos de indivíduos. Além disso, quando tipos diferentes competem entre si pelos recursos do meio, levando uns a se reproduzir com mais frequência do que outros, surge o fenômeno de seleção.

Aos poucos, a noção de evolução passou a ser empregada em outros contextos além da biologia. Ainda assim, a utilização desse conceito continuou se fundamentando nos princípios básicos da evolução genética. Por exemplo, não apenas genes, mas também linguagens, ideias e costumes multiplicam-se, propagam e se alteram ao longo do tempo.

Hoje, evolução não somente é um tema bem difundido em outras áreas da Biologia, como também é objeto de estudo em outros campos da ciência. Por exemplo, em Genética de Populações, uma área ativa da Biologia Matemática, modelos de dinâmica populacional que simulam mutação e seleção são usados para investigar as mudanças que ocorrem na composição genética de uma população.

Um desses modelos é o processo de Moran, proposto pelo matemático australiano Patrick A. P. Moran em 1958 [10]. O processo de Moran é um modelo estocástico que visa descrever a evolução temporal da composição genética de uma população finita e haploide com reprodução assexuada supondo que não ocorrem mutações durante a reprodução. Uma característica presente nesse processo é a deriva genética (*genetic drift*): se a população é composta por dois tipos de indivíduos, após um tempo finito, com probabilidade 1, haverá a fixação de um único tipo na população. Entretanto, esse fenômeno, que é característico de populações finitas e existente mesmo na ausência de seleção, não garante a fixação de um tipo de indivíduo que possua uma aptidão (ou taxa de sucesso reprodutivo) vantajosa.

Em geral, indivíduos mutantes aparecem em uma população em pequeno número, frequentemente um único indivíduo. Mesmo que esse mutante seja mais apto que o resto da população, portanto mais propenso a ser selecionado, ele e seus eventuais descendentes podem ser extintos em decorrência de seu baixo número e flutuações estatísticas. Portanto, não há garantia de que, ao final do processo, a população seja formada apenas por aquele tipo vantajoso. Em virtude disso, somos motivados a estudar uma das principais quantidades do processo de Moran: a probabilidade de fixação.

Desde a sua formulação, o processo de Moran ganhou múltiplas extensões e, juntamente com elas, muitos resultados importantes foram obtidos. Nesse trabalho, vamos apresentar duas extensões principais do processo de Moran: uma na Teoria de Jogos Evolutivos e outra na Teoria Evolutiva em Grafos. Em ambos os contextos, vamos trabalhar com o caso particular em que população é composta por apenas dois tipos de indivíduos.

O processo de Moran foi originalmente proposto para o caso em que as aptidões dos indivíduos dependem do seu tipo, mas não da sua frequência na população. Em 2004, esse processo foi estendido ao contexto da Teoria de Jogos Evolutivos, onde os tipos de indivíduos são interpretados como sendo estratégias e a aptidão deles depende de sua frequência na população [12], [14]. No regime da Teoria de Jogos, Taylor et al. [14] estabeleceram critérios para classificar os cenários evolutivos do processo de Moran em uma população com dois tipos de indivíduos. A princípio, o número de possíveis cenários evolutivos para o processo de Moran em uma população com dois tipos de indivíduos é 16. Porém, um resultado importante provado em [14] mostra que apenas 8 dos 16 cenários são permitidos. Além disso, Taylor et al. chamaram atenção para um fato importante: o tamanho da população desempenha um papel relevante na dinâmica evolutiva do processo de Moran; também, forneceram exemplos que atestam esse fato.

Pouco tempo depois, em 2005, Lieberman, Hauert e Nowak [9] lançaram as bases da Teoria Evolutiva em Grafos ao proporem uma formulação do processo de Moran para populações estruturadas. Nessa abordagem mais geral do processo de Moran, cada indivíduo da população é representado por um único vértice de um grafo e as regras que definem o processo de evolução populacional levam em consideração a estrutura do grafo. Nesse caso, a probabilidade de fixação dependerá tanto da aptidão dos indivíduos, como da estrutura da população. Um resultado importante elucidado em [9] é a caracterização dos grafos para os quais a probabilidade de fixação se exprime como a probabilidade de fixação do processo de Moran em populações não-estruturadas.

Mais tarde, em 2008, Broom e Rychtář [1] investigaram mais a fundo o problema de calcular a probabilidade de fixação em um grafo, dado que um certo conjunto inicial de vértices esteja ocupado por indivíduos de um tipo e os demais por indivíduos de um segundo tipo. Neste caso, a probabilidade de fixação é obtida como solução de um sistema de equações lineares de ordem $2^{|V|}$, onde $|V|$ é a quantidade de vértices no grafo. Broom e Rychtář provam em [2] que, se o grafo possuir simetrias, podemos usá-las para reduzir a ordem do sistema.

Em 2018, de Souza, Ferreira e Neves [4] provaram que o gráfico da função de probabilidade de fixação em cada um dos 8 cenários evolutivos do processo de Moran (cf. [14]) tem uma forma característica. Eles também perceberam que estava faltando em [14] uma análise do que ocorre na dinâmica quando o tamanho da população tende ao infinito e a relação disto com a dinâmica determinística correspondente. Em [4] eles obtêm fórmulas assintóticas para a probabilidade de fixação e deduzem um conjunto de resultados que conciliam o caso determinístico com o estocástico.

No capítulo 1, abordaremos o processo de Moran no contexto da Teoria de Jogos Evolutivos. Na seção 1.1, apresentaremos o formalismo matemático do processo de Moran e calcularemos uma expressão exata da probabilidade de fixação a partir de qualquer estado inicial da população. Ainda na seção 1.1, enunciaremos e demonstraremos o Teorema 2 sobre a classificação dos cenários evolutivos do processo de Moran. Em particular, a demonstração que iremos apresentar é mais simples do que aquela encontrada em [14]. Em seguida, na seção 1.2, discutiremos um resultado que até então não havíamos encontrado na literatura: a caracterização da forma do gráfico da probabilidade de fixação para cada um dos cenários evolutivos do processo de Moran [4]. Por último, na seção 1.3, faremos uma abordagem qualitativa sobre o comportamento dos cenários evolutivos do Teorema 2 quando o tamanho da população tende para o infinito [4].

Já no capítulo 2 discutiremos uma extensão do processo de Moran na Teoria Evolutiva em Grafos. Num certo sentido, o processo de Moran que será estudado no capítulo 1 é um caso particular deste. Após uma breve introdução que faremos na seção 2.1, formularemos na seção 2.2 o processo de Moran em grafos. Neste caso, podemos ainda calcular a probabilidade de fixação para qualquer estado inicial da população, mas para isso, em vez de termos uma fórmula explícita, será necessário resolver um sistema de equações lineares. Na seção 2.3 demonstraremos o Teorema Isotérmico [9], que caracteriza os grafos em que a probabilidade de fixação se exprime como a do processo de Moran em populações não-estruturadas. Ao contrário do que ocorre no caso de populações não-estruturadas, nem sempre é possível resolver explicitamente o sistema que determina a probabilidade de fixação em grafos. Na seção 2.4, discutiremos e ilustraremos um resultado de Broom e Rychtář [2], em que os autores provam, usando ações de grupos e o lema de contagem de órbitas de Burnside, que o número de equações no sistema é da ordem de $2^{|V|}$, onde $|V|$ é a quantidade de vértices no grafo.

O capítulo 3 é devotado ao estudo do processo de Moran no grafo estrela.

Broom e Rychtář [1] determinaram para a estrela uma solução do sistema no caso particular em que as aptidões dos indivíduos independem de sua frequência na população. Na seção 3.1, vamos apresentar uma solução exata que generaliza a encontrada por eles ao caso em que as aptidões dos indivíduos dependem de sua frequência na população. O processo de Moran é um caso particular de uma classe denominada processos de nascimento e morte (BD). Existe ainda uma outra classe chamada de processos de morte e nascimento (DB). Mostraremos que o método de solução a ser apresentado no caso BD continua valendo no caso DB. Por fim, na seção 3.2 determinaremos uma expressão assintótica da solução que encontramos para a estrela no caso DB e faremos algumas considerações da mesma para o caso BD.

Finalizaremos essa dissertação com uma conclusão acerca dos resultados que iremos estudar ao longo do texto. Ao final dela, o leitor encontrará um apêndice, onde fizemos uma breve revisão de álgebra, contendo os resultados que usaremos na seção 2.4.

Capítulo 1

O processo de Moran

1.1 O processo de Moran com aptidões e duas estratégias

Consideremos uma população de tamanho constante igual a N indivíduos. Cada indivíduo dessa população é do tipo A ou do tipo B. Assumiremos que um indivíduo do tipo A interage uma fração do seu tempo com os outros indivíduos do tipo A e a fração restante do seu tempo com indivíduos do tipo B. Ao interagir com os demais, cada indivíduo recebe um pagamento. Esses pagamentos são determinados por meio de uma matriz 2×2, chamada de matriz de pagamentos

$$P = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \tag{1.1}$$

onde a, b, c, d são parâmetros positivos. Na matriz P, o elemento na linha l e coluna k é o pagamento que um indivíduo do tipo l ganha interagindo com um indivíduo do tipo k, onde o tipo A é numerado como 1 e o tipo B, como 2. Uma vez ocorridos esses encontros, contabilizamos o pagamento final de cada indivíduo da população. Esse pagamento final será interpretado como sendo o sucesso reprodutivo daquele indivíduo, isto é, sua aptidão.

Se i é o número de indivíduos que adotam a estratégia A, então $N-i$ serão os que adotam a estratégia B. A fração do tempo que um indivíduo de tipo A interage com outros indivíduos de tipo A é $\frac{i-1}{N-1}$. Com indivíduos de tipo B, a fração de tempo é $\frac{N-i}{N-1}$. Portanto, é natural definir a aptidão dos indivíduos do tipo A como

$$f_i = 1 - w + w\left[a\,\frac{i-1}{N-1} + b\,\frac{N-i}{N-1}\right] \tag{1.2}$$

e, de forma análoga, a aptidão dos indivíduos do tipo B é definida como

$$g_i = 1 - w + w \left[c \, \frac{i}{N-1} + d \, \frac{N-i-1}{N-1} \right]. \tag{1.3}$$

Nas equações acima, o parâmetro $w \in [0,1]$, intitulado *intensidade de seleção*, pesa o quanto a matriz de pagamentos contribui para a aptidão. Em particular, quando $w = 1$, a matriz de pagamentos contribui na totalidade para a aptidão. Por outro lado, se $w = 0$ todos indivíduos, independentemente do tipo, possuem a mesma aptidão. Atendendo a alguns dos resultados que serão utilizados na seção 1.3, assumiremos que w é independente de N.

Observe que, se $a \neq b$ e $c \neq d$, f_i e g_i dependem de i, isto é, da frequência dos indivíduos do tipo A na população. Aptidões dependentes da frequência são a característica distintiva da Teoria de Jogos Evolutiva. Note ainda que, se na matriz P em (1.1), fizermos $a = b$ e $c = d$, as aptidões passarão a ser independentes da frequência, como nos modelos tradicionais da Genética de Populações.

Uma vez estabelecidas as condições acima, vamos definir o processo de Moran como um modelo para estudar as mudanças que ocorrem ao longo do tempo na frequência de indivíduos do tipo A e do tipo B dessa população, com indivíduos morrendo e se reproduzindo.

Supomos que o tempo transcorre de forma discreta. A partir de uma composição inicial arbitrária da população, a cada passo de tempo, realiza-se dentre todos os indivíduos da população dois sorteios independentes. Esses sorteios ocorrem da seguinte maneira. Primeiro, um indivíduo da população é sorteado com probabilidade proporcional à sua aptidão para se reproduzir de forma assexuada. Em seguida, escolhe-se de maneira uniforme um indivíduo para morrer. O descendente do indivíduo que se reproduziu terá o mesmo tipo que seu ancestral, sem possibilidade de mutações, e irá tomar o lugar na população do indivíduo que morreu.

O processo de Moran descrito acima e introduzido em [14], define uma cadeia de Markov $(X_n)_{n=0}^{\infty}$ com espaço de estados $E = \{0, 1, 2, \ldots, N\}$, onde

$$X_n \text{ é o número de indivíduos do tipo } A \text{ no tempo } n.$$

Para uma revisão de cadeias de Markov veja [11].

A cada passo de tempo, o número de indivíduos do tipo A pode aumentar de 1, caso um indivíduo de tipo A seja escolhido para reprodução e um de tipo B para a morte, diminuir de 1, caso um indivíduo B seja sorteado para a reprodução e um A seja sorteado para a morte, ou se manter constante nos demais casos. Em outras palavras, se o número de indivíduos do tipo A é igual a i existe uma probabilidade de transição positiva entre o estado i e os estados $i-1$, i e $i+1$.

Dentro da hipótese já mencionada de que o sorteio do indivíduo para a reprodução é proporcional à aptidão, a probabilidade de que um indivíduo A seja sorteado para se reproduzir é

$$\frac{if_i}{if_i + (N-i)g_i} \ ,$$

e a probabilidade de reprodução de um tipo B é

$$\frac{(N-i)g_i}{if_i + (N-i)g_i} \ .$$

A probabilidades de transição do estado i para o estado $i+1$, levando em conta que um indivíduo do tipo B será sorteado de maneira uniforme para morrer e que esse sorteio independe do sorteio para nascimento, é

$$P(X_{n+1} = i+1 \mid X_n = i) \equiv \alpha_i = \frac{if_i}{if_i + (N-i)g_i}\frac{N-i}{N} \ . \tag{1.4}$$

De maneira semelhante, obtemos

$$P(X_{n+1} = i-1 \mid X_n = i) \equiv \beta_i = \frac{(N-i)g_i}{if_i + (N-i)g_i}\frac{i}{N} \ , \tag{1.5}$$

e

$$P(X_{n+1} = i \mid X_n = i) = 1 - \alpha_i - \beta_i \ .$$

Todas as demais probabilidades de transição são nulas.

Definindo t_{ij} como sendo a probabilidade da transição do estado j para o estado i, obtemos a matriz de transição T abaixo. Note que T é tridiagonal.

$$T = \begin{pmatrix}
1 & \beta_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1-\alpha_1-\beta_1 & \beta_2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
0 & \alpha_1 & 1-\alpha_2-\beta_2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & \alpha_2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & \dots & 1-\alpha_{N-2}-\beta_{N-2} & \beta_{N-1} & 0 \\
0 & 0 & 0 & \dots & \alpha_{N-2} & 1-\alpha_{N-1}-\beta_{N-1} & 0 \\
0 & 0 & 0 & \dots & 0 & \alpha_{N-1} & 1
\end{pmatrix} . \tag{1.6}$$

Os estados 0 e N são chamados de absorventes, pois uma vez que a cadeia entre em um desses estados, permanece nele para sempre. Os demais estados são chamados de transientes, pois existe uma probabilidade não nula de nunca retornar a eles.

Um resultado importante sobre cadeias de Markov com espaço de estados finito é o seguinte:

Teorema 1. *Seja $(X_n)_{n=0}^{\infty}$ uma cadeia de Markov com espaço de estados E finito. Suponha que haja em E um subconjunto não vazio de estados absorventes e que os demais estados sejam todos transientes. Então, com probabilidade 1, serão absorvidas todas as trajetórias que começam em um estado transiente.*

O leitor poderá consultar a demonstração desse teorema em [11].

O processo de Moran que definimos anteriormente atende às hipóteses do teorema acima, uma vez que há dois estados absorventes e todos os demais $N-1$ são transientes. Portanto, com probabilidade 1 todas as trajetórias serão absorvidas no estado 0 ou N. A seguir, deduziremos para o processo de Moran, uma fórmula explícita para as probabilidades de absorção da cadeia nos estados 0 e N como função do número inicial de indivíduos do tipo A.

Seja π_i a probabilidade de absorção da cadeia no estado N (isto é, fixação do tipo A) dado que o estado inicial é i indivíduos de tipo A.

Note que
$$\pi_0 = 0 \ \text{ e } \ \pi_N = 1 \ . \tag{1.7}$$

No tempo 0 as trajetórias que contribuem para o cálculo da probabilidade π_i se encontram no estado i e, com probabilidade t_{ji}, estarão no estado j no tempo 1. E uma vez no estado j, a probabilidade de serem absorvidas em N é π_j. Encontramos uma fórmula recursiva para π_i somando as probabilidades de transição do estado i no tempo 0 para o estado j no tempo 1, multiplicadas pelas respectivas probabilidades de absorção no estado N. Ou seja, temos $\pi_i = \sum_{j=0}^{N} t_{ji}\pi_j, \ i = 1, 2, \ldots, N-1$.

Usando a matriz T em (1.6) e levando em conta as condições de contorno (1.7), obtemos o sistema de equações lineares

$$\begin{aligned} &\pi_0 = 0 \\ &\pi_i = \beta_i \ \ \pi_{i-1} + (1-\alpha_i-\beta_i)\ \pi_i + \alpha_i \ \pi_{i+1}, \quad i = 1, 2, \ldots, N-1 \\ &\pi_N = 1 \end{aligned} \tag{1.8}$$

que pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} &\pi_0 = 0 \\ &\alpha_i \ (\pi_{i+1}-\pi_i) - \beta_i \ (\pi_i - \pi_{i-1}) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, N-1. \\ &\pi_N = 1 \end{aligned} \tag{1.9}$$

A fim de nos auxiliar na tarefa de encontrar uma solução $\pi = (\pi_0, \pi_1, \ldots, \pi_N)$ do sistema (1.9), definimos a variável d_i, que nada mais é que a derivada discreta de π_i
$$d_i = \pi_i - \pi_{i-1}. \tag{1.10}$$

Assim, as equações $\alpha_i\ (\pi_{i+1} - \pi_i) - \beta_i\ (\pi_i - \pi_{i-1}) = 0,\ i = 1, 2, \ldots, N-1$ que aparecem em (1.9) podem ser reescritas como

$$d_{i+1} = r_i^{-1} d_i \ , \tag{1.11}$$

$i = 1, 2, \ldots, N-1$, onde

$$r_i = \frac{\alpha_i}{\beta_i} = \frac{f_i}{g_i} \tag{1.12}$$

é a aptidão relativa dos indivíduos de tipo A com relação aos do tipo B. Usando a condição $\pi_0 = 0$ e resolvendo (1.11), obtemos

$$\begin{array}{rcl} d_1 & = & \pi_1 \\ d_2 & = & r_1^{-1}\pi_1 \\ d_3 & = & r_2^{-1} r_1^{-1}\pi_1 \\ & \vdots & \\ d_N & = & \left(\prod_{k=1}^{N-1} r_k^{-1}\right)\pi_1 \end{array} \tag{1.13}$$

Note que, pela definição de d_i tem-se

$$\sum_{i=1}^{N} d_i = \sum_{i=1}^{N} (\pi_i - \pi_{i-1}) = \pi_N - \pi_0 = 1 \ ,$$

onde usamos (1.7). Por outro lado, somando os lados direitos das igualdades em (1.13) obtemos

$$\sum_{i=1}^{N} d_i = \left(1 + \sum_{j=1}^{N-1} \prod_{k=1}^{j} r_k^{-1}\right) \pi_1.$$

Igualando as duas expressões para $\sum_{i=1}^{N} d_i$ obtemos

$$\pi_1 = d_1 = \frac{1}{1 + \sum_{j=1}^{N-1} \prod_{k=1}^{j} r_k^{-1}} \ . \tag{1.14}$$

Para obtermos π_i para $i = 2, 3, \ldots, N-1$ reescrevemos os π_i em termos dos d_i e usamos (1.13), obtendo assim

$$\begin{gathered} \pi_2 = \pi_1 + d_2 = (1 + r_1^{-1})\ \pi_1, \\ \pi_3 = \pi_2 + d_3 = (1 + r_1^{-1} + r_1^{-1} r_2^{-1})\ \pi_1 \ , \\ \vdots \end{gathered}$$

que em geral é

$$\pi_i = \left(1 + \sum_{j=1}^{i-1} \prod_{k=1}^{j} r_k^{-1}\right) \pi_1 \ . \tag{1.15}$$

Finalmente, substituindo (1.14) em (1.15) obtemos

$$\pi_i = \frac{1 + \sum_{j=1}^{i-1} \prod_{k=1}^{j} r_k^{-1}}{1 + \sum_{j=1}^{N-1} \prod_{k=1}^{j} r_k^{-1}} \tag{1.16}$$

que vale para $i = 2, 3, \ldots, N-1$ e, junto com (1.7) e (1.14), determinam a solução do sistema (1.9).

Se, ao invés da probabilidade de fixação do tipo A, estivermos interessados na probabilidade de fixação do tipo B, consideramos a probabilidade $\overline{\pi}_i$ de fixação do tipo B quando o número inicial deles na população é i

$$\overline{\pi}_i = 1 - \pi_{N-i} \ . \tag{1.17}$$

Embora explícitas, as fórmulas (1.14) e (1.16) não são totalmente transparentes, pois é difícil entender o comportamento das somas de produtos no numerador e denominador. No entanto, para alguns casos particularmente interessantes podemos simplificá-las. Por exemplo, o processo de Moran neutro, em que tanto o sorteio de morte quanto o de reprodução são uniformes. Este importante caso particular é descrito pela matriz de pagamentos

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Nesse caso, $r_k = 1$ para todo k, e obtemos imediatamente

$$\pi_i = \frac{i}{N} \ , \tag{1.18}$$

para $i = 0, 1, \ldots, N$. No caso do processo de Moran com aptidões independentes da frequência, usamos

$$P = \begin{pmatrix} r & r \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \ ,$$

onde r é uma constante positiva que representa a aptidão relativa dos indivíduos A com relação aos B. Nesse caso, temos $r_k = r$ para todo k. Assim, usando a fórmula para a soma de um número finito de termos de uma progressão geométrica, obtemos de (1.16) que

$$\pi_i = \frac{1 - (\frac{1}{r})^i}{1 - (\frac{1}{r})^N} \ , \tag{1.19}$$

para $i = 1, \ldots, N$.

Uma quantidade de muito interesse em Genética de Populações é a probabilidade de fixação $\rho_A \equiv \pi_1$ de um único indivíduo do tipo A em uma população de

$N-1$ indivíduos do tipo B, e também seu análogo $\rho_B \equiv 1 - \pi_{N-1}$. Para o caso do processo de Moran neutro temos, por (1.18), que

$$\rho_A = \rho_B = \frac{1}{N}. \tag{1.20}$$

Em [14] os cenários evolutivos do processo de Moran com duas estratégias são classificados usando os sinais de $r_1 - 1, r_{N-1} - 1, \rho_A - 1/N$ e $\rho_B - 1/N$. Os sinais de $r_1 - 1$ e $r_{N-1} - 1$ caracterizam o que se chama a dinâmica de invasão, enquanto que os sinais de $\rho_A - 1/N$ e $\rho_B - 1/N$ caracterizam o que se conhece por dinâmica de substituição. Por exemplo, $r_1 > 1$ significa que um indivíduo do tipo A em uma população de $N-1$ indivíduos do tipo B, é mais apto que os indivíduos do tipo B. Neste caso, dizemos que a seleção natural favorece a invasão da população de indivíduos do tipo B por um indivíduo do tipo A. A notação usada para essa situação é $B \rightarrow A$.

Além de comparar a aptidão de um único indivíduo do tipo A com a do resto da população, compararemos também a probabilidade de fixação do indivíduo do tipo A com a probabilidade de fixação (1.20) do caso neutro. Assim, se $\rho_A > 1/N$, dizemos que a seleção natural favorece a substituição de B por A, e denotamos isso por $B \Rightarrow A$.

Como notação para os cenários evolutivos, seguindo [14], usaremos setas simples superiores para nos referir à dinâmica de invasão e setas duplas inferiores para nos referir à dinâmica de substituição. Por exemplo, o caso $r_1 > 1, r_{N-1} < 1, \rho_A > 1/N, \rho_B < 1/N$, isto é, a seleção favorece a invasão de B por A e a invasão de A por B, favorece a substituição de B por A, mas se opõe à substituição de A por B é denotado por $B \overset{\rightarrow}{\Rightarrow}\overset{\leftarrow}{\Rightarrow} A$.

Cada uma das 16 combinações possíveis de sinais para $r_1 - 1, r_{N-1} - 1, \rho_A - 1/N$ e $\rho_B - 1/N$ é definida como um cenário evolutivo para o processo de Moran com duas estratégias. No entanto, como o resultado a seguir mostra, apenas 8 cenários evolutivos realmente ocorrem [14].

Teorema 2. *Dentre os 16 possíveis cenários evolutivos para o processo de Moran com duas estratégias, apenas 8 podem ocorrer:*

$$B \overset{\rightarrow}{\Rightarrow}\overset{\rightarrow}{\Rightarrow} A \quad e \quad B \overset{\leftarrow}{\Leftarrow}\overset{\leftarrow}{\Leftarrow} A, \tag{1.21}$$

$$B \overset{\rightarrow}{\Rightarrow}\overset{\leftarrow}{\Rightarrow} A, \; B \overset{\rightarrow}{\Leftarrow}\overset{\leftarrow}{\Leftarrow} A \quad e \quad B \overset{\rightarrow}{\Rightarrow}\overset{\leftarrow}{\Leftarrow} A, \tag{1.22}$$

e finalmente

$$B \overset{\leftarrow}{\Rightarrow}\overset{\rightarrow}{\Rightarrow} A, \; B \overset{\leftarrow}{\Leftarrow}\overset{\rightarrow}{\Leftarrow} A \quad e \quad B \overset{\leftarrow}{\Leftarrow}\overset{\rightarrow}{\Rightarrow} A. \tag{1.23}$$

Para demonstrar o Teorema 2 faremos uso do seguinte lema:

Lema 3. *A aptidão relativa definida em (1.12) é uma função monótona de i ou é independente de i.*

Deixamos a cargo do leitor a demonstração desse resultado. Para obtê-lo, bastar derivar (1.12) com respeito a i e notar que o sinal da derivada é independente de i.

A seguir, faremos a prova do Teorema 2 exatamente como [4], que emprega argumentos mais simples que [14].

Demonstração. Inicialmente, provaremos o segundo cenário em (1.21). Mostraremos que se a dinâmica de invasão é $B \leftarrow\leftarrow A$, então necessariamente devemos ter $\rho_A < \frac{1}{N}$ e $\rho_B > \frac{1}{N}$. As setas simples, neste caso, significam que r_1 e r_{N-1} são ambos menores que 1. Pelo Lema 3, devemos ter $r_i < 1$ para todo i. Isso implica que $\sum_{j=1}^{N-1} \prod_{i=1}^{j} r_i^{-1} > N - 1$. Como $\rho_A = \pi_1$, a fórmula (1.14) implica que $\rho_A < 1/N$.

Uma fórmula para ρ_B análoga a (1.14) é

$$\rho_B = \frac{1}{1 + \sum_{j=1}^{N-1} \prod_{i=1}^{j} r_{N-i}}.$$

Podemos usar um raciocínio similar ao que foi feito acima para mostrar que, como r_i é menor que 1 para todo i, isso implica $\rho_B > 1/N$. Isso prova que, se a dinâmica de invasão é dada por $B \leftarrow\leftarrow A$, então o único cenário possível é $B \overset{\leftarrow}{\Leftarrow}\overset{\leftarrow}{\Leftarrow} A$. Uma demostração análoga vale para o primeiro cenário em (1.21).

Vamos nos concentrar agora nos cenários em (1.22), nos quais as setas simples significam $r_1 > 1 > r_{N-1}$. Neste caso, pelo Lema 3, r_i é decrescente. Seja

$$\ell \ \equiv \max\{j; r_j \geq 1\} \ \text{ e } \ \ell' \ \equiv \max\{j; r_{N-j} \leq 1\}.$$

É claro que $1 \leq \ell \leq N - 2$ e o mesmo vale para ℓ'. Definimos recursivamente H_i como

$$H_1 = \frac{1}{r_1} \ \text{ e } \ H_i = \frac{1}{r_i} H_{i-1}, \ \text{ para } \ i = 1, 2, \ldots, N-1.$$

Analogamente, definimos H'_i como

$$H'_1 = r_{N-1} \ \text{ e } \ H'_i = r_{N-i} H'_i, \ \text{ para } \ i = 1, 2, \ldots, N-1.$$

Note que as sequências $H_1, H_2, \ldots, H_\ell$ e $H'_1, H'_2, \ldots, H'_{\ell'}$, são decrescentes, enquanto que as sequências $H_\ell, H_{\ell+1}, \ldots, H_{N-1}$ e $H'_{\ell'}, H'_{\ell'+1}, \ldots, H'_{N-1}$ são crescentes. Observe também que $H_1 < 1$, $H'_1 < 1$, mas não sabemos se H_{N-1} e H'_{N-1} são maiores, menores ou iguais a 1. Se $H_i > 1$ para algum i, então devemos ter $H_{N-1} > 1$.

Se, por outro lado, $H_{N-1} \leq 1$, então $H_i \leq 1$ para todo i. As mesmas conclusões são válidas para H'_i. Além disso, vale a seguinte relação

$$H_{N-1} = \frac{1}{H'_{N-1}}. \tag{1.24}$$

Reescrevendo ρ_A e ρ_B respectivamente em termos de H_i e H'_i temos

$$\rho_A = \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^{N-1} H_i} \quad \text{e} \quad \rho_B = \frac{1}{1 + \sum_{i=1}^{N-1} H'_i}. \tag{1.25}$$

Suponha que $\rho_A < 1/N$. Então $1/\rho_A - 1 = \sum_{i=1}^{N-1} H_i > N - 1$ e devemos ter $H_i > 1$ para algum i. Conforme já observamos, isso implica que $H_{N-1} > 1$. Pela relação (1.24) concluímos que $H'_{N-1} < 1$ e portanto $H'_i < 1$ para todo i. Isso implica $\sum_{i=1}^{N-1} H'_i < N - 1$ e, pela fórmula para ρ_B em (1.25), concluímos que $\rho_B > 1/N$. Podemos aplicar um raciocínio inteiramente análogo ao anterior para mostrar que se $r_1 > 1 > r_{N-1}$ e $\rho_B < 1/N$, então $\rho_A > 1/N$.

Resulta imediatamente dos argumentos acima que, as desigualdades $\rho_A < 1/N$ e $\rho_B < 1/N$ não podem ser ambas verdadeiras, se $r_1 > 1 > r_{N-1}$. Em símbolos, isso significa que o cenário $B \overset{\rightarrow}{\Leftarrow}\overset{\leftarrow}{\Rightarrow} A$ não é permitido. Isso prova a afirmação feita sobre os cenários em (1.22).

A afirmação sobre os cenários (1.23) pode ser provada por argumentos análogos. Donde, resultará também que, se $r_1 < 1 < r_{N-1}$, então as desigualdades $\rho_A > 1/N$ e $\rho_B > 1/N$ não podem ser ambas verdadeiras. Em símbolos, o cenário $B \overset{\leftarrow}{\Rightarrow}\overset{\rightarrow}{\Leftarrow} A$ não é permitido. $\square$

Na seção 1.2, daremos exemplos de matrizes de pagamento que comprovam que os cenários evolutivos que não são proibidos pelo Teorema 2 podem ocorrer.

1.2 Forma dos gráficos da probabilidade de fixação

A classificação dos cenários evolutivos do processo de Moran descritos no Teorema 2 baseia-se na comparação de π_1 e π_{N-1} com a probabilidade de fixação do caso neutro. Um resultado provado em [4] é que, para cada possível atribuição de sinais a $r_1 - 1$ e $r_{N-1} - 1$, atribuindo apenas valores a π_1 e a π_{N-1}, podemos estimar os demais valores de π_i comparando-os com os correspondentes valores da probabilidade de fixação do caso neutro (1.18). Uma consequência importante disso, é que para cada um dos cenários evolutivos que aparecem no Teorema 2, podemos determinar uma forma característica para o gráfico da probabilidade de fixação π_i em função da fração inicial de indivíduos na população.

Considere o cenário $B \overset{\leftarrow}{\Leftarrow}\overset{\leftarrow}{\Leftarrow} A$, isto é, o caso em que B domina A tanto do ponto de vista da invasão quanto do ponto de vista da substituição. O Lema 3 garante que, se $r_1 < 1$ e $r_{N-1} < 1$, então $r_i < 1$ para todo i. Isso quer dizer que B é mais apto do que A não importa a frequência de A na população. Mas isso não significa automaticamente que a probabilidade de fixação de A é menor do que a do caso neutro (1.18) para todas as frequências de A. As setas duplas em $B \Leftarrow\Leftarrow A$ significam que $\rho_A < 1/N$ e $\rho_B < 1/N$, e isso nos diz que para $i = 1$ e $i = N - 1$ temos que $\pi_i < i/N$. A proposição a seguir mostra que, para esse caso, a desigualdade $\pi_i < i/N$ também vale para os demais valores de i.

Proposição 4. *No cenário $B \overset{\leftarrow}{\Leftarrow}\overset{\leftarrow}{\Leftarrow} A$, tem-se que $\pi_i < i/N$ para todo $i \in \{1, 2, \ldots, N-1\}$. Além disso, a derivada discreta (1.10) é uma função crescente de i.*

A demonstração da Proposição 4, bem como das demais que aparecerão nessa seção, será omitida aqui. O leitor poderá consultá-las em [4].

Usando a probabilidade $\overline{\pi}_i$ de fixação do tipo B, pode-se provar um resultado similar à proposição 4 para o cenário $B \overset{\rightarrow}{\Rightarrow}\overset{\rightarrow}{\Rightarrow} A$:

Proposição 5. *No cenário $B \overset{\rightarrow}{\Rightarrow}\overset{\rightarrow}{\Rightarrow} A$, tem-se que $\pi_i > i/N$ para todo $i \in \{1, 2, \ldots, N-1\}$. Além disso, a derivada discreta (1.10) é uma função decrescente de i.*

Para os três cenários evolutivos (1.22), o gráfico de π_i é caracterizado pela seguinte proposição:

Proposição 6. *Nos cenários em que a dinâmica de invasão é $B \rightarrow\leftarrow A$ existe um único $i^* \in \{1, 2, \ldots, N-1\}$ tal que $d_{i+1} < d_i$ para $i < i^*$, $d_{i+1} > d_i$ para $i > i^*$ e $d_{i^*+1} \geq d_{i^*}$. Além disso,*

(a) no cenário $B \overset{\rightarrow}{\Rightarrow}\overset{\leftarrow}{\Leftarrow} A$ existe um único $\bar{i} \in \{1, 2, \ldots, N-2\}$ tal que $\pi_i \geq i/N$ para $i < \bar{i}$ e $\pi_i < i/N$ para $i \geq \bar{i}$.

(b) nos cenários $B \overset{\rightarrow}{\Rightarrow}\overset{\leftarrow}{\Rightarrow} A$ e $B \overset{\rightarrow}{\Leftarrow}\overset{\leftarrow}{\Leftarrow} A$ temos respectivamente que $\pi_i > i/N$ e $\pi_i < i/N$ para todo $i \in \{1, 2, \ldots, N-1\}$.

A primeira parte da Proposição 6 estabelece para cada um dos três cenários evolutivos (1.22) do Teorema 2, a existência e unicidade de um ponto i^* onde a derivada discreta muda seu comportamento de negativa para positiva. Podemos encarar i^* como um ponto de inflexão. Por outro lado, o ponto $\bar{i}$ (que também é único) existe somente no cenário $B \overset{\rightarrow}{\Rightarrow}\overset{\leftarrow}{\Leftarrow} A$.

Para os cenários evolutivos (1.23) do Teorema 2 temos a seguinte caracterização (análoga à Proposição 6) para a forma dos gráficos de π_i

Proposição 7. *Nos cenários em que a dinâmica de invasão é* $B \leftarrow\rightarrow A$ *existe um único* $i^* \in \{1, 2, \ldots, N-1\}$ *tal que* $d_{i+1} > d_i$ *para* $i < i^*$, $d_{i+1} < d_i$ *para* $i > i^*$ *e* $d_{i^*+1} \leq d_{i^*}$. *Além disso,*

(a) no cenário $B \overset{\leftarrow}{\Leftarrow}\overset{\rightarrow}{\Rightarrow} A$ *existe um único* $\bar{i} \in \{1, 2, \ldots, N-2\}$ *tal que* $\pi_i \leq i/N$ *para* $i < \bar{i}$ *e* $\pi_i > i/N$ *para* $i \geq \bar{i}$.

(b) nos cenários $B \overset{\leftarrow}{\Rightarrow}\overset{\rightarrow}{\Rightarrow} A$ *e* $B \overset{\leftarrow}{\Leftarrow}\overset{\rightarrow}{\Leftarrow} A$ *temos respectivamente que* $\pi_i > i/N$ *e* $\pi_i < i/N$ *para todo* $i \in \{1, 2, \ldots, N-1\}$.

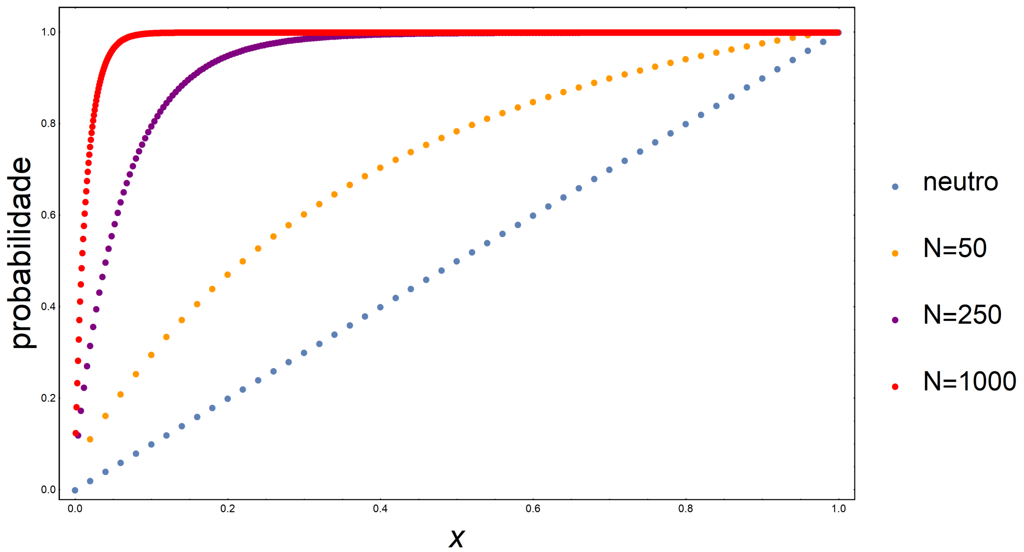

Figura 1.1: Gráfico da probabilidade de fixação de A em função da fração inicial $x = i/N$ de indivíduos A na população para alguns valores de N. O gráfico do caso neutro $\pi_i = i/N$ está sendo exibido apenas para comparação. Os elementos da matriz de pagamentos são $a = 2.07$, $b = 1.07$, $c = 2$, $d = 1$. Para $N = 50$, $N = 250$ e $N = 1000$ verifica-se que $r_1 > 1$ e $r_{N-1} > 1$. As condições $\rho_A > 1/N$ e $\rho_B < 1/N$ também são satisfeitas para esses valores, de modo que o cenário evolutivo é $B \overset{\rightarrow}{\Rightarrow}\overset{\rightarrow}{\Rightarrow} A$.

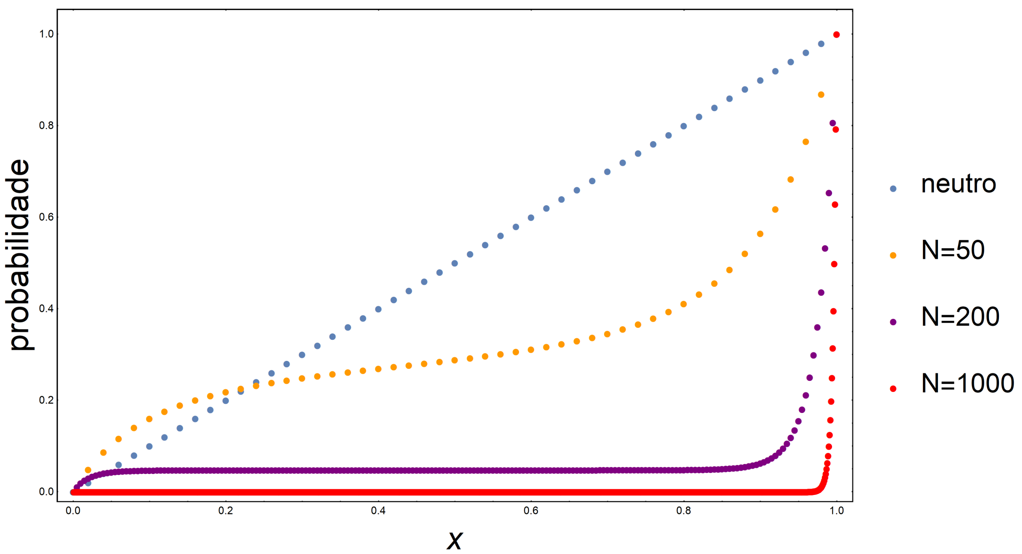

Figura 1.2: Gráfico da probabilidade de fixação de A em função da fração inicial $x = i/N$ de A indivíduos na população para alguns valores de N. O gráfico do caso neutro $\pi_i = i/N$ está sendo exibido apenas para comparação. Os elementos da matriz de pagamentos são $a = 1.9,\ b = 1.7,\ c = 2.4,\ d = 1.3$. Para $N = 50$, $N = 200$ e $N = 1000$ pode-se facilmente ver que $r_1 > 1$ e $r_{N-1} < 1$. Para $N = 50$ ou $N = 200$ temos que $\rho_A > 1/N$ e $\rho_B > 1/N$ e o cenário evolutivo é $B \rightrightarrows\leftleftarrows A$. Mas para $N = 1000$ temos que $\rho_A < 1/N$ e $\rho_B > 1/N$, de modo que o cenário evolutivo é $B \rightleftarrows\leftleftarrows A$.

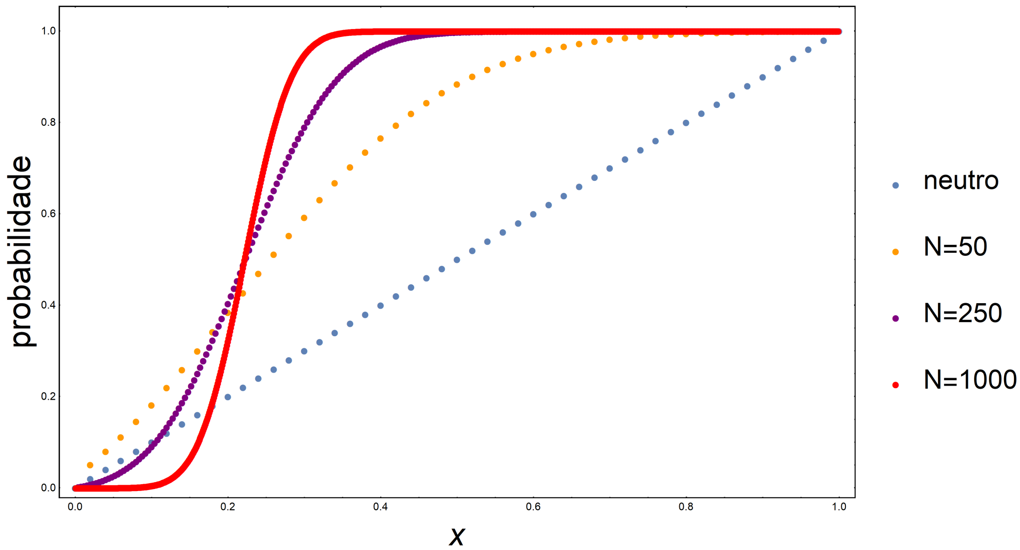

Figura 1.3: Gráfico da probabilidade de fixação de A em função da fração inicial $x = i/N$ de A indivíduos na população para alguns valores de N. O gráfico do caso neutro $\pi_i = i/N$ está sendo exibido apenas para comparação. Os elementos da matriz de pagamentos são $a = 2.9$, $b = 1.8$, $c = 2.2$, $d = 2$. Para os referidos valores de N verifica-se que $r_1 < 1$ e $r_{N-1} > 1$. Para $N = 50$ temos que $\rho_A > 1/N$ e $\rho_B < 1/N$ e o cenário evolutivo é $B \overset{\leftrightarrows}{\Rightarrow}\overset{\rightarrow}{\Rightarrow} A$. Mas para $N = 250$ ou $N = 1000$ temos que $\rho_A < 1/N$ e $\rho_B < 1/N$, de modo que o cenário evolutivo é $B \overset{\leftarrow}{\Leftarrow}\overset{\rightarrow}{\Rightarrow} A$.

1.3 Comportamento assintótico da probabilidade de fixação

A partir de agora estudaremos de maneira qualitativa como se comportam as probabilidades de fixação nos cenários evolutivos do Teorema 2 quando o tamanho da população N tende para o infinito. Mais precisamente, supondo que a matriz de pagamentos e o parâmetro w sejam mantidos fixos, estudaremos o comportamento assintótico da probabilidade de fixação π_i quando ambos o tamanho da população e o número de indivíduos do tipo A tendem para o infinito e, admitindo-se que a fração $x = i/N$ seja mantida fixa.

No artigo [4], usando ferramentas como a fórmula de Euler-Maclaurin e uma versão para somas do método de Laplace para avaliação assintótica de integrais, foram provados teoremas que justificam a análise qualitativa aqui apresentada. Como a apresentação destas ferramentas nos levaria longe demais do assunto central dessa dissertação, optamos por colocar aqui somente a ideia por trás delas.

Começamos definindo para $x \in [0, 1]$

$$\Pi_N(x) \equiv \pi_{[Nx]}. \tag{1.26}$$

Definindo

$$\ell_j = -\sum_{k=1}^{j} \frac{1}{N} \log r_k \tag{1.27}$$

e denotando $[z]$ como o inteiro mais próximo de z, podemos escrever

$$\pi_{[Nx]} = \frac{1 + \sum_{j=1}^{[Nx]-1} e^{N\ell_j}}{1 + \sum_{j=1}^{N-1} e^{N\ell_j}}. \tag{1.28}$$

Ademais, substituindo (1.2) e (1.3) em (1.12) é fácil ver que

$$r_i \overset{N\to\infty}{\longrightarrow} R(\frac{i}{N}), \tag{1.29}$$

onde

$$R(x) \equiv \frac{1 - w + w[ax + b(1 - x)]}{1 - w + w[cx + d(1 - x)]}. \tag{1.30}$$

É importante observar que, em razão de (1.29), quando N é suficientemente grande, os sinais de $r_1 - 1$ e $R(0) - 1$ são iguais, bem como os sinais de $r_{N-1} - 1$ e $R(1) - 1$. Isso significa que para N suficientemente grande a dinâmica de invasão na classificação dos cenários evolutivos do Teorema 2 pode ser expressa em termos dos sinais de $R(0) - 1$ e $R(1) - 1$.

Chamamos a atenção do leitor para o fato de que um resultado análogo ao Lema 3 também é verdadeiro para a função R, pois sua derivada R' é ou estritamente positiva ou estritamente negativa, ou nula em $[0,1]$. Informamos também que R é infinitamente diferenciável em $[0,1]$.

Continuando, note que (1.27) é aproximadamente uma soma de Riemann para $-\log R$ no intervalo $[0, j/N]$. Em virtude disso, podemos escrever a seguinte aproximação:

$$\ell_j \approx L(\frac{j}{N}) \tag{1.31}$$

onde

$$L(x) \equiv -\int_0^x \log R(t)\ dt \tag{1.32}$$

é uma função C^∞ definida no intervalo $[0,1]$. Utilizando a aproximação (1.31) a equação (1.26) torna-se

$$\mathit{\Pi}_N(x) \approx \frac{1+\sum_{j=1}^{[Nx]-1} e^{NL(j/N)}}{1+\sum_{j=1}^{N-1} e^{NL(j/N)}}. \tag{1.33}$$

Note que para N grande, as somas no numerador e no denominador da fórmula acima são dominadas pelos valores de j dentro do intervalo de soma próximos aos valores para os quais a função L assume valor máximo. Como veremos, os valores de j que maximizam L dependem, em cada cenário de invasão, dos correspondentes sinais de $R(0)-1$ e $R(1)-1$. Analisemos cada cenário de invasão separadamente.

Cenário $B \rightarrow\leftarrow A$

Para N suficientemente grande, $B \rightarrow\leftarrow A$ é caracterizado por $R(0) > 1$ e $R(1) < 1$. Neste caso, R é uma função decrescente em $[0,1]$, pois a derivada de R não muda de sinal em $[0,1]$. Em virtude disso, a função $-\log R(t)$, que aparece no integrando de (1.32), será crescente e assumirá valores negativos para $x < x^*$ e positivos para $x > x^*$, onde x^* é o ponto que satisfaz $R(x^*) = 1$. Logo, a função L assume um valor mínimo negativo no ponto x^*. Como $L(0) = 0$, a função L assumirá valor máximo em $x = 0$ se $L(1) < 0$, ou em $x = 1$ caso $L(1) > 0$. Obviamente, é possível que $L(1) = 0$, mas não lidaremos com essa possibilidade. O gráfico de L para um exemplo deste cenário de invasão é mostrado na Figura 1.4.

Suponha que $L(1) < 0$. Tanto no numerador, quanto no denominador de (1.33) os termos com j próximo de 0 estarão presentes mesmo que x seja pequeno. Quanto maior for N, tanto mais esses termos serão mais relevantes que os demais. Isto significa que desde valores pequenos de x o numerador e o denominador serão praticamente iguais. Portanto, para $x > 0$ qualquer, desde que N seja grande o suficiente, espera-se que $\mathit{\Pi}_N(x) \approx 1$.

Por outro lado, caso $L(1) > 0$, mesmo quando x é muito próximo de 1 os termos mais relevantes do numerador não terão sido somados. Portanto, se $x < 1$

e N é grande o suficiente, o numerador será muito menor que o denominador em (1.33) e espera-se que $\Pi_N(x) \approx 0$.

O resultado a seguir, provado em [4], estabelece para este caso, o que ocorre para populações arbitrariamente grandes.

Proposição 8. *Se o cenário de invasão é $B \rightarrow\leftarrow A$, então para todo $x \in (0,1)$,*

$$\Pi_N(x) \xrightarrow{N\to\infty} \begin{cases} 0, & L(1) > 0 \\ 1, & L(1) < 0 \end{cases}. \tag{1.34}$$

Em consequência disso, para N suficientemente grande o cenário evolutivo deverá ser $B \overset{\rightarrow}{\Leftarrow}\overset{\leftarrow}{\Leftarrow} A$ se $L(1) > 0$, ou $B \overset{\rightarrow}{\Rightarrow}\overset{\leftarrow}{\Rightarrow} A$ se $L(1) < 0$. O cenário $B \overset{\rightarrow}{\Rightarrow}\overset{\leftarrow}{\Leftarrow} A$ não é permitido, a menos que $L(1) = 0$.

Cenário $B \leftarrow\rightarrow A$

Para N suficientemente grande, $B \leftarrow\rightarrow A$ é caracterizado por $R(0) < 1$ e $R(1) > 1$. Neste caso, R é uma função crescente em $[0,1]$. Consequentemente, $-\log R(t)$ é decrescente e assume valores positivos para $x < x^*$ e valores negativos para $x > x^*$, onde, como anteriormente, x^* satisfaz $R(x^*) = 1$. Logo, se $x < x^*$ a função L é crescente em x e, se $x > x^*$ L é decrescente em x. Dependendo de ter-se $x < x^*$ ou $x > x^*$, tem-se diferentes valores para o índice j que maximiza $L(j/N)$. Apurando os casos para x e empregando um argumento análogo ao anterior, obtêm-se o seguinte resultado:

Proposição 9. *Se o cenário de invasão é $B \leftarrow\rightarrow A$, então*

$$\Pi_N(x) \xrightarrow{N\to\infty} \begin{cases} 0, & se\ x < x^* \\ 1, & se\ x > x^* \end{cases}. \tag{1.35}$$

Em consequência disso, para N suficientemente grande os cenário evolutivos $B \overset{\leftarrow}{\Rightarrow}\overset{\rightarrow}{\Rightarrow} A$ e $B \overset{\leftarrow}{\Leftarrow}\overset{\rightarrow}{\Leftarrow} A$ não são permissíveis, sendo portanto $B \overset{\leftarrow}{\Leftarrow}\overset{\rightarrow}{\Rightarrow} A$, o único cenário admissível.

Cenários $B \leftarrow\leftarrow A$ e $B \rightarrow\rightarrow A$

Para N suficientemente grande $B \rightarrow\rightarrow A$ é caracterizado por $R(0) > 1$ e $R(1) > 1$. Neste caso, R pode ser crescente ou decrescente. Contudo, qualquer que seja o crescimento de R, sabemos que, devido a $R(0)$ e $R(1)$ serem estritamente maiores do que 1, segue que $-\log R(t) < 0$ para todo $x \in [0,1]$. Em virtude disso, a função L é decrescente com $L(x) < 0$ para todo $x \in (0,1]$. Portanto, aplicando o mesmo raciocínio que já fizemos, verifica-se o seguinte resultado:

Proposição 10. *Se o cenário de invasão é $B \to\to A$ ou $B \leftarrow\leftarrow A$, então $\forall x \in (0,1)$*

$$\mathit{\Pi}_N(x) \overset{N\to\infty}{\longrightarrow} \begin{cases} 0, & \textit{se o cenário é } B \leftarrow\leftarrow A \\ 1, & \textit{se o cenário é } B \to\to A \end{cases}. \tag{1.36}$$

Sugerimos ao leitor voltar às páginas 26 a 28 e reexaminar os gráficos da probabilidade de fixação π_i que ilustram alguns dos resultados enunciados acima para casos particulares de matrizes de pagamentos. Nas Figuras 1.2 e 1.3, fixada a matriz de pagamento e, portanto, o cenário de invasão, observa-se mudança de cenário evolutivo com o aumento de N, conforme as Proposições 8 e 9 acima.

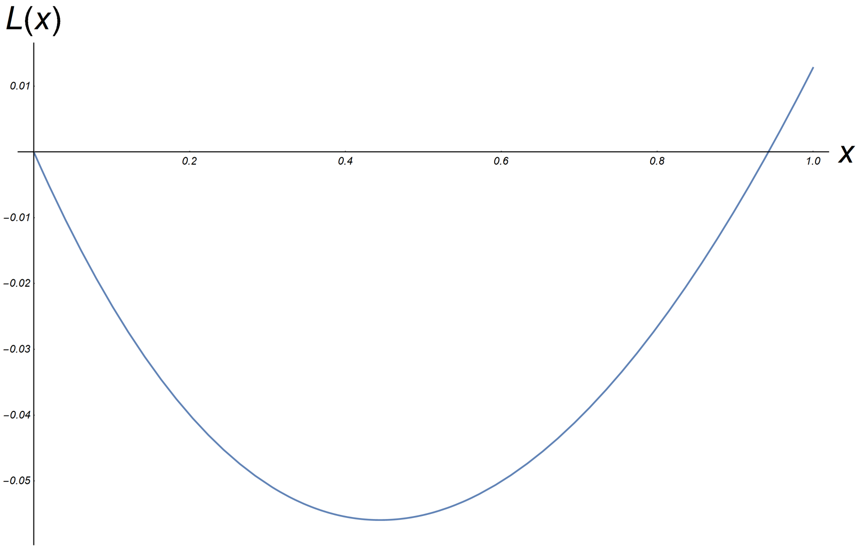

Figura 1.4: Gráfico da função $L(x)$ para o exemplo ilustrado na figura 1.2. Para aqueles valores de matriz de pagamento o cenário de invasão é $B \to\leftarrow A$. Como $L(1) > 0$, a Proposição 8 prevê que para N suficientemente grande, haverá a fixação de indivíduos do tipo B, ou seja, a permanência do cenário evolutivo $B \overset{\rightarrow}{\Leftarrow}\overset{\leftarrow}{\Leftarrow} A$.

Capítulo 2

Processo de Moran em grafos

2.1 Breve introdução à Teoria Evolutiva em grafos

Em muitas áreas da ciência existe o interesse em se estudar a relação existente entre objetos ou indivíduos em um determinado meio. Essa relação ou estrutura pode ser dada, por exemplo, através de um grafo: os objetos ou indivíduos são os vértices e as relações são determinadas pelas arestas, que podem ser orientadas. Por exemplo, um grafo pode modelar a interação física entre computadores na internet, a troca de informações entre pessoas em uma rede social ou a estrutura espacial de animais ou plantas em um ecossistema.

A preocupação de se colocar uma estrutura de interações ocorre possivelmente em todas as áreas da Biologia Matemática. Por exemplo, na Ecologia podemos usar grafos para modelar como espécies ou indivíduos interagem de diferentes formas em um ecossistema: competição por recursos ou território, interação entre presas e predadores ou a relação entre hospedeiros e parasitas. Na Epidemiologia, os modelos de espalhamento de doenças em uma população podem ser generalizados levando-se em conta a estrutura de contatos da população.

No capítulo 1 estudamos a dinâmica evolutiva do processo de Moran em uma população não-estruturada onde todos os indivíduos interagiam com todos os demais na população. Porém, nas populações realísticas os indivíduos não são todos iguais em termos de contatos.

Na teoria evolutiva em grafos consideramos que os indivíduos de uma população de tamanho finito estão ocupando os vértices de um grafo cujas arestas definem uma estrutura de interação entre os indivíduos. Nessa abordagem estudamos as mudanças que ocorrem na composição da população quando nela empregamos as regras de um determinado processo evolutivo. No restante dessa dissertação nos restringiremos ao estudo de um processo estocástico de nascimento e morte para populações estruturadas, originalmente introduzido por Lieberman, Hauert e Nowak [9] e que generaliza o processo de Moran estudado no capítulo 1.

Como anteriormente, consideraremos que a população é composta por dois tipos de indivíduos: A e B, aos quais nos referiremos respectivamente como mutante e residente.

Quando estudamos teoria evolutiva em grafos estamos frequentemente interessados em calcular a probabilidade de fixação de um mutante na população, dado que um conjunto inicial de vértices esteja ocupada por eles e os demais vértices por residentes.

No contexto da teoria evolutiva em grafos não apenas a aptidão dos tipos de indivíduos afeta a probabilidade de fixação, mas também a estrutura da população e as posições no grafo ocupadas pelos mutantes e residentes. Algumas estruturas podem significativamente aumentar (ou diminuir) a probabilidade de fixação, enquanto outras não afetam a probabilidade de fixação.

Antes de prosseguirmos, vamos apresentar algumas notações sobre grafos. Um grafo $G = (V, X)$ de ordem p é composto de um conjunto finito e não-vazio $V = \{v_1, v_2, \ldots, v_p\}$ de p pontos, chamados de vértices de G, e de um conjunto X de pares de pontos de V. Um par $x = \{v_i, v_j\} \in X$ é chamado de uma aresta de G e pode ser representado graficamente por uma linha conectando o vértice v_i ao vértice v_j. Nesse caso dizemos que v_i é adjacente ou vizinho a v_j. O número d_{v_i} de vértices vizinhos a v_i é chamado de grau de v_i.

2.2 O processo de Moran em grafos

Considere uma população de tamanho N com indivíduos de dois tipos, A e B, e suponha que eles estão distribuídos de forma que possamos imaginá-los ocupando os vértices de um dado grafo $G = (V, W)$, onde $V = \{1, 2, \ldots, N\}$. Admita que cada vértice do grafo G represente um único indivíduo dessa população. No contexto da teoria evolutiva em grafos, assumimos que as arestas do grafo possuem pesos probabilísticos e que esses são dados por uma matriz $W = [w_{ij}]$ cujas entradas significam a probabilidade de um indivíduo no vértice i substituir por um descendente seu um indivíduo no vértice j. Obviamente W tem que ser estocástica por linhas, ou seja $w_{ij} \geq 0$ para todos os índices com $\sum_{j=1}^{N} w_{ij} = 1$ para todos os i. Deve-se ter em mente que a matriz W não é necessariamente simétrica, isto é, não se exige que $w_{ij} = w_{ji}$.

O processo de Moran em um grafo é definido da seguinte maneira: a cada unidade de tempo discreto são realizados primeiramente um sorteio de um indivíduo para se reproduzir, que irá deixar um descendente de tipo idêntico ao seu; em seguida será sorteado um indivíduo que irá morrer e em cujo vértice será colocado o descendente do indivíduo que se reproduziu[1]. O sorteio de reprodução, como no caso do processo de Moran em uma população não-estruturada, será realizado entre todos os indivíduos, com probabilidade proporcional à aptidão do indivíduo. O sorteio de morte será realizado entre todos os vértices j adjacentes ao vértice i do indivíduo que se reproduziu com probabilidade de morte igual a w_{ij}.

O processo de Moran para o caso de populações não estruturadas consideradas no capítulo 1 é um caso particular desse. Podemos recuperá-lo supondo que o grafo que modela os contatos dos indivíduos na população é um grafo completo, isto é, um grafo onde todos os vértices são adjacentes entre si, e $w_{ij} = \frac{1}{N}$ para todos i e j.

O processo de nascimento e morte descrito acima define uma cadeia de Markov $(C_n)_{n=0}^{\infty}$ a tempo discreto, onde

$$C_n \in \mathcal{P}(V) \text{ é o conjunto de vértices habitados por indivíduos do tipo } A \text{ no tempo } n,$$

e $\mathcal{P}(V)$ é o conjunto potência de V.

Pelas regras do processo, no tempo $n+1$ C_{n+1} poderá assumir um dos seguintes estados:

(1) $C_n \cup \{j\}$, $j \notin C_n$, caso um indivíduo do tipo A no vértice $i \in C_n$ seja escolhido para se reproduzir e seu descendente substitui um indivíduo do tipo B no vértice j.

(2) $C_n \setminus \{i\}$, $i \in C_n$, caso um indivíduo do tipo B no vértice $j \notin C_n$ seja escolhido para reprodução e seu descendente substitui um indivíduo do tipo A em i.

(3) C_n, caso um indivíduo do tipo A em C_n ou um do tipo B em $V \setminus C_n$ sejam escolhidos para se reproduzir e seu descendente substitui respectivamente um indivíduo do tipo A em C_n ou um do tipo B em $V \setminus C_n$.

Supondo por simplicidade que a aptidão dos indivíduos independe da sua frequência na população, e que a aptidão dos do tipo A é $f_i = r$ e a dos do tipo B é $g_i = 1$, as probabilidades de transição entre os estados C_n e C_{n+1} são dadas por

[1]A ordem dos sorteios de reprodução e morte pode ser trocada e os dois processos em geral não produzem os mesmos resultados, como será visto mais adiante.

$$P_{C_n \to C_n \cup \{\bar{j}\}} \equiv \alpha_{C_n \cup \{\bar{j}\}} = \frac{r \sum_{i \in C_n} w_{i\bar{j}}}{r|C_n| + N - |C_n|}, \tag{2.1}$$

$$P_{C_n \to C_n \setminus \{\bar{i}\}} \equiv \beta_{C_n \setminus \{\bar{i}\}} = \frac{\sum_{j \in V \setminus C_n} w_{j\bar{i}}}{r|C_n| + N - |C_n|}, \tag{2.2}$$

$$P_{C_n \to C_n} \equiv \mu_{C_n} = \frac{r \sum_{i,j \in C_n} w_{ij} + \sum_{i,j \in V \setminus C_n} w_{ij}}{r|C_n| + N - |C_n|}. \tag{2.3}$$

O processo é uma cadeia de Markov com conjunto de estados $\mathcal{P}(V)$ e possui uma matriz de transição estocástica $2^N \times 2^N$. Os estados $C_n = \emptyset$ e $C_n = V$ são absorventes.

Uma quantidade de grande interesse no estudo da teoria evolutiva em grafos é a probabilidade de fixação. Estamos interessados em calcular a probabilidade de fixação do tipo A na população dado que um conjunto inicial de vértices esteja ocupada por eles e os demais vértices por indivíduos do tipo B. Seja $P_C = P(\exists n : C_n = V | C_0 = C)$ a probabilidade de fixação do tipo A, dado que inicialmente os indivíduos do tipo A ocupam um conjunto $C \subseteq V$ e os demais vértices são ocupados por indivíduos do tipo B.

Para $C \neq \emptyset$ e $C \neq V$, as probabilidades de fixação P_C podem ser obtidas como soluções de um sistema de equações lineares, que pode ser construído de forma análoga ao que foi construído no capítulo 1 para obter π_i, ou seja

$$P_C = \sum_{j \notin C} \alpha_{C \cup \{j\}} \; P_{C \cup \{j\}} + \mu_C \; P_C + \sum_{i \in C} \beta_{C \setminus \{i\}} \; P_{C \setminus \{i\}}, \tag{2.4}$$

com condições de contorno $P_\emptyset = 0$ e $P_V = 1$. Usando as probabilidades de transição e efetuando algumas manipulações algébricas, podemos reescrever as equações desse sistema como

$$P_C = \frac{\sum_{i \in C} \sum_{j \notin C} (r \; w_{ij} \; P_{C \cup \{j\}} + w_{ji} \; P_{C \setminus \{i\}})}{\sum_{i \in C} \sum_{j \notin C} (r \; w_{ij} + w_{ji})} \tag{2.5}$$

com $P_\emptyset = 0$ e $P_V = 1$. Note que o número de equações do sistema é $2^N - 2$, a cardinalidade do conjunto $\mathcal{P}(V)$ menos uma equação para cada um dos estados absorventes. Além disso, se ordenarmos de alguma forma as probabilidades de fixação P_C, o sistema de todas as equações lineares (2.5) pode ser escrito de forma matricial $EX = F$, onde E é uma matriz de coeficientes $(2^N - 2) \times (2^N - 2)$ e F é uma matriz coluna de dimensão $2^N - 2$ que contém as condições de contorno.

A seguir, enunciaremos e demonstraremos dois resultados que serão usados na demonstração do Teorema 13. Estes são análogos a resultados para problemas de Dirichlet para a equação de Laplace, ou sua versão discretizada [7].

Teorema 11. (Propriedade do máximo e do mínimo) *Considere na forma $EX = F$ o sistema de equações lineares (2.5) , onde F se refere aqui a condições de contorno de Dirichlet arbitrárias em $\emptyset$ e V. Então tanto o máximo quanto o mínimo da probabilidade de fixação P_C ocorrem em $\emptyset$ ou V.*

Demonstração. Suponha que o máximo do conjunto de todos os P_C ocorra em um estado C' onde não há condição de contorno. Pela equação (2.5) $P_{C'}$ é a média ponderada dos valores de probabilidade de fixação dos estados vizinhos a C'. Como $P_{C'}$ é máximo, isso significa que o valor da probabilidade de fixação dos estados vizinhos a C' não pode ser menor que o valor máximo. Temos assim um conjunto de estados vizinhos a C' tais que em todos eles o valor da probabilidade de fixação é o mesmo. Repetindo esse mesmo argumento para cada um dos estados vizinhos aos vizinhos de C', após um número finito de passos teremos mostrado que P_C é constante. A prova usando o mínimo é análoga. □

Proposição 12. *O sistema de equações lineares (2.5) com condições de contorno $P_\emptyset = 0$ e $P_V = 1$ tem solução única.*

Demonstração. Com efeito, o conjunto de soluções do sistema homogêneo $EX = 0$ associado a (2.5) com condições de contorno $P_\emptyset = 0$ e $P_V = 0$ é não-vazio e vale a propriedade do máximo e do mínimo para essas soluções. Neste caso, como as condições de contorno são todas nulas, o máximo e o mínimo desse conjunto de soluções deve ser 0. Logo, a única solução do sistema $EX = 0$ é a trivial. Consequentemente, $\det E \neq 0$. Portanto, E é invertível e $EX = F$ tem solução única. □

2.3 Teorema Isotérmico

No processo de Moran em populações não-estruturadas de tamanho N e seleção constante, a probabilidade de fixação ρ_A de um único indivíduo do tipo A em uma população de $N-1$ indivíduos do tipo B se expressa pela fórmula

$$\rho_A = \frac{1 - \frac{1}{r}}{1 - (\frac{1}{r})^N} \,, \tag{2.6}$$

onde supõe-se que os indivíduos do tipo A têm aptidão constante r e os do tipo B têm aptidão 1. Recorde-se que o processo de Moran em um grafo completo com peso $1/N$ em todas as arestas é equivalente ao processo de Moran para populações não estruturadas. Assim sendo, em um grafo completo a probabilidade de fixação ρ de um único mutante (que estamos identificando como sendo um indivíduo do tipo A) com aptidão r em uma população de $N-1$ residentes (indivíduos do tipo B) com aptidão 1 também se exprime pela fórmula (2.6).

Visto que, conforme veremos, há outros tipos de grafos em que a probabilidade de fixação de um único mutante na população coincide com a fórmula (2.6), somos motivados a dar a seguinte definição:

Definição 1. *Se em um grafo com N vértices, a probabilidade de fixação ρ de um único mutante com aptidão r em uma população de $N-1$ residentes com aptidão 1 se igualar à fórmula (2.6), então dizemos que esse grafo é ρ-equivalente ao processo de Moran em populações não-estruturadas com aptidão constante.*

A definição que faremos a seguir estabelece uma classe importante de grafos que são ρ-equivalente ao processo de Moran.

Definição 2. *Seja $W = [w_{ij}]$ a matriz associada ao grafo no processo de Moran. Definimos $T_j = \sum_{i=1}^{N} w_{ij}$ como sendo a temperatura do vértice j. Um grafo é chamado de isotérmico se T_j é constante como função de j.*

A temperatura de um vértice nos dá uma ideia da frequência com que indivíduos que o ocuparem serão substituídos durante o processo de Moran. Note ainda, na definição acima, que, como W é estocástica por linhas, isto é, $\sum_{j=1}^{N} w_{ij} = 1$ para todo i, se $T_j = \sum_{i=1}^{N} w_{ij}$ é constante para todo j, então $T_j = 1$. Em outras palavras, um grafo é isotérmico se, e somente se, a matriz W associada a ele é duplamente estocástica.

No Teorema Isotérmico que enunciaremos a seguir, deduziremos uma fórmula explícita para a probabilidade de fixação P_C para o caso de grafos isotérmicos. Como consequência, obteremos uma importante classe de grafos que são ρ-equivalentes ao processo de Moran.

Teorema 13. **(Teorema Isotérmico)** *Se G é isotérmico e $C \subset V$, então*

$$P_C = \frac{1-\left(\frac{1}{r}\right)^{|C|}}{1-\left(\frac{1}{r}\right)^{N}} \ . \tag{2.7}$$

Em particular, se G é isotérmico, então é ρ-equivalente ao processo de Moran.

Demonstração. Inicialmente, afirmamos que, se W é duplamente estocástica, então

$$\sum_{i\in C}\sum_{j\notin C} w_{ij} = \sum_{i\notin C}\sum_{j\in C} w_{ij}. \tag{2.8}$$

De fato, como W é estocástica por linhas, temos

$$\sum_{i\in C}\sum_{j\notin C} w_{ij} = \sum_{i\in C}\sum_{j=1}^{N} w_{ij} - \sum_{i\in C}\sum_{j\in C} w_{ij} = |C| - \sum_{i,j\in C} w_{ij}.$$

Por outro lado, usando que W é estocástica por colunas, vem que

$$\sum_{i\notin C}\sum_{j\in C} w_{ij} = \sum_{j\in C}\sum_{i\notin C} w_{ij} = \sum_{j\in C}\sum_{i=1}^{N} w_{ij} - \sum_{j\in C}\sum_{i\in C} w_{ij} = |C| - \sum_{i,j\in C} w_{ij}.$$

Isto prova nossa afirmação.

Agora, vamos escrever o sistema (2.4) para o caso de um grafo isotérmico:

$$\begin{aligned} P_C = {} & \sum_{j\notin C}\sum_{i\in C} \frac{r w_{ij}}{r|C| + N - |C|} P_{C\cup\{j\}} + \sum_{j\in C}\sum_{i\notin C} \frac{w_{ij}}{r|C| + N - |C|} P_{C\setminus\{j\}} \\ & + \left(1 - \sum_{j\notin C}\sum_{i\in C} \frac{r w_{ij}}{r|C| + N - |C|} - \sum_{j\in C}\sum_{i\notin C} \frac{w_{ij}}{r|C| + N - |C|}\right) P_C, \end{aligned} \tag{2.9}$$

com condições de contorno $P_\emptyset = 0$ e $P_V = 1$. Definamos

$$s_c \equiv \sum_{i\in C}\sum_{j\notin C} w_{ij} = \sum_{i\notin C}\sum_{j\in C} w_{ij} = |C| - \sum_{i,j\in C} w_{ij} \tag{2.10}$$

e reescrevamos (2.9) como

$$(1+r)s_c P_C = \left[r\sum_{j\notin C}\sum_{i\in C} w_{ij} P_{C\cup\{j\}} + \sum_{j\in C}\sum_{i\notin C} w_{ij} P_{C\setminus\{j\}} \right]. \tag{2.11}$$

Seja $C+$ a família de todos os subconjuntos de V que contêm C e possuem exatamente um elemento a mais. Da mesma forma, seja $C-$ a família de todos os subconjuntos de V contidos em C e que possuem exatamente um elemento a menos. Se supusermos momentaneamente que P_C depende somente do número de elementos de C, então podemos definir P_{C+} e P_{C-} de maneira não ambígua.

As equações (2.11) tornam-se então

$$(1+r)s_c P_C = r s_c P_{C+} + s_c P_{C-}.$$

Ou seja,

$$P_C = \frac{r}{1+r} P_{C+} + \frac{1}{1+r} P_{C-}, \tag{2.12}$$

com $P_\emptyset = 0$ e $P_V = 1$. Este sistema possui exatamente a mesma forma que (1.8). Logo, a equação (2.7) é uma solução procurada.

Pela Proposição 12 o sistema de equações (2.11) e condições de contorno $P_\emptyset = 0$ e $P_V = 1$ possui solução única. Portanto, a equação (2.7) é a única solução do sistema (2.12) e a hipótese de que P_C depende só de $|C|$ fica justificada. $\square$

Definição 3. *Um grafo é regular quando todos os seus vértices têm o mesmo grau e $w_{ij} = w_{ji}$ para todos i e j.*

Corolário 14. *Se G é um grafo regular, então G é isotérmico.*

Quando consideramos o processo de Moran em um grafo que não é isotérmico, geralmente a probabilidade de fixação ρ dependerá não somente da aptidão do mutante, mas também da posição que ele ocupa no grafo. Certas estruturas de grafos contribuem para que o valor da probabilidade de fixação ρ seja maior (ou menor) do que o valor de ρ_A em (2.6).

Definição 4. *A probabilidade de fixação média de um mutante colocado de forma aleatória uniforme em um vértice de G é definida como*

$$\rho_M = \frac{1}{N} \sum_{i \in V} P_{\{v_i\}}. \tag{2.13}$$

Para determinar se a estrutura de um grafo G favorece (ou desfavorece) a fixação de um mutante, comparamos o valor da probabilidade de fixação ρ_A de um mutante no caso de uma população não-estruturada, com a probabilidade de fixação ρ_M.

Definição 5. *Um grafo G é chamado de supressor de seleção (respectivamente amplificador de seleção) se, para um mutante com aptidão $r > 1$ a probabilidade de fixação ρ_M for menor (respectivamente maior) do que a probabilidade (2.6) de fixação de um mutante com mesma aptidão em uma população não-estruturada. Se $\rho_M = 1/N$ para qualquer r, dizemos que o grafo G é fortemente supressor de seleção. Isso significa que a estrutura do grafo G elimina completamente o efeito de seleção natural.*

Vejamos alguns exemplos que ilustram as definições acima. Um classe de grafos que são ρ-equivalentes ao processo de Moran e que não são completos, são os chamados círculos direcionados. O grafo $G = (V, W)$ com

$$V = \{1,2,3,4,5,6,7,8\},\ X = \{\{1,2\},\{2,3\},\{3,4\},\{4,5\},\{5,6\},\{6,7\},\{7,8\},\{8,1\}\}$$

e matriz $W = [w_{ij}]$ expressa por

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \end{pmatrix} \tag{2.14}$$

está ilustrado na figura 2.1 e é um exemplo dessas estruturas. A afirmativa de que o círculo direcionado é ρ-equivalente ao processo de Moran segue do Teorema Isotérmico, já que, para essas estruturas, a matriz W é duplamente estocástica.

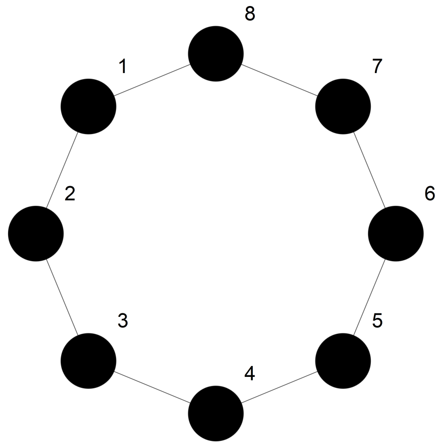

Figura 2.1: O círculo direcionado é um exemplo de grafo ρ-equivalente ao processo de Moran.

Considere agora o grafo $G = (V, W)$ dado por

$$V = \{1,2,3,4,5,6,7,8\}, \quad X = \{\{1,2\},\{2,3\},\{3,4\},\{4,5\},\{5,6\},\{6,7\},\{7,8\}\}$$

e com matriz $W = [w_{ij}]$ representada por

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.15}$$

Esse grafo pertence a uma classe chamada de linhas (veja a figura 2.2).

Para o grafo linha de N vértices, a matriz W caracteriza a seguinte regra: se um indivíduo ocupa o vértice $i = 1, 2, \ldots, N-1$, então com probabilidade 1 seu descendente ocupará o vértice $i+1$. Por outro lado, se um indivíduo ocupa o vértice N, com probabilidade 1, seu descendente substituirá ele próprio. Assim, se um mutante ocupar o vértice 1, com probabilidade 1 haverá a sua fixação na população. Ou seja,

$$P_{\{i\}} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = 1 \\ 0, & \text{se } i \neq 0 \end{cases}. \tag{2.16}$$

Portanto, o grafo linha é fortemente supressor de seleção, já que

$$\rho_M = \frac{1}{N} \tag{2.17}$$

independente do valor da aptidão.

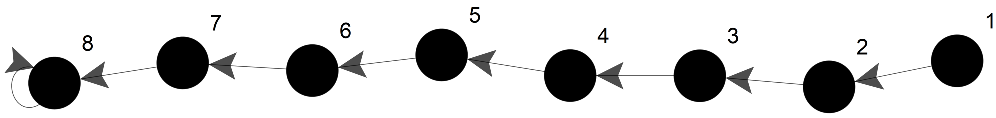

Figura 2.2: O grafo linha é um exemplo de estrutura que suprime a seleção.

No capítulo 3, estudaremos em detalhes o grafo estrela e veremos que é um exemplo importante de amplificador de seleção.

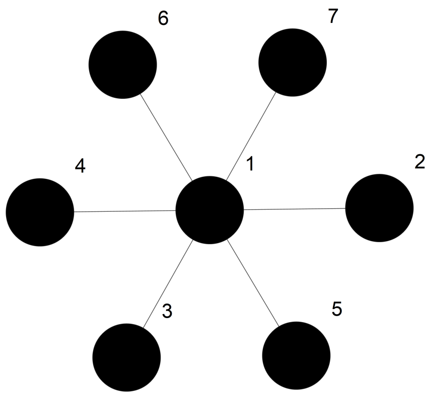

Figura 2.3: Grafo estrela com $N = 7 + 1$ vértices.

Para o grafo estrela ilustrado na figura 2.3 tem-se

$$V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8\}, \quad X = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{1, 4\}, \{1, 5\}, \{1, 6\}, \{1, 7\}, \{1, 8\}\}$$

e matriz $W = [w_{ij}]$ dada por

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 1/7 & 1/7 & 1/7 & 1/7 & 1/7 & 1/7 & 1/7 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.18}$$

2.4 Complexidade da determinação de P_C

O número de variáveis do sistema linear que determina P_C torna inviável a obtenção de uma solução analítica ou mesmo numérica quando N é grande. Em [1], [2] Broom e Rychtář descreveram um método para reduzir o número de equações do sistema (2.5) no caso em que a estrutura da população é dada por um grafo. Esse método utiliza os automorfismos (ou simetrias) do grafo para determinar o número exato de *configurações mutante-residente* não-equivalentes. Esse número, que em geral cresce com a complexidade do sistema, é a quantidade de variáveis que devem ser consideradas na procura de uma solução do sistema (2.5).

Se o grafo possuir simetrias, isso faz com que alguns conjuntos de vértices ocupados por mutantes possuam probabilidades de fixação idênticas entre si e possam ser definidas como formações equivalentes. Portanto, o número exato de possíveis formações mutante-residente não-equivalentes depende da quantidade de simetrias que o grafo possui.

A seguir, descreveremos e exemplificaremos o método que Broom e Rychtář utilizaram para determinar o número de formações mutante-residente não-equivalentes. Esse método emprega ações de grupos e o Lema de Burnside. Caso o leitor deseje fazer uma breve revisão sobre ações de grupos e o Lema de Burnside, poderá consultar o apêndice A.

Como anteriormente, considere uma população de tamanho N e suponha que cada indivíduo dessa população esteja ocupando um único vértice de um dado grafo G. Sabe-se que cada vértice do grafo pode ser ocupado por um único mutante ou residente, de modo que, se $V = \{1, 2, \ldots, N\}$ é o conjunto de vértices de G, existem $2^{|V|}$ possíveis configurações mutante-residente na população.

Sejam, $V(G)$ e $V(G')$ os respectivos conjuntos de vértices de grafos G e G'. Uma função injetiva σ entre $V(G)$ e $V(G')$ que preserva adjacências é um isomorfismo. No caso em que $G = G'$, dizemos que σ é uma permutação dos vértices de G e é chamado um automorfismo de G. Os automorfismos do grafo G carregam, por assim dizer, a informação a respeito das simetrias que o grafo possui. O conjunto $\Gamma(G)$ desses automorfismos é um grupo finito que denominamos de *grupo associado ao grafo G*.

Como exemplo, considere o grafo $G = (X, V)$ dado por

$$V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}, \quad X = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{1, 4\}, \{4, 5\}, \{4, 6\}\}.$$

e com matriz $W = [w_{ij}]$ representada por

$$W = \begin{pmatrix} 0 & 1/3 & 1/3 & 1/3 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1/3 & 0 & 0 & 0 & 1/3 & 1/3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.19}$$

Esse grafo, pertencente a uma classe chamada de estrelas duplas, está ilustrado em forma de diagrama na figura 2.4 abaixo.

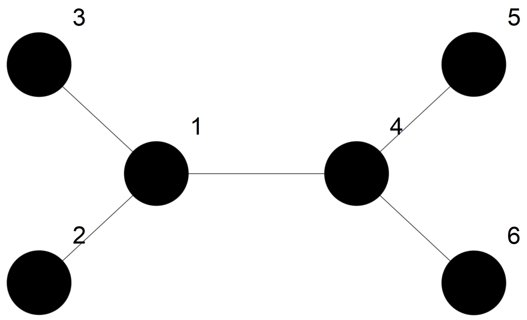

Figura 2.4: Estrela dupla.

O grupo de automorfismos da estrela dupla, na notação de ciclos, é dado por:

$$\Gamma(G) = \{1, (23), (56), (23)(56), (14)(25)(36), (14)(26)(35), (14)(2536), (14)(2635)\}, \tag{2.20}$$

o qual possui ordem $|\Gamma(G)| = 8$.

Uma configuração mutante-residente pode ser expressa através de uma função

$$\varphi : V(G) \longmapsto \{0, 1\},$$

que atribui 0 aos vértices que estejam ocupados por residentes e 1 aos povoados por mutantes. O conjunto $M = \{\varphi : V \longmapsto \{0, 1\}\}$ dessas funções, possui $2^{|V|}$ elementos.

Agora, definamos a ação do grupo $\Gamma(G)$ no conjunto M das configurações mutante-residente:

$$\begin{array}{ccc} \Gamma(G) \times M & \longrightarrow & M \\ (\sigma, \varphi) & \longmapsto & \sigma \circ \varphi \equiv \varphi\ (\sigma^{-1}). \end{array} \tag{2.21}$$

Sabemos que, ao definirmos uma ação do grupo $\Gamma(G)$ no conjunto M, induzimos naturalmente em M uma relação de equivalência. No caso em que estamos

trabalhando, isso significa que duas formações mutante-residente representadas pelas funções $\varphi, \varphi' \in M$ são equivalentes se existir um automorfismo $\sigma \in \Gamma(G)$ tal que
$$\varphi' = \sigma \circ \varphi. \tag{2.22}$$
A relação em (2.22) nos diz que, a parte simetrias no grafo, as funções φ e φ' representam a mesma configuração mutante-residente na população e portanto suas probabilidades de fixação são idênticas. Na linguagem da teoria de grupos, dizemos que cada classe de equivalência em M é uma órbita de $\Gamma(G)$.

Considerando a existência de configurações mutante-residente equivalentes, no exemplo do grafo estrela dupla mencionado acima, considere a seguinte configuração mutante-residente $\varphi_1 = (1,1,0,0,0,1)$ que tem mutantes nos vértices $1,2$ e 6 e residentes nos vértices $3,4$ e 5. Essa configuração é equivalente a $\varphi_2 = (1,0,1,0,1,0)$ já que
$$(23)(56) \circ \varphi_1 = \varphi_2.$$
Usando os demais automorfismos de $\Gamma(G)$ verifica-se que as seguintes configurações mutante-residente se encontram na mesma órbita de $\Gamma(G)$:

$$(0,0,1,1,0,1),(0,0,1,1,1,0),(0,1,0,1,0,1),(0,1,0,1,1,0),(1,0,1,0,0,1),$$
$$(1,0,1,0,1,0),(1,1,0,0,0,1),(1,1,0,0,1,0).$$

O número de incógnitas do sistema (2.5) será, portanto, efetivamente igual ao número de classes de equivalência $|M/\Gamma(G)|$ do conjunto quociente de M pela relação de equivalência. De fato, cada órbita com mais de um elemento nos permite diminuir o número de incógnitas do sistema (2.4). Por exemplo, suponha que $C_1, C_2, \ldots C_k$ são conjuntos de vértices distintos e ocupados por mutantes respectivamente em configurações $m_1, m_2, \ldots, m_k$ que estão na mesma órbita. Tomando um representante nessa órbita, digamos m_*, e o respectivo conjunto de vértices C_* habitados por mutantes, podemos trocar de modo apropriado as probabilidades P_{C_i}, $i \in \{1,2,\ldots,k\}$ que aparecem nas equações do sistema (2.4), por P_{C_*}. Fazendo a mesma operação de escolher um representante para cada uma das outras órbitas, obteremos um sistema onde várias das equações de (2.4) aparecem repetidas. Efetivamente, teremos um sistema com menos equações. Em vez de uma equação para cada configuração, teremos uma para cada órbita.

Usando o lema de contagem de órbitas de Burnside podemos escrever

$$|M/\Gamma(G)| = |\Gamma(G)|^{-1} \sum_{\sigma \in \Gamma(G)} |Fix(\sigma)| \ , \tag{2.23}$$

onde $|Fix(\sigma)|$ denota o número de elementos de M que são fixos por σ.

Por exemplo, se $\sigma = (23)(56) \in \Gamma(G)$ é um automorfismo do grafo estrela, então

$$\begin{aligned} Fix(\sigma) = \{&(0,0,0,0,0,0),(0,0,0,0,1,1),(0,0,0,1,0,0),(0,0,0,1,1,1),\\ &(0,1,1,0,0,0),(0,1,1,0,1,1),(0,1,1,1,0,0),(0,1,1,1,1,1),\\ &(1,0,0,0,0,0),(1,0,0,0,1,1),(1,0,0,1,0,0),(1,0,0,1,1,1),\\ &(1,1,1,0,0,0),(1,1,1,0,1,1),(1,1,1,1,0,0),(1,1,1,1,1,1)\}, \end{aligned}$$

e $|Fix(\sigma)| = 16$.

Se denotarmos $c(\sigma)$ como o número de ciclos da representação de σ como produto de ciclos disjuntos, então $|Fix(\sigma)| = 2^{c(\sigma)}$, pois uma configuração φ será fixada por σ se, e somente se, for constante em cada um dos seus ciclos. Como exemplo, observe que $\sigma = (23)(56)$ possui 4 ciclos. Note que os 1-ciclos (1) e (4) foram omitidos na notação por uma convenção estabelecida no Apêndice A. De acordo com a fórmula, $|Fix(\sigma)| = 2^4$, conferindo com a contagem anteriormente realizada de forma manual.

Portanto, reescrevendo (2.23), concluímos que o número total de classes de equivalência de M pode ser determinado pela fórmula

$$|M/\Gamma(G)| = |\Gamma(G)|^{-1} \sum_{\sigma \in \Gamma(G)} 2^{c(\sigma)}. \tag{2.24}$$

Observe que a fórmula (2.24) leva em conta apenas a estrutura do grafo G e não faz nenhuma referência ao processo que estamos considerando. No caso em que $\Gamma(G)$ contém somente a permutação identidade, que possui N ciclos, obtemos 2^N órbitas e nada se ganha.

Voltando ao exemplo da estrela dupla, note que a quantidade de possíveis formações mutante-residente nessa estrutura é $2^6 = 64$. O número total de órbitas, usando o Lema de Burnside é

$$|M/\Gamma(G)| = \frac{1}{8}\left(2^6 + 2^5 + 2^5 + 2^4 + 2^3 + 2^3 + 2^2 + 2^2\right) = 21,$$

em que as parcelas desta soma são, na mesma ordem em que aparecem, referentes aos elementos de $\Gamma(G)$ elencados em (2.20).

Portanto, em vez resolvermos um sistema de 64 equações lineares, precisamos resolver um de apenas 21 equações. Assim, o trabalho computacional para calcular as probabilidades de fixação nessa estrela dupla é substancialmente diminuído caso se lance mão das suas simetrias.

No próximo capítulo estudaremos a estrela simples com n pontas e veremos que a simplificação obtida com esse método é tal que as probabilidades de fixação podem ser encontradas de forma exata.

Capítulo 3

Processos de Moran no grafo estrela

3.1 Processos de morte nascimento (DB) e nascimento morte (BD) na estrela

Neste capítulo consideraremos os processos de nascimento-morte (BD) e de morte-nascimento (DB) em uma população de N indivíduos estruturada pelo grafo estrela. A estrela (com n pontas) é um grafo que possui $N = n + 1$ vértices, onde apenas um deles, o central, está conectado com pesos iguais aos demais (pontas). Cada ponta está conectada somente ao centro. Os indivíduos dessa população poderão ser do tipo A ou do tipo B e assumiremos que a aptidão deles depende de sua frequência na população. Nosso objetivo é determinar, a partir de qualquer estado inicial da população, a probabilidade de fixação de indivíduos do tipo A, que serão também chamados mutantes. Os indivíduos de tipo B serão denominados residentes. Lembre-se que para isso é necessário, em princípio, resolvermos um sistema de 2^N equações lineares. Por causa das simetrias do grafo estrela - todas as pontas são equivalentes -, o número de equações será bem menor.

O processo de Moran em grafos estudado até aqui é o caso BD: primeiro sorteamos um indivíduo para se reproduzir e, depois, escolhemos entre os vértices vizinhos do indivíduo que se reproduziu, quem vai morrer. O processo DB é diferente: primeiro escolhemos de maneira uniforme um indivíduo da população para morrer. Em seguida, sorteamos com probabilidade proporcional à sua aptidão o indivíduo que irá ocupar o vértice daquele que morreu.

No caso BD, Broom e Rychtář [1] determinaram uma solução exata para a probabilidade de fixação na situação particular em que as aptidões dos indivíduos independem de sua frequência na população. Deduziremos uma solução exata que generaliza a encontrada por eles ao caso em que as aptidões do indivíduos dependem de sua frequência na população. Conforme o leitor irá notar, o método que empregaremos para resolver o sistema se aplicará a ambos os processos BD e DB. Os estados da população na estrela podem ser descritos por $2(n+1)$ pares ordenados $(0,i),(1,i)$ com $i \in \{0,1,\ldots,n\}$. Nessa notação, usamos 0 ou 1 na primeira entrada do par ordenado para indicar se o vértice central está ocupado respectivamente por um residente ou por um mutante e, na segunda entrada usamos i para indicar o número de mutantes ocupando as pontas.

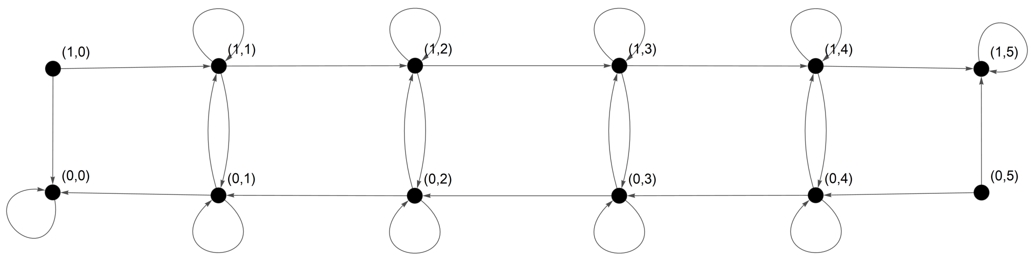

Figura 3.1: Esquema do espaço de estados para os processos BD e DB na estrela com $N = 5 + 1$ vértices. As setas indicam as possíveis transições que podem ocorrer entre esses estados.

A probabilidade de fixação de mutantes será denotada por

$$P_i^0 = P(\exists k : C_k = (1,n) \mid C_0 = (0,i)),$$

quando na condição inicial o centro estiver ocupado por um residente e houver i mutantes nas pontas e, por

$$P_i^1 = P(\exists k : C_k = (1,n) \mid C_0 = (1,i)),$$

quando na condição inicial o centro estiver ocupado por um mutante e houver i mutantes nas pontas. As aptidões de mutantes e residentes serão denotadas respectivamente por f_i e g_i, cujas expressões são dadas por (1.2) e (1.3). A aptidão relativa de mutantes em relação a residentes será denotada por

$$r_i \equiv \frac{f_i}{g_i}. \tag{3.1}$$

No caso BD, suponha que o centro está ocupado por um residente e que haja i mutantes nas pontas. Caso o centro seja sorteado para reprodução, o que acontece com probabilidade $g_i/(if_i + (n-i+1)g_i)$, e uma ponta com mutante for escolhida para a morte, o que acontece com probabilidade i/n, o estado passa a ser $(i-1,0)$. A probabilidade dessa transição, considerando a independência dos sorteios de reprodução e morte, é portanto

$$\frac{g_i}{i\ f_i+(n-i+1)\ g_i}\ \frac{i}{n}.$$

Considerando todos os demais sorteios possíveis de forma parecida e também as transições a partir dos estados $(1,i)$, obtemos

$$\begin{aligned} P_i^0 = &\frac{g_i}{if_i+(n-i+1)g_i}\frac{i}{n}P_{i-1}^0+\frac{if_i}{if_i+(n-i+1)g_i}P_i^1+\\ &\left(\frac{g_i}{if_i+(n-i+1)g_i}\frac{n-i}{n}+\frac{(n-i)g_i}{if_i+(n-i+1)g_i}\right)P_i^0, \end{aligned}$$

$i\in\{1,\dots,n\}$ e

$$\begin{aligned} P_i^1 = &\frac{f_i}{(i+1)f_i+(n-i)g_i}\frac{n-i}{n}P_{i+1}^1+\frac{(n-i)g_i}{(i+1)f_i+(n-i)g_i}P_i^0+\\ &\left(\frac{f_i}{(i+1)f_i+(n-i)g_i}\frac{i}{n}+\frac{if_i}{(i+1)f_i+(n-i)g_i}\right)P_i^1, \end{aligned}$$

$i\in\{0,1,\dots,n-1\}$, com condições de contorno

$$P_0^0=0 \ \text{ e } \ P_n^1=1. \tag{3.2}$$

As equações acima podem ser reescritas sucintamente como

$$\begin{aligned} P_i^0 &= \frac{1}{nr_i+1}P_{i-1}^0+\frac{nr_i}{nr_i+1}P_i^1\\ P_i^1 &= \frac{r_i}{n+r_i}P_{i+1}^1+\frac{n}{n+r_i}P_i^0. \end{aligned} \tag{3.3}$$

De maneira semelhante, obtemos pelas regras do processo DB, as equações

$$P_i^0=\frac{1}{n+1}\frac{if_i}{if_i+(n-i)g_i}P_i^1+\frac{i}{n+1}P_{i-1}^0+\left(\frac{1}{n+1}\frac{(n-i)g_i}{if_i+(n-i)g_i}+\frac{n-i}{n+1}\right)P_i^0$$

e

$$P_i^1=\frac{1}{n+1}\frac{(n-i)g_i}{if_i+(n-i)g_i}P_i^0+\frac{n-i}{n+1}P_{i+1}^1+\left(\frac{1}{n+1}\frac{if_i}{if_i+(n-i)g_i}+\frac{i}{n+1}\right)P_i^1$$

com as mesmas condições de contorno (3.2) do caso BD. Simplificando as equações acima obtemos

$$\begin{aligned} P_i^0 &= \frac{r_i}{(i+1)r_i+n-i}P_i^1 + \frac{ir_i+n-i}{(i+1)r_i+n-i}P_{i-1}^0 \\ P_i^1 &= \frac{1}{ir_i+n-i+1}P_i^0 + \frac{ir_i+n-i}{ir_i+n-i+1}P_{i+1}^1. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Observe que para os processos BD e DB na estrela, obtivemos os sistemas (3.3) e (3.4) que são ambos da forma

$$P_i^0 = \beta_i P_{i-1}^0 + (1-\beta_i)P_i^1 \tag{3.5}$$

$$P_i^1 = \alpha_i P_{i+1}^1 + (1-\alpha_i)P_i^0, \tag{3.6}$$

e em ambos os casos temos também condições contorno $P_0^0 = 0$ e $P_n^1 = 1$.

A seguir, mostraremos como resolver de forma geral o sistema dado pelas equações (3.5), (3.6) com suas condições de contorno (3.2). Para nos auxiliar nessa tarefa definiremos as seguintes diferenças:

$$d_i^0 = P_i^0 - P_{i-1}^0 \tag{3.7}$$

$$d_i^1 = P_i^1 - P_{i-1}^1 \tag{3.8}$$

$$d_i^{10} = P_i^1 - P_i^0. \tag{3.9}$$

Em primeiro lugar, vamos reescrever as relações dadas acima usando as equações (3.5) e (3.6). Substituindo a equação (3.5) na relação (3.7) obtêm-se

$$\begin{aligned} d_i^0 = P_i^0 - P_{i-1}^0 &= (\beta_i - 1)P_{i-1}^0 + (1-\beta_i)P_i^1 \\ &= (1-\beta_i)(P_i^1 - P_{i-1}^0) \\ &= (1-\beta_i)(P_i^1 - P_i^0 + P_i^0 - P_{i-1}^0) \\ &= (1-\beta_i)(d_i^{10} + d_i^0), \end{aligned}$$

de que resulta

$$d_i^0 = \frac{1-\beta_i}{\beta_i} d_i^{10}. \tag{3.10}$$

Trocando-se i por $i-1$ na equação (3.6) e subtraindo o termo $\alpha_{i-1}P_{i-1}^1$ de ambos os lados da expressão resultante, obtemos, usando a relação (3.8), que

$$d_i^1 = \frac{1-\alpha_{i-1}}{\alpha_{i-1}} d_{i-1}^{10}. \tag{3.11}$$

Finalmente,

$$d_i^{10} = P_i^1 - P_i^0 = (P_i^1 - P_{i-1}^1) - (P_i^0 - P_{i-1}^0) + (P_{i-1}^1 - P_{i-1}^0),$$

que, pela definição das relações (3.7), (3.8) e (3.9), se torna

$$d_i^{10} = d_i^1 - d_i^0 + d_{i-1}^{10}. \tag{3.12}$$

Podemos encarar (3.10), (3.11) e (3.12) como um sistema de 3 equações lineares que determinam as incógnitas d_i^0, d_i^1 e d_i^{10} todas em termos de d_{i-1}^{10}. Resolvamo-lo.

A equação (3.11) nos dá diretamente d_i^1 em termos de d_{i-1}^{10}. Segue da equação (3.12) que

$$d_i^{10} + d_i^0 = d_i^1 + d_{i-1}^{10} = (1 + \frac{1-\alpha_{i-1}}{\alpha_{i-1}})d_{i-1}^{10} = \frac{1}{\alpha_{i-1}}d_{i-1}^{10}.$$

Substituindo a equação (3.10) na expressão acima, obtemos

$$d_i^{10} = \frac{\beta_i}{\alpha_{i-1}}d_{i-1}^{10}. \tag{3.13}$$

Por fim, substituindo a expressão de d_i^{10} dada por (3.13) na equação (3.10), chegamos a

$$d_i^0 = \frac{1-\beta_i}{\alpha_{i-1}}d_{i-1}^{10}. \tag{3.14}$$

Agora, vamos eliminar o termo d_{i-1}^{10} das equações (3.11), (3.13) e (3.14) para exprimi-las em função de P_0^1.

Primeiro, atribuindo $i = 0$ na relação (3.9) tem-se

$$d_0^{10} = P_0^1 - P_0^0 = P_0^1, \tag{3.15}$$

onde usamos umas das condições de contorno.

Assim, usando esse fato podemos obter recursivamente de (3.13) a seguinte equação:

$$d_i^{10} = \prod_{j=1}^{i}\left(\frac{\beta_j}{\alpha_{j-1}}\right)P_0^1. \tag{3.16}$$

Levando-se em conta que $d_0^{10} = P_0^1$ e usando a equação (3.16) diretamente nas equações (3.11) e (3.14), decorrem respectivamente as fórmulas

$$d_i^1 = \frac{1-\alpha_{i-1}}{\alpha_{i-1}}\prod_{j=1}^{i-1}\left(\frac{\beta_j}{\alpha_{j-1}}\right)P_0^1 \tag{3.17}$$

e

$$d_i^0 = \frac{1-\beta_i}{\alpha_{i-1}} \prod_{j=1}^{i-1} \left(\frac{\beta_j}{\alpha_{j-1}} \right) P_0^1. \tag{3.18}$$

Podemos agora usar as equações obtidas em (3.16), (3.18) e (3.17) para calcular recursivamente fórmulas para as probabilidades de fixação P_i^0 e P_i^1. A ideia do processo que faremos é simples, mas como a notação torna-se longa, exibiremos o cálculo para os índices mais baixos, deixando claro o processo indutivo que leva ao termo geral.

Utilizando a relação (3.8) e a equação (3.17) procedemos da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
P_1^1 &= P_0^1 + d_1^1 = P_0^1 \left(1 + \frac{1-\alpha_0}{\alpha_0}\right) = P_0^1 \frac{1}{\alpha_0} \\
P_2^1 &= P_1^1 + d_2^1 = P_0^1 \left(\frac{1}{\alpha_0} + \frac{1-\alpha_1}{\alpha_1}\frac{\beta_1}{\alpha_0}\right) = P_0^1 \frac{1}{\alpha_0}\left[1 + (1-\alpha_1)\frac{\beta_1}{\alpha_1}\right] \\
P_3^1 &= P_2^1 + d_3^1 = P_0^1 \left[\frac{1}{\alpha_0}\left(1 + (1-\alpha_1)\frac{\beta_1}{\alpha_1}\right) + \frac{1-\alpha_2}{\alpha_2}\frac{\beta_2}{\alpha_1}\frac{\beta_1}{\alpha_0}\right] = \\
&= P_0^1 \frac{1}{\alpha_0}\left[1 + (1-\alpha_1)\frac{\beta_1}{\alpha_1} + (1-\alpha_2)\frac{\beta_2}{\alpha_2}\frac{\beta_1}{\alpha_1}\right] \\
&\vdots
\end{aligned}$$

Indutivamente, chegamos ao termo geral

$$P_i^1 = \frac{P_0^1}{\alpha_0}\left[1 + \sum_{j=1}^{i-1}(1-\alpha_j)\prod_{k=1}^{j}\frac{\beta_k}{\alpha_k}\right]. \tag{3.19}$$

Para obter P_0^1, utilizamos a condição de contorno $P_n^1 = 1$ no termo geral acima, que nos dá imediatamente

$$P_0^1 = \frac{\alpha_0}{1 + \sum_{j=1}^{n-1}(1-\alpha_j)\prod_{k=1}^{j}\frac{\beta_k}{\alpha_k}}. \tag{3.20}$$

Logo

$$P_i^1 = \frac{1 + \sum_{j=1}^{i-1}(1-\alpha_j)\prod_{k=1}^{j}\frac{\beta_k}{\alpha_k}}{1 + \sum_{j=1}^{n-1}(1-\alpha_j)\prod_{k=1}^{j}\frac{\beta_k}{\alpha_k}}, \tag{3.21}$$

$i = 1, 2, \ldots, n$.

Agora, vamos obter P_i^0. A relação (3.9) nos dá

$$P_1^0 = P_1^1 - d_1^{10}, \tag{3.22}$$

e como
$$d_1^{10} = \frac{\beta_1}{\alpha_0} d_0^{10} = \frac{\beta_1}{\alpha_0} P_0^1 = \frac{\beta_1}{1 + \sum_{j=1}^{n-1}(1-\alpha_j)\prod_{k=1}^{j}\frac{\beta_k}{\alpha_k}},$$
levamos esta última relação na anterior e obtemos
$$P_1^0 = \frac{1-\beta_1}{1 + \sum_{j=1}^{n-1}(1-\alpha_j)\prod_{k=1}^{j}\frac{\beta_k}{\alpha_k}}. \tag{3.23}$$

Continuando, podemos empregar a relação (3.7) e as equações (3.18) e (3.23), e lançar mão de um processo análogo ao que utilizamos na determinação de P_i^1, daí se seguirá a fórmula
$$P_i^0 = \frac{\sum_{j=1}^{i}(1-\beta_j)\prod_{k=1}^{j-1}\frac{\beta_k}{\alpha_k}}{1 + \sum_{j=1}^{n-1}(1-\alpha_j)\prod_{k=1}^{j}\frac{\beta_k}{\alpha_k}}, \tag{3.24}$$
$i = 1, 2, \ldots, n$. Convenção na fórmula (3.24): se $j = 1$, tomamos $\prod_{k=1}^{j-1}\frac{\beta_k}{\alpha_k} = 1$.

Portanto, as condições de contorno (3.20) e (3.21), juntamente com as fórmulas (3.23) e (3.24), determinam a solução do sistema dado pelas equações (3.5) e (3.6).

As figuras 3.2 e 3.3 ilustram os gráficos das probabilidades aqui calculadas para os casos BD e DB na estrela. Observe que no caso BD, P_i^0 e P_i^1 são muito próximos. Enquanto que, no caso DB, P_i^0 e P_i^1 são bem diferentes.

3.2 Expressões assintóticas da probabilidade de fixação na estrela: caso DB

Daqui por diante, trataremos de deduzir expressões assintóticas para as probabilidades de fixação P_i^0 e P_i^1 quando ambos o tamanho da população e o número de mutantes i tendem para o infinito e, supondo-se que a fração de pontas ocupadas por mutantes $x = i/n$ seja mantida fixa. Com o objetivo de obter tais expressões, vamos definir
$$\pi^0(x) = \lim_{n\to\infty} P_{[nx]}^0 \tag{3.25}$$
e
$$\pi^1(x) = \lim_{n\to\infty} P_{[nx]}^1, \tag{3.26}$$
onde $[z]$ é o inteiro mais próximo de z. Definamos também
$$\rho_k \equiv \frac{\alpha_k}{\beta_k},$$

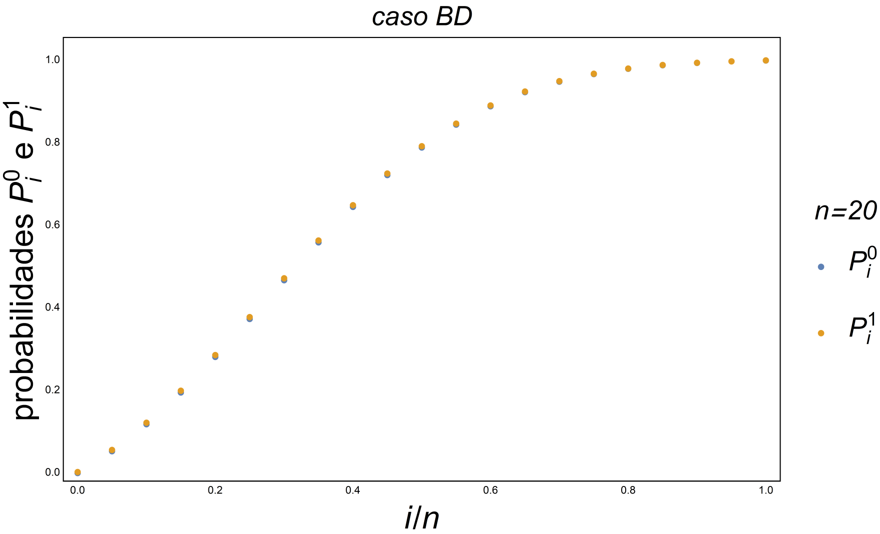

Figura 3.2: Gráfico das probabilidades de fixação de A no grafo estrela com $n = 20$ pontas em função da fração inicial i/n de indivíduos A na população para o caso BD com matriz de pagamentos $a = 2.9,\ b = 1.8,\ c = 2.2,\ d = 2$. Observe que para cada i, P_i^0 e P_i^1 são tão próximos que é difícil distinguí-los no gráfico.

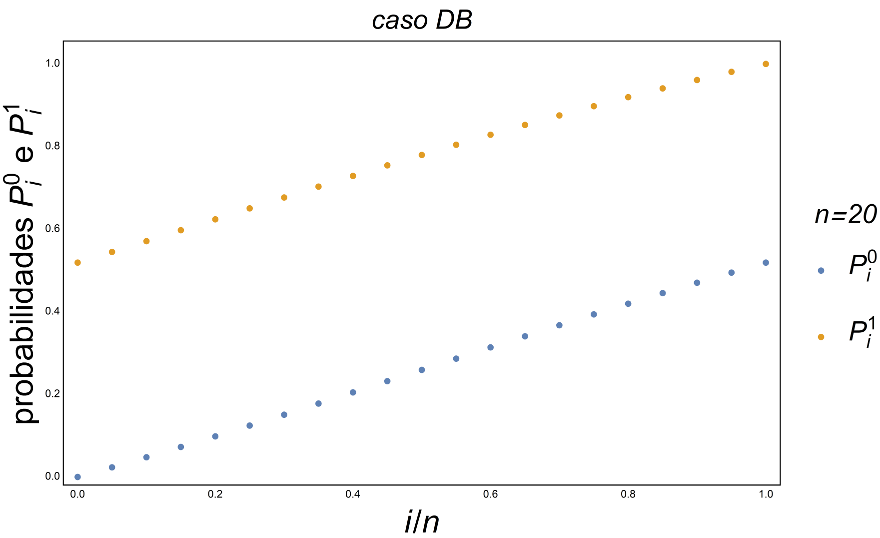

Figura 3.3: Gráfico das probabilidades de fixação de A no grafo estrela com $n = 20$ pontas em função da fração inicial i/n de indivíduos A na população para o caso DB com matriz de pagamentos $a = 2.9,\ b = 1.8,\ c = 2.2,\ d = 2$.

onde α_k e β_k aparecem nas expressões (3.5) e (3.6) e são dados por expressões conhecidas que dependem de estarmos considerando o caso BD (3.3) ou o DB (3.4).

Ao investigarmos fórmulas assintóticas para as probabilidades de fixação quando $n \to \infty$, percebemos que existe uma grande diferença entre os casos BD e DB e, por isso, a partir de agora, iremos tratá-los separadamente. Comecemos com o caso DB, que é mais simples.

Para o caso DB, tomando as expressões (3.4) seguem que

$$\frac{\alpha_i}{\beta_i} = 1 + \frac{1}{n}\frac{r_i - 1}{1 + \frac{i}{n}(r_i - 1)} + O(\frac{1}{n^2}), \tag{3.27}$$

$$1 - \alpha_i = \frac{1}{n}\frac{1}{1 + \frac{i}{n}(r_i - 1)} + O(\frac{1}{n^2}), \tag{3.28}$$

e

$$1 - \beta_i = \frac{1}{n}\frac{r_i}{1 + \frac{i}{n}(r_i - 1)} + O(\frac{1}{n^2}). \tag{3.29}$$

Podemos agora obter fórmulas assintóticas para as probabilidades de fixação quando $n \to \infty$ no caso DB na estrela.

Teorema 15. *Defina*

$$\Theta(x) \equiv \int_0^x \frac{R(y)}{1 + y\ (R(y) - 1)}\ e^{-\int_0^y \frac{R(z)-1}{1+z(R(z)-1)}\ dz}\ dy \tag{3.30}$$

e

$$\Xi(x) \equiv \int_0^x \frac{1}{1 + y\ (R(y) - 1)}\ e^{-\int_0^y \frac{R(z)-1}{1+z(R(z)-1)}\ dz}\ dy, \tag{3.31}$$

onde R é definido em (1.30). Então, para o caso DB na estrela, temos que

$$\pi^0(x) \stackrel{n\to\infty}{\longrightarrow} \frac{\Theta(x)}{1 + \Xi(1)} \tag{3.32}$$

e

$$\pi^1(x) \stackrel{n\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1 + \Xi(x)}{1 + \Xi(1)}. \tag{3.33}$$

Demonstração. Primeiramente, usando a expressão (3.27) e que $\log(1 + x) = x + O(x^2)$ escrevemos

$$\prod_{k=1}^{[nx]} \rho_k^{-1} = e^{-\sum_{k=1}^{[nx]} \log \rho_k} = e^{-\sum_{k=1}^{[nx]} \frac{1}{n}\left[\frac{r_k - 1}{1 + \frac{k}{n}(r_k - 1)} + O(\frac{1}{n})\right]}. \tag{3.34}$$

Daí podemos garantir que

$$e^{-\sum_{k=1}^{[nx]} \frac{1}{n}\left[\frac{r_k - 1}{1 + \frac{k}{N}(r_k - 1)} + O(\frac{1}{n})\right]} \stackrel{n\to\infty}{\longrightarrow} e^{-\int_0^y \frac{R(z)-1}{1+z(R(z)-1)}\ dz}, \tag{3.35}$$

$$\sum_{j=1}^{[nx]}(1-\beta_j)\prod_{k=1}^{j}\rho_k^{-1} \overset{n\to\infty}{\longrightarrow} \Theta(x), \tag{3.36}$$

e

$$\sum_{j=1}^{[nx]-1}(1-\alpha_j)\prod_{k=1}^{j}\rho_k^{-1} \overset{n\to\infty}{\longrightarrow} \Xi(x). \tag{3.37}$$

Portanto, substituindo os termos de P_i^0 e P_i^1 quando $n \to \infty$ pelos seus correspondentes em (3.36) e (3.37), chegamos a

$$\pi^0(x) \overset{n\to\infty}{\longrightarrow} \frac{\Theta(x)}{1+\Xi(1)} \tag{3.38}$$

e

$$\pi^1(x) \overset{n\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1+\Xi(x)}{1+\Xi(1)}. \tag{3.39}$$

□

No caso particular de aptidões independentes da frequência $r_i = r$, as integrais do Teorema 15 são facilmente calculáveis:

$$\Theta(x) = \frac{rx}{1+x(r-1)} \tag{3.40}$$

e

$$\Xi(x) = \frac{x}{1+x(r-1)}. \tag{3.41}$$

Corolário 16. *No caso DB com aptidões independentes da frequência $r_i = r$, valem as seguintes expressões assintóticas*

$$\pi^0(x) \overset{n\to\infty}{\longrightarrow} \frac{r^2x}{(1+r)(1+x(r-1))} \tag{3.42}$$

e

$$\pi^1(x) \overset{n\to\infty}{\longrightarrow} \frac{r(1+rx)}{(1+r)(1+x(r-1))}. \tag{3.43}$$

A figura 3.4 mostra a diferença entre a probabilidade de fixação $P_{[nx]}^0$ e sua expressão assintótica $\pi^0(x)$ dada por (3.32). Conforme era de se esperar, a diferença entre as expressões exatas e as assintóticas são pequenas quando n é grande.

Vale a pena mencionar que, sem ter a fórmula exata, aproximações contínuas para as probabilidades de fixação nos casos BD e DB, no chamado regime de seleção fraca, foram obtidas em [3].

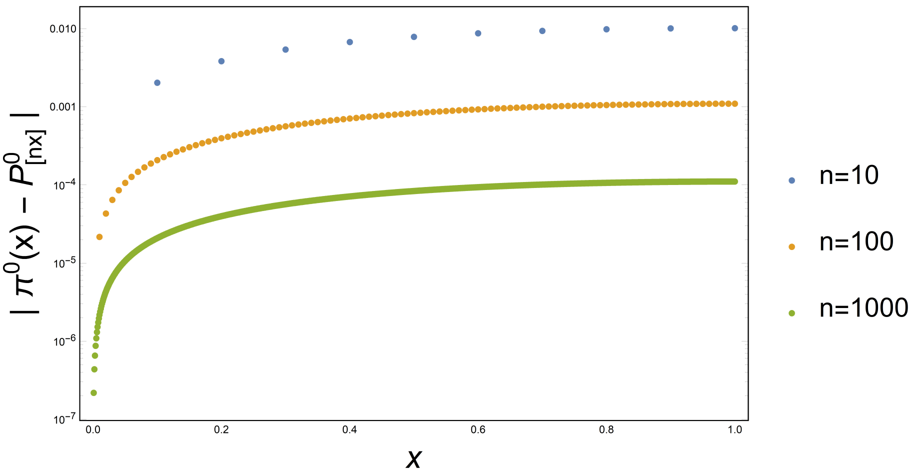

Figura 3.4: Gráfico com escala vertical logarítmica da diferença entre a probabilidade de fixação $P^0_{[nx]}$ e sua expressão assintótica $\pi^0(x)$ dada por (3.32) em função da fração $x = i/n$ de A indivíduos na população. Neste exemplo, a matriz de pagamentos é dada por $a = 2.9,\ b = 1.8,\ c = 2.2,$ e $d = 2$.

3.3 Problemas em aberto

3.3.1 Expressões assintóticas da probabilidade de fixação na estrela: caso BD

Consideremos agora o caso BD, cujas expressões para α_i e β_i são dados por

$$\alpha_i = \frac{r_i}{r_i + n} \quad \text{e} \quad \beta_i = \frac{1}{nr_i + 1} \tag{3.44}$$

Assim, no caso BD, obtemos

$$\frac{\alpha_i}{\beta_i} = r_i^2 + \frac{1}{n}(\frac{1}{r_i} - r_i) + O(\frac{1}{n^2}), \tag{3.45}$$

bem como

$$1 - \alpha_i = 1 - \frac{r_i}{n} + O(\frac{1}{n^2}) \quad \text{e} \quad 1 - \beta_i = 1 - \frac{1}{nr_i} + O(\frac{1}{n^2}). \tag{3.46}$$

Observe no caso BD que, se n é grande e as aptidões são independentes da frequência, $r_i = r$, então

$$\frac{\alpha_i}{\beta_i} \approx r^2, \tag{3.47}$$

além de que as expressões em (3.46) são ambas aproximadas por 1. Daí resulta, pelas fórmulas (3.21) e (3.24), que para o grafo estrela no caso BD e n grande a probabilidade de fixação de um mutante com aptidão relativa r é aproximadamente a do processo de Moran para população não-estruturada com aptidão r^2 [9]. Portanto a estrela é um amplificador de seleção. Na situação de aptidões independentes da frequência, a figura 3.5 mostra juntamente o gráfico da probabilidade de fixação π_i para o caso de população não-estruturada e os gráficos das probabilidades de fixação P_i^0 e P_i^1 para o caso BD, onde em ambos os casos $r = 1.1$.

Para deduzirmos as expressões assintóticas da probabilidade de fixação para o caso BD, vamos repetir o raciocínio empregado na demonstração do Teorema 15. Usando a expressão (3.45) tem-se

$$\prod_{k=1}^{[nx]} \rho_k^{-1} = e^{-\sum_{k=1}^{[nx]} \log \rho_k} = e^{-\sum_{k=1}^{[nx]} \log\left[r_i^2 + \frac{1}{n}(\frac{1}{r_i} - r_i) + O(\frac{1}{n^2})\right]}. \tag{3.48}$$

Lembre-se que, para "transformar" somas em integrais, precisamos de um fator $1/n$ dentro da soma. No caso DB, um fator $1/n$ aparecia naturalmente no somatório do expoente da expressão (3.35) mas, no caso BD, o mesmo não ocorre. O que torna mais complicado obter expressões assintóticas para as probabilidades de fixação no caso BD é que precisamos introduzir um fator $1/n$ dentro da soma do expoente da expressão (3.48), o qual deverá ser obviamente contrabalançado por um n do lado de fora.

De maneira parecida ao que fizemos em (1.27) e (1.28) podemos definir

$$\ell_j = -\sum_{k=1}^{j} \frac{1}{n} \log \rho_k \tag{3.49}$$

e reescrever as fórmulas para P_i^0 e P_i^1 como

$$P_{[nx]}^0 = \frac{\sum_{j=1}^{i}(1-\beta_j)e^{n\ell_{[nx]}}}{1+\sum_{j=1}^{n-1}(1-\alpha_j)e^{n\ell_{[nx]}}} \tag{3.50}$$

e

$$P_{[nx]}^1 = \frac{1+\sum_{j=1}^{i-1}(1-\alpha_j)e^{n\ell_{[nx]}}}{1+\sum_{j=1}^{n-1}(1-\alpha_j)e^{n\ell_{[nx]}}}. \tag{3.51}$$

Desse modo, acreditamos que para obtermos as fórmulas assintóticas para as probabilidades de fixação no caso BD, devemos lançar mão de uma versão para somas do método de Laplace análogo ao que foi feito em [4] no caso de populações não-estruturadas, e que descrevemos de forma qualitativa na seção 1.3.

3.3.2 Uma propriedade do caso DB

Se observarmos a Figura 3.3, parece que, no caso DB, $P_n^0 = P_0^1$. Observe ainda que no caso de aptidões independentes da frequência, o Corolário 16 nos informa

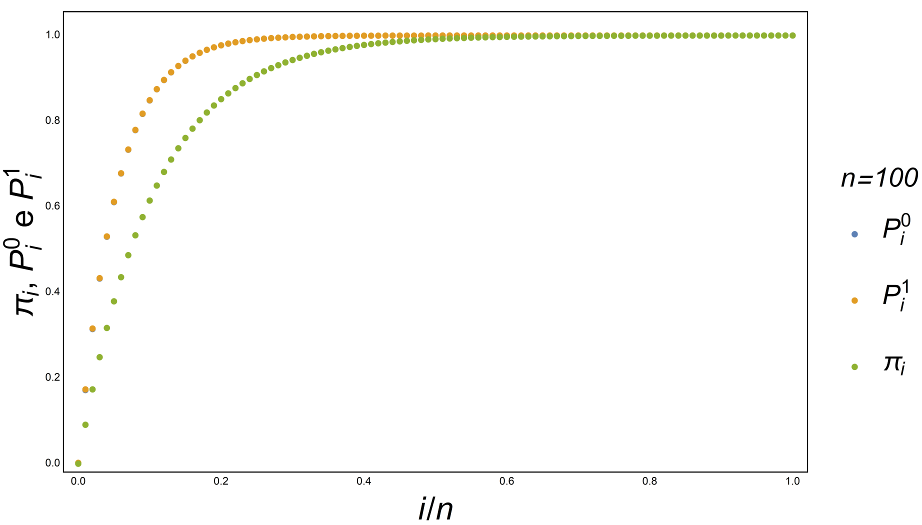

Figura 3.5: Gráfico da probabilidade de fixação π_i para o processo de Moran em população não-estruturada e das probabilidades de fixação P_i^0 e P_i^1 para o caso BD na estrela com 100 pontas. Neste gráfico, a diferença entre P_i^0 e P_i^1 é invisível para todos os valores de i. Neste exemplo, o regime de seleção é constante com $r = 1.1$. O gráfico mostra que a estrela é um amplificador de seleção.

que

$$\pi^0(1) = \frac{r}{1+r} = \pi^1(0). \tag{3.52}$$

Com a ajuda do computador, realizamos alguns cálculos numéricos envolvendo as expressões para P_n^0 e P_0^1 e matrizes de pagamento arbitrárias, e os resultados que obtivemos parecem apoiar a conjectura de igualdade exata das duas quantidades. No entanto, ainda não fomos capazes de verificar a sua veracidade. Da mesma forma, para o caso de aptidões dependentes da frequência, cálculos numéricos sugerem que $\Theta(1) = 1$ e, portanto, no Teorema 15, também obtemos a conjectura relacionada $\pi^0(1) = \pi^1(0)$.

3.3.3 Uma diferença entre os casos BD e DB

Observe que, a diferença $d_i^{10} = P_i^1 - P_i^0$ é positiva. Isso é uma consequência imediata da expressão

$$d_i^{10} = \prod_{j=1}^{i} \left(\frac{\beta_j}{\alpha_{j-1}} \right) P_0^1. \tag{3.53}$$

Em todas as figuras mostradas aqui, pode-se ver que os gráficos de P_i^0 e P_i^1 são muito próximos no caso BD, enquanto que, no caso DB eles são mais afastados. Portanto, espera-se que para cada valor de i, a diferença d_i^{10} seja pequena para o caso BD e maior para o caso DB. Porém, nos cálculos que realizamos, não conseguimos enxergar de modo claro como a expressão (3.53) evidencia esse fato.

Conclusão

No processo de Moran em populações finitas com aptidões dependentes da frequência e duas estratégias somos capazes de determinar uma fórmula exata para a probabilidade de fixação π_i. Porém, apesar de explicita, a fórmula de π_i não deixa transparecer de modo claro o que se passa na dinâmica do processo. Mesmo assim, comparando-se a aptidão dos tipos de indivíduos e, utilizando-se apenas dos valores da probabilidade de fixação π_i para $i = 1$ e $i = N - 1$, é possível estabelecer uma classificação precisa dos cenários evolutivos que podem ocorrer no processo. Outrossim, valendo-se da derivada discreta de π_i, cuja formulação é mais simples, prova-se que o gráfico da probabilidade de fixação π_i em função da fração de indivíduos na população tem uma forma característica em cada cenário evolutivo. Examinamos também o comportamento dos cenários evolutivos quando o tamanho da população é arbitrariamente grande. Nessa direção, obtivemos uma classe de resultados que aumentam o nosso entendimento sobre a dinâmica estocástica no limite $N \to \infty$. Vimos por exemplo, que se fixarmos a matriz de pagamentos e o parâmetro intensidade de seleção w, devemos esperar que para tamanhos de população suficientemente grandes alguns desses cenários deixem de existir. Em determinados casos, esses resultados estabelecem também critérios para a fixação dos tipos de indivíduos quando a população é arbitrariamente grande.

Na segunda parte desse trabalho, descrevemos o processo de Moran em populações finitas com estrutura de grafo, do qual o mesmo processo para populações não-estruturadas é um caso particular. O processo de Moran em grafos é mais complicado, visto que, para determinarmos a probabilidade de fixação P_C é necessário, na maioria dos casos, resolvermos um sistema linear cujo número de equações é da ordem de $2^{|V|}$, com $|V|$ sendo o número de vértices do grafo. Apesar disso, se o grafo possuir simetrias, podemos esperar uma diminuição do número de equações do sistema. Conforme estudamos, se pudermos determinar os automorfismos associados a tais simetrias, podemos evocar o Lema de Burnside e calcular precisamente o número de equações relevantes no sistema. Obviamente, isso não nos fornece de imediato a solução do sistema, mas é um indicativo da sua complexidade. Além disso, enunciamos e provamos o Teorema Isotérmico que estabelece uma importante classe de grafos na qual somos capazes de exibir uma solução exata do sistema que determina P_C.

Por fim, estudamos os processos de nascimento-morte (BD) e morte- nascimento (DB) no grafo estrela, que é um bom exemplo de grafo simétrico. Embora esses sejam processos distintos, desenvolvemos um método que nos permite solucionar simultaneamente para os casos BD e DB na estrela o sistema que determina P_C. Além disso, no caso DB somos capazes de determinar uma expressão exata da probabilidade de fixação no limite $N \to \infty$. Por outro lado, determinar uma expressão assintótica da probabilidade de fixação no caso BD requer um pouco mais de trabalho. Devido a essa dificuldade, não tivemos tempo de fazer uma análise mais rigorosa de tais expressões para o caso BD de modo a incluí-las no texto.

Apêndice A

Uma breve revisão de álgebra

Para ajudar no entendimento da seção 2.4, faremos a seguir uma breve revisão sobre grupos simétricos e ações de grupos. O leitor que desejar aprender mais sobre o tema poderá consultar publicações que tratam desse assunto, como, por exemplo, as referências [5], [6] e [8].

A.1 Grupos simétricos

Seja X um conjunto não-vazio e S_X o conjunto de todas as bijeções $X \xrightarrow{\sigma} X$. O conjunto S_X é um grupo com a operação de composição $\circ$, chamado grupo simétrico de X. Os elementos de S_X são chamados de permutações.

Os isomorfismos que compõem S_X dependem apenas da cardinalidade do conjunto X e não dos elementos de X. Assim, se X e Y são conjuntos com a mesma cardinalidade, temos que $S_X \simeq S_Y$.

No caso particular em que $X = I_n := \{1, 2, \ldots, n\}$, o grupo simétrico de I_n é denotado por S_n. O grupo S_n possui ordem $n!$. Uma notação eficaz para escrever os elementos σ de S_n é dada na seguinte definição:

Definição 6. *Se $i_1, i_2, \ldots, i_r$, $r \leq n$, são distintos elementos de I_n, o símbolo $(i_1 i_2 i_3 \cdots i_r)$ denotará a permutação que mapeia $i_1 \mapsto i_2$, $i_2 \mapsto i_3$, $i_3 \mapsto i_4, \ldots,$ $i_{r-1} \mapsto i_r$, e $i_r \mapsto i_1$, e os demais elementos de I_n em si mesmos. Chamamos $(i_1 i_2 i_3 \cdots i_r)$ de um ciclo de comprimento r ou um r-ciclo.*

Por simplicidade, adotaremos a convenção de omitir na utilização da notação de r-ciclo a escrita dos 1-ciclos, quando for o caso. Contudo, a identidade de S_n, que na notação de r-ciclos se escreve como $(1)(2)\ldots(n)$, será simplesmente escrita como 1. Note que a notação para ciclos não é única, já que $(i_1 i_2 i_3 \cdots i_r)$ pode representar um elemento de qualquer S_n para $n \geq r$. No entanto, se o contexto estiver claro isso não causará nenhuma confusão.

Exemplo. O grupo S_3 tem $3! = 6$ elementos, que na notação de r-ciclo se escrevem como:

$$1, (23), (13), (12), (123) \text{ e } (132).$$

Teorema 17. *Toda permutação em S_n que é diferente da identidade, pode ser escrita de maneira única (a menos de ordenamento de fatores) como um produto de ciclos disjuntos, cada ciclo tendo pelo menos comprimento 2.*

A.2 Ações de grupos

Definição 7. *Seja G um grupo. Uma ação do grupo G no conjunto X é uma função*

$$\begin{array}{ccc} G \times X & \longrightarrow & X \\ (g, x) & \mapsto & g \cdot x \end{array} \tag{A.1}$$

tal que para todo $x \in X$ e $g_1, g_2 \in G$, valem as seguintes duas propriedades:

$$1_G \cdot x = x \quad \text{e} \quad (g_1 g_2) \cdot x = g_1 \cdot (g_2 \cdot x).$$

Quando uma tal função existe, diz-se que o grupo G age no conjunto X.

Exemplo. Se H é um subgrupo de um grupo G. A ação de H no conjunto G é dada por $(h, x) \mapsto hxh^{-1}$. A ação de $h \in G$ é chamada de ***conjugação*** por h e o elemento hxh^{-1} é chamado de **conjugado** de x. Se K é qualquer subgrupo de G e $h \in H$, então hKh^{-1} é um subgrupo de G isomorfo a K. Temos que H age no conjunto de todos subgrupos de G por conjugação: $(h, K) \mapsto hKh^{-1}$. Dizemos que o grupo hKh^{-1} é conjugado a K.

Proposição 18. *Se G é um grupo que age no conjunto X, então*

1. *A relação no conjunto X definida por*

   $$x \sim y \Leftrightarrow g \cdot x = y, \quad \text{para algum} \quad g \in G$$

   é uma relação de equivalência.

2. *Para cada $x \in X$,*

   $$E(x) = \{g \in G \mid g \cdot x = x\} \tag{A.2}$$

   é um subgrupo de G.

As classes de equivalência da relação de equivalência definida na proposição 18 são chamadas de órbitas de G em X. O subgrupo $E(x)$ é chamado de estabilizador de x.

Note que quando x e y pertencem à mesma órbita, $E(x)$ e $E(y)$ são subgrupos conjugados de G e portanto $|E(x)| = |E(Y)|$.

Proposição 19. *Para qualquer elemento* y *de uma órbita* Y *de* G*, tem-se*

$$|G| = |E(y)| \ \ |Y|, \tag{A.3}$$

isto é, o número de elementos na órbita de y *é o índice do estabilizador de* y *em* G.

Definição 8. *Seja* G *um grupo agindo em* X*, definimos o* Fix *de* $g \in G$ *como*

$$Fix(g) = \{x \in X \mid g \cdot x = x\}.$$

Lema de Burnside. *O número* $N(G)$ *de órbitas de* G *é dado por*

$$N(G) = |G|^{-1} \sum_{g \in G} |Fix(g)| \tag{A.4}$$

Referências Bibliográficas

[1] Broom, M., Rychtář, J., An analysis of the fixation probability of a mutant on special classes of non-directed graphs. *Procedings of Royal Society A*, vol. 464, pp. 2609-2627, 2008

[2] Broom, M., Hadjichrysanthou, C., Rychtář, J., Stadler, T., Two results on evolutionary processes on general non-directed graph. *Procedings of Royal Society A*, vol. 466, pp. 2795-2798, 2010

[3] da Silva, P. H., Two Studies on the Mathematical Analysis of Evolution: Fixation in star-like graphs and phylogenetic reconstruction through breakpoint medians. Tese de doutorado no programa de pós-graduação em Matemática da UFF, dezembro 2017

[4] de Souza, E. P., Ferreira, E. M., Neves, A. G. M., Fixation probabilities for the Moran process in evolutionary game with two strategies: graph shapes and large population asymptotics. *Journal of Mathematical Biology*, vol. 78, pp. 1033-1065, 2018. DOI 10.1007/s00285-018-1300-4

[5] Dummit, D. S., Foote, R. M., Abstract Algebra, Third Edition. *John Wiley & Sons, Inc*, 2004

[6] Hungerford, T. W., Algebra - Graduate Text in Mathematics. *Springer-Verlag*, New York, Inc

[7] I. G. Petrovsky, Lectures on partial differential equations. *Dover Publications*, 1992

[8] José Plínio O. Santos e Eduardo Bovo, O Teorema de Burnside e Aplicações. Texto para minicurso na 2a. Bienal da SBM, Salvador, 2004

[9] Lieberman, E., Hauert, C., Nowak, M. A., Evolutionary dynamics on graphs. *Nature*, vol. 433, pp. 312-316, 2005

[10] Moran, P. A. P., Random processes in genetics. *Proceedings Cambridge Philosophical Society*, vol. 54, pp. 60-71, 1958

[11] Neves, A. G. M., Aplicações biológicas de cadeia de Markov. *Sociedade Brasileira de Matemática - SBM*, Rio de Janeiro, Brasil, 2014

[12] Nowak, M. A., Sasaki, A., Taylor, C., Fudenberg, D., Emergence of cooperation and evolutionary stability in finite populations. *Nature*, vol. 428, pp. 646-650, 2004

[13] Nowak, M. A., Evolutionary Dynamics - Exploring the Equations of Life. *Havard University Press*, Cambridge, Mass, USA, 2005

[14] Taylor, C., Fudenberg, D., Sasaki, A., Nowak, M. A., Evolutionay game dynamics in finite populations. *Bulletin of Mathematical Biology*, vol. 66, pp. 1621-1644, 2004