Modelos Matemáticos I

Tema 4: Matrices estocásticas. Aplicaciones en genética

Teresa E. Pérez y Miguel Piñar

Departamento de Matemática Aplicada
Facultad de Ciencias
Universidad de Granada

2 de junio de 2016

Contenidos

Contenidos

Matrices positivas y estrictamente positivas

Sea $A = (a_{ij}) \in \mathcal{M}_{d\times d}(\mathbb{R})$ una matriz. Se dice que es

(i) Débilmente positiva o no negativa: $A \geq 0$ si $a_{ij} \geq 0, \forall i, j$

(ii) Positiva: $A > 0$ si $a_{ij} \geq 0, \forall i, j$ y al menos un $a_{ij} > 0$

(iii) Estrictamente positiva: $A >> 0$ si $a_{ij} > 0, \forall i, j$

Si X, Y son dos vectores columna de dimensión d, definimos

$$
\begin{aligned}
X \geq Y &\iff X - Y \geq 0 \\
X > Y &\iff X - Y > 0 \\
X >> Y &\iff X - Y >> 0
\end{aligned}
$$

Propiedades básicas

(i) Si $A >> 0$, $X > 0$, entonces $A\,X >> 0$.

(ii) Si $A > 0$, $X > Y > 0$, entonces $A\,X > A\,Y$.

(iii) Si $A > 0$, $X >> 0$, $A\,X = 0$, entonces $A = 0$.

(iv) Si $A > 0$, $X >> Y >> 0$, entonces $A\,X >> A\,Y$.

Sistemas de ecuaciones lineales en diferencias

Consideraremos sistemas de ecuaciones lineales en diferencias en la forma

$$X_{n+1} = A\,X_n, \quad n \geq 0,$$

donde A es una matriz positiva o estrictamente positiva.

La solución es: $$X_n = A^n\,X_0, \quad n \geq 0.$$

Ejemplos:

- La matriz del modelo de Leslie es positiva no estricta.
- La matriz del ejemplo en genética del Tema 3 también es positiva no estricta.

Teorema de Perron–Frobenius[1]

Definición

Una matriz positiva $A = (a_{ij}) \in \mathcal{M}_{d\times d}(\mathbb{R})$ se dice primitiva o ergódica si existe $m \in \mathbb{N}$ tal que $A^m >> 0$.

Teorema de Perron–Frobenius

Si A es una matrix primitiva, entonces

(i) A tiene un valor propio λ_1 real, estrictamente positivo y dominante, esto es,

$$|\lambda_i| < \lambda_1, \qquad \forall \lambda_i \in \sigma(A) \setminus \{\lambda_1\},$$

y $\rho(A) = \lambda_1$.

(ii) Se puede tomar un vector propio v_1 asociado al valor propio λ_1 con todas las componentes positivas, i. e., $v_1 >> 0$.

[1] El teorema de Perron–Frobenius es la base del Algoritmo Page Rank de Google

Demostración del Teorema de Perron–Frobenius

Lema 1

Sea A una matriz estrictamente positiva. Entonces

(i) $\rho(A)$ es un valor propio de A.

(ii) Existe v vector propio asociado a $\lambda_1 = \rho(A)$ con $v >> 0$.

(iii) Si λ es un valor propio tal que $|\lambda| = \rho(A)$, entonces $\lambda = \rho(A)$.

(iv) La multiplicidad algebraica y geométrica de $\rho(A)$ coinciden.

(v) La multiplicidad algebraica de $\rho(A)$ es 1.

(vi) No existen vectores propios positivos asociados a valores propios distintos de $\rho(A)$.

Lema 2

Si λ es valor propio de A y v es un vector propio asociado a λ, entonces $\mu = \lambda^m$ es valor propio de A^m y v es vector propio asociado a μ.

Consecuencias del Teorema de Perron–Frobenius

Sea X_0 el vector inicial de $X_{n+1} = A\,X_n, n \geq 0$.

Corolario 1

Si A es una matrix primitiva, λ_1 es su valor propio real, estrictamente positivo y dominante, y $v_1 >> 0$ vector propio asociado a λ_1.
Entonces existe $\alpha \in \mathbb{R}$ tal que

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{\lambda_1^n} A^n\, X_0 = \alpha\, v_1 .$$

Corolario 2

En las condiciones anteriores, si $X_0 > 0$, entonces

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{\|X_n\|_1} X_n = \frac{1}{\|v_1\|_1} v_1 .$$

Matrices positivas

¿Qué ocurre si A es positiva pero no primitiva?

Proposición

Sea $A \geq 0$, entonces

(i) Existe un valor propio $\lambda_M \geq 0$ que verifica $|\mu| \leq \lambda_M$ para todo valor propio μ. Esto es, $\rho(A)$ es valor propio de A. Lo llamaremos el *mayor valor propio*.

(ii) Existe $v > 0$ vector propio asociado a λ_M.

Ejemplos:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, C = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, D = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, E = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Cotas para el mayor valor propio

Proposición

Sea $A \geq 0$ y $\rho(A) = \lambda_M \geq 0$ su mayor valor propio. Sean

$$C_j = \sum_{i=1}^{d} a_{ij}, \qquad R_i = \sum_{j=1}^{d} a_{ij},$$

las sumas de los elementos de la j–ésima columna y de la i–ésima fila, respectivamente, de A. Entonces

$$\min_{1\leq j\leq d} C_j \leq \lambda_M \leq \max_{1\leq j\leq d} C_j \qquad \min_{1\leq i\leq d} R_i \leq \lambda_M \leq \max_{1\leq i\leq d} R_i$$

Ejemplo: determinar cotas para el mayor valor propio de

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 2 & 2 \\ 4 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Matrices reducibles. Grafo de una matriz

Definición 1

Una matriz real A se dice reducible si existe una matriz de permutación P tal que

$$P^t\,A\,P = \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ B & A_2 \end{pmatrix}$$

donde A_1 y A_2 son matrices cuadradas.
Si A no es reducible, se dice que es irreducible.

Equivalentemente, A se dice reducible si existe una matriz de permutación Q tal que

$$Q^t\,A\,Q = \begin{pmatrix} \hat{A}_1 & \hat{B} \\ 0 & \hat{A}_2 \end{pmatrix}$$

donde $\hat{A}_1$ y $\hat{A}_2$ son matrices cuadradas.

Grafo de una matriz

Definición 2

Dada una matriz cuadrada real A, se llama grafo de A (graf(A)) a la gráfica dirigida sobre d nodos $\{N_1, N_2, \ldots, N_d\}$ tal que si $a_{ij} > 0$ entonces existe una flecha desde N_j hacia N_i.

Definición 3

Se dice que graf(A) está fuertemente conectado si para toda pareja de nodos N_j, N_i existe un camino que los conecta, es decir, se puede ir del nodo N_j al N_i tras m pasos en el grado de A.

Ejemplo: Determinar el grafo de la matriz

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

Grafo de una matriz

Proposición

Sea $A \geq 0$ de orden $d \times d$. Son equivalentes:

(i) A es irreducible.

(ii) graf(A) está fuertemente conectado.

Grafos e irreducibilidad

Teorema

Sea $A \geq 0$ de orden $d \times d$ e irreducible. Entonces:

(i) $\lambda_1 = \rho(A)$ es valor propio positivo y simple.

(ii) Existe un único vector propio u_1 asociado a $\lambda_1 = \rho(A)$ verificando $u_1 >> 0$ y $\|u_1\|_1 = 1$, llamado *vector de Perron*.

(iii) Si existe $j \in \{1, 2, \dots d\}$ tal que $a_{jj} > 0$, entonces $\lambda_1 = \rho(A)$ es dominante.

(iv) Todos los valores propios de módulo igual a $\rho(A)$ son simples.

Comportamiento asintótico de las soluciones

Sea $X_{n+1} = A\,X_n, \quad n \geq 0,$ sistema lineal de ecuaciones en diferencias. La solución es: $X_n = A^n\,X_0, \quad n \geq 0.$

Si la matriz A es positiva e irreducible:

- $\lambda_1 = \rho(A)$ es dominante, entonces
  - (i) $\lim_{n\to\infty} X_n = 0$ si y sólo si $\rho(A) < 1$.
  - (ii) Si $\rho(A) = 1$ y $X_0 >> 0$, entonces $\lim_{n\to\infty} X_n = X >> 0$, que es vector propio asociado al valor propio $\lambda_1 = 1$.
- $\lambda_1 = \rho(A)$ no es dominante, entonces habrá valores propios simples de igual módulo
  - (i) $\rho(A) > 1$: las soluciones oscilan creciendo en radio
  - (ii) $\rho(A) < 1$: las soluciones oscilan decreciendo hacia cero
  - (iii) $\rho(A) = 1$: las soluciones se mantendrán en la circunferencia unidad y podrían ser eventualmente periódicas.

Contenidos

Matrices estocásticas

Definición

Sea $A = (a_{ij})$ una matriz cuadrada de orden d positiva. Se dice que A es estocástica o de probabilidad o de Markov (por columnas) si

$$\sum_{i=1}^{d} a_{ij} = 1, \qquad j = 1, 2, \ldots, d.$$

Propiedad básica

Si A es una matriz estocástica, entonces

(i) $\rho(A) = 1$, y además $\lambda_1 = 1$ es valor propio de A

(ii) Admite un vector propio v_1 asociado a $\lambda_1 = 1$ con $v_1 > 0$

Cadenas de Markov

Definición

Una cadena de Markov es una sucesión de vectores positivos $\{P_0, P_1, \ldots, P_n, \ldots\}$ solución de un sistema de ecuaciones en diferencias

$$P_{n+1} = M\,P_n, \qquad n \geq 0,$$

donde P_0 cumple $\|P_0\|_1 = 1$, y se le llama *distribución inicial de probabilidad*, y la matriz de transición M es estocástica.

Las cadenas de Markov surgen en el estudio de repeticiones de experimentos con d resultados posibles que corresponden a los estados $S_1, S_2, \ldots, S_d$, con ciertas hipótesis:

Cadenas de Markov

- La probabilidad de que resulte un estado S_i sólo depende del resultado en la repetición anterior del experimento, y no de los anteriores.
- m_{ij}, $j = 1, 2, \ldots, d$, representa la probabilidad de que se dé el estado S_i habiéndose dado el estado j en la etapa anterior.
- Sea $p_n(i)$ la probabilidad de que en la n–ésima repetición del experimento salga S_i. Entonces:

$$p_{n+1}(i) = m_{i1}\, p_n(1) + m_{i2}\, p_n(2) + \cdots + m_{id}\, p_n(d),$$

Así, si $P_n = (p_n(1), p_n(2), \ldots, p_n(d))^t$, entonces

$$P_{n+1} = M\, P_n, \qquad n \geq 0,$$

y se verifica

- La matriz de transición M es estocástica.
- Los vectores P_n cumplen $\|P_n\|_1 = 1$.

Cadenas de Markov

Hay dos tipos especiales de cadenas de Markov:

1. Cadenas Regulares: Se dice que una cadena de Markov es regular si la matriz M es primitiva, es decir, $M^k >> 0$ para algún entero positivo k.
   En este caso, el valor propio λ_1 es dominante y por tanto la cadena que parte de un $P_0 >> 0$ tiende a una distribución estacionaria (vector propio asociado o vector de Perron) de probabilidad que nos indicaría las probabilidades (proporciones/ porcentajes) de cada uno de los estados del experimento a largo plazo.

2. Cadenas Absorbentes: Se dice que una cadena de Markov es absorbente si hay, al menos, un estado S_j absorbente (es decir, $m_{jj} = 1$) y desde cualquier otro estado podemos conectar a uno absorbente.

Contenidos

Un modelo para la herencia autosómica

- La genética es el área de estudio de la biología que busca comprender y explicar cómo se transmite la herencia biológica de generación en generación.
- El principal objeto de estudio de la genética son los genes, formados por segmentos de ADN y ARN. El ADN controla la estructura y el funcionamiento de cada célula, tiene la capacidad de crear copias exactas de sí mismo tras un proceso llamado replicación.
- El genoma es la totalidad de la información genética que puede poseer un organismo en particular.
- El genotipo se refiere a la información genética que posee un organismo en particular. El genotipo, junto con factores ambientales que actúan sobre el ADN, determina las características del organismo, es decir, su fenotipo.

- Los cromosomas son cada una de las estructuras de la celula altamente organizadas, formadas por ADN y proteinas, que contiene la mayor parte de la información genética de un individuo. Aparecen en pares conteniendo los miembros de cada par genes con idénticas funciones. Los pares se separan durante la división celular.
- Un autosoma o cromosoma somático es cualquier cromosoma que no sea sexual. En el ser humano, los cromosomas del par 1 al 22 son autosomas, y el par 23 corresponde a los cromosomas sexuales X e Y.
- En la reprodución sexual cada nuevo individuo recibe un juego de cromosomas proveniente de cada uno de sus progenitores.

Un modelo para la herencia autosómica

- Muchos rasgos de los individuos de una especie biológica están determinados por los genes heredados de sus padres.
- Supongamos que un gen en particular $\mathcal{G}$ tiene sólo dos formas llamadas alelos (alelo G y alelo g),
- Ya que cada individuo hereda un alelo de este gen de cada padre, puede tener en su herencia cromosómica cuatro tipos de pares de alelos del gen G : (G, G), (g, g), (G, g), (g, G).
- Los dos primeros tipos se denominan homocigóticos, y heterocigóticos los últimos. Consideremos, por simplicidad, el caso en el que el orden de los alelos no tiene ninguna influencia, es decir, consideramos indistinguibles (G, g) y (g, G).
- Así, tenemos tres tipos de individuos en relación con las características determinadas por el gen $\mathcal{G}$: dos homocigóticos (G, G), (g, g) y un heterocigótico (G, g).

Ejemplo

Si pretendemos modelar la evolución de los caracteres en sucesivas generaciones por herencia de los progenitores basta saber como son los emparejamientos.

Por ejemplo, supongamos que el emparejamiento en sucesivas generaciones es, siempre, con individuos de genotipo Gg. En esta situación se puede deducir el modelo siguiente:
Si

$$P_n = \begin{pmatrix} p_n(GG) \\ p_n(Gg) \\ p_n(gg) \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad P_{n+1} = M\, P_n,$$

donde

$$M = \begin{pmatrix} 0{,}5 & 0{,}25 & 0 \\ 0{,}5 & 0{,}5 & 0{,}5 \\ 0 & 0{,}25 & 0{,}5 \end{pmatrix}$$

Ejemplo

Mediante el grafo de la matriz, es fácil deducir que la cadena de Markov obtenida es regular y, por tanto, a largo plazo dicha cadena irá hacia el vector propio asociado al valor propio $\lambda_1 = 1$.

Dicho vector puede obtenerse mediante el cálculo de unos cuantos vectores P_n partiendo de cualquier vector inicial de probabilidad, poe ejemplo $P_0 >> 0$.

Como los otros valores propios son $\lambda_2 = 0{,}5$ y $\lambda_3 = 0$, este procedimiento daría una buena estimación con un número de iteraciones relativamente pequeño.

The drunk walker

E. Salinelli, F. Tomarelli, *Discrete Dynamical Models*, Springer International Publishing Switzerland, 2014.
(Página 244)

Page Rank de Google

http://www.ams.org/samplings/feature-column/fcarc-pagerank

Sergey Brin & Lawrence Page, autores de la patente

Contenidos

Referencias

D. Austin, How Google Finds Your Needle in the Web's Haystack,
http://www.ams.org/samplings/feature-column/fcarc-pagerank

C. Brezinski, M. Redivo–Zaglia, Méthodes numériques itératives, Ellipses, Paris, 2006.

K. Bryan, T. Leise, The $25,000,000,000 Eigenvector: The Linear Algebra behind Google, SIAM Review, Vol. 48, No. 3 (2006), 569-581.

S. Elaydi, *An Introduction to Difference Equations*, Springer–Verlag, New York, 2005.

A. N. Langville, C.D. Meyer, Google's PageRank and beyond: the science of search engine rankings, Princeton University Press, 2006.

L. Page, Google Page Rank (Patente, 1998)
http://www.google.com/patents/US6285999

E. Salinelli, F. Tomarelli, *Discrete Dynamical Models*, Springer International Publishing Switzerland, 2014.