

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Instituto de Ciências Exatas
Programa de Pós-Graduação em Matemática

Evandro Pereira de Souza

**PROBABILIDADES DE FIXAÇÃO NA APROXIMAÇÃO DE
BAIXA MIGRAÇÃO DO PROCESSO DE MORAN EM
METAPOPULAÇÕES ESTRUTURADAS POR GRAFOS**

Belo Horizonte
2024

Evandro Pereira de Souza

**PROBABILIDADES DE FIXAÇÃO NA APROXIMAÇÃO DE
BAIXA MIGRAÇÃO DO PROCESSO DE MORAN EM
METAPOPLULAÇÕES ESTRUTURADAS POR GRAFOS**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito para obtenção do título de Doutor em Matemática.

Orientador: Prof. Dr. Armando Gil Magalhães Neves

Belo Horizonte
2024

2024, Evandro Pereira de Souza.
Todos os direitos reservados

Souza, Evandro Pereira de.

S729p Probabilidades de fixação na aproximação de baixa migração do processo de Moran em metapopulações estruturadas por grafos [recurso eletrônico] / Evandro Pereira de Souza. Belo Horizonte — 2024.
1 recurso online (107 f. il.): pdf.

Orientador: Armando Gil Magalhães Neves.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Minas Gerais, Instituto de Ciências Exatas, Departamento de Matemática.

Referências: f. 102-106

1. Matemática – Teses. 2. Aproximação assintótica - Teses. 3. Teoria evolutiva em grafos – Teses. 4. Jogos de probabilidades (Matemática) – Teses. 5. Markov, Processos de - 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 Irénquer Vismeg
Lucas Cruz - CRB 6ª Região - nº 819.

ATA DA DUCENTÉSIMA DÉCIMA QUARTA DEFESA DE TESE DE DOUTORADO DO ALUNO EVANDRO PEREIRA DE SOUZA, REGULARMENTE MATRICULADO NO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA DO INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS, REALIZADA DIA 05 DE JULHO DE 2024.

Aos cinco dias do mês de julho de 2024, às 10h00, na sala 3060, reuniram-se os professores abaixo relacionados, formando a Comissão Examinadora homologada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Matemática, para julgar a defesa de tese do aluno **Evandro Pereira de Souza**, intitulada: “*Probabilidades de fixação na aproximação de baixa migração do processo de Moran em metapopulações estruturadas por grafos*”, requisito final para obtenção do Grau de Doutor em Matemática. Abrindo a sessão, o Senhor Presidente da Comissão, Prof. Armando Gil Magalhães Neves, após dar conhecimento aos presentes do teor das normas regulamentares do trabalho final, passou a palavra ao aluno para apresentação de seu trabalho. Seguiu-se a arguição pelos examinadores com a respectiva defesa do aluno. Após a defesa, os membros da banca examinadora reuniram-se reservadamente, sem a presença do aluno, para julgamento e expedição do resultado final. Foi atribuída a seguinte indicação: o aluno foi considerado aprovado sem ressalvas e por unanimidade. O resultado final foi comunicado publicamente ao aluno pelo Senhor Presidente da Comissão. Nada mais havendo a tratar, o Presidente encerrou a reunião e lavrou a presente Ata, que será assinada por todos os membros participantes da banca examinadora. Belo Horizonte, 05 de julho de 2024.


PROF. DR. ARMANDO GIL MAGALHÃES NEVES
Orientador (UFMG)


PROFA. DRA. ELIZA MARIA FERREIRA
Examinadora (UFLA)


PROF. DR. JOSÉ LUIZ ACEBAL
Examinador (CEFET-MG)


PROF. DR. LUCAS WARDIL
Examinador (FIS-UFMG)


PROF. DR. WILHELM ALEXANDER CARDOSO STEINMETZ
Examinador (UFMG)

Agradecimentos

Agradeço de coração aos meus pais, que sempre inculcaram em mim o valor dos estudos e que não mediram esforços para que eu e minhas irmãs pudéssemos ter a melhor educação possível.

Agradeço profundamente ao professor Armando Gil Magalhães Neves pela orientação acadêmica e pelo apoio que me deu de diversas formas. Agradeço à ele também pelo extenso trabalho de revisão em cima desta tese.

Agradeço a todos professores, professoras, funcionários e funcionárias do Departamento de Matemática da UFMG, que contribuíram, direta ou indiretamente, para a minha formação acadêmica.

Por fim, agradeço à agência Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pela bolsa de doutorado.

Resumo

Nesta tese vamos apresentar alguns resultados desenvolvidos por nós a partir do trabalho de Yagoobi e Traulsen [44] sobre a *aproximação de baixa migração* (ABM) do processo de Moran em metapopulações com dois tipos de indivíduos e estruturadas por grafos dirigidos [26]. Nesse contexto, concentramo-nos em estudar a probabilidade de fixação dos tipos considerando que as aptidões independem da frequência e sob duas regras de atualização: nascimento-morte (Bd) e morte-nascimento (dB). Trabalharemos aqui com dois casos particulares de metapopulações: duas únicas populações isoladas geograficamente e a metaestrela. Em ambos os casos, utilizaremos a ABM para obter, dentro dessa aproximação, fórmulas exatas para a probabilidade de fixação com condição inicial num estado homogêneo arbitrário da metapopulação. Em seguida, deduziremos fórmulas assintóticas para as probabilidades de fixação que obtemos na ABM, a descrição precisa do limite assintótico será dada oportunamente. Posteriormente, vamos lançar mão dessas aproximações assintóticas para quantificar o tamanho da vantagem ou desvantagem que a estrutura confere à fixação de uma mutação introduzida de maneira uniforme na metapopulação. Baseando-se em nossos resultados assintóticos, estabeleceremos também condições que nos permitem inferir se a estrutura da metapopulação em consideração atua como, por exemplo, supressora ou amplificadora de seleção natural, tanto na regra Bd quanto na regra dB. Em particular, nossos resultados mostram que, contrário ao que Yagoobi e Traulsen obtiveram anteriormente, a metaestrela na regra Bd pode atuar como supressora de seleção natural ou mesmo como redutora. Mostramos também que, dependendo da razão entre a população do centro e a população total das pontas, a metaestrela dB pode apresentar um comportamento que não é nem amplificação, nem supressão.

Palavras-chave: metapopulações; processo de Moran; teoria evolutiva em grafos; evolução.

Abstract

In this thesis we present some original results based on the work of Yagoobi and Traulsen [44] on the *low migration regime* for the Moran process in network structured meta-populations with two types of individuals [26]. We investigate the fixation probability of both types in the case of frequency independent fitnesses and under two update rules: birth-death (Bd) and death-birth (dB). Our analysis includes two particular cases of meta-populations: two-patch meta-population and meta-star. In both cases, we use the low migration approximation to obtain exact formulas for the fixation probability with initial condition in an arbitrary homogeneous state of the meta-population. After that, we deduce an asymptotic formula for the fixation probabilities obtained in the low migration approximation; the precise description of the asymptotic limit will be given in due course. Furthermore, we apply the asymptotic approximation to quantify the size of the advantage or disadvantage that population structure imposes on the fixation of a mutation introduced uniformly into the meta-population. Based on our asymptotic results, we also establish conditions that permit us to infer whether the metapopulation structure under consideration acts as, for example, a suppressor or amplifier of natural selection. We do that analysis both in the Bd rule and in the dB rule. In particular, our results show that, contrary to what Yagoobi and Traulsen found, the meta-star under Bd rule may act as a suppressor of natural selection or even as reducer. In addition, depending on the ratio between the size of the population at centre and the total size of population at leaves, the meta-star under dB rule can exhibit behaviour that is neither amplification nor suppression.

Keywords: meta-populations; Moran process; evolutionary graph theory; evolution.

Sumário

0	Introdução	9
1	O processo de Moran em populações estruturadas	15
1.1	O processo de Moran em grafos	16
1.2	Probabilidades de fixação no grafo estrela	26
1.2.1	A regra Bd na estrela e o fator de amplificação r^2 . . .	33
1.2.2	A regra dB na estrela: uma visão pelo problema do colecionador de figurinhas	35
1.3	Comportamento assintótico das probabilidades de fixação na estrela	39
1.3.1	Estrela: caso dB	40
1.3.2	Estrela: caso Bd	42
2	O processo de Moran em metapopulações estruturadas	44
3	O processo de Moran na ABM de duas subpopulações	48
3.1	Probabilidades de fixação em duas subpopulações	49
3.2	Probabilidade de fixação de uma mutação em duas subpopulações	59
3.3	Absorção dos Neandertais na população humana	65
4	O processo de Moran na ABM da metaestrela	68
4.1	Metaestrela	68
4.2	Metaestrela: caso Bd	74
4.3	Metaestrela: caso dB	84
5	Conclusão	99

SUMÁRIO

Referências	102
Índice Remissivo	107

Capítulo 0

Introdução

Em fins de 1859, quando Charles Darwin publicou a sua Teoria da Evolução [11], pouco ou nada se sabia a respeito dos mecanismos envolvidos na transmissão das características hereditárias. Darwin propôs que a seleção natural atuava nas variações existentes de organismos especialmente adaptadas ao seu ambiente, e, por isso, transmitiam essas características à sua descendência. Entretanto, a seleção natural como mecanismo de evolução falhava em explicar a origem de tais variações. Mas as respostas estavam por vir. Em 1866, Gregor Mendel publicou a primeira teoria correta a respeito da hereditariedade [1]. Nas suas experiências com ervilhas, Mendel descobriu o que chamou de “unidades básicas da hereditariedade”, ocultas nas células, e afirmou que estas eram responsáveis pela transmissão de traços, ou características. Em 1953, quando James Watson e Francis Crick descobriram a estrutura química em dupla hélice do DNA, os humanos deram um grande passo à frente na solução dos mistérios da vida. Mesmo assim, levou quase uma década para que os biólogos começassem a entender a “linguagem” usada pelas moléculas de DNA para transportar informações genéticas. E os geneticistas só terminaram de sequenciar o genoma humano em 2003.

Já nos primórdios do século XX, a Teoria da Evolução de Darwin aliada à Genética de Mendel despertava o interesse da comunidade científica. Foi nessa época que surgiram alguns dos trabalhos mais importantes sobre genética de populações mostrando que a ideia da seleção natural proposta por Darwin poderia operar com o mecanismo de herança mendeliana. Den-

tre os vários cientistas que contribuíram com novas descobertas, podemos citar Sewall Wright, Ronald Fisher e John B. S. Haldane que fundaram com seus trabalhos independentes o campo da Biologia Matemática que hoje conhecemos como *Genética de Populações*. Esses três cientistas são também reconhecidos como alguns dos nomes principais da chamada *Moderna Síntese Evolutiva*. A partir de então, os aspectos quantitativos dos mecanismos genéticos da evolução passaram a ser modelados matematicamente em termos da variação da frequência de genes nas populações ao longo do tempo. A esse respeito, Wright e Fisher mostraram que mesmo na ausência de seleção natural, as frequências dos genes de uma população sofrem alterações com o passar do tempo. Este outro mecanismo de evolução ficou conhecido como *deriva genética*. Posteriormente, Motoo Kimura, através da sua *teoria neutra da evolução molecular*, estabeleceu que a maioria das mudanças genéticas em uma população é resultado da deriva genética.

Em 1958, Patrick Moran propôs um modelo estocástico - o processo de Moran [29], para estudar a variação das frequências dos genes de uma população de tamanho finito com indivíduos morrendo e se reproduzindo ao longo do tempo. O processo de Moran em sua versão mais simples, supõe que os indivíduos possuem reprodução assexuada e que apenas dois tipos de alelos estão competindo por dominância na população. Se incluirmos a hipótese de que não ocorrem mutações durante a reprodução, então é possível provar que um dos dois tipos irá se fixar na população e se consegue calcular exatamente a probabilidade de fixação de cada tipo. Mais tarde, em 2004 [42, 35], o processo de Moran incorporou elementos da *Teoria de Jogos Evolutiva* [28, 22, 34], que havia sido desenvolvida para estudar a dinâmica determinística em populações infinitas no caso em que a aptidão reprodutiva dos indivíduos depende da frequência da estratégia que adotam na população.

O processo de Moran [29] em sua versão mais simples, assim como grande parte dos modelos da Biologia Matemática, pressupõe que todos os indivíduos interagem com igual probabilidade com todos os demais. Em anos recentes, houve um aumento do interesse em estudar o efeito que algum tipo de estrutura que viole a hipótese acima poderia ter sobre a evolução. Conforme já se tem observado, a distribuição espacial de uma população, ou mais geralmente o isolamento geográfico de subpopulações, tem papel importante como

mecanismo de evolução. Pesquisas têm colocado em evidência a importância de se ter uma estrutura espacial nos modelos de Genética de Populações. Hendersin et al. [21] se perguntam sobre como a estrutura de um tecido poderia influenciar o risco de desenvolvimento do câncer. Chakraborty et al. [8] realizaram experimentos de laboratório para testar a influência de uma estrutura espacial da população na evolução da resistência a antibióticos em bactérias. Vê-se também a importância de incluir uma estrutura espacial para se aprimorar os modelos de propagação de vírus e doenças transmitidas por vetores [41]. Além do mais, a inclusão do isolamento geográfico nos modelos de quantificação de mistura genética entre subpopulações de homínidos [33, 24] pode ajudar a explicar a extinção desses grupos.

Em 2005, Lieberman et al. [26] divulgaram a proposta de estudar o processo de Moran em grafos dirigidos. Nessa abordagem, cada vértice do grafo representa um único indivíduo da população enquanto que as arestas determinam o padrão e a intensidade de interação entre os indivíduos. Em geral, a probabilidade de fixação no processo de Moran em grafos depende do grafo que está sendo usado para modelar o processo. Um problema não-trivial é determinar se o grafo aumenta ou diminui a probabilidade de fixação dos tipos em relação ao caso não-estruturado [26, 34, 19]. Grafos que aumentam (diminuem) a probabilidade de fixação de um mutante mais apto e que diminuem (aumentam) a de um menos apto são denominados *amplificadores de seleção natural* (*supressores de seleção natural*). Também, em razão da estrutura de grafo, a probabilidade de fixação depende em geral da regra de atualização que está sendo considerada [20, 23].

Mais recentemente, o processo de Moran vem sendo estudado em metapopulações estruturadas por metagrafos [2, 44, 43]. Nessa abordagem, um grafo especifica as interações entre as subpopulações e um outro grafo especifica as interações de cada indivíduo com cada outro da subpopulação. No caso do grafo que especifica a interação entre as subpopulações, as arestas representam uma migração de um indivíduo de uma subpopulação para a outra.

Allen et al. [2] estudaram o processo de Moran em metagrafos no regime de seleção fraca e aptidões independentes da frequência. Eles identificam, para a regra de atualização dB, grafos de *amplificação transiente*: depen-

dendo do valor da aptidão r , o grafo amplifica ou suprime a seleção natural. Também, identificam novos exemplos de grafos *redutores de seleção natural*: para todo valor de aptidão r , o grafo é supressor de seleção natural. Os primeiros exemplos dessa classe de grafos foram divulgados em [20, 21].

Tendo em vista a complexidade envolvida no cálculo da probabilidade de fixação no processo de Moran em grafos (e em metagrafos), Yagoobi e Traulsen [44] desenvolveram *uma aproximação de baixa migração* (ABM) que lhes permitiu obter, dentro dessa aproximação, o cálculo exato de probabilidades de fixação em casos particulares de metagrafos. Porém, alguns dos resultados divulgados em [44] são baseadas em experimentos numéricos ou são pouco gerais. Por exemplo, os autores em [44], concluem que, na ABM, a metaestrela é amplificadora de seleção natural na regra Bd. Porém, nossos cálculos mostram que esse nem sempre é o caso. Além do mais, uma análise envolvendo a regra dB não é feita em [44].

Nesta tese, vamos apresentar resultados de nossa autoria que justificam e ampliam alguns dos resultados divulgados em [44].

Este trabalho contém cinco capítulos, cujos conteúdos passamos a descrever sucintamente.

No Capítulo 1 introduzimos o processo de Moran em grafos para populações com dois tipos de indivíduos e duas regras de atualização: nascimento-morte (Bd) e morte-nascimento (dB). Definimos a *Razão de Vantagem para Fixação de um Mutante* (RVFM), a principal medida de como a estrutura da população pode influenciar para maior ou menor a probabilidade de fixação de um mutante com relação ao padrão de uma população sem estrutura. Em termos da RVFM definimos o que são grafos amplificadores, supressores e redutores da seleção natural. Concentramo-nos no problema de calcular a probabilidade de fixação dos dois tipos na população. Especialmente, examinamos o processo de Moran em um caso particular importante de grafo, a estrela, e deduzimos fórmulas exatas de probabilidade de fixação no caso de aptidões dependentes da frequência. Incluímos também neste capítulo uma discussão detalhada sobre o comportamento qualitativo da probabilidade de fixação no grafo estrela no caso particular de aptidões independentes da frequência. O capítulo finda com uma breve análise do comportamento assintótico da probabilidade de fixação na estrela.

No Capítulo 2 preparamos o terreno para a discussão dos Capítulos 3 e 4, fazendo uma breve introdução ao processo de Moran em metagrafos. Também definimos de maneira geral a aproximação de baixa migração (ABM), a qual será usada em todos os desenvolvimentos teóricos dos capítulos subsequentes.

Passamos em seguida, nos Capítulos 3 e 4, à discussão do processo de Moran no metagrafo com dois vértices e na metaestrela, respectivamente. Em ambos os capítulos, tanto para a regra Bd quanto para a dB, são deduzidas, na ABM, fórmulas exatas de probabilidade de fixação com condição inicial num estado homogêneo arbitrário da metapopulação. Em seguida, abordamos o comportamento assintótico no regime de seleção forte das probabilidades obtidas na ABM, quando o tamanho das subpopulações tendem ao infinito e mantendo-se constante o valor da razão entre o tamanho delas. Na continuação, utilizamos essas aproximações assintóticas para quantificar, através da RVFM, o tamanho da vantagem ou desvantagem que o metagrafo confere à fixação de um mutante introduzido de maneira aleatória uniforme na metapopulação. Com base em nossos resultados assintóticos, estabelecemos condições que nos permitem dizer se o metagrafo atua como supressor ou amplificador de seleção natural, ou se algum outro comportamento de transiência entre amplificação e supressão aparece.

No Capítulo 3, mostramos que o metagrafo com dois vértices é, na aproximação assintótica de seleção forte, um supressor de seleção natural para a regra de atualização Bd. Para a regra dB, nossos resultados parecem indicar que comportamentos transientes [2] entre amplificação e supressão podem ocorrer.

Ainda no Capítulo 3, na Seção 3.3, discutimos o contexto biológico de um modelo matemático simplificado, proposto por Kolodny e Feldman [24], para a mistura genética de africanos anatomicamente modernos (AM) e Neandertais. Utilizamos os resultados obtidos na Seção 3.1 para calcular exatamente a probabilidade de fixação do grupo africano AM na ABM do processo de Moran neutro com isolamento geográfico dos dois grupos. Mostramos que o isolamento geográfico aumenta muito a probabilidade de fixação dos africanos AM com relação ao caso sem isolamento geográfico, desde que a população de africanos AM seja muito maior do que a de Neandertais. É interessante

notar que em [24], os autores conjecturaram esse resultado para o modelo por eles proposto - que é um modelo parecido com um processo de Moran neutro com isolamento geográfico.

No Capítulo 4, mostramos que a metaestrela Bd, contrário ao que Yagoobi e Traulsen [44] obtiveram, pode ser, na aproximação assintótica de seleção forte, amplificadora, supressora ou redutora de seleção natural, dependendo do número de folhas e dos valores das populações do centro e das folhas. O comportamento no caso dB, de forma análoga ao caso do metagrafo com dois vértices, é mais complexo e nossos resultados parecem indicar as possibilidades de supressão ou transiência, dependendo sempre do número de folhas e dos valores das populações do centro e das folhas.

Em [2], a atualização dB é utilizada e a metaestrela, ali chamada *star of islands*, é um dos casos estudados. Nossos resultados do Capítulo 4 diferem dos encontrados em [2] na aproximação de seleção fraca. Ainda precisamos entender essa discrepância.

A tese termina, no Capítulo 5, com um resumo geral dos principais resultados discutidos nos capítulos anteriores.

Capítulo 1

O processo de Moran em populações estruturadas

Neste capítulo, formalizamos o processo de Moran em populações com dois tipos de indivíduos e estruturadas por grafos. O modelo de Moran [29] supunha originalmente que as populações são mistas, isto é, não estruturadas. Essa hipótese significa que os indivíduos da população interagem com probabilidade igual com todos os demais. Podemos quebrar esta hipótese supondo que existe um grafo que modele o contato entre os indivíduos da população [26]. Mais precisamente, assumimos que os indivíduos da população ocupam os vértices de um grafo e que a interação entre eles é determinada pelas arestas - as quais, por sua vez, estão associadas um determinado “peso” probabilístico.

Na seção 1.1, discutiremos o processo de Moran em grafos. A principal quantidade que estamos interessados em estudar é a probabilidade de fixação dos tipos na população. Vamos discorrer sobre a complexidade computacional envolvida em calcular a probabilidade de fixação e como as simetrias do grafo nos auxiliam a superar tal complexidade. Na seção 1.2, especializaremos nossa discussão ao processo de Moran no grafo estrela, que é um exemplo de grafo com muitas simetrias. Nas Subseções 1.2.1 e 1.2.2, apresentaremos ao leitor uma discussão qualitativa das regras Bd e dB no grafo estrela. Na Seção 1.3, o assunto se resume ao estudo do comportamento assintótico da probabilidade de fixação no grafo estrela.

1.1 O processo de Moran em grafos

Considere uma população de tamanho constante igual a N e suponha que nesta população existam somente dois tipos de indivíduos, aos quais nos referiremos como tipo A e B . Por exemplo, no contexto da *Teoria de Jogos Evolutivos*, poderíamos pensar que os tipos são as estratégias ou o comportamento que os indivíduos adotam na população. Poderíamos também pensar que A e B sejam duas formas alternativas de um mesmo gene (ou, ainda, dois alelos para um mesmo locus gênico). Vamos supor ainda que a população está estruturada por um grafo conexo \mathcal{G} com N vértices, os quais vamos assumir que estão rotulados pelos números naturais de 1 a N . Esta hipótese, por sua vez, implica que cada vértice de \mathcal{G} representa um único indivíduo da população. Posteriormente, atendendo a teoria que será desenvolvida a partir do Capítulo 2, iremos quebrar esta hipótese e assumir que cada vértice do grafo representa uma população. Para nossos propósitos, ao invés de um grafo ordinário, poderíamos também supor que a população está estruturada por um grafo dirigido e com pesos que indiquem probabilidades de interação (hipóteses, aliás, que estão presentes no trabalho original de Lieberman et al. [26]). Contudo, usaremos, por simplicidade, a palavra grafos para nos referirmos a ambos os casos.

Para o que segue, vamos associar a cada aresta $\{i, j\}$ do grafo \mathcal{G} duas arestas orientadas: uma partindo na direção de i para j e vice-versa. Cada uma dessas arestas orientadas terá um peso probabilístico. Por exemplo, a aresta de i para j terá peso associado w_{ij} . Estes pesos podem ser tabulados convenientemente como uma matriz $N \times N$. A matriz W , assim obtida é não-negativa e com zeros na diagonal principal. Entretanto, esta matriz não é necessariamente simétrica, pois não se exige $w_{ij} = w_{ji}$. Contudo, observe que se $w_{ij} = w_{ji} = 0$ então não existe uma aresta incidindo em i e j . Note ainda que, por definição, a matriz W é estocástica por linha. O papel das arestas e dos pesos associados a elas, será esclarecido nos próximos dois parágrafos.

Nas condições mencionadas acima, suponha que o tempo transcorra de forma discreta e que no instante n ($n = 0, 1, 2 \dots$), sejam realizados dois sorteios na população: um de reprodução e outro de morte. Em geral, o sorteio de reprodução é feito de modo que os indivíduos mais aptos tenham maior

probabilidade de serem sorteados para se reproduzir do que os menos aptos. Assumimos que cada indivíduo reprodutor produza somente um descendente por vez na unidade de tempo em consideração. Nesse sentido, interpretamos a aresta $\{i, j\}$ que incide em i e j como significando que o descendente do indivíduo ocupando o vértice i pode ocupar com probabilidade w_{ij} o vértice j . Aqui, estamos supondo, implicitamente, que a reprodução é assexuada, pois cada indivíduo que nasce possui somente um ancestral. Além dessas hipóteses, vamos assumir a seguinte

Hipótese 1. *Não ocorrem mutações na população. Esta hipótese é uma simplificação útil e implica o descendente do indivíduo reprodutor ter tipo idêntico ao de seu ancestral.*

Sob este conjunto de hipóteses, faremos distinção com respeito à ordem temporal entre os sorteios de reprodução e morte que passamos a descrever no próximo parágrafo.

Consideramos dois tipos de sorteios, os quais são normalmente referidos por *regras de atualização*. Na regra nascimento-morte, ou birth-death em inglês (abreviamos Bd), primeiro um indivíduo da população é sorteado para se reproduzir com probabilidade proporcional à sua aptidão. Suponha que o vértice ocupado pelo indivíduo reprodutor seja o i . Em seguida, escolhe-se com probabilidade w_{ij} um indivíduo no vértice j , vizinho a i , para morrer. Por fim, o descendente do indivíduo que se reproduziu no vértice i irá substituir o indivíduo que morreu no vértice j . Na regra morte-nascimento (abreviado dB), invertemos a ordem dos sorteios: primeiro, escolhemos de maneira uniforme um indivíduo no vértice j para morrer e, em seguida, somente entre os seus vértices vizinhos, sorteamos com probabilidade proporcional à aptidão e aos pesos w_{ji} o vértice i do indivíduo que irá se reproduzir e gerar um descendente que ocupará o vértice j do indivíduo que morreu. A convenção usual da área [43] é que a letra maiúscula B indica que o sorteio de nascimento leva em conta a seleção natural através da aptidão do indivíduo reprodutor e a letra minúscula d indica que o sorteio de morte é uniforme. Outras regras de atualização, por exemplo BD, são possíveis, mas as mais comuns e que trataremos nesta tese são Bd e dB. Observe que, pelas regras de reprodução e morte, o tamanho da população se mantém constante igual a N durante

todo o tempo. O processo de nascimento e morte que acabamos de descrever é chamado de processo de Moran em grafos. Na seção 1.2, vamos estudar o processo de Moran no grafo estrela e veremos que resultados diferentes são obtidos dependendo de estarmos considerando a regra Bd ou dB.

A *aptidão* (ou *fitness*) de um indivíduo é, por definição, o número de descendentes que esse indivíduo deixa na geração seguinte. Denotemos por f_i e g_i a aptidão dos indivíduos do tipo A e do tipo B respectivamente. Aqui o índice $i \in \{0, 1, \dots, N\}$ se refere ao número de indivíduos do tipo A na população. Observe que, como a população é constante ao longo do tempo, o número de indivíduos do tipo B será $N - i$. No contexto da Teoria de Jogos Evolutivos, a aptidão é calculada em termos de uma matriz 2×2 , chamada de *matriz de pagamentos* [34, 13]

$$M = \begin{bmatrix} m_{11} & m_{12} \\ m_{21} & m_{22} \end{bmatrix}, \quad (1.1)$$

onde m_{11}, m_{12}, m_{21} e m_{22} são parâmetros positivos. Na matriz M , 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. Explicitamente, temos que

$$f_i = 1 - w + w \left[m_{11} \frac{i - 1}{N - 1} + m_{12} \frac{N - i}{N - 1} \right] \quad (1.2)$$

e

$$g_i = 1 - w + w \left[m_{21} \frac{i}{N - 1} + m_{22} \frac{N - i - 1}{N - 1} \right]. \quad (1.3)$$

Nas equações acima, o parâmetro $w \in [0, 1]$, denominado *intensidade de seleção*, quantifica o quanto a matriz de pagamentos contribui para a aptidão. Em particular, quando $w = 0$ todos indivíduos, independente do tipo, possuem a mesma aptidão. O caso em que $w \approx 0$ é denominado *seleção fraca* e significa que a matriz de pagamentos tem pouco efeito na aptidão dos indivíduos. Por outro lado, quando $w = 1$, a matriz de pagamentos contribui na

totalidade para a aptidão.

Observe ainda que, nas equações (1.2) e (1.3), se $m_{11} \neq m_{12}$ e $m_{21} \neq m_{22}$, f_i e g_i dependem de i , isto é, da frequência dos indivíduos do tipo A na população. Quando a aptidão dos tipos A e B depende de i dizemos que ela é dependente da frequência. Por outro lado, quando $m_{11} = m_{12}$ e $m_{21} = m_{22}$, as aptidões são independentes da frequência, como ocorre nos modelos tradicionais de Genética de Populações. Doravante, assumiremos a observação abaixo sem maiores comentários.

Observação 1. *Na maior parte desta tese, trabalharemos com aptidões independentes da frequência. Mais precisamente, vamos supor $m_{11} = m_{12} = r$, $m_{21} = m_{22} = 1$ e $w = 1$, onde r é um número real positivo. Nessas condições, $f_i = r$ e $g_i = 1$ para todo i .*

A *aptidão relativa* dos indivíduos do tipo A com relação aos do tipo B é definida como

$$r_i = \frac{f_i}{g_i} . \quad (1.4)$$

Se para algum valor de i tem-se $r_i > 1$ então para essa frequência de A , indivíduos do tipo A são mais aptos que os indivíduos do tipo B . Caso $0 < r_i < 1$, dizemos que os indivíduos do tipo B são mais aptos que os indivíduos do tipo A para aquela frequência. O caso *neutro*, $r_i = 1$, ocorre quando todos os elementos da matriz de pagamentos M são iguais ou quando a intensidade de seleção w é nula.

Como dissemos anteriormente, por ora, assumiremos que cada um dos N vértices de \mathcal{G} pode ser ocupado por apenas um único indivíduo do tipo A ou B . Assim sendo, dados os números de indivíduos de tipo A e B na população, podemos escolher de diferentes modos o conjunto dos vértices de \mathcal{G} que estarão ocupados por indivíduos do tipo A ou do tipo B . À vista disso, dizemos que uma *configuração* é uma composição da população em \mathcal{G} onde ficou determinado os vértices que estão ocupados por indivíduos do tipo A ou do tipo B . Podemos representar uma configuração de \mathcal{G} como uma sequência (x_1, x_2, \dots, x_N) de tamanho N formado por zeros e uns, onde $x_i = 1$ se o vértice i é do tipo A e $x_i = 0$ se i for do tipo B . O conjunto E de todas

configurações possíveis,

$$E = \{x = (x_1, x_2, \dots, x_N); x_i = 0 \text{ ou } 1\} \quad (1.5)$$

tem exatamente 2^N elementos.

O processo de Moran em grafos define uma cadeia de Markov $(X_n)_{n=0}^{\infty}$ com espaço de estados finito E . Os estados $\mathbf{0} = (0, 0, \dots, 0)$ e $\mathbf{1} = (1, 1, \dots, 1)$, os quais representam a composição da população onde apenas um tipo está presente, são absorventes, pois uma vez que, como consequência da hipótese de ausência de mutações, a cadeia entre em um desses estados, permanece nele para sempre. Ademais, graças à hipótese de conexidade do grafo, os demais estados são todos 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 1.1. *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 [18] ou [31].

O processo de Moran em grafos atende às hipóteses do Teorema 1.1, uma vez que há dois estados absorventes e todos os demais são transientes. Portanto, no processo de Moran em grafos, dada uma composição arbitrária da população, se esperarmos um número suficiente de unidades de tempo, com probabilidade 1, a população será composta só de indivíduos de tipo A ou só de tipo B . Esse fenômeno em que a população ao final é composta por apenas um tipo é chamado de *fixação*. Por essa razão, vamos nos preocupar daqui em diante com o seguinte problema: dada uma composição inicial de indivíduos de tipo A na população, qual a probabilidade de fixação do tipo A em cada um dos dois estados absorventes?

Para prosseguir, vamos definir π_x como a probabilidade de fixação no estado $\mathbf{1}$ dado que o estado inicial é $x = (x_1, x_2, \dots, x_N)$. É fácil ver que as

seguintes condições de contorno são válidas:

$$\pi_{\mathbf{0}} = 0 \quad \text{e} \quad \pi_{\mathbf{1}} = 1 . \quad (1.6)$$

Ademais, denotando por $T = [t_{ij}]$ a matriz de transição da cadeia (conventionamos escrever t_{ij} para denotar a probabilidade de transição do estado j para o estado i), temos

$$T = \begin{bmatrix} 1 & \vec{v}_{\mathbf{0}}^t & 0 \\ \vec{0} & Q & \vec{0} \\ 0 & \vec{v}_{\mathbf{1}}^t & 1 \end{bmatrix} , \quad (1.7)$$

onde $\vec{v}_{\mathbf{0}}$ e $\vec{v}_{\mathbf{1}}$ são respectivamente os vetores da probabilidade de transição dos estados transientes em E para os estados absorventes $\mathbf{0}$ e $\mathbf{1}$, e Q é a matriz de ordem $2^N - 2$ de transição entre os estados transientes de E .

As probabilidades de fixação são obtidas como solução de um sistema de equações lineares que podem ser escritas conjuntamente em notação matricial como

$$\pi = T^t \pi . \quad (1.8)$$

Escrevendo a equação (1.8) de maneira explícita, temos

$$Q \tilde{\pi} = \tilde{\pi} - \vec{v}_{\mathbf{1}} , \quad (1.9)$$

onde $\tilde{\pi}$ é o vetor obtido de π removendo-se as suas primeira e última coordenadas. Além disso, subtraindo o vetor $\tilde{\pi}$ de ambos os lados da equação (1.9), podemos resolver para $\tilde{\pi}$ e obter

$$\tilde{\pi} = (I - Q)^{-1} \vec{v}_{\mathbf{1}} , \quad (1.10)$$

onde I representa a matriz identidade de ordem $2^N - 2$. Pode-se provar, ver Teorema 11.4 de [18], que a matriz $I - Q$ é invertível. Sua inversa é chamada a matriz fundamental de uma cadeia de Markov absorvente [18]. Apesar de, em certos grafos particulares, podermos obter soluções explícitas para a probabilidade de fixação (1.10), não conhecemos muitos resultados exatos ou rigorosos sobre isto.

Pelo que vimos acima, o número de equações a serem resolvidas para que se possa determinar $\tilde{\pi}$ cresce exponencialmente com N , o que torna inviável a obtenção de uma solução analítica ou mesmo numérica quando N é grande.

Entretanto, podemos contornar a dificuldade mencionada acima se o grafo em consideração possuir um número razoável de simetrias. Para estes grafos em particular, podemos lançar mão de suas simetrias para reduzir substancialmente o número de equações do sistema. O uso efetivo de simetrias para diminuir o número de equações do sistema foi originalmente proposto por Broom e Rychtář [7, 6]. Por definição, uma simetria ou automorfismo de \mathcal{G} é uma permutação dos seus vértices que preserva incidência. O conjunto destas simetrias é um grupo finito chamado *grupo de automorfismos* de \mathcal{G} e denotado por $\text{Aut}(\mathcal{G})$. O grupo $\text{Aut}(\mathcal{G})$ é utilizado para poder definir uma relação de equivalência no conjunto E através da noção de ação de grupos. Mais precisamente, dados $x, y \in E$, dizemos que x é equivalente a y em E , se existe $\sigma \in \text{Aut}(\mathcal{G})$ tal que y é a imagem de x por σ . Pode-se provar, usando os axiomas de ação de grupos, que a relação assim definida é de fato uma relação de equivalência em E [39].

A ideia de como efetuar a redução do número de equações do sistema pode ser extraída a partir das seguintes observações essenciais descritas a seguir:

1. Identificamos o grupo $\text{Aut}(\mathcal{G})$ associado a \mathcal{G} .
2. Particionamos E em classes de equivalência ou órbitas e elegemos um representante para cada órbita.
3. Em cada equação do sistema trocamos a probabilidade de fixação com condição inicial no estado x pela probabilidade de fixação com condição inicial no representante da órbita de x .
4. Removemos do sistema as equações que aparecem repetidas e obtemos, ao final, uma equação para cada órbita.
5. O número de órbitas (i.e., equações) pode ser calculado lançando mão do *Lema de Burnside* [39].

Recomendamos ao leitor a referência [12] para os detalhes.

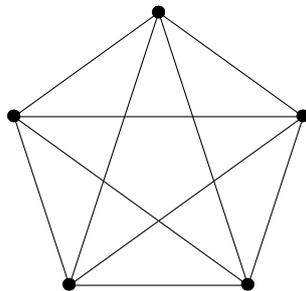


Figura 1.1: Representação do grafo completo com $N = 5$ vértices.

O processo de Moran em uma população não estruturada de tamanho N , pode ser encarado como um caso particular do processo de Moran em grafos se supusermos que a estrutura que modela a população é um grafo completo com N vértices, dois quaisquer deles conectados por uma aresta. (Veja o diagrama da Figura 1.1). O grupo de automorfismos do grafo completo com N vértices é o grupo simétrico S_N que tem ordem $N!$. A ação do grupo simétrico sobre o conjunto das configurações do grafo completo, particiona tal conjunto em $N + 1$ classes de equivalência. Portanto, usando a ideia geral esboçada no parágrafo anterior podemos reduzir o numero de equações do sistema de 2^N para $N + 1$. Neste caso, é imediato verificar que são equivalentes estados com o mesmo número de indivíduos do tipo A . Isso nos permite identificar essas classes de equivalência com o número i de indivíduos do tipo A , denotando-as por $i \in \{0, 1, \dots, N\}$. Os estados 0 e N , que representam respectivamente a situação em que toda a população é composta de indivíduos do tipo B e A , são absorventes. Pode-se provar [34] que a probabilidade de fixação quando a condição inicial é i indivíduos do tipo A é dada por

$$\Phi_i = \frac{1 + \sum_{j=1}^{i-1} \prod_{k=1}^j r_k^{-1}}{1 + \sum_{j=1}^{N-1} \prod_{k=1}^j r_k^{-1}}, \quad (1.11)$$

que vale para $i = 1, 2, \dots, N$, desde que o somatório do numerador seja interpretado como nulo no caso $i = 1$. Em particular, no caso de aptidões independentes da frequência, $r_k = r$, a probabilidade do lado direito da

fórmula (1.11) será denotada por $\Phi_{wm}^N(i, r)$ e sua expressão é dada por

$$\Phi_{wm}^N(i, r) = \begin{cases} \frac{1-r^{-i}}{1-r^{-N}}, & \text{se } r \neq 1 \\ \frac{i}{N}, & \text{se } r = 1 \end{cases} \quad (1.12)$$

com $i = 1, 2, \dots, N$. O sobrescrito “*wm*” que aparece na notação $\Phi_{wm}^N(i, r)$ é uma abreviação do termo em inglês “*well mixed*” para populações mistas.

Para conhecimento do leitor, no caso particular de aptidões independentes da frequência, existe uma classe importante de grafos, denominados *isotérmicos*, para os quais a probabilidade de fixação π_x é dada por (1.12). Essa afirmação é, na verdade, o conteúdo do *Teorema Isotérmico* cuja prova, bem como a definição precisa de grafo isotérmico, pode ser encontrada em [34, 12].

Voltando ao caso geral do processo de Moran em grafos, estaremos particularmente interessados em calcular a probabilidade de fixação de uma mutação que possa eventualmente surgir na população. Esta é uma situação de interesse biológico. Muitas vezes todos os indivíduos em uma população são iguais para uma determinada característica genética, mas mutações aparecem raramente, geralmente em um único indivíduo, e podem ou não se fixar na população. Para sermos mais precisos, considere uma população estruturada por um grafo de N vértices. Suponha que nesta população um único mutante de tipo A apareça e que os $N - 1$ indivíduos restantes sejam de tipo B . Admitindo que a mutação de tipo A tenha mesma probabilidade de aparecer em qualquer vértice do grafo, queremos responder à seguinte pergunta: qual é a probabilidade de fixação na população do tipo deste único indivíduo mutante do tipo A ? Para nos referir a esta quantidade, vamos introduzir uma notação específica, conforme ensina a seguinte

Definição 1.1. *Considere o processo de Moran em um grafo com N vértices. Seja $P_j(x)$ a probabilidade de fixação do tipo A quando a configuração inicial x da população é tal que $x_j = 1$ e $x_i = 0$ para $i \neq j$. Definimos a probabilidade de fixação média de um mutante do tipo A por*

$$\mu = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N P_j(x). \quad (1.13)$$

Grosso modo, a probabilidade de fixação média do tipo A é simplesmente a média aritmética das probabilidades de fixação tomadas com condições iniciais nos casos possíveis onde tem-se apenas o vértice j ocupado por um tipo A e todos os demais vértices ocupados por um tipo B .

No caso particular do processo de Moran no grafo completo com N vértices e aptidões independentes da frequência, é imediato verificar que para todo r tem-se

$$\mu = \Phi_{wm}^N(1, r) = \begin{cases} \frac{1-r^{-1}}{1-r^{-N}}, & \text{se } r \neq 1 \\ \frac{1}{N}, & \text{se } r = 1 \end{cases} \quad (1.14)$$

Assim sendo, tomando como padrão de comparação o grafo completo, podemos estabelecer um critério para decidir se um grafo arbitrário atua no aumento ou diminuição da probabilidade de fixação de uma mutação de tipo A com aptidão r introduzida de maneira uniforme numa população de residentes de tipo B com aptidão 1. Mais precisamente, temos a seguinte definição.

Definição 1.2. *Considere o processo de Moran em um grafo de tamanho N e aptidões independentes da frequência. A Razão de Vantagem para Fixação de um Mutante (RVFM), denotada $R_N(r)$, é definida por*

$$R_N(r) = \frac{\mu}{\Phi_{wm}^N(1, r)}. \quad (1.15)$$

Ainda em relação à definição acima, chamamos a atenção do leitor para o fato de que o valor de $R_N(r)$ deve depender do grafo e da regra de atualização.

Historicamente [26], [34], as primeiras definições foram de grafos amplificadores e supressores de seleção natural:

Definição 1.3. *Seja \mathcal{G} um grafo de tamanho N . Considere, as seguintes condições:*

(1)

$$R_N(r) \begin{cases} < 1, & \text{se } 0 < r < 1 \\ > 1, & \text{se } r > 1 \end{cases}. \quad (1.16)$$

(2)

$$R_N(r) \begin{cases} > 1, & \text{se } 0 < r < 1 \\ < 1, & \text{se } r > 1 \end{cases}. \quad (1.17)$$

Se a condição (1) é satisfeita, dizemos que \mathcal{G} é um amplificador de seleção natural, já que um mutante mais apto que a população residente ($r > 1$) tem probabilidade aumentada de se fixar comparado com a população misturada, enquanto um menos apto ($0 < r < 1$) possui probabilidade diminuída de se fixar. Por outro lado, de maneira análoga, se a condição (2) ocorre, dizemos que \mathcal{G} é um supressor de seleção natural.

Em particular, não conhecemos nenhuma razão que obrigue um grafo qualquer ser amplificador ou supressor de seleção natural. De fato, Hindersin et al. [20, 21] descobriram exemplos de grafos *redutores* de seleção natural:

Definição 1.4. Um grafo \mathcal{G} de tamanho N é chamado de redutor de seleção natural, se $R_N(r) < 1$ para todo $r \neq 1$. Se ocorrer $R_N(r) > 1$ para todo $r \neq 1$, diremos então que \mathcal{G} é um promotor de seleção natural.

Mais adiante, Allen et al. [2] encontraram grafos que chamaram de *amplificadores transientes* de seleção natural. Mais geralmente, não conhecemos nenhuma razão que obrigue um grafo qualquer a se encaixar necessariamente em algum dos casos das definições acima. Quando isto acontecer, diremos que houve transiência. Nos capítulos 3 e 4 vamos mostrar exemplos que parecem indicar comportamentos transientes.

1.2 Probabilidades de fixação no grafo estrela

Nesta seção vamos discutir o processo de Moran no *grafo estrela*. Por definição, a estrela é um grafo com $N = n + 1$ vértices: o *centro* e as n folhas. O centro está conectado a cada vértice do conjunto das n folhas - que, por sua vez, não estão conectadas entre si. Podemos representar esquematicamente as relações de adjacência entre os vértices da estrela por um conjunto de N pontos no plano onde existe apenas uma aresta não orientada conectando o centro a cada vértice do conjunto das n folhas. (Veja o diagrama da Figura 1.2.)

Quando estudamos o processo de Moran na estrela, fica claro o papel que as simetrias desempenham na redução do número de equações do sistema que determina as probabilidades de fixação. As órbitas são determinadas pelo

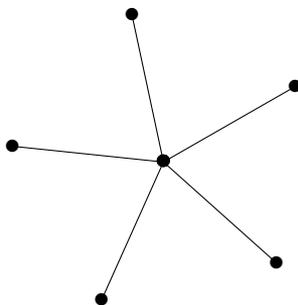


Figura 1.2: Representação do grafo estrela com $n = 5$ folhas.

tipo A ou B de indivíduo ocupando o centro e pelo número $i \in \{0, 1, \dots, n\}$ de indivíduos do tipo A ocupando as folhas. Podemos denotar por $(0, i)$ um representante da órbita que contém as configurações nas quais existe um indivíduo do tipo B no centro e i indivíduos do tipo A nas folhas. Concordeamente, $(1, i)$ denotará um representante da órbita que contém as configurações nas quais existe um indivíduo do tipo A no centro e i indivíduos do tipo A nas folhas. Como evidenciado pela discussão acima, o número efetivo de equações necessárias para calcular a probabilidade de fixação no grafo estrela é consideravelmente menor que 2^N . De fato, a simplificação computacional que obtemos nos fornece um sistema equivalente de $2N$ equações, uma para cada representante $(0, i)$, $(1, i)$ com $i \in \{0, 1, \dots, n\}$.

O diagrama da Figura 1.3 ilustra, tomando o caso $n = 5$ como exemplo, as possíveis transições que podem ocorrer, a cada passo de tempo, entre os estados do processo de Moran no grafo estrela e sob qualquer das regras de atualização Bd ou dB.

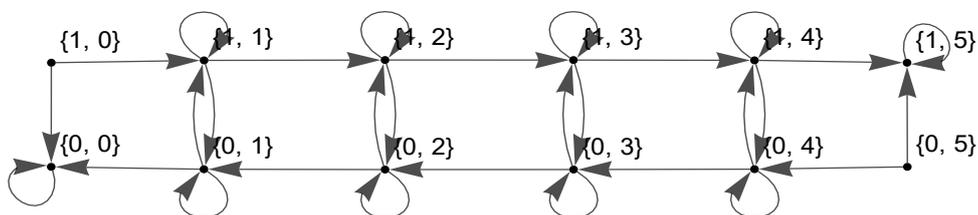


Figura 1.3: Digrafo das transições possíveis do processo de Moran no grafo estrela com $n = 5$ folhas. Os estados são simbolizados pelo sistema de representantes distintos $(0, i)$, $(1, i)$ com $i \in \{0, 1, \dots, 5\}$. As setas indicam possíveis transições entre os estados.

Pela Figura 1.3, podemos ver que, em geral, o estado $(0, i)$ se move para esquerda $(0, i - 1)$, para cima $(1, i)$ ou permanece onde está. A transição $(0, i) \rightarrow (0, i - 1)$, cuja probabilidade denotaremos por $t_{i,-}$, ocorre quando selecionamos o centro ocupado por um indivíduo do tipo B para reprodução e uma folha ocupada por um indivíduo do tipo A para morte. Similarmente, a transição $(0, i) \rightarrow (1, i)$, denotada $t_{i,u}$, ocorre quando selecionamos uma das i folhas ocupadas por indivíduos do tipo A para reprodução e o centro ocupado por um tipo B para morte. O leitor poderá repetir um raciocínio similar para as demais transições $(1, i) \rightarrow (1, i + 1)$ e $(1, i) \rightarrow (0, i)$ cujas probabilidades são denotadas respectivamente por $t_{i,+}$ e $t_{i,d}$. Todas as probabilidades das transições mencionadas acima podem ser facilmente calculadas usando as regras de reprodução e morte estabelecidas na Seção 1.1. À guisa de exemplo, deduziremos, a seguir, como calcular a probabilidade de transição $t_{i,+}$ na regra Bd. Com efeito, $t_{i,+}$ é a probabilidade de sortearmos para reprodução o centro ocupado por um indivíduo do tipo A vezes a probabilidade de sortearmos qualquer das $n - i$ folhas ocupadas por indivíduos do tipo B para morte. A primeira delas, levando em conta (1.4) e que o número total de indivíduos do tipo A é $i + 1$, é dada por $r_{i+1} / [(i + 1)r_{i+1} + n - i]$. A segunda probabilidade, levando em conta que o sorteio de morte é uniforme, é dada simplesmente por $(n - i)/n$.

Colecionamos, a seguir, as fórmulas para calcular todas as probabilidades de transição não-triviais que podem ocorrer no grafo estrela. Ao deduzir tais fórmulas, o leitor deve ter em mente que, na regra Bd, a probabilidade de sortear o centro para morte será 1, caso uma folha seja sorteada para reprodução. Já no regime dB, a probabilidade de sortear o centro para reprodução será 1 se uma folha for sorteada para morte. As fórmulas são:

Caso Bd:

$$\begin{aligned} t_{i,u} &= \frac{i r_i}{i r_i + n - i + 1} & t_{i,d} &= \frac{n - i}{(i + 1) r_{i+1} + n - i} \\ t_{i,-} &= \frac{1}{i r_i + n - i + 1} \frac{i}{n} & t_{i,+} &= \frac{r_{i+1}}{(i + 1) r_{i+1} + n - i} \frac{n - i}{n} \end{aligned} \quad (1.18)$$

Caso dB:

$$\begin{aligned} t_{i,u} &= \frac{1}{n+1} \frac{i r_i}{i r_i + n - i} & t_{i,d} &= \frac{1}{n+1} \frac{n-i}{i r_i + n - i} \\ t_{i,-} &= \frac{i}{n+1} & t_{i,+} &= \frac{n-i}{n+1} \end{aligned} \quad (1.19)$$

Como mencionamos, uma quantidade de interesse é calcular a probabilidade de fixação dos tipos a partir de uma condição inicial arbitrária. Para tanto, seja P_i^0 a probabilidade de fixação do tipo A com condição inicial $(0, i)$. Similarmente, P_i^1 denotará a probabilidade de fixação do tipo A com condição inicial $(1, i)$. Graças à hipótese de não haver mutações, os estados $(0, 0)$ e $(1, n)$, os quais representam a situação em que apenas um dos tipos está presente na população, são absorventes. Portanto, temos as seguintes condições de contorno

$$P_0^0 = 0 \quad \text{e} \quad P_n^1 = 1. \quad (1.20)$$

Para ambos os casos Bd e dB, as equações para calcular a probabilidade de fixação do tipo A no grafo estrela são dadas por

$$\begin{cases} P_i^0 = t_{i,u}P_i^1 + t_{i,-}P_{i-1}^0 + (1 - t_{i,u} - t_{i,-})P_i^0 \\ P_i^1 = t_{i,d}P_i^0 + t_{i,+}P_{i+1}^1 + (1 - t_{i,d} - t_{i,+})P_i^1 \end{cases}, \quad (1.21)$$

onde na primeira linha i varia de 1 a n e na segunda linha i varia de 0 a $n-1$. Logo, para obtermos as probabilidades de fixação, precisamos resolver o sistema acima formado de $2n$ equações lineares, levando em conta as condições de contorno (1.20).

Podemos reescrever de forma concisa as equações (1.21) como

$$\begin{cases} P_i^0 = \beta_i P_{i-1}^0 + (1 - \beta_i) P_i^1 \\ P_i^1 = \alpha_i P_{i+1}^1 + (1 - \alpha_i) P_i^0 \end{cases}, \quad (1.22)$$

com

$$\alpha_i = \frac{t_{i,+}}{t_{i,d} + t_{i,+}} \quad \text{e} \quad \beta_i = \frac{t_{i,-}}{t_{i,u} + t_{i,-}}. \quad (1.23)$$

Para resolver o sistema (1.22), comecemos definindo as seguintes equações

auxiliares

$$d_i^0 = P_i^0 - P_{i-1}^0, \quad d_i^1 = P_i^1 - P_{i-1}^1 \quad \text{e} \quad d_i^{10} = P_i^1 - P_i^0 .$$

Usando as equações definidas acima, podemos reescrever o sistema 1.22 na forma

$$\begin{aligned} d_i^0 &= \frac{1 - \beta_i}{\beta_i} d_i^{10} \\ d_i^1 &= \frac{1 - \alpha_{i-1}}{\alpha_{i-1}} d_{i-1}^{10} . \end{aligned}$$

Também, pela definição das equações auxiliares, obtemos

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

As três últimas equações podem ser encaradas como um sistema linear nas incógnitas d_i^0 , d_i^1 e d_i^{10} cuja solução pode ser expressa em termos de d_{i-1}^{10} . Resolvendo-as, obtemos

$$\begin{aligned} d_i^1 &= \frac{1 - \alpha_{i-1}}{\alpha_{i-1}} d_{i-1}^{10} \\ d_i^{10} &= \frac{\beta_i}{\alpha_{i-1}} d_{i-1}^{10} \\ d_i^0 &= \frac{1 - \beta_i}{\alpha_{i-1}} d_{i-1}^{10} . \end{aligned} \tag{1.24}$$

Resolvendo de maneira recursiva a segunda equação em (1.24), temos

$$\begin{aligned} d_i^{10} &= \prod_{j=1}^i \left(\frac{\beta_j}{\alpha_{j-1}} \right) d_0^{10} \\ &= \prod_{j=1}^i \left(\frac{\beta_j}{\alpha_{j-1}} \right) P_0^1 . \end{aligned} \tag{1.25}$$

Graças à primeira condição em (1.20), temos $d_0^{10} = P_0^1 - P_0^0 = P_0^1$. Daí, obtemos também que para todo i , tem-se $P_i^1 > P_i^0$.

Substituindo (1.25) na primeira equação que aparece em (1.24), temos

$$\begin{aligned} d_i^1 &= \frac{1 - \alpha_{i-1}}{\alpha_{i-1}} \prod_{j=1}^{i-1} \left(\frac{\beta_j}{\alpha_{j-1}} \right) P_0^1 \\ &= \frac{1 - \alpha_{i-1}}{\alpha_0} \prod_{j=1}^{i-1} \frac{\beta_j}{\alpha_j} P_0^1. \end{aligned} \quad (1.26)$$

Agora, podemos obter uma fórmula explícita para P_0^1 , pois, graças à segunda condição em (1.20), temos

$$\begin{aligned} 1 &= P_n^1 = d_n^1 + d_{n-1}^1 + \cdots + d_1^1 + P_0^1 \\ &= \frac{P_0^1}{\alpha_0} \left(1 + \sum_{j=1}^{n-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k} \right). \end{aligned}$$

Resolvendo para P_0^1 , obtemos

$$P_0^1 = \frac{\alpha_0}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}}. \quad (1.27)$$

A fórmula para P_i^1 , $i = 1, 2, \dots, n-1$, pode ser obtida recursivamente a partir de $P_i^1 = P_{i-1}^1 + d_i^1$ usando (1.26) e (1.27). O resultado é

$$P_i^1 = \frac{1 + \sum_{j=1}^{i-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}}. \quad (1.28)$$

Finalmente, podemos determinar P_i^0 , $i = 1, 2, \dots, n$ a partir de $P_i^1 - d_i^{10}$. Usando as fórmulas (1.28), (1.25) e (1.27) obtemos

$$\begin{aligned} P_i^0 &= \frac{1 + \sum_{j=1}^{i-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k} - \beta_i \prod_{j=1}^{i-1} \frac{\beta_j}{\alpha_j}}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}} \\ &= \frac{\sum_{j=1}^i (1 - \beta_j) \prod_{k=1}^{j-1} \frac{\beta_k}{\alpha_k}}{1 + \sum_{j=1}^{n-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}}. \end{aligned} \quad (1.29)$$

Portanto, as fórmulas (1.27), (1.28) e (1.29) são as soluções exatas do sistema (1.22). Neste ponto, cumpre observar que apesar das fórmulas da probabi-

lidade de fixação dos indivíduos do tipo A no grafo estrela terem a mesma forma nos casos Bd e dB, elas podem produzir resultados diferentes. Este fato está ilustrado na Figura 1.4 onde, para ambos os casos Bd e dB, usamos as fórmulas exatas para a solução do sistema (1.22) e exibimos o comportamento da probabilidade de fixação dos indivíduos do tipo A em função da fração i/n de indivíduos do tipo A nas folhas do grafo estrela.

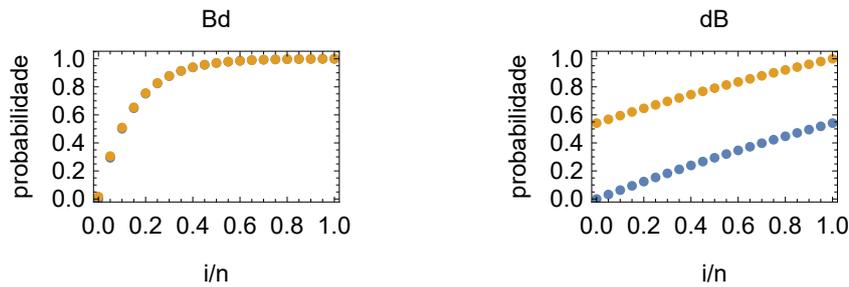


Figura 1.4: Em ambos os painéis, os pontos azuis representam a probabilidade de fixação do tipo A quando o centro está ocupado por um tipo B e os pontos laranja representam a probabilidade correspondente quando o centro está ocupado por um tipo A . Painel esquerdo: gráfico da probabilidade de fixação do tipo A no grafo estrela com $n = 20$ folhas, regra Bd, com aptidões independentes da frequência $r = 1.2$. Observe que, neste caso, para os mesmos valores de i a diferença entre as probabilidades de fixação dos indivíduos do tipo A onde há um indivíduo do tipo A ou do tipo B no centro é praticamente invisível. Painel direito: o análogo para o caso dB. Neste caso, note que para i fixo, a probabilidade de fixação do tipo A com o centro ocupado por um tipo B é bem menor que com o centro ocupado por um tipo A .

Para entender melhor o resultado apontado nos gráficos da Figura 1.4, vamos discutir qualitativamente nas Subseções 1.2.1 e 1.2.2 as regras Bd e dB no processo de Moran na estrela com aptidões independentes da frequência. Conforme veremos, um fato importante que nos permite explicar a diferença entre as regras Bd e dB na estrela consiste em observar que se o número n de folhas na estrela é grande, os sorteios envolvendo reprodução nas folhas e morte no centro ocorrem numa escala de tempo muito diferente da dos sorteios de reprodução no centro e morte nas folhas, tanto no caso Bd, quanto no caso dB. Nestas condições, podemos supor, como aproximação, que no processo as duas escalas de tempo são independentes. Nas seções a seguir, discutiremos em cada caso, como usar essa informação. O conteúdo

da Subseção 1.2.1 é, em essência, apresentado em [15]. Porém, o material desenvolvido na Subseção 1.2.2 é original, embora algumas ideias também apareçam em [16].

1.2.1 A regra Bd na estrela e o fator de amplificação r^2

Em 2005, Lieberman et al. [26] conjecturaram, para o caso Bd na estrela com aptidões independentes da frequência, que a probabilidade de fixação dos indivíduos do tipo A é assintoticamente, no limite $n \rightarrow \infty$, igual à probabilidade de fixação dos indivíduos do tipo A no grafo completo com aptidão relativa r trocada por r^2 . Essa troca é responsável por a estrela ser um amplificador de seleção. Pouco tempo depois, o cálculo exato de Broom e Rychtář [7] confirmou inicialmente a conjectura. Mais tarde, Chalub [9] observou que a expressão assintótica conjecturada por Lieberman et al. precisava ser corrigida. A correção se deve ao fato de que no produto dos β_k/α_k , que aparece, por exemplo, em (1.27) certos termos $O(1/n)$ que surgem ao se fazer uma aproximação não podem ser simplesmente desprezados. Freat et al. [15] propuseram um tipo de aproximação denominada por eles de *aproximação por separação de escalas de tempo* para explicar de maneira qualitativa a regra Bd na estrela reobtendo, inclusive, a expressão assintótica de Lieberman et al. conjecturada anteriormente. Na discussão a seguir, vamos reproduzir os argumentos de Freat et al. para mostrar que a estrela é um amplificador de seleção na regra Bd.

Para tanto, comecemos fixando a fração $x = i/(n + 1)$ de indivíduos do tipo A na população. No limite $n \rightarrow \infty$, para x fixo, i é de ordem n . Então, nas fórmulas (1.18), as probabilidades $t_{i,+}$ e $t_{i,-}$ de sorteio do centro para reprodução são $O(1/n)$, enquanto as probabilidades $t_{i,u}$ e $t_{i,d}$ de sortear uma folha para reprodução são $O(1)$. Logo, se n é grande, podemos admitir que, por tempo $O(n)$, ocorrem *apenas* sorteios envolvendo as folhas para reprodução. Ou seja, o tempo esperado para que ocorra um sorteio do centro para reprodução é muito grande, da ordem de n .

Nas condições do parágrafo anterior, podemos supor como *aproximação* que, por tempo $O(n)$, a cadeia permanece transitando somente entre os estados $(0, i)$ e $(1, i)$. No esquema da Figura 1.3 estas transições são representadas

pelos setas verticais. Por conseguinte, podemos supor que uma fração desse tempo a cadeia permanece no estado $(1, i)$ e outra fração do tempo no estado $(0, i)$. Vamos calcular essas frações. Antes disso, note ainda que, para aumentar o número de indivíduos do tipo A nas folhas é necessário que o centro esteja ocupado por um indivíduo do tipo A . Por outro lado, para diminuir o número de indivíduos do tipo A nas folhas é necessário que o centro esteja ocupado por um indivíduo do tipo B (referenciamos novamente o leitor à Figura 1.3).

Considere então uma outra cadeia de Markov auxiliar com somente dois estados $(0, i)$ e $(1, i)$. Esta cadeia descreve a dinâmica durante o longo tempo enquanto o centro não for sorteado para a reprodução. Se $P_i = (n - i)/(ir + n - i)$ é a probabilidade condicional de sortear um indivíduo B para reprodução, dado que o centro não será sorteado para a reprodução, então, P_i é a probabilidade das transições $(0, i) \rightarrow (0, i)$ e $(1, i) \rightarrow (0, i)$. A matriz de transição da cadeia auxiliar será então

$$T_i = \begin{bmatrix} P_i & P_i \\ 1 - P_i & 1 - P_i \end{bmatrix}.$$

A cadeia auxiliar possui uma única distribuição estacionária dada por $v_i = (P_i, 1 - P_i)$, um autovetor de T_i com autovalor 1. Como na cadeia auxiliar qualquer distribuição inicial converge à distribuição estacionária, podemos interpretar que P_i e $1 - P_i$ são as frações do tempo que a cadeia auxiliar passa respectivamente nos estados $(0, i)$ e $(1, i)$.

Voltando à cadeia de Markov original, a probabilidade ε_i de que aumente o número de indivíduos A nas pontas é aproximadamente dada pelo produto da probabilidade $1 - P_i$ de que a cadeia auxiliar esteja em $(1, i)$ pela probabilidade $r/[(i + 1)r + n - i]$ de que o centro seja de tipo A e sorteado para a reprodução e da probabilidade $(n - i)/n$ de que uma folha ocupada por indivíduo B seja sorteada para a morte. Assim, temos

$$\varepsilon_i = \frac{ir}{ir + n - i} \frac{r}{(i + 1)r + n - i} \frac{n - i}{n}.$$

De maneira análoga, a probabilidade δ_i de que diminua o número de indiví-

duos A nas pontas é

$$\delta_i = \frac{n-i}{ir+n-i} \frac{1}{ir+n-i+1} \frac{i}{n}.$$

Assim, na aproximação por separação de escalas de tempo, o processo de Moran na estrela na regra Bd equivale ao processo de Moran no grafo completo com probabilidades de aumento e diminuição dos indivíduos do tipo A dadas respectivamente por ε_i e δ_i . Portanto, a probabilidade de fixação de A pode ser calculada pela fórmula (1.11) com r_k substituído por ω_k , onde

$$\omega_k \equiv \frac{\varepsilon_k}{\delta_k} = r^2 \left[1 + \frac{1-r}{n \left(1 - \frac{k}{n} + r \frac{k}{n} + \frac{r}{n} \right)} \right] = r^2 [1 + O(1/n)].$$

Desprezando a correção $O(1/n)$, da expressão acima para ω_k podemos verificar que as probabilidades de fixação de A a partir de configurações com k pontas de tipo A (o centro pode ser A ou B) são aproximadas pela expressão (1.11) com r_k trocado por r^2 . Isto explica a origem da conjectura de Lieberman et al.

Pelo que vimos, na regra Bd podemos prever que a ocupação do centro por um tipo A ou por um tipo B praticamente não afeta a probabilidade de fixação dos indivíduos do tipo A . Na Figura 1.4 este fato pode ser constatado no gráfico correspondente à regra Bd onde notamos que as probabilidades de fixação dos indivíduos do tipo A onde há um tipo A ou B no centro são praticamente indistinguíveis.

1.2.2 A regra dB na estrela: uma visão pelo problema do colecionador de figurinhas

Nesta subseção, vamos aplicar a aproximação por separação de escalas de tempo ao processo de Moran na regra dB na estrela com aptidões independentes da frequência. Para tanto, precisaremos primeiro discutir brevemente o clássico *problema do colecionador de figurinhas* [30], o qual se revelará útil para avaliar qualitativamente a regra dB na estrela.

Problema do Colecionador de Figurinhas. *Um colecionador deseja completar um álbum de figurinhas, as quais são numeradas de 1 a n . Suponha que*

as figurinhas são vendidas em um pacotinho e que cada pacotinho contenha apenas uma figurinha. Cada figurinha tem a mesma probabilidade de aparecer em qualquer pacotinho, e os pacotinhos são independentes. Considere que o colecionador compra um pacotinho; e se a figurinha que ele obteve não é repetida, ele a cola no álbum. Pergunta-se então: se o colecionador começa com o álbum vazio, quantos pacotinhos deverão ser comprados, em média, para se completar o álbum? Podemos formular uma mesma pergunta para o caso em que o colecionador começa o álbum com exatamente i figurinhas.

Em relação ao problema acima, se o colecionador já possui $i - 1$ figurinhas coladas no álbum, a probabilidade de que ele consiga a próxima figurinha inédita é $(n - i + 1)/n$. Para calcularmos o número de pacotinhos que deverão ser adquiridos para completar o álbum inicialmente vazio, vamos definir X como número de pacotinhos que serão necessários para completar o álbum. Assim, podemos escrever $X = Y_1 + Y_2 + \dots + Y_n$, onde $Y_1 = 1$, Y_2 é o número de figurinhas compradas a partir de Y_1 até se obter a próxima figurinha diferente da anterior, Y_3 é o número de figurinhas compradas a partir de $Y_1 + Y_2$ até se obter a próxima figurinha diferente das duas anteriores, e assim por diante. Dessa forma, temos que $Y_1 = 1$ e Y_i tem distribuição geométrica com parâmetro $(n - i + 1)/n$ para $i = 2, \dots, n$. Logo, o valor esperado de Y_i é $n/(n - i + 1)$.

Portanto, pela linearidade da esperança,

$$\begin{aligned}
 \mathbb{E}[X] &= \mathbb{E}[Y_1] + \mathbb{E}[Y_2] + \dots + \mathbb{E}[Y_n] \\
 &= 1 + \frac{1}{\frac{n-1}{n}} + \frac{1}{\frac{n-2}{n}} + \dots + \frac{1}{\frac{n-(n-1)}{n}} \\
 &= 1 + \frac{n}{n-1} + \frac{n}{n-2} + \dots + \frac{n}{1} \\
 &= n \left(1 + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{n} \right) \\
 &= n H_n
 \end{aligned} \tag{1.30}$$

onde

$$H_n = \sum_{k=1}^n \frac{1}{k}.$$

Na situação em que o álbum possui um número muito grande de figuri-

nhas, podemos obter uma expressão assintótica para (1.30). De fato, usando a fórmula de Euler-Maclaurin [5], pode-se provar que no limite $n \rightarrow \infty$, tem-se

$$H_n = \log n + \gamma + O(1/n) \quad (1.31)$$

onde γ é a constante de Euler-Mascheroni. Daí, segue que

$$\mathbb{E}[X] = n \log n + \gamma n + O(1) . \quad (1.32)$$

Uma pequena modificação no argumento apresentado acima pode ser feito para calcular o número médio de pacotinhos necessários para completar o álbum no caso em que o colecionador começa o álbum com i figurinhas. Seja X_i o número de pacotinhos necessários para completar o álbum começando com i figurinhas. Então,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[X_i] &= \mathbb{E}[Y_{i+1}] + \mathbb{E}[Y_{i+2}] + \dots + \mathbb{E}[Y_n] \\ &= n \left(1 + \frac{1}{2} + \dots + \frac{1}{n-i} \right) \\ &= n H_{n-i} = n \log(n-i) + \gamma n + O(1) , \end{aligned}$$

desde que $n-i$ seja grande. Caso i seja pequeno, por exemplo $i=1$ ou $i=2$, $\mathbb{E}[X_i]$ é da ordem de n . Em resumo, o número médio de pacotinhos a serem comprados para completar um álbum com poucas figurinhas coladas é $O(n \log n)$, enquanto em um álbum quase completo o número de pacotinhos médio é $O(n)$.

O número médio de pacotinhos a serem comprados para completar um álbum com i figurinhas é naturalmente uma função decrescente de i . Este número médio é dado por (1.32) se $i=0$ e vale n se $i=n-1$. Em particular, precisamos em média de n pacotinhos para encontrar a última figurinha.

De volta à discussão da regra dB na estrela, podemos observar nas fórmulas (1.19) que, quando $n \rightarrow \infty$, as probabilidades $t_{i,\pm}$ envolvendo o sorteio das folhas para morte são $O(1)$ enquanto as probabilidades $t_{i,u}$ e $t_{i,d}$ de sortear o centro para morte são $O(1/n)$. Estes fatos nos permitem utilizar, uma vez mais, a aproximação por separação de escalas de tempo. Mais precisamente, podemos supor, como aproximação, que existem duas escalas de tempo inde-

pendentes: na escala de tempo longo ocorre somente sorteio do centro para morte, enquanto na escala de tempo curto ocorrem apenas sorteios das folhas para morte. Isto posto, o tempo em que o centro não é sorteado para a morte é $O(n)$. Durante todo este longo tempo, o centro permanece ocupado ou por um indivíduo A , ou por um B .

Se o indivíduo no centro é A , o número de indivíduos A nas pontas é i e na condição de que o centro não é sorteado para morte, a probabilidade de aumentar o número de indivíduos A nas pontas é exatamente igual à probabilidade de obter a $(i + 1)$ -ésima figurinha em um álbum com n figurinhas. Para contrastar com o outro caso, vamos dizer que quando o centro é A , estamos considerando um colecionador de figurinhas “positivo”.

Por outro lado, se o centro é B , e na condição de que o centro não é sorteado para morte, a probabilidade de diminuir o número de indivíduos A nas pontas é exatamente a de um problema do colecionador de figurinhas “negativo”, em que o colecionador descola uma figurinha presente em seu álbum sempre que ela aparecer em um pacotinho e não faz nada sempre que a figurinha do pacotinho não estiver em seu álbum.

No que segue, convencionamos dizer que a estrela está próxima à fixação ou quando o centro é A e o número de pontas ocupadas por B é $O(1)$, ou quando o centro é B e o número de pontas ocupadas por A é $O(1)$. Podemos pensar a estrela dB aproximadamente como uma sucessão de problemas de colecionador de figurinhas positivos e negativos. Quando a estrela não está próxima da fixação, a transição de positivo para negativo ou vice-versa acontece em tempos $O(n)$. O tempo médio para completar um álbum com i figurinhas no problema positivo (descolar i figurinhas de um álbum no problema negativo) é maior que o tempo médio em que o centro permanece de tipo A (B). Portanto a fixação do tipo A ou B na estrela dB em uma condição inicial longe da fixação deve ocorrer depois de vários episódios de transição do colecionador positivo para o negativo e vice-versa.

Quanto maior o valor de r , maior a probabilidade $t_{i,u}$, de modo que a maior aptidão de indivíduos do tipo A favorece a mudança do modo negativo para o positivo. Desta forma, caso $r > 1$ a probabilidade de fixação do tipo A é maior do que no caso $r < 1$. De todo modo, seja $r > 1$ ou $r < 1$, se temos i pontas ocupadas por tipo A , a probabilidade de fixação de A quando

o centro é A é apreciavelmente maior do que quando o centro é B . Na Figura 1.4 podemos ver que quando o centro está ocupado por um tipo A , há uma boa probabilidade de completar o álbum. Por outro lado, quando o centro é do tipo B , a probabilidade de completar o álbum é baixa.

Observação 2. *Frean e Baxter [16] abordam de forma qualitativa as regras Bd e dB no processo de Moran na estrela com aptidões independentes da frequência, embora não façam menção à analogia com o problema do colecionador de figurinhas. Tomando a estrela como inspiração, eles interpretam que no caso Bd uma aresta do grafo significa um risco, enquanto no dB uma oportunidade. Mais precisamente, eles afirmam que na regra Bd indivíduos muito conectados correm um risco grande de morrer, ao passo que na regra dB possuem muitas oportunidades de se reproduzir. Nesse sentido, intuitivamente podemos entender as regras Bd e dB como sendo características de uma espécie. A regra Bd se aplica a espécies “corajosas” em que os indivíduos correm risco ao ocupar novos espaços, enquanto a regra dB se aplica a espécies “cautelosas” em que os indivíduos procuram novos espaços para ocupar quando encontram oportunidades.*

1.3 Comportamento assintótico das probabilidades de fixação na estrela

Nesta seção, vamos estudar o comportamento assintótico das fórmulas da probabilidade de fixação dos indivíduos do tipo A no grafo estrela. Mais precisamente, estamos interessados em obter fórmulas assintóticas quando ambos o tamanho n da população nas folhas e o número i de indivíduos do tipo A nelas tendem para o infinito, mantendo-se fixa a fração $x = i/n$. O principal resultado desta seção é a obtenção de fórmulas assintóticas para os casos Bd e dB na estrela com aptidões dependentes da frequência. A ideia que serve de ponto de partida para os resultados que pretendemos alcançar, consiste em escrever o produtório dos β_k/α_k que aparece nas fórmulas (1.27), (1.28) e (1.29) como uma exponencial de um somatório que pretendemos identificar com uma soma de Riemann. Como veremos adiante, no caso dB , esta identificação ocorre naturalmente e a soma converge para uma integral.

Porém, no caso Bd, o mesmo não ocorre e, ao substituirmos a soma por uma integral, faz-se necessário introduzir um erro que não pode ser simplesmente desprezado quando n tende ao infinito. Para fixar ideias, vamos iniciar deduzindo fórmulas assintóticas para o caso dB, que é bem mais simples que o caso Bd. A análise do caso Bd será feita mais adiante, ao final desta seção.

Para o que segue, fazendo o quociente de (1.2) por (1.3), é fácil verificar que a aptidão relativa (1.4) tem a forma

$$r_i = R(i/n) + O(1/n) , \quad (1.33)$$

onde

$$R(x) = \frac{m_{11}x + m_{12}(1-x)}{m_{21}x + m_{22}(1-x)} \quad (1.34)$$

é independente de n .

Seja $x \in [0, 1]$ uma fração fixa de indivíduos do tipo A nas folhas do grafo estrela e $[nx]$ o inteiro mais próximo de nx . Definimos as probabilidades assintóticas de fixação como

$$\pi^0(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} P_{[nx]}^0 \quad \text{e} \quad \pi^1(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} P_{[nx]}^1 . \quad (1.35)$$

Analisemos, agora, os casos Bd e dB separadamente. Começemos pelo caso dB que pode ser mais facilmente tratado, postergando à Subseção 1.3.2 a discussão do caso Bd.

1.3.1 Estrela: caso dB

Substituindo (1.19) em (1.23), obtemos no caso dB as seguintes expressões

$$\frac{\alpha_i}{\beta_i} = 1 + \frac{1}{n} \frac{r_i - 1}{1 + \frac{i}{n}(r_i - 1)} + O(1/n^2) , \quad (1.36)$$

$$1 - \alpha_i = \frac{1}{n} \frac{1}{1 + \frac{i}{n}(r_i - 1)} + O(1/n^2) , \quad (1.37)$$

$$1 - \beta_i = \frac{1}{n} \frac{r_i}{1 + \frac{i}{n}(r_i - 1)} + O(1/n^2) . \quad (1.38)$$

Prosseguimos, agora, escrevendo o produtório dos α_k/β_k como uma ex-

ponencial da soma. Uma vez que

$$\log(1+x) = x + O(x^2), \quad (1.39)$$

utilizamos essa relação em (1.36) para concluir que $\log(\alpha_k/\beta_k)$ é $O(1/n)$. Daí, segue que a soma converge convenientemente para uma integral:

$$\begin{aligned} \prod_{k=1}^{[nx]} \frac{\beta_k}{\alpha_k} &= \exp \left[- \sum_{k=1}^{[nx]} \log \frac{\alpha_k}{\beta_k} \right] \\ &= \exp \left[- \sum_{k=1}^{[nx]} \frac{1}{n} \left(\frac{r_k - 1}{1 + \frac{k}{n}(r_k - 1)} + O\left(\frac{1}{n}\right) \right) \right] \\ &\xrightarrow{n \rightarrow \infty} \exp \left[- \int_0^x \frac{R(z) - 1}{1 + z(R(z) - 1)} dz \right]. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Note ainda que, como o fator $1/n$ está presente em ambas as expressões (1.37) e (1.38), as somas em (1.28) e (1.29) também convergem para integrais. Isso nos permite definir funções as quais são os limites das somas que aparecem no numerador e denominador das expressões (1.28) e (1.29):

$$\Psi(x) = \int_0^x \frac{R(y) - 1}{1 + y(R(y) - 1)} dy, \quad (1.41)$$

$$\Theta(x) = \int_0^x \frac{R(y)}{1 + y(R(y) - 1)} e^{-\Psi(y)} dy \quad (1.42)$$

e

$$\Xi(x) = \int_0^x \frac{1}{1 + y(R(y) - 1)} e^{-\Psi(y)} dy. \quad (1.43)$$

Em termos de tais funções, é fácil ver no caso dB que

$$\pi^0(x) = \frac{\Theta(x)}{1 + \Xi(1)} \quad \text{e} \quad \pi^1(x) = \frac{1 + \Xi(x)}{1 + \Xi(1)}. \quad (1.44)$$

Conforme veremos na próxima subseção, a análise do caso Bd é mais complicada do que a examinada acima. O motivo dessa diferença é que no caso dB, o fator $1/n$ que aparece naturalmente dentro da soma no expoente da expressão (1.40), não aparece na mesma expressão equivalente para o caso

Bd. Assim, não podemos repetir o raciocínio anterior e argumentar que a soma converge para uma integral.

1.3.2 Estrela: caso Bd

O análogo das fórmulas (1.36-1.38) para o caso Bd são as seguintes:

$$\frac{\alpha_i}{\beta_i} = r_i r_{i+1} \left[1 + \frac{1}{n} \frac{1 - r_i r_{i+1}}{r_i} + O\left(\frac{1}{n^2}\right) \right], \quad (1.45)$$

$$1 - \alpha_i = 1 - \frac{r_{i+1}}{n} + O\left(\frac{1}{n^2}\right), \quad (1.46)$$

$$1 - \beta_i = 1 - \frac{1}{n r_i} + O\left(\frac{1}{n^2}\right). \quad (1.47)$$

A análise do caso Bd é mais delicada, mas pode ser tratada de maneira similar ao caso para populações não-estruturadas [13], [38]. No que se refere aos métodos para a determinação das fórmulas assintóticas propriamente ditas, as ferramentas principais são a Fórmula de Euler-Maclaurin e uma versão para somas do método de Laplace para integrais [36].

A fim de examinarmos mais rigorosamente os fatos mencionados acima, precisamos, inicialmente, introduzir duas definições que nos serão úteis. A bem da clareza da exposição, delineamos, no restante desta seção, apenas os principais resultados e argumentos de que necessitamos, referindo o leitor a [13] e [37] para os detalhes técnicos.

Para $x \in [0, 1]$ e R dado por (1.34), definimos o *potencial de aptidão*

$$L(x) \equiv - \int_0^x \log R(t) dt. \quad (1.48)$$

Com relação à definição acima, verifica-se que L sempre tem um ponto de máximo $x^* \in [0, 1]$. Para conhecimento do leitor, é possível mostrar que a localização de x^* no interior do intervalo, ou em uma das extremidades dele, depende do *cenário de invasão* [42, 13], i.e., dos sinais de $R(0) - 1$ e $R(1) - 1$.

A fim de manipular adequadamente os termos $O(1/n)$ em (1.45), definimos também

$$C(x) \equiv \int_0^x \left(\frac{R(t)^2 - 1}{R(t)} - \frac{\det M}{m_{12}m_{22}} \right) dt. \quad (1.49)$$

De posse das definições acima, um raciocínio similar ao que fizemos para o caso dB permite provar que

$$\begin{aligned}
\prod_{k=1}^{[nx]} \frac{\beta_k}{\alpha_k} &= \exp \left[- \sum_{k=1}^{[nx]} \log \frac{\alpha_k}{\beta_k} \right] \\
&= \exp \left[-n \sum_{k=1}^{[nx]} \frac{1}{n} (\log r_k + \log r_{k+1}) \right] \exp \left[- \sum_{k=1}^{[nx]} \frac{1}{n} \left(\frac{1 - r_k r_{k+1}}{r_k} + O\left(\frac{1}{n}\right) \right) \right] \\
&= \exp \left[-2n \sum_{k=1}^{[nx]} \frac{1}{n} \log r_k \right] \exp \left[- \sum_{k=1}^{[nx]} \frac{1}{n} \left(\frac{1 - r_k r_{k+1}}{r_k} + \frac{\det M}{m_{12}m_{22}} + O\left(\frac{1}{n}\right) \right) \right] \\
&\stackrel{n \rightarrow \infty}{\sim} e^{C(x)+E(x)} e^{2nL(x)},
\end{aligned} \tag{1.50}$$

onde o termo $E(x)$ será explicado abaixo.

Na expressão (1.50), $e^{2nL(x)}$ é o termo principal. Ele aparece em [13], [4] e também como r^{-2n} em [9], no caso de aptidões independentes da frequência. O termo $e^{C(x)}$ generaliza a correção proposta por Chalub [9], e o termo $e^{E(x)}$ é denominado “erro de continuação” [13], em virtude de a soma $\sum_{k=1}^{[nx]} \frac{1}{n} \log r_k$ ser substituída pela integral $-L(x)$.

Rigorosamente falando, a validade das afirmações feitas acima deveria ser demonstrada como um teorema, o que, de fato, pode ser feito com o auxílio das ferramentas supracitadas. Todavia, uma tal demonstração fugiria do objetivo principal desta tese, de forma que não a apresentaremos aqui.

Capítulo 2

O processo de Moran em metapopulações estruturadas

Neste capítulo, vamos estender o estudo do processo de Moran em grafos a metapopulações estruturadas. Uma metapopulação é um conjunto de subpopulações que se encontram de alguma forma separadas, mas não completamente. Os indivíduos de cada subpopulação interagem entre si, possivelmente estruturados por um grafo de interação local e possuem algum padrão de interação com os indivíduos das outras subpopulações. Nesta tese uma metapopulação será modelada por um metagrafo [44], ou seja, um grafo em que cada vértice representa não mais um indivíduo, mas uma subpopulação, e as arestas representam a possibilidade de um indivíduo de uma subpopulação produzir descendentes em outra subpopulação. Considerando o total da população, temos dois níveis de grafos: um grafo que especifica as interações de cada indivíduo com cada outro na população e um outro grafo que especifica as interações entre as subpopulações. Os padrões de maior ou menor intensidade de interação entre pares de indivíduos e pares de subpopulações podem ser ajustados no processo de Moran através de pesos dados às arestas do grafo que representa o total da população. Ao leitor interessado em conhecer trabalhos envolvendo modelos com metapopulações estruturadas por metagrafos, sugerimos as referências [2], [27], [44] e [43].

No restante desta tese, vamos assumir as mesmas hipóteses mencionadas na Seção 1.1. Para comodidade do leitor, isolamo-as na Observação 3 a

seguir.

Observação 3. *Daqui em diante, assumiremos as hipóteses abaixo sem maiores comentários.*

1. *Cada indivíduo da população é do tipo A ou do tipo B.*
2. *Os indivíduos se reproduzem de forma assexuada sem possibilidade de mutações (cf. Hipótese 1, Seção 1.1).*
3. *A aptidão dos indivíduos independe da frequência dos tipos na população (cf. Observação 1, Seção 1.1).*
4. *A cada unidade de tempo discreta são realizados dois sorteios na população: um de reprodução e outro de morte, de acordo com as regras de atualização Bd ou dB elucidadas na seção 1.1.*

Tendo em vista as considerações acima, vamos a partir de agora estudar o processo de Moran em metapopulações estruturadas. Antes de prosseguirmos, precisamos modelar a estrutura espacial de interação entre as subpopulações, isto é o que faremos no próximo parágrafo.

Considere novamente uma população de tamanho fixo igual a N . Suponha que os indivíduos desta população estejam espacialmente distribuídos em V subpopulações de tamanhos constantes N_i , $i = 1, 2, \dots, V$, $N = \sum_{i=1}^V N_i$. Seja \mathcal{G} um grafo com V vértices e assumamos que cada subpopulação de tamanho N_i seja representada por um único vértice deste grafo. Por sua vez, vamos supor que cada subpopulação de tamanho N_i seja estruturada por um grafo \mathcal{G}_i e que, como anteriormente, cada indivíduo da subpopulação seja representado por um único vértice deste grafo.

Conforme frisamos no capítulo anterior, a quantidade principal que iremos estudar é a probabilidade de fixação dos tipos a partir de uma composição inicial arbitrária da população. Até aqui, o fato de os indivíduos da população pertencerem a uma metapopulação não desempenhou papel algum. Portanto, considerando que o total da população é estruturado por um grafo com N vértices, a probabilidade de fixação do processo de Moran na metapopulação ainda é obtida como solução de um sistema de 2^N equações lineares.

Para superar a complexidade computacional no cálculo da probabilidade de fixação, Yagoobi e Traulsen [44], entre outros resultados, trabalharam com uma aproximação, denominada por eles de *aproximação de baixa migração*, que lhes permitiu obter resultados em grafos de metapopulações. Chamamos de *migrações* os sorteios do processo de Moran em que o indivíduo que se reproduz e o indivíduo que morre pertencem a subpopulações distintas. Na verdade, pode-se dizer que a aproximação de baixa migração é, em um certo sentido, uma aproximação por separação de escalas de tempo. Se a probabilidade de um evento de migração é suficientemente baixa, o tempo médio entre uma migração e a próxima será muito maior que o tempo médio de absorção [38] do processo de Moran em cada nó do metagrafo. Se isto acontece, sempre que uma migração ocorrer, com alta probabilidade as subpopulações em cada nó do metagrafo serão, cada uma, composta ou só de indivíduos A , ou só de B . Esta observação leva à seguinte definição.

Definição 2.1. *Chamamos configuração homogênea uma composição da população em que cada uma das V subpopulações é composta por indivíduos ou só do tipo A , ou só do tipo B . O conjunto de todas configurações homogêneas possíveis tem exatamente 2^V elementos.*

A definição a seguir desempenhará papel central ao longo desta tese.

Definição 2.2. *Denominamos Aproximação de Baixa Migração (ABM) a hipótese de que entre duas migrações consecutivas o tempo foi grande o suficiente para que a configuração da população se tornasse homogênea.*

Consoante a definição acima, na ABM podemos ignorar a possibilidade de configurações não homogêneas. Como os sorteios de reprodução e morte do processo de Moran que não sejam migrações não modificam as configurações homogêneas, na ABM podemos ignorar estes sorteios e considerar somente os sorteios de migrações. Como o número de configurações homogêneas é somente 2^V , a complexidade computacional para o cálculo das probabilidades de fixação das configurações homogêneas na ABM pode ser bastante reduzido. Veremos que há exemplos interessantes em que será possível calcular exatamente essas probabilidades na ABM.

Vale ainda observar que na ABM as probabilidades de transição entre as configurações homogêneas são computadas de maneira análoga à que fazemos no processo de Moran em grafos. A diferença é que na ABM estas probabilidades deverão ser ponderadas pela probabilidade de fixação em cada subpopulação. Concordemente, o sistema que determina as probabilidades de fixação na ABM tem 2^V equações lineares, uma equação para cada configuração homogênea, onde V é o número de subpopulações que compõem a metapopulação.

Nos próximos capítulos, vamos dar prosseguimento à discussão iniciada em [44] e estudar o processo de Moran na ABM em dois metagrafos particulares: o metagrafo de $V = 2$ vértices com populações de tamanhos N_1 e N_2 arbitrários; e o metagrafo estrela com centro representando uma população de tamanho N_1 e pelo menos duas folhas, todas com população de mesmo tamanho N_2 . Nesta tese, vamos trabalhar apenas com o caso em que tais populações nos vértices são estruturadas por grafos completos. Entretanto, gostaríamos de frisar que não existe nenhuma restrição em supor que as subpopulações sejam estruturadas por grafos que não o completo: desde que conheçamos, seja por uma fórmula exata, seja por um cálculo numérico, a probabilidade de fixação do tipo A nestes grafos, podemos, em princípio, reproduzir os argumentos elucidados aqui para estudar o processo de Moran na ABM nestes metagrafos. Este é o caso, por exemplo, em que poderíamos substituir grafos completos por grafos estrelas nos vértices dos metagrafos de 2 vértices ou metagrafo estrela. Outra possibilidade interessante que ganhamos com a ABM e que não será explorada aqui é podermos tratar numericamente metagrafos arbitrários com valores de V pequenos.

Observação 4. *Chamamos a atenção do leitor para o fato de que, com exceção de fórmulas assintóticas, as quantidades que iremos calcular nos Capítulos 3 e 4 são exatas dentro da aproximação de baixa migração.*

Capítulo 3

O processo de Moran na ABM de duas subpopulações

Neste capítulo, vamos utilizar a ABM no processo de Moran no metagrafo mais simples possível, com $V = 2$ vértices e aptidões independentes da frequência. Este metagrafo pode ser pensado intuitivamente como duas subpopulações isoladas geograficamente (por exemplo ocupando duas ilhas com dificuldades para a migração entre elas). Como o leitor verá, neste caso podemos calcular de forma exata as probabilidades de fixação com condições iniciais em configurações homogêneas da população e, em termos destas, a probabilidade de fixação de um mutante que surja em uma população totalmente homogênea. Posteriormente, estudaremos a RVFM, ver Definição 1.2, quantificando qual o efeito da separação da população em dois pedaços muito isolados sobre questões biologicamente relevantes.

Na Seção 3.1 vamos deduzir fórmulas exatas para a probabilidades de fixação no processo de Moran na ABM de duas subpopulações com condições iniciais em configurações homogêneas. Posteriormente, deduziremos também fórmulas assintóticas para tais probabilidades quando o tamanho total da população $N = N_1 + N_2$ tende ao infinito, mantendo-se fixa a razão $\rho = N_1/N_2$. Na Seção 3.2 faremos um estudo da RVFM na ABM de duas subpopulações. Por fim, na Seção 3.3, como aplicação do estudo que faremos aqui, examinaremos um modelo matemático simplificado, proposto por Kolodny e Feldman [24], para a mistura genética de africanos anatomicamente modernos e Ne-

andertais. Em particular, vamos provar, no contexto da ABM, um resultado que Kolodny e Feldman conjecturaram a partir de simulações do modelo por eles proposto.

3.1 Probabilidades de fixação em duas subpopulações

Considere duas subpopulações isoladas geograficamente, às quais nos referiremos por subpopulação 1 e subpopulação 2. Suponha que as subpopulações tenham tamanhos constantes iguais a N_1 e N_2 respectivamente. Além disso, suponha que cada indivíduo das subpopulações 1 e 2 esteja conectado por um grafo completo aos demais indivíduos da sua subpopulação (Veja a Figura 3.1).

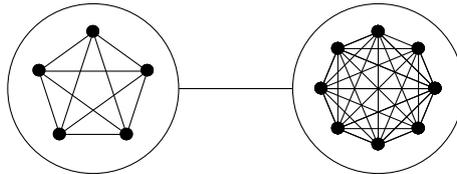


Figura 3.1: Representação esquemática ilustrando uma metapopulação composta de duas subpopulações estruturadas cada uma por um grafo completo. Neste exemplo, a subpopulação 1 tem tamanho $N_1 = 5$ e a subpopulação 2 tem tamanho $N_2 = 8$.

Nosso intuito é estudar o processo de Moran em uma metapopulação formada por estas duas subpopulações admitindo que as migrações entre elas são raras e que as aptidões são independentes da frequência. Sem perda de generalidade, consideraremos que os indivíduos de tipo A têm aptidão r e os de tipo B têm aptidão 1. Este caso é estudado em [44], onde os autores obtêm resultados exatos considerando que na ABM as migrações acontecem segundo a regra de atualização Bd. Os resultados descritos por eles correspondem ao estudo da probabilidade de fixação de um único mutante do tipo A na metapopulação, os quais também são atestados numericamente para valores pequenos e fixos de N_1 e N_2 . Em nosso trabalho, vamos explorar não somente a regra Bd, como também a regra dB na ABM. Procuraremos, em cada um

dos casos, apresentar fórmulas assintóticas para as probabilidades de fixação na ABM, não obtidas em [44].

Hipótese 2. *Em todo este capítulo, bem como no Capítulo 4, assumiremos que a aptidão dos indivíduos de tipo A será r . Por outro lado, aos indivíduos de tipo B atribuiremos aptidão igual a 1.*

Isto posto, queremos calcular as probabilidades de fixação dos tipos com condições iniciais tomadas no sentido da ABM. No presente caso de duas subpopulações, somos levados a considerar quatro possíveis estados homogêneos que denotaremos por AA, AB, BA e BB . O estado AB significa só indivíduos do tipo A na subpopulação 1 e só indivíduos do tipo B na subpopulação 2. Uma definição análoga vale para BA . Os estados AA e BB são absorventes e correspondem respectivamente às situações em que ambas as subpopulações são do tipo A e do tipo B .

As probabilidades de transição não-nulas, na ABM, entre os estados homogêneos da metapopulação podem ser facilmente calculadas de acordo com as regras de atualização pré-estabelecidas. As fórmulas são:

Caso Bd:

$$t_{AB \rightarrow AA} = \frac{N_1 r}{N_1 r + N_2} \Phi_{wm}^{N_2}(1, r) \quad t_{AB \rightarrow BB} = \frac{N_2}{N_1 r + N_2} \Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r). \quad (3.1)$$

Caso dB:

$$t_{AB \rightarrow AA} = \frac{N_2}{N_1 + N_2} \Phi_{wm}^{N_2}(1, r) \quad t_{AB \rightarrow BB} = \frac{N_1}{N_1 + N_2} \Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r). \quad (3.2)$$

Vejamos como obter as fórmulas no caso Bd. Na primeira das fórmulas (3.1), o fator $N_1 r / (N_1 r + N_2)$ é a probabilidade de que um indivíduo do tipo A na subpopulação 1 seja sorteado para reprodução. A probabilidade de que este indivíduo, em um evento de migração, substitua um indivíduo B na subpopulação 2 é 1. Mas para que a configuração se torne AA , este migrante precisa se fixar, o que ocorre com probabilidade $\Phi_{wm}^{N_2}(1, r)$. Um raciocínio análogo vale para explicar a segunda fórmula, note que a probabilidade de um único indivíduo B se fixar em uma população com $N - 1$ indivíduos A é $1 - \Phi_{wm}^N(N - 1, r)$. Usando (1.12), pode-se ver que esta probabilidade é

simplesmente $\Phi_{wm}^N(1, 1/r)$. Note ainda que, nas condições da ABM,

$$t_{AB \rightarrow BA} = t_{BA \rightarrow AB} = 0, \quad (3.3)$$

pois tais transições requerem pelo menos duas migrações na mesma unidade de tempo, e

$$t_{AB \rightarrow AB} = 1 - t_{AB \rightarrow AA} - t_{AB \rightarrow BB}. \quad (3.4)$$

As probabilidades $t_{BA \rightarrow AA}$ e $t_{BA \rightarrow BB}$ podem ser calculadas por fórmulas análogas. Seguindo o mesmo raciocínio acima, o leitor pode obter sem dificuldade as fórmulas para o caso dB.

Seja $\pi_x, x \in E = \{AA, AB, BA, BB\}$, a probabilidade de fixação no estado AA dado que o estado inicial homogêneo é x . Notemos que

$$\pi_{BB} = 0 \quad \text{e} \quad \pi_{AA} = 1. \quad (3.5)$$

Na notação do parágrafo anterior, a equação geral que determina π_{AB} , em ambos os casos Bd e dB, pode ser escrita como

$$\pi_{AB} = t_{AB \rightarrow AA} \pi_{AA} + t_{AB \rightarrow AB} \pi_{AB} + t_{AB \rightarrow BA} \pi_{BA} + t_{AB \rightarrow BB} \pi_{BB}. \quad (3.6)$$

Usando as condições (3.3), (3.4) e (3.5), podemos resolver facilmente a equação (3.6) e concluir que

$$\pi_{AB} = \frac{1}{1 + \frac{t_{AB \rightarrow BB}}{t_{AB \rightarrow AA}}}. \quad (3.7)$$

Para o que falta, basta substituir na fórmula (3.7) as probabilidades de transição $t_{AB \rightarrow BB}$ e $t_{AB \rightarrow AA}$ estabelecidas em (3.1) e (3.2). O resultado é

Caso Bd:

$$\pi_{AB} = \frac{1}{1 + \frac{N_2}{N_1 r} \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, r)}} = \begin{cases} \frac{1}{1 + \frac{N_2}{N_1} r^{-N_1} \frac{1-r^{-N_2}}{1-r^{-N_1}}}, & \text{se } r \neq 1 \\ \frac{1}{1 + N_2^2/N_1^2}, & \text{se } r = 1 \end{cases}. \quad (3.8)$$

Caso dB:

$$\pi_{AB} = \frac{1}{1 + \frac{N_1}{N_2} \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1,1/r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1,r)}} = \begin{cases} \frac{1}{1 + \frac{N_1}{N_2} r r^{-N_1} \frac{1-r^{-N_2}}{1-r^{-N_1}}}, & \text{se } r \neq 1 \\ \frac{1}{2}, & \text{se } r = 1 \end{cases}. \quad (3.9)$$

Observação 5. *As fórmulas para π_{BA} são obtidas a partir de π_{AB} simplesmente trocando N_1 com N_2 nas fórmulas (3.8) e (3.9).*

Queremos comparar os resultados acima para π_{AB} na ABM com

$$\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r) = \begin{cases} \frac{1-r^{-N_1}}{1-r^{-(N_1+N_2)}}, & \text{se } r \neq 1 \\ \frac{N_1}{N_1+N_2}, & \text{se } r = 1 \end{cases}. \quad (3.10)$$

Ou seja, queremos tomar uma população não-estruturada de mesmo tamanho $N_1 + N_2$, uma mesma condição inicial de N_1 indivíduos de tipo A e respondermos se o isolamento destes indivíduos aumenta ou diminui a probabilidade de fixação do tipo A . Em particular, entender como este aumento ou diminuição depende da aptidão r , dos tamanhos N_1 e N_2 das subpopulações e do tipo Bd ou dB da regra de atualização.

Para o que segue, vamos denotar por ρ a razão entre N_1 e N_2 :

$$\rho = \frac{N_1}{N_2}. \quad (3.11)$$

O parâmetro ρ nos permitirá descrever, em termos deste, os efeitos da variação do tamanho da subpopulação 1 em relação à subpopulação 2 no comportamento da probabilidade de fixação.

Em que pese sua demonstração elementar, o teorema a seguir responde rigorosamente, no contexto da ABM, sobre a comparação entre $\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r)$ e π_{AB} . O nosso resultado inclui ambos os casos Bd e dB.

Teorema 3.1. *Considere duas subpopulações de tamanhos N_1 e N_2 , cada uma das quais estruturada por um grafo completo e isoladas geograficamente. Suponha que a subpopulação de tamanho N_1 seja toda de tipo A e a de tamanho N_2 toda de tipo B . Admita as condições da Hipótese 2. Então, na ABM*

do processo de Moran nessas duas subpopulações, vale a seguinte condição:

$$\pi_{AB} > \Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r) \Leftrightarrow \begin{cases} \rho > 1, & \text{caso Bd} \\ \rho < \frac{1}{r}, & \text{caso dB} \end{cases}. \quad (3.12)$$

Prova: Para examinar a fração $\pi_{AB}/\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r)$, observe primeiro que as quantidades (3.8), (3.9) e (3.10) são da forma $1/(1+R)$, onde R é uma função positiva de N_1, N_2 e r . Assim, podemos considerar a seguinte relação

$$\frac{1}{1+R_1} > \frac{1}{1+R_2} \Leftrightarrow R_2 > R_1. \quad (3.13)$$

Começemos analisando o caso Bd. Para $r \neq 1$, a fórmula (3.10) é da forma $1/(1+R)$, com $R = r^{-N_1}(1-r^{-N_2})/(1-r^{-N_1})$. Daí, usando a relação (3.13), temos que

$$\pi_{AB} > \Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r) \Leftrightarrow r^{-N_1} \frac{1-r^{-N_2}}{1-r^{-N_1}} > \frac{N_2}{N_1 r} \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, r)}. \quad (3.14)$$

Agora, usando a expressão (1.12) para $\Phi_{wm}^N(1, r)$ e simplificando, obtemos

$$\pi_{AB} > \Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r) \Leftrightarrow \frac{N_1}{N_2} > 1. \quad (3.15)$$

Para $r = 1$, ainda no caso Bd, podemos repetir o raciocínio acima e verificar que a relação (3.15) continua valendo. Com argumentos análogos, podemos também tratar o caso dB e mostrar que para todo r vale

$$\pi_{AB} > \Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r) \Leftrightarrow \frac{N_1}{N_2} < \frac{1}{r}. \quad (3.16)$$

□

Observação 6. Em relação ao Teorema 3.1, é fácil verificar nos casos Bd e dB que quando $r \neq 1$, vale também a igualdade em (3.12) conforme a relação abaixo:

$$\pi_{AB} = \Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r) \Leftrightarrow \begin{cases} \rho = 1, & \text{caso Bd} \\ \rho = \frac{1}{r}, & \text{caso dB} \end{cases}. \quad (3.17)$$

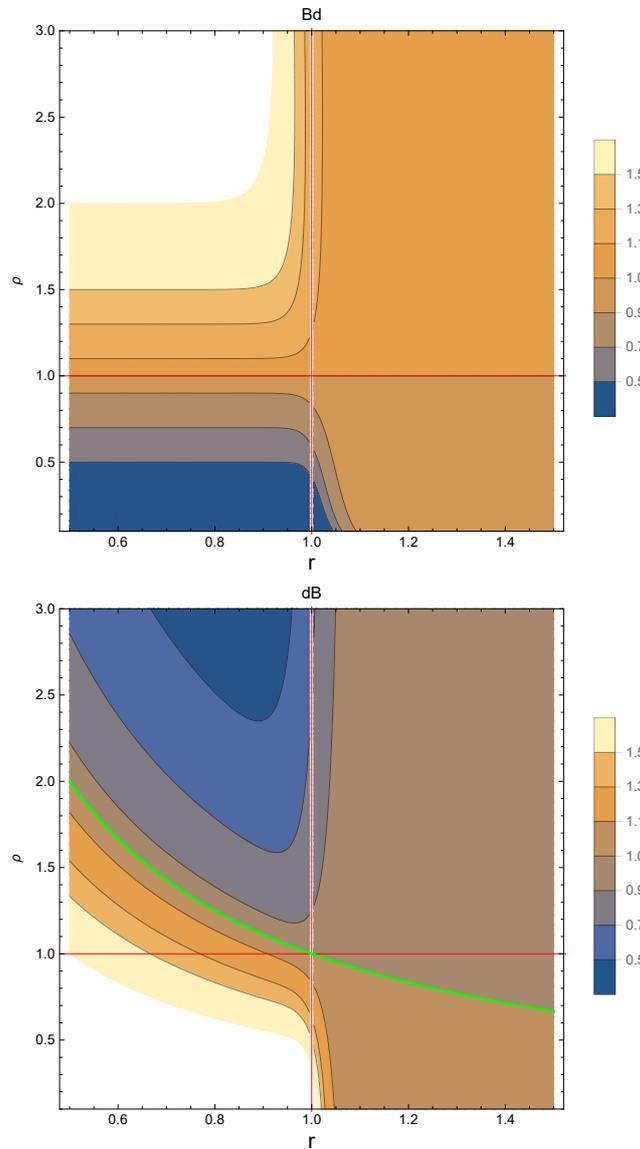


Figura 3.2: Painel superior: gráfico das curvas de nível da razão $\pi_{AB}/\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r)$ no caso Bd. Para este caso, podemos constatar na figura que o isolamento geográfico corrobora para a probabilidade de fixação da subpopulação mais numerosa. Painel inferior: o análogo para o caso dB. Neste caso, observe que a separação entre a razão ser maior ou menor que 1 é determinada por $\rho = 1/r$, representada pela curva verde. Em ambos painéis fixamos $N_1 = 50$.

No caso Bd, os cálculos acima evidenciam que o isolamento geográfico confere vantagem à fixação do tipo mais numeroso na população quando

comparado ao caso sem isolamento geográfico. Portanto, dentro da ABM, o isolamento geográfico aumenta, com relação ao caso misto, a probabilidade de fixação do tipo mais numeroso.

Já no caso dB, a expressão (3.16) indica que o isolamento geográfico confere desvantagem aos indivíduos do tipo A caso eles sejam mais numerosos e mais aptos. Por exemplo, se $N_1 > N_2$, vê-se que o isolamento geográfico favorece a fixação dos indivíduos do tipo A , desde que a aptidão r deles seja menor que 1 e suficientemente pequena. Por outro lado, se $N_1 < N_2$, os indivíduos do tipo A têm vantagem se r não for muito grande. É interessante notar que, no caso dB neutro, isto é, quando $r = 1$, o isolamento geográfico beneficia os indivíduos do tipo A caso eles sejam a minoria na população. A Figura (3.2) ilustra o resultado do Teorema 3.1 para o casos Bd e dB.

Apesar da generalidade do Teorema (3.1), é interessante quantificar o tamanho da vantagem ou desvantagem que a estrutura de isolamento confere. As fórmulas exatas (3.8) e (3.9) não são muito explícitas sobre isto. Por isto, é conveniente ter expressões assintóticas para π_{AB} no limite em que os tamanhos N_1 e N_2 das subpopulações ficam grandes. Mais precisamente, estamos interessados em obter fórmulas assintóticas quando ambos N_1 e N_2 tendem para o infinito, mantendo-se fixa a razão $\rho = N_1/N_2$.

Continuando, precisamos da definição a seguir, a qual desempenhará papel preponderante na discussão subsequente.

Definição 3.1. *Considere $r \neq 1$. Definamos $N_s = \min\{N_1, N_2\}$ e*

$$\varepsilon = \begin{cases} r^{N_s}, & \text{se } r < 1 \\ r^{-N_s}, & \text{se } r > 1 \end{cases} . \quad (3.18)$$

Denominamos regime de seleção forte a condição em que, para N_s grande o suficiente, tem-se o parâmetro ε muito menor que 1.

No contexto da definição acima, os resultados assintóticos que pretendemos alcançar serão obtidos calculando as quantidades de interesse como séries de potências de ε e desprezaremos potências elevadas de ε . Pode-se dizer que seleção forte significa que indivíduos menos aptos têm probabilidade grande de serem extintos, enquanto indivíduos mais aptos têm fixação quase certa. Podemos verificar a validade dessa afirmação no conteúdo do

teorema a seguir em que estabelecemos fórmulas assintóticas de seleção forte para π_{AB} .

Teorema 3.2. *As fórmulas para π_{AB} dadas por (3.8) e (3.9) possuem as seguintes expressões assintóticas de seleção forte*

Caso Bd:

$$\pi_{AB} = \begin{cases} \rho r^{N_2}(1 - (\rho - 1)r^{N_2} - r^{N_1}) + O(r^{3N_s}), & \text{se } r < 1 \\ 1 - \rho^{-1} r^{-N_1} + O(r^{-2N_s}), & \text{se } r > 1 \end{cases} . \quad (3.19)$$

Caso dB:

$$\pi_{AB} = \begin{cases} \rho^{-1} r^{-1} r^{N_2}(1 - (\rho^{-1} r^{-1} - 1)r^{N_2} - r^{N_1}) + O(r^{3N_s}), & \text{se } r < 1 \\ 1 - \rho r r^{-N_1} + O(r^{-2N_s}), & \text{se } r > 1 \end{cases} . \quad (3.20)$$

No contexto da Definição 3.1, as fórmulas (3.19) e (3.20) dão o termo dominante e a primeira correção a ele em séries de potências de ε . Passemos, agora, à prova do Teorema 3.2.

Prova: Provaremos o resultado para o caso Bd. A prova para o caso dB é análoga. Começemos examinando o termo

$$\frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, r)} = r r^{-N_1} \frac{1 - r^{-N_2}}{1 - r^{-N_1}}, \quad (3.21)$$

que aparece no denominador da equação (3.8). Se N_1 é suficientemente grande, podemos constatar facilmente que

$$r r^{-N_1} \frac{1 - r^{-N_2}}{1 - r^{-N_1}} = \begin{cases} r r^{-N_2}(1 + r^{N_1} - r^{N_2}) + O(r^{N_s}), & \text{se } r < 1 \\ r r^{-N_1}(1 + r^{-N_1} - r^{-N_2}) + O(r^{-3N_s}), & \text{se } r > 1 \end{cases} . \quad (3.22)$$

Levando em conta (3.18), o resultado acima é obtido tomando os primeiros termos na expansão em série de Taylor de $(1 - \varepsilon)^{-1}$ em torno do zero.

Se $r > 1$ e N_1 suficientemente grande, podemos escrever um termo que

aparece no denominador da equação (3.8), como

$$\frac{N_2}{N_1 r} \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, r)} = \rho^{-1} r^{-N_1} (1 + r^{-N_1} - r^{-N_2}) + O(r^{-3N_s}). \quad (3.23)$$

Observe que o termo $O(r^{-3N_s})$ é uma pequena correção se $r > 1$ e N_1 é suficientemente grande. Substituindo no denominador da equação (3.8) a expressão obtida acima, um cálculo direto fornece

$$\pi_{AB} = 1 - \rho^{-1} r^{-N_1} + O(r^{-2N_s}),$$

onde escrevemos explicitamente somente a primeira correção além da dominante quando N_1 e N_2 são grandes.

Para $r < 1$, empregamos um raciocínio similar ao que foi feito acima para obter

$$\frac{N_2}{N_1 r} \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, r)} = \rho^{-1} r^{-N_2} (1 + r^{N_1} - r^{N_2}) + O(r^{N_s}). \quad (3.24)$$

Levando a expressão acima em (3.8) o resultado segue. \square

Na Figura 3.3 comparamos o gráfico de π_{AB} com sua expressão assintótica dada por (3.19) e (3.20).

Como corolário do Teorema 3.2, estabelecemos a seguir fórmulas assintóticas para a razão $\pi_{AB}/\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r)$ nos casos Bd e dB. Essa razão foi objeto de discussão do Teorema 3.1, veja a relação (3.12).

Corolário 3.1.1. *A razão $\pi_{AB}/\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r)$ possui as seguintes expressões assintóticas no regime de seleção forte*

Caso Bd:

$$\frac{\pi_{AB}}{\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r)} = \begin{cases} \rho(1 - (\rho - 1) r^{N_2}) + O(r^{2N_s}), & \text{se } r < 1 \\ 1 - (\rho^{-1} - 1) r^{-N_1} + O(r^{-2N_s}), & \text{se } r > 1 \end{cases}. \quad (3.25)$$

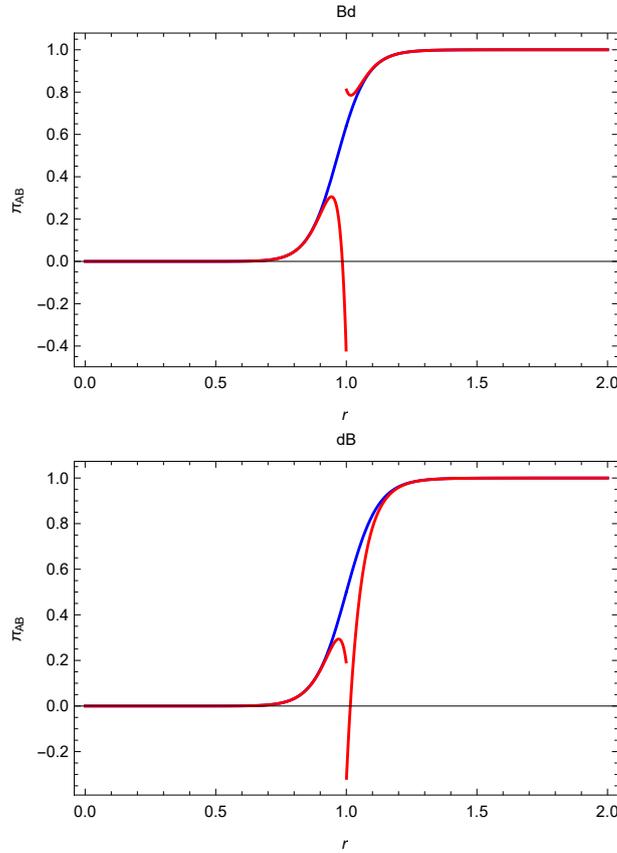


Figura 3.3: Em ambos os painéis a linha azul representa o gráfico de π_{AB} para $N_1 = 20$ e $N_2 = 15$, enquanto que a linha vermelha representa a aproximação assintótica no regime de seleção forte dada pelo Teorema 3.2. Podemos também observar diretamente dos gráficos acima que, em ambos os casos Bd e dB, existe uma limitação da precisão da aproximação assintótica quando r fica próximo de 1, pois os termos incluídos nos termos de correções de ordem superior em (3.22) deixam de ser desprezíveis.

Caso dB:

$$\frac{\pi_{AB}}{\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r)} = \begin{cases} \rho^{-1} r^{-1} (1 - (\rho^{-1} r^{-1} - 1) r^{N_2}) + O(r^{2N_s}), & \text{se } r < 1 \\ 1 - (\rho r - 1) r^{-N_1} + O(r^{-2N_s}), & \text{se } r > 1 \end{cases} \quad (3.26)$$

Prova: É fácil ver que

$$\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r) = \begin{cases} r^{N_2}(1 - r^{N_1}) + O(r^{3N_s}), & \text{se } r < 1 \\ 1 - r^{-N_1}(1 - r^{-N_2}) + O(r^{-3N_s}), & \text{se } r > 1 \end{cases} . \quad (3.27)$$

A partir daí, a prova segue fazendo a razão das fórmulas (3.19) e (3.20) por (3.27). \square

Na Figura 3.4, comparamos para ambos os casos Bd e dB, as curvas de nível produzidas a partir das expressões assintóticas (3.25) e (3.26) com as curvas de nível exibidas na Figura 3.2, produzidas a partir da expressão exata $\pi_{AB}/\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r)$. Vê-se que a concordância entre as expressões assintóticas e as exatas é boa desde que r não seja próximo de 1.

3.2 Probabilidade de fixação de uma mutação em duas subpopulações

Conforme frisamos na Seção 1.1, existe interesse em determinar o quanto a estrutura espacial da população influencia na probabilidade de fixação de um único indivíduo de um dado tipo introduzido de maneira aleatória uniforme em uma população de indivíduos do outro tipo. Mais precisamente, no caso de duas subpopulações isoladas geograficamente e estruturadas por um grafo completo, suponhamos, inicialmente, que toda a população $N = N_1 + N_2$ seja do tipo B e tenha aptidão 1. Considere que um indivíduo do tipo B seja sorteado de maneira uniforme para ser substituído por um indivíduo do tipo A com aptidão r . Neste caso, a probabilidade de fixação média do tipo A , na ABM, é dada por

$$\mu = \frac{N_1}{N_1 + N_2} \Phi_{wm}^{N_1}(1, r) \pi_{AB} + \frac{N_2}{N_1 + N_2} \Phi_{wm}^{N_2}(1, r) \pi_{BA} . \quad (3.28)$$

Queremos, nesta seção, estudar a razão entre a probabilidade μ dada por (3.28) e a probabilidade $\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(1, r)$. De outra forma, estamos interessados em estudar a RVFM, ver Definição 1.2, na ABM do processo de Moran em

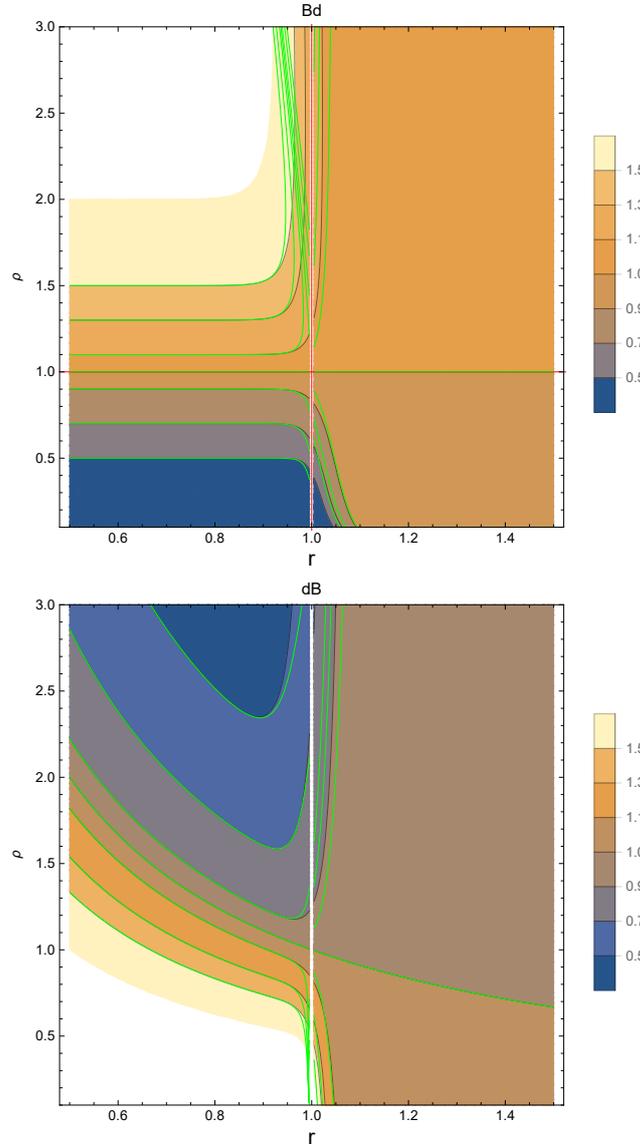


Figura 3.4: Painel superior: gráfico das curvas de nível (em verde) produzidas a partir da expressão assintótica (3.25) dada pelo Corolário 3.1.1 sobrepostas com as curvas de nível da razão $\pi_{AB}/\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(N_1, r)$ para caso Bd. Painel inferior: o análogo para o caso dB. Em ambos painéis, o valor de N_1 é o mesmo que foi usado para produzir a Figura 3.2, $N_1 = 50$.

duas subpopulações. Para o caso $r \neq 1$, o estudo da RVFM em duas subpopulações é feito através de fórmulas assintóticas, no limite quando ambos N_1 e N_2 tendem para o infinito, mantendo-se fixa a razão $\rho = N_1/N_2$. Embora não tenhamos uma fórmula explícita para π_{BA} , esta pode ser facilmente

obtida, de acordo com a Observação 5.

Teorema 3.3. *Considere duas subpopulações de tamanhos N_1 e N_2 , cada uma das quais estruturada por um grafo completo e isoladas geograficamente. Admita as condições da Hipótese 2. Então, na ABM do processo de Moran nessas duas subpopulações, valem as seguintes expressões assintóticas de seleção forte para a RVFM:*

Caso Bd:

$$R_{N_1+N_2}(r) = \begin{cases} \rho + \rho^{-1} - 1 + Q_1(\rho) r^{N_1} + Q_1(\rho^{-1}) r^{N_2} + O(r^{2N_s}), & \text{se } r < 1 \\ 1 + \frac{\rho-1}{\rho+1} (r^{-N_1} - r^{-N_2}) + O(r^{-2N_s}), & \text{se } r > 1 \end{cases} \quad (3.29)$$

Caso dB:

$$R_{N_1+N_2}(r) = \begin{cases} \frac{1}{r} + Q_2(\rho) r^{N_1} + Q_2(\rho^{-1}) r^{N_2} + O(r^{2N_s}), & \text{se } r < 1 \\ 1 + Q_3(\rho^{-1}) r^{-N_1} + Q_3(\rho) r^{-N_2} + O(r^{-2N_s}), & \text{se } r > 1 \end{cases} \quad (3.30)$$

Aqui $Q_1(x)$, $Q_2(x)$ e $Q_3(x)$ são as funções racionais dadas por

$$Q_1(x) = \frac{x-1}{x^2(x+1)}, \quad Q_2(x) = \frac{xr-1}{r^2x(x+1)} \quad e \quad Q_3(x) = \frac{x-r}{x(x+1)}. \quad (3.31)$$

Ademais, quando $r = 1$, a RVFM para ambas as regras Bd e dB é, na ABM, dada por

$$R_{N_1+N_2}(1) = 1. \quad (3.32)$$

Prova: Fazendo a razão entre μ e $\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(1, r)$ obtemos

$$R_{N_1+N_2}(r) = \frac{N_1}{N_1+N_2} \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, r)}{\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(1, r)} \pi_{AB} + \frac{N_2}{N_1+N_2} \frac{\Phi_{wm}^{N_2}(1, r)}{\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(1, r)} \pi_{BA}. \quad (3.33)$$

Observe que o segundo termo é simétrico ao primeiro, bastando trocar N_1 por N_2 . A expressão $\Phi_{wm}^{N_1}(1, r)/\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(1, r)$ que aparece no primeiro termo da expressão (3.33), tem a seguinte expansão assintótica:

$$\frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, r)}{\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(1, r)} = \begin{cases} r^{-N_2} - r^{N_1} + O(r^{2N_s}), & \text{se } r < 1 \\ 1 + r^{-N_1} + O(r^{-2N_s}), & \text{se } r > 1 \end{cases} \quad (3.34)$$

Tomando $r \neq 1$ e substituindo as expressões (3.19) e (3.34) no primeiro termo de (3.33), temos

$$\frac{N_1}{N_1 + N_2} \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, r)}{\Phi_{wm}^{N_1+N_2}(1, r)} \pi_{AB} = 1 + r^{-N_1}(1 - \rho^{-1}) + O(r^{-2N_s}). \quad (3.35)$$

Repetindo este procedimento para o segundo termo em (3.33) e mantendo explícito somente os termos $O(r^{-N_1})$ ou $O(r^{-N_2})$, obtemos no caso Bd para $r > 1$ que

$$R_{N_1+N_2}(r) = 1 + \frac{\rho - 1}{\rho + 1} (r^{-N_1} - r^{-N_2}) + O(r^{-2N_s}). \quad (3.36)$$

A demonstração dos demais casos para $r \neq 1$ é análoga. No caso em que $r = 1$, a prova é um cálculo imediato levando-se em conta as expressões (3.8) e (3.9). \square

Agora, vamos utilizar os resultados acima para estudar a RVFM na ABM do processo de Moran no metagrafo com dois vértices. Para tanto, definiremos para os casos Bd e dB, as seguinte aproximações assintóticas:

Caso Bd:

$$R_{N_1+N_2}^{as}(r) = \begin{cases} \rho + \rho^{-1} - 1, & \text{se } r < 1 \\ 1 + \frac{\rho-1}{\rho+1}(r^{-N_1} - r^{-N_2}), & \text{se } r > 1 \end{cases}. \quad (3.37)$$

Caso dB:

$$R_{N_1+N_2}^{as}(r) = \begin{cases} \frac{1}{r}, & \text{se } r < 1 \\ 1 + Q_3(\rho^{-1})r^{-N_1} + Q_3(\rho)r^{-N_2}, & \text{se } r > 1 \end{cases}, \quad (3.38)$$

onde $Q_2(x)$ e $Q_3(x)$ são funções dadas por

$$Q_2(x) = \frac{xr - 1}{r^2 x(x+1)} \quad \text{e} \quad Q_3(x) = \frac{x - r}{x(x+1)}. \quad (3.39)$$

A Figura 3.5 exhibe o gráfico das curvas de nível obtidas numericamente através da expressão exata de $R_{N_1+N_2}(r)$ nos casos Bd e dB, bem como o gráfico das curvas de nível produzidas a partir da aproximação assintótica $R_{N_1+N_2}^{as}(r)$

dada por (3.37) e (3.38).

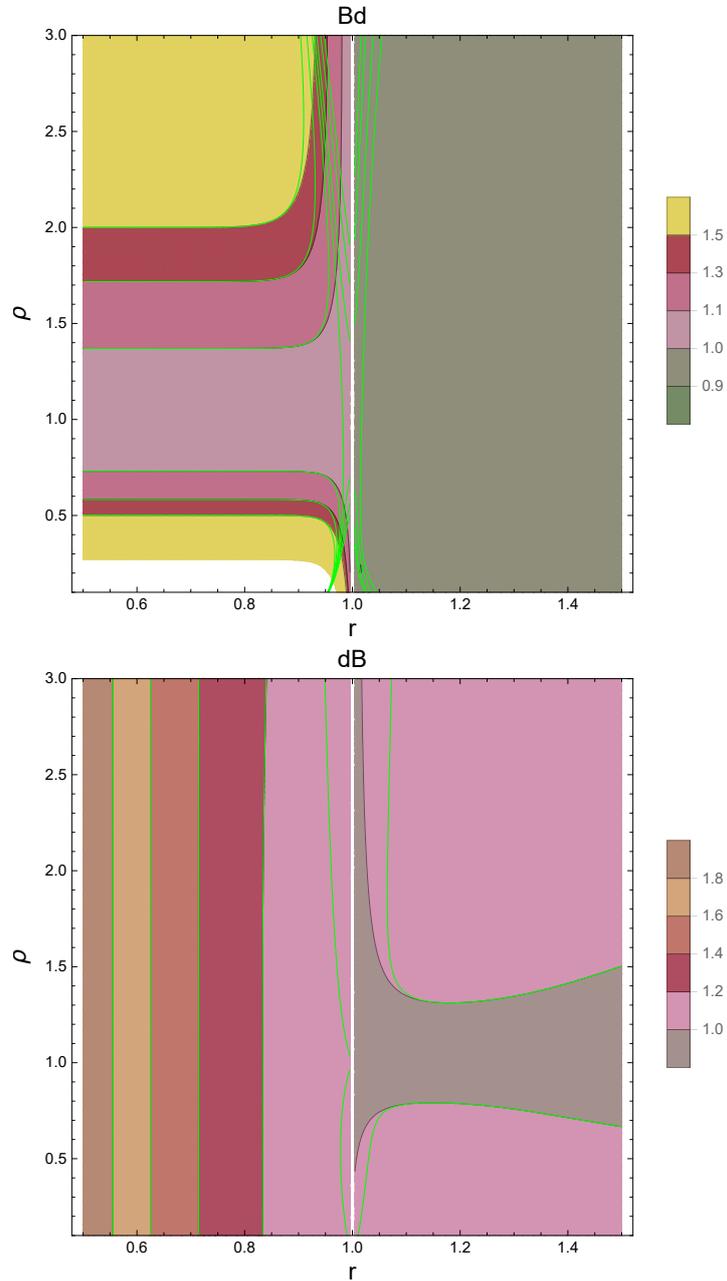


Figura 3.5: Painel superior: Gráfico das curvas de nível de $R_{N_1+N_2}(r)$ no caso Bd obtido numericamente para $N_1 = 50$. Para efeito de comparação, os contornos em verde representam as curvas de nível produzidas a partir da aproximação assintótica $R_{N_1+N_2}^{as}(r)$ dada por (3.37). Painel inferior: o análogo para o caso dB com $N_1 = 50$.

Começemos analisando a RVFM no caso Bd. Para tanto, consideremos dois casos separadamente:

1. Caso $\rho \neq 1$. Nesse caso, uma análise simples das expressões em (3.37), nos permite verificar que, $R_{N_1+N_2}^{as}(r)$ é maior que 1, para $r < 1$, e menor que 1, para $r > 1$. Portanto, na aproximação dada por (3.37), o metagrafo com dois vértices é uma estrutura supressora de seleção natural na regra Bd.
2. Caso $\rho = 1$. Aqui funciona um cálculo direto, de modo que não precisamos recorrer à aproximação (3.37). De fato, pela Observação 6, temos que $\pi_{AB} = \Phi_{wm}^{2N_1}(N_1, r)$. Por outro lado, como $\pi_{AB} = \pi_{BA}$ neste caso, concluímos, a partir da expressão (3.28), que

$$\mu = \Phi_{wm}^{N_1}(1, r) \Phi_{wm}^{2N_1}(N_1, r), \quad (3.40)$$

e segue daí que

$$R_{N_1+N_2}(r) = \frac{\mu}{\Phi_{wm}^{2N_1}(1, r)} = \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, r) \Phi_{wm}^{2N_1}(N_1, r)}{\Phi_{wm}^{2N_1}(1, r)} = 1. \quad (3.41)$$

Passemos, agora, ao estudo da RVFM no caso dB. Há dois casos a considerar:

1. Caso $\rho = 1$. Aqui não precisamos apelar para a aproximação (3.38). Com efeito, um cálculo direto fornece

$$R_{N_1+N_2}(r) = \frac{1 + r^{N_1}}{r + r^{N_1}}, \quad (3.42)$$

Portanto, podemos concluir, a partir de (3.42), que quando $\rho = 1$, o metagrafo com dois vértices é uma estrutura supressora de seleção na regra dB, conforme pode ser visto no painel inferior da Figura 3.5.

2. Caso $\rho \neq 1$. Levando em conta a aproximação (3.38) notamos que, para $r < 1$, $R_{N_1+N_2}^{as}(r)$ é maior que 1 e independente de ρ . Já para $r > 1$, a análise de quando $R_{N_1+N_2}^{as}(r) = 1$ é mais complicada. Mas podemos ver pela Figura 3.5 que, para cada $r > 1$ fixado, existe uma região em

torno de $\rho = 1$ em que $R_{N_1+N_2}^{as}(r) < 1$, enquanto $R_{N_1+N_2}^{as}(r) > 1$ tanto para valores grandes de ρ , quanto para ρ próximo de 0.

Chamamos a atenção do leitor para o fato de que, por exemplo para $\rho = 1.5$, a Figura 3.5 parece indicar um comportamento transiente no caso dB.

Informalmente, podemos observar que, tanto na regra Bd quanto na regra dB, se $r > 1$, o efeito da estrutura na probabilidade de fixação de um mutante do tipo A , medido pela diferença entre a RVFM e 1, é exponencialmente pequeno quando a população cresce, mas pode ser enorme se $r < 1$. No Capítulo 4, quando estudarmos a ABM do processo de Moran na metaestrela, observaremos esse mesmo aspecto nas quantidades que iremos calcular.

3.3 Absorção dos Neandertais na população humana

A *Teoria da Origem Única Africana* (TOUA) foi, durante muito tempo, defendida pela comunidade científica. Segundo os defensores da TOUA, a espécie *Homo sapiens* teria se originado a partir de um grupo anatomicamente moderno (AM) que teria surgido na África entre cerca de 100 mil a 200 mil anos atrás e migrado posteriormente para outros continentes, substituindo - sem qualquer possibilidade de mistura genética [10] - outros grupos primitivos até então existentes. O mais famoso destes outros grupos são os Neandertais, que habitaram a Europa e o oeste da Ásia e que desapareceram cerca de 30 mil anos atrás.

Inicialmente, os dados genéticos que davam suporte à TOUA eram oriundos principalmente do DNA mitocondrial coletado de humanos vivos nos anos 1980. Com o tempo, a TOUA ganhou ainda mais força após a descoberta experimental de que o DNA mitocondrial de um fóssil Neandertal era bem diferente daquele dos humanos vivos [25]. Esses resultados indicavam que a humanidade atual teria se originado de uma única mulher africana, que foi então chamada de *Eva mitocondrial*. Entretanto, contrário à TOUA, alguns pesquisadores afirmavam que era possível que os Neandertais e outros grupos também pudessem ter contribuído para a humanidade atual [40, 32].

Desde o trabalho inicial pelo grupo de Svante Pääbo de sequenciamento de DNA fóssil, começando pelo DNA mitocondrial, passaram-se alguns poucos anos até que a tecnologia fosse aperfeiçoada e viesse a ser usada para sequenciar também o DNA mitocondrial de fósseis de Neandertais [17]. De fato, Pääbo e seu grupo de pesquisa conseguiram sequenciar o genoma nuclear de um único fóssil Neandertal e, contrário aos resultados que tinham obtido anteriormente com o DNA mitocondrial, constataram que os Neandertais contribuíram com algo entre 1% e 4% dos genes que aparecem em humanos vivos não africanos [17]. A explicação mais provável era que algum cruzamento teria acontecido entre grupos africanos e Neandertais, que viviam então no Oriente Médio, desmentindo a TOUA. Após esse cruzamento, aquele grupo africano descendente da Eva mitocondrial se espalhou pelo resto do mundo. Embora não vamos entrar aqui em detalhes sobre o assunto, vale aqui o registro: Pääbo foi agraciado com o Prêmio Nobel de Medicina de 2022 por seu pioneirismo no sequenciamento de DNA antigo e as consequentes “descobertas a respeito dos genomas de homínídeos extintos e evolução humana”.

Apesar de todos os avanços no estudo da contribuição dos Neandertais para a humanidade, ainda restava responder à questão importante de como teria ocorrido a mistura dos dois grupos. Neves e Serva [33] propuseram um modelo para a mistura genética entre os africanos AM e Neandertais baseado em neutralidade adaptativa de um grupo sobre o outro: nem Neandertais, nem africanos AM teriam vantagem evolutiva. Com isto, o processo de mistura teria sido lento e o eventual predomínio dos africanos seria uma consequência da deriva genética.

No mesmo espírito, Kolodny e Feldman [24] trabalharam com um modelo muito semelhante ao processo de Moran neutro com migrações, que também incluía o isolamento geográfico dos dois grupos. Para fixar ideias, seja N_1 a população inicial de africanos AM e N_2 a população inicial de Neandertais. Vamos supor que a população total $N_1 + N_2$ permaneceu constante por muito tempo. No processo de Moran neutro, mas sem isolamento geográfico, sabemos que a probabilidade de fixação do grupo africano AM é $\frac{N_1}{N_1 + N_2}$. Embora a probabilidade de fixação do processo de Moran possa ser calculada exatamente em vários casos, a inclusão do isolamento geográfico dificulta ou

impossibilita a solução exata do modelo de Kolodny e Feldman. Através de simulações computacionais do modelo, Kolodny e Feldman mostraram que com neutralidade e isolamento geográfico, a probabilidade de que ao final restassem somente os africanos AM era, supondo $N_1 > N_2$, substancialmente maior do que $\frac{N_1}{N_1+N_2}$. Eles chegam a conjecturar, baseados em argumentos qualitativos, que a probabilidade seria “algo menor” que $\frac{N_1^2}{N_1^2+N_2^2}$. Já neste ponto, não vamos entrar em mais detalhes a respeito do modelo proposto por Kolodny e Feldman. O que gostaríamos de destacar daqui em diante e também o que motivou a elaboração desta curta seção, é que o resultado presumido por Kolodny e Feldman, citado há pouco, pode ser obtido de forma rigorosa pelos métodos desenvolvidos neste capítulo.

De fato, considere que africanos AM e Neandertais se mantiveram em continentes separados um período de tempo suficientemente longo. Suponha que a população total $N_1 + N_2$ de africanos e Neandertais permaneceu constante durante esse período. Embora as migrações ocorram em bandos, é razoável supor que sejam raras e que podemos usar a ABM. Sob este conjunto de hipóteses, se A representa os africanos AM e B os Neandertais, vimos na Seção 3.1 que no processo de Moran neutro na ABM de duas subpopulações geograficamente isoladas, a probabilidade π_{AB} de fixação dos africanos AM na população total $N_1 + N_2$ é, na regra Bd, exatamente $\pi_{AB} = \frac{N_1^2}{N_1^2+N_2^2}$, o resultado conjecturado em [24]. Em particular, se $N_1 > N_2$ a probabilidade de fixação dos africanos AM aumenta bastante em relação ao caso sem isolamento geográfico. É interessante notar, para efeitos de comparação, que na regra dB teríamos $\pi_{AB} = 1/2$, de modo que, caso $N_1 > N_2$, a probabilidade de fixação dos africanos seria menor que no caso sem isolamento geográfico. Parece então mais natural explicar a sobrevivência do grupo dos africanos AM e a preponderância de seu material genético na população humana atual com a hipótese de que $N_1 > N_2$ e regra de atualização Bd. Levando em conta a Observação 2 no Capítulo 1, parece que os humanos são corajosos, não cautelosos.

Capítulo 4

O processo de Moran na ABM da metaestrela

Yagoobi e Traulsen [44] empregaram a ABM para calcular a probabilidade de fixação média de um mutante do tipo A no processo de Moran em uma população estruturada por uma metaestrela e regra Bd. Posteriormente, fazendo gráficos para valores pequenos de tamanhos de populações, compararam o resultado obtido com a probabilidade de fixação de um mutante do tipo A em populações mistas. O estudo feito por eles não inclui o caso dB.

Neste capítulo, vamos estudar o processo de Moran na ABM da metaestrela e apresentaremos resultados de nossa autoria que vão além daqueles divulgados por Yagoobi e Traulsen. Mais precisamente, vamos deduzir tanto para o caso Bd, quanto para o caso dB, fórmulas exatas e assintóticas para a probabilidade de fixação do tipo A com condições iniciais em estados homogêneos da metaestrela. Posteriormente, estabeleceremos também fórmulas assintóticas para a RVFM na metaestrela.

4.1 Metaestrela

Uma *metaestrela* é um grafo estrela cujo centro representa um grafo de tamanho N_1 e cada uma das M folhas representa um grafo de tamanho N_2 . Nesta tese, vamos trabalhar com a metaestrela em que tanto o centro quanto as M folhas são grafos completos. O diagrama da Figura 4.1 ilustra um

exemplo de metaestrela com a qual trabalharemos.

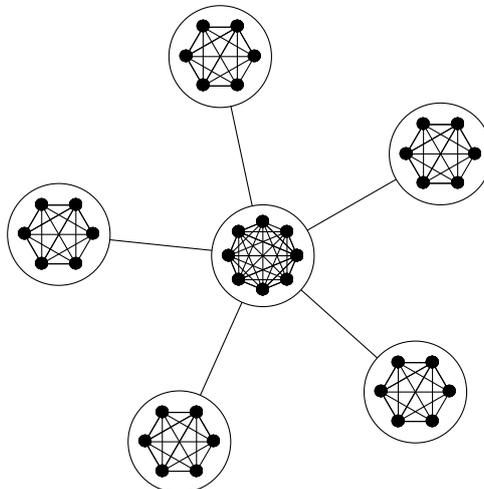


Figura 4.1: Na figura acima, os círculos grandes representam os vértices de um grafo estrela, o qual especifica a interação entre seis populações. Estas, por sua vez, estão representadas cada uma por um grafo completo. Neste exemplo, tomamos uma estrela com $M = 5$ folhas. A população do centro tem tamanho $N_1 = 8$, enquanto que cada uma das populações nas folhas tem tamanho $N_2 = 6$.

Considere uma população de tamanho $N = N_1 + MN_2$, estruturada pela metaestrela. Para calcular as probabilidades de fixação do tipo A no processo de Moran na ABM, consideramos apenas condições iniciais homogêneas. Observe que na ABM do processo de Moran, se considerarmos, por um momento, que cada subpopulação da metaestrela é composta só por indivíduos do tipo A ou só por indivíduos do tipo B podemos identificar imediatamente os estados homogêneos da metaestrela com as configurações da estrela. Graças a esse fato, podemos lançar mão das simetrias da estrela e contabilizar os estados homogêneos na metaestrela da mesma forma como contabilizamos as classes de equivalência no processo de Moran na estrela (Veja a Seção 1.2).

Pelo comentário do parágrafo anterior, podemos identificar os estados homogêneos na metaestrela simplesmente observando se o centro está todo ocupado por indivíduos A ou B e quantas pontas estão todas ocupadas por indivíduos A . Ademais, por analogia com a notação empregada para designar os representantes das classes de equivalência no grafo estrela, vamos denotar os estados homogêneos da metaestrela por $(A, i), (B, i), i = 0, 1, 2, \dots, M$.

Assim, o estado homogêneo (B, i) representa a situação em que o centro é todo do tipo B enquanto que, nas folhas da metaestrela, tem-se i delas todas tipo A . Da mesma forma, o estado homogêneo (A, i) representa a situação análoga no caso em que a subpopulação do centro é inteira do tipo A .

A seguir, introduzimos o parâmetro ρ , o qual desempenhará papel importante na discussão subsequente:

$$\rho = \frac{N_1}{MN_2}. \quad (4.1)$$

Chamamos a atenção do leitor para o fato de que a letra grega ρ já foi empregada no Capítulo 3 para denotar a razão N_1/N_2 , no caso de duas subpopulações. No presente caso da metaestrela, o parâmetro ρ , dado por (4.1), tem significado análogo àquele do caso de duas subpopulações, porém é diferente.

Agora, passaremos a estabelecer para os casos Bd e dB, as probabilidades de transição no processo de Moran na ABM entre os estados homogêneos da metaestrela. Para obtê-las, podemos, tendo como base as probabilidades de transição (1.18) e (1.19) do processo de Moran na estrela, repetir um raciocínio análogo ao que foi feito na Seção (3.1) para obter as fórmulas (3.1) e (3.2). Ainda mantendo analogia com a Seção 1.2, vamos denotar por $T_{i,u}$ a probabilidade de transição entre os estados $(B, i) \rightarrow (A, i)$ e por $T_{i,d}$ a transição entre os estados $(A, i) \rightarrow (B, i)$. As probabilidades das transições $(A, i) \rightarrow (A, i+1)$ e $(B, i) \rightarrow (B, i-1)$ serão denotadas respectivamente por $T_{i,+}$ e $T_{i,-}$.

Para exemplificar, vamos deduzir a probabilidade de transição $T_{i,-}$ do estado homogêneo (B, i) para o estado $(B, i-1)$. No caso Bd, a transição $(B, i) \rightarrow (B, i-1)$ ocorre quando sorteamos um migrante do tipo B no centro (probabilidade $N_1/(N_1 + iN_2r + (M-i)N_2)$), este vai para uma ponta do tipo A (probabilidade $(iN_2)/(MN_2)$) e consegue se fixar nessa ponta (probabilidade $\Phi_{wm}^{N_2}(1, 1/r)$). Como estes eventos são todos independentes, $T_{i,-}$ é o produto das três probabilidades mencionadas. Com argumentos análogos, podemos estabelecer para a metaestrela na ABM todas as demais probabilidades de transição entre estados homogêneos, seja no caso Bd ou no dB. Em termos do parâmetro ρ , tais probabilidades de transição são escritas de

forma concisa como:

Caso Bd:

$$\begin{aligned}
T_{i,u} &= \frac{r \frac{i}{M}}{\rho + 1 + \frac{i}{M}(r-1)} \Phi_{wm}^{N_1}(1, r) \\
T_{i,d} &= \frac{1 - \frac{i}{M}}{\rho r + 1 + \frac{i}{M}(r-1)} \Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r) \\
T_{i,-} &= \frac{\rho \frac{i}{M}}{\rho + 1 + \frac{i}{M}(r-1)} \Phi_{wm}^{N_2}(1, 1/r) \\
T_{i,+} &= \frac{\rho r (1 - \frac{i}{M})}{\rho r + 1 + \frac{i}{M}(r-1)} \Phi_{wm}^{N_2}(1, r)
\end{aligned} \tag{4.2}$$

Caso dB:

$$\begin{aligned}
T_{i,u} &= \frac{\rho}{\rho + 1} \frac{r \frac{i}{M}}{1 + \frac{i}{M}(r-1)} \Phi_{wm}^{N_1}(1, r) \\
T_{i,d} &= \frac{\rho}{\rho + 1} \frac{1 - \frac{i}{M}}{1 + \frac{i}{M}(r-1)} \Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r) \\
T_{i,-} &= \frac{\frac{i}{M}}{\rho + 1} \Phi_{wm}^{N_2}(1, 1/r) \\
T_{i,+} &= \frac{1 - \frac{i}{M}}{\rho + 1} \Phi_{wm}^{N_2}(1, r)
\end{aligned} \tag{4.3}$$

Vamos denotar por P_i^A , a probabilidade de fixação do tipo A no processo de Moran na ABM da metaestrela quando o estado inicial da população é (A, i) . Concomitadamente, P_i^B denotará a probabilidade de fixação do tipo A com condições iniciais em (B, i) . É claro que

$$P_0^B = 0 \quad \text{e} \quad P_M^A = 1. \tag{4.4}$$

O sistema geral que determina P_i^A e P_i^B na ABM no processo de Moran na metaestrela para ambas regras de atualização Bd e dB, se escreve como

$$\begin{cases} P_i^B = T_{i,u} P_i^A + T_{i,-} P_{i-1}^B + (1 - T_{i,u} - T_{i,-}) P_i^B \\ P_i^A = T_{i,d} P_i^B + T_{i,+} P_{i+1}^A + (1 - T_{i,d} - T_{i,+}) P_i^A \end{cases}, \tag{4.5}$$

onde na primeira linha i varia de 1 a M e na segunda linha i varia de 0 a $M - 1$. Ou seja, temos $2M$ equações lineares, suplementadas pelas condições de contorno (4.4).

Podemos reescrever de forma mais compacta as equações (4.5) como

$$\begin{cases} P_i^B = \beta_i P_{i-1}^B + (1 - \beta_i) P_i^A \\ P_i^A = \alpha_i P_{i+1}^A + (1 - \alpha_i) P_i^B \end{cases}, \quad (4.6)$$

com

$$\alpha_i = \frac{T_{i,+}}{T_{i,d} + T_{i,+}} \quad (4.7)$$

e

$$\beta_i = \frac{T_{i,-}}{T_{i,u} + T_{i,-}}. \quad (4.8)$$

Como se observa, o sistema de equações (4.6), obtido no regime da ABM na metaestrela, tem a mesma forma que o sistema (1.22) que determina as probabilidades de fixação no grafo estrela e, portanto, neste caso podemos expressar também a solução do sistema (4.6) de modo unificado para os casos Bd e dB. O resultado é

$$P_0^A = \frac{\alpha_0}{1 + \sum_{j=1}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}}, \quad (4.9)$$

$$P_i^A = \frac{1 + \sum_{j=1}^{i-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}}{1 + \sum_{j=1}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}}, \quad i = 1, 2, \dots, M - 1 \quad (4.10)$$

e

$$P_i^B = \frac{\sum_{j=1}^i (1 - \beta_j) \prod_{k=1}^{j-1} \frac{\beta_k}{\alpha_k}}{1 + \sum_{j=1}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}}, \quad i = 1, 2, \dots, M. \quad (4.11)$$

Motivados pelos resultados desenvolvidos no capítulo anterior, abordaremos a seguir o comportamento assintótico das fórmulas obtidas acima para ambos os casos Bd e dB, esboçando uma análise similar à que fizemos na Seção (3.1). Assim como no caso já estudado de duas subpopulações isoladas, no caso da metaestrela, tais fórmulas assintóticas serão estabelecidas considerando que tanto N_1 quanto N_2 tendem ao infinito, mantendo-se fixa

a razão $\rho = \frac{N_1}{MN_2}$. Além disso, tais fórmulas assintóticas serão estabelecidas no regime de seleção forte, conforme a Definição 3.1 mencionada no Capítulo 3.

Iremos também determinar fórmulas assintóticas para a RVFM na metaestrela. Para isso, devemos ter em mente que a probabilidade de fixação média de um mutante do tipo A na metaestrela é, na ABM, dada por

$$\mu = \frac{N_1}{N_1 + MN_2} \Phi_{wm}^{N_1}(1, r) P_0^A + \frac{MN_2}{N_1 + MN_2} \Phi_{wm}^{N_2}(1, r) P_1^B. \quad (4.12)$$

Para explicar o primeiro termo da expressão (4.12), considere, inicialmente, que a subpopulação N_1 no centro e as M subpopulações N_2 tenham apenas indivíduos do tipo B . Suponha que uma mutação do tipo A apareça de maneira uniforme na população. Com probabilidade $\frac{N_1}{N_1 + MN_2}$, essa mutação surge na subpopulação N_1 no centro da metaestrela. O indivíduo do tipo A se fixará na subpopulação N_1 com probabilidade $\Phi_{wm}^{N_1}(1, r)$. Uma vez ocorrida a fixação do tipo A no centro, a configuração da população se torna $(A, 0)$. Daí, na ABM, a fixação do tipo A na população inteira ocorre com probabilidade P_0^A . Um raciocínio análogo vale para explicar o segundo termo da expressão acima.

A RVFM na metaestrela é, na ABM, dada pela fórmula

$$R_{N_1 + MN_2}(r) = \frac{\mu}{\Phi_{wm}^{N_1 + MN_2}(1, r)}, \quad (4.13)$$

onde μ é a expressão definida em (4.12).

Observação 7. Em [44], os autores estudam a RVFM na ABM do processo de Moran na metaestrela Bd , em termos da quantidade $\mu - \Phi_{wm}^{N_1 + MN_2}(1, r)$. Eles consideram, “por simplicidade”, $N_1 = N_2$. Dessa maneira, eles concluem, analisando o gráfico da diferença $\mu - \Phi_{wm}^{N_1 + MN_2}(1, r)$, que na ABM a metaestrela Bd é amplificadora de seleção. Mais adiante, veremos que, na ABM e regime de seleção forte, a metaestrela Bd pode atuar como supressora de seleção.

4.2 Metaestrela: caso Bd

Para começar, vamos explicitar as expressões para α_i e β_i em termos r, N_1, N_2 e M no caso Bd. Substituindo diretamente em (4.7) e (4.8) as expressões correspondentes em (4.2), obtemos, após efetuar as simplificações óbvias

$$\alpha_i = \frac{1}{1 + \rho^{-1} r^{-1} \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, r)}} \quad (4.14)$$

e

$$\beta_i = \frac{1}{1 + \rho^{-1} r \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, 1/r)}} . \quad (4.15)$$

Podemos observar de imediato nas expressões acima que tanto α_i como β_i não dependem de i e, portanto, daqui em diante, vamos omitir o índice i na notação de α_i e β_i . Já neste ponto, cumpre chamar a atenção do leitor para o fato de que no caso Bd, as fórmulas (4.9), (4.10) e (4.11) para o regime neutro, isto é $r = 1$, são bastante simples. Este é o conteúdo do teorema a seguir.

Teorema 4.1. *Na ABM do processo de Moran da metaestrela, regra Bd e $r = 1$, temos que*

$$P_i^A = \frac{i + M\rho^2}{M + M\rho^2} \quad (4.16)$$

e

$$P_i^B = \frac{i}{M + M\rho^2} , \quad (4.17)$$

onde ρ é o parâmetro definido em (4.1) e $i = 0, 1, 2, \dots, M$. Ademais, tem-se que

$$R_{N_1+MN_2}(1) = 1 . \quad (4.18)$$

Prova: De fato, levando em conta (1.12) e fazendo $r = 1$ em (4.14) e (4.15), vê-se facilmente que

$$\alpha = \beta = \frac{N_1^2}{N_1^2 + MN_2^2} = \frac{1}{1 + \frac{\rho^{-2}}{M}} . \quad (4.19)$$

Além disso, visto que neste caso a razão β_i/α_i é igual a 1, se substituirmos (4.19) nas fórmulas (4.9), (4.10) e (4.11), um cálculo imediato, após algumas simplificações, fornece as fórmulas (4.16) e (4.17).

Para calcular a RVFM quando $r = 1$, observe que

$$P_0^A = \frac{N_1^2}{N_1^2 + M^2 N_2^2} \quad \text{e} \quad P_1^B = \frac{M N_1^2}{N_1^2 + M^2 N_2^2}. \quad (4.20)$$

Ademais, recorde por (1.12) que $\Phi_{um}^N(1, 1) = 1/N$. Reunindo estas informações em (4.12) e dividindo o resultado por $\Phi_{um}^{N_1 + M N_2}(1, 1) = 1/(N_1 + M N_2)$, obtemos (4.18). \square

A Figura 4.2 exibe gráficos das probabilidades (4.16) e (4.17) para $M = 25$ e valores de ρ iguais a 0.1 e 1.2. Podemos observar no painel esquerdo da Figura 4.2 que quando a população total das pontas supera muito a população do centro, a diferença entre P_i^A e P_i^B é pequena, e o gráfico se parece com o das probabilidades de fixação na estrela Bd. Por outro lado, vemos no painel esquerdo da Figura 4.2 que quando a população do centro fica comparável à população total das pontas, a diferença entre P_i^A e P_i^B fica grande e o gráfico se assemelha ao das probabilidades de fixação na estrela dB. A diferença entre um caso e outro parece ser a maior ou menor facilidade de mudar a configuração do centro.

Quando $r \neq 1$, a razão β_i/α_i que aparece no produtório das fórmulas (4.9), (4.10) e (4.11) também não depende de i , os somatórios envolvendo α_i e β_i que aparecem nestas fórmulas se reduzem a somas de uma progressão geométrica de razão β/α . Então, levando em conta esse fato, um cálculo imediato mostra que as fórmulas (4.9), (4.10) e (4.11) para $r \neq 1$ são as seguintes:

$$P_i^A = \frac{1 - \beta - (1 - \alpha)\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^i}{1 - \beta - (1 - \alpha)\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^M}, \quad i = 0, 1, 2, \dots, M - 1 \quad (4.21)$$

e

$$P_i^B = \frac{(1 - \beta)\left(1 - \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^i\right)}{1 - \beta - (1 - \alpha)\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^M}, \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (4.22)$$

onde β/α é a razão de (4.15) por (4.14). Podemos visualizar na Figura 4.3,

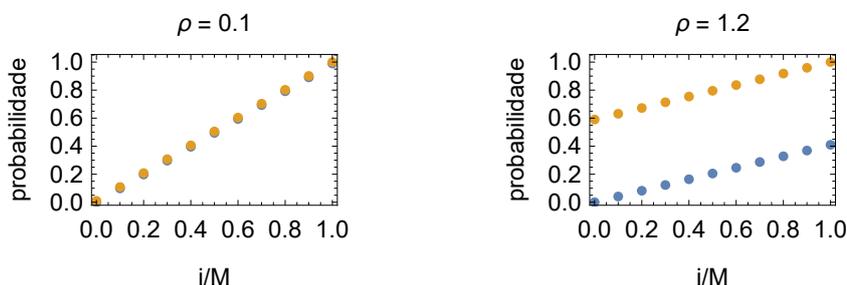


Figura 4.2: Em ambos os painéis, para $r = 1$ e regra Bd, os pontos azuis representam a probabilidade P_i^B e os pontos laranja representam a probabilidade P_i^A . Painel esquerdo: gráfico da probabilidade de fixação com $\rho = 0.1$ dado por $N_1 = 15$, $N_2 = 15$ e $M = 10$. Nota-se neste caso que a diferença entre estas probabilidades é praticamente invisível. Painel direito: o análogo com $\rho = 1.2$ dado por $N_1 = 180$, $N_2 = 15$ e $M = 10$. Neste caso, observamos que para i fixo, a probabilidade de fixação do tipo A com a subpopulação do centro sendo do tipo A é bem maior que com subpopulação do centro sendo do tipo B

o gráfico das probabilidades P_i^A e P_i^B para alguns valores de ρ com r fixo.

Na exposição da Seção 3.1, obtemos fórmulas assintóticas para as probabilidades de fixação na ABM do processo de Moran em duas subpopulações isoladas sob o regime de seleção forte. Na continuação desta seção, queremos fazer um estudo similar no caso da metaestrela. Para tanto, consideremos novamente $N_s = \min\{N_1, N_2\}$ e

$$\varepsilon = \begin{cases} r^{N_s}, & \text{se } r < 1 \\ r^{-N_s}, & \text{se } r > 1 \end{cases}. \quad (4.23)$$

Recordemos (conforme a Definição 3.1) que seleção forte significa $r \neq 1$ e ε muito menor que 1. Assim, considerando $N_s \rightarrow \infty$, e mantendo-se a razão $\rho = \frac{N_1}{MN_2}$ fixa, as expressões assintóticas para P_i^A e P_i^B são obtidas como séries de potências de ε . O teorema a seguir fornece essas fórmulas assintóticas para a regra Bd. Mais adiante, neste capítulo, obteremos também fórmulas assintóticas para o caso dB no sentido acima.

Teorema 4.2. *Na regra Bd e regime de seleção forte, as probabilidades de fixação das configurações homogêneas na ABM do processo de Moran na metaestrela possuem as seguintes expressões assintóticas:*

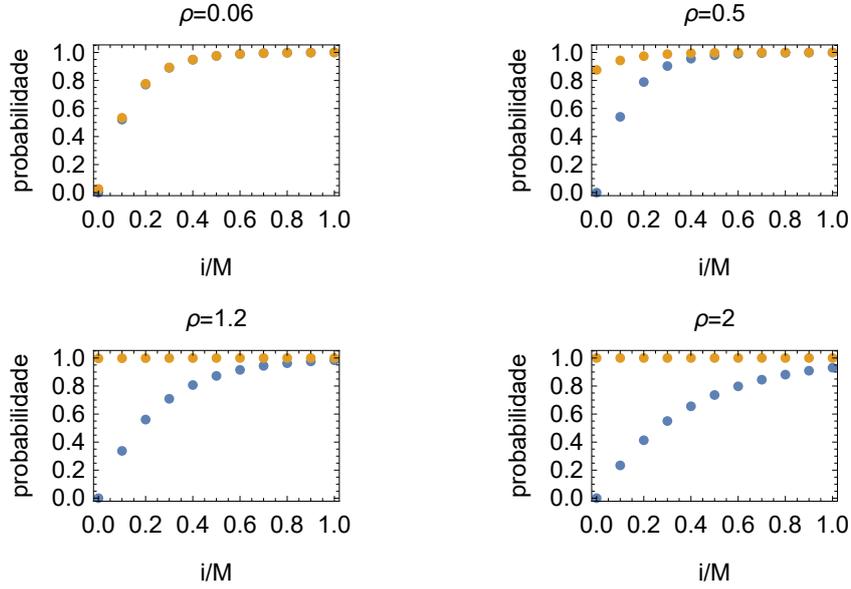


Figura 4.3: Gráficos da probabilidade de fixação na ABM da metaestrela Bd para $r = 1.1$ e diferentes valores de ρ . Em todos os painéis, os pontos azuis representam a probabilidade P_i^B e os pontos laranja representam a probabilidade P_i^A . Os valores de ρ são dados por $M = 10$ e $N_2 = 5$ fixos com N_1 variando dentre 3, 25, 60 e 100.

1) Se $r < 1$, então

$$P_i^A = \rho^{M-i} r^{(M-i)N_2} \left[1 + (M-i)(1-\rho)(\rho^{-1} r^{N_1} + r^{N_2}) \right] + O(r^{(M-i+2)N_s}), \quad i = 0, 1, 2, \dots, M-1;$$

$$P_i^B = \rho^{M-i-1} r^{(M-i)N_2} \left[r^{N_1} + (M-i-1)(1-\rho)(r^{N_1+N_2} + \rho^{-1} r^{2N_1}) \right] + O(r^{(M-i+3)N_s}), \quad i = 1, 2, \dots, M. \quad (4.24)$$

2) Se $r > 1$, então

$$P_i^A = 1 - \rho^{i-1} r^{-N_1-iN_2} + O(r^{-(2+i)N_s}), \quad i = 0, 1, 2, \dots, M-1;$$

$$P_i^B = 1 - \rho^i r^{-iN_2} + O(r^{-(1+i)N_s}), \quad i = 1, 2, \dots, M. \quad (4.25)$$

Prova: Consideremos o caso $r < 1$; a demonstração do caso $r > 1$ é totalmente análoga. Podemos escrever termos que aparecem nos denominadores das equações (4.14) e (4.15), respectivamente, como

$$\rho^{-1} r^{-1} \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, r)} = \rho^{-1} r^{-N_2} \frac{1 - r^{N_2}}{1 - r^{N_1}} \quad (4.26)$$

e

$$\rho^{-1} r \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, 1/r)} = \rho^{-1} r^{N_1} \frac{1 - r^{N_2}}{1 - r^{N_1}}. \quad (4.27)$$

Se $r < 1$, para N_1 e N_2 suficientemente grandes, obtemos de (4.26) e (4.27) que

$$\rho^{-1} r^{-1} \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, r)} = \rho^{-1} (r^{-N_2} - 1 + r^{N_1 - N_2}) + O(r^{N_s})$$

e

$$\rho^{-1} r \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, 1/r)} = \rho^{-1} (r^{N_1} + r^{2N_1} - r^{N_1 + N_2}) + O(r^{3N_s}).$$

A partir daí, um cálculo fácil fornece

$$\alpha = \rho r^{N_2} \left[1 + (1 - \rho) r^{N_2} - r^{N_1} \right] + O(r^{3N_s}), \quad (4.28)$$

$$\beta = 1 - \rho^{-1} \left[r^{N_1} + (1 - \rho^{-1}) r^{2N_1} - r^{N_1 + N_2} \right] + O(r^{3N_s}) \quad (4.29)$$

e

$$\frac{\beta}{\alpha} = \rho^{-1} r^{-N_2} \left[1 + (1 - \rho^{-1})(r^{N_1} + \rho r^{N_2}) \right] + O(r^{N_s}). \quad (4.30)$$

A seguir, vamos determinar uma expressão assintótica para o denominador das probabilidades (4.21) e (4.22). A fim de lidarmos com a potenciação de β/α , vamos reescrever a expressão (4.30) como

$$\frac{\beta}{\alpha} = r^{-N_2} \rho^{-1} \left[1 + (1 - \rho^{-1})(r^{N_1} + \rho r^{N_2}) + O(r^{2N_s}) \right]. \quad (4.31)$$

Prosseguimos, agora, escrevendo $(\beta/\alpha)^i$ como uma exponencial do logaritmo.

Utilizando (4.31) e que $\log(1+x) = x + O(x^2)$, encontramos que

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^i &= e^{i \log(\beta/\alpha)} \\
&= r^{-iN_2} \rho^{-i} \exp \left[i \log \left\{ 1 + (1 - \rho^{-1})(r^{N_1} + \rho r^{N_2}) + O(r^{2N_s}) \right\} \right] \\
&= r^{-iN_2} \rho^{-i} \exp \left[i(1 - \rho^{-1})(r^{N_1} + \rho r^{N_2}) + O(r^{2N_s}) \right] \\
&= r^{-iN_2} \rho^{-i} \left[1 + i(1 - \rho^{-1})(r^{N_1} + \rho r^{N_2}) + O(r^{2N_s}) \right],
\end{aligned} \tag{4.32}$$

onde na última passagem usamos que $e^x = 1+x+O(x^2)$. Em seguida, usando (4.28), (4.29) e (4.32) constatamos que o numerador de P_i^A tem a seguinte expressão assintótica

$$\begin{aligned}
1 - \beta - (1 - \alpha) \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^i &= -\rho^{-i} r^{-iN_2} \left[1 - (i(1 - \rho) + \rho)r^{N_2} + \right. \\
&\quad \left. + i(1 - \rho^{-1})r^{N_1} \right] + O(r^{(-i+2)N_s}).
\end{aligned} \tag{4.33}$$

Por outro lado, a expressão assintótica para o denominador de P_i^A é obtida de (4.33) simplesmente tomando $i = M$. Finalmente, substituindo tais expressões em (4.21), obtemos, após algumas simplificações, a fórmula para P_i^A em (4.24).

Consideremos, agora, a fórmula para P_i^B . Usando (4.29) e (4.32) constatamos que o numerador de P_i^B possui a seguinte expressão assintótica:

$$\begin{aligned}
(1 - \beta) \left[1 - \left(\frac{\beta}{\alpha}\right)^i \right] &= \rho^{-i-1} r^{-iN_2} \left[-r^{N_1} + (1 + i(1 - \rho))r^{N_1+N_2} + \right. \\
&\quad \left. + (1 + i)(1 - \rho)\rho^{-1} r^{2N_1} \right] + O(r^{(-i+3)N_s}).
\end{aligned} \tag{4.34}$$

Levando a expressão acima em (4.22), obtemos, após um cálculo direto, a fórmula assintótica para P_i^B em (4.24).

De forma totalmente análoga ao caso $r < 1$, podemos demonstrar o caso

$r > 1$. □

Como evidenciado nas fórmulas (4.24) e (4.25), se N_1 e N_2 são suficientemente grandes, para todo i , as probabilidades P_i^A e P_i^B são próximas de zero quando $r < 1$, e próximas de um quando $r > 1$. A Figura 4.4 exibe gráficos da razão entre o valor numérico da probabilidade de fixação dada pelas fórmulas exatas (4.21) e (4.22) e a aproximação assintótica fornecida pelo Teorema 4.2.

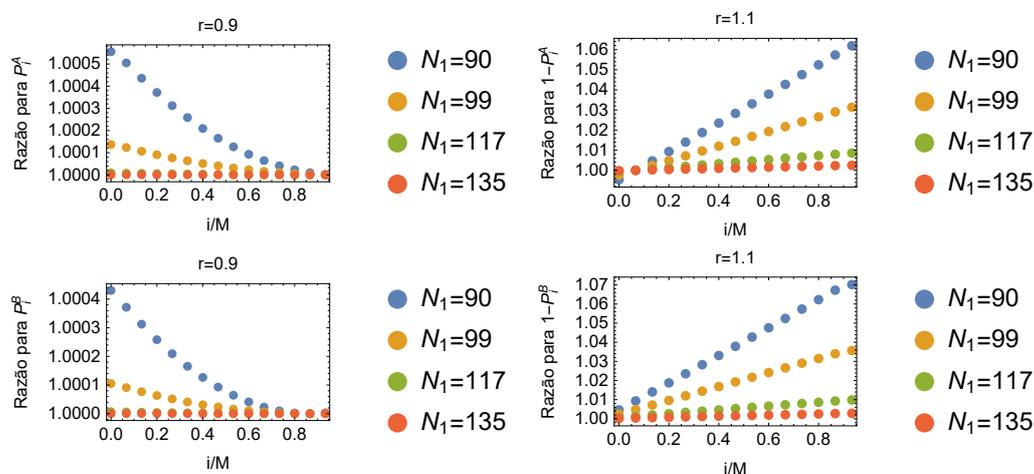


Figura 4.4: Gráficos da razão entre a probabilidade de fixação dada pelas fórmulas exatas (4.21) e (4.22) e a aproximação assintótica dada pelas expressões (4.24) e (4.25). Painéis superiores: gráficos da razão para P_i^A com $r = 0.9$ e para $1 - P_i^A$ com $r = 1.1$. Fixamos, aqui, $\rho = 0.1$ e $M = 15$. Perceba nestes gráficos que, mantendo-se fixo ρ e tomando valores crescentes de N_1 e N_2 , quanto maiores forem os valores de N_1 e N_2 , tanto melhor será a aproximação assintótica. Painéis inferiores: o análogo para P_i^B e $1 - P_i^B$.

Nosso próximo resultado é um corolário do Teorema 4.2 e estabelece expressões assintóticas para $R_{N_1+MN_2}(r)$ com $r \neq 1$ na regra Bd.

Corolário 4.2.1. *Na ABM do processo de Moran na metaestrela, regra Bd e $r \neq 1$, valem as seguintes fórmulas assintóticas no regime de seleção forte:*

1) Se $r < 1$, então

$$R_{N_1+MN_2}(r) = \rho^{M-2} \left[\rho^2 - \rho + 1 - \frac{\rho-1}{\rho+1} \left\{ [(M-1)\rho^2 + (M-2)\rho^{-1}] r^{N_1} + [M(\rho^3+1) - 1] r^{N_2} \right\} \right] + O(r^{2N_s}). \quad (4.35)$$

2) Se $r > 1$, então

$$R_{N_1+MN_2}(r) = 1 + \frac{\rho-1}{\rho+1} \left[r^{-N_1} - r^{-N_2} + \frac{\rho-1}{\rho} r^{-2N_1} - \frac{\rho^3+2\rho-1}{\rho-1} r^{-2N_2} \right] + O(r^{-3N_s}). \quad (4.36)$$

Prova: A demonstração se segue pela aplicação dos mesmos procedimentos empregados na prova do Teorema 4.2 à fórmula (4.13). \square

Observação 8. No caso particular em que $M = 1$, o leitor pode verificar a partir das fórmulas (4.35) e (4.36) que a expressão assintótica para $R_{N_1+MN_2}(r)$ na metaestrela Bd concorda com a quantidade análoga que obtivemos no caso Bd de duas populações isoladas geograficamente, veja o Teorema 3.3 e compare o resultado para $M = 1$ com (3.29).

De posse do corolário acima, podemos finalmente nos voltar à discussão sobre a RVFM na ABM do processo de Moran na metaestrela Bd. Para tanto, consideremos $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ a aproximação para $R_{N_1+MN_2}(r)$ dada por:

$$R_{N_1+MN_2}^{as}(r) = \begin{cases} \rho^{M-2}(\rho^2 - \rho + 1), & \text{se } r < 1 \\ 1 + \frac{\rho-1}{\rho+1}(r^{-N_1} - r^{-N_2}), & \text{se } r > 1 \end{cases}. \quad (4.37)$$

Ou seja, $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ nada mais é que, para $r < 1$, o termo dominante de (4.35) e, para $r > 1$, o termo dominante e o primeiro termo além dele em (4.36). Nesta aproximação, notamos que, para $r < 1$, $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ é independente de r , enquanto que, para $r > 1$ é quase independente de r .

A Figura 4.5 exibe as curvas de nível da aproximação assintótica $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ dada por (4.37) e as curvas de nível obtidas numericamente através da fórmula exata. Pode-se inferir da figura que a aproximação assintótica concorda bem com o seu valor exato. Sendo assim, vamos, agora, analisar em termos de $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$, o comportamento da RVFM na ABM do processo de Moran na metaestrela Bd.

Primeiramente, notamos em (4.37) que, para $r < 1$, tem-se $R_{N_1+MN_2}^{as}(r) = 1$ se, e somente se, $\rho = 1$. Por outro lado, para $r > 1$, tem-se $R_{N_1+MN_2}^{as}(r) = 1$ se $\rho = 1$ ou $N_1 = N_2$. Consideremos, pois, dois casos separadamente:

1. Caso $N_1 \neq N_2$. Para $r < 1$, uma análise simples nos permite verificar que, na condição em que $M \geq 2$, $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ é menor que 1 se, $\rho < 1$, e maior que 1 se, $\rho > 1$. Ademais, para $r > 1$, tem-se $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ menor que 1 se, $\rho > 1$ ou $\rho < 1$ e $N_1 < N_2$, e maior que 1 se, $\rho < 1$ e $N_1 > N_2$. Podemos dizer que, quando $\rho > 1$, a metaestrela Bd na ABM é supressora de seleção. Por outro lado, quando $\rho < 1$, observamos dois comportamentos diferentes para a RVFM, dependendo de N_1 ser maior ou menor que N_2 em $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$. Se $\rho < 1$ e $N_1 > N_2$, a metaestrela Bd é, na ABM, amplificadora de seleção. Agora, se $\rho < 1$ e $N_1 < N_2$, temos na ABM que a metaestrela Bd é uma redutora de seleção.
2. Caso $N_1 = N_2$. Nesse caso, necessariamente $\rho < 1$. Tomando novamente a aproximação dada por (4.37), verificamos que $R_{N_1+MN_2}^{as}(r) < 1$, para $r < 1$, porém, para $r > 1$, ficamos apenas com $R_{N_1+MN_2}^{as}(r) = 1$, já que os termos $O(r^{-N_s})$ se anulam. Isso quer dizer que, quando $N_1 = N_2$, precisamos reter também os termos $O(r^{-2N_s})$ em (4.36) para compor a definição de $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ no caso $r > 1$. Suponhamos, então, $N_1 = N_2$, e denotemos por $R_{N_1+MN_2}^{as*}(r)$ a nova aproximação. Procedendo como dissemos acima, o resultado é, após efetuar as simplificações, o seguinte

$$R_{N_1+MN_2}^{as*}(r) = \begin{cases} \rho^{M-2}(\rho^2 - \rho + 1), & \text{se } r < 1 \\ 1 - (\rho^2 - \rho - \rho^{-1} + 2)r^{-2N_1}, & \text{se } r > 1 \end{cases} \quad (4.38)$$

Já sabemos, no caso $r < 1$, que $R_{N_1+MN_2}^{as*}(r) < 1$, desde que $M \geq 2$. Para $r > 1$ e $N_1 = N_2$, o leitor pode verificar que, como $\rho = 1/M < 1/2$,

então $R_{N_1+MN_2}^{as*}(r) > 1$. Portanto, quando $N_1 = N_2$, a metaestrela Bd é, na ABM, amplificadora de seleção.

Conforme dissemos anteriormente, em [44], Yagoobi e Traulsen chegam à conclusão, baseando-se em gráficos da diferença numérica entre μ e $\Phi_{wm}^{N_1+MN_2}(1, r)$ para valores pequenos de $N_1 = N_2$, que a metaestrela Bd é amplificadora de seleção na ABM. Observe que se $N_1 = N_2$, o resultado obtido por eles é confirmado pelo nosso. Também se $\rho < 1$ e $N_1 > N_2$ mostramos que a metaestrela Bd é amplificadora. Porém, o resultado que obtivemos mostra que a metaestrela Bd é supressora se $\rho > 1$ e redutora se $\rho < 1$ e $N_1 < N_2$. Nosso resultado é mais geral do que aquele em [44].

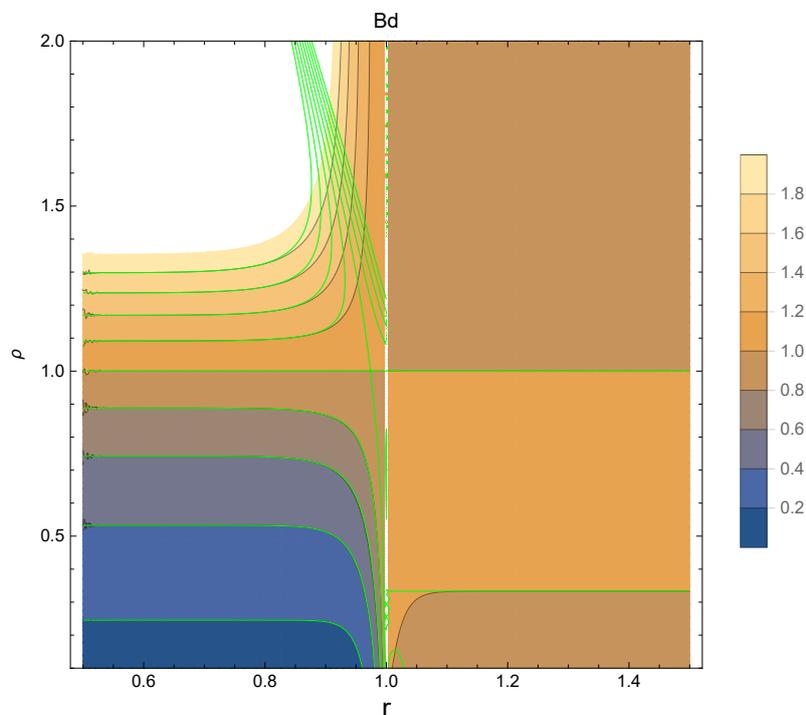


Figura 4.5: Gráfico das curvas de nível da função $R_{N_1+MN_2}(r)$ na regra Bd com $N_1 = 50$ e $M = 3$ fixos. Para efeito de comparação, sobrepomos em verde as curvas de nível produzidas a partir da expressão assintótica $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ dada por (4.37).

Observação 9. Para $r \neq 1$ e $\rho = 1$, é fácil ver, a partir das expressões (4.14) e (4.15), que

$$\alpha = r^{N_2} \frac{1 - r^{MN_2}}{1 - r^{(1+M)N_2}}, \quad (4.39)$$

$$\beta = \frac{1 - r^{MN_2}}{1 - r^{(1+M)N_2}} \quad (4.40)$$

e

$$\frac{\beta}{\alpha} = r^{-N_2} . \quad (4.41)$$

Substituindo as expressões acima em (4.21) e (4.22), obtemos, após algumas simplificações, o seguinte:

$$P_i^A = \frac{1 - r^{-(i+M)N_2}}{1 - r^{-2MN_2}} \quad (4.42)$$

e

$$P_i^B = \frac{1 - r^{-iN_2}}{1 - r^{-2MN_2}} , \quad (4.43)$$

para $i = 0, 1, 2, \dots, M$. Ou seja, quando $N_1 = MN_2$, tem-se que, na ABM do processo de Moran na metaestrela Bd, a probabilidade de fixação do tipo A com condições iniciais em estados homogêneos é dada pela probabilidade de fixação no grafo completo com $2MN_2$ vértices. Ademais, um cálculo direto revela neste caso que

$$R_{N_1+MN_2}(r) = 1 . \quad (4.44)$$

4.3 Metaestrela: caso dB

No caso dB, substituindo diretamente em (4.7) e (4.8) as expressões correspondentes em (4.3), obtemos, após algumas simplificações, o seguinte

$$\alpha_i = \frac{1}{1 + \frac{N_1}{N_2} \frac{1}{ir+M-i} \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, r)}} \quad (4.45)$$

e

$$\beta_i = \frac{1}{1 + \frac{N_1}{N_2} \frac{r}{ir+M-i} \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, 1/r)}} . \quad (4.46)$$

Note-se que no caso dB, α_i e β_i dependem de i . Entretanto, quando $r = 1$, o somatório e produtório envolvendo α_i e β_i no numerador e denominador das fórmulas (4.9), (4.10) (4.11) são bastante simplificados. O teorema a seguir nos dá as fórmulas da probabilidade de fixação do tipo A quando $r = 1$ no

caso dB na ABM da metaestrela.

Teorema 4.3. *Na ABM do processo de Moran da metaestrela, regra dB e $r = 1$, temos que*

$$P_i^A = \frac{i + M}{2M} \quad (4.47)$$

e

$$P_i^B = \frac{i}{2M}, \quad (4.48)$$

com $i = 0, 1, 2, \dots, M$. Além disso, tem-se que

$$R_{N_1+MN_2}(1) = 1. \quad (4.49)$$

Prova: De fato, fazendo $r = 1$ em (4.45) e (4.46) e usando (1.12) é fácil ver que

$$\alpha_i = \beta_i = \frac{M}{M + 1}. \quad (4.50)$$

Logo, o somatório e produtório envolvendo α_i e β_i no numerador e denominador das fórmulas P_i^A e P_i^B são facilmente calculados. Para calcular a RVFM, basta verificar que para $r = 1$, tem-se $\mu = \frac{1}{N_1+MN_2} = \Phi_{wm}^{N_1+MN_2}(1, 1)$, donde segue que $R_{N_1+MN_2}(1) = 1$. \square

Consideremos, agora o caso $r \neq 1$. Podemos visualizar na Figura 4.6, o gráfico das probabilidades P_i^A e P_i^B na ABM com condições iniciais nos estados homogêneos da metaestrela na regra dB para $r = 1.1$ fixo e alguns valores de ρ . Chamamos a atenção do leitor para o fato de que se $r > 1$ e N_1 e N_2 são grandes o suficiente, os fatores $\Phi_{wm}^{N_1}(1, r)$ e $\Phi_{wm}^{N_2}(1, r)$ são ambos aproximadamente iguais a $1 - 1/r$ e não diminuem muito as probabilidades $T_{i,u}$ e $T_{i,+}$. Por outro lado, os fatores $\Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r)$ e $\Phi_{wm}^{N_2}(1, 1/r)$ são exponencialmente pequenos em N_1 e N_2 e diminuem muito as probabilidades $T_{i,d}$ e $T_{i,-}$. Desta forma, ao contrário do que ocorre no processo de Moran na estrela dB, se $r > 1$ e no regime de seleção forte, as probabilidades de fixação de A ficam muito próximas de 1 para todas as configurações homogêneas em que a probabilidade de fixação de A não é nula. Um argumento análogo ao acima explica que se $r < 1$, as probabilidades de fixação de A ficam próximas de 0.

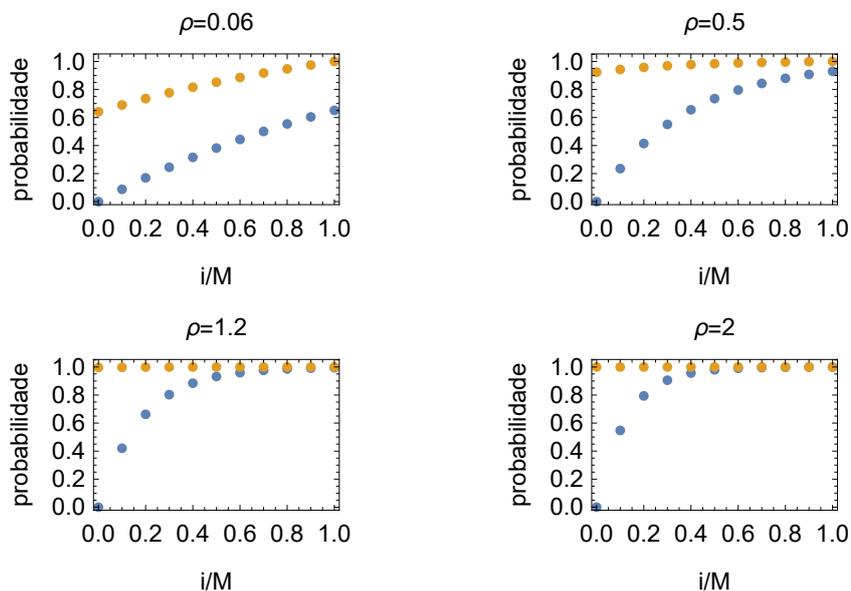


Figura 4.6: Gráficos da probabilidade de fixação na ABM da metaestrela dB para $r = 1.1$ e diferentes valores de ρ . Em todos os painéis, os pontos azuis representam a probabilidade P_i^B e os pontos laranja representam a probabilidade P_i^A . Os valores de ρ são dados por $M = 10$ e $N_2 = 5$ fixos com N_1 variando dentre 3, 25, 60 e 100.

Prosseguindo com o caso $r \neq 1$, o teorema a seguir fornece fórmulas assintóticas para as probabilidades (4.9), (4.10) e (4.11) no regime de seleção forte. Para o que segue, denotaremos por $p_j(r)$, o produto

$$p_j(r) = \prod_{k=1}^j \left(1 + \frac{r-1}{M} k \right). \quad (4.51)$$

É imediato verificar que, para $r > 0$, tem-se $p_j(r) > 0$, desde que $j < M$.

Teorema 4.4. *Na regra dB e regime de seleção forte, as probabilidades de fixação das configurações homogêneas na ABM do processo de Moran na metaestrela possuem as seguintes expressões assintóticas:*

1) Se $r < 1$, então

$$P_i^A = \frac{p_{M-1}(r)}{p_{i-1}(r)} (\rho r)^{-M+i} r^{(M-i)N_2} + O(r^{[M-(i-1)]N_s}),$$

$$i = 0, 1, 2, \dots, M-1;$$
(4.52)

$$P_i^B = \frac{p_{M-1}(r)}{p_i(r)} (\rho r)^{-M+i} \rho r^{N_1+(M-i)N_2} + O(r^{[M-(i-1)]N_s}),$$

$$i = 1, 2, \dots, M.$$

2) Se $r > 1$, então

$$P_i^A = 1 - p_{i-1}(r) \rho^{-i+1} r r^{-N_1-iN_2} + O(r^{-(i+2)N_s}),$$

$$i = 0, 1, 2, \dots, M-1;$$
(4.53)

$$P_i^B = 1 - p_i(r) \rho^{-i} r^{-iN_2} + O(r^{-(i+1)N_s}), \quad i = 1, 2, \dots, M.$$

Prova: Dividiremos a demonstração em duas partes. Começaremos com o caso $r < 1$, analisando, em seguida, o caso $r > 1$.

Caso $r < 1$: Primeiro, precisamos determinar uma expressão assintótica para $1 - \alpha_i$, $1 - \beta_i$ e β_i/α_i , conforme 4.45 e 4.46. Para nos auxiliar, considere as funções f_1 e f_2 dadas por

$$f_1 = \frac{N_1}{N_2} \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, 1/r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, r)} \quad \text{e} \quad f_2 = \frac{N_1 r}{N_2} \frac{\Phi_{wm}^{N_1}(1, r)}{\Phi_{wm}^{N_2}(1, 1/r)}.$$

Se $r < 1$, para N_1 e N_2 suficientemente grandes, temos que

$$f_1 = \frac{N_1 r}{N_2} (r^{-N_2} + r^{N_1-N_2} - 1) + O(r^{N_s})$$

e

$$f_2 = \frac{N_1}{N_2} (r^{N_1} + r^{2N_1} - r^{N_1+N_2}) + O(r^{3N_s}).$$

Assim, pela expansão assintótica das funções f_1 e f_2 , obtemos diretamente

de 4.45 e 4.46 que

$$\begin{aligned}
 1 - \alpha_i &= 1 - \frac{1}{1 + \frac{f_1}{ir+M-i}} = 1 - (\rho r)^{-1} \left(1 + \frac{r-1}{M} i\right) \left\{ r^{N_2} - r^{N_1+N_2} + \right. \\
 &\quad \left. + r^{2N_2} \left[1 - (\rho r)^{-1} \left(1 + \frac{r-1}{M} i\right) \right] \right\} + \\
 &\quad + O(r^{3N_s})
 \end{aligned} \tag{4.54}$$

$$\begin{aligned}
 1 - \beta_i &= 1 - \frac{1}{1 + \frac{f_2}{ir+M-i}} = \rho \left(1 + \frac{r-1}{M} i\right)^{-1} \left\{ r^{N_1} - r^{N_1+N_2} + \right. \\
 &\quad \left. + r^{2N_1} \left[1 - \rho \left(1 + \frac{r-1}{M} i\right)^{-1} \right] \right\} + \\
 &\quad + O(r^{3N_s})
 \end{aligned} \tag{4.55}$$

e

$$\begin{aligned}
 \frac{\beta_i}{\alpha_i} &= 1 - \rho r \left(1 + \frac{r-1}{M} i\right)^{-1} \left\{ 1 - r^{-N_2} - \right. \\
 &\quad \left. - r^{N_1-N_2} \left[1 - \rho \left(1 + \frac{r-1}{M} i\right)^{-1} \right] \right\} + O(r^{N_s})
 \end{aligned} \tag{4.56}$$

Agora, de posse da expressão (4.56), vamos determinar uma expansão para $\prod_{k=1}^j \beta_k/\alpha_k$. Para tanto, vamos escrever esse produtório da seguinte forma:

$$\prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k} = \prod_{k=1}^j \left[\rho r \left(1 + \frac{r-1}{M} k\right)^{-1} r^{-N_2} + \lambda_k \right] \tag{4.57}$$

onde

$$\begin{aligned}
 \lambda_k &= 1 - \rho r \left(1 + \frac{r-1}{M} k\right)^{-1} \left\{ 1 - \right. \\
 &\quad \left. - r^{N_1-N_2} \left[1 - \rho \left(1 + \frac{r-1}{M} k\right)^{-1} \right] \right\} + O(r^{N_s}).
 \end{aligned}$$

Tal maneira de escrever se justifica pelo fato de que λ_k é assintoticamente muito menor que o primeiro termo em (4.57).

Expandindo o lado direito do produtório (4.57) e mantendo explicitamente somente os termos dominantes $O(r^{-jN_2})$ e subdominantes $O(r^{-(j-1)N_2})$, ficamos com

$$\prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k} = \frac{1}{p_j(r)} (\rho r)^j r^{-jN_2} + \frac{1}{p_{j-1}(r)} (\rho r)^{j-1} r^{-(j-1)N_2} \left[\sum_{k=1}^j \left(1 + \frac{r-1}{M} k \right) \lambda_k \right] + O(r^{-(j-2)N_2}). \quad (4.58)$$

Agora, levando em conta (4.54) e (4.58), repare que a parcela de maior contribuição no somatório $\sum_{j=1}^{M-1} (1-\alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}$ é aquela em que $j = M-1$. Assim sendo, temos que

$$1 + \sum_{j=1}^{M-1} (1-\alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k} = 1 + \frac{1}{p_{M-1}(r)} (\rho r)^{M-1} r^{-(M-1)N_2} + O(r^{-(M-2)N_2}). \quad (4.59)$$

Utilizando a equação (4.59) acima e que

$$\alpha_0 = (\rho r)^{-1} r^{N_2} + O(r^{2N_2})$$

encontramos a expressão para P_0^A em (4.52).

Da mesma forma, usando novamente (4.54) e (4.58) observamos em (4.10) que a parcela de maior contribuição no numerador ocorre quando $j = i-1$. Analogamente, em (4.11), o mesmo ocorre quando $j = i$. Sob essas constatações, basta usar a equação (4.59) para obter a expressão para P_i^A e P_i^B em (4.52).

Caso $r > 1$: Se N_1 e N_2 são suficientemente grandes, cálculos análogos aos

que levaram a (4.54), (4.55) e (4.56) fornecem

$$1 - \alpha_i = \rho r \left(1 + \frac{r-1}{M} i\right)^{-1} \left\{ r^{-N_1} - r^{-N_1-N_2} + \left[1 - \rho r \left(1 + \frac{r-1}{M} i\right)^{-1}\right] r^{-2N_1} \right\} + O(r^{-3N_s}), \quad (4.60)$$

$$1 - \beta_i = 1 - \rho^{-1} \left(1 + \frac{r-1}{M} i\right) \left\{ r^{-N_2} - r^{-N_1-N_2} + \left[1 - \rho^{-1} \left(1 + \frac{r-1}{M} i\right)\right] r^{-2N_2} \right\} + O(r^{-3N_s}) \quad (4.61)$$

e

$$\frac{\beta_i}{\alpha_i} = \rho^{-1} \left(1 + \frac{r-1}{M} i\right) r^{-N_2} + \left[r - \rho^{-1} \left(1 + \frac{r-1}{M} i\right) \right] r^{-N_1-N_2} + \rho^{-1} \left(1 + \frac{r-1}{M} i\right) \left[1 - \rho^{-1} \left(1 + \frac{r-1}{M} i\right)\right] r^{-2N_2} + O(r^{-3N_s}). \quad (4.62)$$

Começamos estimando uma expressão assintótica para o denominador das fórmulas (4.9), (4.10) e (4.11). Levando em conta (4.60) e (4.62), não é difícil ver que a parcela de maior contribuição no somatório $\sum_{j=1}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}$ é aquela em que $j = 1$. Assim, temos que

$$\begin{aligned} 1 + \sum_{j=1}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k} &= 1 + (1 - \alpha_1) \frac{\beta_1}{\alpha_1} + \sum_{j=2}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k} \\ &= 1 + r r^{-N_1-N_2} + O(r^{-3N_s}). \end{aligned} \quad (4.63)$$

Continuando, vamos agora deduzir uma fórmula assintótica para P_0^A . Da expressão (4.60), obtemos que

$$\alpha_0 = 1 - \rho r r^{-N_1} + O(r^{-2N_s}). \quad (4.64)$$

Substituindo (4.63) e (4.64) na expressão (4.9), segue que

$$P_0^A = 1 - \rho r r^{-N_1} + O(r^{-2N_s}).$$

Vejam agora como obter a expressão assintótica para P_i^A com $i = 1, 2, \dots, M-$

1. Para isso, observamos inicialmente que,

$$\begin{aligned}
P_i^A &= \frac{1 + \sum_{j=1}^{i-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}}{1 + \sum_{j=1}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}} \\
&= \frac{1 + \sum_{j=1}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k} - \sum_{j=i}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}}{1 + \sum_{j=1}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}} \\
&= 1 - \frac{\sum_{j=i}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}}{1 + \sum_{j=1}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}}.
\end{aligned} \tag{4.65}$$

Para estimar o produtório $\prod_{j=1}^i \frac{\beta_j}{\alpha_j}$, vamos seguir a mesma ideia empregada anteriormente e escrevê-lo na forma:

$$\prod_{j=1}^i \frac{\beta_j}{\alpha_j} = \prod_{j=1}^i \left[\rho^{-1} \left(1 + \frac{r-1}{M} j \right) r^{-N_2} + \lambda_j \right] \tag{4.66}$$

onde

$$\begin{aligned}
\lambda_j &= r r^{-N_1 - N_2} - \frac{1}{\rho} \left(1 + \frac{r-1}{M} j \right) \left\{ r^{-N_1 - N_2} - \right. \\
&\quad \left. - \left[1 - \frac{1}{\rho} \left(1 + \frac{r-1}{M} j \right) \right] r^{-2N_2} \right\} + O(r^{-3N_s}).
\end{aligned} \tag{4.67}$$

Expandindo o lado direito do produtório (4.66) e mantendo explicitamente somente os termos $O(r^{-iN_2})$, ficamos com

$$\prod_{j=1}^i \frac{\beta_j}{\alpha_j} = p_i(r) \rho^{-i} r^{-iN_2} + O(r^{-(i+1)N_s}). \tag{4.68}$$

Isto posto, note que, levando em conta (4.60) e (4.66), a parcela de maior contribuição no somatório no numerador do segundo membro da última igualdade na fórmula (4.65), ocorre quando $j = i$:

$$\sum_{j=i}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k} = p_{i-1}(r) \rho^{-i+1} r r^{-N_1 - iN_2} + O(r^{-(i+2)N_s}). \tag{4.69}$$

Portanto, um cálculo imediato a partir da fórmula (4.65), garante que

$$P_i^A = 1 - p_{i-1}(r) \rho^{-i+1} r r^{-N_1-iN_2} + O(r^{-(i+2)N_s}), \quad (4.70)$$

com $i = 1, 2, 3, \dots, M-1$. Para obter a expressão assintótica de P_i^B precisaremos da seguinte equação auxiliar

$$d_i^{AB} = P_i^A - P_i^B.$$

O mesmo raciocínio que nos levou à dedução da expressão (1.25), nos permite obter também que

$$d_i^{AB} = \prod_{j=1}^i \frac{\beta_j}{\alpha_{j-1}} P_0^A.$$

Agora, observe que

$$\begin{aligned} P_i^B &= P_i^A - d_i^{AB} \\ &= P_i^A - \prod_{j=1}^i \frac{\beta_j}{\alpha_{j-1}} P_0^A \\ &= P_i^A - \frac{\alpha_i}{\alpha_0} \prod_{j=1}^i \frac{\beta_j}{\alpha_j} P_0^A \\ &= P_i^A - \frac{\alpha_i \prod_{j=1}^i \frac{\beta_j}{\alpha_j}}{1 + \sum_{j=1}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}}. \end{aligned} \quad (4.71)$$

Voltemos à expressão (4.71). Já vimos que $P_i^A = 1 + O(r^{-(i+1)N_s})$. Além disso, obtemos de (4.68) e (4.63) que

$$\frac{\alpha_i \prod_{j=1}^i \frac{\beta_j}{\alpha_j}}{1 + \sum_{j=1}^{M-1} (1 - \alpha_j) \prod_{k=1}^j \frac{\beta_k}{\alpha_k}} = p_i(r) \rho^{-i} r^{-iN_2} + O(r^{-(i+1)N_s}). \quad (4.72)$$

Reunindo as informações acima, é imediato verificar que

$$P_i^B = 1 - p_i(r) \rho^{-i} r^{-iN_2} + O(r^{-(i+1)N_s}). \quad (4.73)$$

com $i = 1, 2, 3, \dots, M$. □

Assim como no caso Bd, observamos nas fórmulas (4.52) e (4.53) que, se N_1 e N_2 são suficientemente grandes, as probabilidades P_i^A e P_i^B são muito próximas de zero para $r < 1$, e muito próximas de um para $r > 1$. A Figura 4.7 exibe gráficos da razão entre o valor numérico da probabilidade de fixação dada pelas fórmulas exatas (4.9), (4.10) e (4.11) e a aproximação assintótica fornecida pelo Teorema 4.4.

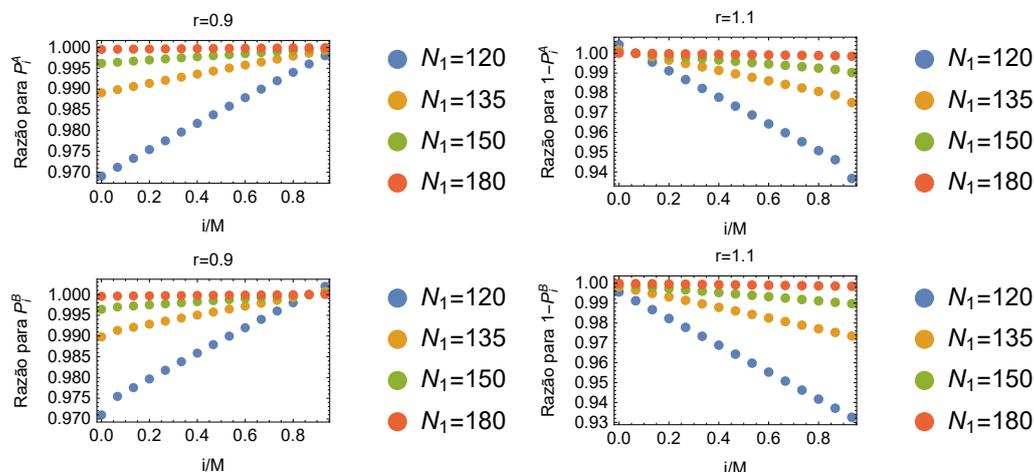


Figura 4.7: Gráficos da razão entre a probabilidade de fixação dada pelas fórmulas exatas (4.9), (4.10) e (4.11) e a aproximação assintótica dada pelas expressões (4.52) e (4.53). Painéis superiores: gráficos da razão para P_i^A com $r = 0.9$ e para $1 - P_i^A$ com $r = 1.1$. Fixamos, aqui, $\rho = 0.1$ e $M = 15$. Observe que, mantendo-se fixo ρ e tomando valores crescentes de N_1 e N_2 , quanto maiores forem os valores de N_1 e N_2 , tanto melhor será a aproximação assintótica. Painéis inferiores: o análogo para P_i^B e $1 - P_i^B$.

Como consequência do teorema anterior, temos o seguinte resultado.

Corolário 4.3.1. *Na ABM no processo de Moran na metaestrela, regra dB e $r \neq 1$, valem as seguintes fórmulas assintóticas no regime de seleção forte:*

1) Se $r < 1$, então

$$R_{N_1+MN_2}(r) = \frac{\rho^{1-M} r^{-M}}{\rho + 1} p_{M-1}(r) \left[1 + p_1^{-1}(r) \rho r \right] + O(r^{N_s}). \quad (4.74)$$

2) Se $r > 1$, então

$$R_{N_1+MN_2}(r) = 1 + \frac{\rho(1-\rho r)}{\rho+1} r^{-N_1} + \frac{1-p_1(r)\rho^{-1}}{\rho+1} r^{-N_2} + O(r^{-2N_s}). \quad (4.75)$$

Prova: Basta usar as fórmulas assintóticas para P_0^A , P_1^B e $\Phi_{wm}^{N_1+MN_2}(1, r)$ em (4.13) e seguir os mesmos passos delineados na prova do Teorema 4.4. \square

Observação 10. Note que no caso em que $M = 1$, podemos verificar a partir das fórmulas (4.74) e (4.75) que a expressão assintótica para $R_{N_1+MN_2}(r)$ na metaestrela dB concorda com a quantidade análoga que obtivemos no caso dB de duas populações isoladas geograficamente, veja o Teorema 3.3 e compare o resultado para $M = 1$ com (3.30).

Tendo como base os resultados acima, voltemos à questão de determinar quando $R_{N_1+MN_2}(r)$ é maior ou menor que 1. Consideremos a seguinte aproximação para $R_{N_1+MN_2}(r)$:

$$R_{N_1+MN_2}^{as}(r) = \begin{cases} \frac{\rho^{1-M} r^{-M}}{\rho+1} p_{M-1}(r) \left[1 + p_1^{-1}(r) \rho r \right], & \text{se } r < 1 \\ 1 + \frac{\rho(1-\rho r)}{\rho+1} r^{-N_1} + \frac{1-p_1(r)\rho^{-1}}{\rho+1} r^{-N_2}, & \text{se } r > 1 \end{cases}. \quad (4.76)$$

Na Figura 4.8, exibimos as curvas de nível da aproximação assintótica $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ dada por 4.76 e as curvas de nível obtidas através do valor numérico da fórmula exata. Como seria de esperar, $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ aproxima bem $R_{N_1+MN_2}(r)$ no regime de seleção forte.

Observe em (4.76), que mesmo na aproximação assintótica não existe no caso dB uma expressão simples para a curva de nível $R_{N_1+MN_2}^{as}(r) = 1$. Devemos notar, todavia, que podemos usar a aproximação dada por (4.76) para estudar a RVFM tomando valores particulares para N_1, N_2 e M . As Figuras 4.9, 4.10 e 4.11 exibem para alguns valores de ρ fixados, o perfil do gráfico de $R_{N_1+MN_2}(r)$ e $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ em função de r , no caso dB. Como a escala da diferença entre a RVFM e 1 é muito diferente, dependendo de ser $r < 1$ ou $r > 1$, nas Figuras 4.9, 4.10 e 4.11 exibimos separadamente gráficos para $r < 1$ e $r > 1$. Aqui, cumpre chamar a atenção do leitor para o fato de

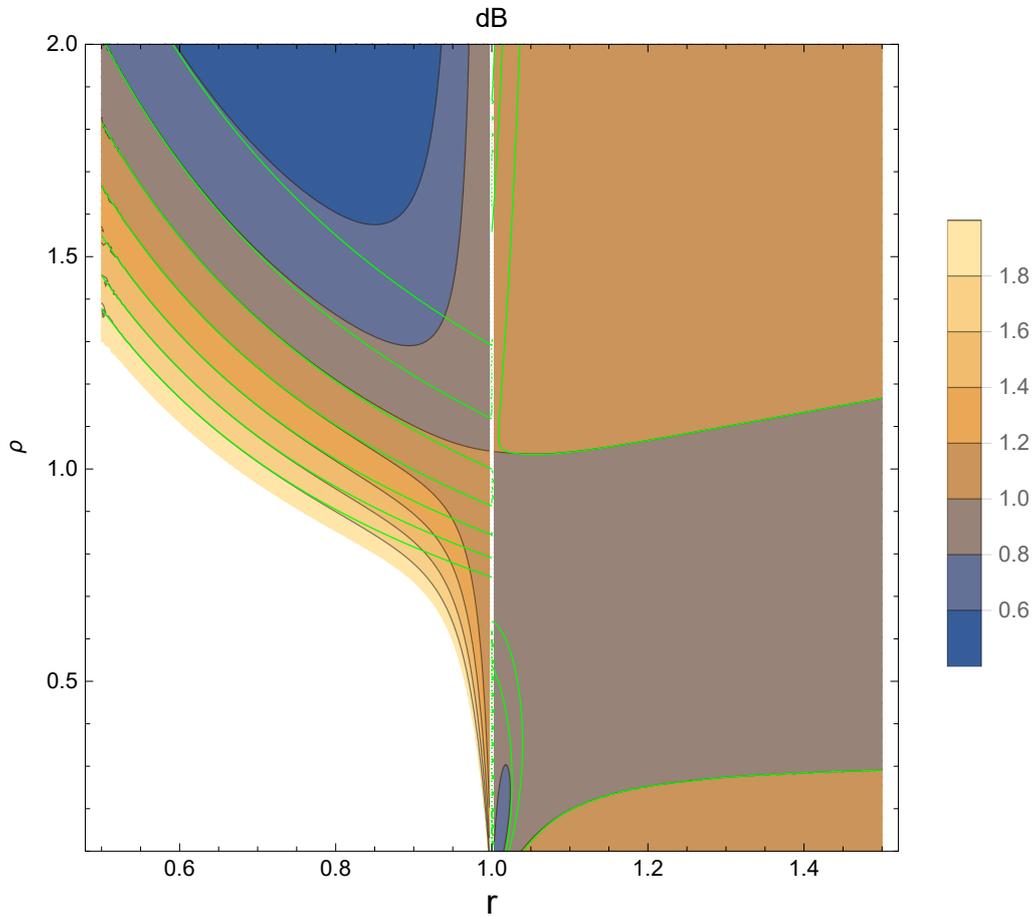


Figura 4.8: Gráfico das curvas de nível da função $R_{N_1+MN_2}(r)$ na regra dB com $N_1 = 50$ e $M = 3$ fixos. Para efeito de comparação, sobrepomos em verde as curvas de nível produzidas usando-se a expressão assintótica $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ dada por (4.76).

que na ABM na metaestrela dB, parecem existir valores de ρ para os quais a RVFM indica transiência. Este é o caso, por exemplo, quando consideramos $\rho = 1.5$ ou $\rho \approx 0.2$, conforme atestam as Figuras 4.10 e 4.11.

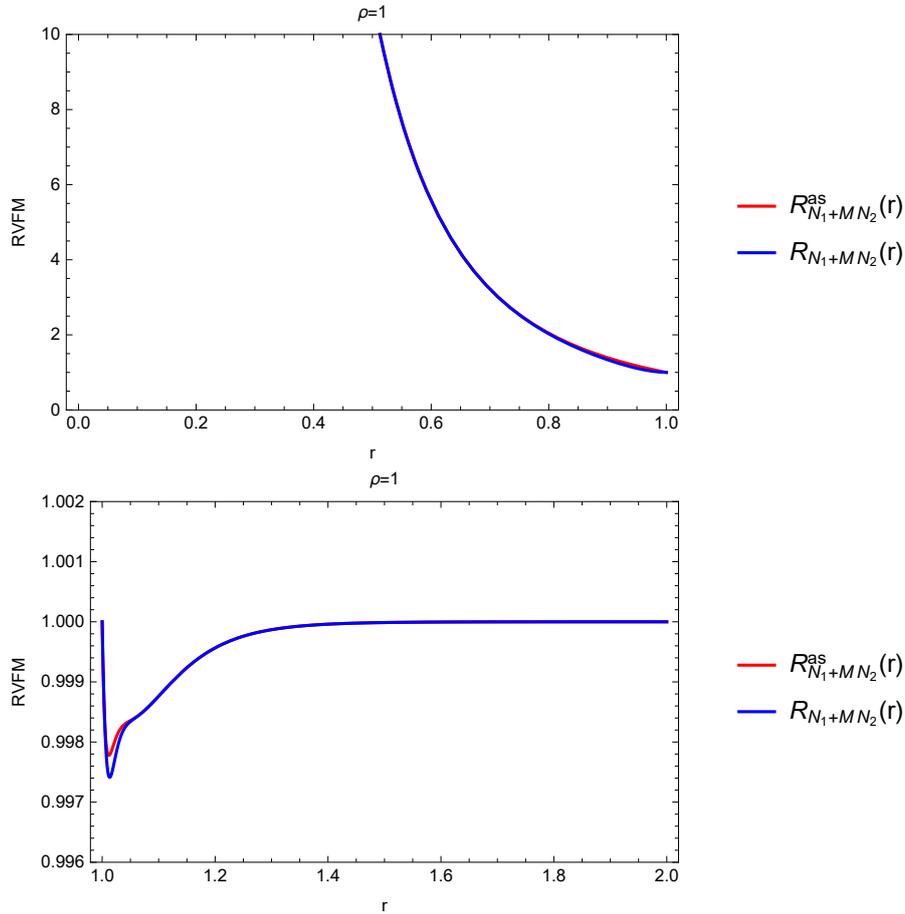


Figura 4.9: RVFM na ABM do processo de Moran na metaestrela, regra dB. A curva em azul representa o gráfico de $R_{N_1+MN_2}(r)$ produzido usando-se a fórmula exata, em que tomamos $N_1 = 120$, $N_2 = 20$ e $M = 6$. A curva em vermelho representa o gráfico de $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ usando-se a aproximação assintótica dada por (4.76). Observe que $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ aproxima bem o valor numérico exato de $R_{N_1+MN_2}(r)$. No painel superior, notamos que, para $0 < r < 1$, $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ é maior que 1. No painel inferior, constatamos que, para $r > 1$, essa quantidade é menor que 1. Portanto, para $\rho = 1$, a metaestrela dB é supressora de seleção.

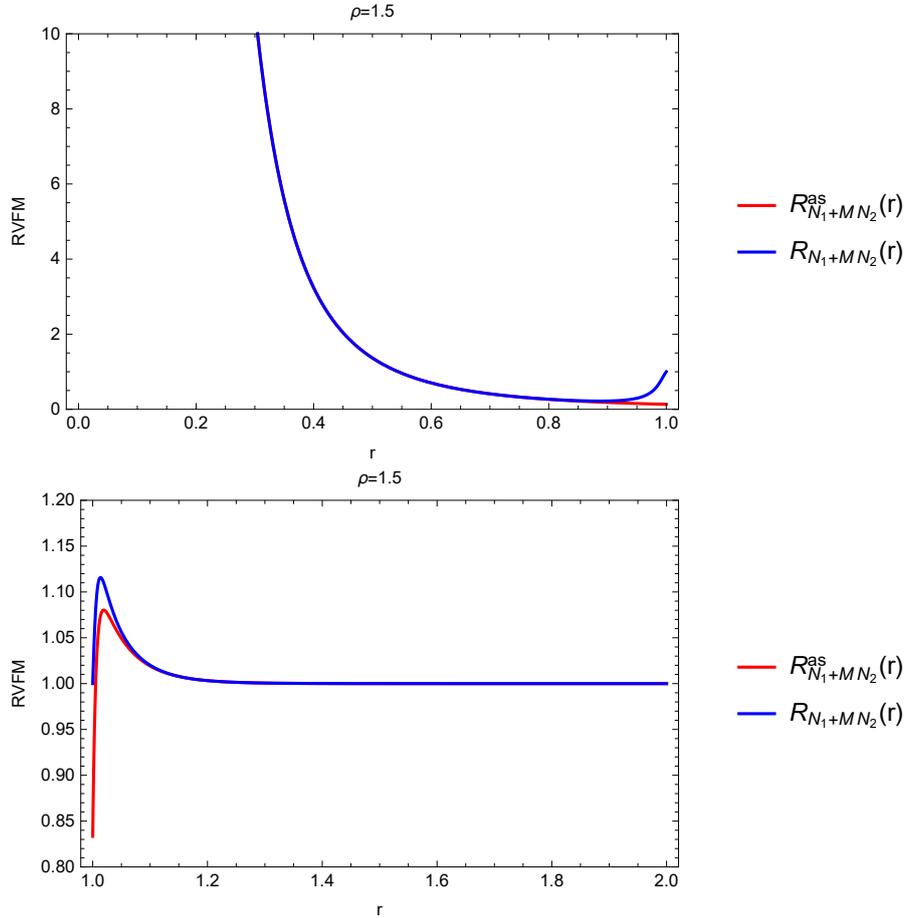


Figura 4.10: RVFM na ABM do processo de Moran na metaestrela, regra dB. A curva em azul representa o gráfico de $R_{N_1+MN_2}(r)$ produzido usando-se a fórmula exata, em que tomamos $N_1 = 180$, $N_2 = 20$ e $M = 6$. A curva em vermelho representa o gráfico de $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ usando-se a aproximação assintótica dada por (4.76). No painel superior, notamos que, para $0 < r < 1$, há um subintervalo em que $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ é menor que 1 e outro em que é maior que 1. No painel inferior, constatamos que, para $r > 1$, tem-se que $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ é maior que 1. Assim sendo, para $\rho = 1.5$, a RVFM apresenta um comportamento de transiência.

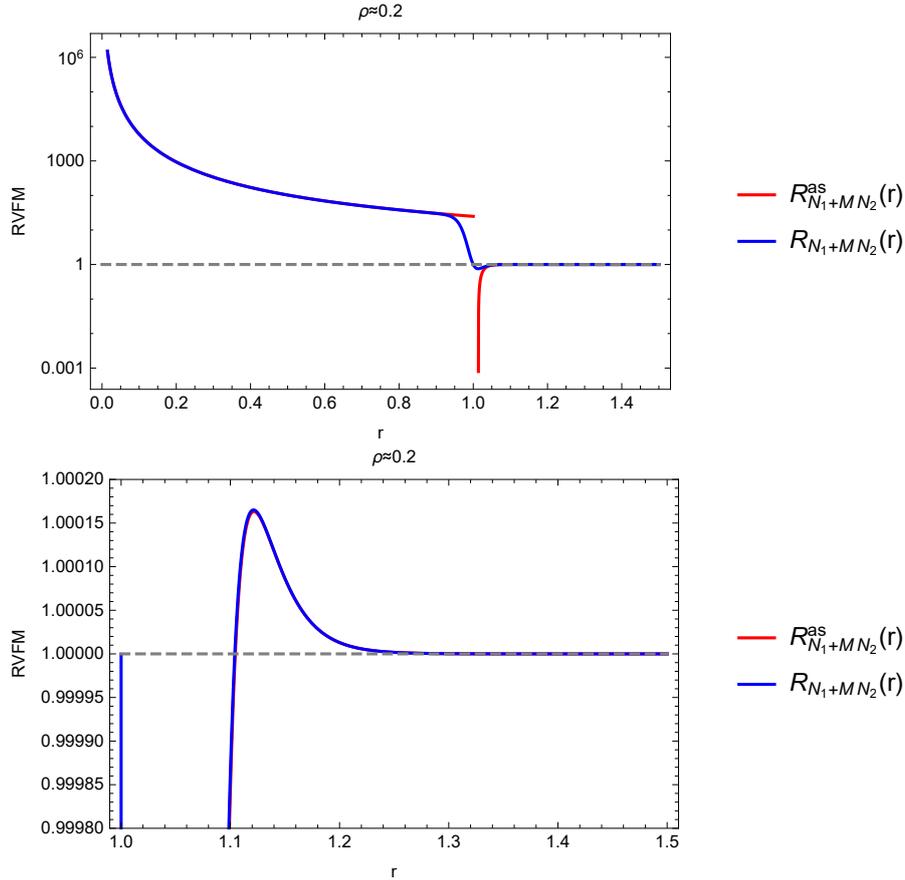


Figura 4.11: RVFM na ABM do processo de Moran na metaestrela, regra dB. A curva em azul representa o gráfico de $R_{N_1+MN_2}(r)$ produzido usando-se a fórmula exata, em que tomamos $N_1 = 50$, $N_2 = 83$ e $M = 3$. A curva em vermelho representa o gráfico de $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ usando-se a aproximação assintótica dada por (4.76). No primeiro painel, a escala vertical é logarítmica e podemos ver que, para $0 < r < 1$, $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ é maior que 1. No segundo painel, para $r > 1$, tem-se um subintervalo em que $R_{N_1+MN_2}^{as}(r)$ é menor que 1 e outro em que é maior que 1. Portanto, para $\rho \approx 0.2$, a RVFM apresenta um comportamento de transiência.

Capítulo 5

Conclusão

No primeiro capítulo desta tese, discutimos o processo de Moran em grafos [26]. Obtivemos de maneira unificada para as regras Bd e dB, com aptidões dependentes da frequência, fórmulas exatas da probabilidade de fixação em função de uma quantidade inicial arbitrária de indivíduos do tipo A no grafo estrela. Entretanto, apesar de explícitas, tais fórmulas são difíceis de serem interpretadas. Por outro lado, no caso particular de aptidões independentes da frequência, a aproximação por separação de escalas de tempo [15] nos permitiu entender de maneira qualitativa, as regras Bd e dB na estrela. Conforme discutimos no texto, quando o número n de pontas é grande o suficiente, a regra Bd na estrela é aproximadamente equivalente ao processo de Moran no grafo completo com aptidão r dos indivíduos do tipo A trocada por r^2 . Por outro lado, na regra dB, a estrela pode ser pensada aproximadamente como uma sucessão de problemas do colecionador de figurinhas positivos e negativos. De outra forma, concluímos que quando a condição inicial é estar longe de completar o álbum no modo positivo ou de apagá-lo no modo negativo, a fixação de algum tipo na estrela a partir de tal condição deverá ocorrer após vários estágios de transição do colecionador positivo para o negativo e vice-versa.

No resto desta tese, discutimos o processo de Moran em metapopulações estruturadas por grafos, ou simplesmente processo de Moran em metagrafos [44]. O problema de calcular probabilidades de fixação no processo de Moran em metagrafos foi abordado por Yagoobi e Traulsen [44]. Para superar a

complexidade envolvida no cálculo dessa quantidade, os autores de [44] introduziram e utilizaram uma aproximação de baixa migração (ABM) que lhes permitiu, dentro dessa aproximação, calcular exatamente a probabilidade de fixação em alguns casos.

Esta tese foi escrita com a proposta de continuar o trabalho iniciado em [44]. Ao lermos o artigo [44], vimos a possibilidade de explorar um pouco mais a utilidade da ABM nos próprios casos estudados pelos autores. Por exemplo, nos dois casos de metapopulações abordados em [44], os autores comparam, na ABM, a probabilidade de fixação de um mutante introduzido de maneira uniforme nessas metapopulações com a quantidade análoga numa população de mesmo tamanho estruturada pelo grafo completo. Porém, eles se limitam a fazer tais comparações apenas numericamente por meio de gráficos com valores pequenos do tamanho das subpopulações. Nós desenvolvemos fórmulas assintóticas dessas comparações. Além do mais, uma análise envolvendo a regra dB não é apresentada em [44]. Nossos resultados, incluem tanto a regra Bd como a regra dB.

Nos Capítulos 3 e 4, estabelecemos os principais resultados desta tese em extensão àqueles já publicados em [44]. Nestes capítulos, desenvolvemos aproximações assintóticas de seleção forte a partir das fórmulas exatas de probabilidades de fixação que obtivemos na ABM. Em termos dessas aproximações, estudamos tanto para a regra Bd quanto para a regra dB, a RVFM em duas únicas populações isoladas geograficamente e na metaestrela. Para a regra de atualização dB, tanto no caso de duas subpopulações isoladas geograficamente, quanto na metaestrela, vemos indícios de comportamentos transientes. Para a metaestrela Bd encontramos um comportamento da RVFM mais rico que somente a amplificação encontrada por Yagoobi e Traulsen [44].

Nota-se em todas as quantidades que obtivemos na ABM e para as quais desenvolvemos aproximações assintóticas de seleção forte, que para $r > 1$, os efeitos da estrutura da população, seja para aumentar ou para diminuir as quantidades estudadas, decrescem exponencialmente com o tamanho das subpopulações. Para $r < 1$, as probabilidades de fixação são muito pequenas, mas os efeitos da estrutura podem ser muito grandes. Conjecturamos que esse aspecto observado nas quantidades que estudamos para os casos particulares

de que tratamos, possa ser típico do regime de seleção forte na ABM no processo de Moran em metagrafos.

Para nós, a importância da discussão sobre a ABM no processo de Moran em metagrafos levada a cabo nos Capítulos 3 e 4, reside no fato de podermos utilizá-la tanto para tentar reproduzir em outros metagrafos os resultados que aqui obtivemos quanto para deduzir novos resultados. Nessa direção, percebe-se pelo que expusemos nessa tese, que a ABM é uma ferramenta poderosa para estudar de maneira rigorosa o processo de Moran em metagrafos. Dentre as possibilidades de aplicações, destacamos a sua utilização tanto para deduzir fórmulas exatas de probabilidade de fixação quanto para obter resultados numéricos em metagrafos com poucos vértices. Esperamos que este trabalho tenha sua parcela de contribuição nos esforços de aumentar o nosso entendimento da Teoria Evolutiva em Grafos, que certamente continuará sendo objeto de muita pesquisa.

Referências

- [1] S. Abbott and D. J. Fairbanks. Experiments on Plant Hybrids by Gregor Mendel. *Genetics (Austin)*, 204(2):407–422, 2016. <https://doi.org/10.1534/genetics.116.195198>. Citado na página 9.
- [2] B. Allen, C. Sample, R. Jencks, J. Withers, P. Steinhagen, and L. Brizuela. Transient amplifiers of selection and reducers of fixation for death-Birth updating on graphs. *PLoS Comput Biol*, 16(1):e1007529, 2020. <https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1007529>. Citado nas páginas 11, 13, 14, 26 e 44.
- [3] L. J. S. Allen. *An introduction to stochastic processes with applications to biology*. Chapman & Hall/CRC Press, Boca Raton, 2 nd edition, 2010. Não citado.
- [4] T. Antal and I. Scheuring. Fixation of strategies for an evolutionary game in finite populations. *B. Math. Biol.*, 68(8):1923–1944, 2006. <https://doi.org/10.1007/s11538-006-9061-4>. Citado na página 43.
- [5] T. M. Apostol. An Elementary View of Euler’s Summation Formula. *Am. Math. Mon.*, 106(5):409–418, 1999. <https://doi.org/10.2307/2589145>. Citado na página 37.
- [6] M. Broom, C. Hadjichrysanthou, J. Rychtář, and B. T. Stadler. Two results on evolutionary processes on general non-directed graphs. *Proc. R. Soc. A*, 466:2795–2798, 2010. <https://doi.org/10.1098/rspa.2010.0067>. Citado na página 22.
- [7] M. Broom and J. Rychtář. An analysis of the fixation probability of a mutant on special classes of non-directed graphs. *Proc. R. Soc. A*, 464:2609–2627, 2008. <https://doi.org/10.1098/rspa.2008.0058>. Citado nas páginas 22 e 33.

- [8] P. P. Chakraborty, L. R. Nemzer, and R. Kassen. Experimental evidence that network topology can accelerate the spread of beneficial mutations. *Evolution Letters*, 7(6):447–456, 2023. <https://doi.org/10.1093/evlett/qrad047>. Citado na página 11.
- [9] F. A. C. C. Chalub. An asymptotic expression for the fixation probability of a mutant in star graphs. *Journal of Dynamics & Games*, 3(3):217–223, 2016. <https://doi.org/10.3934/jdg.2016011>. Citado nas páginas 33 e 43.
- [10] M. Currat and L. Excoffier. Modern humans did not admix with Neanderthals during their range expansion into Europe. *PLOS Biol*, 12(2):e421, 2004. <https://doi.org/10.1371/journal.pbio.0020421>. Citado na página 65.
- [11] C. Darwin. *On the origin of species by means of natural selection, or, The preservation of favoured races in the struggle for life*. London : J. Murray, 1859. Citado na página 9.
- [12] E. P. de Souza. *Um estudo do processo evolutivo de Moran em grafos*. Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática, UFMG, 2019. Citado nas páginas 22 e 24.
- [13] E. P. de Souza, E. M. Ferreira, and A. G. M. Neves. Fixation probabilities for the Moran process in evolutionary games with two strategies: graph shapes and large population asymptotics. *J. Math. Biol.*, 78:1033–1065, 2019. <https://doi.org/10.1007/s00285-018-1300-4>. Citado nas páginas 18, 42 e 43.
- [14] E. P. de Souza and A. G. M. Neves. Exact fixation probabilities for the Birth-Death and Death-Birth frequency-dependent Moran processes on the star graph. *eprint arXiv:2003.05462 [q-bio.PE]*, March 2020. Não citado.
- [15] M. Frean, P. B. Rainey, and A. Traulsen. The effect of population structure on the rate of evolution. *Proc R Soc B*, 280(1762), 2013. <https://doi.org/10.1098/rspb.2013.0211>. Citado nas páginas 33 e 99.
- [16] M. R. Frean and G. J. Baxter. Death-birth ordering and suppression of fitness in networks. *preprint*, 2008. Citado nas páginas 33 e 39.

- [17] R. Green, J. Krause, A. W. Briggs, T. Maricic, U. Stenzel, and et al. A draft sequence of the Neandertal genome. *Science*, 328:710–722, 2010. <https://doi.org/10.1126/science.1188021>. Citado na página 66.
- [18] C. M. Grinstead and J. L. Snell. *Introduction to Probability*. AMS, 2003. Citado nas páginas 20 e 21.
- [19] C. Hadjichrysanthou, M. Broom, and J. Rychtář. Evolutionary Games on Star Graphs Under Various Updating Rules. *Dyn Games Appl*, 1:386–407, 2011. <https://doi.org/10.1007/s13235-011-0022-7>. Citado na página 11.
- [20] L. Hindersin and A. Traulsen. Most undirected random graphs are amplifiers of selection for birth-death dynamics, but suppressors of selection for death-birth dynamics. *PLOS Computational Biology*, 11(11):e1004437, 2015. <https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1004437>. Citado nas páginas 11, 12 e 26.
- [21] L. Hindersin, B. Werner, D. Dingli, et al. Should tissue structure suppress or amplify selection to minimize cancer risk? *Biol Direct*, 11(41), 2016. <https://doi.org/10.1186/s13062-016-0140-7>. Citado nas páginas 11, 12 e 26.
- [22] J. Hofbauer and K. Sigmund. *Evolutionary Games and Population Dynamics*. Cambridge University Press, 1998. Citado na página 10.
- [23] K. Kaveh, N. L. Komarova, and M. Kohandel. The duality of spatial death–birth and birth–death processes and limitations of the isothermal theorem. *R. Soc. Open Sci.*, 2:140465, 2015. <https://doi.org/10.1098/rsos.140465>. Citado na página 11.
- [24] O. Kolodny and M. W. Feldman. A parsimonious neutral model suggests Neanderthal replacement was determined by migration and random species drift. *Nat Commun*, 8(1040), 2017. <https://doi.org/10.1038/s41467-017-01043-z>. Citado nas páginas 11, 13, 14, 48, 66 e 67.
- [25] M. Krings, A. Stone, R. W. Schmitz, H. Krainitzki, M. Stoneking, and S. Pääbo. Neandertal DNA sequences and the origin of modern humans. *Cell*, 90:19–30, 1997. [https://doi.org/10.1016/s0092-8674\(00\)80310-4](https://doi.org/10.1016/s0092-8674(00)80310-4). Citado na página 65.
- [26] E. Lieberman, C. Hauert, and M. Nowak. Evolutionary dynamics on graphs. *Nature*, 433:312–316, 2005. <https://doi.org/10.1038/nature03204>. Citado nas páginas vi, vii, 11, 15, 16, 25, 33 e 99.

- [27] L. Marrec, I. Lamberti, and A. Bitbol. Toward a universal model for spatially structured populations. *Phys. Rev. Lett*, 127:218102, 2021. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.127.218102>. Citado na página 44.
- [28] J. Maynard and G. R. Price. The Logic of Animal Conflict. *Nature*, 246:15–18, 1973. <https://doi.org/10.1038/246015a0>. Citado na página 10.
- [29] P. A. P. Moran. Random processes in genetics. *P. Camb. Philos. Soc.*, 54(1):60–71, 1958. <https://doi.org/10.1017/S0305004100033193>. Citado nas páginas 10 e 15.
- [30] R. Motwani and P. Raghavan. *Randomized Algorithms*. Cambridge University Press, 1995. Citado na página 35.
- [31] A. G. M. Neves. *Aplicações biológicas de cadeia de Markov*. Sociedade Brasileira de Matemática - SBM, Rio de Janeiro, Brasil, 2014. Citado na página 20.
- [32] A. G. M. Neves and C. H. C. Moreira. Applications of the Galton-Watson process to human DNA evolution and demography. *Physica A*, 368:132, 2006. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2005.11.055>. Citado na página 65.
- [33] A. G. M. Neves and M. Serva. Extremely rare interbreeding events can explain Neanderthal DNA in modern humans. *PLoS ONE*, 7(10):e47076, 2012. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0047076>. Citado nas páginas 11 e 66.
- [34] M. A. Nowak. *Evolutionary Dynamics: exploring the equations of life*. The Belknap Press of Harvard University Press, 2006. Citado nas páginas 10, 11, 18, 23, 24 e 25.
- [35] M. A. Nowak, A. Sasaki, C. Taylor, and D. Fudenberg. Emergence of cooperation and evolutionary stability in finite populations. *Nature*, 428(6983):646–650, 2004. <https://doi.org/10.1038/nature02414>. Citado na página 10.
- [36] F. W. J. Olver. *Asymptotics and special functions*. Academic Press, San Diego, 1974. Citado na página 42.
- [37] R. A. Pires. *Análise assintótica dos tempos médios de fixação no processo de Moran*. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Matemática, UFMG, 2022. Citado na página 42.

- [38] R. A. Pires and A. G. M. Neves. Asymptotic behavior of mean fixation times in the Moran process with frequency-independent fitnesses. *J. Math. Biol.*, 88(12), 2024. <https://doi.org/10.1007/s00285-023-02032-1>. Citado nas páginas 42 e 46.
- [39] J. P. O. Santos and E. Bovo. *O Teorema de Burnside e Aplicações*. Texto para minicurso na 2a. Bienal da Sociedade Brasileira de Matemática - SBM, Salvador, Brasil, 2004. Citado na página 22.
- [40] M. Serva. Lack of self-averaging and family trees. *Physica A*, 332:387–393, 2004. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2003.10.038>. Citado na página 65.
- [41] P. L. Simon, M. Taylor, and I. Z. Kiss. Exact epidemic models on graphs using graph-automorphism driven lumping. *J. Math Biol.*, 62(4):479–508, 2011. <https://doi.org/10.1007/s00285-010-0344-x>. Citado na página 11.
- [42] C. Taylor, D. Fudenberg, A. Sasaki, and M. A. Nowak. Evolutionary game dynamics in finite populations. *B. Math. Biol.*, 66(6):1621–1644, 2004. <https://doi.org/10.1016/j.bulm.2004.03.004>. Citado nas páginas 10 e 42.
- [43] S. Yagoobi, N. Sharma, and A. Traulsen. Categorising update mechanisms for graph-structured metapopulations. *J. R. Soc. Interface*, 20:20220769, 2023. <https://doi.org/10.1098/rsif.2022.0769>. Citado nas páginas 11, 17 e 44.
- [44] S. Yagoobi and A. Traulsen. Fixation probabilities in network structured meta-populations. *Sci. Rep.*, 11:17979, 2021. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-97187-6>. Citado nas páginas vi, vii, 11, 12, 14, 44, 46, 47, 49, 50, 68, 73, 83, 99 e 100.

Índice Remissivo

- Amplificador de seleção natural, 26
- Aproximação
 - de Baixa Migração (ABM), 46
 - por separação de escalas de tempo, 33
- Aptidão, 18
 - no contexto da Teoria de Jogos Evolutivos, 18
 - relativa, 19
- Aptidões
 - dependentes da frequência, 19
 - independentes da frequência, 19
- Automorfismo de \mathcal{G} , 22
- Configuração, 19
 - homogênea, 46
- Fixação, 20
- Grafo
 - completo, 23
 - estrela, 26
- Grupo de automorfismos de \mathcal{G} , 22
- Intensidade de seleção, 18
- Matriz
 - de pagamentos, 18
 - fundamental, 21
- Metaestrela, 68
- Metagrafo, 44
- Metapopulação, 44
- Migrações, 46
- Probabilidade
 - de fixação, 20
 - de fixação média, 24
- Problema do Colecionador de Figurinhas, 35
- Processo de Moran
 - em grafos, 18
 - neutro, 19
- Promotor de seleção natural, 26
- Razão de Vantagem para Fixação de um Mutante (RVFM), 25
- Redutor de seleção natural, 26
- Regime de seleção forte, 55
- Regras de atualização, 17
 - morte-nascimento (dB), 17
 - nascimento-morte (Bd), 17
- Seleção fraca, 18
- Simetria, 22
- Supressor de seleção natural, 26
- Transiência, 26