## 3. Haarautumisketjut

Tässä kappaleessa tarkastelemme haarautumisketjua, jolla mallinnamme jonkin populaation kehittymistä sukupolvesta toiseen.

3.1. **Oletus.** *Sukupolvet* ovat ajanhetkiä $n = 0, 1, 2, \ldots$.

3.2. **Oletus.** *Sukupolven koko* on satunnaismuuttuja $X_n$ eli *yksilöiden lukumäärä sukupolvessa* $n$.

3.3. **Oletus.** Lähtotila $X_0 = 1$ (eli aluksi on tarkalleen yksi yksilö)

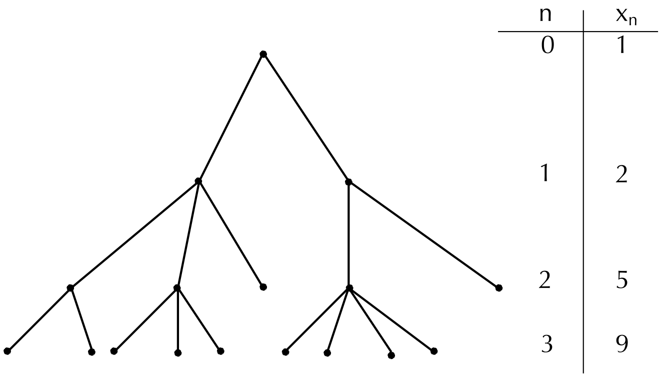
3.4. **Oletus.** Kaikki yksilöt ovat identtisiä eli jälkeläisten lukumääräjakauma on jokaisella yksilöllä sama

3.5. **Oletus.** Yksilön jälkeläisten lukumäärää kuvaa satunnaismuuttuja $\xi$, jonka jakauma on

$$a_k := \mathbf{P}\left(\, \xi = k \,\right), \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

3.6. **Oletus.** Kaikki yksilöt ovat riippumattomia.

3.7. **Esimerkki.** Tällainen malli soveltuu bakteeripopulaatioiden mallintamiseen. Sitä voi myös soveltaa jonkin suvun mies- tai naispuolisiin jäseniin. Fysiikassa ja kemiassa tapahtuvat ketjureaktiot ovat myös mahdollisia mallinnuskohteita.




Kuva 4. Mallin mukainen sukupuu

Selvitämme nyt millainen Markovin ketju $(X_n)$ oletuksista muodostuu. Oletetaan, että $X_n = i$ eli sukupolvessa $n$ on $i$ kaikin tavoin samanlaisia ja toisistaan riippumattomia yksilöitä. Kullakin yksilöllä 1, 2, . . . ja $i$ on mallin mukaan jälkeläisiä $\xi_1$, $\xi_2$, . . . ja $\xi_i$ kappaletta vastaavasti.

Kuvassa esimerkiksi

$$X_2 = 5 \quad \text{ja} \quad \xi_1 = 2,\ \xi_2 = 3,\ \xi_3 = 0,\ \xi_4 = 4,\ \text{ja}\ \xi_5 = 5$$

Laskemalla yhteen saamme seuraavan sukupolven kooksi $X_3 = \xi_1 + \xi_2 + \cdots + \xi_5 = 2 + 3 + 0 + 4 + 0 = 9$.

Tarkastelemme tässä kappaleessa pääsääntöisesti yhtä ongelmaa, mikä on:

**Ongelma.** Millä todennäköisyydellä populaatio kuolee sukupuuttoon?

Sukupuuttoa olemme jo sivunneet sivulla 21 esimerkissä 2.7. Voimme siis määritellä sukupuuton tilanteena $X_n = 0$ jollakin $n \geq 1$. Tästä seuraa välttämättä, että $X_{n+1} = X_{n+2} = \cdots = 0$ eli tila 0 tai sanallisesti tila ”sukupuutto” on absorboiva tila.

Ongelman vastaus on siis määrätä absorptiotodennäköisyys tilaan 0 lähtötilanteesta $X_0 = 1$. Merkitään jatkossa

3.8. **Merkintä.** Sukupuuton todennäköisyys on

$$q := \mathbf{P}\,(\,\text{sukupuutto}\,) = \mathbf{P}\,(\,X_n = 0 \text{ jollakin } n\,) = \mathbf{P}\,(\,T_0 < \infty\,)$$

Käsitellään aluksi helpot tapaukset. Jos

$$a_0 = \mathbf{P}\,(\,\xi = 0\,) = 0; \tag{3.9}$$

eli $\xi \geq 1$ varmasti, niin

$$X_{n+1} = \sum_{i=1}^{X_n} \xi_i^{(n)} \geq \sum_{i=1}^{X_n} 1 = X_n$$

eli kukin sukupolvi on aina vähintään edellisen kokoinen, siispä

$$1 = X_0 \leq X_1 \leq \ldots \quad \Longrightarrow X_n \neq 0 \quad \text{kun } n \geq 1.$$

Tässä tapauksessa $q = 0$. Tämä on tietenkin itsestään selvää. Oletammekin vastaisuudessa, että

3.10. **Oletus.** todennäköisyys $a_0 = \mathbf{P}\,(\,\xi = 0\,) > 0$ eli on mahdollista, että yksilö ei saa yhtään jälkeläistä.

Oletamme, seuraavaksi, että $a_0 + a_1 = 1$ eli

$$\mathbf{P}\,(\,\xi = 0\,) > 0 \quad \text{ja} \quad \mathbf{P}\,(\,\xi = 0 \text{ tai } \xi = 1\,) = 1.$$

Tässä tapauksessa, $X_{n+1} \leq X_n \leq \ldots X_0 = 1$, joten tilajoukkona voidaan pitää joukkoa $S' = \{0, 1\}$. Siirtymätodennäköisyydet ovat $p_{11} = a_1 = (1 - a_0)$ ja $p_{10} = a_0$, joten populaation elinikä $T_0$ on Geom$(a_0)$-jakautunut. Tästä seuraa välittömästi, että $T_0 < \infty$ eli $q = 1$. Tämäkin on varsin helposti ymmärrettävissä, sillä jos kukin yksilöistä voi saada vain yhden jälkeläisen tai sitten jää lapsettomaksi, niin vääjäämättä populaation koko pienenee.

Tästä syystä teemmekin vastaisuudessa seuraavat oletukset:

3.11. **Oletus.** todennäköisyys $a_0 = \mathbf{P}\,(\,\xi = 0\,) > 0$ sekä $a_0 + a_1 < 1$. Toisin sanoen todennäköisyys $\mathbf{P}\,(\,\xi \geq 2\,) > 0$ eli on mahdollista, että yksilö ei saa yhtään jälkeläistä, mutta on myös mahdollista, että yksilö saa kaksi jälkeläistä tai jopa enemmän.

Merkitään nyt jälkeläisjaukaumasatunnaismuuttujan $\xi$ odotusarvoa luvulla $m$, eli

$$m := \mathbf{E}\,\xi = \sum_{k\geq 0} k a_k.$$

Saadaksemme analysoitua ongelman tarkasti tarvitsemme tarkan tiedon koko jakaumasta $(a_k)$. Koko jakauman saa mukavasti nidottua yhteen funktioon, eli niin sanottuun *generoivaan funktioon* $\varphi$, jonka määrittelemme seuraavasti:

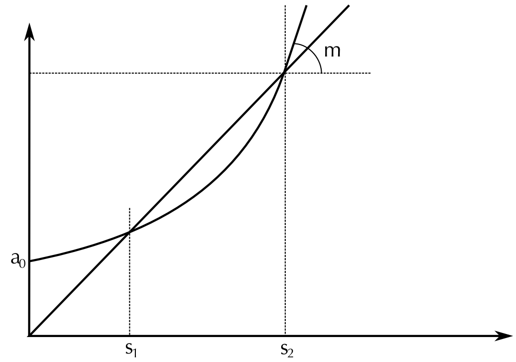
$$\begin{aligned} \varphi\colon [0,1] \to \mathbb{R}; \quad \varphi(s) := \mathbf{E}\,s^{\,\xi} &= \sum_{k=0}^{\infty} s^k \mathbf{P}\,(\,\xi = k\,) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k s^k \\ &= a_0 + a_1 s + a_2 s^2 + \dots \end{aligned} \tag{3.12}$$

Kyseisellä funktiolla on seuraavia ominaisuuksia:

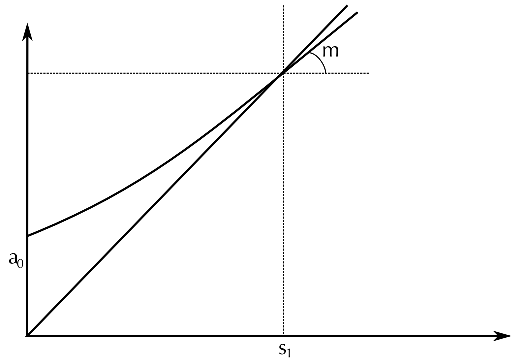
- funktio $\varphi$ on kasvava, sillä kun $s < t$, niin $s^\xi \leq t^\xi$, joten $\varphi(s) \leq \varphi(t)$
- funktion $\varphi$ minimiarvo eli arvo nollassa on $\varphi(0) = a_0 > 0$
- funktion $\varphi$ maksimiarvo on $\varphi(1) = \sum a_k = 1$
- funktion $\varphi$ derivaatta on
$$\varphi'(s) = \sum_{k=1}^{\infty} k a_k s^{k-1} = \mathbf{E}\,\xi s^{\xi-1} = a_1 + 2a_2 s + 3a_3 s^2 + \dots$$
- funktion $\varphi'$ arvo nollassa on $\varphi'(0) = a_1$
- edelleen $\varphi'(1) = \sum k a_k = \mathbf{E}\,\xi = m$.
- funktion $\varphi$ toinen derivaatta on
$$\begin{aligned} \varphi''(s) &= \sum_{k=2}^{\infty} (k-1) k a_k s^{k-2} = \mathbf{E}\,\xi(\xi-1) s^{\xi-2} \\ &= 2a_2 + 6a_3 s + 12 a_4 s^2 + \dots \end{aligned}$$

Funktion derivaatan avulla havaitsemme, että funktio $\varphi$ on *aidosti kasvava*. Koska $a_1 \geq 0$, niin $\varphi'(0) \geq 0$. Toisaalta oletimme, että $a_j > 0$ jollakin $j \geq 2$, joten $\varphi'(s) \geq a_j s^j > 0$, kun $0 < s \leq 1$.

Funktion $\varphi$ toisen derivaatan avulla havaitsemme, että $\varphi$ on *kovera funktio*. Näiden tietojen avulla voimme luonnostella funktion $\varphi$ kuvaajan.




KUVA 5. Funktion $\varphi$ kuvaaja, kun $m > 1$




KUVA 6. Funktion $\varphi$ kuvaaja, kun $m < 1$

Kuvaajan perusteella näyttäisi, että yhtälöllä $\varphi(s) = s$ on ratkaisuja joko 1 tai 2, riippuen onko odotusarvon $m$ suuruudesta. Tämä on helppo osoittaakin:

3.13. **Lemma.** *Kun $m > 1$, niin yhtälöllä $\varphi(s) = s$ on kaksi ratkaisua, $s = s_1 < 1$ ja triviaali ratkaisu $s = s_2 := 1$. Kun $m \leq 1$, on yhtälön ainoa ratkaisu on triviaaliratkaisu $s = s_1 := 1$.*

*Todistus.* Yhtälön $\varphi(s) = s$ ratkaisut ovat funktion $g(s) := \varphi(s) - s$ nollakohtia ja toisinpäin. Koska $g'(s) = \varphi'(s) - 1$ ja funktio $\varphi'$ on aidosti kasvava, niin $g'$ on aidosti kasvava funktio ja saavuttaa siten maksiminsa, kun $s = 1$.

Jos $m \leq 1$, niin $g'(s) < g'(1) = \varphi'(1) - 1 = m - 1 \leq 0$ jokaisella $s < 1$. Erityisesti siis funktio $g$ on aidosti vähenevä funktio. Se saavuttaa siis maksiminsa, kun $s = 0$ ja miniminsä, kun $s = 1$. Koska $g(1) = 0$, niin $g(s) > 0$ jokaisella $s < 1$. Siispä funktiolla $g$ on tarkalleen yksi nollakohta.

Kun $m > 1$, niin $g'(1) > 0$. Toisaalta $g'(0) = \varphi'(0) - 1 = a_1 - 1 \leq a_0 + a_1 - 1 < 0$, joten funktiolla $g'$ on nollakohta $s = t_0 \in (0, 1)$. Koska välillä $(t_0, 1)$ funktio

$g'$ on positiivinen, niin

$$g(1) - g(t_0) = 0 - g(t_0) \int_{t_0}^{1} g'(s)\,\mathrm{d}s > 0,$$

joten $g(t_0) < 0$. Toisaalta $g(0) = \varphi(0) = a_0 > 0$, joten funktiolla $g$ on välillä $(0, t_0)$ ainakin yksi nollakohta $s = s_1$. □

Miksi käytimme näin paljon vaivaa funktion $\varphi$ tarkasteluun ja yhtälön $\varphi(s) = s$ ratkaisujen käytökseen. Osoitamme seuraavaksi, että sukupuuton todennäköisyys $q$ toteuttaa yhtälön $\varphi(q) = q$ ja on itse asiassa pienin mahdollisista ratkaisuista.

3.14. **Lause.** *Sukupuuton todennäköisyys $q$ on yhtälön $\varphi(s) = s$ pienin juuri, eli*

$$\mathbf{P}\,(\,\textit{sukupuutto}\,) = s_1.$$

*Lisäksi $q < 1$ tarkalleen silloin, kun $m > 1$.*

Lauseen väitteessä on huomattava, että tekemämme lisäoletukset satunnaismuuttujan $\xi$ jakaumasta ovat voimassa. Jos $a_0 = a_2 = a_3 = \cdots = 0$ ja $a_1 = 1$, niin $m = 1$, mutta $q = 0$.

*Todistus.* Määräämme ensin satunnaismuuttujan $X_n$ jakauman generoivan funktion $\varphi_n$, jonka määrittelemme siis

$$\varphi_n(s) := \mathbf{E}\, s^{X_n} = \sum_k \mathbf{P}\,(\,X_n = k\,)\, s^k.$$

Sukupuuton todennäköisyys $q$ on absorptiotodennäköisyys tilaan $\{0\}$ joutumisesta, joten edellisen kappaleen kaavan (2.11) sivulla 22 mukaan se voidaan ilmoittaa raja-arvona todennäköisyyksistä $q_n$,

(3.15) $$q_n := \mathbf{P}\,(\,\text{sukupuutto tapahtunut jossakin sukupolvessa } m \le n\,)$$

Edelleen huomaamme, että tämä absorptiotodennäköisyys $q_n = \mathbf{P}\,(\,X_n = 0\,)$, joten $q_n$ saadaan generoivan funktio $\varphi_n$ arvona, kun $s = 0$. Haluttu todennäköisyys $q$ voidaan siis esittää raja-arvona

(3.16) $$q = \lim_{n\to\infty} q_n = \lim_{n\to\infty} \varphi_n(0).$$

Tulemme osoittamaan, että $\varphi_n$ voidaan esittää generoivan funktion $\varphi$ avulla seuraavasti:

(3.17) $$\varphi_n = \varphi^{(n)} := \underbrace{\varphi \circ \varphi \cdots \circ \varphi}_{n \text{ kappaletta}}.$$

Itse asiassa emme tarvitse tätä tietoa kokonaisuudessaan väitteen osoittamiseksi, vaan meille riittää näennäisesti heikompi tieto

$$\varphi_{n+1} = \varphi \circ \varphi_n, \quad n \in \mathbb{N}. \tag{3.18}$$

Nämä kaksi identiteettiä ovat yhtäpitäviä. Tästä esityksestä on paljon hyötyä, sillä nyt todennäköisyydet $q_n$ toteuttavat yksinkertaisen *rekursioyhtälön*. Koska $q_n = \varphi_n(0)$, niin

$$q_{n+1} = \varphi_{n+1}(0) = \varphi \circ \varphi_n(0) = \varphi(q_n) \tag{3.19}$$

kullakin ajanhetkellä $n$. Koska tiedämme, että kuvaus $\varphi$ on jatkuva ja kaavan (3.16) mukaan jonolla $(q_n)$ on raja-arvo $q$, niin

$$\lim_{n\to\infty} \varphi(q_n) = \varphi(q).$$

Toisaalta identiteetin (3.19) nojalla vasen puoli on

$$\lim_{n\to\infty} \varphi(q_n) = \lim_{n\to\infty} q_{n+1} = q,$$

joten voimme päätellä, että $q = \varphi(q)$.

Väitteen osoittamiseksi on siis vielä näytettävä identiteetti (3.18) sekä osoitettava, että $q$ on pienin mahdollisista yhtälön $s = \varphi(s)$ ratkaisuista.

Osoitamme ensin kaavan (3.17). Kun $n = 0$, niin

$$\varphi_0(s) = \mathbf{E}\, s^1 = s.$$

Ehdon (3.18) perusteella pitäisi siis olla $\varphi_1 = \varphi$. Näin onkin, sillä $X_1 \sim \xi$, joten

$$\varphi_1(s) = \mathbf{E}\, s^{X_1} = \mathbf{E}\, s^{\xi} = \varphi(s).$$

Osoitamme nyt kaavan (3.17) yleisesti. Koska suoraan laskemalla saamme

$$\begin{aligned} \varphi_{n+1}(s) &= \sum_k \mathbf{P}\,(\,X_{n+1} = k\,)\, s^k = \sum_{i,k} \mathbf{P}\,(\,X_{n+1} = k, X_n = i\,)\, s^k \\ &= \sum_{i,k} \mathbf{P}\,(\,X_n = i\,)\,\mathbf{P}\,(\,X_{n+1} = k \mid X_n = i\,)\, s^k \\ &= \sum_{i,k} \mathbf{P}\,(\,X_n = i\,)\,\mathbf{P}\left(\xi_1^{(n)} + \cdots + \xi_i^{(n)} = k\right) s^k, \end{aligned} \tag{3.20}$$

olemme onnistuneet palauttamaan siirtymän sukupolven $n$ tilaan yhdessä jälkeisten määrällä. Vaihtamalla summausjärjestystä ja generoivan funktion määritelmää voimme kirjoittaa edellisen kaavan myös muodossa

$$\begin{aligned} \varphi_{n+1}(s) &= \sum_i \mathbf{P}\,(\,X_n = i\,) \sum_k \mathbf{P}\left(\xi_1^{(n)} + \cdots + \xi_i^{(n)} = k\right) s^k \\ &= \sum_i \mathbf{P}\,(\,X_n = i\,)\,\mathbf{E}\, s^{\xi_1 + \cdots + \xi_i} \end{aligned} \tag{3.21}$$

Odotusarvo kaavan oikealla puolella voidaan laskea, sillä oletimme että kukin yksilö on samanlainen ja riippumaton muista. Siispä tulon $s^{\xi} \dots s_i^{\xi}$ odotusarvo on odotusarvojen tulo:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{E}\, s^{\xi_1+\cdots+\xi_i} &= \mathbf{E}\, s^{\xi_1} \dots s^{\xi_i} = \mathbf{E}\, s^{\xi_1}\, \mathbf{E}\, s^{\xi_2} \dots \mathbf{E}\, s^{\xi_i} \\
&= \varphi(s) \times \varphi(s) \times \cdots \times \varphi(s) = \varphi(s)^i.
\end{aligned} \tag{3.22}
$$

Merkitsemme $r := \varphi(s) \in [0,1]$ ja sijoitamme kaavan (3.22) kaavan (3.21), jolloin havaitsemme, että

$$
\begin{aligned}
\varphi_{n+1}(s) &= \sum_i \mathbf{P}\,(\,X_n = i\,)\, \mathbf{E}\, s^{\xi_1+\cdots+\xi_i} = \sum_i \mathbf{P}\,(\,X_n = i\,)\, r^i \\
&= \mathbf{E}\, r^{X_n} = \varphi_n(r) = \varphi_n \circ \varphi(s).
\end{aligned} \tag{3.23}
$$

Tästä identiteetistä saamme ehdon (3.17) induktiolla ajanhetken $n$ suhteen. Tapaus $n = 0$ on jo osoitettu, ja jos oletamme, että $\varphi_n = \varphi^{(n)}$, niin

$$
\varphi_{n+1} = \varphi_n \circ \varphi = \varphi^{(n)} \circ \varphi = \varphi^{(n+1)}, \tag{3.24}
$$

mikä osoittaa induktioaskeleen. Siispä induktioperiaatteen nojalla ehto (3.17) on voimassa kaikilla $n$.

Lauseen todistuksesta puuttuu enää viimeinen askel, eli osoitus sille, että $q = s_1$ on pienin mahdollinen juuri. Koska olemme jo osoittaneet, että $q$ on juuri ja edellisessä lemmassa näytimme, että $s_1$ on pienin juurista, niin $q \geq s_1$. Riittää siis osoittaa, että $q \leq s_1$. Tämä seuraa vahvemmasta väitteestä:

$$
q_n \leq s_1 \quad \text{jokaisella ajanhetkellä } n. \tag{3.25}
$$

Sillä jos vahvempi väite (3.25) on voimassa, niin myöskin raja-arvo $q = \lim q_n \leq s_1$.

Tämän vahvemman väitteen etuna on, että voimme osoittaa sen induktiolla! Kun $n = 0$, niin $q_0 = \varphi_0(0) = 0$, sillä sukupuutto ei ole oletuksiemme perusteella mahdollinen nollannessa sukupolvessa. Siispä $q_0 = 0 \leq s_1$, joten väite (3.25) on voimassa ainakin, kun $n = 0$.

Oletamme, että väite (3.25) on voimassa ajanhetkellä $n$. Nyt

$$
q_{n+1} = \varphi(q_n),
$$

joten funktion $\varphi$ kasvavuuden ja induktio-oletuksen $q_n \leq s_1$ nojalla

$$
q_{n+1} = \varphi(q_n) \leq \varphi(s_1).
$$

Koska $s_1$ on yhtälön $\varphi(s) = s$ juuri, niin $\varphi(s_1) = s_1$. Olemme siis osoittaneet, että $q_{n+1} \leq \varphi(s_1) = s_1$, mikä olikin induktioväite. Siispä väite (3.25) on voimassa jokaisella $n$ ja koko lause on siis todistettu. □

3.26**. Esimerkki.** Tarkastellaan populaatiota, jossa jälkeläisten lukumääräjakauma on

$$(a_0, a_1, a_2, a_3) = (\frac{7}{34}, \frac{9}{34}, \frac{9}{34}, \frac{9}{43})$$

ja $a_k = 0$ kaikilla muilla $k$. Millä todennäköisyydellä populaatio kuolee sukupuuttoon?

Käytämme edellisiä tuloksia tämän ratkaisemiseen. Nyt $a_0 > 0$ ja $a_2 > 0$, joten tekemämme lisäoletukset ovat voimassa. Nyt odotusarvo

$$m = \frac{7}{34} + 2 \times \frac{9}{34} + 4\frac{9}{34} = \frac{7 + 18 + 36}{34} > 1,$$

joten todennäköisyys on pienempi kuin 1. Eli varma sukupuutto ei ainakaan ole. Ratkaisemmekin sitten yhtälön $s = \varphi(s)$. Nyt

$$\varphi(s) = \frac{9}{34}(s^3 + s^2 + s) + \frac{7}{34},$$

joten

$$\varphi(q) = q \quad \Longrightarrow q^3 + q^2 + q^2 + q + \frac{7}{9} = \frac{34q}{9} \Longrightarrow q^3 + q^2 - \frac{25}{9}q + \frac{7}{9} = 0.$$

Tämä on kolmannen asteen yhtälö, mutta tiedämme, että $q = 1$ on sen juuri, joten jakamalla tekijällä $q - 1$ saamme

$$q^3 + q^2 - \frac{25}{9}q + \frac{7}{9} = (q-1)(q^2 + 2q - \frac{7}{9}) = 0.$$

Koska $q^2 + 2q - \frac{7}{9} = (q+1)^2 - (\frac{4}{3})^2 = (q - \frac{1}{3})(q + \frac{7}{3})$, niin kaikki yhtälön $\varphi(q) = q$ juuret ovat siis

$$q_2 = 1, \quad q_1 = \frac{1}{3} \quad \text{ja} \quad q_3 = -\frac{7}{3}.$$

Näistä $q_3 < 0$ ei kuulu tarkasteluvälillemme $[0, 1]$, joten pienin ratkaisuista on siis $q_1 = \frac{1}{3}$. Tarkasteltavana oleva populaatio kuolisi siis näillä oletuksilla sukupuuttoon todennäköisyydellä $\frac{1}{3}$.