

Matrices et dynamiques : chaînes de Markov

Cours 3 – Modèles en biologie

Christophe Ambroise
L3 GBI – Université d'Évry

Vecteurs et combinaisons linéaires

Vecteur de $\mathbb{R}^n$: liste ordonnée de n nombres réels.

$\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_n), \quad \mathbf{x} + \mathbf{y}, \quad \alpha \mathbf{x} : \text{coordonnée par coordonnée}$

Combinaison linéaire : $\alpha_1 \mathbf{v}_1 + \alpha_2 \mathbf{v}_2 + \dots + \alpha_p \mathbf{v}_p, \alpha_i \in \mathbb{R}.$

Trois lectures d'un vecteur : un profil, un état, une loi de probabilité.

Acquis des cours précédents

Systèmes linéaires et pivot de Gauss

Système $\iff$ matrice augmentée $[A \mid \mathbf{b}]$.

Opérations élémentaires sur les lignes, jusqu'à une forme échelonnée.

Pivot dans la dernière colonne	Variables libres	Solutions
oui	–	aucune
non	non	une seule
non	oui	une infinité

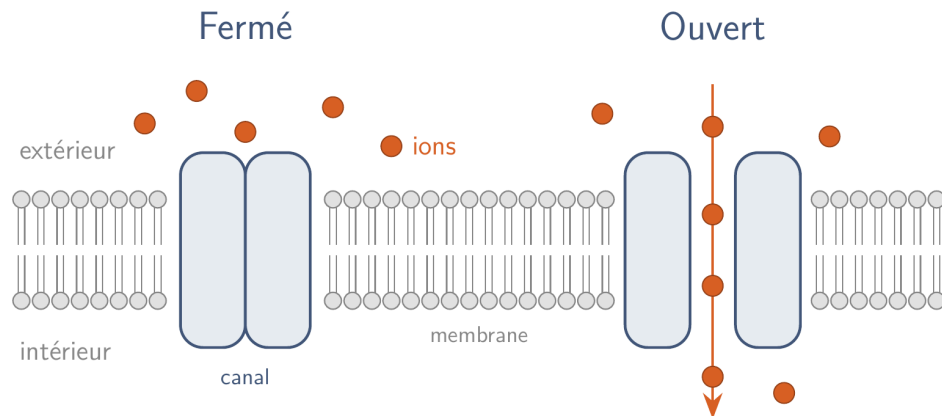
Variables libres et forme vectorielle

Variable libre : inconnue sans pivot, de valeur arbitraire.

$$\begin{cases} x_1 = 8 + 7t \\ x_2 = 4 + 4t \\ x_3 = t \end{cases} \iff \mathbf{x} = \begin{pmatrix} 8 \\ 4 \\ 0 \end{pmatrix} + t \begin{pmatrix} 7 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad t \in \mathbb{R}$$

Une infinité de solutions : un point de départ, une direction.

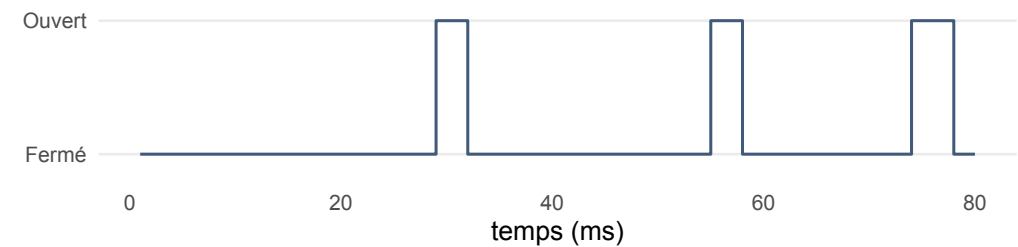
Canal ionique



Une protéine de membrane, deux états : fermé ou ouvert.

Un modèle à deux états

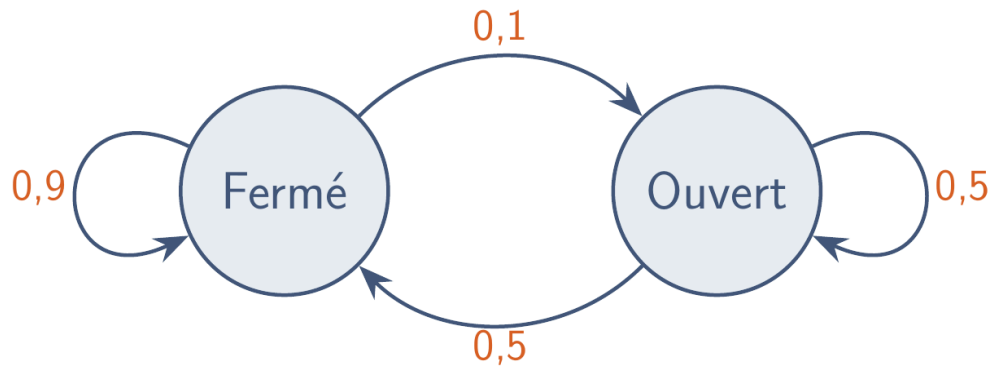
Enregistrement d'un canal unique



Ouvertures et fermetures au hasard, à l'échelle de la milliseconde.

Trajectoire simulée, du type de celles enregistrées en patch-clamp.

Diagramme des transitions



Chaque milliseconde : 1 chance sur 10 de s'ouvrir, 1 chance sur 2 de se refermer.

État d'un canal

Probabilités d'être fermé et d'être ouvert à l'instant t :

$$\mathbf{x}_t = \begin{pmatrix} f_t \\ o_t \end{pmatrix}, \quad f_t + o_t = 1$$

Un canal : une loi de probabilité. Un million de canaux : des proportions.

Propriété de Markov

L'état suivant ne dépend que de l'état présent, pas du chemin qui y a mené.

$$\Pr(X_{t+1} = i \mid X_t = j, X_{t-1}, \dots, X_0) = \Pr(X_{t+1} = i \mid X_t = j) = p_{ij}$$

p_{ij} : probabilité de passer de l'état j à l'état i , fixe dans le temps.

Évolution en deux équations

$$\begin{aligned} f_{t+1} &= 0,9 f_t + 0,5 o_t \\ o_{t+1} &= 0,1 f_t + 0,5 o_t \end{aligned}$$

Première ligne : loi des probabilités totales.

$$\begin{aligned} f_{t+1} &= \Pr(X_{t+1} = 0) = \Pr(X_{t+1} = 0, X_t = 0) + \Pr(X_{t+1} = 0, X_t = 1) \\ &= \Pr(X_t = 0) \Pr(X_{t+1} = 0 \mid X_t = 0) \\ &\quad + \Pr(X_t = 1) \Pr(X_{t+1} = 0 \mid X_t = 1) \\ &= 0,9 f_t + 0,5 o_t \end{aligned}$$

Fermé à $t + 1$: resté fermé, ou refermé.

Départ fermé, $\mathbf{x}_0 = (1; 0) : \mathbf{x}_1 = (0,9; 0,1)$.

Pas de temps et combinaison des colonnes

$$\mathbf{x}_{t+1} = f_t \begin{pmatrix} 0,9 \\ 0,1 \end{pmatrix} + o_t \begin{pmatrix} 0,5 \\ 0,5 \end{pmatrix}$$

Premier vecteur : devenir d'un canal fermé. Second : devenir d'un canal ouvert.

Un pas de temps

Une **combinaison linéaire**, pondérée par l'état présent.

Matrice $n \times p$

Un tableau de nombres à n lignes et p colonnes.

$$A = (a_{ij})_{\substack{1 \leq i \leq n, \\ 1 \leq j \leq p}}, \quad a_{ij} : \text{ligne } i, \text{ colonne } j$$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 1 & 3 & 4 \end{pmatrix} : 2 \times 3, \quad a_{23} = 4$$

Matrice **carrée** : $n = p$.

Matrices

13

Matrice de transition

Une matrice carrée à coefficients positifs, dont chaque colonne a pour somme 1.

$$p_{ij} \geq 0 \quad \text{et} \quad \sum_{i=1}^n p_{ij} = 1 \quad \text{pour tout } j$$

$$P = \begin{pmatrix} 0,9 & 0,5 \\ 0,1 & 0,5 \end{pmatrix}$$

Colonne 1 : depuis « fermé ». Colonne 2 : depuis « ouvert ».

15

16

Produit matrice par vecteur

La combinaison des colonnes de A , pondérées par les coordonnées de $\mathbf{x}$.

$$A\mathbf{x} = x_1 \mathbf{a}_1 + x_2 \mathbf{a}_2 + \cdots + x_p \mathbf{a}_p, \quad \mathbf{a}_j = \text{colonne } j \text{ de } A$$

$\mathbf{x}_{t+1} = f_t \mathbf{p}_1 + o_t \mathbf{p}_2$: exactement ce produit.

Compatibilité des dimensions

Nombre de colonnes de A = nombre de coordonnées de $\mathbf{x}$.

$$\underbrace{A}_{n \times p} \underbrace{\mathbf{x}}_{\in \mathbb{R}^p} \in \mathbb{R}^n$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 1 & 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} : \text{non défini.}$$

Calcul ligne par ligne

Coordonnée i de $A\mathbf{x}$: ligne i de A et $\mathbf{x}$, multipliées terme à terme, puis sommées.

$$(A\mathbf{x})_i = \sum_{j=1}^p a_{ij} x_j$$

$$\begin{pmatrix} 0,9 & 0,5 \\ 0,1 & 0,5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0,6 \\ 0,4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,9 \times 0,6 + 0,5 \times 0,4 \\ 0,1 \times 0,6 + 0,5 \times 0,4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,74 \\ 0,26 \end{pmatrix}$$

Évolution matricielle

Chaîne de Markov

Un pas de temps = une multiplication par la matrice de transition.

$$\mathbf{x}_{t+1} = P \mathbf{x}_t$$

Écriture matricielle d'un système

Le milieu de culture du C2 :

$$\begin{cases} 20x_1 + 10x_2 &= 30 \\ 5x_1 + 20x_2 &= 25 \\ x_1 + 2x_2 + 10x_3 &= 13 \end{cases} \iff \begin{pmatrix} 20 & 10 & 0 \\ 5 & 20 & 0 \\ 1 & 2 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 30 \\ 25 \\ 13 \end{pmatrix}$$

Un système linéaire

$A\mathbf{x} = \mathbf{b}$: quelle combinaison des colonnes de A donne $\mathbf{b}$?

Deux pas enchaînés

$$\mathbf{x}_{t+2} = P\mathbf{x}_{t+1} = P(P\mathbf{x}_t)$$

Une seule matrice pour deux pas : $P(P\mathbf{x}) = (PP)\mathbf{x}$.

Reste à définir le produit PP .

Plusieurs pas de temps

Produit de deux matrices

La matrice dont la colonne j est A multipliée par la colonne j de B .

$$AB = (A\mathbf{b}_1 \ A\mathbf{b}_2 \ \cdots \ A\mathbf{b}_q), \quad (AB)_{ij} = \sum_{k=1}^p a_{ik} b_{kj}$$

Dimensions : $(n \times p)(p \times q) = n \times q$.

Calcul de P^2

$$P^2 = \begin{pmatrix} 0,9 & 0,5 \\ 0,1 & 0,5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0,9 & 0,5 \\ 0,1 & 0,5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,86 & 0,70 \\ 0,14 & 0,30 \end{pmatrix}$$

$$(P^2)_{21} = 0,1 \times 0,9 + 0,5 \times 0,1 = 0,14$$

Fermé $\rightarrow$ fermé $\rightarrow$ ouvert, ou fermé $\rightarrow$ ouvert $\rightarrow$ ouvert.

$(P^2)_{ij}$: probabilité de passer de j à i **en deux pas**.

Non-commutativité

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

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

Ordre des facteurs

En général, $AB \neq BA$.

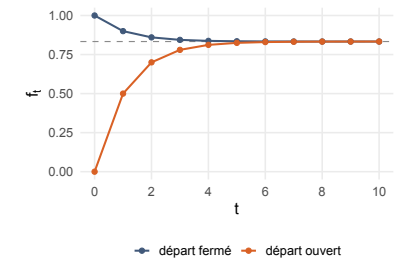
Puissances d'une matrice

$$P^t = \underbrace{P P \dots P}_{t \text{ facteurs}}, \quad \mathbf{x}_t = P^t \mathbf{x}_0$$

$(P^t)_{ij}$: probabilité de passer de j à i en t pas.

Convergence observée

t	f_t , départ fermé	f_t , départ ouvert
0	1	0
1	0,9	0,5
2	0,86	0,7
3	0,844	0,78
4	0,838	0,812
5	0,835	0,825



Oubli de l'état initial

Même limite

Départ fermé ou départ ouvert : $\mathbf{x}_t \rightarrow (5/6; 1/6)$.

Cette limite : comment la calculer ? Existe-t-elle pour toute chaîne ?

Distribution d'équilibre

Une loi de probabilité que la chaîne laisse inchangée.

$$P\pi = \pi, \quad \pi_i \geq 0, \quad \sum_i \pi_i = 1$$

Distribution d'équilibre

29

Matrice identité et système homogène

Matrice **identité** I : des 1 sur la diagonale, des 0 ailleurs. $I\mathbf{x} = \mathbf{x}$.

$$P\pi = \pi \iff P\pi - I\pi = \mathbf{0} \iff (P - I)\pi = \mathbf{0}$$

$P - I$: soustraction coefficient par coefficient.

Système **homogène** : second membre nul. Toujours la solution $\pi = \mathbf{0}$.

Rôle de la contrainte

$\sum_i \pi_i = 1$ écarte la solution nulle.

31

32

Équilibre du canal ionique

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

Deux lignes opposées : une seule équation, $-0,1 f + 0,5 o = 0$, soit $f = 5 o$.
Variable libre : o .

Avec $f + o = 1 : \pi = (5/6; 1/6)$.

Probabilité d'ouverture

Canal ouvert **un sixième** du temps.

Pivot de Gauss sur $P - I$

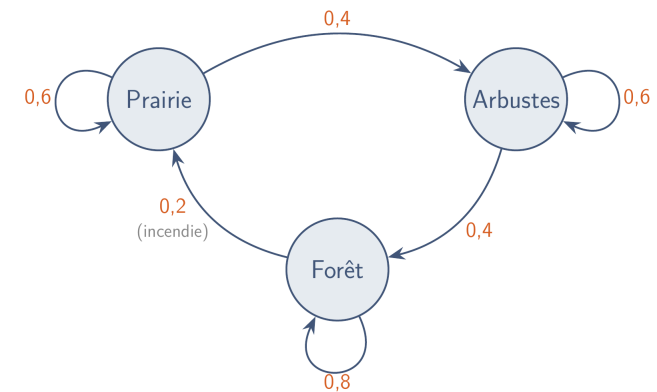
$$P = \begin{pmatrix} 0,6 & 0 & 0,2 \\ 0,4 & 0,6 & 0 \\ 0 & 0,4 & 0,8 \end{pmatrix}, \quad 5(P - I) = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 1 \\ 2 & -2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \end{pmatrix}$$

$L_2 \leftarrow L_2 + L_1$, puis $L_3 \leftarrow L_3 + L_2$:

$$\begin{pmatrix} -2 & 0 & 1 \\ 0 & -2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Ligne nulle : π_3 **libre**.

Succession écologique à trois états



Pas de temps : une décennie. Incendie : retour de la forêt à la prairie.

Équilibre du paysage

$$\begin{aligned} -2\pi_1 + \pi_3 &= 0 &\Rightarrow \pi_1 &= \pi_3/2 \\ -2\pi_2 + \pi_3 &= 0 &\Rightarrow \pi_2 &= \pi_3/2 \end{aligned}$$

$$\pi_1 + \pi_2 + \pi_3 = 2\pi_3 = 1 : \pi = (1/4; 1/4; 1/2).$$

À long terme

Un quart de prairie, un quart d'arbustes, la moitié en forêt.

Vecteur propre

L'équilibre comme vecteur propre

$$P\pi = \pi = 1 \cdot \pi$$

Équilibre

Un vecteur propre de P , associé à la valeur propre **1**.

Vecteur propre, valeur propre

Un vecteur non nul que la matrice transforme en un multiple de lui-même ; le facteur est la valeur propre.

$$A \text{ carrée}, \quad A\mathbf{v} = \lambda \mathbf{v}, \quad \mathbf{v} \neq \mathbf{0}, \quad \lambda \in \mathbb{R}$$

Un état que le modèle reproduit, à un facteur près.

Second vecteur propre du canal

$$P \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,9 - 0,5 \\ 0,1 - 0,5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,4 \\ -0,4 \end{pmatrix} = 0,4 \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$\mathbf{v} = (1; -1)$: vecteur propre, valeur propre 0,4.

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Pas une loi : l'excès de fermé sur ouvert, un déséquilibre.

Vitesse de convergence

Départ fermé : $\mathbf{x}_0 = (1; 0) = \pi + \frac{1}{6} \mathbf{v}$.

Linéarité, $P(\mathbf{u} + c\mathbf{v}) = P\mathbf{u} + cP\mathbf{v}$:

$$\mathbf{x}_t = P^t \pi + \frac{1}{6} P^t \mathbf{v} = \pi + \frac{1}{6} (0,4)^t \mathbf{v}$$

Seconde valeur propre

Écart à l'équilibre multiplié par **0,4** à chaque pas.

Seconde valeur propre et mélange

Toute loi initiale : $\mathbf{x}_0 = \pi + c\mathbf{v}$ — l'équilibre plus un déséquilibre c .

$\lambda_2 = 0,4$: ce déséquilibre multiplié par **0,4** à chaque pas.

$0,4^5 \approx 0,01$: après cinq pas, **1 %** du déséquilibre initial. Le tableau : $f_5 = 0,835$, à **0,002** de l'équilibre.

Vitesse de mélange

λ_2 proche de **1** : oubli lent ; proche de **0** : oubli rapide.

Théorème de Perron-Frobenius

Théorème de Perron-Frobenius

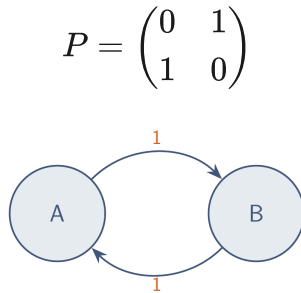
Une chaîne à nombre fini d'états, à probabilités de transition fixes, où tout état est accessible depuis tout autre et sans cycle fixe, possède une unique distribution d'équilibre, limite de la chaîne quel que soit l'état initial.

$$\exists! \pi : P\pi = \pi, \quad \sum_i \pi_i = 1 \quad \text{et} \quad P^t \mathbf{x}_0 \xrightarrow[t \rightarrow \infty]{} \pi \quad \text{pour toute loi initiale } \mathbf{x}_0$$

Chaîne irréductible et apériodique. Scott E. Page, *The Model Thinker*, ch. 17.

Hypothèses non satisfaites

Cycle fixe — oscillation sans fin ; équilibre $(1/2; 1/2)$ jamais atteint.



États isolés — $P = I$: aucun passage d'un état à l'autre. $P\pi = \pi$ pour toute loi : une infinité d'équilibres.

Transposée

La matrice obtenue en échangeant lignes et colonnes.

$$(A^T)_{ij} = a_{ji}, \quad \begin{pmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 1 & 3 & 4 \end{pmatrix}^T = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 3 \\ -1 & 4 \end{pmatrix}$$

Transposée d'un produit : $(AB)^T = B^T A^T$.

Équilibre et intervention

Ouvrir des canaux, un instant : retour au même équilibre.

Un médicament qui double la probabilité de s'ouvrir, de **0,1** à **0,2** :

$$P' = \begin{pmatrix} 0,8 & 0,5 \\ 0,2 & 0,5 \end{pmatrix}, \quad \pi' = (5/7; 2/7)$$

Équilibre

Déterminé par les probabilités de transition.

Convention en lignes

Dans de nombreux livres et logiciels : état en ligne, lignes de somme 1.

$$Q = P^T = \begin{pmatrix} 0,9 & 0,1 \\ 0,5 & 0,5 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{x}_{t+1}^T = (P\mathbf{x}_t)^T = \mathbf{x}_t^T Q$$

Équilibre : $\pi^T Q = \pi^T$.

Deux écritures

Même modèle. Dans ce cours : état en colonne, $\mathbf{x}_{t+1} = P\mathbf{x}_t$.