David Ivaniš, Mia Rošić, Lara Ujčić

ODREĐIVANJE METASTABILNIH STANJA MARKOVLJEVIH LANACA

Seminarski rad iz kolegija
Matrične i tenzorske metode u analizi podataka

Zagreb, prosinac, 2022.

Sadržaj

Uvod

Iskustvo nas uči da događaji u prirodi nisu međusobno nezavisni, nego da stanje svakog sustava u prirodi zavisi od niza faktora. Na svu sreću, u mnogim od tih slučajeva promjena sustava u vremenu, odnosno njegova neposredna budućnost ovisi samo o trenutnom stanju i prirodi funkcioniranja sustava. Matematički modeli takvih sustava su diskretni, konačnodimenzionalni Markovljevi lanci – posebna vrsta stohastičkih procesa na konačnom skupu stanja, snabdjevenih svojstvom „zaboravnosti“ – buduće stanje procesa ovisi samo o trenutnom stanju i vjerojatnostima prelaska iz stanja u stanje.

Proces je karakteriziran pripadnom stohastičkom matricom prijelaza koja određuje funkcioniranje sustava.

Markovljevi lanci javljaju se kao pojednostavljeni modeli kompleksnih sustava u nizu primjena, od redova u prodavnicama, vremena čekanja, kretanja cijena na burzi i prometa do analize molekularne dinamike u dizajniranju lijekova. Činjenica da se iz matrice prijelaza može zaključiti mnoštvo različitih svojstava sustava „na kraće“ i „na duže“ staze, čini ih posebno prikladnim za modeliranje.

Svojstvo sustava koje nam je od interesa u ovom radu je pojava metastabilnosti, koja je česta u realnim sustavima poput klimatskih promjena i konformacijske dinamike molekula – iz koje dolaze i naši primjeri. To je pojava u kojoj se sustav sastoji od određenog broja „makrostanja“ – kolekcija stanja koje sustav napušta tek nakon dugo vremena. U slučaju da su sva stanja raspoređena u klastere, takvo ponašanje sustava vodi do posebnog oblika tranzicijske matrice. Naime, matrica se tada s odgovarajućom permutacijom (koja samo utječe na raspored stanja, a ne i na svojstva sustava) može dovesti na blok-dijagonalno dominantnu matricu, pri čemu blokovi na dijagonali predstavljaju metastabilna stanja. Kako pretpostavljamo niske vjerojatnosti prelaska iz jednog u drugi klaster, matricu možemo zamisliti i kao perturbiranu blokdijagonalnu matricu.

Problem koji se javlja u primjeni je kako iz poznavanja ponašanja sustava odrediti metastabilna stanja. U skladu s prethodno rečenim, ovaj problem se u matematičkom obliku svodi na određivanje permutacije koja će matricu prijelaza dovesti do jednostavne blok-dijagonalno dominantne strukture.

U ovom radu prezentiramo kako navedeni problem riješiti koristeći SVD dekompoziciju matrice, analizirajući singularni vektor pridružen drugoj po modulu najvećoj singularnoj vrijednosti. Izlaganje će pratiti referentni članak [1]. Navedenu metodu ćemo implementirati u Pythonu i testirati ju na umjetnom primjeru niske dimenzije te nekoliko težih problema iz primjene. Kao stvarni primjeri će nam poslužiti markovljevi modeli molekularne dinamike molekula n-pentana.

Poglavlje 1

Osnovne definicije i pojmovi

1.1 Markovljevi lanci

U ovom odjeljku formalno ćemo definirati Markovljeve lance i pripadne osnovne pojmove.

Definicija 1.1.1. *Neka je S prebrojiv skup. Slučajni proces $X = (Xn : n \geq 0)$ definiran na vjerojatnostnom prostoru $(\Omega, \mathcal{F}, \mathbf{P})$ s vrijednostima u skupu S je* ***Markovljev lanac*** *ako vrijedi*

$$\mathbf{P}(X_{n+1} = j \mid X_n = i, X_{n-1} = i_{n-1}, \ldots, X_0 = i_0) = \mathbf{P}(X_{n+1} = j \mid X_n = i)$$

za svaki $n \in \mathbf{N}_0$ i za sve $i_0, \ldots, i_{n-1}, i, j \in S$ za koje su obje uvjetne vjerojatnosti dobro definirane. Svojstvo u relaciji naziva se ***Markovljevim svojstvom***.

Definicija 1.1.2. *Matrica $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $P = (p_{ij})_{i,j=1,\ldots,n}$ koja zadovoljava $p_{ij} \geq 0$ i $\sum_{j=1}^{n} p_{ij} = 1$, za $i = 1, \ldots, n$ je* ***stohastička matrica***.

Definicija 1.1.3. *Neka je $\mu = (\mu_i : i \in S)$ vjerojatnosna distribucija na S, a $P = (p_{ij} : i, j \in S)$ stohastička matrica. Markovljev lanac $X = (X_n : n \geq 0)$ je* ***homogen*** *s početnom distribucijom μ i prijelaznom matricom P ako vrijedi*

1. $\mathbf{P}(X_0 = i) = \mu_i$, *za sve $i \in S$*
2. $\mathbf{P}(X_{n+1} = j \mid X_n = i, X_{n-1} = i_{n-1}, \ldots, X_0 = i_0) = p_{ij}$, *za svaki za svaki $n \in \mathbf{N}_0$ i za sve $i_0, \ldots, i_{n-1}, i, j \in S$.*

Nadalje, X još zovemo i (μ, P)-Markovljev lanac.

U ostatku rada promatrati ćemo samo homogene Markovljeve lance.

1.2 Nespareni Markovljevi lanci

U **Definiciji 1.1.3**, uveli smo pojam prijelazne matrice P za Markovljev lanac X, matricu čije elemente $p_{ij}, i, j \in S$,

$$p_{ij} = \mathbf{P}(X_{n+1} = j \mid X_n = i)$$

shvaćamo kao vjerojatnosti prelaska Markovljevog lanca iz stanja i u stanje j. Proširiti ćemo ovu ideju na vjerojatnost prelaska lanca X iz *skupa* stanja A u *skup* stanja B, za $A, B \subset S$.

Definicija 1.2.1. *Neka je $B = [b_{ij}] \in \mathbb{R}^{n\times n}$ stohastička matrica. Neka je $v = (v_1, \ldots, v_n)$ pozitivan vektor. Neka su $S_k, S_l \subset \{1, \ldots, n\}$ disjunktni skupovi stanja i neka su $B_k = B(S_k, S_k), B_l = B(S_l, S_l)$ pripadne podblok matrice od B.Tada je* ***vjerojatnost prelaska iz*** *B_k* ***u*** *B_l dana s:*

$$w_v(B_k, B_l) = \frac{\sum_{i\in S_k, j\in S_l} v_i |b_{ij}|}{\sum_{i\in S_k} v_i}.$$

Definicija 1.2.2. *Za vektor $v = (1, \ldots, 1)$, definiramo pripadnu 1-normu bloka B_{kl} s*

$$||B_{kl}||_1 = w_v(B_k, B_l) = \frac{1}{n_k} \sum_{i\in S_k, j\in S_l} |b_i j|$$

.

Uočimo, 1-norma je zapravo prosječna suma redaka od matrice.

Definicija 1.2.3. *Neka $S_1, \ldots, S_m$ predstavljaju disjunktnu dekompoziciju prostora stanja S na m podskupova (agregata). Neka su $B_k = B(S_k, S_k)$ pripadni dijagonalni blokovi matrice B. Pripadnu matricu $W_1 \in \mathbb{R}^{m\times m}$ definiranu s*

$$(W_1)_{kl} = w_1(S_k, S_l), k, l = 1, \ldots, m$$

zovemo ***matricom sparivanja*** *dekompozicije.*

Nadalje, uvodimo definiciju skupa stanja sa svojstvom da, kad lanac X jednom uđe u njega, lanac ostaje u njemu beskonačno dugo.

Definicija 1.2.4. *Agregat $A \subset S$ koji zadovoljava $w_1(A, A) = 1$ je* ***invarijantan****.*

Definicija 1.2.5. *Markovljev lanac je* ***nesparen*** *ako dozvoljava dekompoziciju prostora stanja na disjunktne invarijantne agregate $A_1, \ldots, A_k$.*

Uočimo da u tom slučaju vrijedi $w_1(A_i, A_j) = \delta_{i,j}$, odnosno $W_1 = I_k$. Nadalje, pripadna prijelazna matrica P nesparenog Markovljevog lanca očito će biti blok-dijagonalna, odnosno oblika

$$P = \begin{bmatrix} P_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & P_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & P_{kk} \end{bmatrix},$$

gdje su P_{ii} kvadratne stohastičke matrice.

1.3 O matricama

U ovom odjeljku navodimo pojmove koji se općenito tiču matrica, a koristiti ćemo ih kasnije kroz rad.

Definicija 1.3.1. *Vektor $v \in \mathbb{R}^n$, $v = (v_1, v_2, \ldots, v_n)$, je* ***pozitivan vektor*** *ako vrijedi $v_i > 0$ za svaki $i = 1, ..., n$. Tada pišemo $v > 0$.*

Definicija 1.3.2. *Matrica $T \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $T = (t_{ij})_{i,j=1,\ldots,n}$ je* ***pozitivna matrica*** *ako $t_{ij} > 0$ za svaki $i = 1, ..., n$. Tada pišemo $T > 0$.*

Definicija 1.3.3. *Matrica $T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ je* ***reducibilna*** *ako postoji permutacijska matrica $P \in \mathbb{R}^{n\times n}$ takva da vrijedi*

$$PTP^T = \begin{bmatrix} T_{11} & 0 \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix}$$

gdje su T_{11} i T_{22} kvadratne matrice. U suprotnom, matrica T je ***ireducibilna****.*

Definicija 1.3.4. *Matrica $T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ je* ***(strogo) dijagonalno dominantna*** *ako*

$$|t_{ii}| > \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |t_{ij}|$$

za svaki $i = 1, ..., n$.

Definicija 1.3.5. *$\lambda \in \mathbb{R}$ je* ***svojstvena vrijednost*** *matrice $T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ako postoji vektor $v \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ takav da vrijedi $Tv = \lambda v$. U tom slučaju, vektor v nazivamo* ***desnim svojstvenim vektorom*** *matrice T pridruženim svojstvenoj vrijednosti λ. Slično, vektor $w \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ takav da $w^T T = \lambda w^T$ nazivamo* ***lijevim svojstvenim vektorom*** *matrice T pridruženim svojstvenoj vrijednosti λ.*

Definicija 1.3.6. *Neka je $T \in \mathbb{R}^{n\times n}$ matrica sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_i, i = 1, \ldots, n$.* ***Spektralni radijus*** *matrice T je $\rho(T) = \max_{1\leq i\leq n} |\lambda_i|$.*

1.4 O grafovima

Definicija 1.4.1. ***Graf*** *je uređen par* $G = G(V, E)$*, gdje je* V *skup vrhova, a* $E \subset V \times V$ *skup bridova grafa. Za* ***neusmjereni*** *graf vrijedi* $(i, j) \in E \iff (j, i) \in E$*. Graf je* ***konačan*** *ako je skup vrhova* V *konačan.*

Definicija 1.4.2. ***Povezana komponenta*** *grafa* G *je skup vrhova* $K \subset W$ *takvih da:*

1. $\forall i, j \in K$*, postoji* ***put*** *koji povezuje* i *i* j*, odnosno postoji konačan niz bridova* $(i, a_1), (a_1, a_2), \ldots, (a_n, j) \in E$*.*

2. *Ako* $i \in K$*,* $j \in V$ *i postoji put između* i *i* j*, tada nužno* $j \in K$*.*

Graf je ***povezan*** *ako skup vrhova* V *čini jednu povezanu komponentu.* ***Izolirani vrh*** $i \in V$ *je vrh takav da* $\forall j \in V, (i, j) \notin E$*. U ovom radu, smatrati ćemo da izoliranih vrh nije zasebna povezana komponenta.*

Definicija 1.4.3. *Graf* G *je* ***bipartitan*** *ako se skup vrhova* V *može particionirati na dva disjunktna skupa* X *i* Y *takva da ako je* (x, y) *brid grafa, onda* x *i* y *nisu sadržani u istom skupu* X *ili* Y*.*

Definicija 1.4.4. *Neka je* $M \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *matrica. Neka su* $X = \{x_1, \ldots, x_m\}, Y = \{y_1, \ldots, y_m\}$*. Definiramo* $B(M) = G(V, E)$ *kao pripadni* ***bigraf*** *matrice* M*, odnosno neusmjereni bipartitni graf sa skupom vrhova* $V = X \cup Y$ *i skupom bridova* E *takvih da* $(x_i, y_j) \in E$ *ako i samo ako* $m_{ij} \neq 0$*.*

Poglavlje 2

SVD metoda

2.1 Motivacija

Metoda koju ćemo obraditi u ovom poglavlju zasniva se na SVD dekompoziciji matrice i analizi predznaka singularnih vektora. Naime, pokazano je u [4] da broj metastabilnih stanja u idealnom slučaju odgovara broju svojstvenih vrijednosti u tzv. Perronovom klasteru te da se svojstveni vektori koji odgovaraju tim vrijednostima mogu iskoristiti u određivanju metastabilnih stanja. Metoda iskazana u [4] korisna je samo u slučaju reverzibilnih markovljevih lanaca, dakle onih za koje suprotan lanac pokazuje iste tranzicijske vrijednosti, pa je u [1] predstavljena srodna metoda koja koristi singularne vrijednosti, te ne zahtjeva uvjet na reverzibilnost, a koju ćemo mi predstaviti u ovom radu. Teorijski rezultati, motivacije i dokazi su detaljno prikazani u navedenim radovima, a mi ćemo u nastavku samo dati njihov kratki pregled.

Prelazak sa svojstvenih vektora na singularne vektore ponukan je činjenicom da singularni vektori tvore ortogonalnu bazu što se u metodi reflektira u slabijim zahtjevima na Markovljev lanac. Naime, zahtjev na reverzibilnost lanca u metodi zasnovanoj na analizi svojstvenih vektora nameće svojstvo simetričnosti matrice prijelaza u odnosu na određeni skalarni produkt. To pak za rezultat ima da je spektar matrice prijelaza realan.

Kako je u praksi neopravdano očekivati realan spektar matrice prijelaza, SVD metoda predstavlja prirodno poboljšanje prethodne metode, te ne zahtjeva uvjet na reverzibilnost.

U skladu s prirodnim zahtjevom da u procesu otkrivanja metastabilnih stanja želimo otkriti i njihov broj, krajnji algoritam za ulazni parametar neće primati broj metastabilnih stanja, nego će obje informacije biti dio rezultata. Nadalje, proces će se odvijati iterativno, a u svakom koraku algoritma će biti potrebno odrediti samo dva svojstvena vektora, što značajno ubrzava brzinu izvođenja.

2.2 Teorijski izvodi

Najprije ćemo promotriti slučaj Markovljevog lanca čija je matrica prijelaza blok dijagonalna. Prisjetimo se, u tom slučaju je Markovljev lanac *nesparen* - prostor stanja može mu se dekompozirati na disjunktne invarijantne agregate. Invarijantan agregat zapravo predstavlja jednu stabilnu klasu stanja lanca, odnosno skup stanja za kojeg vrijedi da, jednom kad uđe u njega, lanac ostaje u njemu s vjerojatnošću 1.

U nastavku navodimo teoreme koje ćemo primijeniti na prijelaznoj matrici nesparenog Markovljevog lanca.

Za početak navodimo dobro poznati rezultat o SVD dekompoziciji proizvoljne kvadratne matrice.

Teorem 2.2.1 (SVD). *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Tada postoje unitarne matrice $U \in \mathbb{R}^{n\times n}$ i $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ takve da je*

$$A = U\Sigma V^T$$

za $\Sigma = diag(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$, pri čemu vrijedi $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n \geq 0$. Vrijednosti $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n$ nazivamo ***singularnim vrijednostima****, a stupce matrica U i V lijevim, odnosno desnim,* ***singularnim vektorima*** *matrice A.*

Za dokazivanje potrebnih teoretskih rezultata na kojima se zasniva metoda, potreban je i Perron-Frobeniusov teorem o svojstvenim vrijednostima nenegativnih, ireducibilnih matrica.

Teorem 2.2.2 (Perron-Frobenius). *Neka je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ nenegativna, ireducibilna matrica. Tada je njen spektralni radijus $\rho(A)$ svojstvena vrijednost kratnosti jedan čiji su odgovarajući desni i lijevi svojstveni vektori strogo pozitivni. Nadalje, svaki pozitivni svojstveni vektor matrice A odgovara spektralnom radijusu kao svojstvenoj vrijednosti.*

U nastavku dokazujemo teorem o strukturi predznaka koju pokazuju singularni vektori, a na kojem će se zasnivati naša metoda. Primijetimo da je rezultat iskazan za blok-stohastičke matrice. No, kako matrice koje su slične po nekoj matrici permutacije imaju jednake svojstvene vrijednosti (što se vidi iz prethodnog teorema) i svojstvene vektore koji su međusobno povezani istom permutacijom, singularni vektori matrica koje se nekom permutacijom mogu dovesti do blok-stohastičke će također pokazivati svojstvo iskazano u narednom teoremu.

Teorem 2.2.3. *Neka je A blok-stohastička matrica s dijagonalnim blokovima*

$$A_1, \dots, A_m$$

reda $n_1, \dots, n_m$, te neka je S_i skup indeksa iz prostora stanja S koji odgovaraju bloku A_i. Neka je

$$A = U\Sigma V^T$$

SVD dekompozicija matrice, a $u_1, \ldots, u_m$ lijevi singularni vektori koji odgovaraju najvećim singularnim vrijednostima svakog od m blokova, redom. Nadalje, neka bigraf svakog od blokova sadrži točno jednu komponentu povezanosti. Pridružimo li svakom stanju s_i njegov vektor strukture predznaka na sljedeći način:

$$sign(s_i) = [sgn(u_1)_i, \ldots, sgn(u_m)_i]$$

tada vrijedi:

1. *Stanja koja pripadaju istom bloku, imaju istu strukturu predznaka, odnosno $\forall A_j, \forall k, l \in S_j$ vrijedi*
$$sign(s_k) = sign(s_l),$$
2. *Stanja koja pripadaju različitim blokovima, imaju različitu strukturu predznaka, odnosno $\forall A_i, A_j, i \neq j$ i $\forall k \in S_i, l \in S_j$, vrijedi*
$$sign(s_k) \neq sign(s_l).$$

Dokaz. 1. Iz SVD dekompozicije matrice A vrijedi:

$$AA^T = U\Sigma^2 U^T$$

pa iz toga slijedi da $AA^T U = U\Sigma^2$. Dakle, lijevi singularni vektori matrice A (stupci matrice U) su svojstveni vektori matrice AA^T, a singularne vrijednosti su korijeni svojstvenih vrijednosti od AA^T.

Matrica A je po definiciji pozitivna pa je i matrica $A_i A_i^T$ pozitivna. Nadalje, iz svojstva da bigraf svakog bloka A_i sadrži točno jednu komponentu povezanosti, slijedeći propoziciju 3.1 iz [5] slijedi da je matrica $A_i A_i^T$ ireducibilna.

Perron- Frobeniusov teorem nam sada daje da je spektralni radijus matrice $A_i A_i^T$ svojstvena vrijednost kratnosti jedan te da je njen odgovarajući svojstveni vektor $\hat{u}_i$ strogo pozitivan.

Nadopunimo li vektor $\hat{u}_i$ nulama do vektora oblika:

$$u_i = [0, \ldots, 0, \hat{u}_i^T, 0, \ldots, 0], \tag{2.1}$$

lako se vidi da je on svojstveni vektor matrice AA^T koji odgovara najvećoj singularnoj vrijednosti bloka A_i.

Kako će ovakvi vektori imati disjunktne nosače i nenegativne komponente, stanja koja pripadaju istom bloku će imati istu strukturu predznaka.

2. Po gornjem dokazu, sva stanja koja pripadaju istom bloku imaju istu strukturu predznaka, pa bez smanjenja općenitosti možemo pretpostaviti da svaki blok sadrži samo jedno stanje. Tada je zbog disjunktnosti nosača stupaca, matrica $U = [u_1, \ldots, u_m] \in \mathbb{R}^{m \times m}$ ortogonalna. Slijedi da su i vektori retci matrice U međusobno ortogonalni što povlači da stanja u različitih blokovima imaju različitu strukturu predznaka.

$\square$

Napomena 2.2.4. *Zamijenimo li u gornjem dokazu lijeve singularne vektore desnim, dokaz možemo provesti u istom obliku koristeći matricu $A^T A$. Prema propoziciji 3.1 iz [5] tada slijedi da je od matrice A potrebno zahtjevati nešto jači uvjet, da su bigrafovi dijagonalnih blokova povezani, tj. da imaju točno jednu komponentu povezanosti i nula izoliranih vrhova.*

Time smo dokazali da singularni vektori vezani uz najveće singularne vrijednosti svakog bloka imaju posebnu strukturu predznaka. Ako to primjenimo na naš nespareni Markovljev lanac, zaključujemo da sva stanja koja pripadaju jednom agregatu imaju istu strukturu predznaka, a stanja koja pripadaju različitim agregatima imaju različitu strukturu predznaka.

Do sada smo promatrali Markovljeve lance sa stabilnim klasama stanja. Za praktične primjene, potrebno je razmotriti slučaj *metastabilnih* klasa stanja - skupovi stanja u kojima lanac ostaje *dugo vremena*, umjesto beskonačno dugo.

Slično, matrice prijelaza će u ovom slučaju imati *blok-dijagonalno dominantnu* strukturu, umjesto blok-dijagonalnu, i nazivat ćemo ih *gotovo nespareninima.* Na takve matrice prijelaza možemo gledati kao na perturbirane blok-dijagonalne matrice. Zadatak tada postaje pronaći matricu permutacije koja će matricu prijelaza dovesti do blok-dijagonalno dominantne strukture.

Najprije navodimo formalnu definiciju gotovo nesparene matrice.

Definicija 2.2.5. *Dva ili više dijagonalnih blokova stohastičke matrice nazivamo **gotovo nesparenima** ako je 1-norma svakog bloka veća od danog praga $thr = 1 - \delta$ za neki $\delta > 0$. Tada matricu*

$$\tilde{B} = \begin{bmatrix} B_1 & B_{12} & \cdots & B_{1m} \\ B_{21} & B_2 & \cdots & B_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ B_{m1} & B_{m2} & \cdots & B_m \end{bmatrix}$$

*nazivamo **gotovo nesparenom** ako su njeni dijagonalni blokovi gotovo nespareni i ako je pripadna matrica sparivanja dijagonalno dominantna.*

U nastavku ćemo provjeriti kakve sve perturbacije možemo primjeniti nad nesparenom matricom (koja time postaje gotovo nesparena), a da i dalje vrijede pretpostavke **teorema 2.2.3**.

Definiramo perturbiranu matricu $B = \hat{A} + \epsilon R$, za neki $\epsilon > 0$ i stohastičke matrice A i R. Za dovoljno mali realni $\epsilon > 0$ matrica $T(\epsilon) = BB^T$ je simetrični linearni operator koji se može zapisati na sljedeći način:

$$T(\epsilon) = T + \epsilon T^{(1)} + \mathcal{O}(\epsilon^2), \tag{2.2}$$

gdje je $T(0) = T = \hat{A}\hat{A}^T$ neperturbirani operator, a $T^{(1)} = \hat{A}R^T + R\hat{A}^T$ pripadni tzv. Lyapunov perturbacijski operator.

Pokaže se da [1], za svaki $\epsilon > 0$, za $T(\epsilon)$ postoji ortonormalna baza svojstvenih vektora $\phi_k(\epsilon)$ koji su analitička funkcija po ϵ, pa stoga i dopuštaju Taylorovu ekspanziju

$$\phi_k(\epsilon) = \phi_k + \epsilon\phi_k^{(1)} + \mathcal{O}(\epsilon^2), \tag{2.3}$$

gdje je ϕ_k ortonormalni svojstveni vektor od $T = \hat{A}\hat{A}^T$, odnosno linearna kombinacija svojstvenih vektora $\tilde{u}_k$ od T, oblika **2.1**, a $\phi_k^{(1)}$ vektor-koeficjent pogreške prvog reda.

Teorem 2.2.6. *Neka je $T(\epsilon)$ definiran s 2.2, i neka su njegove dvije najveće svojstvene vrijednsoti $\lambda_1(\epsilon) \geq \lambda_1(\epsilon)$. Pretpostavimo da se neperturbirana matrica $T = \hat{A}\hat{A}$ iz 2.2 može permutirati do $\tilde{T} = PTP^T$, takve da $\tilde{T}$ ima m nesparenih ireducibilnih blokova $A_i, \ldots, A_m$. Neka su $\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots > \lambda_m$ najveće svojstvene vrijednosti pripadnih blokova. Nadalje, uz oznaku $\lambda_{i,2}$ za drugu najveću svojstvenu vrijednost bloka A_i, neka vrijedi $\lambda_i > \lambda_{j,2}$, za svaki $i \neq j$. Tada perturbirani ortonormalni svojstveni vektor $\phi_2(\epsilon)$ koji odgovara perturbiranoj svojstvenoj vrijednosti $\lambda_2(\epsilon)$ je oblika:*

$$\phi_2(\epsilon) = \sum_{j=1}^{m}(\alpha_j + \epsilon\beta_j)\tilde{u}_j + \epsilon \sum_{j=m+1}^{n} < \phi_j, \phi_2^{(1)} > \phi_j + \mathcal{O}(e^2) \tag{2.4}$$

gdje su $\tilde{u}_j$ svojstveni vektori oblika 2.1 iz dokaza teorema 2.2.3, α_j i β_j prigodni koeficijenti, i $< .,. >$ Euklidski skalarni produkt.

Dokaz teorema može se naći u [1]. Promotrimo pobliže izraz 2.4 za svojstveni vektor $\phi_2(\epsilon)$ koji pripada drugoj najvećoj svojstvenoj vrijednosti od $T(\epsilon)$.

Prvi član tog izraza ne mijenja strukturu predznaka sve dok su α_j i β_j istog predznaka, a ako nisu, možemo uzeti dovoljno mali ϵ takav da $|\alpha_j| > \epsilon|\beta_j|$ vrijedi za svaki $j = 1, \ldots, m$.

Drugi član izraza ovisi o ortogonalnosti perturbacije prvog reda od drugog singularnog vektora $\phi_2^{(1)}$ i vektora $\phi_{m+1}, \ldots, \phi_n$. Veličina ovog člana zapravo ovisi o razmaku između druge i $(m+1)$-te neperturbirane singularne vrijednosti.

To možemo uočiti promatrajući $\phi_2^{(1)}$, koji na prostoru razapetom sa singularnim vektorima $\phi_{m+1}, \ldots, \phi_n$ daje sljedeći rezultat

$$(I - P_{1,\ldots,m})\phi_2^{(1)} = \sum_{j=m+1}^{n} \frac{1}{\lambda_2}\lambda_j P_j T^{(1)} \phi_2.$$

Što je manji razmak, to perturbacija opertora mora biti manja kako ne bi utjecala na strukturu predznaka. No, u većini praktičnih primjera, ova razlika je veća od razlike između prvih m svojstvenih vrijednosti i ostatka spektra, što nam intuitivno daje do znanja da će nam ova metoda dati bolje rezultate od metode zasnivane na Perronovom klasteru.

U najgorem slučaju, tj ako prvi član izraza za 2.3 ima drugačiju srukturu predznaka od prvog člana, dodatno zahtjevamo

$$\epsilon < \frac{\left|\left[\sum_{j=1}^{m}(\alpha_j + \epsilon\beta_j)\tilde{u}_j\right]_i\right|}{\left|\left[\sum_{j=m+1}^{n} < \phi_j, \phi_2^{(1)} > \phi_j\right]_i\right|}.$$

U ovom slučaju, do na grešku prvog reda, struktura predznaka neće biti promijenjena.

2.3 Algoritam

U skladu s prethodnim izlaganjima, algoritam koji implementira metodu trebao bi koristiti informaciju o strukturi predznaka singularnih vektora za sortiranje matrice. Kako ne znamo *a priori* broj blokova koje treba dovesti na dijagonalu krajnje matrice, nepoznat nam je broj singularnih vektora koje moramo promatrati. Taj problem sugerira rekurzivno rješavanje problema.

U idealnoj situaciji u kojoj su perturbacije dovoljno malene da ne kvare strukturu predznaka, stanja istog metastabilnog skupa stanja pokazuju jednaku strukturu predznaka. To povlači da predznak koji odgovara drugom svojstvenom vektoru mora biti jednak za stanja iz iste skupine, a da stanja sa različitim predznakom nužno pripadaju različitim metastabilnim skupovima stanja. Grupiramo li tada stanja u dvije skupine prema tome kakav predznak pridružuju drugom svojstvenom vektoru, kao rezultat dobijamo skupine međusobno jače povezanih stanju.

U slučaju da se lanac sastoji od dva metastabilna skupa stanja, ovaj postupak rješava problem u jednom koraku, tj. procedura upravo odgovara postupku rješavanju problema. U slučaju da je broj metastabilnih skupova stanja veći, ideja je postupak ponavljati dovoljan broj puta, dok stanja ne rasporedimo u točan broj blokova točne dimenzije.

Kako trebamo imati uvjet zaustavljanja algoritma (inače bismo završili sa jednočlanim skupovima stanja), a krajnja matrica po prirodi problema mora biti blok-dijagonalno dominantna, uvodimo donju granicu na 1-normu nastalih blokova. Kada je uvjet narušen, a što sugerira da daljnjim dijeljenjem gubimo blok dijagonalnu dominantnost, pronašli smo blokove koje ne dijelimo dalje. Opišimo postupak permutiranja nešto preciznije.

Neka je B matrica prijelaza koju treba permutirati. Budući da B nije nesparena, slijedi da je BB^T ireducibilna.

Po Perron-Frobeniusovom teoremu, B ima najveću singularnu vrijednost 1 kratnosti 1 i pripadni lijevi singularni vektor u_1 je pozitivan. Kako su singularni vektori ortogonalni, u_2 koji pripada drugoj po modulu najvećoj singularnoj vrijednosti mora imati barem jednu vrijednost negativnog predznaka. Dakle, gore opisan postupak će sigurno formirati dva međusobno disjunktna skupa stanja.

Zaključujemo da stanja koja odgovaraju vrijednostima različitog predznaka iz u_2 pripadaju različitim blokovima. Sortiramo li drugi svojstveni vektor, matricu B permutiramo u skladu sa permutacijom koja sortira svojstveni vektor. Novu matricu tada promatramo kao sastavljenu od dva bloka - prvi blok B_1 dimenzije jednake broju negativnih vrijednosti vektora u_2, a B_2 dimenzije jednake broju nenegativnih vrijednosti vektora u_2.

U slučaju da je norma novonastalih blokova veća od zadanog praga, postupak nastavljamo dalje. U slučaju da je uvjet narušen, postupak se u odgovarajućoj podmatrici zaustavlja. Krajnji rezultat otkriva blok dijagonalno dominantnu strukturu, jedinstvenu do na raspored dijagonalnih blokova i stanja u blokovima.

Opisani algoritam se nalazi na sljedećoj strani.

Algoritam 1 Algoritam za kreiranje gotovo nesparenih blokova

Ulaz Matrica B i prag $thr = 1 - \delta$

Izlaz Broj m, veličine $n_1, \ldots, n_m$ identificiranih blokova u B te permutacijska matrica P takva da vrijedi $PBP^T = A + E$.

1: Računamo drugi lijevi singularni vektor u_2 matrice B

2: Sortiramo u_2 i upotrijebimo to sortiranje kako bi dobili permutiranu matricu P te pomoću nje permutiramo matricu B

3: Kreiramo dva potencijalna bloka B_1 i B_2 korištenjem strukture predznaka vektora u_2

4: Dimenzija prvog bloka B_1 je broj negativnih vrijednosti vektora u_2, a veličina drugog bloka B_2 je broj pozitivnih vrijednosti vektora u_2

5: **ako** norma blokova B_1 i B_2 veća od r **onda**

6:     Nastavimo rekurzivno, to jest vraćamo se na korak 1. za svaki od blokova

7: **inače**

8:     Trenutačni blok se ne može dalje smanjivati pa povećamo brojač za jedan

9: **kraj ako**

Poglavlje 3

Primjena algoritma na primjerima

3.1 Primjer malih dimenzija

Za ilustraciju isprobajmo algoritam na jednom konstruiranom problemu male dimenzije.

Neka je dana matrica A dimenzija 9×9:

$$A = \begin{bmatrix} 0.35 & 0.15 & 0.5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.2 & 0.75 & 0.05 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0.3 & 0.5 & 0.2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.24 & 0.57 & 0.19 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.32 & 0.36 & 0.32 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0.2 & 0.7 & 0.1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.2 & 0.6 & 0.2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.2 & 0.55 & 0.25 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0.1 & 0.85 & 0.05 \end{bmatrix}$$

Matrica A je blok-dijagonalno stohastička. Konstruiramo matricu slučajnih perturbacija E tako da su elementi koji odgovaraju blokovima na dijagonali uniformno distribuirani na intervalu $< -1, 1 >$, a preostali elementi uniformno distribuirani na intervalu $< 0, 1 >$.

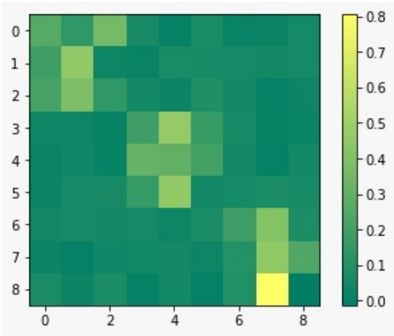
Pomnožimo li matricu konstantom $\epsilon = 0.05$, dobili smo matricu perturbacije gdje su perturbacije po elementima najviše reda ϵ.

Definirajmo matricu M kao $M = A + \epsilon * E$ koja predstavlja perturbiranu matricu A.

Kako bi matrica bila stohastička, skaliramo joj redove da budu norme jedan. Kao rezultat dobijamo matricu M koja je stohastička te predstavlja perturbiranu matricu

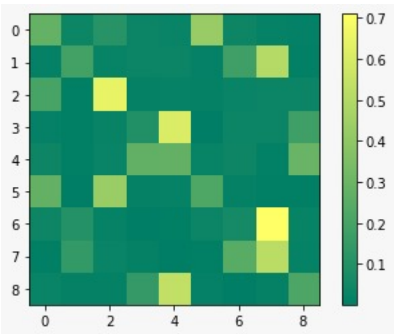
A. Takva nastala matrica je blok-dijagonalno dominantna. Ona modelira Markovljev lanac koji onda očito ima tri metastabilna skupa stanja, svako sa po tri stanja.

Takva nastala matrica je blok-dijagonalno dominantna i modelira Markovljev lanac sa tri metastabilna skupa stanja, svaki sa po tri stanja(**Slika 3.1**).



Slika 3.1: Matrica M

Slučajno odabranom matricom permutacije ispermutiramo matricu M. Novi oblik matrice M koju dajemo algoritmu kao ulazni podatak može se vidjeti na **slici 3.2**

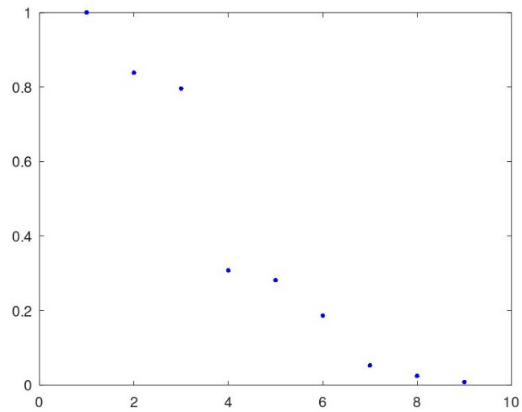


Slika 3.2: Permutirana matrica M

Iz permutirane matrice se ne daju na prvi pogled iščitati metastabilna stanja, odnosno nije moguće uopće odrediti njihovo postojanje. Elementi se čine raspoređeni po matrici bez ikakvog pravila.

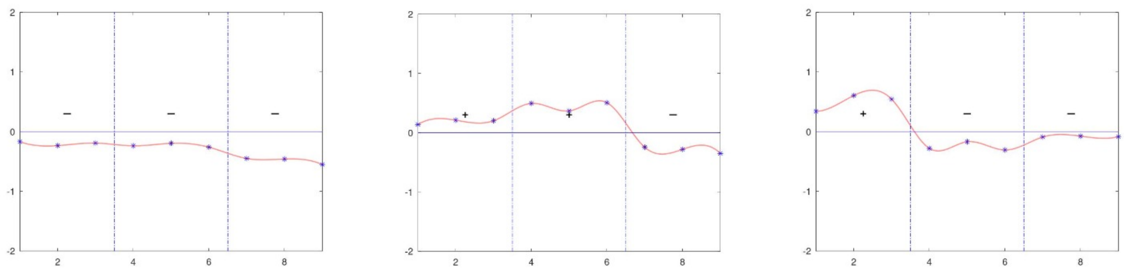
Pogledajmo prvo kako svojstvene vrijednosti i singularni vektori nepermutirane matrice kodiraju informaciju o njenom obliku (**Slika 3.3**).

Graf svojstvenih vrijednosti jasno pokazuje da su tri vrijednosti izdvojene po apsolutnoj vrijednosti. Prema teorijskim razmatranjima iz [4], ova informacija daje



Slika 3.3: Graf svojstvenih vrijednosti matrice M

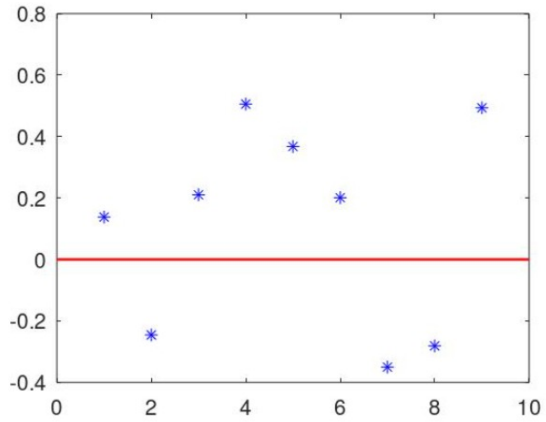
naslutiti da bi se primjenom SVD metode trebala rekonstruirati tri dijagonalna bloka. Pogled na singularne vektore početne, neispermutirane matrice koji odgovaraju trima najvećim singularnim vrijednostima daje uvid i u raspored stanja po blokovima (**Slika 3.4**). Dakle, u neispermutiranoj matrici, prva tri stanja imaju zajedničku strukturu predznaka $(-,+,+)$, druga tri $(-,+,-)$ i posljednja tri $(-,-,-)$.



Slika 3.4: Strukture predznaka blokova

U ovom slučaju je zbog ilustracije odabrana matrica čije su najveće svojstvene vrijednosti jasno odijeljene od ostatka spektra, i čija perturbacija ne kvari strukturu predznaka. SVD metoda je konstruirana tako da upravo zaobiđe potrebu jasno odijeljenog Perronovog klastera, poznavanja broja metastabilnih stanja unaprijed te da bude brza i stabilna u odnosu na perturbacije.

Sada ilustriramo izvođenje samog algoritma na permutiranoj matrici. Za prag uzimamo $thr = 0.7$. U prvom koraku analiziramo lijevi singularni vektor pridružen drugoj najvećoj singularnoj vrijednosti (**Slika 3.5**).



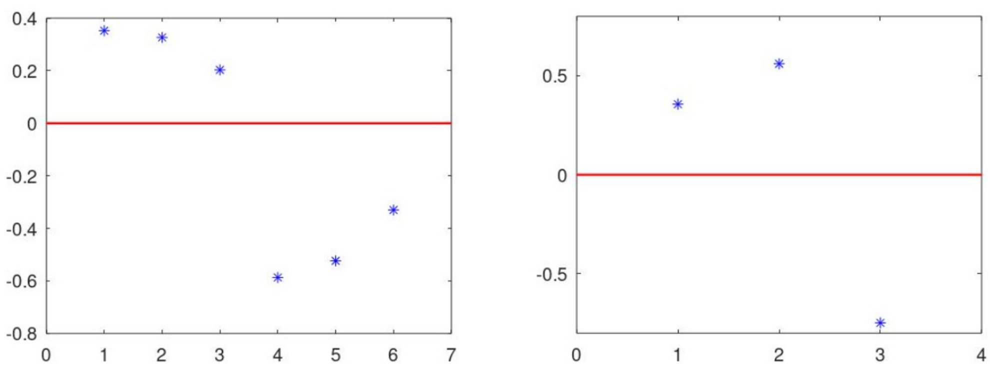
Slika 3.5: Lijevi sing. vektor druge najveće sing. vrijednosti permutirane matrice M

Algoritam grupira šest stanja kojima odgovaraju pozitivne vrijednosti na gornjem grafu u jednu skupinu, a preostale u drugu skupinu. Matrica se permutira tako da prva skupina bude predstavljena prvim blokom stanja, a druga drugim. Trenutna matrica sparivanja W je dana sa:

$$W = \begin{bmatrix} 0.9387 & 0.0613 \\ 0.1137 & 0.8863 \end{bmatrix}$$

Za obje skupine je norma 1 veća od praga pa matricu dijelimo na dva bloka i nastavljamo dalje iterativno.

Grafovi drugih singularnih vektora novih blokova su dani na **slici 3.6)**:



Slika 3.6: Grafovi singularnih vektora od dva nova bloka

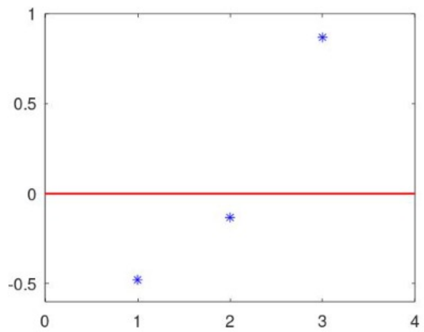
Matrice sparivanja su sljedeće:

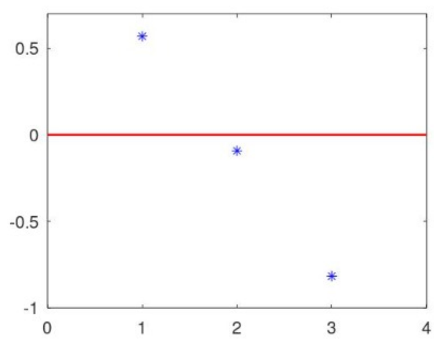
$$W_1 = \begin{bmatrix} 0.8789 & 0.0651 \\ 0.0618 & 0.8715 \end{bmatrix}, W_2 = \begin{bmatrix} 0.677645 & 0.215258 \\ 0.810829 & 0.062145 \end{bmatrix}$$

Za drugu skupinu, 1-norma pripadnih blokova nakon drugog koraka pada ispod praga 0.7 pa algoritam drugu skupinu više ne razbija na manje. Naime, daljnjim dijeljenjem bismo izgubili blok-dijagonalno dominantnu strukturu.

Na prvom bloku, kao 6×6 podmatrici ponavljamo postupak, tj. permutiramo ga da bismo dobili blokove u kojima su raspoređena stanja u skladu sa strukturom predznaka drugog singularnog vektora i postupak nastavljamo dalje.

Drugi svojstveni vektori novih pod-blokova i matrice sparivanja koje bi nastale kao rezultat daljnjeg dijeljenja su dani su u nastavku:

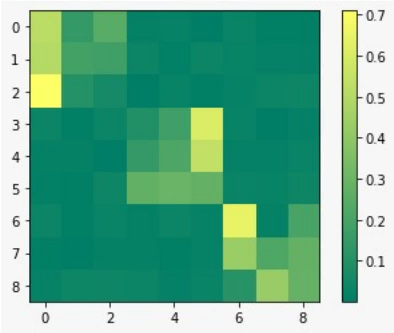




Slika 3.7: Grafovi singularnih vektora od dva nova bloka dobivena iz prvog bloka

$$W_{1,1} = \begin{bmatrix} 0.3188 & 0.5747 \\ 0.5693 & 0.2806 \end{bmatrix}, W_{1,2} = \begin{bmatrix} 0.6443 & 0.2153 \\ 0.2753 & 0.6040 \end{bmatrix}$$

Daljnjom podjelom bilo kojeg od dva bloka bismo izgubili blok-dijagonalnu dominantnost, pa se algoritam prekida. Kao rezultat dobijena je permutacija početne matrice M, koja je blok-dijagonalno dominantna, sa tri bloka od po tri elementa **(Slika 3.8)**. Algoritam je uspješno rekonstruirao blok strukturu matrice, odnosno pronašao metastabilna stanja povezanog Markovljevog lanca. Matrica se od neispermutirane matrice M razlikuje samo po podjeli blokova na dijagonali i elemenata u blokovima.

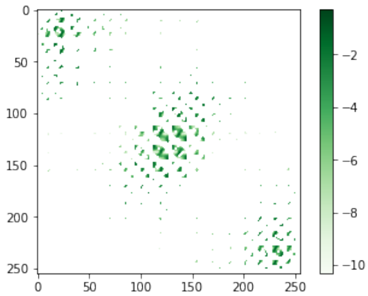


Slika 3.8: Matrica M, permutirana permutacijom dobivenom s algoritmom

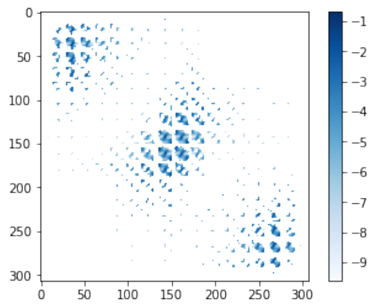
3.2 Molekula n-pentana

Kao sljedeći primjer navodimo problem iz primjene u analizi metastabilnih stanja molekule n-pentana.

Određivanje metastabilnih stanja molekula, odnosno razumijevanja dinamike savijanja proteina predstavlja najznačajniji izvor interesa i primjera za predstavljeni matematički problem. Razumijevanje ovih procesa važno je npr. za razumijevanje nastanka raznih bolesti. Markovljevi modeli molekulske dinamike nisu jedinstveni nego zavise od uvjeta eksperimenta i načina formiranja modela. Koristeći različite eksperimentalne uvjete, formirane su dvije matrice, *Ph300* i *Ph500*, koje predstavljaju istu molekulu. Matrice su dimenzija 255, odnosno 307. Za uvjet prekidanja algoritma u ovom slučaju uzimamo prag $thr = 0.5$.



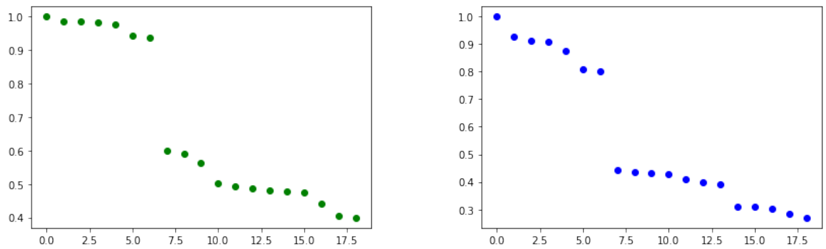
(a) Ph300



(b) Ph500

Slika 3.9: Matrični prikaz Ph300 i Ph500

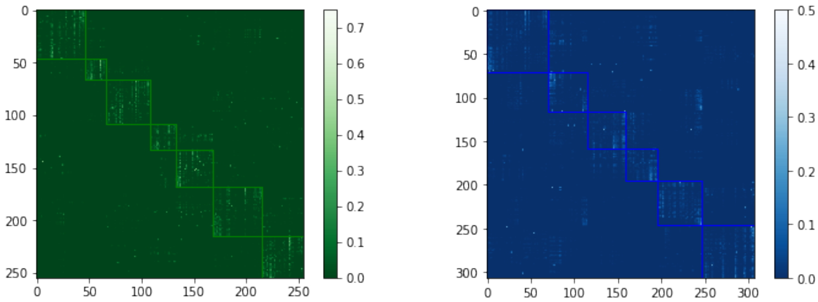
Grafovi svojstvenih vrijednosti sugeriraju sedam metastabilnih stanja. Iz grafičkog prikaza matrica Ph300 i Ph500 u logaritamskoj skali, ta struktura se ne da na oko iščitati.



(a) Ph300 (b) Ph500

Slika 3.10: Pripadni grafovi svojstvenih vrijednosti

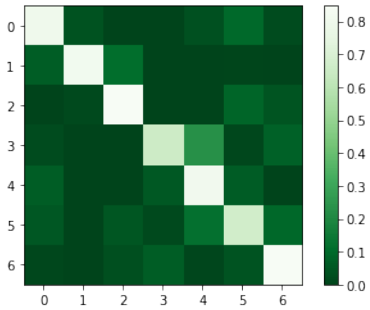
Algoritam SVD metode primijenjen na ove matrice za rezultat daje sljedeće rezultate:



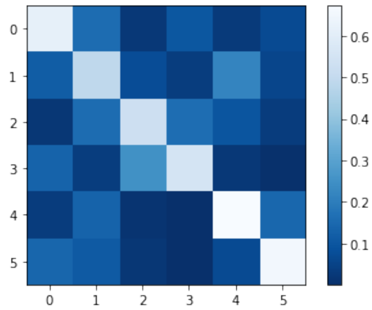
(a) Ph300 (b) Ph500

Slika 3.11: Permutirane matrice Ph300 i Ph500 dobivene dobivene SVD algoritmom

U prvom slučaju, dimenzije 255, otkriveno je sedam metastabilnih stanja, dimenzija $(47, 20, 42, 24, 36, 36, 40)$, a u drugom slučaju je otkriveno šest metastabilnih stanja dimenzija $(71, 45, 43, 37, 51, 60)$. Matrica sparivanja je dijagonalno dominantna. Rezultati odgovaraju onim iskazanim u [1].



(a) Ph300



(b) Ph500

Slika 3.12: Matrice sparivanja

Poglavlje 4

Python kod

```
def SVD(B, thr, x=0, y=0 , dim=0):
  # postavljanje po etnih vrijednosti:
  if dim==0:
    P=np.identity(len(B))
    dim=len(B)
    y=dim

    # ova funkcija ra una samo prva dva sv.vektora
  [U,S,V]=np.linalg.svd(B, 2)
  drugi_sv_vektor=U[:,1]
  indeksi_za_sortiranje=np.argsort(drugi_sv_vektor)
  sortirani_drugi_sv_vektor=np.sort(drugi_sv_vektor)

  # kreiranje permutacijske matrice
  dimB=len(drugi_sv_vektor)
  niz=np.arange(dimB) # [0, 1, ..., dimB]
  Ptilda = np.zeros((dimB, dimB), dtype=int)
  Ptilda[niz, indeksi_za_sortiranje]=1

  # permutacijska matrica u po etnoj dimenziji
  P1tilda=np.identity(dim)
  P1tilda[x:y, x:y]=Ptilda

  # permutiranje matrice B
  Btilda=np.dot(np.dot(Ptilda,B), np.transpose(Ptilda)) # Ptilda * B
                                                          * Ptilda'

  # tra imo promjenu u predznaku
  ind=(np.where(np.diff(np.sign(sortirani_drugi_sv_vektor))))[0][0]

  # izdvajanje blokova B_1 i B_2
  B_1=Btilda[0:ind+1, 0:ind+1]
```

```
B_2=Btilda[ind+1:dimB, ind+1:dimB]

# ra unanje norme 1 matrica B_1 i B_2
norma_1=(B_1.sum().sum())/ind
norma_2=(B_2.sum().sum())/(dimB-ind)

if ((norma_1 > thr) and (norma_2 > thr)):
  m1,n1,P1 = SVD(B_1, thr, x, x+ind+1, dim) # m1,2 je br. klastera
                                         , n1,2 dimenzije klastera
  m2,n2,P2 = SVD(B_2, thr, x+ind+1, y, dim) # P1,2 je trenutna
                                         matrica permutacije
  P=np.identity(dim)
  P[x:x+ind+1, x:x+ind+1] = P1[x:x+ind+1, x:x+ind+1]
  P[x+ind+1:y, x+ind+1:y] = P2[x+ind+1:y, x+ind+1:y]
  return m1+m2, np.append(n1,n2), np.dot(P, P1tilda)
else:
  return 1, [dimB], P1tilda
```

Bibliografija

[1] D.SZYLD E. VIRNIK. D. FRITZSCHE, V. MEHRMANN, *An SVD approach to identifying metastable states of Markov chains*, Electron. Trans. Numer. Anal. **29** (2008), 46–69.

[2] X. FAN H. JIANG, *The Two-Step Clustering Approach for Metastable States Learning*, Int. J. Mol. Sci. (2021), 22.

[3] M. McCAFFREY, *Markov Chains - A Random Walk Through Particles, Cryptography, Websites, and Card Shuffling*, Department of Mathematics, University of Notre Dame (2017).

[4] A. FISCHER C. SCHÜTTE P. DEUFLHARD, W. HUISINGA, *Identification of almost invariant aggregates in reversible nearly uncoupled Markov chains*, Linear Algebra and its Applications **315** (2000), br. 1-3, 39–59.

[5] R. TIFENBACH, *On an SVD-based algorithm for identifying meta-stable states of Markov chains*, Electron. Trans. Numer. Anal. **38** (2011), 17–33.