Matemática II - Biología

Facultad de Ciencias Exactas y Naturales - Universidad de Buenos Aires

Segundo Cuatrimestre 2020

Cadenas de Markov

Recordamos que ...

Definición: *Matriz de transición o matriz de Markov*

Una matriz $P \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $n =$ cantidad de estados, es una matriz de Markov si cumple

- $p_{ij} \geq 0$, $i, j = 1, \cdots, n$
- $\sum_{i=1}^{n} p_{ij} = 1$, $1 \leq j \leq n$. *O sea, la suma de los elementos de cada columna debe dar* 1.
- p_{ij} *representa la probabilidad de pasar del estado j al estado i.*

La matriz asociada al problema de las flores de la clase pasada era

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0{,}5 & 0 \\ 0 & 0{,}5 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Dado un vector de estados inicial $\mathbf{v}(0)$ la cadena de Markov se obtiene haciendo

$$\mathbf{v}(1) = P\mathbf{v}(0) \quad \mathbf{v}(2) = P\mathbf{v}(1) \qquad \mathbf{v}(n) = P\mathbf{v}(n-1) = P^n v(0)$$

Para unificar conceptos **vamos a trabajar con estados que sean vectores de probabilidad,** o sea vectores cuyas componentes son todas mayores e iguales que cero y suman 1.

Definimos el espacio de estados como:

$$\mathcal{V} = \{\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n : 0 \leq v_j \leq 1, 1 \leq j \leq n, \text{ y además} \sum_{j=1}^{n} v_j = 1\}$$

Llamamos $\|\mathbf{v}\|_1 = \sum_{j=1}^{n} |v_j|$

Notemos que: Si el dato inicial **w** viene dado por ejemplo por cantidad de individuos, como $w_i \geq 0$, los podemos llevar a un vector de probabilidad simplemente haciendo

$$\mathbf{v} = \frac{\mathbf{w}}{\|\mathbf{w}\|_1} = \left(\frac{w_1}{w_1 + w_2 + \cdots + w_n}, \frac{w_2}{w_1 + w_2 + \cdots + w_n}, \cdots, \frac{w_n}{w_1 + w_2 + \cdots + w_n}\right)$$

y tendremos así que $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$.

Por ejemplo si miramos un cultivo de 30 flores y tenemos 10 rosas y 20 blancas, o sea un vector inicial $\mathbf{w}(0) = (0, 10, 20)$ para que sea de probabilidad hacemos

$$\mathbf{v}(0) = (\frac{0}{30}, \frac{10}{30}, \frac{20}{30}) = (0, \frac{1}{3}, \frac{2}{3})$$

El estado después de 2 generaciones sería:

$$\mathbf{v}(1) = P\mathbf{v}(0) = \begin{pmatrix} 1 & 0{,}5 & 0 \\ 0 & 0{,}5 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1/3 \\ 2/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/6 \\ 5/6 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{v}(2) = P\mathbf{v}(1) = \begin{pmatrix} 1 & 0{,}5 & 0 \\ 0 & 0{,}5 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/6 \\ 5/6 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7/12 \\ 5/12 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Diriamos que después de dos generaciones tenemos $30.\frac{7}{12} = 17,5$ rojas y $30.\frac{5}{12} = 12,5$ rosas (redondeando podrias decir 18 rojas y 12 rosas, la suma debe dar 30).

Preguntas que surgen naturalmente....

¿Habrá algún **estado de equilibrio?**

Definición: Estado de equilibrio

Decimos que $\mathbf{v}^* \in \mathcal{V}$ *es un estado de equilibrio si*

$$P\mathbf{v}^* = \mathbf{v}^*$$

¿Dado un estado inicial, habrá algún **estado límite**?

Definición: Estado límite para el estado inicial $\mathbf{v}(0)$.

Si para $\mathbf{v}(0)$ *tenemos que:*

$$\lim_{k \to +\infty} \mathbf{v}(k) = \lim_{k \to +\infty} P^k \mathbf{v}(0) = \mathbf{v}^\infty$$

decimos que $\mathbf{v}^\infty \in \mathcal{V}$ *es un estado límite de* $\mathbf{v}(0)$

Nota: *: Si* $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$ *es un estado límite entonces debe ser un estado de equilibrio*

Pues como

$$\mathbf{v}(k+1) = P\mathbf{v}(k)$$

si existe el estado límite $\mathbf{v}^\infty$ para $\mathbf{v}(0)$, entonces tomando linite resulta que debe cumplir

$$\mathbf{v}^\infty = P\mathbf{v}^\infty$$

y por ende $\mathbf{v}^\infty$ es un estado de equilibrio.

Nota: Vamos a ver que siempre hay al menos un estado de equilibrio pero No siempre dado un estado inicial hay estado límite.

Para poder contestar sobre estados de equilibrio y estados limite hay que analizar el espectro de P, o sea analizar sus autovalores.

Proposición

Para cualquier matriz de Markov P se tiene que

1. $\lambda = 1$ *es autovalor de* P *y existe un autovector asociado a* $\lambda = 1$ *que es un estado de equilibrio.*
2. $|\lambda| \leq 1$ *para todo* λ *autovalor de* P*.*
3. *si* $\lambda \neq 1$ *es autovalor entonces su autovector asociado* $\mathbf{w}$ *cumple que* $\sum_{j=1}^{n} w_j = 0$

Nota: : A partir del resultado del item 3) podemos afirmar que no hay autovectores asociados a autovalores $\lambda \neq 1$ que esten en $\mathcal{V}$.

Dem: Lo probamos en matrices de 2×2.
En la demostración a veces conviene trabajar con P^T, la traspuesta de P, que tiene los mismos autovalores que P.

1)

$$P = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} \\ p_{21} & p_{22} \end{pmatrix} \qquad P^T = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{21} \\ p_{12} & p_{22} \end{pmatrix}$$

Tomamos el vector $\mathbf{1} = (1,1)$ y calculamos $P^T \mathbf{1}$:

$$P^T \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{11} + p_{21} \\ p_{12} + p_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Esto nos dice que $\lambda = 1$ es autovalor de P^T (con autovector $(1,1)$) y por ende $\lambda = 1$ es autovalor de P.

Va a existir entonces un vector $\mathbf{v} \neq 0$ tal que $P\mathbf{v} = \mathbf{v}$. El asunto es ver que ese vector se puede elegir de probabilidad.
Nota: P y P^T No tienen porque tener los mismos autovectores

Queremos probar que podemos elegir un autovector asociado a $\lambda = 1$ que este en $\mathcal{V}$. Sabemos que hay un vector $\mathbf{v} \neq 0$ tal que

$$P \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{11}v_1 + p_{12}v_2 \\ p_{21}v_1 + p_{22}v_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$$

Tomando módulo y usando la desigualdad triangular queda

$$\begin{aligned} |v_1| &= |p_{11}v_1 + p_{12}v_2| \leq p_{11}|v_1| + p_{12}|v_2| \\ |v_2| &= |p_{21}v_1 + p_{22}v_2| \leq p_{21}|v_1| + p_{22}|v_2| \end{aligned}$$

Sumando las ecuaciones resulta

$$|v_1|+|v_2| \leq p_{11}|v_1|+p_{12}|v_2|+p_{21}|v_1|+p_{22}|v_2| = (p_{11}+p_{21})|v_1|+(p_{12}+p_{22})|v_2| = |v_1|+|v$$

Entonces debe ser

$$\begin{aligned} |v_1| &= p_{11}|v_1| + p_{12}|v_2| \\ |v_2| &= p_{21}|v_1| + p_{22}|v_2| \end{aligned}$$

O sea que el vector

$$\begin{pmatrix} |v_1| \\ |v_2| \end{pmatrix}$$

es un autovector de P asociado al autovalor $\lambda = 1$.
Luego tomando $\frac{|\mathbf{v}|}{\|\mathbf{v}\|_1}$ tenemos un autovector de $\lambda = 1$ que esta en $\mathcal{V}$.

$$\begin{pmatrix} \frac{|v_1|}{|v_1|+|v_2|} \\ \\ \frac{|v_2|}{|v_1|+|v_2|} \end{pmatrix} \quad \text{es autovector asociado a } \lambda = 1 \text{ y está en } \mathcal{V}$$

Nota: esta demostración me dice en particular como encontrar estados de equilibrio.

2) Sea $\mathbf{w}$ un autovector de P^T asociado a λ, o sea $P^T\mathbf{w} = \lambda\mathbf{w}$, entonces

$$p_{11}w_1 + p_{21}w_2 = \lambda w_1$$
$$p_{12}w_1 + p_{22}w_2 = \lambda w_2$$

Supongamos que $|w_1| \geq |w_2|$ de lo anterior se tiene

$$|\lambda||w_1| = |p_{11}w_1 + p_{21}w_2| \leq p_{11}|w_1| + p_{21}|w_2| \leq (p_{11} + p_{21})|w_1| = |w_1|$$

De aqui $(|\lambda| - 1)|w_1| \leq 0$ lo que implica que

$$|\lambda| \leq 1.$$

Analogamente se demuestra el caso $|w_1| \leq |w_2|$ ya que

$$|\lambda||w_2| = |p_{12}w_1 + p_{22}w_2| \leq p_{12}|w_1| + p_{22}|w_2| \leq (p_{12} + p_{22})|w_2| = |w_2|$$

y por ende $(|\lambda| - 1)|w_2| \leq 0 \Rightarrow |\lambda| \leq 1$

3) Sea $\lambda \neq 1$ autovalor de P de autovector $\mathbf{z}$. Entonces de $P\mathbf{z} = \lambda \mathbf{z}$ resulta

$$p_{11}z_1 + p_{12}z_2 = \lambda z_1$$
$$p_{21}z_1 + p_{22}z_2 = \lambda z_2$$

Sumando y agrupando nos queda

$$\lambda z_1 + \lambda z_2 = (p_{11} + p_{21})z_1 + (p_{12} + p_{22})z_2 = z_1 + z_2$$

o sea que $\lambda(z_1 + z_2) = z_1 + z_2$ y entonces

$$(\lambda - 1)(z_1 + z_2) = 0$$

y como $\lambda \neq 1$ debe ser $z_1 = -z_2$

$\square$

Para la matriz del **ejemplo de las flores** $P = \begin{pmatrix} 1 & 0{,}5 & 0 \\ 0 & 0{,}5 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ sus autovalores son $\lambda = 1, \lambda = \frac{1}{2}$ y $\lambda = 0$ (en una matriz triangular sus autovalores son los elementos de la diagonal)
Si buscamos los autovectores asociados a $\lambda = 1$ vemos que son los vectores de la forma

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \alpha \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{con } \alpha \neq 0$$

y para que sea un vector de probabilidad debe ser $\alpha = 1$, o sea $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

El estado de equilibrio es que todas las flores sean rojas.

Nota: Autovectores para $\lambda = \frac{1}{2}$ y $\lambda = 0$ son respectivamente $(1, -1, 0)$ y $(-\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2})$, cuyas componente suman cero.

Para la matriz de la clase pasada del **ejemplo de niveles económicos**

$$P = \begin{pmatrix} 0{,}7 & 0{,}2 & 0{,}1 & 0 \\ 0{,}2 & 0{,}4 & 0{,}1 & 0{,}3 \\ 0{,}1 & 0{,}3 & 0{,}4 & 0{,}2 \\ 0 & 0{,}1 & 0{,}4 & 0{,}5 \end{pmatrix}$$

podemos buscar (con python) sus autovalores y ver que son $\lambda = 1$ y los demás tienen módulo menor a 1 (hay dos autovalores complejos).

$$\lambda_1 = 1, \quad |\lambda_1| = 1$$

$$\lambda_2 = 0{,}65736589, \quad |\lambda_2| = 0{,}65736589$$

$$\lambda_3 = 0{,}17131706 + 0{,}15941922i, \quad \lambda_4 = \overline{\lambda_3} = 0{,}17131706 - 0{,}15941922i$$

$$|\lambda_3| = |\lambda_4| = 0{,}23401714$$

Recordamos que si $z = a + i\, b$ entonces $|z| = \sqrt{a^2 + b^2}$

Si buscamos autovector asociado a $\lambda = 1$ vemos que son los vectores de la forma $\mathbf{w} = \begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha \\ \alpha \\ \alpha \end{pmatrix}$ $\alpha \neq 0$ y para que sea un vector de probabilidad debe ser $4\alpha = 1$, o sea $\alpha = \frac{1}{4}$ resultando

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{pmatrix}$$

Si lo hacemos con Python, para obtener un vector de estados a partir de un autovector **w** simplemente calculamos

$$\mathbf{v} = (\frac{|w_1|}{\|\mathbf{w}\|_1}, \frac{|w_2|}{\|\mathbf{w}\|_1}, \cdots, \frac{|w_n|}{\|\mathbf{w}\|_1})$$

La conclusión es que **el estado de equilibrio es que todas las clases sociales tengan el mismo número de individuos.**

Ejercicio:

Sea

$$M = \begin{pmatrix} a & b & 0 \\ c & b & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

- Sabiendo que $\det M = \frac{1}{4}$, determinar todos los valores de a, b y c para los cuales M es de Markov.
- Hacer el diagrama de estados para la matriz de Markov M.
- ¿Es posible hallar dos estados de equilibrio linealmente independientes para una cadena de Markov con matriz de transición M?.

Recordemos que al estudiar autovalores y autovectores se define la dimensión algebraica y la dimensión geométrica.

$m_\lambda =$ dimensión algebraica $=$ multiplicidad del autovalor como raíz del polinomio característico.

$\dim \varepsilon_\lambda =$ dimensión geométrica $=$ dimensión del autoespacio asociado al autovalor (o sea la cantidad de autovectores linealmente independientes asociados al autovalor)

Una matriz es diagonalizable cuando $\dim \varepsilon_\lambda = m_\lambda, \; \forall \lambda.$

Nota: : en particular, si todos sus autovalores son distintos entonces es diagonalizable (en principio en $\mathbb{C}$ y si son todos reales en $\mathbb{R}$)

Proposición

En toda matriz de Markov se tiene que si λ es tal que $|\lambda| = 1$ entonces $\dim \varepsilon_\lambda = m_\lambda$

Nota: para los λ con $|\lambda| < 1$ podríamos tener $\dim \varepsilon_\lambda \neq m_\lambda$. Así que una matriz de Markov no es necesariamente diagonalizable.

Nota: Esto que vale en Markov para los autovalores de modulo 1 no vale en general.
Por ejemplo la matriz

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

tiene autovalores $\lambda = 1$ doble y $\lambda = 2$ simple. Aqui $m_{\lambda=1} = 2$ pero $\dim \varepsilon_{\lambda=1} = 1$.

Aún seguimos con el interrogante de como podriamos saber, estudiando el espectro de la matriz, si hay o no estado límite.

Sobre la existencia de estado límite

- *Si el único autovalor de P de módulo 1 es $\lambda = 1$ entonces hay estado límite para cualquier dato inicial $\mathbf{v}(0)$. O sea que todos los $\mathbf{v}(0) \in \mathcal{V}$ tienen estado límite.*
  Dicho estado límite varía según el dato inicial $\mathbf{v}(0)$ pero está en el $\varepsilon_{\lambda=1}$, o sea que es una combinación lineal de autovectores asociados a $\lambda = 1$.
- *Si además $\lambda = 1$ es un autovalor simple, i.e., $m_\lambda = 1$ entonces el estado límite $\mathbf{v}^\infty$ es único. O sea que tendremos un solo estado limite independientemente de cual sea el vector inicial.*