

Otkrivanje meta stabilnih stanja Markovljevog lanca

Dijana Pratljacic, Vice Perica, Niko Perica

Uvod

- ▶ Stohastička matrica B opisuje prijelaze između stanja biomolekule, pri čemu su mjerena opterećena određenom pogreškom.
- ▶ Želimo pronaći permutacijsku matricu P takvu da vrijedi

$$P^T BP = A + E,$$

gdje A predstavlja strukturu metastabilnih stanja, a E matricu pogreške.

- ▶ **Metastabilna stanja** su skupine stanja u kojima Markovljev lanac ostaje „zarobljen“ vrlo velik dio vremena te ih rijetko napušta.

Pristup problemu

- ▶ Računamo singularni vektor koji odgovara **drugoj najvećoj svojstvenoj vrijednosti** matrice B .
- ▶ Sortiranjem komponenti tog vektora dobivamo prirodno grupiranje stanja.
- ▶ Poredak dobiven sortiranjem daje nam **permutaciju** koju primjenjujemo na matricu B .
- ▶ Ovim pristupom **nije potrebno unaprijed znati broj blokova** metastabilnih stanja.
- ▶ **Ne trebamo prepostavku reverzibilnosti** Markovljevog lanca.
- ▶ Izbjegavamo problem pronalaženja **Perronovog klastera**, koji može biti teško identificirati ili može sadržavati prevelik broj svojstvenih vrijednosti.

Tehnički detalji potrebni za algoritam

- ▶ **Perron–Frobenius teorem** Neka je $A \geq 0$ ireducibilna matrica sa spekralnim radijusom $\rho(A)$. Tada je $\rho(A)$ jednostavna svojstvena vrijednost i postoji pozitivan lijevi i desni svojstveni vektor koji joj odgovaraju. Svaki pozitivan svojstveni vektor nenegativne matrice odgovara upravo spekralnom radijusu $\rho(A)$.
- ▶ **SVD dekompozicija**
- ▶ **Sign structure**

$$\text{sign}(s_i) := [\operatorname{sgn}(\tilde{u}_1)_i, \dots, \operatorname{sgn}(\tilde{u}_m)_i]$$

- ▶ Jednak sign structure = isto stanje, različit sign structure = različiti blokovi.

Tehnički detalji potrebni za algoritam (nastavak)

- ▶ **Rekurzivno grupiranje:** u svakom koraku dijelimo sustav na dva bloka i sortiramo ih dalje.
- ▶ **Kada stati?** Uvodi se **v-norma** koja mjeri autonomnost bloka.
- ▶ Mi koristimo **1-normu** da izbjegnemo računanje stacionarne distribucije.
- ▶ **Nearly uncoupled blokovi:** dovoljno velika 1-norma dijagonalnih blokova znači stabilne metastabilne blokove i zaustavljanje rekurzije.

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

Algoritam otkrivanja blokova

1. Računajmo drugi svojstveni vektor u_2 matrice B .
2. Sortirajmo u_2 u rastućem poretku, što nam daje permutaciju P .
3. Identificirajmo potencijalne blokove B_1 i B_2 koristeći promjenu predznaka u u_2 .
4. Veličina prvog bloka je broj negativnih vrijednosti, a drugog broj pozitivnih.
5. Ako je norma dijagonalnih blokova veća od praga δ , tada smo pronašli dva bloka; razdvojimo ih i nastavljamo proceduru od koraka 1.
6. Inače, trenutni blok ne može biti razdvojen.

Resultati

