多类型 Moran 过程中优势突变固定概率的参数化近似*

Leslie Ann Goldberg　Marc Roth　计算机科学系　计算机科学系　牛津大学　牛津大学　英国　英国　Tassilo Constantin Schwarz　应用数学与理论物理系　剑桥大学　英国

arXiv:2303.08118v1 [cs.DS] 14 Mar 2023

2023年3月14日

摘要

多类型 Moran 过程是在连通图 G 上进行的一种进化过程，其中每个顶点具有 k 种类型之一；在每一步中，都会选取一个顶点 v，使其将自身类型繁殖给一个邻居。顶点 v 被选中进行繁殖的概率，与其类型 v 的适应度成正比。迄今为止，文献几乎只关注二类型 Moran 过程，其中每个顶点要么是健康个体（类型 0），要么是突变体（类型 1）；人们主要研究的问题是计算所谓的固定概率（或其近似值），即最终所有顶点都成为突变体的概率。

在这项工作中，我们首次着手研究一般图上的多类型 Moran 过程中固定概率的近似计算。我们的主要结果是一个 FPTRAS（固定参数可处理的随机近似方案），用于计算优势突变的固定概率；参数为类型数量及其适应度。在研究过程中，我们还给出了期望吸收时间的新上界，即多类型 Moran 过程到达所有顶点类型都相同的状态所需的时间。

1 引言

（2 类型）Moran 过程的研究可追溯至 20世纪50年代末 [16]，其目标是模拟并理解有利突变如何在有限群体中传播：在最初的形式中，过程从 n 个体开始，其中 $n-1$ 个是健康个体（适应度为 1），另一个是具有优势的“突变体”（适应度为 $r>1$）。在过程的每一步中，按适应度成比例的概率选取一个个体，并以其自身类型（健康个体或突变体）替换另一个随机均匀选取的个体的类型。如果所有个体都成为突变体，或者突变灭绝，过程便会稳定下来。众所周知，突变占据群体的概率称为固定概率，其值为 $(1-r)/(1-r^n)$（例如参见 Lieberman、Hauert 和 Nowak [14]）。

后来，Moran 过程被推广到具有空间结构[14, 17]的群体中。在这一推广中，个体是一个 n 顶点图 G 的顶点，并且每个顶点只能替换其邻居的类型。此外，过程开始时的单个突变体从所有顶点中均匀随机选取。对于这种空间 Moran 过程，固定概率关键取决于图的结构。这个量可以通过显式计算得到，但方程的数量

*本研究全部或部分由德国学术奖学金基金会资助。为实现开放获取，作者已对本次投稿产生的任何作者接受稿版本采用知识共享署名许可公共版权许可。本论文结果部分完整提供了所有数据。

会随着图规模呈指数级增长。因此，D´ıaz、Goldberg、Mertzios、Richerby、Serna 和 Spirakis [5] 构造了一个全多项式随机近似方案（FPRAS）来解决相关的计算问题。这意味着他们给出了一个算法，其输入包括图 G、突变适应度 $r \geq 1$以及实数 ε 和 δ，它们位于区间（0，1）内，用于控制近似精度。以至少 $1-\delta$的概率，该算法会输出一个 ε-近似的固定概率，也就是说，输出的数值与固定概率的差距不超过 $1 \pm \varepsilon$。根据 FPRAS 的定义，该算法的运行时间上界是关于 $|G|$、$1/\varepsilon$ 和 $\log(1/\delta)$ 的多项式。关于二类型 Moran 过程的更多相关工作（包括改进的 FPRAS），请参见第1.4节。

对于存在多种突变类型的 Moran 过程，我们所知甚少。尽管 Ferreira 和 Neves [8], 曾研究过完全图这一特殊情形下的多类型 Moran 过程，但据我们所知，尚无关于一般图上的多类型 Moran 过程的研究。

在存在多种类型的情形下，突变个体不仅会与健康个体竞争，不同的突变谱系也会彼此争夺优势。例如，癌症的形成便是如此：肿瘤通常含有两到八种“驱动”突变，以及数百种“乘客”突变（例如参见 Vogelstein、Papadopoulos、Velculescu、Zhou、D´ıaz 和 Kinzler [18]）。因此，我们在本文中着手研究一般图上的多类型 Moran 过程。我们的目标是计算优势突变体（即适应度最高的类型）的固定概率：如果这一概率足够小，我们便可以期待健康个体/细胞最终占据主导。

我们的主要成果是一种高效算法，用于近似优势突变体的固定概率。为正式陈述我们的结果，接下来我们将详细介绍这一过程。

1.1 多类型 Moran 过程

本文考虑的图均为简单无向图，且不含自环。给定图 $G=(V,E)$ 的一个顶点 v，我们用 $N(v):=\{u \mid \{u,v\} \in E\}$ 表示 v 的（开）邻域，并用 $d(v):=|N(v)|$ 表示 v 的度。

设 $G=(V,E)$ 是一个有 n 个顶点的图。设 τ 是一个有限类型集合，且 τ_{ord} 是 τ 的一个元素。直观而言，τ_{ord} 是“普通”类型——τ 中的所有其他类型都是突变。设 f 是一个从 τ 到 $\mathbb{Q}_{\geq 1}$ 的函数。我们称 f 为“适应度函数”，因为我们用它来衡量 τ 中各类型的“适应度”。设 $f^+=\max_{i\in\tau} f(i)$ 和 $\tau_{f^+}=\{i\in\tau \mid f(i)=f^+\}$。类似地，设 $f^-=\min_{i\in\tau} f(i)$ 和$\tau_{f^-}=\{i\in\tau \mid f(i)=f^-\}$。本文将研究突变具有有利性的情形，因此$\tau_{\text{ord}} \in \tau_{f^-}$。在这种情况下，我们称 f 是适用于 τ 和 τ_{ord} 的有利适应度函数。

令 Ω 为从 V 到 τ 的函数集合。Ω 中的元素就是我们研究的状态——每个状态都为 G 的每个顶点指定一种类型。给定一个状态 $M_0 \in \Omega$，与 G、τ、f 和 M_0 相对应的 Moran 过程是一个马尔可夫链 $M=M_0$、M_1、.....，其状态空间为 Ω，初始状态为 M_0。

在定义 M 的转移之前，我们先介绍一些记号。若 S 是 Ω 中的一个状态，且 v 和 w 是 V 中的顶点，那么 $S|_{v\to w}$ 是状态 S'，满足 $S'(w)=S(v)$，并且对所有 $u\in V\setminus\{w\}$，$S'(u)=S(u)$。直观地说，S' 是由 S 派生而来，即将 v 的类型复制到 w 上。例如，若 v 是一种突变类型，那么这种突变就会传播到它在 $S|_{v\to w}$ 中的邻居 w。

我们将 M_t 称为马尔可夫链 M 在（离散）时间 t 的状态。对于任意类型 $j\in\tau$，我们用 $V_j(t)$ 表示在时间 t 被指定为类型 j 的顶点集合，也就是 $V_j(t):=\{v\in V \mid M_t(v)=j\}$。为简化记号，我们令 $f(v,t):=f(M_t(v))$，表示 v 在时间 t 的类型的适应度。给定一个子集 $U\subseteq V$，我们用 $f(U,t):=\sum_{v\in U} f(v,t)$ 表示 U 中各顶点在时间 t 的总适应度。时间 t 的总适应度 $F(t)$ 是所有顶点的总适应度，即 $F(t):=f(V,t)$。

从 M_t 到 M_{t+1} 的转移定义如下。以概率 $f(v,t)/F(t)$ 选择一个随机顶点 $v\in V$。以概率 $1/d(v)$ 选择一个顶点 $w\in N(v)$。然后 $M_{t+1}:=M_t|_{v\to w}$。直观地说，在每次转移中，以与时间 t 时其类型的适应度成正比的概率选择一个顶点 v，再从 v 的邻居中均匀随机地选择一个顶点 w。随后，用 v 的类型替换 w 的类型。

如果 M_t 将所有顶点赋予相同的类型，那么马尔可夫链 M 在时间 t之后状态不会改变。我们称类型 $j\in\tau$ 在时间 t 之前达到固定，当且仅当 M_t 将所有顶点赋予类型 j。如果 G 是

连通的，那么以概率 1， τ 中的某种类型会达到固定。我们用π_j 表示j 达到固定的概率。

如果我们想明确 G、 τ、 f 和 M_0，那么我们将 M称为 $M(G,\tau,f,M_0)$，并将 π_j称为$\pi_j(G,\tau,f,M_0)$。

有时，考虑起始状态 M_0上的一个分布会很有用。如果 D 是 Ω 上的一个分布，那么 $\pi_j(G,\tau,f,D) = \sum_{M_0\in\Omega} \Pr_D(M_0)\,\pi_j(G,\tau,f,M_0)$。

就我们的目的而言，并非 Ω 上的每个分布 D 都重要。在广为研究的情形中，$|\tau| = 2$ 且适应度函数是有利的（因此 $\tau_{\mathrm{ord}} \in \tau_{f^-}$），其思路是，类型 $\alpha \in \tau \setminus \{\tau_{\mathrm{ord}}\}$是一种“突变体”类型，具有较高的适应度，并由一次突变产生。因此，适宜考虑这样的情形：起始状态 M_0 取自分布 $D_{\mathrm{mut}} = D_{\mathrm{mut}}(G,\tau,\tau_{\mathrm{ord}})$，该分布在 Ω 中恰有一个顶点具有$\tau \setminus \{\tau_{\mathrm{ord}}\}$中的类型的状态 $M_0 \in$上均匀分布。这就是先前研究中所考察的分布。

在多类型 Moran 过程中，对 D_{mut} 有一种自然的推广，其中 $|\tau| = k > 2$。在这种情况下，D_{mut} 是在状态 $M_0 \in\Omega$ 上的均匀分布，这些状态恰好为每种类型 $i \in \tau \setminus \{\tau_{\mathrm{ord}}\}$分配一个顶点。

我们的结果适用于 D_{mut}，也适用于其他几种分布。令 $V[k]$ 为集合，其中包含来自 V的所有由互不相同的顶点组成的 k 元组；令 $\tau[k]$ 为集合，其中包含 τ中所有由互不相同的类型组成的 k 元组。对于每个 $\mathbf{u} \in V[k]$和 $\boldsymbol{\gamma} \in \tau[k]$，令 $\Omega(\mathbf{u}\ \boldsymbol{\gamma})$ 为 Ω 中将 u 中的顶点依次映射到 $\boldsymbol{\gamma}$中的类型的状态集合。当从 D_{mut}中抽取状态 $S \in\Omega$ 时， $S \in \Omega(\mathbf{u}\ \boldsymbol{\gamma})$ 的概率有一个显然的下界。我们的结果适用于任何具有此性质的分布。为明确起见，我们将一组适用的分布定义如下。分布集合 $\mathcal{D} = \mathcal{D}(G,\tau)$ 包含 Ω 上满足以下条件的所有分布 D 。

- 对于每一对 $(\mathbf{u}\ \boldsymbol{\gamma}) \in V[k] \times \tau[k]$, $D_{\mathbf{u}\,\boldsymbol{\gamma}}$都是 $\Omega(\mathbf{u}\ \boldsymbol{\gamma})$ 上的一个分布。
- For any $S \in \Omega$, $\Pr_D(S) = \frac{1}{|V[k]\times\tau[k]|} \sum_{(\mathbf{u},\boldsymbol{\gamma})\in V[k]\times\tau[k]} \Pr_{D_{\mathbf{u},\boldsymbol{\gamma}}}(S)$.

容易看出， $D_{\mathrm{mut}}(G,\tau,\tau_{\mathrm{ord}}) \in \mathcal{D}(G,\tau)$，因为在这种情况下，$D_{\mathbf{u},\gamma}$可以取为 $\Omega(\mathbf{u}\ \boldsymbol{\gamma})$ 中仅包含一个状态的分布，且该状态将 u 以外的每个顶点都赋予类型τ_{ord}。

令 $\Omega_0(G,\tau)$ 为所有取值范围为 τ 的状态 $S \in\Omega$ 的集合。根据构造，从分布 $D \in \mathcal{D}(G,\tau)$ 中抽取的任何样本 S 都属于 $\Omega_0(G,\tau)$。

1.2 参数化与近似算法

我们将研究以下与适应度最高的类型的固定概率有关的问题。

定义 1（$\textsc{MaxFixProb}_{\mathrm{mut}}$）。问题 $\textsc{MaxFixProb}_{\mathrm{mut}}$ 的输入包括一个连通图G、一个类型集合 τ（其中包含普通类型 $\tau_{\mathrm{ord}} \in \tau$）、一个有利适应度函数 $f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$，以及一种类型 $\alpha \in \tau_{f^+}$。目标是计算 $\pi_\alpha(G,\tau,f,D_{\mathrm{mut}}(G,\tau,\tau_{\mathrm{ord}}))$。

定义 2（$\textsc{MaxFixProb}$）。问题 $\textsc{MaxFixProb}$的输入包括一个连通图 G、一个类型集合 τ、一个适应度函数 $f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$、一个类型 $\alpha \in \tau_{f^+}$ 以及一个分布 $D \in \mathcal{D}(G,\tau)$（通过一个黑盒预言机提供来自 D 的样本）。目标是计算 $\pi_\alpha(G,\tau,f,D)$。

正如引言中所述，我们关注针对$\textsc{MaxFixProb}$和 $\textsc{MaxFixProb}_{\mathrm{mut}}$的高效近似算法。

与参数化算法的通常设定一致（对于本应用而言，这也是自然的），我们假设类型数量（以及其适应度的编码）远小于输入图 G的规模，我们将其记为 $|G|$。因此，我们可以接受运行时间中包含一个依赖于 τ和 f的因子，例如 $g(\tau,f)$；但对于任意函数 g，我们无法接受运行时间高达 $|G|^{g(\tau,f)}$ 的算法。

形式上，我们令 $||f||$ 表示适应度函数 f 的描述长度。此处无需关注 f 的具体编码方式。我们以参数 $\kappa\colon = |\tau| + ||f||$ 对问题进行参数化，并旨在构造一个固定参数可 tractable 近似方案（FPTRAS），

这是高效参数化近似算法的标准概念（参见 Arvind 和 Raman [1]）。

定义 3（FPTRAS）。问题 P 的固定参数可处理随机近似方案（FPTRAS）是一种随机化算法 $\mathbb{A}$，它以问题输入 x 和实数 $0 <\hat{}\ \hat{}\varepsilon$、$\delta < 1$为输入，并输出 P，使得 $\Pr((1-\varepsilon)P(x) \leq P \leq (1+\varepsilon)P(x)) \geq 1-\delta$。此外，必须存在一个可计算函数 g，使得 $\mathbb{A}$ 的运行时间至多为 $g(\kappa) \cdot \text{poly}(|x|, 1/\varepsilon, \log(1/\delta))$，其中 κ 是 x的参数。

1.3 主要结果

现在我们可以陈述主要结果。

定理 4. MaxFixProb 在以 κ为参数时具有 FPTRAS：$= |\tau| + ||f||$。

定理 5. $\text{MaxFixProb}_{\text{mut}}$ 在以 κ为参数时具有 FPTRAS：$= |\tau| + ||f||$。

在证明定理4 和5 的过程中，我们还得到了吸收时间的上界，即该过程运行至某一类型达到固定所需的时间。对于多类型 Moran 过程，这个上界的形式为 $g(|\tau| + ||f||) \cdot$多项式$(|G|)$（见定理18）。

1.4 相关工作

双类型空间 Moran 过程的近似算法

迄今为止，关于空间 Moran 过程中固定概率近似的研究主要集中在双类型过程上；针对该过程，D´ıaz 等人 [5] 提出了首个全多项式随机近似方案。将类型记为 $\tau = \{1, 2\}$，其中 $\tau_{\text{ord}} = 1$ 为普通类型，近似突变 π_2 固定概率的思路是，对该过程进行足够多次马尔可夫链蒙特卡罗模拟，并通过证明以下两点来界定步数和模拟次数：(a) 期望吸收时间的上界；(b) 固定概率 π_2的下界。他们的工作适用于突变有利的情况，因此 $\tau_{f^-} = \{1\}$ 且 $f(2) > f(1)$。请注意，当突变不利时，即使图是完全图，其固定概率 π_2 也可能随图的规模呈指数级小，因此这种近似方法不可行。

在第一次改进中，Chatterjee、Ibsen-Jensen 和 Nowak [4] 利用了这样一个观察：某个顶点向同类型的邻居繁殖，不会改变整体状态。通过只模拟那些会改变底层马尔可夫链状态的步骤，他们加快了全多项式随机近似方案的速度。

Goldberg、Lapinskas 和 Richerby [10] 通过展示固定概率 π_2会随着 $f(2)/f(1)$ 的变化而发生相变，从而刻画了 $f(2)/f(1)$ 对每个连通无向图中固定概率的影响。该相变还为有利情形下的 π_2 带来了更大的下界。将此下界与固定概率足够高时提前终止蒙特卡罗模拟相结合，他们提出了一种更快的全多项式随机近似方案。

相关模型中的多种类型

多种突变类型的建模思路已在 Wright-Fisher模型 [2]中得到探讨，近期也应用于非空间 Moran 过程 [7, 8, 3]。Wright-Fisher 模型 [9, 19] 是一种非空间模型，其时间尺度较粗，所有个体同时繁殖，因此世代之间互不重叠。该模型是时间尺度更精细的 Moran 过程的前身；关于其详细定义以及与非空间 Moran 过程的比较，请参见 Lanchier [13] 。

对于 Wright-Fisher模型，Beerenwinkel、Antal、Dingli、Traulsen、Kinzler、Velculescu、Vogelstein 和 Nowak [2] 提出了一种推广模型，以纳入多种类型的演化：他们考虑一个按顺序排列、包含无限多种类型的集合 τ，其中类型越高，适应度越高。初始时，所有个体都属于某种普通类型 τ_{ord}。除了繁殖按代进行外，个体还会以一定速率进展到更高的类型，而该速率取决于初始类型在 τ 排序中与新类型的距离。他们通过计算机模拟这一模拟癌细胞演化的过程，目标是近似计算癌症表型出现前的期望时间，

他们将癌症表型定义为某种固定类型以突变形式出现时的等待时间。因此，他们的模型和模拟主要关注类型进展。

Etheridge 和 Griffiths [7] 为非空间 Moran 过程定义了一个有限类型集合 τ；除了繁殖动态之外，不同类型之间还会以给定速率发生突变。Chao 和 Schweinsberg [3] 将研究扩展到连续环面上的种群，重点关注类型之间的演进（类似于 Beerenwinkel 等人 [2]的研究）。

对于不存在空间动态且类型之间不存在演进的 Moran 过程，Ferreira 和 Neves [8] 近期在一项研究中引入了多种类型的概念。他们的模型与我们的相同，但着重研究图 G 为完全图这一特殊情形。他们给出了三类型情形下固定概率的界。在我们关于 空间Moran 过程的研究中，当 G 为完全图且 $|\tau| = 3$时，可以通过在这一特殊情形下应用我们的耦合推导出这些界，正如我们在引理 22中所示。

2 连续 Moran 过程

尽管我们的主要结果针对离散时间Moran过程，但在证明中考察 Moran 过程的连续时间版本也很有用。

我们用 Exp(λ) 表示参数为 λ 的指数分布。令 M 为与 $G = (V, E)$、τ、f 和 M_0 对应的（离散时间）Moran 过程。沿用 Diaz、Goldberg、Richerby 和 Serna [6] 在 $|\tau| = 2$ 情形下的工作，我们定义与 M 对应的连续时间 Moran过程 $\tilde{M} = \tilde{M}(G, \tau, f, M_0)$。过程 $\tilde{M}$ 与 M 具有相同的状态空间，即从 V 到 τ 的函数 Ω 集合，并以 $\tilde{M}_0 = M_0$ 为初始状态。$\tilde{M}$ 的演化由非负实数序列 $T_0, T_1, \ldots$ 指引，其中 $T_0 = 0$。对于任意非负整数 i，从 $\tilde{M}_{T_i}$ 开始的演化如下进行。每个顶点 $v \in V$ 都配有一个“时钟” c_v^i，它是一个参数为 $f(v, T_i) := f(M_{T_i}(v))$ 的指数分布服从指数分布的随机变量。时钟 c_v^i 的分布相互独立。令 $\Delta_i := \min_{w \in V} c_w^i$，并令 $T_{i+1} = T_i + \Delta_i$。对于 $t \in [T_i, T_{i+1})$，我们定义 $\tilde{M}_t = \tilde{M}_{T_i}$。定义 $\tilde{M}_{T_{i+1}}$ 如下。令 $v := \arg\min\{c_u^i \mid u \in V\}$。以 $1/d(v)$ 的概率选择 $w \in N(v)$。然后 $M_{T_{i+1}} := M_{T_i}|_{v \to w}$。

D´ıaz 等人 [6] 选择指数分布来设定时钟，是因为指数分布具有无记忆性，因此便于进行耦合。此外，一组 S 指数分布的最小值仍服从指数分布，其新参数为其中各参数之和S。因此，对于所有 v 和 T_i，$\Pr(\Delta_i = c_v^i) = \tilde{f}(v, T_i)/\tilde{F}(T_i)$，其中 $\tilde{F}(T_i) = \sum_{v \in V} \tilde{f}(v, T_i)$。这与从 M_{T_i}出发的离散步骤中选择 v 进行繁殖的概率相同。因此，过程 $M_{T_0}, M_{T_1}, \ldots$ 是 M的忠实副本。由此可得，$\tilde{\pi}_j(G, \tau, f, M_0)$，即 $\tilde{M}$ 在 j 中达到固定的概率，等于 $\pi_j(G, \tau, f, M_0)$。

3 连续时间多类型 Moran 过程的耦合

以下引理是 [6, 引理 5], 的推广，后者针对的是 $k = 2$的情形。

引理 6. 设 $G = (V, E)$ 是一个图，τ是一个类型集合，且 $f, f' \colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$是适应度函数。假设存在一种类型 $\alpha \in \tau$，满足 $f(\alpha) = f'(\alpha)$，并且对于任意类型 $\beta, \beta' \in \tau \setminus \{\alpha\}$，$f(\beta) \leq f'(\beta')$。设 M_0和 M_0'是从 V到 τ的函数集合 Ω 中的状态。令 $M = M(G, \tau, f, M_0)$和 $M' = M'(G, \tau, f', M_0')$为连续时间Moran过程。对于所有 $j \in \tau$，令 $V_j(t) = \{v \in V \mid M_t(v) = j\}$ 且 $V_j'(t) = \{v \in V \mid M_t'(v) = j\}$。假设 $V_\alpha'(0) \subseteq V_\alpha(0)$。那么存在 M，使得 M 与 M' 之间存在耦合，并且对于任意时间 $t \in \mathbb{R}_{\geq 0}$，$V_\alpha'(t) \subseteq V_\alpha(t)$。

证明。为方便起见，令 $f(v, T_i) := f(M_{T_i}(v))$，且 $f'(v, T_i) := f'(M_{T_i}'(v))$。联合过程由一列非负实数 $T_0, T_1, \ldots$ 引导，其中 $T_0 = 0$。在时间 T_0，两个过程分别处于其初始状态 M_0 和 M_0'。对于任意非负整数 i，联合过程从时间 T_i 开始的演化定义如下。首先，我们定义一些服从指数分布的

随机变量。

$$\begin{aligned}\forall v \in V: \quad & C_v^0(i) \sim \mathrm{Exp}(\min\left(\tilde{f}(v,T_i), \tilde{f}'(v,T_i)\right)).\\ \forall v \in V \text{ with } \tilde{f}(v,T_i) > \tilde{f}'(v,T_i): \quad & C_v^1(i) \sim \mathrm{Exp}(\tilde{f}(v,T_i) - \tilde{f}'(v,T_i)).\\ \forall v \in V \text{ with } \tilde{f}(v,T_i) < \tilde{f}'(v,T_i): \quad & C_v^2(i) \sim \mathrm{Exp}(\tilde{f}'(v,T_i) - \tilde{f}(v,T_i)).\end{aligned}$$

ˆ这些随机变量中最早出现的是随机变量 $\Delta(i)$，其定义为

$$\hat{\Delta}(i) := \min\left\{C_v^0(i) \mid v \in V\right\} \cup \left\{C_v^1(i) \mid \tilde{f}(v,T_i) > \tilde{f}'(v,T_i)\right\} \cup \left\{C_v^2(i) \mid \tilde{f}(v,T_i) < \tilde{f}'(v,T_i)\right\}.$$

令 $T_{i+1} = T_i + \hat{\Delta}(i)$。这两条链从 T_i 开始按如下方式演化。在区间 $[T_i, T_{i+1})$ 内， $\tilde{M}$ 和 $\tilde{M}'$ 都保持在各自的状态中。在时间 T_{i+1} ，状态按如下方式发生变化。

情形 0。如果对于某个 $v \in V$，$\hat{\Delta}(i) = C_v^0(i)$，则均匀随机选择 $w \in N(v)$，并令 $\tilde{M}_{T_{i+1}}$:
$= \tilde{M}_{T_i}|_{v\to w}$ 以及~ ~$M'_{T_{i+1}} := M'_{T_i}|_{v\to w}$

情形 1。如果对于某个 $v \in V$，$\hat{\Delta}(i) = C_v^1(i)$，则均匀随机选择 $w \in N(v)$，并令 $\tilde{M}_{T_{i+1}} := \tilde{M}_{T_i}|_{v\to w}$ 以及
$\tilde{M}'_{T_{i+1}} := \tilde{M}'_{T_i}$.

情况 2. 若对某个 $v \in V$ 有 $\hat{\Delta}(i) = C_v^2(i)$，则以均匀随机方式选择 $w \in N(v)$，并设 $\tilde{M}_{T_{i+1}} := \tilde{M}_{T_i}$ 和 $\tilde{M}'_{T_{i+1}} := M'_{T_i}|_{v\to w}$。

~ ~不难看出，这种联合演化是各自的链 M 和 M' 的正确演化。~ ~例如，考虑 M（对 M' 的论证是对称的）。我们将证明，对于每个 $v \in V$,~，直到选择 v 进行繁殖的时间服从参数为 $f(v,T_i)$ 的指数分布。若$\tilde{f}(v,T_i) \le \tilde{f}'(v,T_i)$，则这是因为 $C_v^0(i)$ 服从参数为 $\tilde{f}(v,T_i)$ 的指数分布，并且在情况 2 中 $\tilde{M}$ 不会演化。否则，这是因为 $\min\{C_v^0(i)\ C_v^1(i)\}$ 服从参数为 $f(v,T_i)$ 的指数分布~。现在假设 $V'_\alpha(T_i) \subseteq V_\alpha(T_i)$。为完成证明，我们将证明 $V'_\alpha(T_{i+1}) \subseteq V_\alpha(T_{i+1})$。具体而言，我们将排除 $w \in V'_\alpha(T_{i+1}) \setminus V_\alpha(T_{i+1})$ 这种可能性。

在情形 0 中，使 $w \in V'_\alpha(T_{i+1})$ 的唯一方式是 $v \in V'_\alpha(T_i)$。这意味着 $v \in V_\alpha(T_i)$，因此 $w \in V_\alpha(T_{i+1})$，正如所需。

在情形 1 中，使 $w \in V'_\alpha(T_{i+1}) \setminus V_\alpha(T_{i+1})$ 的唯一方式是 $v \notin V_\alpha(T_i)$，因此 $v \notin V'_\alpha(T_i)$。但这时，情形 1 要求
~ ~$f(v,T_i) > f'(v,T_i)$，这是不可能的，因为 $v \notin V_\alpha(T_i)$ 且 $v \notin V'_\alpha(T_i)$（根据引理陈述中关于类型 β、β' 的条件）。

在情况 2 中，使 $w \in V'_\alpha(T_{i+1})$ 的唯一方式是 $v \in V'_\alpha(T_i)$，因此 $v \in V_\alpha(T_i)$。但这时，我们没有
~ ~$f(v,T_i) < f'(v,T_i)$，而这是情况 2 所要求的。 □

引理 6 推出推论 9 ，它给出了在分布 $\mathcal{D}$中，适应度最高的突变达到固定的概率下界。为证明推论 9 ，我们将使用推论 7，该推论将多类型 Moran 过程中的固定概率下界问题，简化为双类型 Moran 过程中的固定概率下界问题。我们还将使用引理 8，它是关于双类型 Moran 过程的早期研究成果的推论。

推论 7。设 $G = (V,E)$ 是一个连通图，设 τ是一个类型集合，且 $f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\ge 1}$ 是一个适应度函数。设 α是 τ中的一个类型。设 $\beta = \arg\max\{f(j) \mid j \in \tau \setminus \{\alpha\}\}$。设 $\tau' = \{\alpha, \beta\}$。设 Ω 是从 V到 τ的函数集合，Ω′是从 V到 τ'的函数集合。设 $g\colon \Omega \to \Omega'$定义如下。对于每个状态 $S \in \Omega$， $g(S)$ 是满足以下条件的状态：若 $S(v) = \alpha$ 且$g(S)(v) = \beta$，则 $g(S)(v) = \alpha$ ；否则如此。于是，对于每个状态 $M_0 \in \Omega$， $\pi_\alpha(G,\tau,f,M_0) \ge \pi_\alpha(G,\tau',f,g(M_0))$。

证明。论证分为三个步骤。首先，令 $f'\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\ge 1}$ 为适应度函数，其中$f'(\alpha) = \alpha$；并且，对任意 $\beta' \in \tau \setminus \{\alpha\}$， $f'(\beta') = f(\beta)$。注意，对任意 $M_0 \in \Omega$， $\pi_\alpha(G,\tau',f,g(M_0)) = \pi_\alpha(G,\tau,f',M_0)$，因此目标是证明 $\pi_\alpha(G,\tau,f,M_0) \ge \pi_\alpha(G,\tau,f',M_0)$。

~ ~ ~ ~其次，令
$M = M\ G\ \tau\ f\ M_0$ ~ $M' = M'\ G\ \tau\ f'\ M_0$ ~ $j \in \tau$ ~ $V_j\ t = \{v \in V \mid (,,,),$ 并令 $(,,,)$。对于所有 ，令 $()\ M_t(v)$ ~$= j\}$ 且 $V'_j(t) = \{v \in V \mid M'_t(v) = j\}$。应用引理 6 可知，对于任意时间 $t \in \mathbb{R}_{\ge 0}$~ ~$V'_\alpha(t) \subseteq V_\alpha(t)$。因此 $\tilde{\pi}_\alpha(G,\tau,f,M_0) \ge \tilde{\pi}_\alpha(G,\tau,f',M_0)$。

最后，回想一下（根据连续 Moran 过程的构造），$\tilde{\pi}_\alpha(G,\tau,f,M_0) = \pi_\alpha(G,\tau,f,M_0)$，且 $\tilde{\pi}_\alpha(G,\tau,f',M_0) = \pi_\alpha(G,\tau,f',M_0)$。综合以上结果即可证明该推论。

□

引理 8。设 $G=(V,E)$ 是一个连通图，τ 是一个类型集合，且 $|\tau|=2$，令 $f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$ 为适应度函数。设 α 是 τ_{f^+} 中的一种类型。设 D 是 $\mathcal{D}(G,\tau)$ 中的一个分布。那么 $\pi_\alpha(G,\tau,f,D) \geq 1/n$。

证明。设 τ_{ord} 是 $\tau\backslash\{\alpha\}$ 中的类型。回顾分布 $D_{\mathrm{mut}} = D_{\mathrm{mut}}(G,\tau,\tau_{\mathrm{ord}})$，它在状态 $M_0 \in \Omega$ 上均匀分布，其中恰有一个顶点具有类型 α。

我们将构造一个耦合，使 D 与 D_{mut} 满足：从该耦合中抽取的随机样本（M_0，M_0^{mut}中，每个被赋予类型 α 的状态，在 M_0^{mut}中也被赋予类型 α。M_0然后，我们可以应用 [6] 中的定理 6 来证明 $\pi_\alpha(G,f,\tau,D) \geq \pi_\alpha(G,f,\tau,D_{\mathrm{mut}})$，从而完成证明。

为构造耦合，考虑分布 D。根据定义，D 定义如下：从 $V[2]\times\tau[2]$ 中均匀随机地选择 $(\mathbf{u}\ \boldsymbol{\gamma})$，并从分布 $D_{\mathbf{u},\boldsymbol{\gamma}}$ 中选择 M_0，其定义在 $\Omega(\mathbf{u}\ \boldsymbol{\gamma})$ 上。令 $n=|V|$。在耦合中，M_0^{mut}将顶点 u 赋予类型 α 的结果，与满足以下任一条件的所有选择 $(\mathbf{u}\ \boldsymbol{\gamma})$ 耦合：(1) u 是 $\mathbf{u}$ 的第一个顶点，且α 是 $\boldsymbol{\gamma}$ 中的第一个类型；(2) u 是 $\mathbf{u}$ 的第二个顶点，且 α 是 $\boldsymbol{\gamma}$中的第二个类型。注意，具有此性质的配对 $(\mathbf{u}\ \boldsymbol{\gamma})$ 占 $1/n$。此外，$D_{\mathbf{u},\boldsymbol{\gamma}}$ 中的每种结果都会将 α 赋予 u，符合要求。 □

推论 9。设 $G=(V,E)$ 是一个连通图，τ是一个类型集合，且 $f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$ 是一个适应度函数。设 α 是 τ_{f^+} 中的一种类型。设 D 是 $\mathcal{D}(G,\tau)$ 中的一个分布。那么 $\pi_\alpha(G,f,\tau,D) \geq 1/n$。

证明。令 $k=|\tau|$。若 $k=2$，则结论可由引理 8 直接得出。否则，令 $\beta = \arg\max\{f(j) \mid j\in\tau\setminus\{\alpha\}\}$。令 $\tau'=\{\alpha,\beta\}$。令 Ω 为从 V到 τ的函数集合，并令 Ω'为从 V到 τ'的函数集合。定义 $g\colon\Omega\to\Omega'$如下。对于每个状态 $S\in\Omega$，$g(S)$ 是满足以下条件的状态：若 $S(v)=\alpha$ 且 $g(S)(v)=\beta$，则 $g(S)(v)=\alpha$；否则如此。推论 7 保证，对于每个状态 $M_0\in\Omega$，$\pi_\alpha(G,\tau,f,M_0) \geq \pi_\alpha(G,\tau',f,g(M_0))$。

令 $g(D)$ 为由 D 和 g诱导的 Ω' 上的分布。具体而言，要从 $g(D)$ 中抽取样本，先从 D中抽取一个样本 S，然后输出 $g(S)$。于是 $\pi_\alpha(G,\tau,f,D) \geq \pi_\alpha(G,\tau',f,g(D))$。最后，我们将证明 $g(D) \in \mathcal{D}(G,\tau')$。这便可推出该推论，因为随后我们可以应用引理 8 得出 $\mathrm{conclude}\pi_\alpha(G,\tau',f,g(D)) \geq 1/n$。

为了证明 $g(D)\in\mathcal{D}(G,\tau')$，回顾一下 $D\in\mathcal{D}(G,\tau)$ 的含义。这意味着，对于每个 $\mathbf{u}\in V[k]$ 和 $\boldsymbol{\gamma}\in\tau[k]$，都存在 $\Omega(\mathbf{u}\ \boldsymbol{\gamma})$ 上的一个分布 $D_{\mathbf{u},\boldsymbol{\gamma}}$，使得 D 可以按如下方式定义：从 $V[k]\times\tau[k]$ 中均匀随机地选择 $(\mathbf{u}\ \boldsymbol{\gamma})$，并从 $D_{\mathbf{u},\boldsymbol{\gamma}}$ 中选择一个样本 S。

对于 $V[2]\times\tau'[2]$ 中的每一对 $(\mathbf{u}',\boldsymbol{\gamma}')$，令 $W_{\mathbf{u}',\boldsymbol{\gamma}'}$ 为满足以下条件的所有对 $(\mathbf{u}\ \boldsymbol{\gamma}) \in V[k]\times\tau[k]$：$\mathbf{u}'$ 是 $\mathbf{u}$ 的一个子元组，而 $\boldsymbol{\gamma}'$ 是 $\boldsymbol{\gamma}$ 中对应的相同子元组（使用相同的索引）。令 $D'_{\mathbf{u}',\boldsymbol{\gamma}'}$ 为如下分布：从 $W_{\mathbf{u}',\boldsymbol{\gamma}'}$ 中均匀随机地选择 $(\mathbf{u}\ \boldsymbol{\gamma})$，从 $D_{\mathbf{u},\boldsymbol{\gamma}}$ 中选择 S，并输出 $g(S)$。令 D' 为按如下方式定义的分布：从 $V[2]\times\tau'[2]$ 中等概率随机选择 $(\mathbf{u}',\boldsymbol{\gamma}')$，并从 $D'_{\mathbf{u}',\boldsymbol{\gamma}'}$ 中抽取一个输出样本。根据构造可知，D' 属于 $\mathcal{D}(G,\tau')$。因此，要证明 $g(D)\in\mathcal{D}(G,\tau')$，只需证明 $g(D)=D'$。这是因为在 D' 的执行过程中，每一对 $(\mathbf{u}\ \boldsymbol{\gamma})\in V[k]\times\tau[k]$ 被选中的概率都相同。 □

4 吸收时间的界

本节旨在界定多类型 Moran 过程的吸收时间。本节中，处理连通图会更方便。我们还将从初始状态 $M_0\in\Omega_0(G,\tau)$开始，因为 $\mathcal{D}(G,\tau)$中的所有分布都是状态空间$\Omega_0(G,\tau)$上的分布。

定义 10（吸收时间）。设 $G=(V,E)$ 为一个连通图，τ 为类型集合，$f\colon\tau\to\mathbb{Q}_{\geq 1}$ 为适应度函数，且 $M_0\in\Omega_0(G,\tau)$ 为一个初始状态。对于 Moran 过程 $M=M(G,\tau,f,M_0)$，以及任意类型 $j\in\tau$，我们定义停止时间

$$A_j(G,\tau,f,M_0) := \min\{t\in\mathbb{Z}_{\geq 0} \mid V_j(t)=V \ \textit{or}\ V_j(t)=\emptyset\}.$$

我们将 A_j 称为 M 中类型 j 的吸收时间。 M 的总吸收时间定义为

$$A(G,\tau,f,M_0) := \min\{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \mid \textit{for some } j \in \tau,\ V_j(t) = V\}.$$

如果根据上下文可以清楚地确定 G、 τ、 f 和 M_0，我们就只写作 A_j 和 A。

我们将为每种类型给出吸收时间的上界，由此很容易得到总吸收时间的上界。为此，我们先从适应度最高的类型开始。

4.1 适应度最高的突变体的期望吸收时间

为了给出期望吸收时间的上界，我们采用 D´ıaz 等人针对双类型过程提出的势函数 [5, 第 3]，并将其调整为适用于多类型过程中适应度最高的类型。

定义 11。设 $G = (V, E)$ 是一个图， τ 是一个类型集合。令 Ω 为从 V 到 τ 的函数所组成的集合。对于任意类型 $j \in \tau$，势函数 Ψ_j 是将每个状态 $S \in \Omega$ 映射为值 $\Psi_j(S) = \sum_{v:\ S(V)=j} 1/d(v)$ 的函数。

引理 12 适用于适应度最高的类型唯一的情形。证明与 [5, 引理 5], 的证明几乎完全相同，但为完整起见，我们仍给出详细证明。

引理 12. 设 $G = (V, E)$ 是一个连通图，设 τ是一个满足 $|\tau| = k > 1$的类型集合，并设$f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$是一个适应度函数。设 α是 τ_{f^+}中的一种类型。设 $f^* = \max\{f(j) \mid j \in \tau \setminus \alpha\}$，并假设 $f^* < f(\alpha) = f^+$。假设对于某个非负整数 t， $V_\alpha(t) \notin \{\emptyset, V\}$。那么

$$\mathbb{E}(\Psi_\alpha(M_{t+1}) - \Psi_\alpha(M_t)) > (1 - f^*/f^+)/n^3.$$

证明. 首先注意到 $\mathbb{E}(\Psi_\alpha(M_{t+1}) - \Psi_\alpha(M_t))$ 等于

$$\begin{aligned}
&\sum_{\substack{\{u,v\}\in E\\ u\in V_\alpha(t)\\ v\in V_j(t), j\neq\alpha}} \frac{f^+}{F(t)}\frac{1}{d(u)}\left(\Psi_\alpha(M_t|_{u\to v}) - \Psi_\alpha(M_t)\right) + \frac{f(j)}{F(t)}\frac{1}{d(v)}\left(\Psi_\alpha\left(M_t|_{v\to u}\right) - \Psi_\alpha(M_t)\right)\\
&= \sum_{\substack{\{u,v\}\in E\\ u\in V_\alpha(t)\\ v\in V_j(t), j\neq\alpha}} \frac{f^+}{F(t)}\frac{1}{d(u)}\frac{1}{d(v)} - \frac{f(j)}{F(t)}\frac{1}{d(v)}\frac{1}{d(u)}
\end{aligned}$$

接下来注意到，对于所有 $j \in \tau \setminus \alpha$， $F(t) < nf^+$且 $f(j) \leq f^*$。因此

$$\mathbb{E}(\Psi_\alpha(M_{t+1}) - \Psi_\alpha(M_t)) > \frac{f^+ - f^*}{nf^+} \sum_{\substack{\{u,v\}\in E\\ u\in V_\alpha(t)\\ v\in V_j(t), j\neq\alpha}} \frac{1}{d(u)d(v)} > \left(1 - \frac{f^*}{f^+}\right)/n^3,$$

从而完成证明。 □

我们用来为 $\mathbb{E}(A_\alpha(G,\tau,f,M_0))$ 给出上界的技术依赖于鞅技术，而 Hajek [11]对此作了明确阐述。Diaz 等人 [5, 定理 6] 采用这一技术研究双类型过程，遵循 He 和 Yao [12]的方法。为方便起见，我们在此采用 Goldberg 等人 [10]提出的命题的多类型推广。

引理 13（[10] 引理 45）。设 Y是一个状态空间 Ω_Y有限的马尔可夫链。设 $c_1, c_2 > 0$， 令$\Psi : \Omega_Y \to \mathbb{R}_{\geq 0}$ 为一个函数，并设 A ≥ 0 是一个停止时间，且 A $\leq \min\{t \mid \Psi(Y_t) = 0$ 或 $\Psi(Y_t) \geq c_1\}$。假设

(i) 对于每个满足 $0 < \Psi(S_1) < c_1$ 的状态 $S_1 \in \Omega_Y$， 在 Y 中都存在一条从 S_1 出发、通往某个满足 $\Psi(S_2) = 0$ 或 $\Psi(S_2) \geq c_1$ 的状态 S_2 的路径；

(ii) 对于所有 $t \geq 0$，如果 $\Psi(Y_t) < c_1$，那么 $\Psi(Y_{t+1}) \leq c_1 + 1$；并且

(iii) 对所有 $t \geq 0$ 和所有满足事件 $A > t$ 与 $Y_t = S$ 相容的 $S \in \Omega_Y$， $\mathbb{E}(\Psi(Y_{t+1}) - \Psi(Y_t) \mid Y_t = S) \geq c_2$。

于是我们有 $\mathbb{E}(A) \leq (c_1 - \Psi(Y_0) + 1)/c_2$。

推论 14. 设 $G = (V, E)$ 是一个连通图，τ 是满足 $|\tau| = k > 1$ 的类型集合，且 $f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$ 是一个适应度函数。设 α 是 τ_{f^+} 中的一个类型。设 $f^* = \max\{f(j) \mid j \in \tau \setminus \alpha\}$，并假设 $f^* < f(\alpha) = f^+$。考虑状态 $M_0 \in \Omega_0(G, \tau)$。那么

$$\mathbb{E}(A_\alpha(G, \tau, f, M_0)) \leq \frac{f^+}{f^+ - f^*}(n+1)\, n^3.$$

证明. 令 $c_1 := \sum_{v \in V} 1/d(v)$，并令 $c_2 := (1 - f^*/f^+)/n^3$。设 $A_\alpha = A_\alpha(G, \tau, f, M_0)$，并令 Ψ_α 为定义 11 中的势函数。设 $M = M(G, \tau, f, M_0)$。由构造可知 $A_\alpha = \min\{t \mid \Psi(M_t) = 0 \text{ 或 } \Psi(M_t) = c_1\}$。。若 $V_\alpha(0) \in \{V, \emptyset\}$，则 $A_\alpha = 0$，结论得证。否则，注意到 M 的状态空间 Ω 是有限的，且对于每个状态，Ψ_α 都非负。现在我们证明引理 13 的三个要求 (i) –(iii) 均得到满足。

对于 (i)，假设 $0 < \Psi(M_t) < c_1$，其中 t 是某个非负整数。根据 A_α 的定义，$V_\alpha \notin \{\emptyset, V\}$。由于 G 连通，M 有正概率从 M_t 移动到状态 S，在该状态下 $V_\alpha = V$，因此 $\Psi(S) = c_1$。对于 (ii)，注意到势能的最大值为 c_1。最后，对于 (iii)，引理 12 保证 $\mathbb{E}(\Psi_\alpha(M_{t+1}) - \Psi_\alpha(M_t)) > c_2 > 0$。

引理 13 因此可推出 $\mathbb{E}(A_\alpha) \leq (c_1 - \Psi_\alpha(M_0) + 1)/c_2 \leq (c_1 + 1)/c_2$。由于 $c_1 \leq n$，推论得证。 □

4.2 期望总吸收时间

现在，我们已经得到了最适应类型 α 的 $A_\alpha(G, \tau, f, M_0)$ 期望的一个上界，并将利用它推导任意 $j \in \tau$ 的 $A_j(G, \tau, f, M_0)$ 期望的一个上界。我们的策略如下。如果 $j = \alpha$，则问题已解决。否则，在经过时间 $A_\alpha(G, \tau, f, M_0)$ 后，有两种可能。如果类型 α 已固定，则发生 $A_j(G, \tau, f, M_0)$。否则，类型 α 已灭绝，因此我们用新的类型集合 $\tau \setminus \alpha$ 重复这一过程。这种归纳方法适用于各类型适应度两两不同的情形，我们将在本节第一部分中作此假设。之后将推导一般结果（不作此假设）。

当我们假设适应度彼此不同时，通常会假设 $\tau = \{1, \ldots, k\}$，并且 $f(1) < f(2) < \cdots < f(k)$。这不会损失一般性，却能简化记号。注意，在这种情况下，$\tau_{f^+} = \{k\}$。

定义15（$A_{\geq j}$）。设 G 为一个连通图。设 k 为一个正整数。设 $\tau = \{1, \ldots, k\}$。设 $f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$ 为满足 $f(1) < f(2) < \cdots < f(k)$ 的适应度函数。设 M_0 为 $\Omega_0(G, \tau)$ 中的一个状态，并设 $M = M(G, \tau, f, M_0)$。对于任意类型 $j \in \{2, \ldots, k\}$，定义

$$A_{\geq j} := \min\{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \mid \cup_{i \geq j} V_i(t) = \emptyset \text{ or, for some } i \geq j,\ V_i(t) = V\}.$$

$A_{\geq j}$ 因此是这样一个时间点：此时所有类型 j、.....、k 均已灭绝，或者其中一种类型已经固定。

观察16. 设 G 为一个连通图。设 k 为一个正整数。设 $\tau = \{1, \ldots, k\}$。设 $f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$ 为一个适应度函数，使得 $f(1) < f(2) < \cdots < f(k)$。设 M_0 为 $\Omega_0(G, \tau)$ 中的一个状态，并设 $M = M(G, \tau, f, M_0)$。那么 $A_{\geq j}$ 关于 j 单调递减。也就是说，对于所有 $j \in \{2, \ldots, k\}$，$A_{\geq j} \geq A_{\geq j+1}$。

证明。在时间 $t = A_{\geq j}$，要么 $\cup_{i \geq j} V_i(t) = \emptyset$，要么对于某个 $i \geq j$，$V_i(t) = V$。唯一不能直接推出 $A_{\geq j+1} \leq t$（根据定义）的情况是 $V_j(t) = V$，但这种情况意味着 $\cup_{i \geq j+1} V_i(t) = \emptyset$，因此 $A_{\geq j+1} \leq t$。 □

引理17。设 G 是一个具有 n 个顶点的连通图。设 k 是一个正整数。设 $\tau = \{1, \ldots, k\}$。设 $f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$ 是一个适应度函数，满足 $f(1) < f(2) < \cdots < f(k)$。设 M_0 是 $\Omega_0(G, \tau)$ 中的一个状态，并设 $M = M(G, \tau, f, M_0)$。设 j 是 $\{2, \ldots, k\}$ 中的一种类型。那么

$$\mathbb{E}(A_{\geq j}) \leq \sum_{i=j}^{k} \frac{f(i)}{f(i) - f(i-1)}(n+1)n^3.$$

证明。该引理通过对 $k - j$进行归纳法证明。对于基础情形 $j = k$，注意到 $A_{\geq k} = A_k$。因此，根据推论 $j = k$ 14，该断言对 $j = k$ 成立。

对于归纳步骤，假设该断言对 $j + 1$ 成立；我们将证明它对 j 也成立。

为此，令 Ω^j 为所有没有顶点被分配到类型 $\{j+1, \ldots, k\}$的状态构成的集合。对 Ω 中的初始状态应用推论 14，^{j}可得

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(A_{\geq j} - A_{\geq j+1}) &\leq \sum_{S \in \Omega^j} \mathbb{E}(A_{\geq j} - A_{\geq j+1} \mid M_{A_{\geq j+1}} = S) \cdot \Pr(M_{A_{\geq j+1}} = S) \\ &\leq \frac{f(j)}{f(j) - f(j-1)}(n+1)n^3 \cdot \underbrace{\sum_{S \in \Omega^j} \Pr(M_{A_{\geq j+1}} = S)}_{\leq 1}.\end{aligned}$$

因此，结合关于 $j + 1$ 的归纳假设，我们得到

$$\begin{aligned}\mathbb{E}(A_{\geq j}) &= \mathbb{E}(A_{\geq j} - A_{\geq j+1}) + \mathbb{E}(A_{\geq j+1}) \\ &\leq \frac{f(j)}{f(j) - f(j-1)}(n+1)n^3 + \mathbb{E}(A_{\geq j+1}) \\ &\leq \frac{f(j)}{f(j) - f(j-1)}(n+1)n^3 + \sum_{i=j+1}^{k} \frac{f(i)}{f(i) - f(i-1)}(n+1)n^3,\end{aligned}$$

由此完成证明。 □

最后一步，我们将吸收时间的界推广到不同类型可能具有相同适应度的过程。

定理 18. 设 $G = (V, E)$ 是一个具有 n 个顶点的连通图，设 τ是一个满足 $|\tau| > 1$的类型集合，设 $f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$ 是一个适应度函数，并设 M_0 是 $\Omega_0(G, \tau)$ 中的一个状态。假设 τ 中的类型具有 k 个不同的适应度，并令 $f^- = f_1 < f_2 < \cdots < f_k = f^+$ 表示这些适应度。对于每个 $i \in \{1, \ldots, k\}$，令 $\ell_i = |f^{-1}(f_i)|$ 表示适应度为 f_i 的类型数量，并令 $\ell = \max\{\ell_i \mid i \in \{1, \ldots, k\}\}$ 表示共享相同适应度的类型的最大数量。那么

(1) 总吸收时间有如下界：

$$\mathbb{E}(A(G, \tau, f, M_0)) \leq (\ell - 1)n^6 + \sum_{i=2}^{k} \frac{f_i}{f_i - f_{i-1}}(n+1)n^3.$$

(2) 对于任意 $j \in \{2, \ldots, k\}$，每个满足 $f(\beta) = f_j$ 的类型 β 的吸收时间有如下界：

$$\mathbb{E}(A_\beta(G, \tau, f, M_0)) \leq (\ell_j - 1)n^6 + \sum_{i=j}^{k} \frac{f_i}{f_i - f_{i-1}}(n+1)n^3.$$

(3) 每个具有 $f(\beta) = f_1$ 的类型 β 的吸收时间有界

$$\mathbb{E}(A_\beta(G, \tau, f, M_0)) \leq (\ell_1 - 1)n^6 + \sum_{i=2}^{k} \frac{f_i}{f_i - f_{i-1}}(n+1)n^3.$$

证明。我们首先将适应度相同的类型视为同一种类型。设 $\tau' = \{1, \dots, k\}$，并令 $f'\colon \tau' \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$ 为适应度函数，使得对每个 $i \in \tau'$，$f'(i) = f_i$。令 Ω 为从 V 到 τ 的函数集合，并令 Ω' 为从 V 到 τ' 的函数集合。照例，令 $\Omega_0(G, \tau)$ 为 Ω 中取值范围为 τ 的函数集合，并令 $\Omega'_0(G, \tau')$ 为 Ω' 中取值范围为 τ' 的函数集合。

我们将定义一个从 Ω 到 Ω' 的函数 g。给定 $S \in \Omega$，令 $g(S)$ 为 Ω' 中按如下方式定义的状态。对于每个 $v \in V$，找出满足 $f(v) = f_i$ 的值 $i \in \{1, \dots, k\}$。然后令 $g(S)(v) = i$。注意，如果 $S \in \Omega_0(G, \tau)$，那么 $S' \in \Omega'_0(G, \tau')$。令 $M'_0 = g(M_0)$。

令 $M = M(G, \tau, f, M_0)$ 和 $M' = M'(G, \tau', f', M'_0)$。对于任意 $j \in \tau'$，令 $V'_j(t) = \{v \in V \mid M'_t(v) = j\}$。根据定义 10 和 15，定义

$$\begin{aligned} A'_j &= \min\{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \mid V'_j(t) = V \text{ or } V'_j(t) = \emptyset\}, \\ A' &= \min\{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \mid \text{ for some } j \in \tau,\, V'_j(t) = V\}, \text{and} \\ A'_{\geq j} &= \min\{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \mid \cup_{i \geq j} V'_i(t) = \emptyset \text{ or, for some } i \geq j,\, V'_i(t) = V\ \}. \end{aligned}$$

由于 $A'_{\geq 2} = A'$，引理 17 应用于 M' 可得

$$\mathbb{E}(A') \leq \sum_{i=2}^{k} \frac{f_i}{f_i - f_{i-1}}(n+1)n^3. \tag{1}$$

注意，$g(M_0)\ g(M_1)\ldots$ 是链 M' 的忠实副本。若使用这种耦合将 M 与 M' 耦合，则在时间 A' 时，$M_{A'}$ 中所有顶点都被赋予适应度相同的类型。

考虑任意状态 $S \in \Omega$，其中顶点被赋予 q 种不同类型，且这些类型的适应度均相同。Díaz 等人著作中的定理11 [5] 表明，在二类型 Moran 过程中，从任意含有 2 种类型的状态出发，直到至多剩下一种类型的期望时间不超过 n^6。将这一论证应用于 S，把第一种类型与 $q-1$ 其他类型区分开来，可得直到至多剩下 $q-1$ 种类型的期望时间不超过 n^6。由于任一给定适应度下至多有 ℓ 种不同类型，$\mathbb{E}(A(G, \tau, f, S)) \leq (\ell - 1)n^6$。定理陈述中给出的 $\mathbb{E}(A(G, \tau, f, M_0))$ 的上界 (1) 随即得证。

为了证明 (2)，注意到 $A'_j \leq A'_{\geq j}$。将引理17 应用于 M' 可得

$$\mathbb{E}(A'_{\geq j}) \leq \sum_{i=j}^{k} \frac{f_i}{f_i - f_{i-1}}(n+1)n^3.$$

其余论证与 (1) 的论证类似。

最后，为证明 (3)，注意到在时间 A' 之后，要么类型 β 灭绝，要么所有剩余类型的适应度为 $f(\beta) = f_1$。接下来的论证与其他情形相同。证明至此完成。 □

由从 $\mathcal{D}(G, \tau)$ 中某个分布选取的初始状态，立即可得吸收时间的上界。

定义 19（随机初始状态下的吸收时间）。设 $G = (V, E)$ 是一个连通图，τ 是一个类型集合，$f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$ 是一个适应度函数，且 $D \in \mathcal{D}(G, \tau)$。对于 Moran 过程 $M = M(G, \tau, f, D)$，以及任意类型 $j \in \tau$，我们定义停止时间

$$A_j = A_j(G, \tau, f, D) := \min\{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \mid V_j(t) = V \text{ or } V_j(t) = \emptyset\}.$$

我们将 A_j 称为从 D 出发时 M 中类型 j 的吸收时间。D 中的总吸收时间定义为

$$A = A(G, \tau, f, D) := \min\{t \in \mathbb{Z}_{\geq 0} \mid \text{for some } j \in \tau,\, V_j(t) = V\ \}.$$

由于任意分布的支撑集 $D \in \mathcal{D}(G, \tau)$ 均包含于 $\Omega_0(G, \tau)$ 中，因此定理 18 中的界在 M_0 取自 D 时也成立。我们将适应度最高的类型的情形明确列出，因为我们将用这一结果建立 FPTRAS。

推论20. 设 G 是一个含有 n 个顶点的连通图，τ 是一个满足 $|\tau| > 1$ 的类型集合，$f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$ 是一个适应度函数，并设 $D \in \mathcal{D}(G,\tau)$。令 $f^* = \max\{f(j) \mid j \in \tau \setminus \tau_{f^+}\}$。任意 $\alpha \in \tau_{f^+}$ 的总吸收时间有如下界：

$$\mathbb{E}(A_\alpha(G,\tau,f,D)) \leq (|\tau_{f^+}|-1)n^6 + \frac{f(\alpha)}{f(\alpha)-f^*}(n+1)n^3.$$

证明。注意到 $\mathbb{E}(A_\alpha(G,\tau,f,D)) = \sum_{S\in\Omega} \Pr_D(S)\, E(A_\alpha(G,\tau,f,S))$。由于 D 的支撑集包含在 $\Omega_0(G,\tau)$ 中，因此该推论由定理 18 得出。 □

5 FPTRAS 的构造

定理 4（重述）。 MaxFixProb 在以 κ 为参数时具有 FPTRAS：$= |\tau| + ||f||$。

证明。首先考虑以下算法 $\mathbb{A}'$，其输入为一个连通图 G、一个类型集合 τ，满足 $|\tau| > 1$、一个适应度函数 f：$\tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$、一种类型 $\alpha \in \tau_{f^+}$、精度参数 ε 和 δ'，以及（通过预言机访问获得的）一个分布 $D \in \mathcal{D}(G,\ \tau)$。根据推论 9，$\pi_\alpha(G,\ \tau,\ f,\ D) \geq 1/n$。

令 $t = \lceil 3\ln(2/\delta')n/\varepsilon^2 \rceil$。算法 $\mathbb{A}'$ 执行 t 次对 $M(G,\tau,f,D)$ 的独立模拟；若满足以下任一条件，则停止模拟：(i) 所有顶点的类型均为 α；或 (ii) 类型 α 灭绝。在每次模拟中，使用预言机为 D 抽取初始状态。

令 $f^* = \max\{f(j) \mid j \in \tau \setminus \tau_{f^+}\}$。推论 20 意味着每次模拟的期望时间至多为 $\mathrm{poly}(n)\cdot|\tau|\cdot f(\alpha)/(f(\alpha)-f^*)$. 令 w 表示类型 α 达到固定的模拟次数。算法 $\mathbb{A}'$ 的输出为 w/t。

对于 $i \in \{1,\ldots,t\}$，令 X_i 表示事件“α 在第 i 次模拟中达到固定”的指示变量。由于 $\mathbb{E}(X_i) = \pi_\alpha(G,\tau,f,D) \geq 1/n$，因此有 $\mathbb{E}(w/t) = \mathbb{E}(\frac{1}{t}\sum_{i=1}^t X_i) = \pi_\alpha(G,\tau,f,D)$。根据 Chernoff 界（例如参见 Mitzenmacher 和 Upfal 的标准教材 [15, 定理11.1]），

$$\Pr(|w/t - \pi_\alpha(G,\tau,f,D)| < \varepsilon\pi_\alpha(G,\tau,f,D)) \geq 1-\delta'.$$

$\mathbb{A}'$的期望总运行时间至多为 $t\cdot\mathrm{poly}(n)\cdot|\tau|\cdot f(\alpha)/(f(\alpha)-f^*)$。接下来，我们使用以下标准构造，基于 $\mathbb{A}'$ 得到一个 ε-近似算法 $\mathbb{A}$。算法 $\mathbb{A}$ 以 G、τ、f、α、ε以及（通过预言机访问获得的）分布 D作为输入。算法$\mathbb{A}$使用这些输入以及 $\delta' = 1/8$模拟 $\mathbb{A}'$，最多运行 $8t\cdot\mathrm{poly}(n)\cdot|\tau|\cdot f(\alpha)/(f(\alpha)-f^*)$ 步。如果 $\mathbb{A}'$ 在这一步数内终止，则算法 $\mathbb{A}$ 返回其输出。否则，算法 $\mathbb{A}$ 停止模拟并返回 0。

根据马尔可夫不等式，$\mathbb{A}$ 停止模拟的概率至多为 $1/8$。因此，$\mathbb{A}$返回 $\pi_\alpha(G,\tau,f,D)$ 的 ε 近似的概率至少为 $1-\delta'-1/8 \geq 3/4$。

所需的 FPTRAS 通过重复运行算法 $\mathbb{A}$ O 次（$\log(1/\delta)$ 次）并取输出的中位数来实现。 □

定理 5（重述）。 $\mathrm{MaxFixProb}_{\mathrm{mut}}$ 以 κ 为参数时，具有 FPTRAS：$= |\tau| + ||f||$。

证明。证明与定理 4 的证明相同，不同之处在于，算法可以在多项式时间内直接从 $D_{\mathrm{mut}}(G,\tau,\tau_{\mathrm{ord}})$ 中抽取样本，而无需使用预言机。 □

6 利用二类型 Moran 过程给固定概率设定上界

推论 7 根据相关双类型 Moran 过程中 α 的固定概率，给出了多类型 Moran 过程中类型 α 固定概率的一个下界。如下推论所示，利用这一思路同样容易得到上界。

推论 21。设 $G = (V,E)$ 是一个连通图，τ 是类型集合，$f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$ 是一个适应度函数。设 α 是 τ 中的一种类型。设 $\beta = \arg\min\{f(j) \mid j \in \tau \setminus \{\alpha\}\}$。设 $\tau' = \{\alpha,\beta\}$。设 Ω 是从 V 到 τ 的函数集合，Ω' 是从 V 到 τ' 的函数集合。定义 $g\colon \Omega \to \Omega'$ 如下。对于每个状态 $S \in \Omega$，$g(S)$ 是满足以下条件的状态：若 $S(v) = \alpha$ 且$g(S)(v) = \beta$，则 $g(S)(v) = \alpha$；否则。于是，对于每个状态 $M_0 \in \Omega$，$\pi_\alpha(G,\tau,f,M_0) \leq \pi_\alpha(G,\tau',f,g(M_0))$。

证明。设 $f'\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$ 是适应度函数，满足 $f'(\alpha) = \alpha$，并且对于任意 $\beta' \in \tau \setminus \{\alpha\}$，$f'(\beta') = f(\beta)$。注意到 $\pi_\alpha(G, \tau', f, g(M_0)) = \pi_\alpha(G, \tau, f', M_0)$，因此目标是证明 $\pi_\alpha(G, \tau, f, M_0) \leq \pi_\alpha(G, \tau, f', M_0)$。

令 $M = M(G, \tau, f, M_0)$，$M' = M'(G, \tau, f', M_0)$，$j \in \tau$，$V_j(t) = \{v \in V \mid M_t(v) = j\}$，并令 $M_t(v) = j\}$。对于所有，令 $V'_j(t) = \{v \in V \mid M'_t(v) = j\}$。应用引理 6（交换 f 和 f' 的角色），我们发现对于任意时间 $t \in \mathbb{R}_{\geq 0}$，$V'_\alpha(t) \supseteq V_\alpha(t)$。因此 $\tilde{\pi}_\alpha(G, \tau, f, M_0) \leq \tilde{\pi}_\alpha(G, \tau, f', M_0)$。与推论 7 的证明一样，最后一步是观察到 $\tilde{\pi}_\alpha(G, \tau, f, M_0) = \pi_\alpha(G, \tau, f, M_0)$ 且 $\tilde{\pi}_\alpha(G, \tau, f', M_0) = \pi_\alpha(G, \tau, f', M_0)$。□

本文最后，我们利用推论 7 和 21 重新推导 Ferreira 和 Neves 关于三类型 Moran 过程固定概率的最新界限，讨论的是 G为完全图这一非常特殊的情形。他们关于 Moran 过程的主要结果 [8, 定理 4] 对应于引理 22在 $\tau = \{A, B, C\}$ 和 $f(A) > f(B) > f(C)$ 的特殊情形。

引理 22。设 n 是一个正整数，且 $G = (V, E)$ 是一个有 n 个顶点的完全图。设 τ 是一个类型集合，$f\colon \tau \to \mathbb{Q}_{\geq 1}$ 是一个适应度函数。设 α 是 τ 中的一种类型。令 $\beta^+ = \arg\max\{f(\beta) \mid \beta \in \tau \setminus \{\alpha\}\}$ 和 $\beta^- = \arg\min\{f(\beta) \mid \beta \in \tau \setminus \{\alpha\}\}$。假设 $f(\alpha) \neq f(\beta^+)$ 且 $f(\alpha) \neq f(\beta^-)$。设 M_0 是从 V 到 τ 的函数集合 Ω 中的一个状态。设 i 是 V 中映射到类型 α 的顶点数量，其中映射由 M_0给出。那么

$$\frac{1 - \left(\frac{f(\beta^+)}{f(\alpha)}\right)^i}{1 - \left(\frac{f(\beta^+)}{f(\alpha)}\right)^n} \leq \pi_\alpha(G, \tau, f, M_0) \leq \frac{1 - \left(\frac{f(\beta^-)}{f(\alpha)}\right)^i}{1 - \left(\frac{f(\beta^-)}{f(\alpha)}\right)^n}.$$

证明。我们首先给出下界。令 $\beta = \beta^+$。令 $\tau' = \{\alpha, \beta\}$。令 Ω′ 为从 V到 τ'的函数集合。令 $g\colon \Omega \to \Omega'$ 定义如下。对于每个状态 $S \in \Omega$，$g(S)$ 是满足以下条件的状态：$g(S)(v) = \alpha$ 当 $S(v) = \alpha$ 且 $g(S)(v) = \beta$时；否则为其他状态。推论 7 表明，$\pi_\alpha(G, \tau, f, M_0) \geq \pi_\alpha(G, \tau', f, g(M_0))$。为完成证明，我们注意到 $\pi_\alpha(G, \tau', f, g(M_0))$ 等于引理陈述中给出的下界。这一众所周知的事实源于 $\pi_\alpha(G, \tau', f, g(M_0))$ 是有偏一维随机游走到达下边界的概率。该随机游走是有偏的，因为 $f(\alpha) \neq f(\beta)$。详细信息请参见 Lieberman 等人 [14] 。上界的证明相同，只需将 $\beta = \beta^-$，并用推论 21 代替推论 7。

□

参考文献

[1] Vikraman Arvind 和 Venkatesh Raman。若干参数化计数问题的近似算法。载于 Prosenjit Bose 和 Pat Morin 编，算法与计算，第13届国际研讨会，ISAAC 2002，温哥华（加拿大不列颠哥伦比亚省），2002年11月21—23日，论文集，第2518卷，计算机科学讲义，第453–464页。Springer，2002年。doi:10.1007/3-540-36136-7_40。[2]Niko Beerenwinkel、Tibor Antal、David Dingli、Arne Traulsen、Kenneth W. Kinzler、Victor E. Velculescu、Bert Vogelstein 和 Martin A. Nowak。遗传进展与癌症等待时间。PLOS 计算生物学，3(11):e225，2007年11月。doi:10.1371/journal.pcbi.0030225。[3] Brian Chao 和 Jason Schweinsberg。突变率递增的空间突变模型。*CoRR*，abs/2108.09590，2021年。arXiv:2108.09590，doi:10.48550/arXiv.2108.09590。[4]Krishnendu Chatterjee、Rasmus Ibsen-Jensen 和 Martin A. Nowak。无向图上 Moran 过程固定概率的更快蒙特卡洛算法。载于第42届计算机科学数学基础国际研讨会，第83卷，*LIPIcs*，第61:1–61:13页。Schloss Dagstuhl - Leibniz-Zentrum f¨ur Informatik，2017年。doi:10.4230/LIPIcs.MFCS.2017.61。

[5] Josep D´íaz、Leslie Ann Goldberg、George B. Mertzios、David Richerby、Maria Serna 和 Paul G. Spirakis。广义 Moran 过程中的固定概率近似。Algorithmica，69(1):78–91，2014年5月。doi:10.1007/s00453-012-9722-7。[6] Josep D´íaz、Leslie Ann Goldberg、David Richerby 和 Maria Serna。Moran 过程的吸收时间。Random Structures & Algorithms，49(1):137–159，2016年。doi:10.1002/rsa.20617。[7] A. M. Etheridge 和 R. C. Griffiths。具有基因选择的 Moran 模型中的合并谱系对偶过程。Theoretical Population Biology，75(4):320–330，2009年。doi:10.1016/j.tpb.2009.03.004。[8] Eliza M. Ferreira 和 Armando G. M. Neves。三种或更多策略下 Moran 过程的固定概率：一般性结果与耦合结果。Journal of Mathematical Biology，81(1):277–314，2020年7月。doi:10.1007/s00285-020-01510-0。[9] R. A. Fisher。论显性比率。Proceedings of the Royal Society of Edinburgh，42:321–341，1923年。doi:10.1017/S0370164600023993。[10] Leslie Ann Goldberg、John Lapinskas 和 David Richerby。Moran 过程的相变及其算法后果。Random Structures & Algorithms，56(3):597–647，2020年。doi:10.1002/rsa.20890。[11] Bruce Hajek。漂移分析所蕴含的首次到达时间界与占用时间界及其应用。Advances in Applied Probability，14(3):502–525，1982年。doi:10.2307/1426671。[12] Jun He 和 Xin Yao。进化算法的漂移分析与平均时间复杂度。Artificial Intelligence，127(1):57–85，2001年。doi:10.1016/S0004-3702(01)00058-3。[13] Nicolas Lanchier。Wright–Fisher 模型与 Moran 模型。载于 Nicolas Lanchier 编，Stochastic Modeling，Universitext，第203–218页。Springer International Publishing，2017年。doi:10.1007/978-3-319-50038-6_12。[14] Erez Lieberman、Christoph Hauert 和 Martin A. Nowak。图上的进化动力学。Nature，433(7023):312–316，2005年1月。doi:10.1038/nature03204。[15] Michael Mitzenmacher 和 Eli Upfal。概率与计算：随机算法与概率分析。剑桥大学出版社，2005年。doi:10.1017/CBO9780511813603。[16] P. A. P. Moran。遗传学中的随机过程。Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society，54(1):60–71，1958年。doi:10.1017/S0305004100033193。[17] Martin A. Nowak。进化动力学：探索生命方程。哈佛大学出版社，2006年。doi:10.2307/j.ctvjghw98。[18] Bert Vogelstein、Nickolas Papadopoulos、Victor E. Velculescu、Shibin Zhou、Luis A. Diaz 和 Kenneth W. Kinzler。癌症基因组图谱。Science（纽约，纽约州），339(6127):1546–1558，2013年3月。doi:10.1126/science.1235122。[19]Sewall Wright。孟德尔群体中的进化。Genetics，16(2):97–159，1931年。doi:10.1093/genetics/16.2.97。