A. K. Slizhevsky, New Estimations of Fixation Time Mean for Populations with Fixed Size, *Vestn. Novosib. Gos. Univ., Ser. Mat. Mekh. Inform.*, 2011, Volume 11, Issue 4, 94–106

УДК 519.21

А. К. Слижевский

НОВЫЕ ОЦЕНКИ СРЕДНЕГО ВРЕМЕНИ ФИКСАЦИИ ДЛЯ ПОПУЛЯЦИЙ ПОСТОЯННОГО ОБЪЕМА

Рассмотрена популяция, состоящая из N частиц, каждой из которых приписан некоторый тип. Все частицы в целочисленные моменты времени гибнут и порождают случайное число частиц того же типа, что и родитель. При этом популяция сохраняет размер N, а случайные векторы, задающие численность потомства от каждой частицы, имеют распределения, независимые относительно любых перестановок координат. Доказана справедливость верхней оценки, основанной на разложении функции $v(k)$ по формуле Тейлора с точностью до 5-го момента. Приведены условия, при которых новая оценка улучшает ранее известную.

Ключевые слова: цепи Маркова, эволюция популяций, ближайший общий предок, время фиксации, имитационное моделирование.

Введение

В популяционной динамике и анализе эволюции популяций, основанных на изменениях ДНК, активно используются марковские модели. Одним из популярных классов моделей такого рода является класс гаплоидных моделей фиксированного размера N (см. [1–4]) без мутаций. Это модели с дискретным временем, в которых изначально имеется некоторое количество частиц, относящихся к одному из возможных типов. Далее каждая из них гибнет, порождая при этом случайное количество потомков. Закон размножения и гибели таков, что суммарная численность популяции не изменяется. Условие «гаплоидный» означает, что каждый потомок имеет не более одного родителя. Отсутствие мутаций состоит в том, что частицы производят только себе подобных.

В работах [1; 2], а также в [5] изучается модель, в которой каждый предок вносит свой аддитивный вклад в потомство, а итоговое распределение инвариантно относительно перестановок частиц родителей. В принципе, все это сильно перекликается с условием ветвления: каждая частица порождает свой независимый ветвящийся процесс, но с жестким условием фиксированной общей численности потомства.

Приведем формальное описание модели *популяции постоянной численности*. Объем популяции всегда равен N и каждая из частиц может принадлежать одному из N типов. Состав популяции изменяется в целочисленные моменты времени. Пусть в произвольный фиксированный момент времени популяция описывается вектором $\mathbf{k} := (k_1, \dots, k_N)$, где $k_j \in \{0, \dots, N\}$ — количество частиц j-го типа, и $|\mathbf{k}| := k_1 + \dots + k_N = N$. Здесь и далее равенство с двоеточием обозначает определение символов или выражений, стоящих со стороны двоеточия. Обозначим через $K_1, \dots, K_N$ множества индексов, содержащие номера частиц, имеющих $1, \dots, N$ тип. Отметим, что $K_1, \dots, K_N$ имеют $k_1, \dots, k_N$ элементов и попарно не пересекаются. Тогда в следующий момент времени популяция будет

ISSN 1818-7897. Вестник НГУ. Серия: Математика, механика, информатика. 2011. Т. 11, вып. 4. С. 94–106

описываться случайным вектором

$$\Big(\sum_{j\in K_1}\xi_j^{(N)},\dots,\sum_{j\in K_N}\xi_j^{(N)}\Big),$$

где $\xi_j^{(N)}$ — численность потомства j-й частицы, и

$$\xi_1^{(N)}+\dots+\xi_N^{(N)}=N, \tag{1}$$

т. е. компоненты $\xi_j^{(N)}$ зависимы между собой и в популяции по-прежнему насчитывается N частиц. Будем считать, что $\sum_{j\in K_s}\xi_j^{(N)}=0$ при $K_s=\varnothing$.

Случайные векторы численности потомства $(\xi_1^{(N)},\dots,\xi_N^{(N)})$ имеют распределения, неизменные относительно любых перестановок координат, т. е. закон размножения и гибели частиц не зависит от их типа. В частности, одномерные распределения случайных величин $\xi_j^{(N)}$ совпадают и не зависят от j. На каждом шаге эволюции популяции векторы численности потомства независимы и одинаково распределены.

Важной характеристикой в биологии является *время фиксации* популяции τ — случайный момент времени, когда популяция, начинающаяся с нескольких групп разнородных частиц (возможно все различны), впервые становится однородной, т. е. все частицы становятся однотипными [3]. Здесь мы имеем дело с неразложимыми (без сообщающихся подклассов существенных состояний) марковскими цепями с двумя типами состояний — несущественными и поглощающими. Такие марковские цепи с вероятностью 1 попадают в одно из поглощающих состояний, соответствующих однотипности всей популяции.

Изучим зависимость математического ожидания времени фиксации τ от параметров модели постоянной численности. Ранее в работах [5–7] были получены оценки математического ожидания времени фиксации. Мы усилим эти результаты. В общем случае их трудно сравнить с предшествующими. Для демонстрации эффективности новых результатов вычисления будут проведены в частном случае для модели из [7], обобщающей модель из [6]. Эта модель соответствует полиномиальному распределению вектора $(\xi_1^{(N)},\dots,\xi_N^{(N)})$. Качественно она описывается следующим образом. Каждая частица, погибая, оставляет после себя $s>1$ потомков того же типа. Из получившихся sN новых частиц равновозможно, вне зависимости от типа, отбирается N штук, которые образуют новое поколение, а остальные $(s-1)N$ частиц мгновенно погибают. Назовем эту схему *s-моделью.*

1. Основные результаты

Обозначим совокупность всех векторов $\mathbf{k}$, таких что $|\mathbf{k}|=N$, через $\mathbf{K}$, а подмножества векторов, у которых $\max\limits_{i=1,\dots,N}k_i=M$, через $\mathbf{K}_M$. Аналогично для векторов с максимальной компонентой, удовлетворяющей какому-то неравенству, в нижний индекс добавляем это неравенство. В частности, совокупности векторов с условиями $\max\limits_{i=1,\dots,N}k_i>$ $>M$ или $\max\limits_{i=1,\dots,N}k_i\le M$ обозначаются $\mathbf{K}_{>M}$ и $\mathbf{K}_{\le M}$ соответственно.

Нас интересует случайная величина τ — время фиксации популяции (т. е. вытеснения одним типом частиц всех остальных или первого попадания в множество поглощающих состояний $\mathbf{K}_N$). Мы оцениваем ее математическое ожидание в терминах моментов распределения $\xi_1 = \xi_1^{(N)}$. Отметим, что в силу условия (1) $\mathbb{E}\xi_j^{(N)} = 1$. Обозначим $\mathbb{E}(\xi_1 - 1)^{i_1}(\xi_2 - 1)^{i_2} \dots (\xi_l - 1)^{i_l} =: \mu_{i_1 i_2 \dots i_l}$. В частности, $\mathbb{E}(\xi_1 - 1)^5 =: \mu_5$, $\mathbb{E}(\xi_1 - 1)^2 \times (\xi_2 - 1)^2 =: \mu_{22}$. Пусть $\sigma^2 := \operatorname{Var} \xi_1$ и $\mu_3 := \mathbb{E}(\xi_1 - 1)^3$. Дисперсия и третий центральный момент ξ_1 могут изменяться в пределах от 0 до $N-1$ и от 1 до $N^2 - 1$ соответственно.

Наряду со случайной величиной τ будет рассматриваться величина $\tau_{>N-k_0}$, равная числу поколений, по прошествии которого популяция впервые содержит более чем $N - k_0$ частиц какого-то из типов, т. е. цепь Маркова впервые попадает в $\mathbf{K}_{>N-k_0}$. Легко видеть, что $\tau = \tau_{>N-1}$.

В [5] доказана следующая теорема.

Теорема 1. *Для популяции постоянной численности фиксируем произвольное целое* $k_0 \in [1, N/2]$ *такое, что*

$$c_1^{-1} = c_1^{-1}(N, k_0) := \frac{N}{N-1}\left(\frac{\sigma^2}{2} - \frac{\mu_3}{6k_0} \cdot \frac{(N - 2k_0)^2}{(N-2)(N-k_0)}\right) > 0.$$

Пусть $\mathbf{k} \in \mathbf{K}_{\le N-k_0}$ *— вектор, задающий конфигурацию типов частиц в начальный момент времени. Тогда для математического ожидания случайной величины* $\tau_{>N-k_0}$, *когда впервые популяция состоит более чем из* $N - k_0$ *частиц какого-то одного типа, справедливо неравенство:*

$$\mathbb{E}_{\mathbf{k}} \tau_{>N-k_0} \le c_1 v(\mathbf{k}), \tag{2}$$

где $v(\mathbf{k}) := (N-1)N \ln N - \sum_{j=1}^{N} (N - k_j) \ln(N - k_j)$.

Теорема 1 дает хорошие и, как следует из вычислительных экспериментов, предположительно асимптотически точные оценки при больших k_0, точнее для $\mathbf{k} \in \mathbf{K}_{\le N-s}$, если $\frac{\mu_3}{\sigma^2 s} \to 0$, $s = o(N)$ при $N \to \infty$, то c_1 превращается в $\frac{2}{\sigma^2}$, что вряд ли можно улучшить.

Для $\mathbf{k} \in \mathbf{K}_{>N-s}$ при небольших s оценки в теореме 1 достаточно грубые. Результаты численных экспериментов наводят на мысль, что слагаемое, содержащее μ_3, должно либо отсутствовать, либо быть существенно меньше.

Доказательство теоремы 1 существенно использует разложение $v(\mathbf{k})$ по формуле Тейлора с точностью до 3-го порядка. Для $\mathbf{k} \in \mathbf{K}_{\le N-k_0}$ с k_0 достаточно большими мы воспользуемся схемой и результатами из [5], приводящими к оценке (2), а при $\mathbf{k} \in \mathbf{K}_{>N-k_0}$ воспользуемся разложением Тейлора для $v(\mathbf{k})$ до 5-го порядка. Достоинством разложения с 3 моментами является возможность свести оценки к случаю двух типов частиц. Для разложения 5-го порядка это сделать не получается, но когда количество частиц одного типа приближается к объему популяции, то существенный вклад в оценку вносит лишь одно слагаемое, что и позволяет получить новые оценки.

Обозначим

$$\begin{aligned} c_2^{-1} &= c_2^{-1}(N, k_0', k_0) := \max_{k_0' \le k^* \le k_0} \left\{ \frac{\sigma^2}{2} - \frac{\mu_3}{6k^*}(1 + \Delta_3) + \frac{\mu_4}{12k^{*2}}(1 + \Delta_4) + \right. \\ &+ \left. \frac{\mu_{22}(k^* - 1)}{4k^{*2}}(1 + \Delta_{22}) - \frac{\mu_5}{20k^{*3}}(1 + \Delta_5) - \frac{\mu_{32}(k^* - 1)}{2k^{*3}}(1 + \Delta_{32}) \right\}, \end{aligned}$$

где $\Delta_3, \Delta_4, \Delta_{22}, \Delta_5, \Delta_{32}$ определены в формулах (15)–(17), (19) и (20) и равномерно по k_0' и k_0 сходятся к 0 при $N \to \infty$.

Теорема 2. *Для популяции постоянной численности фиксируем произвольные целые* $k_0 \in [3, N/2]$, $k_0' \in [1, k_0 - 1]$. *Пусть* $\mathbf{k} \in \mathbf{K}_{\le N-k_0'}$ *— вектор, задающий конфигурацию типов частиц в начальный момент времени. Тогда для математического ожидания случайной величины* $\tau_{>N-k_0'}$ *(момента времени, когда популяция впервые состоит более чем из* $N - k_0'$ *частиц одного из типов) справедливо неравенство*

$$\mathbb{E}_{\mathbf{k}}\tau_{>N-k_0'} \le c^* v(\mathbf{k}),$$

где $v(\mathbf{k}) = (N-1)N\ln N - \sum_{j=1}^N (N-k_j)\ln(N-k_j)$, $(c^*)^{-1} = \max\{c_1^{-1}, c_2^{-1}\}$.

Если говорить о сравнении теорем 1 и 2, то возможна даже ситуация $c_1(k_0) > 0, c_1(k_0') < 0$ (т. е. утверждение теоремы 2 для k_0' не имеет смысла). При этом $c_2(k_0')$ будет определено и больше 0. Далее мы покажем, что при выполнении условия (23) теорема 2 улучшает оценку (2) при подстановке в нее k_0' вместо k_0, и приведем серию примеров, где это условие выполнено.

2. Вспомогательные утверждения

Обозначим $S_{K_s} := \sum_{j\in K_s}\xi_j$, $\tilde{S}_{K_s} := \sum_{j\in K_s}\xi_j N^{-1}$, $\tilde{k} := kN^{-1}$, $\bar{\xi}_j := \xi_j - 1$, $\bar{S}_{K_s} := \sum_{j\in K_s}\bar{\xi}_j$. Рассмотрим функцию

$$f(x) := -(N-x)\ln(N-x), \quad 0 \le x \le N.$$

Запишем формулу Тейлора с остаточным членом, включающим в себя шестую производную функции f, в форме Лагранжа. Поскольку остаточный член неположителен, оценим его сверху нулем:

$$\begin{aligned} f(x+y) - f(x) = f'(x)y + \frac{f''(x)y^2}{2!} + \frac{f'''(x)y^3}{3!} + \frac{f^{(4)}(x)y^4}{4!} + \frac{f^{(5)}(x)y^5}{5!} + \\ + \frac{f^{(6)}(x+\theta y)y^6}{6!} \le (1+\ln(N-x))y - \frac{y^2}{2(N-x)} - \frac{y^3}{6(N-x)^2} - \\ - \frac{y^4}{12(N-x)^3} - \frac{y^5}{20(N-x)^4}, \end{aligned} \tag{3}$$

где $\theta \in (0,1)$.

Пусть P — оператор на марковской цепи, который описывает динамику изменения численности популяции и определяется соотношением

$$Pv(k_1, \dots, k_N) := \mathbb{E}v\Big(\sum_{j\in K_1}\xi_j, \dots, \sum_{j\in K_N}\xi_j\Big),$$

где мощности множеств $K_1, \dots, K_N$ равны $k_1, \dots, k_N$.

Оценим $Pv(\mathbf{k}) - v(\mathbf{k})$ с помощью неравенства (3):

$$\begin{aligned} Pv(\mathbf{k}) - v(\mathbf{k}) = \mathbb{E}\sum_{s=1}^N\Big(f\Big(k_s + \sum_{j\in K_s}\bar{\xi_j}\Big) - f(k_s)\Big) \le \\ \le \sum_{s=1}^N (1+\ln(N-k_s))\mathbb{E}\sum_{j\in K_s}\bar{\xi_j} - \sum_{s=1}^N\frac{1}{2(N-k_s)}\mathbb{E}\Big(\sum_{j\in K_s}\bar{\xi_j}\Big)^2 - \end{aligned}$$

$$-\sum_{s=1}^{N}\frac{1}{6(N-k_s)^2}\mathbb{E}\Big(\sum_{j\in K_s}\bar{\xi_j}\Big)^3-\sum_{s=1}^{N}\frac{1}{12(N-k_s)^3}\mathbb{E}\Big(\sum_{j\in K_s}\bar{\xi_j}\Big)^4-$$

$$-\sum_{s=1}^{N}\frac{1}{20(N-k_s)^4}\mathbb{E}\Big(\sum_{j\in K_s}\bar{\xi_j}\Big)^5=:I_1+I_2+I_3+I_4+I_5, \quad (4)$$

где $I_j=I_j(\mathbf{k})$.

В леммах 1, 2 и 3 приводятся соотношения, позволяющие выразить $I_j, j=1,\dots,5$ через моменты случайной величины ξ_1.

Лемма 1. *Если случайные векторы* $(\xi_1,\dots,\xi_N)$ *с целыми* $\xi_j\ge 0$, $j=1,\dots,N$, *имеют распределения, неизменные относительно любых перестановок координат, и* $\xi_1+\dots+\xi_N=N$, *то*

$$\mathbb{E}\bar{\xi}_1 = 0, \quad (5)$$

$$\mathbb{E}\bar{\xi}_1\bar{\xi}_2 = -\frac{1}{N-1}\mathbb{E}\bar{\xi_j}^2, \quad (6)$$

$$\mathbb{E}\bar{\xi}_1^2\bar{\xi}_2 = -\frac{1}{N-1}\mathbb{E}\bar{\xi_j}^3, \quad (7)$$

$$\mathbb{E}\bar{\xi}_1\bar{\xi}_2\bar{\xi}_3 = \frac{2}{(N-1)(N-2)}\mathbb{E}\bar{\xi_j}^3. \quad (8)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Соотношение (5) следует из одинаковой распределенности ξ_j и того, что $\sum_{j=1}^N\bar{\xi}_j=0$.

Умножим равенство $\sum_{j=1}^N\bar{\xi}_j=0$ на $\bar{\xi}_1$ и возьмем математическое ожидание:

$$0=\mathbb{E}\bar{\xi}_1\sum_{j=1}^{N}\bar{\xi_j}=\mathbb{E}\bar{\xi}_1^2+(N-1)\mathbb{E}\bar{\xi}_1\bar{\xi}_2\,,$$

откуда следует соотношение (6). Равенство (7) выводится аналогично, путем умножения на $\bar{\xi}_1^2$.

Наконец, умножим тождество $\sum_{j=1}^N\bar{\xi}_j=0$ на $\bar{\xi}_1\bar{\xi}_2$ и возьмем математическое ожидание:

$$0=2\mathbb{E}\bar{\xi}_1^2\bar{\xi}_2+(N-2)\mathbb{E}\bar{\xi}_1\bar{\xi}_2\bar{\xi}_3,$$

откуда с помощью соотношения (7) выводим формулу (8). □

Лемма 2. *При выполнении условий леммы* 1

$$\mu_4=-(N-1)\mu_{31},\quad \mu_{31}+\mu_{22}=-(N-2)\mu_{211},\quad 3\mu_{211}=-(N-3)\mu_{1111}.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Соотношения леммы выводятся путем домножения равенства $\sum_{j=1}^N\bar{\xi}_j=0$ на $\bar{\xi}_1^3, \bar{\xi}_1^2\bar{\xi}_2$ и $\bar{\xi}_1\bar{\xi}_2\bar{\xi}_3$ соответственно и вычисления математического ожидания левой и правой частей полученных соотношений. □

Система уравнений из леммы 2 имеет две степени свободы, и все смешанные моменты можно выразить через μ_4 и μ_{22}. Получаем:

$$\mu_{31}=-\frac{\mu_4}{N-1},\quad \mu_{211}=\frac{\mu_4}{(N-1)(N-2)}-\frac{\mu_{22}}{N-2}, \quad (9)$$

$$\mu_{1111}=\frac{3\mu_{22}}{(N-2)(N-3)}-\frac{3\mu_4}{(N-1)(N-2)(N-3)}. \quad (10)$$

Лемма 3. *При выполнении условий леммы* 1

$$\mu_5 = -(N-1)\mu_{41}, \quad \mu_{41} + \mu_{32} = -(N-2)\mu_{311}, \quad \mu_{311} + 2\mu_{221} = -(N-3)\mu_{2111},$$
$$2\mu_{32} = -(N-2)\mu_{221}, \quad 4\mu_{2111} = -(N-4)\mu_{11111}.$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Соотношения этой леммы выводятся аналогично лемме 2 после умножения равенства $\sum_{j=1}^{N} \bar{\xi}_j = 0$ на $\bar{\xi}_1^4$, $\bar{\xi}_1^3\bar{\xi}_2$, $\bar{\xi}_1^2\bar{\xi}_2\bar{\xi}_3$, $\bar{\xi}_1^2\bar{\xi}_2^2$ и $\bar{\xi}_1\bar{\xi}_2\bar{\xi}_3\bar{\xi}_4$ соответственно. □

Система уравнений из леммы 3 позволяет выразить все смешанные моменты через μ_5 и μ_{32}.

$$\mu_{41} = -\frac{\mu_5}{N-1}, \quad \mu_{311} = \frac{\mu_5}{(N-1)(N-2)} - \frac{\mu_{32}}{N-2}, \quad \mu_{221} = -\frac{2\mu_{32}}{N-2}, \tag{11}$$

$$\mu_{2111} = \frac{5\mu_{32}}{(N-2)(N-3)} - \frac{\mu_5}{(N-1)(N-2)(N-3)}, \tag{12}$$

$$\mu_{11111} = \frac{4\mu_5}{(N-1)(N-2)(N-3)(N-4)} - \frac{20\mu_{32}}{(N-2)(N-3)(N-4)}. \tag{13}$$

Согласно равенству (5) первая сумма I_1 в правой части оценки (4) равна нулю.

Оценим $I_j, j = 2, 3, 4, 5$ при $N \to \infty$ и $\mathbf{k} \in \mathbf{K}_{>N-k_0} \setminus \mathbf{K}_{>N-k_0'}$, где $1 \le k_0' < k_0 < N/2$. При оценивании I_j, не ограничивая общности, можно считать, что первая компонента максимальна и имеет вид $k_1 := N - k^* > N/2$. При этом очевидно $1 \le k_0' \le k^* < k_0$.

В силу равенства (6)

$$\mathbb{E}\,\bar{S}_{K_s}^2 = k_s \mathbb{E}\,\bar{\xi}_1^2 + k_s(k_s-1)\mathbb{E}\,\bar{\xi}_1\bar{\xi}_2 = \frac{k_s(N-k_s)}{N-1}\sigma^2,$$

поэтому

$$I_2 = -\sum_{s=1}^{N} \frac{k_s}{2(N-1)}\sigma^2 = -\frac{N\sigma^2}{2(N-1)} \le -\frac{\sigma^2}{2}. \tag{14}$$

Пользуясь соотношениями (7) и (8) леммы 1, находим:

$$\mathbb{E}\,\bar{S}_{K_s}^3 = k_s\mathbb{E}\,\bar{\xi}_1^3 + 3k_s(k_s-1)\mathbb{E}\,\bar{\xi}_1^2\bar{\xi}_2 + k_s(k_s-1)(k_s-2)\mathbb{E}\,\bar{\xi}_1\bar{\xi}_2\bar{\xi}_3 =$$
$$= \frac{k_s(N-k_s)(N-2k_s)}{(N-1)(N-2)}\mu_3.$$

Отсюда следует, что

$$I_3 = -\frac{\mu_3}{6(N-1)(N-2)}\sum_{i=1}^{N}\frac{k_i(N-2k_i)}{N-k_i} = \frac{\mu_3}{6k^*}\frac{(N-k^*)(N-2k^*)}{(N-1)(N-2)} -$$
$$- \frac{\mu_3}{6(N-1)(N-2)}\sum_{i=2}^{N}\frac{k_i(N-2k_i)}{N-k_i} \le \frac{\mu_3}{6k^*}\frac{(N-k^*)(N-2k^*)}{(N-1)(N-2)} =:$$
$$=: \frac{\mu_3}{6k^*}\Big(1+\Delta_3\Big), \tag{15}$$

где $\Delta_3 = o(1)$ при $N \to \infty$.

Легко получить более точную оценку для Δ_3.

$$\Delta_3 = \frac{2(k^*-1)^2 - (k^*-1)(3N-4)}{(N-1)(N-2)} =: -\frac{3(k^*-1)}{N}\delta_3,$$

где $\delta_3 = \delta_3(N) \sim 1$ при $N \to \infty$.

Здесь и далее $(1-\delta_i)$ можно оценить величиной порядка $\dfrac{k^*}{N}$, но мы в явном виде этого не используем. Такая оценка позволит записать условия на N и $\dfrac{k_0}{N}$, при которых δ_i попадают в произвольную окрестность 1.

Пользуясь соотношениями (9) и (10), получаем

$$\begin{aligned}\mathbb{E}\,\bar S^4_{K_s} &= k_s\mathbb{E}\,\bar\xi_1^4 + 4k_s(k_s-1)\mathbb{E}\,\bar\xi_1^3\bar\xi_2 + 6k_s(k_s-1)(k_s-2)\mathbb{E}\,\bar\xi_1^2\bar\xi_2\bar\xi_3 + \\ &\quad + 3k_s(k_s-1)\mathbb{E}\,\bar\xi_1^2\bar\xi_2^2 + k_s(k_s-1)(k_s-2)(k_s-3)\mathbb{E}\,\bar\xi_1\bar\xi_2\bar\xi_3\bar\xi_4 = \\ &= \frac{k_s(N-k_s)\mu_4((N-2)(N-3)-3(k_s-1)(N-k_s-1))}{(N-1)(N-2)(N-3)} + \\ &\quad + 3k_s(k_s-1)\mathbb{E}\,\bar\xi_1^2\bar\xi_2^2\frac{(N-k_s)(N-k_s-1)}{(N-2)(N-3)}\,.\end{aligned}$$

Поэтому

$$\begin{aligned}I_4 &= -\biggl(\frac{\mu_4}{12(N-1)}\sum_{i=1}^N\frac{k_i}{(N-k_i)^2} + \Bigl(\frac{\mu_{22}}{4(N-2)(N-3)} - \\ &\quad - \frac{\mu_4}{4(N-1)(N-2)(N-3)}\Bigr)\sum_{i=1}^N\frac{k_i(k_i-1)(N-k_i-1)}{(N-k_i)^2}\biggr) = \\ &= -\frac{\mu_4}{12(N-1)}\biggl(\frac{N-k^*}{k^{*2}}\Bigl(1-\frac{3(N-k^*-1)(k^*-1)}{(N-2)(N-3)}\Bigr) + \\ &\quad + \sum_{i=2}^N\biggl(\frac{k_i}{(N-k_i)^2}\Bigl(1-3\frac{(k_i-1)(N-k_i-1)}{(N-2)(N-3)}\Bigr)\biggr)\biggr) - \\ &\quad - \frac{\mu_{22}}{4(N-2)(N-3)}\sum_{i=1}^N\frac{k_i(k_i-1)(N-k_i-1)}{(N-k_i)^2} \le -\frac{\mu_4}{12k^{*2}}\biggl(\frac{N-k^*}{N-1}\times \\ &\quad \times\Bigl(1-\frac{3(N-k^*-1)(k^*-1)}{(N-2)(N-3)}\Bigr)\biggr) - \frac{\mu_{22}(k^*-1)}{4k^{*2}}\frac{(N-k^*)(N-k^*-1)}{(N-2)(N-3)} \le \\ &\le -\frac{\mu_4}{12k^{*2}}\Bigl(\frac{N-k^*}{N-1}-\frac{3(k^*-1)}{N-3}\Bigr) - \frac{\mu_{22}(k^*-1)}{4k^{*2}}\frac{(N-k^*)(N-k^*-1)}{(N-2)(N-3)}.\end{aligned}$$

Эта оценка справедлива при выполнении условия $1-\dfrac{3(N-k_i-1)(k_i-1)}{(N-2)(N-3)} > 0$, где $i \ge 2$. Переобозначим выражение из последней оценки, умножаемое на дробь, содержащую μ_{22}.

$$\frac{(N-k^*)(N-k^*-1)}{(N-2)(N-3)} =: 1+\Delta_{22}, \tag{16}$$

где

$$\Delta_{22} = \frac{(k^*-2)^2-(k^*-2)(2N-5)}{(N-2)(N-3)} =: -\frac{2(k^*-2)}{N}\delta_{22},$$

$\Delta_{22} = o(1)$ и $\delta_{22} = \delta_{22}(N) \sim 1$ при $N \to \infty$.

Аналогично для выражения, умножаемого на дробь, содержащую μ_4.

$$\frac{N-k^*}{N-1} - \frac{3(k^*-1)}{N-3} =: 1+\Delta_4, \tag{17}$$

где

$$\Delta_4 = -\frac{k^*-1}{N-1} - \frac{3(k^*-1)}{N} =: -4\frac{k^*-1}{N}\delta_4,$$

$\Delta_4 = o(1)$ и $\delta_4 = \delta_4(N) \sim 1$ при $N \to \infty$.

Таким образом,

$$I_4 \le -\frac{\mu_4}{12k^{*2}}\,(1+\Delta_4) - \frac{\mu_{22}(k^*-1)}{4k^{*2}}\,(1+\Delta_{22})\,. \tag{18}$$

С помощью соотношений (11)–(13) получаем

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}\,\bar S^5_{K_s} &= k_s\mathbb{E}\,\bar\xi_1^5 + 5k_s(k_s-1)\mathbb{E}\,\bar\xi_1^4\bar\xi_2 + 10k_s(k_s-1)\mathbb{E}\,\bar\xi_1^3\bar\xi_2^2 + \\
&\quad + 15k_s(k_s-1)(k_s-2)\mathbb{E}\,\bar\xi_1^2\bar\xi_2^2\bar\xi_3 + 10k_s(k_s-1)(k_s-2)\mathbb{E}\,\bar\xi_1^3\bar\xi_2\bar\xi_3 + \\
&\quad + 10k_s(k_s-1)(k_s-2)(k_s-3)\mathbb{E}\,\bar\xi_1^2\bar\xi_2\bar\xi_3\bar\xi_4 + \\
&\quad + k_s(k_s-1)(k_s-2)(k_s-3)(k_s-4)\mathbb{E}\,\bar\xi_1\bar\xi_2\bar\xi_3\bar\xi_4\bar\xi_5 = \\
&= \frac{k_s(N-k_s)(N-2k_s)\mu_5}{(N-1)(N-2)(N-3)(N-4)}\Big((N-3)(N-4) - 2(k_s-1)(N-k_s-1)\Big) + \\
&\quad + \frac{10k_s(k_s-1)(N-k_s)(N-2k_s)(N-k_s-1)\mu_{32}}{(N-2)(N-3)(N-4)},
\end{aligned}$$

откуда при $1 - \dfrac{2(N-k_i-1)(k_i-1)}{(N-3)(N-4)} > 0$, если $i \ge 2$ (верно при $k^* < N/4$ и N таких, что $1 - \dfrac{2(3N/4-1)(N/4-1)}{(N-3)(N-4)} > 0$) получаем

$$\begin{aligned}
I_5 &= -\frac{\mu_5}{20(N-1)(N-2)}\sum_{i=1}^{N}\frac{k_i(N-2k_i)}{(N-k_i)^3} - \Bigg(\frac{\mu_{32}}{2(N-2)(N-3)(N-4)} - \\
&\quad - \frac{\mu_5}{10(N-1)(N-2)(N-3)(N-4)}\Bigg)\sum_{i=1}^{N}\frac{k_i(k_i-1)(N-k_i-1)(N-2k_i)}{(N-k_i)^3} \le \\
&\le \frac{\mu_5}{20k^{*3}}\frac{(N-k^*)(N-2k^*)}{(N-1)(N-2)}\Big(1 - \frac{2(N-k^*-1)(k^*-1)}{(N-3)(N-4)}\Big) + \\
&\quad + \frac{\mu_{32}(k^*-1)(N-k^*)(N-k^*-1)(N-2k^*)}{2(N-2)(N-3)(N-4)k^{*3}} \le \\
&\le \frac{\mu_5}{20k^{*3}}\Big(1 - \frac{2(N-k^*-1)(k^*-1)}{(N-3)(N-4)}\Big) + \frac{\mu_{32}(k^*-1)}{2k^{*3}}\frac{(N-k^*)(N-2k^*)}{(N-3)(N-4)}\,.
\end{aligned}$$

Переобозначим выражение, умножаемое на дробь, содержащую μ_{32}.

$$\frac{(N-k^*)(N-2k^*)}{(N-3)(N-4)} =: 1+\Delta_{32}, \tag{19}$$

где

$$\Delta_{32} = \frac{2(k^*-2)(k^*-3) - (k^*-3)(N-4) - 2(k^*-2)(N-3)}{(N-3)(N-4)} =: -\frac{3k^*-7}{N}\delta_{32},$$

$\Delta_{32} = o(1)$ и $\delta_{32} = \delta_{32}(N) \sim 1$ при $N \to \infty$.

Переобозначим выражение, умножаемое на дробь, содержащую μ_5.

$$1 - \frac{2(N-k^*-1)(k^*-1)}{(N-3)(N-4)} =: 1+\Delta_5, \tag{20}$$

где

$$\Delta_5 = -\frac{2(N-k^*-1)(k^*-1)}{(N-3)(N-4)} =: -\frac{2(k^*-1)}{N}\delta_5,$$

$\Delta_5 = o(1)$ и $\delta_5 = \delta_5(N) \sim 1$ при $N \to \infty$.

Таким образом,

$$I_5 \le \frac{\mu_5}{20k^{*3}}\Big(1+\Delta_5\Big) + \frac{\mu_{32}(k^*-1)}{2k^{*3}}\Big(1+\Delta_{32}\Big). \tag{21}$$

3. Доказательство теоремы 2

Следующая лемма [6. Утверждение 1] помогает осуществить переход от оценок для $Pv(\mathbf{k}) - v(\mathbf{k})$ непосредственно к оценкам для математического ожидания τ.

Лемма 4. *Пусть функция $v(\mathbf{k}) \geq 0$, константа $C > 0$ и множество D таковы, что*

$$Pv(\mathbf{k}) - v(\mathbf{k}) \leq -C \tag{22}$$

при $\mathbf{k} \notin D$. Тогда для момента τ достижения множества D из точки $\mathbf{k}$ справедлива оценка $\mathbb{E}_{\mathbf{k}}\tau \leq \frac{v(\mathbf{k})}{C}$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО (теоремы 2). Используя оценки (14), (15), (18), (21), получаем неравенство

$$\begin{aligned} Pv(\mathbf{k}) - v(\mathbf{k}) \leq -\frac{\sigma^2}{2} + \frac{\mu_3}{6k^*}\Big(1+\Delta_3\Big) - \frac{\mu_4}{12k^{*2}}\Big(1+\Delta_4\Big) - \\ - \frac{\mu_{22}(k^*-1)}{4k^{*2}}\Big(1+\Delta_{22}\Big) + \frac{\mu_5}{20k^{*3}}\Big(1+\Delta_5\Big) + \frac{\mu_{32}(k^*-1)}{2k^{*3}}\Big(1+\Delta_{32}\Big) = -\frac{\sigma^2}{2} + \\ + \frac{\mu_3}{6k^*}\Big(1 - \frac{3k^*}{N}\delta_{32}\Big) - \frac{\mu_4}{12k^{*2}}\left(1 - 4\frac{k^*-1}{N}\delta_4\right) - \frac{\mu_{22}(k^*-1)}{4k^{*2}}\left(1 - \frac{2k^*}{N}\delta_{22}\right) + \\ + \frac{\mu_5}{20k^{*3}}\Big(1 - \frac{2(k^*-1)}{N}\delta_5\Big) + \frac{\mu_{32}(k^*-1)}{2k^{*3}}\Big(1 - \frac{3k^*}{N}\delta_{32}\Big), \end{aligned}$$

где $\delta_4(N), \delta_{22}(N), \delta_5(N), \delta_{32}(N) \sim 1$ при $N \to \infty$.

Применяя к последнему неравенству лемму 4, доказываем теорему 2. □

На последнем этапе доказательства теорем 1 и 2 используется лемма 4. И соответствующие оценки будут точнее, если C из (22) будет больше. Если в оценках, ведущих к определению c_2^{-1}, использовать разложение для 3-х моментов вместо 5-ти, то получим

$$c_2^{'-1} := c_2^{'-1}(N, k_0, k_0') = \max_{k_0' \leq k^* \leq k_0} \Big(\sigma^2 - \frac{\mu_3}{6k^*}(1+\Delta_3)\Big).$$

Из доказательства теоремы 1 следует, что c_1^{-1} монотонно убывает по k_0, следовательно, $c_1^{-1}(N, k_0') = c_2^{'-1}(N, k_0, k_0')$. Поэтому теорема 2 будет усиливать теорему 1, если

$$\begin{aligned} \frac{\mu_4}{12k^{*2}}\left(1 - 4\frac{k^*-1}{N}\delta_4\right) + \frac{\mu_{22}(k^*-1)}{4k^{*2}}\left(1 - \frac{2k^*}{N}\delta_{22}\right) - \\ - \frac{\mu_5}{20k^{*3}}\Big(1 - \frac{2(k^*-1)}{N}\delta_5\Big) - \frac{\mu_{32}(k^*-1)}{2k^{*3}}\Big(1 - \frac{3k^*}{N}\delta_{32}\Big) > 0 \end{aligned} \tag{23}$$

для всех $k_0' \leq k^* < k_0$.

4. Сравнение теорем 1 и 2 для s-модели

Цель данного раздела провести вычисления для ряда частных случаев и удостовериться, что соотношение (23) верно. Мы остановимся на s-модели. Вначале вычислим ряд характеристик, используемых в оценке.

Обозначим $[A]_k := (A-1)\ldots(A-k)$.

Теорема 3. *В случае s-модели для моментов случайной величины ξ_1 имеют место соотношения*

$$\begin{aligned}
\sigma^2 &= \frac{(s-1)(N-1)}{sN-1}, \mu_3 = \frac{[s]_2[N]_2}{[sN]_2}, \mu_4 = \frac{[s]_3[N]_3}{[sN]_3} + \sigma^2 + \mu_3\,,\\
\mu_5 &= \frac{[s]_4[N]_4}{[sN]_4} + 5\frac{[s]_3[N]_3}{[sN]_3} + 5\mu_3\,,\\
\mu_{22} &= \frac{(3sN-4s-4N+6)(sN-3)(s-1)+s(s-1)^2[N]_3}{[sN]_3}\,,\\
\mu_{32} &= \frac{[N]_4 s(s-1)^2(s-2)}{[sN]_4} + \frac{(s-1)(N-2)\mu'_{32}}{[sN]_3}\,,
\end{aligned}$$

где $\mu'_{32} = 2s^2N - 3sN^2 + 5sN + 3s - 3s^2 + 6N - 12$.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Распишем ξ_1 как сумму индикаторов: $\xi_1 = \sum_{j=1}^{N} I_j$, где $I_j = 1$, если на j-м месте находится частица 1-го типа и $I_j = 0$ иначе.

$$\mathbb{E}I_1 = \frac{s}{sN} = \frac{1}{N},\ \mathbb{E}I_1I_2 = \frac{s(s-1)}{sN(sN-1)}.$$

Сначала выведем формулы для $\mathbb{E}\Big(\sum_{j=1}^{N} I_j\Big)^l$, где l принимает значения от 1 до 5:

$$\mathbb{E}\Big(\sum_{j=1}^{N} I_j\Big) = N\mathbb{E}I_1 = 1.$$

Для индикаторов очевидно соотношение $\mathbb{E}I_1^{l_1}I_2^{l_2}\dots I_k^{l_k} = \mathbb{E}I_1I_2\dots I_k$, где $l_1, l_2, \dots, l_k > 1$. Учитывая, что индикаторы одинаково распределены, получаем

$$\mathbb{E}\Big(\sum_{j=1}^{N} I_j\Big)^2 = N\mathbb{E}I_1\Big(\sum_{j=1}^{N} I_j\Big) = N\mathbb{E}I_1^2 + N(N-1)\mathbb{E}I_1I_2 =$$
$$= 1 + N(N-1)\frac{s(s-1)}{sN(sN-1)} = 1 + \frac{(s-1)(N-1)}{sN-1}\,.$$

Аналогично

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}\Big(\sum_{j=1}^{N} I_j\Big)^3 &= N\mathbb{E}I_1\Big(\sum_{j=1}^{N} I_j\Big)^2 = N\mathbb{E}I_1^2\sum_{j=1}^{N} I_j + N(N-1)\mathbb{E}I_1I_2\sum_{j=1}^{N} I_j =\\
&= N\mathbb{E}I_1^3 + 3N(N-1)\mathbb{E}I_1^2I_2 + N(N-1)(N-2)\mathbb{E}I_1I_2I_3 =\\
&= 1 + 3\frac{(s-1)(N-1)}{sN-1} + \frac{(s-1)(s-2)(N-1)(N-2)}{(sN-1)(sN-2)}\,.
\end{aligned}$$

Опуская промежуточные вычисления, имеем

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}\Big(\sum_{j=1}^{N} I_j\Big)^4 &= 1 + 7\frac{(s-1)(N-1)}{sN-1} + 6\frac{(s-1)(s-2)(N-1)(N-2)}{(sN-1)(sN-2)} +\\
&\quad + \frac{(s-1)(s-2)(s-3)(N-1)(N-2)(N-3)}{(sN-1)(sN-2)(sN-3)}\,.
\end{aligned}$$

Аналогично

$$\mathbb{E}\Big(\sum_{j=1}^{N} I_j\Big)^5 = 1 + 15\frac{(s-1)(N-1)}{sN-1} + 25\frac{(s-1)(s-2)(N-1)(N-2)}{(sN-1)(sN-2)} + \\ + 10\frac{(s-1)(s-2)(s-3)(N-1)(N-2)(N-3)}{(sN-1)(sN-2)(sN-3)} + \\ + \frac{(s-1)(s-2)(s-3)(s-4)(N-1)(N-2)(N-3)(N-4)}{(sN-1)(sN-2)(sN-3)(sN-4)}.$$

Теперь несложно вывести формулы для моментов ξ_1, используя только что полученные формулы для $\mathbb{E}\Big(\sum_{j=1}^{N} I_j\Big)^l$.

$$\sigma^2 = \mathbb{E}(\xi_1-1)^2 = \mathbb{E}\Big(\sum_{j=1}^{N} I_j - 1\Big)^2 = \mathbb{E}\Big(\sum_{j=1}^{N} I_j\Big)^2 - 2\mathbb{E}\Big(\sum_{j=1}^{N} I_j\Big) + 1 = \\ = \mathbb{E}\Big(\sum_{j=1}^{N} I_j\Big)^2 - 1 = \frac{(s-1)(N-1)}{sN-1}.$$

С помощью формулы куба разности находим

$$\mu_3 = \mathbb{E}(\xi_1-1)^3 = \mathbb{E}\left(\sum_{j=1}^{N} I_j - 1\right)^3 = \frac{(s-1)(s-2)(N-1)(N-2)}{(sN-1)(sN-2)}.$$

Для оставшихся моментов опустим промежуточные вычисления:

$$\mu_4 = \frac{(s-1)(s-2)(s-3)(N-1)(N-2)(N-3)}{(sN-1)(sN-2)(sN-3)} + \sigma^2 + 2\mu_3,$$

$$\mu_5 = \frac{(s-1)(s-2)(s-3)(s-4)(N-1)(N-2)(N-3)(N-4)}{(sN-1)(sN-2)(sN-3)(sN-4)} + \\ + 5\frac{(s-1)(s-2)(s-3)(N-1)(N-2)(N-3)}{(sN-1)(sN-2)(sN-3)} + \\ + 5\frac{(s-1)(s-2)(N-1)(N-2)}{(sN-1)(sN-2)}.$$

Для смешанных моментов получаем

$$\mu_{22} = \frac{(3sN-4s-4N+6)(sN-3)(s-1) + s(s-1)^2[N]_3}{(sN-1)(sN-2)(sN-3)},$$

$$\mu_{32} = \frac{(N-1)(N-2)(N-3)(N-4)s(s-1)^2(s-2)}{(sN-1)(sN-2)(sN-3)(sN-4)} + \\ + \frac{(s-1)(N-2)(2s^2N-3sN^2+5sN+3s-3s^2+6N-12)}{(sN-1)(sN-2)(sN-3)}. \qquad \square$$

В приводимых ниже следствиях из теоремы 3 рассматривается асимптотическое поведение моментов и оценок при $N \to \infty$.

Следствие 1. *Для s-модели при $N \to \infty$ имеют место соотношения*

$$\sigma^2 \sim \frac{s-1}{s},\ \mu_3 \sim \frac{[s]_2}{s^2},\ \mu_4 \sim \frac{[s]_3}{s^3} + \frac{2[s]_2}{s^2} + \frac{s-1}{s},$$

$$\mu_5 \sim \frac{[s]_4}{s^4} + \frac{5[s]_3}{s^3} + \frac{5[s]_2}{s^2},\ \mu_{22} \sim \frac{s(s-1)^2}{s^3},\ \mu_{32} \sim \frac{s(s-1)^2(s-2)}{s^4} - \frac{3s(s-1)}{s^3}.$$

Вычислим асимптотический вид правой части неравенства (23) для s-модели.

Следствие 2. *Для s-модели при $s \le N, N \to \infty$ выражение (23) будет асимптотически положительно при $k^* > 1$ и любых s, а также при $k^* = 1$ и $s \le 4$. Это означает, что теорема 2 усиливает теорему 1 для данных значений параметров.*

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО.

$$\frac{\mu_4}{12k^{*2}} + \frac{\mu_{22}(k^*-1)}{4k^{*2}} - \frac{\mu_5}{20k^{*3}} - \frac{\mu_{32}(k^*-1)}{2k^{*3}} = \\ = \frac{5k^*\mu_4 + 15k^*(k^*-1)\mu_{22} - 3\mu_5 - 30(k^*-1)\mu_{32}}{60k^{*3}} = \\ = \left\{5k^*\frac{(s-1)((s-2)(s-3)+s^2+2s(s-2))}{s^3} + 15k^*(k^*-1)\frac{s(s-1)^2}{s^3} - \right. \\ - 3\frac{(s-1)(s-2)(s-3)(s-4)+5s(s-1)(s-2)(s-3)+5s^2(s-1)(s-2)}{s^4} - \\ \left. - 30(k^*-1)\frac{s(s-1)^2(s-2)-3s^2(s-1)}{s^4}\right\} \Big/ \Big(60k^{*3}\Big).$$

Обозначим выражение в фигурных скобках через $y(k^*; s)$ и изучим его знак при различных s и k^*. Вынося за скобки $\frac{s-1}{s^3}$ и приводя подобные, получаем

$$y(k^*; s) = \frac{s-1}{s^3}\Big(15(s^2-s)k^{*2} + (-25s^2+150s-30)k^* - \\ - \Big(3s^2+48s+108-\frac{72}{s}\Big)\Big) =: \frac{s-1}{s^3}\Big(a(s)k^{*2} + b(s)k^* + c(s)\Big),$$

где $a(s) =: 15(s^2-s), b(s) =: -25s^2+150s-30, c(s) =: -\Big(3s^2+48s+108-\frac{72}{s}\Big)$.

Легко видеть, что $a(s) > 0, c(s) < 0$. Это означает, что уравнение $y(k^*; s) = 0$ имеет два корня, причем эти корни разных знаков. Поскольку $y(2; s) > 0$, а $y(0; s) < 0$, положительный корень уравнения $y(k^*; s) = 0$ меньше 2. График функции $z = y(x; s)$ при фиксированном s является параболой с ветвями, направленными вверх. Значит, $y(k^*; s)$ возрастает при $k^* \ge 2$, и $y(k^*; s) > 0$ при $k^* \ge 2$.

В случае $k^* = 1$ имеем

$$y(1; s) = \frac{s-1}{s^3}\Big(-13s^2 + 87s - 148 + \frac{72}{s}\Big).$$

Выражение $-13s^2 + 87s - 148$ отрицательно для всех s, поскольку дискриминант отрицателен. Благодаря добавлению $\frac{72}{s}$ получаем $y(1; s) < 0$ при $s > 4$, и $y(1; s) > 0$ при $s = 2$, $s = 3$ и $s = 4$. □

Следствие 3. *В случае s-модели при $s \to \infty, N \to \infty$ неравенство (23) превращается в*

$$\frac{15k^{*2} - 25k^* - 3}{60k^{*3}} > 0.$$

Оно положительно при $k^* > 1$, т. е. теорема 2 усиливает теорему 1.

Список литературы

1. *Cannings R.* The Latent Roots of Certain Markov Chains Arising in Genetics: A New Approach, I. Haploid Models // Adv. Appl. Prob. 1974. Vol. 6. P. 260–294.

2. *Cannings R.* The Latent Roots of Certain Markov Chains Arising in Genetics: A New Approach, II. Further Haploid Models // Adv. Appl. Prob. 1975. Vol. 7. P. 264–282.

3. *Durrett R.* Probability Models for DNA Sequence Evolution. Berlin: Springer-Verlag, 2002.

4. *Haccou P., Jagers P., Vatutin V. A.* Branching Processes: Variation, Growth, and Extinction of Populations. Cambridge; N. Y.: Cambridge University Press, 2004.

5. *Клоков С. А., Топчий В. А.* Оценки среднего времени фиксации в популяциях постоянного объема // Сиб. мат. журн. 2006. Т. 47, № 6. С. 1275–1288.

6. *Клоков С. А., Топчий В. А.* О времени вытеснения одним из типов частиц всех остальных в популяции фиксированной численности // Мат. тр. ИМ СО РАН. 2005. Т. 8, № 2. С. 41–56.

7. *Клоков С. А., Топчий В. А.* Оценки средних времен достижения однородности в популяциях фиксированного объема // Пленарные доклады IV Всерос. конф. «Математика, информатика, управление». Иркутск, 2005.

Материал поступил в редколлегию 10.12.2010

Адрес автора

СЛИЖЕВСКИЙ Александр Константинович

Омский филиал института математики

им. С. Л. Соболева СО РАН

ул. Певцова, 13, Омск, 644099, Россия

e-mail: alexslizh@mail.ru