統計数理（1991）
第 39 巻 第 1 号 47-52

ライト・フィッシャーモデルの確率微分方程式

—— 伊藤型方程式とストラトノヴィッチ型方程式 ——

総合研究大学院大学 統計科学専攻　丸　山　貴志子
統計数理研究所・総合研究大学院大学　伊　藤　栄　明

（1991 年 4 月　受付）

1. はじめに

集団遺伝学において確率過程は非常に重要な役割を演じ，特に分子進化や蛋白質多型現象では遺伝的浮動が重要な要因であると考えられている．最も典型的な確率モデルはライト・フィッシャーモデルと呼ばれるものである．確率積分には二つの形式 —— 伊藤型とストラトノヴィッチ型 —— がある．ここではライト・フィッシャーモデルの伊藤型確率微分方程式による表現とストラトノヴィッチ型確率微分方程式による球面上のブラウン運動の表現の類似性を示す．このことは伊藤型積分とストラトノヴィッチ型積分の違いを示す良い例になっていると思われる．また球面上のブラウン運動とライト・フィッシャーモデルの関係についてのべる．

2. ライト・フィッシャーモデルのシミュレーション法

ライト・フィッシャーモデルとは，任意交配を行う有限集団で世代交代において次世代の遺伝子が集団から無作為に抽出されるというモデルである．この無作為抽出による確率的変動のことを遺伝的浮動あるいはライト効果という．ここでは，遺伝的浮動のみを考慮し，突然変異や自然淘汰による影響は考えない．

いま，N 個の二倍体個体からなる集団を考え，ある遺伝子座の遺伝子に注目する．つまり $2N$ 個の遺伝子からなる集団を考える．その中における m 種類の対立遺伝子 $A_1, A_2, \ldots, A_m$ の頻度をそれぞれ，$x_1, x_2, \ldots, x_m$ とする．

第 t 世代における遺伝子頻度が与えられた時，次世代の集団に A_i 遺伝子が k 個含まれる確率は

(2.1)
$$\binom{2N}{k} x_i^k (1-x_i)^{2N-k}$$

によって与えられる．すなわち二項分布に従う．この分布の平均は $2Nx_i$，分散は $2Nx_i(1-x_i)$ であるから，世代交代における A_i 遺伝子の頻度変化の平均および分散は

(2.2)
$$Mx_i = E\{x_i(t+1) - x_i(t)\} = 0$$

および

(2.3)
$$Vx_i = E\{(x_i(t+1) - x_i(t))^2\} = x_i(1-x_i)/2N$$

となる．同様にして A_i 遺伝子と A_j 遺伝子の間の共分散を計算すると

$$\begin{aligned} Vx_i,\, x_j &= E\{(x_i(t+1)-x_i(t))(x_j(t+1)-x_j(t))\} \\ &= -x_i x_j/2N \end{aligned} \tag{2.4}$$

となる．これらの式において第 t 世代における遺伝子頻度を単に x_i と書いた．

ここで，時間および頻度を連続変数と見なす．遺伝子頻度は拡散過程として近似でき，頻度の確率分布はコルモゴロフ方程式（フォッカー・プランク方程式）に従うことになる．頻度変化の平均および共分散行列は (2.2)-(2.4) 式によって表される．

コルモゴロフ方程式によって表される確率過程を伊藤型確率微分方程式で表すには，共分散行列を

$$\{d_{ij}(t)\}\{d_{ij}(t)\}^t = \{x_i(t)(\delta_{ij}-x_j(t))\} \tag{2.5}$$

のように分解する必要がある．(2.5)式のような分解ができると，頻度変化は次式のような確率微分方程式で表される．

$$dx_i(t) = c\sum_{j=1}^{m} d_{ij}(t)dB_j(t) \tag{2.6}$$

ここで，$\{B_j(t)\}$ は平均 0 分散 t である互いに独立なウィーナー過程を表し，$c=\sqrt{1/2N}$ である．

(2.5)式の分解はしばしばコレスキー法によって数値的に行われる．しかし，ここでは，ランダムな衝突モデルに基づく別の表現形式を与えよう（Itoh (1979, 1984)）．

$2N$ 個の遺伝子は遺伝子プールの中で，ランダムな衝突をしていると考える．$(t, t+dt)$ の間に衝突の起こる確率は λdt によって与えられるとし，異なった種類の遺伝子 i と j が衝突すれば，それらは確率 1/2 で i 遺伝子となり，確率 1/2 で j 遺伝子になるものとする．すなわち，この衝突により遺伝子 i の頻度は $c\sqrt{x_i(t)x_j(t)}\,dB_{ij}$ だけ増え，遺伝子 j は $c\sqrt{x_i(t)x_j(t)}\,dB_{ij}$ だけ減ることになる．

したがって，このモデルは確率微分方程式 (2.7) によって近似することができる．

$$dx_i(t) = c\sum_{j=1}^{m} \sqrt{x_i(t)x_j(t)}\,dB_{ij}(t) \tag{2.7}$$

ここで，$\{B_{ij}(t)\}$ $(i>j)$ は平均 0 分散 t である互いに独立なウィーナー過程であり，B_{ij} と B_{ji} は

$$B_{ij}(t)+B_{ji}(t)=0 \tag{2.8}$$

により関係づけられている．また，$c=\sqrt{\lambda/2N}$ である．方程式 (2.7) によって表される確率過程は共分散行列として $c^2\{x_i(t)(\delta_{ij}-x_j(t))\}$ をもつ．

この表現形式を用いると数値的なコレスキー分解を行わずにシミュレーションを行うことができる．コレスキー法を用いない分解方法としては他に Aki (1984), Shiga (1987) の方法がある．また，厳密なコレスキー分解は Tanabe and Sagae (1991) によって与えられている．

3. ライト・フィッシャーモデルと球面上のブラウン運動

(2.7)式は伊藤型の確率微分方程式によって表されていたが，確率積分には，伊藤型とストラトノヴィッチ型がある（Stratonovich (1966)）．

伊藤型：

$$\int_b^a \Phi(x(t),t)dx(t)=\underset{\Delta\to 0}{\mathrm{l.i.m.}}\sum_{j=1}^{N-1}\Phi(x(t_j),t_j)[x(t_{j+1})-x(t_j)] \tag{3.1}$$

ストラトノヴィッチ型：

$$\int_b^a \Phi(x(t),t)\circ dx(t)=\underset{\Delta\to 0}{\mathrm{l.i.m.}}\sum_{j=1}^{N-1}\Phi\left(\frac{x(t_j)+x(t_{j+1})}{2},t_j\right)[x(t_{j+1})-x(t_j)] \tag{3.2}$$

ここで，$\circ$ はストラトノヴィッチ型の確率積分を表し，$\Delta=\mathrm{Max}(t_{j+1}-t_j)$ であり，l.i.m. は limit in the mean（平均収束）を表す．両者は互いに関係づけられており，伊藤型からストラトノヴィッチ型あるいはその逆の変換が可能である．

ドリフトおよび拡散が $\{a_i(x,t)\}$ および $\{b_{ij}(x,t)\}$ によって表される多次元拡散過程 $\{x_i(t)\}$ を伊藤型で表すと，

$$dx_i(t)=a_i(x,t)dt+\sum_j\sigma_{ij}(x,t)dB_j(t) \tag{3.3}$$

$$b_{ij}(t)=\sum_k\sigma_{ik}(x,t)\sigma_{jk}(x,t) \tag{3.4}$$

である．一方，ストラトノヴィッチ型で表すと，同じ過程が次のように表される．

$$dx_i(t)=m_i(x,t)dt+\sum_j\sigma_{ij}(x,t)\circ dB_j(t) \tag{3.5}$$

ここで，両者の係数の関係は，

$$a_i(x,t)=m_i(x,t)+\sum_{jk}\frac{1}{2}\frac{\partial\sigma_{ik}(x,t)}{\partial x_j}\sigma_{jk}(x,t) \tag{3.6}$$

によって与えられる．

(2.7)式は伊藤型の微分を表していたが，ストラトノヴィッチ型であると解釈した場合を考えよう．つまり，次の式を考える．

$$dx_i(t)=c\sum_{j=1}^{m}\sqrt{x_i(t)x_j(t)}\circ dB_{ij}(t) \tag{3.7}$$

ここで，(2.8) 式の関係は成り立っているとする．

ここで，次のような対応を考える．

$$x_i=y_i^2 \tag{3.8}$$

球面上のブラウン運動は (2.7) 式におけるウィーナー過程を用いてストラトノヴィッチ型の方程式により次のように表される．

$$dy_i(t)=\frac{c}{2}\sum_j y_j(t)\circ dB_{ij}(t) \tag{3.9}$$

これより上記 (3.8) 式を用い (3.7) 式が得られる．

(3.3)-(3.6) 式の関係を用いて，(3.9) 式を伊藤型に変換しよう．(2.8) 式によりウィーナー過程は互いに独立ではないので，まず，(3.9) 式を次のように書き直す．

$$dy_i(t)=\frac{c}{2}\sum_{kl}\sigma_{i,kl}(t)\circ dB_{kl}(t) \tag{3.10}$$

$$\sigma_{i,kl}(t)=\delta_{ik}y_l \tag{3.11}$$

(2.8) 式を考慮に入れると，(3.10) 式は

$$dy_i(t)=\frac{c}{2}\sum_{k>l}\rho_{i,kl}(t)\circ dB_{kl}(t) \tag{3.12}$$

$$\rho_{i,kl}(t)=\sigma_{i,kl}(t)-\sigma_{i,lk}(t) \tag{3.13}$$

となる．したがって，(3.3)-(3.6) 式より (3.12) 式は

$$dy_i(t)=\frac{c}{2}\sum_{j=1}^{m}y_j(t)dB_{ij}(t)-c^2(m-1)y_i dt/8 \tag{3.14}$$

のように変換される．

頻度 x_i の和は 1 であるから，$\sum_i y_i^2=1$ である．y_i によって表される点は半径 1 の球面に拘束されていることになる．(3.14) 式において，第一項は球の接平面上でのブラウン運動を表し，第二項はそれを球面に引き戻す作用を表している．したがって，(3.14) 式は球面上のブラウン運動を表す．(3.8) 式および (3.14) 式より次の伊藤型方程式が得られる．これは突然変異を考えに入れたライト・フィッシャーモデルの特別な場合を表す．

$$dx_i(t)=\frac{c^2}{4}(1-mx_i(t))dt+\sum_{j=1}^{m}c\sqrt{x_i(t)x_j(t)}\,dB_{ij}(t) \tag{3.15}$$

球面上の等方的な拡散について，確率密度の時間的な振舞いは分かっている．これを用いると，(3.15) 式で表されるライト・フィッシャーモデルについて確率密度を求めることができる (Maruyama and Itoh (1991))．

ここでの話は，$B_{ij}(t)$ がウィーナー過程の場合に限られていた．(3.9) 式を通常の微分で書くと

$$\frac{dy_i(t)}{dt}=\frac{c}{2}\sum_{j=1}^{m}y_j(t)n_{ij}(t) \tag{3.16}$$
$$dB_{ij}(t)/dt=n_{ij}(t)$$

のように書ける．$B_{ij}(t)$ がウィーナー過程であるというのは，$n_{ij}(t)$ がガウス白色ノイズである場合に対応している．$m=2$ の場合ではあるが，ガウス白色ノイズに限らずより一般的な確率過程について，(4.1) 式の確率過程の性質は調べられている (Maruyama and Shibata (1988))．

参 考 文 献

Aki, S. (1984). On a decomposition of the covariance matrix of the multinomial distribution, Research Memo., No. 274, The Institute of Statistical Mathematics, Tokyo.

Itoh, Y. (1979). Random collision process on oriented graph, Research Memo., No. 154, The Institute of Statistical Mathematics, Tokyo.

Itoh, Y. (1984). Random collision model for random genetic drift and stochastic differential equation, *Ann. Inst. Statist. Math.*, **36**, 353-362.

Maruyama, K. and Itoh, Y. (1991). An application of isotropic diffusion on a sphere to Fisher-Wright model, Research Memo., No. 404, The Institute of Statistical Mathematics, Tokyo.

Maruyama, K. and Shibata, F. (1988). From two-state jump to Gaussian stochastic processes, *Physica A*, **149**, 447-471.

Shiga, T. (1987). A certain class of infinite dimensional diffusion processes arising in population genetics, *J. Math. Soc. Japan*, **39**, 17-25.

Stratonovich, R.L. (1966). A new representation for stochastic integrals and equations, *J. SIAM Control*, **4**, 362-371.

Tanabe, K. and Sagae, M. (1991). An exact Cholesky decomposition and the generalized inverse of the variance covariance matrix of the multinomial distribution with applications, *J. Roy. Statist. Soc. Ser. B* (to appear).

Stochastic Differential Equations for the Wright-Fisher Model

Kishiko Maruyama

(Department of Statistical Science, The Graduate University for Advanced Studies)

Yoshiaki Itoh

(The Institute of Statistical Mathematics and The Graduate University for Advanced Studies)

Consider a population of N particles each of which is one of m types, $A_1, A_2, \ldots, A_m$. The types may represent species, alleles, genotypes or other classification. We then consider random collisions between particles, which are assumed to occur at the rate λdt per time interval $(t, t+dt)$ for each particle. If a pair of particles of different types i and j collide, then after the collision the both particles are the type i with probability 1/2 and the type j with probability 1/2. If the type of the colliding particles are the same, no change occurs.

We can approximate our random collision model by the following stochastic differential equation, in Ito's sense. In it, the relative abundance of type i increases by $c\sqrt{x_i(t)x_j(t)}\,dB_{ij}(t)$ and the relative abundance of type j decreases by $c\sqrt{x_i(t)x_j(t)}\,dB_{ij}(t)$ by the interaction of the particles of type i and j, where $c=\sqrt{\lambda/2N}$. Hence our random collision model automatically makes the following equation (1), which has the genetic drift matrix as covariances, for $i, j=1, 2, \ldots, m$,

$$dx_i(t)=\sum_{j=1}^{m} c\sqrt{x_i(t)x_j(t)}\,dB_{ij}(t) \tag{1}$$

with $B_{ij}(t)+B_{ji}(t)=0$, where $B_{ij}(t)$ $(i>j)$ are mutually independent one-dimensional Brownian motion with mean 0 and variance t.

It is pointed out that the stochastic differential equation (1) in Stratonovich's sense represents a Brownian motion on a sphere by a correspondence $y_i^2=x_i$, and that the transition probability density for the isotropic diffusion on a sphere gives the density for the Wright-Fisher model of a particular mutation rate.

Key words: Ito integral, Stratonovich integral, Wright-Fisher model, Brownian motion on a sphere.