

Πτυχιακή Εργασία
του φοιτητή του Τμήματος ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ
του Πανεπιστημίου Πατρών

ΛΟΥΚΑΪΔΗ ΑΝΔΡΟΝΙΚΟΥ του ΝΙΚΟΛΑΟΥ

Αριθμός Μητρώου: 1084818

ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΙΚΩΝ ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΩΝ (ΠΡΩΗΝ)

«ΕΞΕΛΙΚΤΙΚΑ ΔΥΝΑΜΙΚΑ ΣΕ ΓΡΑΦΗΜΑΤΑ »

Επιβλέπων
ΡΑΠΤΟΠΟΥΛΟΣ ΧΡΙΣΤΟΦΟΡΟΣ

Πάτρα, 03/09/2024

ΠΙΣΤΟΠΟΙΗΣΗ

Πιστοποιείται ότι η Πτυχιακή Εργασία με θέμα

«Εξελικτικά Δυναμικά σε Γραφήματα »

του φοιτητή του Τμήματος Μαθηματικών
Ανδρόνικου Λουκαΐδη του Νικολάου

Αριθμός Μητρώου: 1084818

Παρουσιάστηκε δημόσια και εξετάστηκε στο Τμήμα Μαθηματικών
στις
...03.../...09.../...2024...

Ο Επιβλέπων

Χριστόφορος Ραπτόπουλος
Επίκουρος Καθηγητής

Ο Διευθυντής του Τομέα

Σωτήριος Κωτσιαντής
Αναπληρωτής Καθηγητής

Τίτλος Πτυχιακής Εργασίας: Εξελικτικά Δυναμικά σε Γραφήματα

Φοιτητής: Ανδρόνικος Λουκαΐδης

Επιβλέπων: Χριστόφορος Ραπτόπουλος

Το μοντέλο του *Moran*, το οποίο ανακαλύφθηκε από τον ίδιο το 1958, δημιούργησε πολλά ανοικτά προβλήματα. Ειδικότερα, συζητάμε για τις δυναμικές ενός πληθυσμού με δύο τύπους κατοίκων. Μελετάμε την απλή διεργασία *Moran*, μια διαδικασία γεννήσεων θανάτων. Οι ποσότητες που μας ενδιαφέρουν είναι η πιθανότητα κάποιος από τους δύο πληθυσμούς να κυριαρχήσει, καθώς και ο αναμενόμενος χρόνος, στον οποίο θα συμβεί αυτό το γεγονός. Ο ακριβής υπολογισμός των ανωτέρω ποσοτήτων είναι ιδιαίτερα δύσκολος σε θεωρητικό επίπεδο, διότι προκύπτει ένα γραμμικό σύστημα $2^{|S|}$ εξισώσεων, το οποίο είναι αδύνατο να λυθεί υπολογιστικά. Έχουμε να αντιμετωπίσουμε πολλές διαφορετικές παραμέτρους στο πρόβλημα προσέγγισης υπολογισμού της πιθανότητας αποκατάστασης. Για παράδειγμα, τη δομή του εκάστοτε πληθυσμού, τις πιθανότητες επιλογής κάθε ατόμου, το πλήθος των ατόμων. Στόχος αυτής της πτυχιακής εργασίας είναι να προσεγγίσουμε τον αναμενόμενο χρόνο τερματισμού της διαδικασίας, καθώς και τις πιθανότητες του εκάστοτε πληθυσμού να κυριαρχήσει, μέσω της απλής διεργασίας *Moran*. Όπως προαναφέρθηκε ο υπολογισμός των ποσοτήτων αυτών δεν μπορεί να είναι ακριβής. Ως εκ τούτου, οι συγγραφείς της δημοσίευσης [5] συνδύασαν ορισμένες στοχαστικές διαδικασίες με προσεγγιστικούς αλγορίθμους, ώστε να προσεγγίσουν τον επιθυμητό χρόνο τερματισμού της παραπάνω διεργασίας. Οι βάσεις στις οποίες θα στηριχθούμε είναι η θεωρία πιθανοτήτων και οι δομές των δεδομένων. Συνοπτικά, η Διαδικασία *Moran* είναι ένα καθοριστικό μοντέλο που συνδυάζει τη στοχαστικότητα με τα εξελικτικά δυναμικά για να εξηγήσει πώς εξελίσσονται οι πληθυσμοί με την πάροδο του χρόνου. Οι γνώσεις που αποκτώνται από αυτή τη διαδικασία επεκτείνονται πέρα από τη βιολογία, παρέχοντας πλαίσια για την κατανόηση διαφόρων πολύπλοκων συστημάτων στα οποία οντότητες ανταγωνίζονται, αναπαράγονται και εξελίσσονται. Χάρη στη μαθηματική αυστηρότητα και την εννοιολογική απλότητα, συνεχίζει να αποτελεί θεμελιώδες στοιχείο στη μελέτη της εξέλιξης και των συναφών κλάδων.

Abstract

The Moran model, which was invented by Moran in 1958, created many open problems. Specifically, we are discussing the dynamics of a population with two different types of residents. We will study the simple Moran process, a birth-death process. We are interested in the following quantities. Firstly, the probability that one of the two population dominates the graph (Fixation Probability) and secondly the Expected Absorption Time of the latter possibility. The exact computation of the above quantities proves to be difficult from a theoretical stand point. This is due to the mathematical system of $2^{|S|}$ equations, which is not computationally solvable. We also have to encounter many different variables in the problem of the fixation probability approximation. For example, the structure of the population, the weights of every edge and the number of vertices. The main objective of the thesis is to approximate both the fixation probability and the expected absorption time, through the simple Moran process, with respect to the above variables. As mentioned above, the exact computation of the desired quantities is not feasible. Therefore, based on the paper [5] combining certain stochastic processes with approximating algorithms is essential, in order to make a good estimation of the desired quantities. Summing up, the Moran Process is a vital model, which combines stochastic processes and evolutionary dynamics, in order to explain how populations develop, through time. The knowledge that one can obtain from this thesis expands way more than biology, while competitive populations interact through complicated mathematical systems. Thanks to mathematics, populations like cells are still a fundamental element in the research of evolutionary dynamics and relevant fields.

Περιεχόμενα

Πιστοποίηση

Περίληψη

Abstract

1	Εισαγωγή	IV
1.1	Εισαγωγή στην διαδικασία Moran	IV
1.1.1	Προεπισκόπηση	IV
1.1.2	Επεκτάσεις και εφαρμογές	V
1.1.3	Σημασία Εφαρμογών	VI
1.2	Εισαγωγή στα Εξελικτικά Δυναμικά	VI
1.2.1	Οι στοχαστικές διαδικασίες στα Εξελικτικά Δυναμικά	VII
1.2.2	Αριθμητικές προσομοιώσεις	VIII
1.2.3	Προκλήσεις και μελλοντικές προοπτικές	VIII
1.3	Συμπέρασμα	IX
2	Βασικοί Ορισμοί	X
2.1	Μαρκοβιανές Αλυσίδες-Markov Chains	X
2.2	Ορισμός του Moran	XI
2.2.1	Διεργασία Moran	XII
2.3	Martingales	XV
2.3.1	Πιθανότητα Αποκατάστασης (Fixation Probability)	XVI
2.3.2	Ενισχυτές και Καταπιεστές (Amplifiers and Suppressors) . . .	XVI
2.4	Εφαρμογές και Παραδείγματα	XVI
3	Απαραίτητα Εργαλεία	XIX
3.1	Το Υπόβαθρο-Background	XIX
3.2	Ιδιότητα Μέσης Τιμής	XX
3.3	Χρήσιμες Ανισότητες	XXI
3.3.1	Ανισότητα Markov	XXI
3.3.2	Λήμμα Hoeffding	XXI
3.3.3	Ανισότητα Hoeffding	XXI
3.4	Θεωρία Δυναμικού-Potential Theory	XXIII
3.5	Ο Αλγόριθμος FPRAS	XXVIII
4	Προσεγγιστικός Υπολογισμός Πιθανότητας Αποκατάστασης	XXIX
4.1	Φράγματα Πιθανότητας Αποκατάστασης-Bounding the Fixation Probability	XXX

4.2	Φράγματα Χρόνου Απορρόφησης-Bounding the Absorption Time	XXXIII
4.3	Προσεγγιστικοί Αλγόριθμοι	XLVI
5	Ανοιχτά Προβλήματα	LI
5.1	Προσέγγιση Πιθανότητας Αποκατάστασης ($r < 1$)	LI
5.2	Προσέγγιση Αναμενόμενου Χρόνου Απορρόφησης	LII

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

1.1 Εισαγωγή στην διαδικασία Moran

1.1.1 Προεπισκόπηση

Η Διαδικασία *Moran* είναι μια συναρπαστική και σημαντική έννοια στο πεδίο της εξελικτικής βιολογίας και της θεωρίας παιγνίων. Παρέχει πληροφορίες για το πώς οι μεταλλάξεις μέσα σε έναν πληθυσμό μπορούν να επηρεάσουν τα εξελικτικά δυναμικά και να μας βοηθήσουν να κατανοήσουμε τις διαδικασίες που διέπουν τη φυσική επιλογή. Στην ουσία, η Διαδικασία *Moran* είναι μια στοχαστική διαδικασία, που σημαίνει ότι περιλαμβάνει την τυχειότητα και επίσης μοντελοποιεί τον τρόπο με τον οποίο η συχνότητα των διαφόρων τύπων (ή αλληλόμορφων) σε έναν πληθυσμό μεταβάλλεται με την πάροδο του χρόνου λόγω των γεγονότων της γέννησης και του θανάτου. Η Διαδικασία *Moran* παραδοσιακά θεωρεί έναν πληθυσμό σταθερού μεγέθους N , όπου κάθε άτομο φέρει έναν από τους δύο τύπους αλληλόμορφων (ατόμων): A ή B. Ο πληθυσμός εξελίσσεται με διακριτά χρονικά βήματα, με δύο κύρια γεγονότα να συμβαίνουν σε κάθε βήμα:

i. Ένα άτομο επιλέγεται για αναπαραγωγή, συνήθως με βάση την δυναμικότητά του.

ii. Ένα άλλο άτομο επιλέγεται για να αντικατασταθεί από τον απόγονο του αναπαραγόμενου ατόμου.

Η δυναμικότητα των ατόμων μπορεί να διαφέρει ανάλογα με τον τύπο τους. Για παράδειγμα, εάν τα άτομα του τύπου A έχουν πλεονέκτημα δυναμικότητας, μπορεί να είναι πιο πιθανό να αναπαραχθούν σε σύγκριση με τα άτομα του τύπου B. Αυτή η διαφορετική αναπαραγωγική επιτυχία οδηγεί σε αλλαγές στη συχνότητα των αλληλόμορφων A και B με την πάροδο του χρόνου.

1. Οι αρχικές συνθήκες:

Ξεκινάμε με έναν πληθυσμό που αποτελείται από N άτομα. Ας υποθέσουμε ότι υπάρχουν i άτομα τύπου A και $N - i$ άτομα τύπου B. Η δυναμικότητα των ατόμων τύπου A είναι f_A και του τύπου B είναι f_B .

2. Επιλογή αναπαραγωγής:

Ένα άτομο επιλέγεται για αναπαραγωγή. Η πιθανότητα επιλογής ενός ατόμου τύπου A για αναπαραγωγή δίνεται από τη σχέση $\frac{i \times f_A}{i \times f_A + (N - i) \times f_B}$. Αντίθετα, η πιθανότητα επιλογής ενός ατόμου τύπου B για αναπαραγωγή είναι $\frac{(N - i) \times f_B}{i \times f_A + (N - i) \times f_B}$.

3. Επιλογή αντικατάστασης:

Μόλις επιλεγεί το άτομο που αναπαράγεται, επιλέγεται ομοιόμορφα τυχαία ένα άτομο από ολόκληρο τον πληθυσμό για να αντικατασταθεί από τον απόγονο του ατόμου που αναπαράγεται. Αυτό σημαίνει ότι κάθε άτομο έχει ίση πιθανότητα $\frac{1}{N}$ να αντικατασταθεί.

4. Επικαιροποίηση της κατάστασης:

Ο απόγονος που παράγεται από το επιλεγμένο άτομο κληρονομεί τον τύπο του γονέα του. Εάν ένα άτομο A αναπαραχθεί και ένα A αντικαταστήσει ένα B, ο αριθμός των ατόμων A αυξάνεται κατά ένα και ο αριθμός των ατόμων B μειώνεται κατά ένα, και αντίστροφα.

5. Συνθήκες τερματισμού:

Η διαδικασία συνεχίζεται έως ότου ένας τύπος καταλάβει ολόκληρο τον πληθυσμό, δηλαδή έως ότου υπάρχουν είτε N άτομα όλα τύπου A είτε N άτομα όλα τύπου B.

Ένα από τα βασικά ενδιαφέροντα για τη μελέτη της Διαδικασίας *Moran* είναι η κατανόηση της πιθανότητας αποκατάστασης, δηλαδή η πιθανότητα που έχει ένα συγκεκριμένο αλληλόμορφο να καταλάβει τελικά ολόκληρο τον πληθυσμό. Για παράδειγμα, αν ξεκινήσουμε με ένα ξένο A σε έναν πληθυσμό από B (δηλαδή, $i = 1$ και $N - 1$ άτομα τύπου B), τότε μπορεί να προκύψει η πιθανότητα αποκατάστασης, π_A , για τον τύπο A. Όταν $f_A = f_B$, τότε αυτό απλοποιείται στην ουδέτερη περίπτωση όπου η επιλογή δεν ευνοεί κανέναν από τους δύο τύπους. Σε αυτή την ουδέτερη παρέκκλιση, η πιθανότητα αποκατάστασης π_A είναι απλώς ίση με $\frac{1}{N}$. Ωστόσο, όταν $f_A \neq f_B$:

$$\pi_A = \frac{1 - (f_B/f_A)^{-1}}{1 - (f_B/f_A)^{-N}}$$

Ο τύπος αυτός δείχνει ότι η σχετική διαφορά δυναμικότητας $\frac{f_A}{f_B}$ επηρεάζει σε μεγάλο βαθμό την πιθανότητα αποκατάστασης των αλληλόμορφων στον πληθυσμό.

1.1.2 Επεκτάσεις και εφαρμογές

Η κλασική Διαδικασία *Moran* έχει αρκετές επεκτάσεις και παραλλαγές, οι οποίες την καθιστούν εφαρμόσιμη σε πιο σύνθετα και ρεαλιστικά βιολογικά σενάρια:

1. Δομημένοι πληθυσμοί:

Μια παραλλαγή εξετάζει τη χωρική δομή, όπου ο πληθυσμός δεν είναι καλά αναμειγμένος και τα άτομα μπορούν να αναπαραχθούν μόνο στην τοπική τους γειτονιά. Αυτό μπορεί να επηρεάσει σημαντικά τη δυναμική.

2. Πολλαπλοί τύποι:

Αντί για δυαδικούς τύπους (A και B) μόνο, μπορούμε να επεκτείνουμε αυτό το μοντέλο σε πολλαπλά αλληλόμορφα που κυκλοφορούν στον πληθυσμό, γεγονός που οδηγεί σε πολύπλοκες αλληλεπιδράσεις και πολλαπλές πιθανότητες αποκατάστασης σε διαφόρους τύπους.

3. Μετάλλαξη:

Μια παραλλαγή είναι η εξέταση κάποιας μετάλλαξης, όπου οι απόγονοι έχουν πιθανότητα μετάλλαξης σε διαφορετικό τύπο. Αυτό δίνει μια πιο ρεαλιστική απεικόνιση της γενετικής ποικιλίας του πραγματικού κόσμου.

4. Θεωρία παιγνίων:

Οι διαδικασίες *Moran* μπορούν να ενσωματώσουν έννοιες από την εξελικτική θεωρία παιγνίων. Σε αυτά τα μοντέλα, η δυναμικότητα ενός ατόμου μπορεί να εξαρτάται από τη συχνότητα των τύπων στον πληθυσμό.

Για παράδειγμα, η δυναμικότητα των στρατηγικών σε ένα παίγνιο μπορεί να ενσωματωθεί στο μοντέλο, συνδυάζοντας έτσι τις στρατηγικές αλληλεπιδράσεις με τα εξελικτικά δυναμικά.

1.1.3 Σημασία Εφαρμογών

Η κατανόηση της Διαδικασίας *Moran* έχει σημαντικές επιπτώσεις όχι μόνο στην εξελικτική βιολογία, αλλά και σε διάφορα πεδία όπως η οικολογία, η επιδημιολογία, ακόμη και σε κοινωνικοοικονομικά μοντέλα όπου παράγοντες με στρατηγικές εξελίσσονται με την πάροδο του χρόνου.

1. Αντοχή στα αντιβιοτικά:

Η διαδικασία μοντελοποιεί τον τρόπο με τον οποίο τα ανθεκτικά στελέχη βακτηρίων πολλαπλασιάζονται σε έναν πληθυσμό ξενιστή.

2. Έρευνα για τον καρκίνο:

Βοηθά στην κατανόηση του τρόπου με τον οποίο τα μεταλλαγμένα επιθετικά καρκινικά κύτταρα μπορεί να πολλαπλασιάζονται και να κυριαρχούν σε έναν όγκο.

3. Βιολογία προστασίας των ειδών:

Η κατανόηση της γενετικής παρέκκλισης σε μικρούς πληθυσμούς απειλούμενων ειδών μπορεί να βοηθήσει στο σχεδιασμό καλύτερων στρατηγικών προστασίας των ειδών.

4. Πολιτιστική εξέλιξη:

Η διαδικασία αυτή έχει εφαρμοστεί για τη μελέτη της εξάπλωσης και της αποκατάστασης των πολιτισμικών χαρακτηριστικών και συμπεριφορών μεταξύ των ανθρωπίνων πληθυσμών.

1.2 Εισαγωγή στα Εξελικτικά Δυναμικά

Τα Εξελικτικά Δυναμικά είναι ένας συναρπαστικός τομέας έρευνας που εφαρμόζει μαθηματικά μοντέλα για την κατανόηση και την περιγραφή της διαδικασίας της εξέλιξης στα βιολογικά συστήματα. Συνδυάζοντας αρχές από τη βιολογία, τη γενετική, τη θεωρία παιγνίων και τη μη γραμμική δυναμική με στοχαστικές διαδικασίες. Τα Εξελικτικά Δυναμικά προσφέρουν ισχυρά εργαλεία για την ανάλυση του τρόπου με τον οποίο οι πληθυσμοί εξελίσσονται με την πάροδο του χρόνου. Ειδικότερα, οι στοχαστικές διαδικασίες διαδραματίζουν ένα βασικό ρόλο στη συνεκτίμηση των τυχαίων διακυμάνσεων και των αβεβαιοτήτων που υπάρχουν στα βιολογικά συστήματα, προσδίδοντας βάθος και ρεαλισμό στα μοντέλα. Στο επίκεντρο των εξελικτικών δυναμικών βρίσκεται η έννοια της "φυσικής επιλογής", όπου τα χαρακτηριστικά που παρέχουν αναπαραγωγικό

πλεονέκτημα αυξάνονται σε συχνότητα με την πάροδο των γενεών. Σε αντίθεση με τα ντετερμινιστικά μοντέλα, τα οποία υποθέτουν άπειρους πληθυσμούς και μέσες συμπεριφορές, τα στοχαστικά μοντέλα ενσωματώνουν στοιχεία τυχαιότητας που είναι ζωτικής σημασίας για την κατανόηση των πεπερασμένων πληθυσμών και του ρόλου των τυχαίων γεγονότων.

1. Τοπίο Δυναμικότητας:

Στην εξελικτική βιολογία, το τοπίο δυναμικότητας είναι μια αντιστοίχιση των γονότυπων ή φαινοτύπων με την αντίστοιχη αναπαραγωγική τους επιτυχία. Οι κορυφές σε αυτό το τοπίο υποδηλώνουν υψηλή δυναμικότητα, ενώ οι κοιλάδες αντιπροσωπεύουν χαμηλή δυναμικότητα. Οι στοχαστικές διαδικασίες είναι ιδιαίτερα χρήσιμες στη μοντελοποίηση του τρόπου με τον οποίο οι πληθυσμοί διέρχονται από αυτά τα τοπία, ξεφεύγοντας ενδεχομένως από τα τοπικά βέλτιστα λόγω τυχαίας γενετικής παρέκκλισης.

2. Δυναμική αντιγραφών:

Πρόκειται για ένα σύνολο διαφορικών εξισώσεων που χρησιμοποιούνται για να περιγράψουν τους ρυθμούς ανάπτυξης των διαφόρων τύπων σε έναν πληθυσμό με βάση τη σχετική τους δυναμικότητα.

Σε ένα στοχαστικό πλαίσιο, η δυναμική αυτή μπορεί να τροποποιηθεί, έτσι ώστε να συμπεριλάβει "όρους θορύβου" (noise terms), οδηγώντας σε στοχαστικές διαφορικές εξισώσεις που αποτυπώνουν τις τυχαίες διακυμάνσεις γύρω από τις ντετερμινιστικές τάσεις.

1.2.1 Οι στοχαστικές διαδικασίες στα Εξελικτικά Δυναμικά

Οι στοχαστικές διαδικασίες επιτρέπουν τη μοντελοποίηση της τυχαιότητας στην εξέλιξη των πληθυσμών. Ορισμένες κοινές στοχαστικές διαδικασίες που εφαρμόζονται στο εξελικτικά δυναμικά είναι οι εξής:

1. Η διαδικασία *Moran*:

Στη διαδικασία *Moran*, σε κάθε χρονικό βήμα επιλέγεται ένας οργανισμός για να αναπαραχθεί και ένας για να πεθάνει, διατηρώντας σταθερό το μέγεθος του πληθυσμού. Αυτή η διαδικασία μπορεί να εισάγει στοχαστικές διακυμάνσεις στις συχνότητες των αλληλομόρφων και χρησιμοποιείται συχνά για την περιγραφή των εξελικτικών δυναμικών σε πεπερασμένους πληθυσμούς.

2. Οι διαδικασίες γέννησης-θανάτου:

Πρόκειται για τις διαδικασίες *Markov*, όπου κάθε οργανισμός στον πληθυσμό μπορεί να γεννήσει νέους οργανισμούς ή να πεθάνει με συγκεκριμένη ταχύτητα ή ρυθμό. Αυτές οι διαδικασίες μπορούν να συμπληρωθούν με κάποιους συντελεστές επιλογής για να μοντελοποιήσουν τις διαφορές δυναμικότητας.

Τέτοιες διαδικασίες επιτρέπουν τη μελέτη των πιθανοτήτων εξαφάνισης και των χρόνων αποκατάστασης, δηλαδή του χρόνου που χρειάζεται ένα συγκεκριμένο αλληλόμορφο για να γίνει το μοναδικό αλληλόμορφο στον πληθυσμό.

Τα στοχαστικά μοντέλα εξελικτικού δυναμικού έχουν ευρείες εφαρμογές σε διάφορους τομείς, όπως:

1. Η γενετική των πληθυσμών:

Κατανόηση του τρόπου με τον οποίο οι συχνότητες των αλληλομόρφων μεταβάλλονται με την πάροδο του χρόνου υπό την επίδραση κάποιας μετάλλαξης, επιλογής, γενετικής παρέκκλισης και μετανάστευσης.

2. Η δυναμική των μολυσματικών ασθενειών:

Μοντελοποίηση της εξάπλωσης ασθενειών, συμπεριλαμβανομένων των επιπτώσεων των εμβολιασμών και άλλων παρεμβάσεων, μέσω πληθυσμών, όπου στοχαστικά φαινόμενα όπως τα γεγονότα υπερδιάδοσης μπορεί να είναι κρίσιμα.

3. Εξελικτική Θεωρία Παιγνίων:

Η μοντελοποίηση των αλληλεπιδράσεων μεταξύ ατόμων όπου οι απολαβές τους (δυναμικότητα) εξαρτώνται όχι μόνο από τις δικές τους στρατηγικές αλλά και από τις στρατηγικές των άλλων ατόμων του πληθυσμού.

Τα στοχαστικά μοντέλα βοηθούν στην κατανόηση της σταθερότητας των στρατηγικών και των χρονικών διαστημάτων κατά τα οποία κυριαρχούν ή εξαφανίζονται.

Για να εμβαθύνει κανείς στις μαθηματικές πτυχές, πρέπει να χειρίζεται στοχαστικές διαφορικές εξισώσεις (ΣΔΕς) και να κατέχει εργαλεία από τις αλυσίδες *Markov* και τη θεωρία πιθανοτήτων. Για παράδειγμα, μια τυπική ΣΔΕ για τα εξελικτικά δυναμικά μπορεί να έχει τη μορφή:

$$dX_t = f(X_t)dt + \sigma(X_t)dB_t$$

όπου X_t αντιπροσωπεύει την κατάσταση του πληθυσμού, τη χρονική στιγμή t , $f(X_t)$ αντιπροσωπεύει ντετερμινιστικές αλλαγές όπως η επιλογή, και το $\sigma(X_t)dB_t$ αντιπροσωπεύει τις στοχαστικές διακυμάνσεις με B_t έναν όρο της κίνησης *Brown*.

1.2.2 Αριθμητικές προσομοιώσεις

Η επίλυση αυτών των μοντέλων απαιτεί συχνά αριθμητικές προσομοιώσεις, ιδίως όταν οι λύσεις κλειστής μορφής είναι ανέφικτες. Αλγόριθμοι όπως:

1. Η Τεχνική Μαρκοβιανής Αλυσίδας Μόντε Κάρλο (*MCMC*):

Μέθοδοι προσομοίωσης τυχαίων δειγμάτων από πολύπλοκες κατανομές και προσεγγιστικά ολοκληρώματα.

2. Επίλυση στοχαστικών διαφορικών εξισώσεων:

Αυτές περιλαμβάνουν άμεσες και έμμεσες μεθόδους προσαρμοσμένες για να χειρίζονται αποτελεσματικά τα στοχαστικά μέρη.

1.2.3 Προκλήσεις και μελλοντικές προοπτικές

Ενώ τα στοχαστικά μοντέλα παρέχουν ένα πλούσιο πλαίσιο για την κατανόηση του εξελικτικού δυναμικού, εισάγουν επίσης πολυπλοκότητα όσον αφορά τις μαθηματικές και υπολογιστικές προκλήσεις. Η τρέχουσα έρευνα περιλαμβάνει τους εξής τομείς:

1. Μοντελοποίηση πολλαπλής κλίμακας:

Ολοκλήρωση διαδικασιών που λειτουργούν σε διαφορετικές κλίμακες, από το μοριακό έως το πληθυσμιακό επίπεδο.

2. Υβριδικά μοντέλα:

Συνδυασμός ντετερμινιστικών προσεγγίσεων με στοχαστικές προσομοιώσεις για την καταγραφή τόσο των μέσων τάσεων όσο και των τυχαίων διακυμάνσεων.

3. Προσαρμογή και εξαφάνιση:

Κατανόηση της ισορροπίας μεταξύ των προσαρμοστικών αλλαγών και του κινδύνου εξαφάνισης κάποιων ειδών υπό διαφορετικές εξελικτικές πιέσεις.

4. Η ενσωμάτωση των δεδομένων στον πραγματικό κόσμο:

Γεφύρωση του χάσματος μεταξύ των θεωρητικών μοντέλων και των εμπειρικών δεδομένων για την επαλήθευση και την τελειοποίηση των μοντέλων.

1.3 Συμπέρασμα

Ο τομέας της Εξελικτικής Θεωρίας Γραφημάτων συνδυάζει στοχαστικές διαδικασίες με αλγόριθμους. Έχοντας στη διάθεσή μας δύο διαφορετικούς πληθυσμούς (γηγενείς και μη γηγενείς) και εφαρμόζοντας τη διαδικασία του *Moran*, προσπαθούμε να προσεγγίσουμε την πιθανότητα κυριαρχίας του ιού σε ολοκληρω τον πληθυσμό (πιθανότητα αποκατάστασης). Από την άλλη πλευρά, θέλουμε να βρούμε τον χρόνο απορρόφησης της διαδικασίας. Αλλά αν δεχτούμε ότι μετά από $N = O(n^4)$ βήματα, είμαστε σχεδόν βέβαιοι ότι η απορρόφηση έχει ολοκληρωθεί (όλος ο πληθυσμός γίνεται γηγενείς ή μη-γηγενείς), συμπεραίνουμε ότι $\mathbb{P}(\text{εξαφάνισης}) + \mathbb{P}(\text{αποκατάστασης}) = 1$ με ένα αμελητέο σφάλμα. Αρκεί λοιπόν να προσεγγίσουμε μία από τις παραπάνω πιθανότητες και αμέσως έχουμε την προσέγγιση και για την άλλη. Ωστόσο, ο απότερος στόχος μας είναι να βρούμε αποδοτικά φράγματα για τον χρόνο απορρόφησης της διαδικασίας. Το πρόβλημα που μελετάμε έχει πολλαπλές εφαρμογές στην ιατρική. Ειδικότερα, στον ρυθμό εξάπλωσης των ιών, μέσω πληθυσμών όπως κύτταρα και άνθρωποι. Για παράδειγμα, ο κορωνοϊός είναι ένα χαρακτηριστικό παράδειγμα που δείχνει πώς θα μπορούσαμε να προβλέψουμε τον χρόνο της εξάπλωσης του ιού και να παίρναμε τα απαραίτητα μέτρα. Τα εξελικτικά δυναμικά που μοντελοποιούνται μέσω στοχαστικών διαδικασιών παρέχουν ένα περίπλοκο και διεισδυτικό πλαίσιο για την κατανόηση της βιολογικής εξέλιξης. Αναγνωρίζοντας και αποτυπώνοντας με ακρίβεια την εγγενή τυχαιότητα στις διαδικασίες σε επίπεδο πληθυσμού, τα μοντέλα αυτά προσφέρουν μια πιο ολιστική και ρεαλιστική άποψη του τρόπου με τον οποίο η εξέλιξη εξελίσσεται κατά τη διάρκεια των γενεών. Η συνεχής πρόοδος σε αυτό το διεπιστημονικό πεδίο υπόσχεται περαιτέρω γνώσεις σχετικά με τους θεμελιώδεις μηχανισμούς που οδηγούν στην εξέλιξη και τις επιπτώσεις τους σε διάφορα βιολογικά και οικολογικά φαινόμενα. Η κατανόηση και η εργασία με αυτά τα στοχαστικά μοντέλα απαιτούν ισχυρά θεμέλια στα μαθηματικά, ιδίως στη θεωρία πιθανοτήτων, στις στοχαστικές διαδικασίες και στις αριθμητικές μεθόδους, αλλά οι πλούσιες πληροφορίες που προσφέρουν καθιστούν την προσπάθεια αυτή ιδιαίτερα εποικοδομητική. Ο υπολογισμός της πιθανότητας αποκατάστασης στα εξελικτικά δυναμικά είναι ένα κομβικό πρόβλημα, ιδίως στη γενετική των πληθυσμών και τη θεωρητική βιολογία. Η πιθανότητα αποκατάστασης αναφέρεται στην πιθανότητα μια νέα μετάλλαξη, αφού εισαχθεί σε έναν πληθυσμό, να εξαπλωθεί τελικά και να αντικαταστήσει τα υπάρχοντα αλληλόμορφα, αποτελώντας το μοναδικό αλληλόμορφο που υπάρχει στον πληθυσμό. Η έννοια αυτή απορρέει από την κατανόηση του τρόπου με τον οποίο οι πλεονεκτικές, ουδέτερες ή μειονεκτικές μεταλλάξεις συμπεριφέρονται κάτω από τη φυσική επιλογή και τη γενετική παρέκκλιση.

Κεφάλαιο 2

Βασικοί Ορισμοί

2.1 Μαρκοβιανές Αλυσίδες-Markov Chains

Ορισμός 1 Θεωρούμε μια στοχαστική διαδικασία

$$\{X_n, n = 0, 1, 2, \dots\}$$

η οποία έχει πεπερασμένο ή αριθμήσιμα άπειρο πλήθος δεικτών. Από εδώ και στο εξής θα ασχοληθούμε με διαδικασίες διακριτού χρόνου με σύνολο καταστάσεων $S = \{1, 2, \dots, n\}$. Από τα παραπάνω προκύπτει η ιδιότητα της Μαρκοβιανής Αλυσίδας:

$$\mathbb{P}\{X_{n+1} = j | X_n = i, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_1 = i_1, X_0 = i_0\} = P_{ij} \quad (2.1)$$

, για κάθε κατάσταση $i_0, i_1, \dots, i_{n-1}, i, j \in S$: $i_n > i_{n-1} > \dots > i_0$ και για όλα τα $n \geq 0$. Μια τέτοια διαδικασία ονομάζεται Μαρκοβιανή αλυσίδα. Αν $X_n = i$, τότε θα λέμε ότι η διαδικασία βρίσκεται στη κατάσταση i τη χρονική στιγμή n . Υποθέτουμε ότι όταν η διαδικασία βρίσκεται στην κατάσταση i , τότε υπάρχει πιθανότητα $\mathbb{P}_{ij}$ να μεταβεί στην κατάσταση j , τη χρονική στιγμή $n+1$. Η εξίσωση 2.1 μπορεί να ερμηνευθεί ως εξής: Για μια Μαρκοβιανή Αλυσίδα η δεσμευμένη κατανομή οποιασδήποτε μελλοντικής κατάστασης X_{n+1} , δοθέντος τις παρελθοντικές καταστάσεις $X_0, X_1, \dots, X_{n-1}$ και την παρούσα κατάσταση X_n , είναι ανεξάρτητη από τις παρελθοντικές καταστάσεις και εξαρτάται μόνο από την κατάσταση X_n . Αυτό ονομάζεται Μαρκοβιανή ιδιότητα. Η τιμή $\mathbb{P}_{ij}$ ορίζεται ως η πιθανότητα η διαδικασία, όταν βρίσκεται στην κατάσταση i να μεταβεί στην κατάσταση j , την αμέσως επόμενη χρονική στιγμή. Καθώς οι πιθανότητες είναι μη αρνητικές και η διαδικασία πρέπει να κάνει μια μετάβαση σε κάποια κατάσταση προκύπτουν τα παρακάτω: $\mathbb{P}_{ij} \geq 0$ $i, j \in S$ $\sum_{j \in S} \mathbb{P}_{ij} = 1, i = 0, 1, \dots$

Ο Πίνακας πιθανοτήτων μετάβασης $\mathbb{P}_{ij}$ ενός βήματος συμβολίζεται με $\mathbb{P}$, έτσι ώστε:

$$\mathbb{P} = \text{matrix}(p_{ij}), i, j = 0, 1, 2, \dots$$

Αξιοσημείωτες είναι επίσης οι εξισώσεις Chapman-Kolmogorov :

$$1. \mathbb{P}_{ij}^{(n+m)} = \sum_{k=0}^{\infty} \{p_{ik}^{(n)} \cdot p_{kj}^{(m)}\}, \text{ για όλα τα } n, m \geq 0, i, j \in S = \{0, 1, 2, \dots\},$$

όπου $\mathbb{P}_{ij}^{(k)} = \mathbb{P}(X_{l+k} = j | X_l = i)$, για κάθε $k, l \in S$.

και η πιθανότητα εμφάνισης ακολουθίας των καταστάσεων:

2. $\mathbb{P}(X_n = i_n, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_0 = i_0) = p_{i_0} * p_{i_0, i_1} * \dots * p_{i_{n-1}, i_n}$, για όλα τα $n \geq 0$, $i_n > i_{n-1} > \dots > i_0$ [όπου $p_{ij} = \mathbb{P}(X_n = j | X_{n-1} = i)$]

Απόδειξη 1 1. Έχουμε $\forall n, m \geq 1$:

$$\mathbb{P}_{ij}^{(n+m)} = \mathbb{P}(X_{n+m} = j | X_0 = i) =$$

Από την εξίσωση πιθανότητας εμφάνισης ακολουθίας των καταστάσεων έπεται ότι:

$$\implies \mathbb{P}_{ij}^{(n+m)} = \sum_{k \in S} \mathbb{P}(X_{m+n} = j | X_n = k, X_0 = i) * \mathbb{P}(X_n = k | X_0 = i) =$$

Από την Μαρκοβιανή Ιδιότητα προκύπτει:

$$\begin{aligned} \implies \mathbb{P}_{ij}^{(n+m)} &= \sum_{k \in S} \mathbb{P}(X_{m+n} = j | X_n = k) * \mathbb{P}(X_n = k | X_0 = i) = \\ &= p_{ik}^{(n)} * p_{kj}^{(m)} \end{aligned}$$

□

2. Έχουμε:

$$\begin{aligned} &\mathbb{P}(X_n = i_n, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_0 = i_0) = \\ &\mathbb{P}(X_n = i_n | X_{n-1} = i_{n-1}, X_{n-2} = i_{n-2}, \dots, X_0 = i_0) * \mathbb{P}(X_{n-1}, X_{n-2}, \dots, X_0 = i_0) \\ &\text{Επειδή } i_n > i_{n-1} > \dots > i_0. \text{ Από την ιδιότητα Markov προκύπτει:} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \mathbb{P}(X_n = i_n | X_{n-1} = i_{n-1}) * \mathbb{P}(X_{n-1}, X_{n-2}, \dots, X_0 = i_0) = \\ &= \mathbb{P}(X_n = i_n | X_{n-1} = i_{n-1}) * P(X_{n-1} = i_{n-1} | X_{n-2}, X_{n-3} = i_{n-3}, \dots, X_0 = i_0) \\ &\quad * \mathbb{P}(X_{n-2} = i_{n-2}, X_{n-3} = i_{n-3}, \dots, X_0 = i_0) = \\ &= p_{i_{n-1}, i_n} * p_{i_{n-1}, i_{n-2}} * \mathbb{P}(X_{n-2} = i_{n-2}, X_{n-3} = i_{n-3}, \dots, X_0 = i_0) \end{aligned}$$

Επαγωγικά, έπεται το αποτέλεσμα:

$$\mathbb{P}(X_n = i_n, X_{n-1} = i_{n-1}, \dots, X_0 = i_0) = p_{i_0} * p_{i_0, i_1} * \dots * p_{i_{n-1}, i_n}$$

, για όλα τα $n \geq 0$, $i_n > i_{n-1} > \dots > i_0$ □

2.2 Ορισμός του Moran

Μια διαδικασία *Moran* είναι μια απλή στοχαστική διαδικασία που χρησιμοποιείται στην βιολογία για να περιγράψει πεπερασμένους πληθυσμούς. Η διαδικασία ονομάστηκε προς τιμήν του Patrick Moran, ο οποίος ήταν ο πρώτος που πρότεινε το μοντέλο το 1958. Το μοντέλο του μπορεί να εφαρμοσθεί σε ένα ευρύ φάσμα εφαρμογών όπως είναι η μετάλλαξη, η γενετική παραλλαγή και η φυσική επιλεξιμότητα (natural selection). Μπορεί επίσης να περιγράψει την πιθανοτική δυναμική σε έναν πεπερασμένο πληθυσμό σταθερού μεγέθους N , στον οποίο

κάθε άτομο είναι είτε τύπου A, είτε τύπου B. Με άλλα λόγια, έχουμε δύο σύνολα ατόμων που αλληλεπιδρούν ανταγωνιστικά για την κυριαρχία του πληθυσμού. Θεωρείται ότι κάθε άτομο τύπου A ή B αναπαράγεται. Σε κάθε βήμα της διαδικασίας ένα τυχαίο άτομο, τύπου A ή B επιλέγεται ώστε να αναπαραχθεί και ένα τυχαίο άτομο επιλέγεται ώστε να αντικατασταθεί. Ως εκ τούτου, εξασφαλίζουμε ότι το μέγεθος του πληθυσμού παραμένει σταθερό. Για να μοντελοποιήσουμε την επιλεξιμότητα ένας από τους δύο τύπους ατόμων πρέπει να έχει μεγαλύτερη δυναμικότητα και ως αποτέλεσμα να είναι πιο πιθανό να επιλεγεί για αναπαραγωγή. Το ίδιο άτομο είναι δυνατό να επιλεγεί για αναπαραγωγή και για θάνατο στο ίδιο βήμα της διαδικασίας.

2.2.1 Διεργασία Moran

Γράφημα ονομάζεται ένα σύνολο κορυφών, οι οποίες ανά δύο συνδέονται με μια ακμή. Ως ακμή ονομάζουμε τον τρόπο με τον οποίο συσχετίζονται δύο κορυφές. Πλήρες γράφημα ονομάζεται το γράφημα, στο οποίο όλες οι κορυφές του είναι διασυνδεδεμένες μεταξύ τους με ακμές.

Παρακάτω αναφερόμαστε στη θεωρία και τις εφαρμογές του βιβλίου του *Martin A. Nowak* [1].

Κατά την διάρκεια της έρευνάς του για τη διαδικασία *Moran* το 1958, Ο *Patrick Moran* μέχρι τότε, εργαζόταν μόνο πάνω σε πλήρη γραφήματα. Η μελέτη που μας ενδιαφέρει αφορά δύο πληθυσμούς. Κάθε χρονική στιγμή επιλέγεται μια κορυφή i με πιθανότητα ανάλογη της λεγόμενης δυναμικότητας (fitness) της κορυφής. Η παραπάνω διαδικασία μοντελοποιείται σε ένα μη κατευθυνόμενο, μη ομογενές, συνεκτικό, βεβαρημένο γράφημα μετά από έναν μεγάλο αριθμό βημάτων. Κάθε κορυφή (vertex) i συνδέεται με μια άλλη κορυφή j , με μια ακμή (edge). Ειδικότερα, υποθέτουμε ότι έχουμε δύο πληθυσμούς, τους γηγενείς (residents) και τους μεταλλαγμένους ή μη-γηγενείς ή ξένους (mutants). Ξεκινάμε με 1 mutant και $(n - 1)$ residents. Για παράδειγμα, μια κορυφή με δυναμικότητα (fitness r), $r > 0$ σε μια διαδικασία n καταστάσεων θα έχει πιθανότητα επιλογής $p = \frac{r}{n+r-1}$. Στη συνέχεια, η κορυφή i που επιλέχθηκε γεννάει μια κορυφή ίδιου τύπου σε μια γειτονική (adjacent) κορυφή. Αυτή η διαδικασία περιγράφεται με τον στοχαστικό πίνακα $\mathbb{P} = (p_{ij})$, όπου p_{ij} είναι η πιθανότητα η διαδικασία να μεταβεί από την κατάσταση i στην κατάσταση j , για κάθε $i, j \in V$ και ονομάζεται Moran Process ή διεργασία Moran. Όπως σε όλες τις στοχαστικές διαδικασίες παρατηρούμε ότι $\sum_{j \in V} p_{ij} = 1$, όπου V το σύνολο των καταστάσεων. Κάθε $p_{ij} > 0$ υποδηλώνει πως υπάρχει η ακμή από την κορυφή i στην j . Από την άλλη πλευρά, όταν $p_{ij} = 0$ δεν υπάρχει ακμή που συνδέει την κορυφή i με την κορυφή j . Θεωρούμε S ως το σύνολο των μη-γηγενών κατοίκων. Είναι μια διεργασία γεννήσεων-θανάτων με απορροφητικές καταστάσεις $S = \emptyset$ και $S = V$, καθώς μετά από τον αφανισμό ενός από τους δύο πληθυσμούς ο άλλος θα επικρατεί επάπειρον. Το ενδιαφέρον βρίσκεται στις πιθανότητες κυριαρχίας ενός πληθυσμού, οι οποίες ανοίγουν άλλους ορίζοντες στο πρόβλημα. Χωρίς βλάβη στην γενικότητα, θεωρούμε $\mathbb{P}(\text{Fixation}) + \mathbb{P}(\text{Extinction}) = 1$ μετά από έναν μεγάλο αριθμό βημάτων $N \rightarrow \infty$. Ξεκινώντας με τις απλές περιπτώσεις θεωρούμε ως κατώφλι (threshold) το πλήρες, ισοβεβαρημένο γράφημα $w_{ij} = \frac{1}{n}$, για κάθε i, j

με $f_{K_n,r} = \mathbb{P}(\text{fixation}) = \frac{1-\frac{1}{r}}{1-\frac{1}{r^n}}$, όπου $r, r > 0$ τη δυναμικότητα (fitness) του μεταλλαγμένου πληθυσμού και n το πλήθος των καταστάσεων της Μαρκοβιανής Αλυσίδας. Προφανώς κάθε χρονική στιγμή, που ενδεχομένως αλλάζει η σύσταση του πληθυσμού, εξαρτάται μόνο από την προηγούμενη εξ' ορισμού:

$$\mathbb{P}(X_n = t_n | X_{n-1} = t_{n-1}) = \mathbb{P}(X_n = t_n | X_0 = t_0, X_1 = t_1, \dots, X_{n-1} = t_{n-1})$$

, με $t_0 < t_1 < \dots < t_n$.

Απόδειξη 2 Θεωρούμε πως $r \geq 1$ και έστω ότι βρισκόμαστε στην κατάσταση x με i mutants, όπου $\{i = 1, 2, \dots, n-1\}$, τότε έχουμε ένα κλασικό πρόβλημα πιθανότητας με $\mathbb{P}_{(i,i+1)} = \frac{r}{n-i+ri}$, $\mathbb{P}_{(i,i-1)} = \frac{1}{n-i+ri}$. [1] Είναι προφανές ότι για $r = 1$ η ζητούμενη πιθανότητα ισούται με $p = \frac{1}{n}$ και πως η διαδικασία διεκπεραιώνεται με ρυθμούς ενός βήματος και πως για $i = 0$, n έχουμε απορρόφηση. Δηλαδή, $\mathbb{P}_{i,i} = \mathbb{P}_{n-i,n-i} = 1 - \mathbb{P}_{(i,i+1)} - \mathbb{P}_{(i,i-1)}$ και στις ακραίες καταστάσεις το πρόβλημα είναι τετριμμένο, αντίστοιχα. Επομένως, από τα παραπάνω κι αν δούμε την διαδικασία σαν μια Μαρκοβιανή Αλυσίδα γεννήσεων-θανάτων γράφουμε το forward bias:

$$\gamma_m = \mathbb{P}_{(i,i-1)} / \mathbb{P}_{(i,i+1)} = \frac{\frac{1}{n-i+ri}}{\frac{r}{n-i+ri}} = 1/r$$

και

$$\begin{aligned} p &= \frac{1}{1 + \sum_{k=1}^{n-1} \prod_{m=1}^k \gamma_m} \\ \implies p &= \frac{1}{1 + \sum_{k=1}^{n-1} \left(\frac{1}{r}\right)^k} \\ \xrightarrow{\frac{1}{r} < 1} p &= \frac{1}{1 + \frac{\frac{1}{r} - \frac{1}{r^n}}{1 - \frac{1}{r}}} \\ \implies p &= \frac{1}{\frac{1 - \frac{1}{r}}{1 - \frac{1}{r}} + \frac{\frac{1}{r} - \frac{1}{r^n}}{1 - \frac{1}{r}}} \\ \iff p &= \frac{1 - \frac{1}{r}}{1 - \frac{1}{r^n}} \end{aligned}$$

Έπεται ότι $f_{K_n,r} = p = \frac{1-\frac{1}{r}}{1-\frac{1}{r^n}}$, το ζητούμενο αποτέλεσμα.

Το ίδιο αποτέλεσμα παίρνουμε και για τον κατευθυνόμενο και τον μη κατευθυνόμενο κύκλο με την απόδειξη να είναι επίσης ίδια.

Line and Burst

[1]

Στην ειδική περίπτωση, όπου ο μεταλλαγμένος εμφανιστεί, είτε στην αρχή της αλυσίδας σε ευθεία γραμμή, είτε στο κέντρο της αλυσίδας του κύκλου, η πιθανότητα αποκατάστασης του πληθυσμού είναι σταθερή και ίση με $p = \frac{r}{n+r-1}$. Η απόδειξη είναι προφανής, καθώς η πιθανότητα επιλογής της μεταλλαγμένης κορυφής επιφέρει σίγουρο αφανισμό του πληθυσμού των κατοίκων residents. Σε αντίθετη περίπτωση, όλες οι υπόλοιπες καταστάσεις είναι επαναληπτικές, επομένως δεν θα υπάρξει ποτέ fixation ούτε extinction (η μοναδική μεταβατική κατάσταση ξεκινά από τον μεταλλαγμένο).

Amplifiers and Suppressors

[1]

Κάθε διαδικασία με πιθανότητα αποκατάστασης $p_M = \frac{1-\frac{1}{r}}{1-\frac{1}{r^n}}$ ονομάζεται ρ -ισοδύναμη με την διεργασία Moran και είναι απόλυτα ισορροπημένη μεταξύ επιλογής και παρασυρμού (selection and drift).

Αρχικά, θα αναλύσουμε την επίδραση που έχει η δομή ενός ομογενούς πληθυσμού στα εξελικτικά δυναμικά. Αυτό γίνεται τοποθετώντας κάθε άτομο του πληθυσμού σε κορυφή ενός βεβαρημένου, κατευθυνόμενου γραφήματος. Οι ακμές του γραφήματος καθορίζουν την ανταγωνιστική αλληλεπίδραση μεταξύ διαφορετικών ατόμων. Αν υπάρχει ακμή από την κορυφή i στην κορυφή j , τότε σε μια διαδικασία γεννήσεων-θανάτων ο απόγονος του i , μπορεί να αντικαταστήσει τον j . Το γράφημα μπορεί να αντιπροσωπεύει μια δομή μεταξύ φυτών ή ζώων σε ένα οικοσύστημα. Το γράφημα μπορεί, επίσης, να περιγράφει την αρχιτεκτονική κυττάρων σε έναν πολυκύτταρο οργανισμό, εμπεριέχοντας διαφορετική κυτταρική ιεραρχία. Κάθε άτομο του πληθυσμού αντιπροσωπεύεται από μια κορυφή i που ανήκει στο $V = \{1, \dots, n\}$ και έχει δύο πιθανούς τύπους: K (γηγενής κάτοικος) και M (μη-γηγενής κάτοικος). Συμβολίζουμε με V το σύνολο των κορυφών, $n = |V|$ και τα σύνολα των K, M ακμών με E_K, E_M , αντίστοιχα. Οι διασυνδέσεις των κορυφών πραγματοποιούνται με άμεσες ακμές. Μια κορυφή i έχει έναν τύπο K ή M και είναι άμεσα διασυνδεδεμένη με μια κορυφή j , αν και μόνο αν όταν επιλέγεται η i υπάρχει θετική πιθανότητα ο απόγονος της να αντικαταστήσει την j . Ο τύπος μιας κορυφής καθορίζει τη δυναμικότητα της. Οι K -κορυφές έχουν δυναμικότητα 1, ενώ οι M -κορυφές έχουν δυναμικότητα $r > 0$. Η διαδικασία λειτουργεί ως εξής: ξεκινάμε με k κορυφές τύπου K και $n - k$ κορυφές τύπου M , με k, n φυσικούς και $n \geq k$. Θεωρούμε διακριτό χρόνο, σε κάθε βήμα (χρονική στιγμή) μια κορυφή i επιλέγεται με πιθανότητα ανάλογη της δυναμικότητας της και αντιγράφει τον τύπο της σε μια γειτονική κορυφή j στο γράφημα, με πιθανότητα που καθορίζεται από το βάρος κάθε ακμής (ij). Μετά από κάθε βήμα υπάρχουν 3 πιθανά αποτελέσματα:

1. Μια κορυφή προστίθεται στο σύνολο των M -κορυφών, έστω S υποσύνολο του V

2. Μια κορυφή διαγράφεται από το S

3. Το S παραμένει το ίδιο (άρα και το $V - S$)

Αν τα δύο γραφήματα είναι ισχυρά διασυνδεδεμένα η διαδικασία ολοκληρώνεται με πιθανότητα 1 σε πεπερασμένο αριθμό βημάτων, όπου προκύπτει $S = \emptyset$ (extinction-αφανισμός πληθυσμού M) ή $S = V$ (fixation-αποκατάσταση πληθυσμού M).

2.3 Martingales

Παρακάτω θα δώσουμε τους ορισμούς των *martingales*, *submartingales* και *supermartingales*.

Ορισμός 2 Μια στοχαστική διαδικασία $\{Z_n, n \in N\}$ λέγεται ότι είναι *Martingale* αν $E[|Z_n|] < \infty$ για όλα τα n και επιπλέον

$$E[Z_{n+1}|Z_1, Z_2, \dots, Z_n] = Z_n \quad (2.2)$$

. Μια *Martingale* είναι μια γενικευμένη εκδοχή ενός δίκαιου παιχνιδιού. Δηλαδή, αν ερμηνεύσουμε την Z_n ως την περιουσία του παίκτη μετά το n -οστό παιχνίδι, τότε η 2.2 λέει ότι η αναμενόμενη περιουσία του μετά το $(n+1)$ -οστό παιχνίδι είναι ίση με την περιουσία του στο n -οστό παιχνίδι, ανεξάρτητα από το τι προηγήθηκε στα προηγούμενα $(n-1)$ παιχνίδια.

Παίρνοντας τις αναμενόμενες τιμές της 2.2 προκύπτει η γνωστή ισότητα: $E[Z_{n+1}] = E[Z_n]$ και ως εκ τούτου $E[Z_n] = E[Z_0]$ για όλα τα n .

Ορισμός 3 Μια στοχαστική διαδικασία $\{Z_n, n \in N\}$ λέγεται ότι είναι *Submartingale* αν $E[|Z_n|] < \infty$ για όλα τα n και επιπλέον

$$E[Z_{n+1}|Z_1, Z_2, \dots, Z_n] \geq Z_n \quad (2.3)$$

. Μια *Submartingale* είναι μια γενικευμένη εκδοχή ενός πειραγμένου παιχνιδιού. Δηλαδή, αν ερμηνεύσουμε την Z_n ως την περιουσία του παίκτη μετά το n -οστό παιχνίδι, τότε η 2.3 λέει ότι η αναμενόμενη περιουσία του μετά το $(n+1)$ -οστό παιχνίδι είναι μεγαλύτερη από την περιουσία του στο n -οστό παιχνίδι, ανεξάρτητα από το τι προηγήθηκε στα προηγούμενα $(n-1)$ παιχνίδια.

Παίρνοντας τις αναμενόμενες τιμές της 2.3 προκύπτει η γνωστή ισότητα: $E[Z_{n+1}] \geq E[Z_n]$ και ως εκ τούτου $E[Z_n] \geq E[Z_0]$ για όλα τα n .

Ορισμός 4 Μια στοχαστική διαδικασία $\{Z_n, n \in N\}$ λέγεται ότι είναι *Supermartingale* αν $E[|Z_n|] < \infty$ για όλα τα n και επιπλέον

$$E[Z_{n+1}|Z_1, Z_2, \dots, Z_n] \leq Z_n \quad (2.4)$$

. Μια *Supermartingale* είναι μια γενικευμένη εκδοχή ενός πειραγμένου παιχνιδιού. Δηλαδή, αν ερμηνεύσουμε την Z_n ως την περιουσία του παίκτη μετά το n -οστό παιχνίδι, τότε η 2.4 λέει ότι η αναμενόμενη περιουσία του μετά το $(n+1)$ -οστό παιχνίδι είναι μικρότερη από την περιουσία του στο n -οστό παιχνίδι, ανεξάρτητα από το τι προηγήθηκε στα προηγούμενα $(n-1)$ παιχνίδια.

Παίρνοντας τις αναμενόμενες τιμές της 2.4 προκύπτει η γνωστή ισότητα: $E[Z_{n+1}] \leq E[Z_n]$ και ως εκ τούτου $E[Z_n] \leq E[Z_0]$ για όλα τα n .

2.3.1 Πιθανότητα Αποκατάστασης (Fixation Probability)

Παρακάτω θα δώσουμε τον ορισμό της πιθανότητας αποκατάστασης.

Ορισμός 5 Πιθανότητα αποκατάστασης ενός πληθυσμού σε μια διεργασία Moran ονομάζεται η πιθανότητα τα άτομα (κορυφές τύπου) M (μη-γηγενείς κάτοικοι) να επιβάλλουν τους απογόνους τους στα άτομα (κορυφές τύπου) K (γηγενείς κάτοικοι). Πιθανότητα αφανισμού του πληθυσμού σε μια διεργασία Moran ονομάζεται η πιθανότητα τα άτομα (κορυφές τύπου) K να επιβάλλουν τους απογόνους τους στα άτομα (κορυφές τύπου) M .

Αμφότερες είναι καταστάσεις απορρόφησης και ως εκ τούτου σε μια διεργασία Moran η Μαρκοβιανή Αλυσίδα καταλήγει, είτε στην κατάσταση αποκατάστασης του πληθυσμού, είτε στην κατάσταση αφανισμού σχεδόν με πιθανότητα 1.

2.3.2 Ενισχυτές και Καταπιεστές (Amplifiers and Suppressors)

Παρακάτω θα δώσουμε τους ορισμούς των ενισχυτών και των καταπιεστών.

Ορισμός 6 Σε μια διεργασία Moran η ιδανική περίπτωση είναι το πλήρες γράφημα (ισοβεβαρημένο), όπου η πιθανότητα αποκατάστασης του πληθυσμού συμβολίζεται με $f_{Moran} = (1 - 1/r)/(1 - 1/r^n)$ στο γράφημα $G(V, E)$.

Ως Ενισχυτής (Amplifier of Selection) της επιλεξιμότητας χαρακτηρίζεται το γράφημα G , όταν η πιθανότητα αποκατάστασής του: $f_G > f_{Moran}$ και $r > 1$ ή $f_G < f_{Moran}$ και $r < 1$, επειδή ευνοεί τον πληθυσμό τύπου M , όταν είναι ισχυρότερος και τον αδικεί όταν είναι ασθενέστερος.

Ως Καταπιεστής (Suppressor of Selection) της επιλεξιμότητας χαρακτηρίζεται το γράφημα G , όταν η πιθανότητα αποκατάστασής του: $f_G < f_{Moran}$ και $r > 1$ ή $f_G > f_{Moran}$ και $r < 1$, διότι αδικεί τον πληθυσμό τύπου M , όταν είναι ισχυρότερος και τον ευνοεί όταν είναι ασθενέστερος.

2.4 Εφαρμογές και Παραδείγματα

Παρακάτω θα κάνουμε μερικά παραδείγματα και εφαρμογές [4].

1. Ο Γενικευμένος Τυχαίος Περίπατος:

Έστω $X_i, i \geq 1$, είναι ανεξάρτητες και όμοια κατανομημένες με

$$\mathbb{P}(X_i = j) = a_j, j = \dots, -1, 0, 1, \dots$$

Αν θεωρήσουμε

$$S_0 = 0 \text{ και } S_n = \sum_{i=1}^n X_i$$

τότε η $\{S_n, n \geq 0\}$ είναι η Μαρκοβιανή Αλυσίδα για την οποία:

$$\mathbb{P}_{ij} = a_{j-i}$$

Η $\{S_n, n \geq 0\}$ ονομάζεται Γενικευμένος Τυχαίος Περίπατος.

2. Η Απόλυτη Τιμή του Απλού Τυχαίου Περιπάτου:

Ο τυχαίος περίπατος $\{S_n, n \geq 1\}$, όπου $S_n = \sum_{i=1}^n X_i$, είναι ο απλός τυχαίος περίπατος για κάποιο $p : 0 < p < 1$ και

$$\mathbb{P}(X_i = 1) = p$$

$$\mathbb{P}(X_i = -1) = q = 1 - p$$

Επομένως, ο απλός τυχαίος περίπατος είναι μια διαδικασία που πάντα κάνει 1 βήμα προς τα δεξιά με πιθανότητα p και 1 βήμα προς τα αριστερά με πιθανότητα $q = 1 - p$. Τώρα, αν θεωρήσουμε $|S_n|$ ως την απόλυτη τιμή του απλού τυχαίου περιπάτου, τότε η διαδικασία $\{S_n, n \geq 1\}$ αντιπροσωπεύει την απόλυτη απόσταση του απλού τυχαίου περιπάτου από την αφετηρία, σε κάθε βήμα. Η $\{|S_n|, n \geq 1\}$ είναι Μαρκοβιανή Αλυσίδα. Αυτό αποδεικνύεται εύκολα, καθώς αν $|S_n| = i$, τότε ανεξάρτητα από τις προηγούμενες καταστάσεις έχουμε:

$$\mathbb{P}(|S_n| = i | S_{n-1} = i_{n-1}, \dots, S_1 = i_1) = \frac{p^i}{p^i + q^i}$$

Σε αντίθεση με την Μαρκοβιανή Αλυσίδα $\{S_n, n \geq 1\}$, που:

$$\mathbb{P}(S_n = i | S_{n-1} = i_{n-1}, \dots, S_1 = i_1) = \frac{p^x q^y}{p^i + q^i}, \text{ όπου } x, y \in \{0, 1, \dots, i\} : x+y = i$$

3. Ένα Μοντέλο Μαρκοβιανής Αλυσίδας με Αλγοριθμική Αποτελεσματικότητα:

Ορισμένοι Αλγόριθμοι στην επιχειρησιακή έρευνα και στην πληροφορική στοχεύουν στον καθορισμό του βέλτιστου στοιχείου από ένα διατεταγμένο σύνολο με N στοιχεία. Ο αλγόριθμος ξεκινά με ένα από τα στοιχεία και διαδοχικά βελτιστοποιεί το παρόν στοιχείο με ένα καλύτερο μέχρι να φτάσει στο βέλτιστο. Η πιο σημαντική εφαρμογεί βρίσκεται στον αλγόριθμο *Simplex* του γραμμικού προγραμματισμού, ο οποίος στοχεύει στην μεγιστοποίηση της γραμμικής συνάρτησης f υπό γραμμικούς περιορισμούς. Αν εξετάσουμε την χειρότερη περίπτωση ως προς την αποτελεσματικότητα του αλγορίθμου, τότε μπορούμε να βρούμε τη λύση σε $N - 1$ βήματα.

Τώρα, θα θεωρήσουμε μια Μαρκοβιανή Αλυσίδα,, η οποία ξεκινά από την χειρότερη κατάσταση. Από οποιαδήποτε κατάσταση μεταβαίνει με ίδια πιθανότητα σε οποιαδήποτε άλλη κατάσταση καλύτερη από την προηγούμενη. Η βέλτιστη κατάσταση είναι απορροφητική.

Έστω $\mathbb{P}_{11} = 1$ και

$$\mathbb{P}_{ij} = \frac{1}{i-1}, j = 1, \dots, i-1, i > 1$$

Έστω T_i : ο αριθμός των μεταβάσεων από την κατάσταση i στην κατάσταση 1. Προκύπτει η αναδρομική σχέση για τα

$$\mathbb{E}[T_i] = 1 + \frac{1}{i-1} \sum_{j=1}^{i-1} \mathbb{E}[T_j]$$

Ξεκινώντας με το $\mathbb{E}[T_1] = 0$ διαδοχικά παρατηρούμε ότι:

$$\mathbb{E}[T_2] = 1$$

$$\mathbb{E}[T_3] = 1 + \frac{1}{2}$$

$$\mathbb{E}[T_3] = 1 + \frac{1}{3}\left(1 + 1 + \frac{1}{2}\right) = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3}$$

και είναι φανερό ότι επαγωγικά προκύπτει:

$$\mathbb{E}[T_i] = \sum_{j=1}^{i-1} \frac{1}{j}$$

Ωστόσο για να περιγράψουμε πλήρως την T_N , θα χρησιμοποιήσουμε την δε-
ίκτη συνάρτηση I_j ως εξής:

$$T_N = \sum_{j=1}^{N-1} I_j$$

, όπου

$$I_j = \begin{cases} 1 & , \text{αν η διαδικασία μεταβεί στην } j \\ 0 & , \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

Με το επόμενο λήμμα, θα κατανοήσουμε πλήρως τη σημασία του παραπάνω συμβολισμού.

Λήμμα 1 Έστω $I_1, \dots, I_N$ ανεξάρτητες και

$$\mathbb{P}(I_j = 1) = \frac{1}{j}, \text{ όπου } j : 1 \leq j \leq N - 1$$

[4]

Απόδειξη 3 Δοθέντος τα $I_{j=1}, \dots, I_N$ αν $n = \min\{i : i > j, I_i = 1\}$. Τότε:

$$\mathbb{P}(I_j = 1 | I_{j+1}, \dots, I_N) = \frac{\frac{1}{n-1}}{\frac{j}{n-1}} = \frac{1}{j}$$

[4]

Κεφάλαιο 3

Απαραίτητα Εργαλεία

3.1 Το Υπόβαθρο-Background

Τα πληθυσμιακά και εξελικτικά δυναμικά έχουν μελετηθεί διεξοδικά τα τελευταία χρόνια. Ένα από τα κύρια μοντέλα σε αυτό το πεδίο είναι η διαδικασία του *Moran*. Ο αρχικός πληθυσμός περιέχει μόνο ένα μη-γηγενή κάτοικο με δυναμικότητα $r > 0$ και όλους τους υπόλοιπους (γηγενείς) κατοίκους με δυναμικότητα 1. Σε κάθε βήμα ένα άτομο επιλέγεται τυχαία με πιθανότητα ανάλογη της δυναμικότητάς του. Το άτομο αυτό αναπαράγεται, αντικαθιστώντας ένα άλλο άτομο, που επιλέγεται τυχαία και ομοιόμορφα, με τους απογόνους του. Τα πληθυσμιακά δυναμικά έχουν μελετηθεί επίσης με την έννοια της στρατηγικής αλληλεπίδρασης στην εξελικτική θεωρία παιγνίων. Ο Lieberman, Hauert [5] και Nowak [1] εισήγαγαν μια γενίκευση της διαδικασίας Moran, στην οποία τα μέλη του πληθυσμού τοποθετούνται πάνω σε κορυφές ενός συνεκτικού γραφήματος, το οποίο γενικά είναι κατευθυντικό. Στο μοντέλο αυτό, ο αρχικός πληθυσμός πάλι αποτελείται από έναν μη-γηγενή κάτοικο δυναμικότητας $r > 0$, τοποθετημένη σε μια κορυφή που επιλέγεται τυχαία και ομοιόμορφα και κάθε άλλον κάτοικο δυναμικότητας 1 να τοποθετείται στις υπόλοιπες κορυφές ως γηγενής. Ο κάτοικος που θα αναπαραχθεί επιλέγεται, όπως και προηγουμένως, ωστόσο τώρα ένας από τους γείτονες του επιλέγεται τυχαία για να αντικατασταθεί από τα παιδιά του αναπαραγόμενου κατοίκου, είτε ομοιόμορφα, είτε βάσει των βαρών των ακμών. Η αυθεντική διαδικασία Moran μπορεί να αποκατασταθεί πάλι αν θεωρήσουμε το ισοβεβαρημένο, πλήρες γράφημα. Στην παρούσα πτυχιακή, θεωρούμε τη διαδικασία σε ένα πεπερασμένο, ισοβεβαρημένο μη-κατευθυντικό γράφημα.

Πολλά παρόμοια μοντέλα που περιγράφουν την αλληλεπίδραση μεταξύ σωματιδίων έχουν μελετηθεί πριν από αυτό της διαδικασίας *Moran*, όπως το SIR και το SIS επιδημιακό μοντέλο, το μοντέλο της ψήφου και το μοντέλο της αντιψήφου. Συσχετιζόμενα μοντέλα όπως το “deceasing cascade model” έχουν μελετηθεί ως προς την έννοια της επιρροής της αναπαραγωγής στα κοινωνικά δίκτυα και στην δυναμική μονοπωλίων. Ωστόσο, κανένα από τα παραπάνω δεν λειτουργεί για πληθυσμούς με διαφορετική δυναμικότητα (ιεραρχία) [5].

Γενικά, η διαδικασία *Moran* σε ένα συνεκτικό, κατευθυντικό γράφημα μπορεί να ολοκληρωθεί, είτε με τους μη-γηγενείς κατοίκους να κατοχυρώνουν όλες τις κορυφές, είτε με τους γηγενείς κατοίκους να κατακτούν όλες τις κορυφές. Οι

παραπάνω περιπτώσεις θα αναφέρονται ως αποκατάσταση ή αφανισμός πληθυσμού αντίστοιχα. Αν η διαδικασία δεν καταλήξει σε καμία από τις παραπάνω απορροφητικές καταστάσεις, τότε μπορεί να συνεχίζει επ'άπειρον. Ωστόσο, για πεπερασμένα μη-κατευθυντικά γραφήματα και πεπερασμένα ισχυρά διασυνδεδεμένα διγράμματα, η διαδικασία τερματίζει σχεδόν σίγουρα σε μία από τις δύο απορροφητικές καταστάσεις που περιγράψαμε παραπάνω. Από την άλλη, η αποκατάσταση είναι αδύνατη σε ένα κατευθυντικό γράφημα με κορυφές x, y, z και ακμές $\{x \rightarrow y, x \rightarrow z\}$ και ο αφανισμός είναι επίσης αδύνατος αν επιλεγεί ως μη γηγενής μια από τις κορυφές x, y [5]. Η πιθανότητα αποκατάστασης για έναν μη-γγενή κάτοικο δυναμικότητας r σε ένα γράφημα G είναι η πιθανότητα η διαδικασία να καταλήξει στην απορροφητική κατάσταση αποκατάστασης και συμβολίζεται με $f_{G,r}$ από εδώ και στο εξής.

Η πιθανότητα αποκατάστασης μπορεί, κατά κανόνα, να υπολογιστεί ακριβώς από γνωστές τεχνικές που χρησιμοποιούνται σε μια Μαρκοβιανή Αλυσίδα. Ωστόσο, αν το δοκιμάσουμε αυτό σε ένα γενικευμένο γράφημα n κορυφών απαιτεί να λύσουμε ένα σύνολο (δυναμοσύνολο του συνόλου n κορυφών) $2^{|V|}$ γραμμικών εξισώσεων, το οποίο είναι πρακτικά υπολογιστικά δύσκολο για μεγάλες τιμές του n . Για παράδειγμα για $n = 15$, που είναι πολύ μικρό για τις εφαρμογές μας, ο καλύτερος υπολογιστής που μπορούμε να προμηθευτούμε θα χρειαστεί μέρες για να λύσει το σύστημα. Ως αποτέλεσμα, η συγκεκριμένη μέθοδος που έγινε ώστε να υπολογιστεί η πιθανότητα αποκατάστασης στην γενικευμένη διαδικασία *Moran* μπορεί να εφαρμοστεί μόνο σε μικρά γραφήματα ή σε κλάσεις γραφημάτων, που έχουν κάποιο βαθμό συμμετρίας, οπότε μειώνεται το μέγεθος του συνόλου καταστάσεων. Επί παραδείγματι, μονοπάτια, κύκλοι, αστέρια και πλήρη γραφήματα.

Λόγω της δυσκολίας εύρεσης ακριβούς λύσης που περιγράψαμε παραπάνω, στρεφόμαστε στις προσεγγίσεις της λύσης. Χρησιμοποιώντας ένα επιχείρημα, μέσω κατάλληλης συνάρτησης δυναμικού προκύπτει το εξής: Με μεγάλη πιθανότητα (σχεδόν βέβαια) η διαδικασία *Moran* σε ένα μη-κατευθυντικό γράφημα n κορυφών με μοναδικό μη-γγενή κάτοικο επιλεγμένο τυχαία και ομοιόμορφα, φτάνει σε απορροφητική κατάσταση (αποκατάσταση ή αφανισμού του πληθυσμού).

3.2 Ιδιότητα Μέσης Τιμής

Ορισμός 7 Έστω ότι οι X, Y είναι πραγματικές τυχαίες μεταβλητές, ορισμένες σ' έναν δειγματικό χώρο Ω , με τιμές σε πεπερασμένα σύνολα $\mathbb{X}$ και $\mathbb{Y}$, αντίστοιχα. Τότε η $\mathbb{E}[X|Y]$ είναι η μοναδική συνάρτηση της Y για την οποία:

$$\mathbb{E}[X] = \mathbb{E}[\mathbb{E}(X|Y)]$$

Απόδειξη 4 Έχουμε $\forall X, Y$ πεπερασμένες πραγματικές τυχαίες μεταβλητές:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(X) &= \sum_{x \in \mathbb{X}} [x \mathbb{P}(X = x)] = \\ &= \sum_{x \in \mathbb{X}} \sum_{y \in \mathbb{Y}} [x \mathbb{P}(X = x|Y = y) \mathbb{P}(Y = y)] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{y \in \mathbb{Y}} \left(\sum_{x \in \mathbb{X}} x \mathbb{P}(X = x | Y = y) \right) \mathbb{P}(Y = y) \\
 &= \sum_{y \in \mathbb{Y}} \mathbb{E}(X | Y) \mathbb{P}(Y = y) = \mathbb{E}(\mathbb{E}(X | Y))
 \end{aligned}$$

□

3.3 Χρήσιμες Ανισότητες

3.3.1 Ανισότητα Markov

Λήμμα 2 Έστω X μια μη-αρνητική τυχαία μεταβλητή και $a > 0$, τότε η πιθανότητα το X να είναι τουλάχιστον a είναι το πολύ η αναμενόμενη τιμή του X διαιρεμένη με a . Με μαθηματικούς όρους από την ανισότητα Markov:

$$\mathbb{P}(X \geq a) \leq \frac{\mathbb{E}(X)}{a}$$

Απόδειξη 5 Έχουμε $\mathbb{E}(X) = \mathbb{P}(X < a) \cdot \mathbb{E}(X | X < a) + \mathbb{P}(X \geq a) \cdot \mathbb{E}(X | X \geq a)$. Καθώς $a > 0$ η ποσότητα $\mathbb{P}(X < a) \cdot \mathbb{E}(X | 0 < X < a) > 0$ και η δεσμευμένη μέση τιμή $\mathbb{E}(X | X \geq a) \geq a$. Από τα παραπάνω εύκολα έπεται ότι

$$\mathbb{E}(X) \geq \mathbb{P}(X \geq a) \cdot a \implies$$

$$\mathbb{P}(X \geq a) \leq \frac{\mathbb{E}(X)}{a}$$

, το ζητούμενο. □

3.3.2 Λήμμα Hoeffding

Λήμμα 3 Έστω X μια πραγματική τυχαία μεταβλητή με $0 \leq X \leq 1$ σχεδόν βέβαια. Τότε $\forall \lambda \in \mathbb{R}$ ισχύει:

$$\mathbb{E}[e^{\lambda(X - \mathbb{E}(X))}] \leq e^{\left(\frac{\lambda^2}{8}\right)}$$

3.3.3 Ανισότητα Hoeffding

Λήμμα 4 Έστω X_i ανεξάρτητες, τυχαίες μεταβλητές με $0 \leq X_i \leq 1$ και $p_n = \sum_{i=1}^n X_i$. Τότε $\forall t \geq 0$, από την ανισότητα Hoeffding, ισχύει η παρακάτω σχέση:

$$\mathbb{P}[|p_n - \mathbb{E}(p_n)| \geq t] \leq 2 \exp\left(\frac{-2t^2}{n}\right)$$

Απόδειξη 6 $\forall \lambda, t > 0$, από την ανισότητα Markov 2 και την ανεξαρτησία των X_i έχουμε:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(p_n - \mathbb{E}[p_n] \geq t) &= \mathbb{P}\left(e^{\lambda(p_n - \mathbb{E}[p_n])} \geq e^{\lambda t}\right) \leq \frac{\mathbb{E}[e^{\lambda(p_n - \mathbb{E}[p_n])}]}{e^{\lambda t}} \\ &= e^{-\lambda t} \cdot \mathbb{E}[e^{\lambda \sum_{i=1}^n X_i - \mathbb{E}(X_i)}] \leq e^{-\lambda t} \cdot \prod_{i=1}^n \mathbb{E}\left[e^{X_i - \mathbb{E}(X_i)}\right] \end{aligned}$$

Από το λήμμα του Hoeffding έχουμε:

$$\mathbb{P}(p_n - \mathbb{E}[p_n] \geq t) \leq e^{-\lambda t} \cdot \prod_{i=1}^n e^{\frac{1}{8}\lambda^2} \implies$$

$$\mathbb{P}(p_n - \mathbb{E}[p_n] \geq t) \leq e^{\frac{\lambda^2 n}{8} - \lambda t}$$

Το παραπάνω άνω φράγμα είναι βέλτιστο, όταν ελαχιστοποιήσουμε τη συνάρτηση $\Phi(\lambda) = \frac{\lambda^2 n}{8} - \lambda t$, για $\lambda, t, n > 0$ Εύκολα αποδεικνύουμε ότι:

$$\frac{\partial \Phi(\lambda)}{\partial \lambda} = \frac{\lambda n}{4} - t$$

και

$$\frac{\partial^2 \Phi(\lambda)}{\partial \lambda^2} = \frac{n}{4} > 0$$

Συνεπώς, έχουμε ελάχιστο στο $\lambda = \frac{4t}{n}$. Ανακεφαλαιώνοντας, παίρνουμε:

$$\mathbb{P}(p_n - \mathbb{E}[p_n] \geq t) \leq e^{\frac{(\frac{4t}{n})^2 n}{8} - \frac{4t}{n} t} = e^{\frac{2t^2}{n}} \leq 2e^{\frac{2t^2}{n}}$$

,το ζητούμενο. $\square$

Θεώρημα 1 Θεώρημα Σταματήματος ή Τερματισμού [2] Έστω $(M_n)_{n \geq 0}$ μία martingale και T ένας χρόνος τερματισμού. Υποθέτουμε ότι τουλάχιστον μία από τις παρακάτω συνθήκες ισχύει:

$$(i) \exists n : T \leq n$$

$$(ii) T < \infty \text{ και } |M_n| < C, \text{ όταν } T \geq n$$

Τότε $\mathbb{E}[M_T] = \mathbb{E}[M_0]$.

Απόδειξη 7 Έστω ότι ισχύει το (i). Για $T < n$, το αποτέλεσμα προκύπτει άμεσα από τον ορισμό της martingale. Αλλιώς έχουμε:

$$\begin{aligned} M_T - M_0 &= (M_T - M_{T-1}) + (M_{T-1} - M_{T-2}) + \dots + (M_1 - M_0) = \\ &= \sum_{l=1}^n (M_l - M_{l-1})_{l < T} \end{aligned}$$

Αν θεωρήσω ως $\mathbb{F}_n$: τις μεταβάσεις $(X_i)_{i \geq 0}$ της αλυσίδας μέχρι τη χρονική στιγμή n , τότε για κάποιο $n : T \leq n$ προκύπτει:

$$\mathbb{E}[(M_l - M_{l-1})|\mathbb{F}_n] = 0, \forall l < T$$

, από τον ορισμό της *martingale*. Συνεπώς,

$$\mathbb{E}(M_T - M_0) = \mathbb{E}\left(\sum_{l=1}^n (M_l - M_{l-1})\right) = \sum_{l=1}^n \mathbb{E}(M_l - M_{l-1}) = 0 \implies$$

$$\mathbb{E}(M_T) - \mathbb{E}(M_0) = 0 \implies \mathbb{E}(M_T) = \mathbb{E}(M_0)$$

, το αποτέλεσμα που επιθυμούσαμε. Έστω ότι ισχύει το (ii). Τότε παρόμοια έχουμε:

$$\begin{aligned} M_T - M_0 &= (M_T - M_{T-1}) + (M_{T-1} - M_{T-2}) + \dots + (M_1 - M_0) = \\ &= \sum_{l=1}^T (M_l - M_{l-1})_{l \leq T} \end{aligned}$$

Έστω τ ένας χρόνος τερματισμού, τέτοιος ώστε $\mathbb{E}M_\tau = \mathbb{E}M_0$, έχουμε: $|\mathbb{E}M_T - \mathbb{E}M_0| = |\mathbb{E}M_T - \mathbb{E}M_\tau| \leq \mathbb{E}|M_T - M_\tau| \leq 2C\mathbb{P}(T > n)$. Όμως, γνωρίζουμε ότι $T < \infty$, επομένως $\lim_{n \rightarrow \infty} \mathbb{P}(T > n) = 0$. Έπεται το ζητούμενο. [2] $\square$

3.4 Θεωρία Δυναμικού-Potential Theory

Η παρακάτω Θεωρία στηρίζεται στο βιβλίο του *J.Norris* [2].

Πολλές θεωρίες φυσικής μοιράζονται ένα κοινό μαθηματικό υπόβαθρο, που ονομάζεται θεωρία δυναμικού. Ένα παράδειγμα είναι η θεωρία της βαρύτητας του Newton. Ωστόσο, η θεωρία δυναμικού είναι επίσης σχετική με την ηλεκτροστατική, την θεωρία ρευστών και τη διάδοση της θερμότητας. Στην βαρύτητα, μια κατανομή μάζας πυκνότητας ρ αυξάνουν το βαρυτικό δυναμικό ϕ , το οποίο, υπό κατάλληλες συνθήκες ικανοποιεί την εξίσωση:

$$\rho = -\Delta\phi$$

όπου $\Delta = d^2/dx^2 + d^2/dy^2 + d^2/dz^2$. Το δυναμικό ϕ εκφράζεται φυσικά από την κλίση του $(d\phi/dx, d\phi/dy, d\phi/dz)$, η οποία επιτρέπει στην δύναμη της βαρύτητας να δράσει πάνω σε ένα σωματίδιο μοναδιαίας μάζας. Οι Μαρκοβιανές Αλυσίδες διακριτού χρόνου προφανώς δεν συνδέονται άμεσα με τη θεωρία δυναμικού, όπου ο χρόνος είναι συνεχής.

1) Ας θεωρήσουμε τον διακριτό τυχαίο περίπατο στο κατευθυντικό γράφημα με κορυφές 1,2,3,4,5 και ακμές $\{(1, 2), (2, 3), (3, 1), (3, 4), (3, 5), (4, 5)\}$, το οποίο σε κάθε βήμα επιλέγει την κάθε μετάβαση με την ίδια πιθανότητα. Ας υποθέσουμε ότι σε κάθε επίσκεψη στις καταστάσεις $i = 1, 2, 3, 4, 5$ εισάγεται ένα κόστος c_i , όπου $c_i = i$. Ποια είναι η τιμή για να μεταβούμε από την κατάσταση 3 στην κατάσταση 4;

Λύση: Η τιμή αυτή είναι πάντα το αναμενόμενο συνολικό κόστος. Συμβολίζουμε με ϕ_i το αναμενόμενο συνολικό κόστος ξεκινώντας από τη κορυφή i . Προφανώς, $\phi_5 = 0$ και $\phi_1 = 1 + \phi_2$,

$$\phi_2 = 2 + \phi_3,$$

$$\phi_3 = 3 + \phi_1/3 + \phi_4/3,$$

$\phi_4 = 4$. Επομένως, $\phi_3 = 8$ και η τιμή μετάβασης από την κατάσταση 3 στην 4 είναι ίση με 4.

Θεωρούμε τον τυχαίο περίπατο διακριτού χρόνου $(X_n)_{n \geq 0}$ πάνω στο γράφημα με κορυφές 1, 2, 3, 4, 5 και ακμές $\{(1, 2), (2, 3), (3, 1), (3, 2), (3, 4), (3, 5), (4, 3), (4, 5)\}$. Προφανώς, οι καταστάσεις 1 και 5 είναι απορροφητικές. Εισάγουμε κόστη $c_i = i$ σε κάθε επίσκεψη της κατάστασης $i = 1, 2, 3, 4$ και ένα τελικό κόστος f_i όταν η αλυσίδα επισκεφθεί τις καταστάσεις 1 ή 5, όπου $f_i = i$. Επομένως, το συνολικό κόστος είναι τώρα:

$$\sum_{n=0}^{T-1} c(X_n) + f(X_T)$$

όπου T είναι ο χρόνος πρώτης επίσκεψης των καταστάσεων 1, 5. Γράφουμε, όπως και προηγουμένως, ϕ_i ως το αναμενόμενο συνολικό κόστος ξεκινώντας από την κατάσταση i . Τότε, $\phi_1 = 1$, $\phi_5 = 5$ και

$$\phi_2 = 2 + (\phi_1 + \phi_3)/2$$

$$\phi_3 = 3 + (\phi_1 + \phi_2 + \phi_4 + \phi_5)/4$$

$$\phi_4 = 4 + (\phi_3 + \phi_5)/2$$

Λύνοντας το παραπάνω σύστημα παίρνουμε $\phi_2 = 7$, $\phi_3 = 9$, $\phi_4 = 11$. Άρα, σε αυτήν την περίπτωση, η τιμή μετάβασης από την κατάσταση 3 στην 4 είναι ίση $\phi_3 - \phi_4 = -2$.

2) Ας θεωρήσουμε τον απλό τυχαίο περίπατο διακριτού χρόνου στο Z με πιθανότητες μετάβασης $p_{i,i-1} = q < p = p_{i,i+1}$. Αφήνουμε το $c > 0$ και υποθέτουμε ότι τα κόστη c_i είναι κάθε φορά που η αλυσίδα επισκέπτεται την κατάσταση i . Ποιο είναι το αναμενόμενο συνολικό κόστος ϕ_0 που επιβάλλεται από τον τυχαίο περίπατο ξεκινώντας από το 0;

Λύση: Πρέπει να προετοιμαστούμε για την περίπτωση $\phi_0 = \infty$ για κάποιες τιμές του c , καθώς το συνολικό κόστος θα προκύψει από ένα άπειρο άθροισμα.

Πράγματι, γνωρίζουμε ότι ο περίπατος $(X_n) \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \infty$, ($\lim_{n \rightarrow \infty} (X_n) = \infty$) με πιθανότητα 1, άρα για $c \geq 1$ σίγουρα θα έχουμε $\phi_0 = \infty$. Συμβολίζουμε με ϕ_i το αναμενόμενο συνολικό κόστος ξεκινώντας από τη κορυφή i . Για κάθε δεξί βήμα όλα τα κόστη πολλαπλασιάζονται με c , άρα προκύπτει το εξής:

$$\phi_{i+1} = c\phi_i$$

Παρατηρώντας τη συμπεριφορά της διαδικασίας, στο πρώτο βήμα βλέπουμε αναδρομικά ότι:

$$\phi_0 = 1 + p\phi_1 + q\phi_{-1} = 1 + (cp + q/c)\phi_0$$

Παρατηρούμε ότι το $\phi_0 = \infty$ ικανοποιεί πάντα την παραπάνω εξίσωση. Γενικά, αποδεικνύεται ότι το ϕ_0 είναι η ελάχιστη μη αρνητική λύση. Ας ψάξουμε τώρα για τη πεπερασμένη λύση, τότε:

$$(c^2p - c + q)\phi_0 = -c$$

,άρα

$$\phi_0 = \frac{-c}{c^2p - c + q}$$

Το δευτεροβάθμιο πολυώνυμο έχει ρίζες $q/p, 1$ και παίρνει αρνητικές τιμές στο διάστημα $\{q/p, 1\}$ ανάμεσα στις δύο ρίζες του. Επομένως, το αναμενόμενο συνολικό κόστος δίνεται από τη σχέση:

$$\phi_0 = \frac{-c}{c^2p - c + q}, (q/p < c < 1)$$

και $\phi_0 = \infty$, διαφορετικά. Ήταν ξεκάθαρο εξ αρχής ότι $\phi_0 = \infty$, όταν $c \geq 1$. Ενδιαφέρον έχει το γεγονός ότι το $\phi_0 = \infty$ και όταν το c είναι πολύ μικρό. Σε αυτήν την περίπτωση τα κόστη μεγαλώνουν πολύ γρήγορα προς τα αριστερά του μηδενός και παρόλο που ο περίπατος κάποια στιγμή αποκλίνει προς τα δεξιά, το αναμενόμενο κόστος που επιβάλλεται στα αριστερά του μηδενός είναι ∞ . Στα παραδείγματα που μόλις συζητήθηκαν μπορέσαμε να υπολογίσουμε τα δυναμικά γράφοντας και επιλύοντας ένα σύστημα γραμμικών εξισώσεων. Η κατάσταση αυτή είναι γνωστή από τις πιθανότητες και τους αναμενόμενους χρόνους πρώτης επίσκεψης. Πράγματι, αυτά είναι απλά παραδείγματα δυναμικού για αλυσίδες Markov. Όπως δείχνουν τα παραδείγματα, δεν χρειάζεται κανείς πραγματικά μια γενική θεωρία για να γράψει τις γραμμικές εξισώσεις. Παρ' όλα αυτά, θα δώσουμε τώρα μερικά γενικά αποτελέσματα για τα δυναμικά. Αυτά θα βοηθήσουν να αποκαλυφθεί το πεδίο εφαρμογής των ιδεών που χρησιμοποιήθηκαν στα παραδείγματα, και θα αποκαλύψουν επίσης τι συμβαίνει όταν οι γραμμικές εξισώσεις δεν έχουν μοναδική λύση. Θα συζητήσουμε τις περιπτώσεις του διακριτού χρόνου. Καθ' όλη τη διάρκεια, θα γράφουμε $(X_n)_{n \geq 0}$ για μια αλυσίδα διακριτού χρόνου με πίνακα μετάβασης P . Ως συνήθως, θεωρούμε ότι η $(X_t)_{t \geq 0}$ πρέπει να είναι ελάχιστη. Ας χωρίσουμε τον χώρο καταστάσεων I σε δύο αμοιβαία αποκλειόμενα σύνολα D και ∂D , το οποίο ονομάζουμε φράγμα. Υποθέτουμε ότι οι συναρτήσεις $(c_i : i \in D)$ και $(f_i : i \in \partial D)$ είναι δεδομένες. Θα εξετάσουμε το σχετικό δυναμικό, το οποίο ορίζεται ως εξής:

$$\phi = \mathbb{E}_i \left(\sum_{n < T} c(X_n) + f(X_T) 1_{T < \infty} \right)$$

σε διακριτό χρόνο

$$\phi = \mathbb{E}_i \left(\int_0^T c(X_t) dt + f(X_T) 1_{T < \infty} \right)$$

και συνεχούς χρόνου αντίστοιχα. Όπου T συμβολίζει το χρόνο πρώτης επίσκεψης του ∂D . Για να είμαστε βέβαιοι ότι τα αθροίσματα και τα ολοκληρώματα εδώ είναι καλά ορισμένα, θα υποθέσουμε ως επί το πλείστον ότι τα c και f είναι μη αρνητικά, δηλαδή, $c_i \geq 0$ για όλα τα $i \in D$ και $f_i \geq 0$ για όλα τα $i \in \partial D$. Γενικότερα, το ϕ είναι η διαφορά των δυναμικών που σχετίζονται με το θετικό και το αρνητικό μέρος των c και f , οπότε η υπόθεση αυτή δεν είναι πολύ περιοριστική. Στην εκρηκτική περίπτωση θέτουμε πάντα $c(\infty) = 0$, οπότε δεν προκύπτουν περαιτέρω κόστη μετά την έκρηξη. Η πιο προφανής ερμηνεία

αυτών των δυναμικών είναι από την άποψη του κόστους: η αλυσίδα περιπλανιέται στο D μέχρι να διαφύγει: ενώ βρίσκεται στο D , στην κατάσταση i ας πούμε, έχει ένα κόστος c_i ανά μονάδα χρόνου. Όταν και αν φτάσει στο ∂D , στο j ας πούμε, έχει ένα τελικό κόστος f_{ij} . Σημειώστε ότι δεν υποθέτουμε ότι η αλυσίδα θα διαφύγει, ούτε καν ότι το ∂D είναι μη-κενό.

Θεώρημα 2 *Ας υποθέσουμε ότι $(c_i : i \in D)$ και $(f_i : i \in \partial D)$ είναι μη-αρνητικά. Συμβολίζουμε:*

$$\varphi_i = E_i \left[\sum_{n=0}^{T-1} c(X_n) + f(X_T) 1_{T < \infty} \right]$$

όπου το T συμβολίζει τον χρόνο πρώτης επίσκεψης στο ∂D . Τότε

(i) Το $\varphi = (\varphi_i : i \in I)$ ικανοποιεί τις σχέσεις:

$$\varphi = P\varphi + c \quad \text{στο } D \quad (3.1)$$

$$\varphi = f \quad \text{στο } \partial D.$$

(ii) Αν $\psi = (\psi_i : i \in I)$ ικανοποιεί τις σχέσεις

$$\psi \geq P\psi + c \quad \text{στο } D \quad (3.2)$$

$$\psi \geq f \quad \text{στο } \partial D.$$

και $\psi_i \geq 0$ για κάθε i , τότε $\psi_i \geq \varphi_i$ για κάθε i .

(iii) Αν $P_i(T < \infty) = 1$ για κάθε i , τότε το 3.1 έχει το πολύ μια φραγμένη λύση. [2]

Απόδειξη 8 Από το βιβλίο [2]. (i) Προφανώς, $\varphi = f$ στο ∂D . Για $i \in D$ από την Μαρκοβιανή ιδιότητα:

$$\varphi_i = E_i \left[\sum_{n=0}^{T-1} c(X_n) + f(X_T) 1_{T < \infty} \right] = c_i + \sum_{j \in I} p_{ij} \varphi_j$$

, το οποίο είναι το ζητούμενο.

(ii) Ας θεωρήσουμε το αναμενόμενο κόστος μέχρι τη χρονική στιγμή n :

$$\varphi_i(n) = E_i \left[\sum_{k=0}^{n-1} c(X_k) 1_{k < T} + f(X_T) 1_{T \leq n} \right].$$

Από την μονοτονία της $\varphi_i(n) \uparrow \varphi_i$ καθώς $n \rightarrow \infty$. Επίσης, από το επιχείρημα του (i), βρίσκουμε:

$$\varphi_i(n+1) = c_i + \sum_{j \in I} p_{ij} \varphi_j(n).$$

Ας υποθέσουμε ότι η ψ ικανοποιεί το σύστημα 3.2 και $\psi \geq 0 = \varphi(0)$. Τότε $\psi \geq P\psi + c \geq P\varphi(0) + c = \varphi(1)$ στο D και $\psi \geq f = \varphi(1)$ στο ∂D , άρα $\psi \geq \varphi(1)$. Παρόμοια και από επαγωγή, $\psi \geq \varphi(n)$ για κάθε n , και συνεπάγεται $\psi \geq \varphi$.

(iii) Τώρα, θα δείξουμε ότι αν η ψ ικανοποιεί την 3.2 τότε

$$\psi_i \geq \varphi_i(n-1) + E_i[\psi(X_n)1_{T \geq n}],$$

με την ισότητα να ισχύει όταν η ισότητα ισχύει στην 3.2. Αυτή είναι ακόμη μια απόδειξη του (ii). Ωστόσο, στην περίπτωση της ισότητας αν $|\psi_i| \leq M$ και $P_i(T < \infty) = 1$ για κάθε i , τότε

$$|E_i[\psi(X_n)1_{T \geq n}]| \leq MP_i(T \geq n) \rightarrow 0 \quad \text{όταν } n \rightarrow \infty$$

άρα $\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} \varphi(n) = \varphi$, το ζητούμενο (iii). $\square$

Θεώρημα 3 (3.3) Ας υποθέσουμε ότι το $(c_i : i \in I)$ είναι φραγμένο. Συμβολίζουμε με:

$$\varphi_i = E_i \left[\sum_{n=0}^{\infty} \beta^n c(X_n) \right]$$

τότε η $\varphi = (\varphi_i : i \in I)$ είναι η μοναδική φραγμένη λύση της:

$$\varphi = \beta P\varphi + c.$$

[2]

Απόδειξη 9 Από το βιβλίο [2]. Ας υποθέσουμε ότι $|c_i| \leq C$ για κάθε i , τότε

$$|\varphi_i| \leq C \sum_{n=0}^{\infty} \beta^n = \frac{C}{1-\beta}$$

άρα το φ είναι φραγμένο. Από την Μαρκοβιανή ιδιότητα προκύπτει μετά από ανάλυση :

$$\varphi_i = c_i + \beta \sum_{j \in I} p_{ij} \varphi_j.$$

Από την άλλη, υποθέτουμε ότι το ψ είναι φραγμένο και επίσης ότι $\psi = c + \beta P\psi$. Ας θέσουμε $M = \sup_i |\psi_i - \varphi_i|$, τότε $M < \infty$. Αλλά

$$\psi - \varphi = \beta P(\psi - \varphi)$$

άρα

$$|\psi_i - \varphi_i| \leq \beta \sum_{j \in I} p_{ij} |\psi_j - \varphi_j| \leq \beta M.$$

Οπότε $M \leq \beta M$, το οποίο μας δίνει $M = 0$ και $\psi = \varphi$. $\square$

3.5 Ο Αλγόριθμος FPRAS

Η παρακάτω θεωρία στηρίζεται στο βιβλίο των *R.Motwani* και *P.Raghavan* [3]

Έστω ένα στιγμιότυπο I ενός προβλήματος απαρίθμησης Π . Έστω $|I|$ συμβολίζει το πλήθος των διακριτών λύσεων για ένα στιγμιότυπο I του προβλήματος απαρίθμησης Π . Τότε, το στιγμιότυπο $|I|$ είναι η λύση του προβλήματος Π . Ένα προσεγγιστικό σχήμα A παίρνει ως είσοδο ένα στιγμιότυπο I και δίνει ως έξοδο έναν ακέραιο $A(I)$, που προσεγγίζει το $|I|$.

Ορισμός 8 Από το βιβλίο [3]. Ένα Πολυωνυμικό Προσεγγιστικό Σχήμα (PAS) για ένα πρόβλημα απαρίθμησης Π είναι ένας ντετερμινιστικός αλγόριθμος $\mathbb{A}$ που παίρνει στιγμιότυπο εισόδου I και έναν πραγματικό αριθμό $\epsilon > 0$ και σε πολυωνυμικό χρόνο $n = |I|$ παράγει μια έξοδο $A(I)$ τέτοια ώστε:

$$(1 - \epsilon)|I| \leq A(I) \leq (1 + \epsilon)|I|$$

Ορισμός 9 Από το βιβλίο [3]. Ένα Πολυωνυμικό Τυχαιοποιημένο Προσεγγιστικό Σχήμα (PRAS) για ένα πρόβλημα απαρίθμησης Π είναι ένας τυχαιοποιημένος αλγόριθμος $\mathbb{A}$, ο οποίος παίρνει στιγμιότυπο εισόδου I και έναν πραγματικό αριθμό $\epsilon > 0$ και σε πολυωνυμικό χρόνο $n = |I|$ παράγει μία έξοδο $A(I)$ τέτοια ώστε

$$\mathbb{P}[(1 - \epsilon)|I| \leq A(I) \leq (1 + \epsilon)|I|] \geq \frac{3}{4}$$

Ένα Πλήρως Πολυωνυμικό Τυχαιοποιημένο Προσεγγιστικό Σχήμα FPRAS είναι ένα Πολυωνυμικό Τυχαιοποιημένο Προσεγγιστικό Σχήμα, του οποίου ο χρόνος τρεξίματος είναι πολυωνυμικά φραγμένος από τα n και $\frac{1}{\epsilon}$.

Ορισμός 10 Από το βιβλίο [3]. Ένας $(\epsilon - \delta)$ - FPRAS (Fully Polynomial Randomized Approximation Scheme) ή Πλήρως Πολυωνυμικό Τυχαιοποιημένο Προσεγγιστικό Σχήμα, για ένα πρόβλημα απαρίθμησης Π που παίρνει στιγμιότυπο εισόδου I , υπολογίζει μια ϵ -προσέγγιση στο στιγμιότυπο I με πιθανότητα τουλάχιστον $1 - \delta$ σε πολυωνυμικό χρόνο $n, \frac{1}{\epsilon}$ και $\log \frac{1}{\delta}$.

Κεφάλαιο 4

Προσεγγιστικός Υπολογισμός Πιθανότητας Αποκατάστασης

Όταν $r = 1$, οι Josep Díaz · Leslie Ann Goldberg · George B. Mertzios · David Richerby · Maria Serna · Paul G. Spirakis έδειξαν ότι αναπόφευκτα η πιθανότητα αποκατάστασης είναι $1/n$ σε οποιοδήποτε συνεκτικό γράφημα n -κορυφών. Για $r \neq 1$, το φράγμα μας στον χρόνο απορρόφησης, μαζί με τα πολυωνυμικά άνω και κάτω φράγματα για την πιθανότητα αποκατάστασης, μας επιτρέπει να εκτιμήσουμε τις πιθανότητες αποκατάστασης και αφανισμού, χρησιμοποιώντας τεχνικές του Monte-Carlo. Χρησιμοποιώντας τον *FPRAS* θεωρούμε ένα πρόβλημα απαρίθμησης Π με στιγμιότυπο εισόδου $I: True - False$ (*True* αν φτάσουμε σε κατάσταση αποκατάστασης και *False* διαφορετικά) με παραμέτρους $r > 0$ (δυναμικότητα) και $n > 0$ (πλήθος κορυφών). Δηλαδή,

$$I = \begin{cases} 1 & ,\text{αν φτάσουμε σε αποκατάσταση} \\ 0 & ,\text{διαφορετικά} \end{cases}$$

Τώρα που ορίσαμε πλήρως το πρόβλημά μας, θα οργανώσουμε τα εργαλεία που έχουμε για να το διαιρέσουμε σε επιμέρους απλούστερα προβλήματα:

1. Αρχικά, θα εξερευνήσουμε την πιθανότητα αποκατάστασης όταν $r = 1$ και θα εκφράσουμε τα πολυωνυμικά άνω και κάτω φράγματα της $f_{G,r}$ για οποιοδήποτε $r > 0$.

2. Στη συνέχεια, θα χρησιμοποιήσουμε την συνάρτηση δυναμικού για να παράξουμε τα πολυωνυμικά φράγματα του χρόνου απορρόφησης (την αναμενόμενη και την πιθανότερη) γενικότερα σε μη-κατευθυντικά γραφήματα.

3. Εν κατακλείδι, θα χρησιμοποιήσουμε τον αλγόριθμό *FPRAS* για να προσεγγίσουμε όσο καλύτερα γίνεται τις πιθανότητες αποκατάστασης και αφανισμού του πληθυσμού.

Ο Lieberman παρατήρησε ότι αν το γράφημα G είναι μη-κατευθυντικό με μια μεμονωμένη πηγή (μια κορυφή με εσωτερικό βαθμό μηδέν), τότε $f_{G,r} = 1/n$, ανεξάρτητα από την δυναμικότητα r των M (μη-γηγενών) κατοίκων. Πρωταρχικά, θα δείξουμε ότι όταν $r = 1$ η πιθανότητα αποκατάστασης είναι επίσης $1/n$, ανεξάρτητα από τη δομή του γραφήματος.

4.1 Φράγματα Πιθανότητας Αποκατάστασης-Bounding the Fixation Probability

Λήμμα 5 Έστω $G = (V, E)$ ένα μη-κατευθυντικό γράφημα με n κορυφές. Τότε $f_{G,1} = 1/n$.

Απόδειξη 10 Ας θεωρήσουμε την εκδοχή της διαδικασίας, όπου κάθε κορυφή ξεκινά με διαφορετικό τύπο (χρώμα) $(A_1, A_2, \dots, A_n)$ και έχει δυναμικότητα 1. Αν αφήσουμε την διαδικασία να εξελιχθεί ως συνήθως (μοντέλο Moran): σε κάθε βήμα μια κορυφή επιλέγεται τυχαία και ομοιόμορφα ($r = 1$) και το χρώμα της μεταδίδεται σε μια γειτονική κορυφή, η οποία επιλέγεται επίσης τυχαία και ομοιόμορφα. Την χρονική στιγμή $t = 0$ μπορούμε να θεωρήσουμε πώς ένα χρώμα είναι η κορυφή τύπου M και όλες οι υπόλοιπες $n - 1$ είναι τύπου K (γηγενείς κάτοικοι). Ως εκ τούτου, με πιθανότητα 1, κάποιο χρώμα θα κυριαρχήσει το γράφημα. Με άλλα λόγια, αν θεωρήσω ως A_i τα ενδεχόμενα κάποιου χρώματος $i = 1, 2, \dots, n$ να κυριαρχήσει το γράφημα, τότε $A_i \cap A_j = \emptyset$, για όλα τα $i \neq j$ που ανήκουν στο V και $\mathbb{P}(\cup_{i=1}^n A_i) = \sum_i \mathbb{P}(A_i) = 1 \Rightarrow \sum_x f_{G,1}(x) = 1$, για τυχούσα κορυφή x στο V . Η πιθανότητα ότι το χρώμα οποιασδήποτε κορυφής x κυριαρχήσει είναι ίση με $f_{G,1}(x)$. Άρα, $f_{G,1} = (1/n) \cdot \sum_x f_{G,1}(x) = 1/n$. [5] $\square$

Αυτό το αποτέλεσμα μας επιτρέπει να δώσουμε ένα κάτω φράγμα για την πιθανότητα αποκατάστασης όταν $r \geq 1$. [5]

Λήμμα 6 Συνέπεια Λήμματος 5: Έστω $G = (V, E)$ ένα μη-κατευθυντικό γράφημα με n κορυφές. Τότε $f_{G,r} \geq 1/n$, για οποιοδήποτε $r \geq 1$.

Απόδειξη: Αρκεί να δείξουμε ότι $f_{G,r} > f_{G,1}$ για οποιοδήποτε $r > 1$ (αποδείξαμε παραπάνω ότι η ισότητα ισχύει αν και μόνο αν $r = 1$). Ωστόσο, διαισθητικά μπορούμε να καταλάβουμε ότι όσο μεγαλύτερο είναι το r , τόσο μεγαλύτερη είναι και η πιθανότητα αποκατάστασης του πληθυσμού (κυριαρχία ατόμων τύπου M). [5] $\square$

Λήμμα 7 Δεύτερη συνέπεια του λήμματος 5: Για S_1, S_2 υποσύνολα του $V(G)$, ισχύει $f_{G,1}(S_1 \cup S_2) = f_{G,1}(S_1) + f_{G,1}(S_2) - f_{G,1}(S_1 \cap S_2)$.

Απόδειξη 11 Όπως και προηγουμένως, θεωρούμε πως κάθε κορυφή έχει δυναμικότητα 1 και διαφορετικό χρώμα από όλες τις άλλες. Σε οποιαδήποτε χρονική στιγμή μπορούμε να υποθέσουμε ότι οποιοδήποτε υποσύνολο ενός από τα n χρώματα να είναι οι κορυφές τύπου M . Έστω A_i : η πιθανότητα να κυριαρχήσει το i χρώμα στο γράφημα, $i = \{1, 2, \dots, n\}$. Τότε έχουμε $A_i \cap A_j = \emptyset$, για κάθε $i, j \in V$ και ως εκ τούτου $\mathbb{P}(\cup_{i=1}^n A_i) = \sum_{i=1}^n \mathbb{P}(A_i)$. Για οποιοδήποτε τέτοιο σύνολο $S \subset V$, η $\mathbb{P}(\cup_{i=1}^n A_i) = f_{G,1}(S)$ εκφράζει την πιθανότητα το συγκεκριμένο χρώμα να κυριαρχήσει στο γράφημα. Με πιθανότητα 1, γνωρίζουμε ότι ένα από τα χρώματα θα επιβληθεί στα υπόλοιπα, άρα $\sum_{i \in S} \mathbb{P}(A_i) = f_{G,1}(S) = \sum_x f_{G,1}(x)$ και το αποτέλεσμα προκύπτει άμεσα. Δηλαδή, αν $S_a = \{a_1, a_2, \dots, a_k\}$ είναι οι κορυφές του S_a , τότε για οποιαδήποτε σύνολα S_1 και S_2 υποσύνολα του V , ισχύει η παραπάνω εξίσωση. [5] $\square$

Αξίζει να σημειωθεί ότι δεν υπάρχει κάτω φράγμα για την ανισότητα της πρώτης συνέπειας του λήμματος 5, όταν $r < 1$. Για παράδειγμα, για $r \neq 1$, η πιθανότητα αποκατάστασης του πλήρους γραφήματος K_n δίνεται από την: $f_{K_n, r} = \frac{1 - \frac{1}{r}}{1 - \frac{1}{r^n}}$, όπως αποδείξαμε. [1]

Η παραπάνω πιθανότητα είναι τουλάχιστον $1 - \frac{1}{r}$, για $r > 1$, αλλά δεν υπάρχει θετικό πολυωνυμικό φράγμα όταν $r < 1$ (K_n). [5]

Λήμμα 8 Έστω $G = (V, E)$ ένα μη-κατευθυντικό γράφημα με n κορυφές. Τότε, $f_{G, r} \leq 1 - \frac{1}{n+r}$, για κάθε $r > 0$.

Απόδειξη 12 Για κάθε κορυφή x που ανήκει στο V , έστω $Q(x) = \sum_{xy \in E} \{1/\deg y\}$, έτσι ώστε

$$\begin{aligned} \sum_{x \in V} Q(x) &= \sum_{x \in V} \sum_{xy \in E} \frac{1}{\deg y} \\ &= \sum_{x \in V} \sum_{y \in N(x)} \frac{1}{\deg y} \\ &= \sum_{y \in V} \sum_{x \in N(y)} \frac{1}{\deg y} \\ &= \sum_{y \in V} \frac{1}{\deg y} \sum_{x \in N(y)} 1 \\ &= \sum_{y \in V} \frac{1}{\deg y} \deg y = \sum_{y \in V} 1 = n \end{aligned}$$

. Για να δώσουμε ένα άνω φράγμα για την $f_{G, r}(x)$ για κάθε κορυφή x που ανήκει στο V , χαλαρώνουμε την Μαρκοβιανή Αλυσίδα, υποθέτοντας ότι η αποκατάσταση του πληθυσμού επιτυγχάνεται μόλις δημιουργηθεί η δεύτερη κορυφή τύπου M . Από την κατάσταση $S = \{x\}$, η πιθανότητα να δημιουργηθεί μια καινούρια κορυφή τύπου M είναι $\alpha(x) = r/(n - 1 + r)$ και η πιθανότητα ένας από τους γείτονες της x (τύπου K) να αναπαραχθεί πάνω σε αυτήν είναι $b(x) = [1/(n - 1 + r)] * Q(x)$. Η πιθανότητα ότι ο πληθυσμός θα μείνει ίδιος με προηγούμενως, επειδή ένας κάτοικος τύπου K αναπαράχθηκε πάνω σε κάτοικο τύπου K , είναι $1 - \alpha(x) - b(x)$. Με άλλα λόγια, η συμπεριφορά της μαρκοβιανής αλυσίδας $\tilde{X}: \{\tilde{X}_n, n \in \mathbb{N}\}$ με σύνολο καταστάσεων $S_a = \{0, 1, 2\}$ διακριτού χρόνου περιγράφεται ως εξής από τη συνάρτηση κατανομής:

$$\mathbb{P}(\tilde{X}_{t+1} = |S| | \tilde{X}_t = S_a = 1) = \begin{cases} a(x) & , \text{αν } |S| = 2, \\ 1 - a(x) - b(x) & , \text{αν } |S| = 1 \\ b(x) & , \text{αν } |S| = \emptyset. \end{cases}$$

Έστω A_x : το ενδεχόμενο η μαρκοβιανή αλυσίδα να πάει σε μια κατάσταση στο $S = \{x, u : u \neq x, u \in V\}$,

$A_\emptyset$: το ενδεχόμενο η μαρκοβιανή αλυσίδα να πάει στο $S = \emptyset$

και $A_x \bar{\cup} A_\emptyset$: το ενδεχόμενο η μαρκοβιανή αλυσίδα να παραμείνει στο $S = \{x\}$

Τότε η πιθανότητα ότι ο πληθυσμός των κατοίκων τύπου M φτάσουν 2 (παραδείγματος χάριν, ότι η πρώτη αλλαγή στην κατάσταση είναι η ανάπλαση ενός νέου κατοίκου τύπου M) δίνεται από:

$$\begin{aligned} p(x) &= \mathbb{P}(A_x | A_x \cup A_\emptyset, X_t = \{x\}) = \\ &= \frac{\mathbb{P}(A_x | X_t = \{x\})}{\mathbb{P}(A_x \cup A_\emptyset | X_t = \{x\})} \iff \\ p(x) &= \frac{a(x)}{a(x) + b(x)} = \frac{r}{r + Q(x)} \end{aligned}$$

Επομένως, η πιθανότητα μια νέα διεργασία να φτάσει σε κατάσταση αποκατάστασης είναι:

$$p = \frac{1}{n} \sum_x p(x) = \frac{r}{n} \sum_x \frac{1}{r + Q(x)}$$

Γράφοντας $p = \frac{r}{n} \sum_i \{(r + q_i)^{-1}\}$, θέλουμε να βρούμε τη μέγιστη τιμή της p , υπό τους περιορισμούς: $q_i > 0$, για όλα τα i και $\sum_{i=1}^n q_i = \sum_x Q(x) = n$. Αν χαλαρώσουμε τον πρώτο περιορισμό σε $q_i \geq 0$. Το p μεγιστοποιείται όταν μεγιστοποιείται το: $\sum_{x \in V} \frac{1}{r + Q(x)} = \sum_{i=1}^n \frac{1}{r + q_i}$.

Πρέπει τουλάχιστον 1 q_i να είναι διάφορο του μηδενός, διότι $\sum_i q_i = n, q_i \geq 0$

Έστω ότι υπάρχουν στο πλήθος 2 $q_i > 0$, χωρίς βλάβη στην γενικότητα επιλέγω τα q_1, q_2 . Θα δείξω ότι το p μεγιστοποιείται αν θέσουμε $q_1 + q_2$ για q_1 και 0 αντί για q_2 . Δηλαδή,

$$p(q_1, q_2, \dots, q_n) \leq p(q_1 + q_2, 0, q_3, \dots, q_n) \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{r + q_1} + \frac{1}{r + q_2} &\leq \frac{1}{r + q_1 + q_2} + \frac{1}{r} \iff \\ \frac{2r + q_1 + q_2}{r^2 + q_1 q_2 + r(q_1 + q_2)} &\leq \frac{2r + q_1 + q_2}{r^2 + r(q_1 + q_2)} \end{aligned}$$

Η παραπάνω ανισότητα ισχύει για κάθε $q_1, q_2 \geq 0$. Αναδρομικά, προκύπτει ότι

$$p(q_1, q_2, \dots, q_n) \leq p\left(\sum_{i=1}^{n-1} q_i, 0, 0, \dots, q_n\right) \leq p\left(\sum_{i=1}^n q_i, 0, 0, \dots, 0\right)$$

Επομένως, το άθροισμα των q_i μεγιστοποιείται για $q_1 = \sum_{i=1}^n q_i = n$ και $q_2 = \dots = q_n = 0$. Συμπερασματικά, $f_{G,r} \leq p \leq \frac{r}{n} \cdot \left[\frac{1}{r+n} + (n-1) \cdot \frac{1}{r+0}\right] = 1 - \frac{1}{n+r}$. [5] □

4.2 Φράγματα Χρόνου Απορρόφησης-Bounding the Absorption Time

Στην παρούσα φάση θα ασχοληθούμε με τις αρχές που διέπουν οι χρόνοι απορρόφησης. Θα εκμεταλλευτούμε την συνάρτηση δυναμικού και θα δείξουμε ότι σε συνεκτικό γράφο G τάξης n αναμένουμε να φτάσουμε σε απορροφητική κατάσταση σε πολυωνυμικό αριθμό βημάτων. Η συνάρτηση δυναμικότητας που χρησιμοποιείται στην εργασία είναι η παρακάτω:

$$\phi(S) = \sum_{x \in S} \frac{1}{\deg x}$$

για κάθε κατάσταση $S \subset V(G)$ και θα συμβολίζουμε με $\phi(G)$ το $\phi(V(G))$. Από τους Josep Díaz · Leslie Ann Goldberg · George B. Mertzios · David Richerby · Maria Serna · Paul G. Spirakis έχουμε $1 < \phi(G) < n$ και $\phi(x) = \frac{1}{\deg x} \leq 1$ για κάθε κορυφή $x \in V$. [5]

Λήμμα 9 Αν $(X_i)_{i \geq 0}$ είναι η διεργασία Moran σε γράφημα $G = (V, E)$ και $\emptyset \subset S \subset V$. Αν $r \geq 1$, τότε

$$\mathbb{E} [\phi(X_{i+1}) - \phi(X_i) | X_i = S] \geq (1 - \frac{1}{r}) \frac{1}{n^3}$$

με την ισότητα να ισχύει αν-ν, $r = 1$. [5]

Απόδειξη 13 Γράφουμε $W(S) = n + (r - 1)|S|$ ως την συνολική δυναμικότητα του πληθυσμού. Για $\emptyset \subset S \subset V$ και για οποιαδήποτε τιμή του r έχουμε:

$$\begin{aligned} \mathbb{E} (\phi(X_{i+1}) - \phi(X_i) | X_i = S) &= \\ &= \frac{1}{W(S)} \sum_{xy \in E, x \in S, y \in \bar{S}} \left(r \frac{\phi(S + y) - \phi(S)}{\deg x} + \frac{\phi(S - x) - \phi(S)}{\deg y} \right) = \\ &= \frac{1}{W(S)} \sum_{xy \in E, x \in S, y \in \bar{S}} \left(r \frac{\sum_{z \in S \cup \{y\}} \frac{1}{\deg z} - \sum_{z \in S} \frac{1}{\deg z}}{\deg x} + \frac{\sum_{z \in S - \{x\}} \frac{1}{\deg z} - \sum_{z \in S} \frac{1}{\deg z}}{\deg y} \right) = \\ &= \frac{1}{W(S)} \sum_{xy \in E, x \in S, y \in \bar{S}} \left(r \frac{1}{\deg x \deg y} - \frac{1}{\deg x \deg y} \right) = \\ &= \frac{r - 1}{W(S)} \sum_{xy \in E, x \in S, y \in \bar{S}} \frac{1}{\deg x \deg y} \end{aligned} \quad (4.1)$$

Αρχικά, για $r = 1$, έχουμε:

$$\mathbb{E} (\phi(X_{i+1}) - \phi(X_i) | X_i = S) = 0$$

και

$$(1 - \frac{1}{r}) \cdot \frac{1}{n^3} = 0$$

αν και μόνο αν $r = 1$. Τώρα, στην χειρότερη περίπτωση $S = V - \{x\} \subset V$, για κάποιο $x \in V$. Για $r > 1$ έχουμε:

$$W(S) = n - |S| + r|S| < n - n + rn = rn \implies$$

$$\frac{1}{W(S)} > \frac{1}{rn} \quad (4.2)$$

Επιπρόσθετα, εφόσον το γράφημα είναι συνεκτικό και $\emptyset \subset S \subset V$, υπάρχει τουλάχιστον μια ακμή $xy \in E : x \in S$ και $y \in \bar{S}$ και κάθε μία από τις τυχούσες κορυφές $x, y \in V$ έχουν βαθμό το πολύ $n-1 < n$. Με μαθηματικούς όρους έχουμε: για οποιεσδήποτε κορυφές $x, y \in V$

$$\deg x < n \text{ και } \deg y < n \iff$$

Αντιστρέφοντας παίρνουμε:

$$\frac{1}{\deg x} > \frac{1}{n} \text{ και } \frac{1}{\deg y} > \frac{1}{n} \implies$$

και πολλαπλασιάζοντας κατά μέλη προκύπτει:

$$\frac{1}{\deg x \cdot \deg y} > \frac{1}{n^2} \implies$$

$$\sum_{xy \in E, x \in S, y \in \bar{S}} \frac{1}{\deg x \deg y} > \frac{1}{n^2} \quad (4.3)$$

Συνεπώς, από 4.2 και 4.3 συμπεραίνουμε ότι:

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}(\phi(X_{i+1}) - \phi(X_i) | X_i = S) = \\ &= \frac{r-1}{W(S)} \sum_{xy \in E, x \in S, y \in \bar{S}} \frac{1}{\deg x \deg y} > \frac{r-1}{rn} \cdot \frac{1}{n^2} \implies \\ & \mathbb{E}(\phi(X_{i+1}) - \phi(X_i) | X_i = S) > (1 - \frac{1}{r}) \cdot \frac{1}{n^3} \end{aligned}$$

,με την ισότητα να ισχύει αν-ν $r = 1$, το οποίο είναι και το ζητούμενο. [5] $\square$

Παρατηρούμε ότι για $r < 1$, θα ήταν ενδιαφέρον να βρούμε, αντίστοιχα, ένα άνω φράγμα για την ποσότητα:

$$\mathbb{E}(\phi(X_{i+1}) - \phi(X_i) | X_i = S)$$

Λήμμα 10 Αν $(X_i)_{i \geq 0}$ είναι η διεργασία Moran σε γράφημα $G = (V, E)$ και $\emptyset \subset S \subset V$. Αν $r < 1$, τότε

$$\mathbb{E}(\phi(X_{i+1}) - \phi(X_i) | X_i = S) < \frac{r-1}{n^3}$$

[5]

Απόδειξη 14 Όπως και παραπάνω, από την 4.1, που ισχύει και για $r < 1$, έχουμε τα αντίστοιχα επιχειρήματα ως εξής: Η συνολική δυναμικότητα είναι πάλι $W(S) = n + (r-1)|S|$. Τώρα, στη χειρότερη περίπτωση $\emptyset \subset S = \{x\}$, για κάποιο $x \in V$. Για $r < 1$ παίρνουμε:

$$W(S) = n + (r-1) \cdot |S| < n + (r-1) \cdot 0 = n \implies$$

$$\frac{1}{W(S)} > \frac{1}{n} \quad (4.4)$$

Στη συνέχεια, συμμετρική περίπτωση με πριν, για $S = \{x\}$ έχουμε:

$$\sum_{xy \in E, x \in S, y \in \bar{S}} \frac{1}{\deg x \deg y} > \frac{1}{n^2} \quad (4.5)$$

Συνεπώς, από τις 4.4 και 4.5, συμπεραίνουμε ότι:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r-1} \mathbb{E}(\phi(X_{i+1}) - \phi(X_i) | X_i = S) &= \\ &= \frac{1}{W(S)} \sum_{xy \in E, x \in S, y \in \bar{S}} \frac{1}{\deg x \deg y} > \frac{1}{n^3} \end{aligned}$$

Αφού $r < 1$, προκύπτει:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\phi(X_{i+1}) - \phi(X_i) | X_i = S) &= \\ &= \frac{r-1}{W(S)} \sum_{xy \in E, x \in S, y \in \bar{S}} \frac{1}{\deg x \deg y} < \frac{r-1}{n^3} \end{aligned}$$

, το οποίο είναι και το ζητούμενο. [5] $\square$

Θεώρημα 4 Έστω $(Y_i)_{i \geq 0}$ είναι μια Μαρκοβιανή Αλυσίδα με χώρο καταστάσεων Ω , όπου Y_0 επιλέγεται από ένα σύνολο $I \subseteq \Omega$. Αν υπάρχουν σταθερές $k_1, k_2 > 0$ και μια μη-αρνητική συνάρτηση $\psi : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, τέτοια ώστε:

$$\psi(S) = 0 \text{ για κάποιο } S \in \Omega$$

$$\psi(S) \leq k_1 \text{ για όλα τα } S \in I$$

$$\text{και } \mathbb{E}[\psi(Y_i) - \psi(Y_{i+1}) | Y_i = S] \geq k_2 \text{ για κάθε } i \geq 0 \text{ και για όλα } S \text{ με } \psi(S) > 0$$

Τότε $\mathbb{E}[\tau] \leq \frac{k_1}{k_2}$, όπου $\tau = \min\{i : \psi(Y_i) = 0\}$. [5]

Απόδειξη 15 Από την τρίτη σύνθηκη, μαρκοβιανή αλυσίδα είναι *supermartingale*, οπότε συγκλίνει στο 0 σχεδόν σίγουρα. Αυτό αποδεικνύεται εύκολα, καθώς:

$$\mathbb{E}[\psi(Y_i) - \psi(Y_{i+1}) | Y_i = S] \geq k_2 > 0 \text{ για κάθε } i \geq 0 \text{ και για όλα } S \text{ με } \psi(S) > 0 \implies$$

$$\mathbb{E}[\psi(Y_i) - \psi(Y_{i+1})] > 0, \forall i \geq 0, \forall \psi(Y_i) > 0$$

Δηλαδή,

$$\exists n_0 \in \mathbb{N} : \forall n > n_0 \implies \mathbb{E}[\psi(Y_n)] \longrightarrow 0$$

Άρα,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\psi(Y_i) | \psi(Y_0) > 0] &= \\ &= \mathbb{E}[\mathbb{E}[\psi(Y_i) | Y_{i-1}] | \psi(Y_0) > 0] = \\ &= \mathbb{E}[\mathbb{E}[\psi(Y_{i-1}) + (\psi(Y_i) - \psi(Y_{i-1})) | Y_{i-1}] | \psi(Y_0) > 0] = \\ &= \mathbb{E}[\mathbb{E}[\psi(Y_{i-1}) + (\psi(Y_i) - \psi(Y_{i-1})) | Y_{i-1}] | \psi(Y_0) > 0] \leq \mathbb{E}[\psi(Y_{i-1}) - k_2 | \psi(Y_0) > 0] \implies \\ \mathbb{E}[\psi(Y_i) | \psi(Y_0) > 0] &\leq \mathbb{E}[\psi(Y_{i-1}) - k_2 | \psi(Y_0) > 0] \end{aligned} \quad (4.6)$$

Με επαγωγή στο i προκύπτει το εξής:

$$\mathbb{E}[\psi(Y_i) | \psi(Y_0) > 0] \leq \mathbb{E}[\psi(Y_0) - ik_2 | \psi(Y_0) > 0]$$

και από τον ορισμό του χρόνου εκκίνησης τ , παίρνουμε:

$$0 = \mathbb{E}[\psi(Y_\tau) | \psi(Y_0) > 0] \implies$$

Από την σχέση 4.6

$$\mathbb{E}[\psi(Y_\tau) | \psi(Y_0) > 0] \leq \mathbb{E}[\psi(Y_0) - \tau k_2 | \psi(Y_0) > 0] \implies$$

$$\mathbb{E}[\psi(Y_\tau) | \psi(Y_0) > 0] \leq \mathbb{E}[\psi(Y_0) | \psi(Y_0) > 0] - k_2 \mathbb{E}[\tau | \psi(Y_0) > 0]$$

Από την δεύτερη συνθήκη του θεωρήματος έχουμε:

$$\mathbb{E}[\psi(Y_0) | \psi(Y_0) > 0] \leq k_1$$

Τελικά,

$$0 = \mathbb{E}[\psi(Y_\tau) | \psi(Y_0) > 0] \leq k_1 - k_2 \mathbb{E}[\tau | \psi(Y_0) > 0] \implies$$

$$\mathbb{E}[\tau | \psi(Y_0) > 0] \leq \frac{k_1}{k_2}$$

Επίσης, είναι φανερό ότι

$$\mathbb{E}[\tau] = \mathbb{E}[\mathbb{E}[\tau | \psi(Y_0) \geq 0]] =$$

$$= \mathbb{E}[\tau | \psi(Y_0) > 0] \cdot \mathbb{P}(\psi(Y_0) > 0) + \mathbb{E}[\tau | \psi(Y_0) = 0] \cdot \mathbb{P}(\psi(Y_0) = 0)$$

Όμως θεωρούμε πως όταν η αρχική κατάσταση $\psi(Y_0) = 0$, τότε $\tau = 0$. Άρα,

$$\mathbb{E}[\tau | \psi(Y_0) = 0] = 0$$

και ως εκ τούτου

$$\mathbb{E}[\tau] = \mathbb{E}[\tau|\psi(Y_0) > 0] \cdot \mathbb{P}(\psi(Y_0) > 0) \leq \mathbb{E}[\tau|\psi(Y_0) > 0]$$

Συμπερασματικά,

$$\mathbb{E}[\tau] = \mathbb{E}[\tau|\psi(Y_0) \geq 0] \leq \mathbb{E}[\tau|\psi(Y_0) > 0] \leq \frac{k_1}{k_2}$$

,έπεται το ζητούμενο. [5] $\square$

Μέχρι τώρα αποδεικνύαμε γενικά αποτελέσματα. Τώρα, θα διακρίνουμε 3 περιπτώσεις για τη δυναμικότητα r . Ξεκινάμε με την περίπτωση $0 < r < 1$.

Θεώρημα 5 Αν $G = (V, E)$ ένα γράφημα τάξης n . Για $r < 1$ και οποιοδήποτε $S \subseteq V$, ο αναμενόμενος χρόνος απορρόφησης τ της διεργασίας Moran στο G ικανοποιεί την ανισότητα:

$$\mathbb{E}[\tau|X_0 = S] \leq \frac{1}{1-r} \cdot n^3 \cdot \phi(S)$$

[5]

Απόδειξη 16 Έστω $(Y_i)_{i \geq 0}$ είναι η διεργασία η οποία συμπεριφέρεται ακριβώς όπως η Moran, όμως όταν φτάνει στην απορροφητική κατάσταση αποκατάστασης $S = V$ τοποθετούμε έναν κάτοικο τύπου K τυχαία και ομοιόμορφα αντικαθιστώντας έναν από τους n κατοίκους τύπου M . Έτσι, η κατάσταση $S = V$ σταματάει να είναι απορροφητική και όταν η αλυσίδα φτάσει σε αυτήν, επιστρέφει σε κάθε μία από τις n καταστάσεις $S = V - \{x\}$ με πιθανότητα $\frac{1}{n}$, δηλαδή τυχαία και ομοιόμορφα. Τώρα, έστω ότι $\tilde{\tau} = \min\{i : Y_i = \emptyset\}$, είναι ο χρόνος απορρόφησης της νέας διεργασίας, που μόλις δημιουργήσαμε. Τότε, ισχύει

$$\mathbb{E}[\tau|X_0 = S] \leq \mathbb{E}[\tilde{\tau}|Y_0 = S]$$

Αυτό που καταφέραμε με αυτόν τον μετασχηματισμό είναι πως ικανοποιούνται οι προϋποθέσεις του θεωρήματος 4 για την μαρκοβιανή αλυσίδα $(Y_i)_{i \geq 0}$.

Αν χρησιμοποιούσαμε το θεώρημα 4 στην Μαρκοβιανή Αλυσίδα $(X_i)_{i \geq 0}$ υπήρχε θετική πιθανότητα ότι η πρώτη συνθήκη του θεωρήματος δεν θα ικανοποιούνταν. Ειδικότερα, αν η αλυσίδα έφτανε στην απορροφητική κατάσταση αποκατάστασης πριν φτάσει σε απορροφητική κατάσταση αφανισμού δεν θα υπήρχε $S : \phi(S_a) = 0$.

Για $\psi(S_a) = \phi(S_a)$, $k_1 = \phi(S_a) > 0$, $k_2 = \frac{1-r}{n^3} > 0$ έχουμε από τον ορισμό της διαδικασίας:

$$\phi(S_a) = 0, \text{ για } S = \emptyset$$

$$\phi(S_a) \leq \phi(S_a) = k_1, \forall S \in I \subseteq V$$

Είναι προφανές ότι στην απορροφητική κατάσταση $S = \emptyset$ ισχύει:

$$\mathbb{E}[\phi(Y_i) - \phi(Y_{i+1})|Y_i = \emptyset] = 0$$

και από το λήμμα 10

$$\mathbb{E}[\phi(Y_i) - \phi(Y_{i+1}) | Y_i = S] > \frac{1-r}{n^3} = k_2, \forall S \subset V : \phi(S_a) > 0$$

Τώρα, αρκεί να εξετάσουμε την περίπτωση $S = V$ της τρίτης συνθήκης.

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\phi(Y_i) - \phi(Y_{i+1}) | Y_i = V] &= \\ &= \mathbb{E}[\phi(V(G)) - \phi(Y_{i+1})] = \\ &= \mathbb{E}[\phi(G)] - \mathbb{E}[\phi(Y_{i+1})] = \\ &= \sum_{y \in V} \frac{1}{\deg y} - \frac{1}{n} \sum_{x \in V} \phi(V - \{x\}) \\ &= \sum_{y \in V} \frac{1}{\deg y} - \frac{1}{n} \left[\sum_{x \in V} \sum_{y \in V - \{x\}} \frac{1}{\deg y} \right] \\ &= \sum_{y \in V} \frac{1}{\deg y} - \frac{1}{n} \left[\sum_{x \in V} \left(\sum_{y \in V} \frac{1}{\deg y} - \frac{1}{\deg x} \right) \right] \\ &= \sum_{y \in V} \frac{1}{\deg y} - \frac{1}{n} \sum_{x \in V} \sum_{y \in V} \frac{1}{\deg y} + \frac{1}{n} \sum_{x \in V} \frac{1}{\deg x} \\ &= \frac{1}{n} \sum_{x \in V} \frac{1}{\deg x} > \frac{1}{n} > \frac{1-r}{n} > \frac{1-r}{n^3} = k_2 \end{aligned}$$

Συμπερασματικά, από το θεώρημα 4 και την 16 έχουμε:

$$\mathbb{E}[\tau | X_0 = S] \leq \mathbb{E}[\tilde{\tau} | Y_0 = S] \leq \frac{k_1}{k_2} = \frac{\phi(S_a)}{\frac{1-r}{n^3}} = \frac{1}{1-r} n^3 \cdot \phi(S_a)$$

,το οποίο είναι το ζητούμενο. [5] $\square$

Λήμμα 11 (i) Έστω $G = (V, E)$ ένα γράφημα τάξης n . Για $r < 1$ και όταν η αρχική κορυφή τύπου M , *mutant*, επιλέγεται τυχαία και ομοιόμορφα, ο αναμενόμενος χρόνος απορρόφησης της διεργασίας Moran φράσσεται εκ των άνω ως εξής:

$$\mathbb{E}[\tau] \leq \frac{1}{1-r} n^3$$

(ii) Επιπλέον, η διεργασία φτάνει σε απορροφητική κατάσταση μέσα σε t βήματα με πιθανότητα τουλάχιστον $1 - \epsilon$, για κάθε $\epsilon \in (0, 1)$ και κάθε $t \geq \frac{1}{1-r} n^3 \cdot \frac{1}{\epsilon}$. [5]

Απόδειξη 17 Για το (i) αναλύουμε τον αναμενόμενο χρόνο απορρόφησης, λαμβάνοντας υπόψιν ότι παράγεται μία κορυφή τύπου M τυχαία και ομοιόμορφα κατά τη διεργασία:

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[\tau] &= \mathbb{E}[\mathbb{E}[\tau|X_0 = \{x\}]] = \\ &= \frac{1}{n} \sum_{x \in V} \mathbb{E}(\tau|X_0 = \{x\})\end{aligned}$$

Όμως από το θεώρημα 5 παίρνουμε:

$$\begin{aligned}\frac{1}{n} \mathbb{E}(\tau|X_0 = \{x\}) &\leq \frac{1}{1-r} n^3 \phi(\{x\}) \leq \frac{1}{1-r} n^4 \implies \\ \mathbb{E}(\tau|X_0 = \{x\}) &\leq \frac{1}{1-r} n^3\end{aligned}$$

,το ζητούμενο. [5]

Για το (ii) θα χρησιμοποιήσουμε την Ανισότητα του Markov 2. Για $X = \tau > 0$, τον χρόνο απορρόφησης και $a = \frac{1}{(1-r)\epsilon} n^3 > 0$, παίρνουμε:

$$\mathbb{P}(\tau \geq \frac{1}{(1-r)\epsilon} n^3) \leq \frac{E(\tau)}{\frac{1}{(1-r)\epsilon} n^3} \leq \frac{\frac{1}{1-r} n^3}{\frac{1}{(1-r)\epsilon} n^3}$$

από την παραπάνω ανισότητα προέκυψε άμεσα ότι:

$$\begin{aligned}\mathbb{P}(\tau \geq \frac{n^3}{(1-r)\epsilon}) &\leq \epsilon \implies \\ 1 - \mathbb{P}(\tau < \frac{n^3}{(1-r)\epsilon}) &\leq \epsilon \implies \\ \mathbb{P}(\tau < \frac{n^3}{(1-r)\epsilon}) &\geq 1 - \epsilon\end{aligned}$$

. Με άλλα λόγια, η διεργασία φτάνει σε απορρόφηση με πιθανότητα τουλάχιστον $1 - \epsilon$, μέσα σε $a = \frac{n^3}{(1-r)\epsilon}$ βήματα. Έχουμε t τέτοιο ώστε: $\mathbb{P}(\tau \geq t) \leq \frac{\mathbb{E}(\tau)}{t} \leq \frac{n^3}{(1-r)t} \leq \epsilon \implies t \geq \frac{1}{(1-r)\epsilon} n^3$ και $\epsilon \in (0, 1)$. [5] $\square$

Στη συνέχεια, εξετάζουμε την περίπτωση $r > 1$.

Θεώρημα 6 Έστω $G = (V, E)$ γράφημα τάξης n . Για $r > 1$ και για κάθε σύνολο $S \subseteq V$, ο χρόνος απορρόφησης τ της διεργασίας Moran στο G ικανοποιεί την ανισοϊσότητα:

$$\mathbb{E}[\tau|X_0 = S] \leq \frac{r}{r-1} n^3 (\phi(G) - \phi(S)) \leq \frac{r}{r-1} n^4$$

[5]

Απόδειξη 18 Έστω $(Y_i)_{i \geq 0}$ η διεργασία που συμπεριφέρεται όπως η διεργασία Moran $(X_i)_{i \geq 0}$ μόνο που όταν η διεργασία φτάνει στην κατάσταση αφανισμού $Y_j = \emptyset$, τότε αντικαθιστούμε μια κορυφή τυχαία και ομοιόμορφα με την μεταλλαγμένη $\{x\}$, $Y_{j+1} = \{x\}$. Αυτό καθιστά την $Y_i = V$, την μοναδική απορροφητική κατάσταση της Μαρκοβιανής Αλυσίδας. Θέτουμε $\tilde{\tau} = \min\{i : Y_i = V\}$ και συμμετρικά με την περίπτωση $r < 1$, έχουμε:

$$\mathbb{E}[\tau | X_0 = S] \leq \mathbb{E}[\tilde{\tau} | Y_0 = S] \quad (4.7)$$

Χρησιμοποιώντας το θεώρημα 4, θέτουμε $\psi(Y) = \phi(G) - \phi(Y)$, $0 < k_1 = \psi(S) = \phi(G) - \phi(S) \leq n$, και $k_2 = \frac{r-1}{rn^3} > 0$. Οι προϋποθέσεις του θεωρήματος 4 ικανοποιούνται καθώς:

$$\psi(S) = \phi(G) - \phi(S) = 0, \text{ για } S = V$$

$$\psi(S) = k_1 \leq k_1, \forall S \subseteq V$$

Είναι προφανές ότι στην απορροφητική κατάσταση $S = V$,

$$\mathbb{E}[\psi(Y_i) - \psi(Y_{i+1}) | Y_i = S] = 0$$

Για κάθε $\emptyset \subset S \subset V$ παίρνουμε από το λήμμα 9:

$$\mathbb{E}[\psi(Y_i) - \psi(Y_{i+1}) | Y_i = S] \geq \frac{r-1}{rn^3} = k_2$$

Για $S = \emptyset$ έχουμε

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}[\psi(Y_i) - \psi(Y_{i+1}) | Y_i = \emptyset] = \\ &= \mathbb{E}[\phi(G) - \phi(\emptyset) - \phi(G) + \phi(Y_{i+1}) | Y_i = \emptyset] = \\ &= \mathbb{E}[\phi(\emptyset)] + \mathbb{E}[\phi(Y_{i+1}) | Y_i = \emptyset] = \\ &= -\sum_{y \in \emptyset} \frac{1}{deg y} + \frac{1}{n} \sum_{x \in V} \phi(\{x\}) \\ &= -\sum_{y \in \emptyset} \frac{1}{deg y} + \frac{1}{n} \left[\sum_{x \in V} \sum_{y \in \{x\}} \frac{1}{deg y} \right] \\ &= 0 + \frac{1}{n} \sum_{x \in V} \frac{1}{deg x} = \\ &= \frac{1}{n} \sum_{x \in V} \frac{1}{deg x} > \frac{1}{n} > \frac{1 - \frac{1}{r}}{n} > \frac{r-1}{rn^3} = k_2 \end{aligned}$$

Από το θεώρημα 4 και την 4.7 παίρνουμε:

$$\mathbb{E}[\tau | X_0 = S] \leq \mathbb{E}[\tilde{\tau} | Y_0 = S] \leq \frac{k_1}{k_2} = \frac{\phi(G) - \phi(S)}{\frac{r-1}{rn^3}} \implies$$

$$\mathbb{E}[\tau | X_0 = S] \leq \frac{r}{r-1} n^3 (\phi(G) - \phi(S))$$

και από τον ορισμό του δυναμικού $\phi(G) - \phi(S) = \sum_{x \in V} \frac{1}{\deg x} - \sum_{x \in S} \frac{1}{\deg x} \leq n$, δηλαδή

$$\mathbb{E}[\tau | X_0 = S] \leq \frac{r}{r-1} n^3 (\phi(G) - \phi(S)) \leq \frac{r}{r-1} n^4$$

[5] $\square$

Λήμμα 12 Όταν $r > 1$ και η αρχική κορυφή τύπου M επιλέγεται τυχαία και ομοιόμορφα, ο αναμενόμενος χρόνος απορρόφησης της διεργασίας Moran σε οποιοδήποτε γράφημα G η κορυφών ικανοποιεί τη σχέση:

$$\mathbb{E}[\tau] \leq \frac{r}{r-1} n^4$$

Επιπρόσθετα, η διαδικασία φτάνει σε απορροφητική κατάσταση μέσα σε t βήματα με πιθανότητα τουλάχιστον $1 - \epsilon$, $\epsilon \in (0, 1)$, $t \geq \frac{r}{r-1} n^4 \cdot \frac{1}{\epsilon} \geq \frac{r}{r-1} n^3 \phi(G) \cdot \frac{1}{\epsilon}$. [5]

Απόδειξη 19 Από το θεώρημα 6 για $S = \{x\}$, έστω x η κορυφή που επιλέγεται τυχαία και ομοιόμορφα έχουμε:

$$\mathbb{E}[\tau | X_0 = \{x\}] \leq \frac{r}{r-1} n^3 (\phi(G) - \phi(\{x\}))$$

Όμως από τον ορισμό του δυναμικού

$$\phi(G) - \phi(\{x\}) = \sum_{y \in V} \frac{1}{\deg y} - \sum_{y \in \{x\}} \frac{1}{\deg y} = \left(\sum_{y \in V} \frac{1}{\deg y} \right) - \frac{1}{\deg x} \leq n - \frac{1}{n} \leq n$$

Συμπερασματικά

$$\mathbb{E}[\tau] \leq \mathbb{E}[\tau | X_0 = \{x\}] \leq \frac{r}{r-1} n^4$$

, το ζητούμενο. Για τη δεύτερη ανισότητα χρειαζόμαστε πάλι την ανισότητα Markov 2. Για $X = \tau > 0$ και $a = \frac{rn^3 \phi(G)}{r-1}$ παίρνουμε:

$$\mathbb{P} \left(\tau \geq \frac{rn^3 \phi(G)}{(r-1)\epsilon} \right) \leq \frac{\mathbb{E}(\tau)}{\frac{rn^3 \phi(G)}{(r-1)\epsilon}} \leq \frac{\frac{rn^3 (\phi(G) - \phi(S))}{r-1}}{\frac{rn^3 \phi(G)}{(r-1)\epsilon}} \leq \epsilon$$

Η δεύτερη ανισότητα προκύπτει από το θεώρημα 6 και η τρίτη από το γεγονός ότι $\phi(G) - \phi(S) \leq \phi(G)$, $\forall S$. Όπως και προηγούμενως, έχουμε:

$$\mathbb{P} \left(\tau < \frac{rn^3 \phi(G)}{(r-1)\epsilon} \right) \geq 1 - \epsilon$$

, το ζητούμενο. [5] $\square$

Τελειώνοντας, θα ανακαλύψουμε φράγματα για την περίπτωση $r = 1$.

Θεώρημα 7 *Ο αναμενόμενος χρόνος απορρόφησης της διεργασίας Moran $(X_i)_{i \geq 0}$ με $r = 1$ σε γράφημα $G = (V, E)$ είναι το πολύ $n^4(\phi(G)^2 - \mathbb{E}[\phi(X_0)^2])$. Με μαθηματικούς όρους:*

$$\mathbb{E}(\tau) \leq n^4 (\phi(G)^2 - \mathbb{E}[\phi(X_0)^2])$$

[5]

Απόδειξη 20 Έστω X_0 η αρχική κατάσταση της μαρκοβιανής αλυσίδας, $m = \frac{\phi(G)}{2}$ και $\psi_i = m - \phi(X_i)$. Επομένως, για τις ακραίες τιμές του $X_i = \emptyset, V$ παίρνουμε τα φράγματα: $-\frac{\phi(G)}{2} = m \leq \psi_i \leq m = \frac{\phi(G)}{2}$ για την ψ_i . Επίσης από το λήμμα 9 έχουμε για $r = 1$ και $\forall S : \emptyset \subset S \subset V$:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[\phi(X_{i+1}) - \phi(X_i) | X_i = S] &= (1 - \frac{1}{r}) \frac{1}{n^3} = 0 \implies \\ \mathbb{E}[\phi(X_{i+1}) - m + m - \phi(X_i) | X_i = S] &= 0 \\ \mathbb{E}[\psi_i - \psi_{i+1} | X_i = S] &= 0 \implies \\ \mathbb{E}[\psi_{i+1} | X_i = S] &= \psi_i \end{aligned} \quad (4.8)$$

Μετά, παρατηρούμε ότι $\phi(X_{i+1}) = \phi(X_i)$ αν και μόνο αν $X_{i+1} = X_i$. Δηλαδή $m - \phi(X_{i+1}) = m - \phi(X_i)$ αν και μόνο αν $X_{i+1} = X_i$. Άρα, $\psi_{i+1} = \psi_i$ αν και μόνο αν $X_{i+1} = X_i$ και τελικά συμπληρωματικά παίρνουμε: $\psi_{i+1} \neq \psi_i$ αν και μόνο αν $X_{i+1} \neq X_i$, ως εκ τούτου

$$\mathbb{P}(\psi_{i+1} \neq \psi_i) = \mathbb{P}(X_{i+1} \neq X_i)$$

Αναζητούμε την πιθανότητα η μαρκοβιανή αλυσίδα να αλλάξει κατάσταση. Αφού $r = 1$ επιλέγουμε μια κορυφή τυχαία και ομοιόμορφα με πιθανότητα $\frac{1}{n}$, καθώς όλες οι κορυφές έχουν την ίδια δυναμικότητα σε αυτήν την περίπτωση. Για $|X_i| = \{0, n\}$, η μαρκοβιανή αλυσίδα έχει απορροφηθεί, οπότε οι παραπάνω πιθανότητες είναι 0. Για $0 < |X_i| < n$, υπάρχει τουλάχιστον μια ακμή από γηγενή σε μη-γγενή κάτοικο. Ως εκ τούτου, η πιθανότητα χτυπήσω μια κορυφή διαφορετικού τύπου, αλλάζοντας την κατάσταση της μαρκοβιανής αλυσίδας είναι

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{x \in X_i} \frac{1}{\deg x} &\geq \frac{1}{n} \cdot \frac{1}{n-1} \geq \frac{1}{n^2} \implies \\ \mathbb{P}(X_{i+1} \neq X_i) &\geq \frac{1}{n^2} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Τώρα, από τον ορισμό της ψ_i , όταν $\psi_{i+1} \neq \psi_i$ έχουμε:

$$\begin{aligned} |\psi_{i+1} - \psi_i| &= |m - \phi(X_{i+1}) - (m - \phi(X_i))| = |\phi(X_i) - \phi(X_{i+1})| \implies \\ \left| \sum_{x \in X_i} \frac{1}{\deg x} - \sum_{x \in X_{i+1}} \frac{1}{\deg x} \right| &\geq \frac{1}{\deg y} \geq \frac{1}{n-1} \geq \frac{1}{n} \implies \end{aligned}$$

, όπου y είναι μια κορυφή που ανήκει στο σύνολο $Y = \{|X_i - X_{i+1}|\}$

$$(\psi_{i+1} - \psi_i)^2 \geq \frac{1}{n^2} \quad (4.10)$$

Συνεπώς

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[(\psi_{i+1} - \psi_i)^2 | X_i] &= \\ \mathbb{P}(X_{i+1} \neq X_i | X_i) \cdot \mathbb{E}[(\psi_{i+1} - \psi_i)^2 | X_{i+1} \neq X_i | X_i] &+ \\ \mathbb{P}(X_{i+1} = X_i | X_i) \cdot \mathbb{E}[(\psi_{i+1} - \psi_i)^2 | X_{i+1} = X_i | X_i] \end{aligned}$$

Προφανώς η μέση τιμή $\mathbb{E}[(\psi_{i+1} - \psi_i)^2 | X_{i+1} = X_i] = 0$, άρα από τις 4.9, 4.10

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[(\psi_{i+1} - \psi_i)^2 | X_i] &= \mathbb{P}(X_{i+1} \neq X_i | X_i) \cdot \mathbb{E}[(\psi_{i+1} - \psi_i)^2 | X_i] \implies \\ \mathbb{E}[(\psi_{i+1} - \psi_i)^2 | X_i] &\geq \frac{1}{n^2} \cdot \frac{1}{n^2} = \frac{1}{n^4} \end{aligned} \quad (4.11)$$

Έστω τώρα $t_0 = \min\{t : |\psi_t| = m\}$, ο χρόνος σταματήματος ή τερματισμού της διαδικασίας (ο ελάχιστος χρόνος που παίρνει στην μαρκοβιανή αλυσίδα να φτάσει σε αποκατάσταση ή *stopping time*) για την ακολουθία $(\psi_t)_{t \geq 0}$. Από τον ορισμό το t_0 είναι ο ελάχιστος χρόνος που χρειάζεται η αλυσίδα, ώστε να φτάσει σε απορροφητική κατάσταση $X_t = \emptyset$ ή $X_t = V$. Έστω συνάρτηση:

$$Z_t = \begin{cases} \psi_t^2 - 2m\psi_t - n^{-4}t, & \text{αν } \psi_t < m \\ 3m^2 - n^{-4}t_0, & \text{αν } \psi_t \geq m. \end{cases}$$

Τώρα, θα δείξουμε ότι η $(Z_t)_{t \geq 0}$ είναι *submartingale*. Για $t \geq t_0$ είμαστε στην περίπτωση $\psi_t \geq m$, παίρνουμε $Z_{t+1} = Z_t$ άρα είναι *submartingale*. Για $t < t_0$ έχουμε:

$$\mathbb{E}[Z_{t+1} - Z_t | X_t] \geq \mathbb{E}[\psi_{t+1}^2 - 2m\psi_{t+1} - n^{-4}(t+1) - \psi_t^2 + 2m\psi_t + n^{-4}t | X_t] \quad (4.12)$$

διότι παρόλο που δεν γνωρίζουμε πόσο απέχει ο χρόνος $t+1$ από τον t_0 , γνωρίζουμε σε κάθε περίπτωση, αφού $|\psi_t| \leq m, \forall t$, ότι: $3m^2 \geq \psi_{t+1}^2 - 2m\psi_{t+1}, \forall t$.

Αν $t+1 = t_0$, τότε τα $n^{-4}t_0$ απλοποιούνται και $Z_{t+1} = 3m^2 - n^{-4}t_0 \geq \psi_{t+1}^2 - 2m\psi_{t+1} - n^{-4}(t+1)$. Αν $t+1 < t_0$, τότε είμαστε στην περίπτωση $\psi_t < m$, δηλαδή $Z_{t+1} = \psi_{t+1}^2 - 2m\psi_{t+1} - n^{-4}(t+1)$. Μετά από αυτήν την ανάλυση συνεχίζουμε τις πράξεις στην 4.12:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[Z_{t+1} - Z_t | X_t] &\geq \mathbb{E}[(\psi_{t+1}^2 - 2\psi_{t+1}\psi_t + \psi_t^2 - n^{-4}) + 2\psi_{t+1}\psi_t - 2\psi_t^2 - 2m\psi_{t+1} + 2m\psi_t] = \\ &= \mathbb{E}[(\psi_{t+1} - \psi_t)^2 - n^{-4}] + 2\mathbb{E}[(\psi_{t+1} - \psi_t)(\psi_t - m)] \\ &= \mathbb{E}[(\psi_{t+1} - \psi_t)^2 - n^{-4}] + \mathbb{E}[2((\psi_{t+1} - \psi_t)(\psi_t - m))] \end{aligned}$$

Από την 4.11 η πρώτη ποσότητα του αθροίσματος είναι θετική και από την 4.8 η δεύτερη ποσότητα είναι επίσης θετική. Άρα,

$$\mathbb{E}[Z_{t+1} - Z_t | X_t] \geq 0$$

.Επιπρόσθετα, $\mathbb{E}[Z_{t+1} - Z_t | X_t] \leq 3m^2 - n^{-4}(t+1) - (-m^2 - n^{-4}t) \leq 4m^2 < \infty$. Δηλαδή η $(Z_t)_{t \geq 0}$ είναι submartingale. Τώρα, θέλουμε να εφαρμόσουμε το θεώρημα σταματήματος ή τερματισμού 1 (optional stopping theorem) για τις καταστάσεις Z_0, Z_{t_0} . Έχουμε για $t = 0$:

$$\mathbb{E}[Z_0] = \mathbb{E}[\psi_0^2 - 2m\psi_0 - n^{-4} \cdot 0] = \mathbb{E}(\psi_0^2 - 2m\psi_0)$$

Από τους ορισμούς των ψ_t, m παίρνουμε:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}(\psi_0^2 - 2m\psi_0) &= \mathbb{E}[(m - \phi(X_0))^2 - 2m(m - \phi(X_0))] = \\ &= \mathbb{E}[-m^2 + \phi(X_0)^2] = \mathbb{E}[\phi(X_0)^2] - m^2 \implies \\ \mathbb{E}[Z_0] &= \mathbb{E}[\phi(X_0)^2] - m^2 \end{aligned} \quad (4.13)$$

και

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[Z_{t_0}] &= \mathbb{E}[3m^2 - n^{-4}t_0] \implies \\ \mathbb{E}[Z_{t_0}] &= 3m^2 - n^{-4}\mathbb{E}(t_0) \end{aligned} \quad (4.14)$$

Άρα πρέπει να αποδείξουμε πρώτα ότι $\mathbb{E}[t_0] < \infty, \forall t_0 > 0$, πριν συνεχίσουμε. Μπορούμε να κατανοήσουμε ότι αυτό ισχύει όταν η διαδικασία δεν ξεκινάει από απορροφητική κατάσταση. Αν η διαδικασία ξεκινούσε από απορροφητική κατάσταση, τότε τετριμμένα παίρνουμε:

$$\mathbb{E}(\tau) = 0$$

Αυστηρά μιλώντας έχουμε ότι σε κάθε μετάβαση η πιθανότητα μετάβασης από μια κατάσταση σε μια άλλη (διαφορετική από την προηγούμενη) όπως αποδείξαμε πριν είναι $\mathbb{P}(X_{i+1} \neq X_i) \geq \frac{1}{n^2}$. Επειδή συζητάμε για μια γεωμετρική κατανομή, όπου κάθε επανάληψη θεωρούμε πως είναι μια n -άδα μεταβάσεων, η μέση της τιμή είναι $\mathbb{E}(t_0) \leq \frac{1}{p}$. Με άλλα λόγια, συμβολίσαμε με p την πιθανότητα τερματισμού κάθε επανάληψης, διότι από την στιγμή που μια επανάληψη φτάσει σε απορρόφηση θα έχουμε: $\mathbb{P}(X_{i+1} = X_i), \forall i$ από εκείνη την χρονική στιγμή και μετά. Ειδικότερα, αναζητούμε κάτω φράγμα για την p , προκειμένου να φράξουμε την $\mathbb{E}(t_0)$. Οπότε σε μια ακολουθία n μεταβάσεων η πιθανότητα να μην έχω απορρόφηση είναι τουλάχιστον $p = (\frac{1}{n^2})^n$. Συνεπώς,

$$\mathbb{E}(t_0) \leq n^{2n} < \infty$$

Στο σημείο αυτό μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε επιτυχώς την ανισότητα του θεωρήματος σταματήματος και τις σχέσεις 4.13 και 4.14 για να εξάγουμε τα παρακάτω:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}[Z_0] &= \mathbb{E}[\phi(X_0)^2] - m^2 \leq \mathbb{E}[Z_{t_0}] = 3m^2 - n^{-4}\mathbb{E}(t_0) \implies \\ n^{-4}\mathbb{E}(t_0) &\leq 4 \left(\frac{1}{2} \phi(G) \right)^2 - \mathbb{E}[\phi(X_0)^2] \implies \\ \mathbb{E}(t_0) &\leq n^4 (\phi(G)^2 - \mathbb{E}[\phi(X_0)^2]) \end{aligned}$$

Όμως προφανώς t_0 είναι ο χρόνος τερματισμού της διαδικασίας, άρα έχουμε:

$$\mathbb{E}(\tau) \leq n^4 (\phi(G)^2 - \mathbb{E}[\phi(X_0)^2])$$

,το ζητούμενο. [5] $\square$

Λήμμα 13 (i) Όταν $r = 1$ και η μοναδική κορυφή τύπου M επιλέγεται τυχαία και ομοιομόμορφα, ο αναμενόμενος χρόνος απορρόφησης της διεργασίας Moran είναι το πολύ $t = \phi(G)^2 n^4$. Με μαθηματικούς όρους:

$$\mathbb{E}(\tau) \leq \phi(G)^2 n^4$$

(ii) Για κάθε $\epsilon \in (0, 1)$ η διεργασία φτάνει σε απορρόφηση μέσα σε $\frac{t}{\epsilon}$ βήματα με πιθανότητα τουλάχιστον $1 - \epsilon$. [5]

Απόδειξη 21 Για το (i) χρησιμοποιούμε το θεώρημα 7 και το γεγονός ότι $\mathbb{E}[\phi(X_0)^2] > 0$. Πιο συγκεκριμένα,

$$\mathbb{E}(\tau) \leq n^4 (\phi(G)^2 - \mathbb{E}[\phi(X_0)^2]) \leq n^4 \phi(G)^2$$

, το ζητούμενο. Σε αυτό το σημείο παρατηρούμε ότι το σφάλμα που κάνουμε είναι αμελητέο, διότι όταν η αρχική κορυφή τύπου M επιλέγεται τυχαία και ομοιόμορφα έχουμε:

$$\mathbb{E}[\phi(X_0)^2] = \frac{1}{n} \sum_{x \in V(G)} \frac{1}{(\deg x)^2}$$

Χρησιμοποιούμε την ανισότητα Cauchy – Schwarz ή απλώς το γεγονός ότι το άθροισμα τετραγώνων πεπερασμένου πλήθους όρων είναι μικρότερο ή ίσο από το τετράγωνο του αθροίσματος των όρων στον χώρο $\mathbb{R}^n$. Τελικά, έχουμε:

$$\mathbb{E}[\phi(X_0)^2] \leq \frac{1}{n} \left(\sum_{x \in V(G)} \frac{1}{\deg x} \right)^2 = \frac{\phi(G)^2}{n}$$

. Δηλαδή $\mathbb{E}(\tau) \leq \phi(G)^2 (n^4 - \frac{1}{n})$ το σφάλμα είναι της τάξης $O(\frac{1}{n})$.

Για το (ii) χρησιμοποιούμε την Ανισότητα του Markov 2. Για $X = \tau > 0$ και $a = \frac{t}{\epsilon} = \frac{\phi(G)^2 n^4}{\epsilon} > 0$ παίρνουμε:

$$\mathbb{P}(\tau \geq \phi(G)^2 n^4) \leq \frac{\mathbb{E}[\tau]}{\frac{\phi(G)^2 n^4}{\epsilon}} \leq \frac{\phi(G)^2 n^4}{\phi(G)^2 n^4} \epsilon = \epsilon$$

έπεται από το (i). Τώρα, αναλύοντας περαιτέρω:

$$1 - \mathbb{P}(\tau < \phi(G)^2 n^4) \leq \epsilon \implies$$

$$\mathbb{P}(\tau < \phi(G)^2 n^4) \geq 1 - \epsilon$$

, το ζητούμενο. Ειδικότερα, μέσα σε $t = \phi(G)^2 n^4$ βήματα η διεργασία φτάνει σε απορρόφηση με πιθανότητα τουλάχιστον $1 - \epsilon$, $\epsilon \in (0, 1)$. [5] $\square$

4.3 Προσεγγιστικοί Αλγόριθμοι

Στο σημείο αυτό κατέχουμε όλα τα εργαλεία, ώστε να αναλύσουμε το Πλήρως Πολυωνυμικό Τυχαιοποιημένο Προσεγγιστικό Σχήμα (*FPRAS*) αποτελεσματικά για το πρόβλημα Προσέγγισης Πιθανότητας Αποκατάστασης. Στα ακόλουθα κρίσιμα θεωρήματα θα αναζητήσουμε *FPRAS* για την διεργασία *Moran*. Προφανώς, απαιτείται για τον *FPRAS* οι χρόνοι τρεξίματος να είναι πολυωνυμικής τάξης για τα n και $\frac{1}{\epsilon}$.

Θεώρημα 8 Υπάρχει τουλάχιστον ένας *FPRAS* για το πρόβλημα της *Moran* αποκατάστασης του πληθυσμού, για $r \geq 1$. [5]

Απόδειξη 22 Καταρχάς, ώστε να είναι έγκυρος και ορθός ο αλγόριθμος παίρνουμε τις εξής περιπτώσεις:

- 1) Αν $r = 1$ επιστρέφουμε $f_{G,1} = \frac{1}{n}$ από το λήμμα 5.
- 2) Διαφορετικά, αν $r > 1$ κάνουμε προσομοίωση στην διεργασία *Moran* στο G , για το πολύ $T = \lceil \frac{8r}{r-1} N n^4 \rceil + 1$ βήματα σε κάθε επανάληψη και $N = \lceil \frac{1}{2} \epsilon^{-2} n^2 \ln 16 \rceil + 1$ επαναλήψεις.
- 3) Αν μια επανάληψη δεν φτάσει σε απορροφητική κατάσταση (αποκατάστασης ή αφανισμού) μέσα σε T βήματα, τότε επιστρέφουμε σφάλμα και ο αλγόριθμος τερματίζει.

Αρχικά, σημειώνουμε ότι η αναπαραγωγή τυχαίων *bits* παίρνει χρόνο $O(\log n) \leq O(n)$. Επομένως, κάθε μετάβαση της διεργασίας *Moran* παίρνει $O(\log n)$ χρόνο. Συνολικά, ο αλγόριθμος τερματίζει σε $O(NT \log n)$, καθώς χρειάζεται το πολύ T βήματα σε κάθε μία από τις N επαναλήψεις. Επομένως, για να λειτουργήσει ο *FPRAS* πρέπει να επιλέξουμε T, N , τέτοια ώστε ο χρόνος τερματισμού να είναι πολυωνυμικός ως προς $|X| = n$ και $\frac{1}{\epsilon}$.

Σε αυτό το σημείο θα εξετάσουμε αν το σφάλμα είναι αποδεκτό για τον *FPRAS*, ο οποίος απαιτεί την προσέγγιση να είναι σωστή με πιθανότητα τουλάχιστον $\frac{3}{4}$. Δηλαδή

$$\mathbb{P}((1 - \epsilon)f_{G,r}(X) \leq g(X) \leq (1 + \epsilon)f_{G,r}(X)) \geq \frac{3}{4}$$

Υπάρχουν δύο πιθανά σφάλματα στον αλγόριθμο:

(i) Τουλάχιστον μια από τις N επαναλήψεις της προσομοίωσης δεν φτάνει σε απορροφητική κατάσταση (αποκατάστασης ή αφανισμού) μέσα σε T βήματα. Ως εκ τούτου ο αλγόριθμος επιστρέφει *ERROR*.

(ii) Η προσέγγισή μας δεν είναι μέσα στα αναμενόμενα φράγματα που δημιουργήσαμε με τον *FPRAS*.

Καθώς τα δύο σφάλματα είναι ανεξάρτητα θα ελέγξουμε το καθένα ξεχωριστά κι έπειτα θα τα συμψηφίσουμε. (i) Καταρχάς, εξετάζουμε την πιθανότητα σφάλματος μη-τερματισμού. Επιλέγουμε κατάλληλα σύμφωνα με το λήμμα 12, την πιθανότητα κάθε μία από τις N επαναλήψεις να τερματίζει, ώστε $T = \lceil \frac{r-1}{8N} n^4 \rceil + 1$. Με άλλα λόγια, η πιθανότητα απορρόφησης είναι τουλάχιστον $1 - \frac{1}{8N}$, σύμφωνα με το λήμμα 12. Συνεπώς:

$$\mathbb{P}(\text{η διαδικασία να τερματίσει μέσα σε } T \text{ βήματα σε απορροφητική κατάσταση}) \geq 1 - \frac{1}{8N}$$

Άρα,

$$\mathbb{P}(\text{η διαδικασία να μην τερματίσει μέσα σε } T \text{ βήματα σε απορροφητική κατάσταση}) < \frac{1}{8N}$$

Θεωρούμε B_i : το ενδεχόμενο η i -οστή επανάληψη να μην τερματίσει μέσα σε T βήματα, $i = 1, 2, \dots, N$, $N \geq 1$. Τότε, κάθε επανάληψη έχει πιθανότητα να μην ολοκληρωθεί μέσα σε T το πολύ $\frac{1}{8}$. Ειδικότερα, παίρνουμε μοναδιαίο φράγμα (Boole). Επομένως, λόγω ανεξαρτησίας των προσομοιώσεων προκύπτει:

$$\mathbb{P}(\cup_{i=1}^n B_i) = \sum_{i=1}^n \mathbb{P}(B_i) \leq \frac{1}{8N} N = \frac{1}{8}$$

Συμπεραίνουμε ότι η πιθανότητα σφάλματος μη-τερματισμού (i) είναι το πολύ $\frac{1}{8}$.

(ii) Τώρα θα εξετάσουμε την πιθανότητα σφάλματος προσέγγισης. Επειδή έχουμε λάβει υπόψιν την περίπτωση τουλάχιστον 1 επανάληψη να μην φτάσει σε απορρόφηση στο (i), θεωρούμε πλέον ότι όλες οι επαναλήψεις τερματίζουν σε μία από τις δύο απορροφητικές καταστάσεις (αποκατάστασης ή αφανισμού) και μάλιστα χρειάζονται το πολύ T βήματα.

Έτσι, εφαρμόζοντας την ανισότητα Hoeffding, εκτιμάται η αναμενόμενη πιθανότητα αποκατάστασης $f_{G,r}$. Έστω X_i δείκτρια συνάρτηση που για $i \in \{1, 2, \dots, N\}$ επιστρέφει:

$$X_i = \begin{cases} 1, & \text{αν η } i\text{-οστή επανάληψη φτάνει σε απορροφητική κατάσταση αποκατάστασης} \\ 0, & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

Βάσει των παραπάνω, μπορούμε να κάνουμε μια πολύ καλή εκτίμηση της πιθανότητας αποκατάστασης με την γνωστή εκτιμήτρια συνάρτηση $p = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i$. Επιπρόσθετα, $\mathbb{E}(p) = \mathbb{E}\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i\right) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbb{E}(X_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_{G,r} = f_{G,r}$. Τελικά, η πιθανότητα του σφάλματος προσέγγισης (ii) είναι η εξής:

$$\mathbb{P}(|p - f_{G,r}| > \epsilon f_{G,r}) = \mathbb{P}(|Np - Nf_{G,r}| > N\epsilon f_{G,r})$$

χρησιμοποιώντας την ανισότητα Hoeffding 4, για $p_n = Np$, $E(p_n) = E(p)$ και $t = N\epsilon f_{G,r}$ έχουμε:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(|Np - Nf_{G,r}| > N\epsilon f_{G,r}) &\leq 2e^{-\frac{(2N\epsilon f_{G,r})^2}{N}} \\ &= 2e^{-4N\epsilon^2 f_{G,r}^2} = 2e^{-4 \cdot \frac{1}{4} \epsilon^{-2} n^2 \ln 16 \cdot \epsilon^2 \cdot f_{G,r}^2} = 2e^{-n^2 f_{G,r}^2 \ln 16} \end{aligned}$$

εφαρμόζοντας το λήμμα 6 $f_{G,r} \geq \frac{1}{n} \implies n^2 f_{G,r}^2 \geq 1, \forall r \geq 1$ και δεδομένου ότι η παραπάνω συνάρτηση είναι φθίνουσα έχουμε:

$$2e^{-n^2 f_{G,r}^2 \ln 16} \leq 2e^{-\ln 16} = \frac{1}{8}$$

Ανακεφαλαιώνοντας, $\mathbb{P}(|p - f_{G,r}| > \epsilon f_{G,r}) \leq \frac{1}{8}$ και $\mathbb{P}(\cup_{i=1}^n B_i) < \frac{1}{8}$ και η συνολική πιθανότητα σφάλματος είναι

$$\mathbb{P}_{total}(\text{σφάλματος}) \leq \frac{1}{4}$$

Κατά αυτόν τον τρόπο αποδείξαμε ότι η πιθανότητα η προσέγγισή μας να είναι ανάμεσα στις ποσότητες $(1 - \epsilon)f_{G,r}$ και $(1 + \epsilon)f_{G,r}$ είναι τουλάχιστον 0.75, πιο αυστηρά:

$$\mathbb{P}((1 - \epsilon)f_{G,r}(X) \leq g(X) \leq (1 + \epsilon)f_{G,r}(X)) \geq \frac{3}{4}$$

, το ζητούμενο. [5] $\square$

Αξιοσημείωτο είναι το γεγονός ότι σε θεωρητικό επίπεδο δεν έχει νόημα να ελαχιστοποιήσουμε το σφάλμα χαμηλότερα από το $\frac{1}{4}$. Διότι από την ανάλυση του *FPRAS*, είναι φανερό πως πρακτικά μπορούμε με αύξηση των βημάτων κάθε επανάληψης T να κάνουμε την πιθανότητα σφάλματος (i) αυθαίρετα μικρή και με αύξηση των επαναλήψεων N να κάνουμε την πιθανότητα σφάλματος (ii), επίσης, αυθαίρετα μικρή αντίστοιχα. Επιπρόσθετως, η αντίστροφη της εκθετικής συνάρτησης που εμφανίζεται από την ανισότητα *Hoeffding* φθίνει πολύ γρήγορα. Συνεπώς, είναι δυνατόν με μικρό υπολογιστικό κόστος να αυξήσουμε την ακρίβεια της προσέγγισης σε μεγάλο βαθμό.

Θεώρημα 9 Υπάρχει τουλάχιστον ένας *FPRAS* για το πρόβλημα του *Moran* αφανισμού, $\forall r > 0$. [5]

Απόδειξη 23 Θα εργαστούμε ανάλογα με το θεώρημα 8. Θεωρούμε πως $f_{G,r}^- = 1 - f_{G,r}$ είναι η πιθανότητα αφανισμού του πληθυσμού, καθώς υπενθυμίζουμε ότι η διαδικασία *Moran* τερματίζει σχεδόν βέβαια (με πιθανότητα 1). Διακρίνουμε ανάλογες περιπτώσεις με πριν:

1) Αρχικά, αν $r = 1$ επιστρέφουμε $f_{G,1}^- = 1 - \frac{1}{n}$.

2) Αν $r \neq 1$ επιλέγουμε κατάλληλα τον μέγιστο αριθμό των βημάτων σε κάθε επανάληψη

$$T(r) = \begin{cases} \lfloor \frac{8}{1-r} N n^3 \rfloor + 1 & \text{αν } r < 1 \\ \lfloor \frac{8r}{r-1} N n^4 \rfloor + 1 & \text{αν } r > 1 \end{cases}$$

και

$$N = \lfloor \frac{1}{2} \epsilon^{-2} (r + n)^2 \ln 16 \rfloor + 1$$

για τον αριθμό των επαναληψησεων που θα τρέξουμε.

3) Αν κάποια επανάληψη δεν φτάσει σε απορρόφηση μέσα σε

$$T(r) = \begin{cases} \lfloor \frac{8}{1-r} N n^3 \rfloor + 1 & \text{αν } r < 1 \\ \lfloor \frac{8r}{r-1} N n^4 \rfloor + 1 & \text{αν } r > 1 \end{cases}$$

βήματα επιστρέφουμε σφάλμα.

Διακρίνουμε 2 πιθανά σφάλματα στον αλγόριθμο:

(i) Η πιθανότητα σφάλματος μη-τερματισμού του αλγορίθμου. Διακρίνουμε 2 υποπεριπτώσεις:

α) Καταρχάς, για $r < 1$ επιλέγουμε κατάλληλα σύμφωνα με το λήμμα 11, την πιθανότητα κάθε μία από τις N επαναλήψεις να τερματίζει, ώστε $T(r) = \left\lceil \frac{1-r}{8N} n^3 \right\rceil + 1$. Με άλλα λόγια, η πιθανότητα απορρόφησης είναι τουλάχιστον $1 - \frac{1}{8N}$, σύμφωνα με το λήμμα 11. Συνεπώς:

$$\mathbb{P}(T \leq T(r)) =$$

$$\mathbb{P}(\text{η διαδικασία να τερματίσει μέσα σε } T(r) \text{ βήματα σε απορρόφηση}) \geq 1 - \frac{1}{8N} \implies$$

$$\mathbb{P}(\text{η διαδικασία να μην τερματίσει μέσα σε } T(r) \text{ βήματα σε απορρόφηση}) < \frac{1}{8N}$$

Παρόμοια με προηγουμένως, θεωρούμε B_i : το ενδεχόμενο η i -οστή επανάληψη να μην τερματίσει μέσα σε T βήματα, $i = 1, 2, \dots, N$, $N \geq 1$. Τότε, κάθε επανάληψη έχει πιθανότητα να μην ολοκληρωθεί μέσα σε T βήματα, το πολύ $\frac{1}{8}$. Ειδικότερα, παίρνουμε μοναδιαίο φράγμα (Boole). Επομένως, λόγω ανεξαρτησίας των προσομοιώσεων προκύπτει:

$$\mathbb{P}(\cup_{i=1}^n B_i) = \sum_{i=1}^n \mathbb{P}(B_i) \leq \frac{1}{8N} N = \frac{1}{8}$$

Συμπεραίνουμε ότι η πιθανότητα σφάλματος τερματισμού (i), για $r < 1$ είναι το πολύ $\frac{1}{8}$.

β) Στη συνέχεια, για $r > 1$ επιλέγουμε κατάλληλα σύμφωνα με το λήμμα 12, την πιθανότητα κάθε μία από τις N επαναλήψεις να τερματίζει, ώστε $T(r) = \left\lceil \frac{r-1}{8N} n^4 \right\rceil + 1$. Με άλλα λόγια, η πιθανότητα απορρόφησης είναι τουλάχιστον $1 - \frac{1}{8N}$, σύμφωνα με το λήμμα 12. Συνεπώς:

$$\mathbb{P}(\text{η διαδικασία να τερματίσει μέσα σε } T(r) \text{ βήματα σε απορρόφηση}) \geq 1 - \frac{1}{8N} \implies$$

$$\mathbb{P}(\text{η διαδικασία να μην τερματίσει μέσα σε } T(r) \text{ βήματα σε απορρόφηση}) < \frac{1}{8N}$$

Παρομοίως, θεωρούμε B_i : το ενδεχόμενο η i -οστή επανάληψη να μην τερματίσει μέσα σε T βήματα, $i = 1, 2, \dots, N$, $N \geq 1$. Τότε, κάθε επανάληψη έχει πιθανότητα να μην ολοκληρωθεί μέσα σε T το πολύ $\frac{1}{8}$. Ειδικότερα, παίρνουμε μοναδιαίο φράγμα (Boole). Επομένως, λόγω ανεξαρτησίας των προσομοιώσεων προκύπτει:

$$\mathbb{P}(\cup_{i=1}^n B_i) = \sum_{i=1}^n \mathbb{P}(B_i) \leq \frac{1}{8N} N = \frac{1}{8}$$

Συμπεραίνουμε ότι η πιθανότητα σφάλματος μη-τερματισμού (i) για $r > 1$ είναι το πολύ $\frac{1}{8}$. Ανακεφαλαιώνοντας, η συνολική πιθανότητα σφάλματος μη-τερματισμού είναι $p = \max\{\mathbb{P}_{r<1}, \mathbb{P}_{r>1}\} \leq \frac{1}{8}$. [5]

(ii) Τώρα θα εξετάσουμε την πιθανότητα σφάλματος προσέγγισης. Επειδή έχουμε λάβει υπόψιν την περίπτωση τουλάχιστον 1 επανάληψη να μην φτάσει σε απορρόφηση στο (i), θεωρούμε πλέον ότι όλες οι επαναλήψεις τερματίζουν σε μία από τις δύο απορροφητικές καταστάσεις (αποκατάσταση ή αφανισμού) και μάλιστα χρειάζονται το πολύ $T(r)$ βήματα. Έστω X_i δείκτρια συνάρτηση που για $i \in \{1, 2, \dots, N\}$ επιστρέφει:

$$X_i = \begin{cases} 1, & \text{όταν η } i\text{-οστή επανάληψη φτάνει σε απορροφητική κατάσταση (fixation)} \\ 0, & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

Βάσει των παραπάνω, μπορούμε να κάνουμε μια πολύ καλή εκτίμηση της πιθανότητας αποκατάστασης με την γνωστή εκτιμήτρια συνάρτηση $\tilde{p} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i$. Επιπρόσθετα, $\mathbb{E}(\tilde{p}) = \mathbb{E}\left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X_i\right) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbb{E}(X_i) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f_{G,r}^- = f_{G,r}^-$. Τελικά, το σφάλμα προσέγγισης είναι το εξής:

$$\mathbb{P}(|\tilde{p} - f_{G,r}^-| > \epsilon f_{G,r}^-) = \mathbb{P}(|N\tilde{p} - Nf_{G,r}^-| > N\epsilon f_{G,r}^-)$$

χρησιμοποιώντας την ανισότητα Hoeffding 4, για $\tilde{p}_n = N\tilde{p}$, $E(\tilde{p}_n) = E(\tilde{p})$ και $t = N\epsilon f_{G,r}^-$ έχουμε:

$$\begin{aligned} \mathbb{P}(|N\tilde{p} - Nf_{G,r}^-| > N\epsilon f_{G,r}^-) &\leq 2e^{-\frac{(2N\epsilon f_{G,r}^-)^2}{N}} \\ &= 2e^{-4N\epsilon^2 f_{G,r}^{-2}} = 2e^{-4 \cdot \frac{1}{4} \epsilon^{-2} (n+r)^2 \ln 16 \cdot \epsilon^2 \cdot f_{G,r}^{-2}} = 2e^{-(n+r)^2 f_{G,r}^{-2} \ln 16} \end{aligned}$$

εφαρμόζοντας το λήμμα 8 $f_{G,r} \leq 1 - \frac{1}{n+r} \implies f_{G,r}^- \geq \frac{1}{n+r} \implies f_{G,r}^{-2} \geq \frac{1}{(n+r)^2}, \forall r > 0$ και δεδομένου ότι η παραπάνω συνάρτηση είναι φθίνουσα έχουμε:

$$2e^{-n^2 f_{G,r}^{-2} \ln 16} \leq 2e^{-\ln 16} = \frac{1}{8}$$

Ανακεφαλαιώνοντας, $\mathbb{P}(|\tilde{p} - f_{G,r}^-| > \epsilon f_{G,r}^-) \leq \frac{1}{8}$ και

$\mathbb{P}(\text{η διαδικασία να μην τερματίσει μέσα σε } T(r) \text{ βήματα σε απορροφητική κατάσταση}) \leq \frac{1}{8}$ και η συνολική πιθανότητα σφάλματος είναι

$$\mathbb{P}_{total}(\text{σφάλματος}) \leq \frac{1}{4}$$

Κατ' αυτόν τρόπο αποδείξαμε ότι η πιθανότητα η προσέγγισή μας να είναι ανάμεσα στις ποσότητες $(1 - \epsilon)f_{G,r}^-$ και $(1 + \epsilon)f_{G,r}^-$ είναι τουλάχιστον 0.75, πιο αυστηρά:

$$\mathbb{P}((1 - \epsilon)f_{G,r}^-(X) \leq g(X) \leq (1 + \epsilon)f_{G,r}^-(X)) \geq \frac{3}{4}$$

, το ζητούμενο. [5] $\square$

Κεφάλαιο 5

Ανοικτά Προβλήματα

Τα αποτελέσματα που παρουσιάσαμε ισχύουν για κάθε μη-κατευθυντικό συνεκτικό γράφημα $G = (V, E)$ τάξης n , ανεξαρτήτως δομής και αριθμό κορυφών n αυθαίρετο. Διακρίθηκαν οι περιπτώσεις για την δυναμικότητα $r > 0$.

5.1 Προσέγγιση Πιθανότητας Αποκατάστασης ($r < 1$)

Σε αυτό το σημείο αναδεικνύεται το πρώτο ερώτημα: Υπάρχει $FPRAS$ για το πρόβλημα της *Moran* αποκατάστασης για $r < 1$;

Η απάντηση είναι ΟΧΙ. Έστω ότι υπήρχε, τότε για κάθε γράφημα, ανεξαρτήτως δομής, υπάρχει αλγόριθμος που τρέχει σε πολυωνυμικό χρόνο n και $\frac{1}{\epsilon}$. Το αντιπαράδειγμά μας είναι το πλήρες γράφημα K_n , με γνωστή πιθανότητα αποκατάστασης $f_{K_n, r} = \frac{1 - \frac{1}{r}}{1 - \frac{1}{r^n}}$, όπως αποδείξαμε [1]. Η πιθανότητα αυτή είναι τάξης $\Theta(r^{n-1}) = \Theta(r^n)$, $\forall 0 < r < 1$, εκθετικά μικρή (προφανώς $n > 1$). Επομένως, αν προσπαθήσουμε να αντισταθμίσουμε την τάξη της πιθανότητας αυτής με πολλές επαναλήψεις, ώστε να μειώσουμε την πιθανότητα (i) σφάλματος μη-τερματισμού, θα αποτύχουμε, καθώς είμαστε περιορισμένοι σε πολυωνυμικό χρόνο τρεξίματος $O(NT \log n)$. Όπου N είναι ο αριθμός των επαναλήψεων του αλγορίθμου, όπου T ο χρόνος τερματισμού κάθε επανάληψης και όπου n αυθαίρετο (ο αριθμός των κορυφών του γραφήματος). Ως εκ τούτου το N πρέπει να είναι το πολύ πολυωνυμικής τάξης ως προς τα n και $\frac{1}{\epsilon}$. Αναλυτικότερα, έστω δείκτρια συνάρτηση

$$F_i = \begin{cases} 1 & \text{,αν την } i\text{-οστή επανάληψη η διαδικασία φτάσει σε απορρόφηση} \\ 0 & \text{,διαφορετικά} \end{cases}$$

τότε έχουμε:

$$W(N) = \mathbb{P} \left(\sum_{i=1}^N F_i \geq 1 \right) =$$

$\mathbb{P} (\geq 1 \text{ επανάληψη, από τις } N = \Theta(n^m \epsilon^{-k}), k, m \in \mathbb{R}_+, \text{ φτάνει σε απορρόφηση}),$
όπου k, m αυθαίρετες θετικές σταθερές. Θεωρούμε Y_i : το ενδεχόμενο την i -οστή

επανάληψη του αλγορίθμου του προβλήματος της *Moran* αποκατάστασης να φτάσει σε απορρόφηση, $i \in \{1, 2, \dots, N\}$. Τότε $\mathbb{P}(Y_i) = \Theta(r^n)$, $\forall i$ και έχουμε:

$$W(N) = \mathbb{P}(\cup_{i=1}^N Y_i)$$

Εφόσον, μιλάμε για προσομοίωση οι τυχαίες μεταβλητές Y_i είναι ανεξάρτητες. Άρα,

$$\mathbb{P}(\cup_{i=1}^N Y_i) = \sum_{i=1}^N \mathbb{P}(Y_i) \leq N \cdot P(Y_i) = \Theta(n^m \epsilon^{-k} \cdot r^n) = \Theta\left(\frac{n^m \epsilon^{-k}}{r^{-n}}\right)$$

Επειδή το n μπορεί να είναι αυθαίρετα μεγάλο, το αποτέλεσμα τείνει στο 0 σχεδόν πάντα:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} W(N(n)) = 0, \forall k, m \in \mathbb{R}_+$$

Με απλά λόγια η πιθανότητα τουλάχιστον μια επανάληψη από τις $N = \Theta(n^m \epsilon^{-k})$ να φτάσει σε απορρόφηση (αποκατάσταση) τείνει στο 0, όταν το γράφημα έχει αρκετά μεγάλο αριθμό κορυφών. Ειδικότερα, η προσέγγιση του αλγορίθμου θα είναι κοντά στο 0, σχεδόν πάντα. Συνεπώς, δεν λαμβάνουμε χρήσιμη πληροφορία από τον *FPRAS*, εφόσον υπάρχει γράφημα, στο οποίο είναι σχεδόν βέβαιο ότι ο αλγόριθμος δεν θα τερματίσει ούτε σε μια επανάληψη. $\square$

Ανακεφαλαιώνοντας, δεν λειτουργεί ο *FPRAS* για το πρόβλημα της *Moran* αποκατάστασης για $r < 1$, όπως λειτουργεί για $r \geq 1$. Παραμένει ανοικτό πρόβλημα μέχρι σήμερα, η προσέγγιση της πιθανότητας αποκατάστασης για το παραπάνω πρόβλημα.

5.2 Προσέγγιση Αναμενόμενου Χρόνου Απορρόφησης

Το δεύτερο ερώτημα είναι: Υπάρχει βελτίωση της προσέγγισης του αναμενόμενου χρόνου απορρόφησης για τις διάφορες τιμές του $r > 0$, αν προσθέσουμε στο γράφημα δομικές ιδιότητες ή αν ανακαλύψουμε μια πιο αποτελεσματική συναρτηση δυναμικού;

Για παράδειγμα η συνάρτηση δυναμικού $\sum_{x \in V} \frac{1}{\deg_{G_2} x}$, όπου η κορυφή x χτυπάει κάθε φορά τον δεύτερο γείτονά της. Υπενθυμίζουμε ότι με μεγάλη πιθανότητα (σχεδόν βέβαια) η διαδικασία *Moran* σε ένα μη-κατευθυντικό γράφημα η κορυφών με μοναδικό μη-γηνγενή κάτοικο επιλεγμένο τυχαία και ομοιόμορφα, φτάνει σε απορροφητική κατάσταση (αποκατάστασης ή αφανισμού του πληθυσμού):

1. Σε $O(n^6)$ βήματα αν $r = 1$
2. Σε $O(n^4)$ βήματα αν $r > 1$
3. Σε $O(n^3)$ βήματα αν $r < 1$ [5]

Συγκεφαλαιώνοντας, δεν γνωρίζαμε αν υπάρχουν καλύτερα φράγματα για τον αναμενόμενο χρόνο απορρόφησης μέχρι το 2014. Ωστόσο, σήμερα έχει βρεθεί αποτελεσματικότερη συνάρτηση δυναμικού που δίνει το βέλτιστο φράγμα του αναμενόμενου χρόνου απορρόφησης για $r > 1$, $\mathbb{E}(\tau) = \Theta(n^2 \log n)$, από

τους *Laumanns, Thiele* και *Zitzler* το 2019 στο *ETH*. Αντιθέτως, για $r < 1$ μέχρι και σήμερα δεν έχει ανακαλυφθεί βελτίωση στο φράγμα του χρόνου απορρόφησης.

Βιβλιογραφία

- [1] Marin A. Nowak, *Evolutionary Dynamics, Exploring the equations of Life* (2006, Belknap Press of Harvard University Press).
- [2] J.R. Norris, *Cambridge Series in Statistical and Probabilistic Mathematics, Markov Chains* (1997, Cambridge University Press and Assessment).
- [3] R. Motwani and P. Raghavan, *Randomized Algorithms* (1995, Cambridge University Press and Assessment).
- [4] Sheldon M. Ross, *Stochastic Processes Second Edition* (1983, John Wiley and Sons, Inc.).
- [5] Díaz, J., Goldberg, L.A., Mertzios, G.B. et al. Approximating Fixation Probabilities in the Generalized Moran Process. *Algorithmica* 69, 78–91 (2014). <https://doi.org/10.1007/s00453-012-9722-7>