Identifikacija metastabilnih stanja Markovljevih lanaca

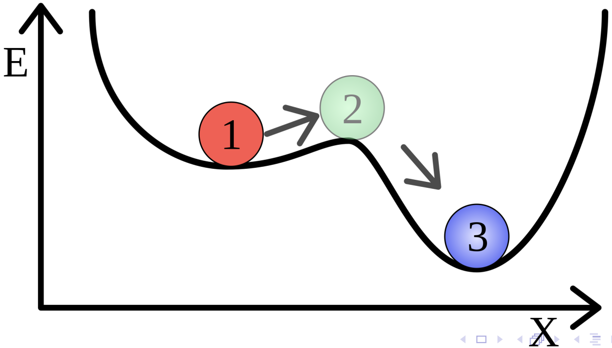
Luka Čabraja, Krunoslav Ivanović, Lucija Kovačević

Prosinac 2022.

Pozadina problema

Metastabilna stanja

- dinamički sustavi žele doći u stanje najmanje energije
- **metastabilna** stanja su međustanja u kojima se sustav ima tendenciju zadržati
- potrebna je veća energija da se sustav izbaci iz metastabilnog stanja



Cilj i ideje

- Problem modeliramo kao Markovljev lanac na konačnom skupu stanja.
- Cilj nam je identificirati particiju skupa stanja tako da je vjerojatnost prelaska iz jedne klase u drugu mala.
- U idealnom slučaju, postojati će permutacija Q takva da vrijedi

$$Q^T P Q = \begin{bmatrix} B_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & B_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & B_m \end{bmatrix},$$

gdje je P matrica prijelaza, a $B_1, \dots, B_m$ kvadratne matrice.

Teorijska pozadina

- osnovni pojmovi teorije grafova, osnovni pojmovi teorije Markovljevih lanaca, grafovi inducirani matricama, ireducibilnost...

Perron-Frobeniusov teorem

Neka je $T \geq 0$ ireducibilna matrica sa spketralnim radijusom $\rho(T)$. Tada je $\rho(T)$ svojstvena vrijednost kratnosti jedan i T ima pozitivan lijevi te pozitivan desni svojstveni vektor pridružen svojstvenoj vrijednosti $\rho(T)$. Štoviše, svaki pozitivan svojstveni vektor x nenegativne matrice T je pridružen $\rho(T)$.

Teorijska pozadina

SVD dekompozicija

Neka je $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Tada, postoje ortogonalne matrice $U = [u_1, \ldots, u_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ i $V = [v_1, \ldots, v_n] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ takve da je

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

gdje je $\Sigma = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_n)$, gdje su $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n \geq 0$ singularne vrijednosti matrice A. Vektore $u_1, \ldots, u_n$, odnosno, $v_1, \ldots, v_n$ nazivamo lijevim, odnosno, desnim singularnim vektorima matrice A.

Stvarni slučaj

- U stvarnosti, matrica P je perturbirana, dakle, zapravo tražimo permutaciju Q takvu da je

$$Q^T P Q = B + E,$$

gdje je B ista kao gore, a E takva da su joj svi elementi mali.

Različiti pristupi

- Teorija iz idealnog slučaja nam daje motivaciju za heuristike koje bi mogle raditi na konkretnom problemu.
- Prvi pristup se bazi na Perronovom klasteru, odnosno, skupu svojstvenih vrijednosti matrice P oko jedinice, odvojenih od ostalih svojstvenih vrijednosti.
- Drugi pristup koristi singularni vektor druge najveće singularne vrijednosti te pronalazi permutaciju temeljenu na njemu.
- Oba pristupa imaju prednosti i nedostatke, koje ćemo detaljnije analizirati.

Perronov klaster

Perronov klaster

Pretpostavljamo da je matrica prijelaza primitvna, odnosno, da postoji m t.d. $P^m > 0$.
Perron-Frobeniusov teorem nam daje da je jedinica svojstvena vrijednost, čiji je desni svojstveni vektor konstantan, a lijevi svojstveni vektor *stacionarna distribucija* Markovljevog lanca.
U slučaju kada je matrica prijelaza P blok-stohastička s k blokova, svojstveni potprostor za $\lambda = 1$ razapet je s k vektora oblika

$$\chi_{A_i} = (0, \dots, 0, {e_i}^T, 0, \dots, 0)^T, i = 1, \dots, k.$$

Kao posljedicu imamo sljedeći teorem

Perronov klaster

Za danu blok-dijagonalnu matricu prijelaza P koja se sastoji od reverzibilnih, primitivnih blokova, stacionarnu distribuciju $\pi > 0$ i π ortogonalnu bazu $X_1, \ldots, X_k$ svojstvenog potprostora za $\lambda = 1$, definiramo za svako stanje i njegovu strukturu predznaka

$$s_i \mapsto (\mathrm{sign}((X_1)_i), \ldots, \mathrm{sign}((X_k)_i)).$$

Tada:

1. invarijante klase su skupovi stanja s istom strukturom predznaka;
2. različite invarijantne klase imaju različite strukture predznaka.

Perturbacije

Naravno, naš slučaj u načelu nije idealan, nego imamo perturbacije. Uz uvjete regularnosti, vrijedi

Perronov klaster

1. Perronova svojstvena vrijednost $\lambda_1(\varepsilon) = 1$;
2. klaster $k - 1$ svojstvenih vrijednosti $\lambda_2(\varepsilon), \ldots, \lambda_k(\varepsilon)$ koje se približavaju jedinici kada $\varepsilon \to 0$;
3. ostatak spektra, koji je ograničen od jedinice, kada $\varepsilon \to 0$.

Broj blokova koje tražimo dobivamo analizom pada spektra, odnosno, pogledamo spektar i procijenimo k.

Rezultat za svojstvene vektore

Struktura perturbiranih svojstvenih vektora

Neka je $P(\varepsilon)$ familija matrica koja zadovoljava uvjete regularnosti. Tada, za sve realne ε, postoje svojstveni vektori $X_1(\varepsilon), \ldots, X_k(\varepsilon)$ za koje vrijedi:

1. svojstveni vektor pridružen Perronovoj svojstvenoj vrijednosti $\lambda_1(\varepsilon) = 1$, dan s $X_1(\varepsilon) = (1, \ldots, 1)^T$;
2. skup $k-1$ svojstvenih vektora koji odgovaraju ostalim svojstvenim vrijednostima Perronovog klastera blizu jedinice oblika

$$X_i(\varepsilon) = \sum_{j=1}^{k} (a_{ij} + \varepsilon b_{ij}) \chi_{A_j} + \varepsilon B + O(\varepsilon^2).$$

Najmanji kvadrati

Uočimo da je gornja relacija zapravo oblika

$$X = \chi \mathcal{A}^{-1} + \varepsilon B + O(\varepsilon^2),$$

gdje je $X = [X_1 \cdots X_k]$, $\chi = [\chi_{A_1} \cdots \chi_{A_k}]$, $\mathcal{A}$ je $k \times k$ matrica koeficijenata koji ovise o ε, a B $n \times k$ matrica. U duhu perturbacija, vidimo da $\mathcal{A}$ možemo dobiti iz problema najmanjih kvadrata

$$\left\| \chi_{A_i} - \sum_{j=1}^{k} a_{ji} X_j \right\|_{\pi} \to \min .$$

Matrica $\mathcal{A}$ nam može poslužiti za procjenu greške.

Algoritam

Osnovna ideja algoritma je da vjerujemo da se struktura predznaka očuvala na dovoljno velikim elementima. Prvo pogledamo kako podijeliti te dovoljno velike elemente, a nakon tog podjelu proširimo na cijeli prostor.

1. Normiramo svojstvene vektore po pozitivnim i po negativnim vrijednostima i odaberemo skup stanja

$$\mathcal{S} = \left\{ s \in \{1, 2, \ldots, n\} : \max_{i=2,\ldots,k} |\tilde{X}_i(s)| > \delta \right\}.$$

Algoritam

2. Ovisno o strukturama predznaka u $\mathcal{S}$, konstruiramo k klasa ekvivalencije. Time ćemo particionirati $\mathcal{S}$ u k klasa. Kasnije ćemo detaljnije objasniti kako se to radi.
3. Riješimo restringirani problem najmanjih kvadrata

$$\|\chi_{\mathcal{S}_i} - \sum_{j=1}^{k} a_{ji} X_j|_{\mathcal{S}}\| \to \min, i = 1, \ldots, k.$$

Nakon što to izračunamo, proširimo preko

$$\chi_i = \sum_{j=1}^{k} a_{ji} X_j,$$

za $i = 1, \ldots, n$. Sada odredimo klase kao

$$A_j = \{s \in \{1, \ldots, n\} \colon \chi_j(s) > \chi_i(s), \forall i \neq j\}.$$

Podjela u drugom koraku

Za parametar θ i stanje s definiramo strukturu predznaka

$$\sigma(s,\theta) = (\sigma_1, \dots, \sigma_k), \quad \sigma_i = \begin{cases} \mathrm{sign}(\tilde{X}_i(s)) & |\tilde{X}_i(s)| > \theta \\ 0 & \text{inače.} \end{cases}$$

Definiramo i uređaj $<$ na $\Sigma(\mathcal{S},\theta)$ gdje

$$\sigma^i < \sigma^j \iff \sigma^i \sim \sigma^j \wedge (\sigma_l{}^j = 0 \implies \sigma_l{}^i = 0), l = 1, \dots, k.$$

Sada iz bojanja grafa maksimalnih elemenata u k boja možemo dobiti particiju u k klasa (nemaksimalne elemente pridružimo nekom koji je od njega veći). Bojanje dobivamo greedy algoritmom.

Pristup preko SVDa

Slično kao u pristupu kod Perronovog klastera, opet važnu ulogu igra struktura predznaka i teorija perturbacija.

Struktura predznaka

Neka je A blok-stohastička matrica s m jednostavno povezanih dijagonalnih blokova Neka je $A = U\Sigma V^T$ SVD dekomopozicija matrice A i neka su $u_1, \ldots, u_m$ m lijevih singularnih vektora koji odgovaraju najvećim singularnim vrijednostima blokova $A_1, \ldots, A_m$, redom. Asocirajmo stanje s_i s

$$\mathrm{sign}(s_i) := [\mathrm{sign}(u_1)_i, \ldots, \mathrm{sign}(u_m)_i].$$

Tada:

1. stanja koja pripadaju istom bloku A imaju istu strukturu predznaka;
2. stanja koja pripadaju različitim blokovima imaju različite strukture predznaka.

Pod perturbacijama

Neka je $B = A + \varepsilon R$ perturbirana stohastička matrica, gdje su A i B također stohastičke. Za dovoljno male ε, $T(\varepsilon) = BB^T$.

Neka je $T(\varepsilon)$ kao gore i neka su $\lambda_1(\varepsilon) \geq \lambda_2(\varepsilon)$ njegove dvije najveće svojstvene vrijednosti. Pretpostavimo da se neperturbirana matrica T može permutirati da bude blok-stohastička s m ireducibilnih blokova. Neka su $\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots \lambda_m$ m najvećih svojstvenih vrijednosti koje pripadaju svakom od blokova. Tada se perturbirani svojstveni vektor $\varphi_2(\varepsilon)$, koji je pridružen svojstvenoj vrijednosti $\lambda_2(\varepsilon)$ može prikazati kao

$$\varphi_2(\varepsilon) = \sum_{j=1}^{m} (a_j + \varepsilon b_j) u_j + \varepsilon \sum_{j=m+1}^{n} \langle \varphi_j, \varphi_2^{(1)} \rangle \varphi_j + O(\varepsilon^2).$$

Problemi u pretpostavkama

Naravno, kao što smo najavili, naš pristup ima radikalne pogreške. Dokazi oba teorema koji su temelj našeg algoritma temelje se na dvije činjenice:

- za blok dijagonalnu matricu $A = \mathrm{diag}(A_1, \ldots, A_m)$, svaki od blokova A_i je jednostavno povezan pa je $A_i {A_i}^T$ ireducibilan;
- drugi najveći singularni vektor je linearna kombinacija m najvećih singularnih vektora svakog od blokova $A_1, \ldots, A_m$.

Obje ove tvrdnje ne vrijede u kontekstu u kojem su navedene.

Iredubilnost od AA^T

U teoremu je pretpostavljeno da jednostavna povezanost svakog od blokova A_i povlači da će $A_i {A_i}^T$ biti ireducibilan. Neka je

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \implies AA^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Lagano se vidi da je graf induciran matricom A jednostavno povezan, dok graf induciran matricom AA^T nije ni povezan pa je sigurno reducibilan. Trebaju nam novi pojmovi.

Bigraf asociran s matricom

Treba nam novi pojam.

Bigraf asociran s matricom

Neka je M matrica reda $m \times n$. Neka je

$$X = \{x_1, \dots, x_m\}, Y = \{y_1, \dots, y_n\}.$$

Bigraf asociran s M (u oznaci $B(M)$) je neusmjeren bipartitan graf na $V = X \cup Y$ gdje postoji brid između x_i i y_j ako i samo ako je $m_{ij} \neq 0$.

Pravi uvjeti teorema

Vrijedi sljedeće:

Pravi uvjet za povezanost

Neka je A stohastička matrica. Tada je AA^T ireducibilna ako i samo ako $B(A)$ ima točno jednu povezanu komponentu[1]. Štoviše, A^TA je ireducibilna ako i samo ako je $B(A)$ povezan.

[1] dakle, graf se sastoji od nekog povezanog podgrafa i izoliranih vrhova

Linearna kombinacija za drugi singularni vektor

Neka je

$$A = \operatorname{diag}(A_1, \ldots, A_m)$$

blok-stohastička matrica i neka je $B = A + \varepsilon R$ kao u prethodnom potpoglavlju. Da bi opisani algoritam radio, potrebne su sljedeće četiri pretpostavke:

1. m najvećih singularnih vrijednosti za A moraju biti $\sigma_1(A_1), \ldots, \sigma_1(A_m)$;
2. bilo koji lijevi singularni vektor za A asociran s nekom od m najvećih singularnih vrijednosti mora biti oblika

$$\varphi = \begin{bmatrix} \alpha_1 u_1(A_1) \\ \vdots \\ \alpha_m u_1(A_m) \end{bmatrix},$$

gdje je $u_1(A_i)$ lijevi singularni vektor od A_i asociran s $\sigma_1(A_i)$;

Linearna kombinacija za drugi singularni vektor

3. svaki lijevi singularni vektor $u_i(A_i)$, asociran s $\sigma_1(A_i)$ mora imati ili sve vrijednost pozitivne, ili sve vrijednosti negativne;
4. parametar ε mora biti dovoljno malen da εR ne mijenja strukturu predznaka singularnih vektora.

Da se dokazati da ako prva tri uvjeta vrijede, postoji dovoljno $\delta > 0$ tako da četvrti uvjet vrijedi za sve $0 < \varepsilon < \delta$.
Jedan od konkretnih slučajeva u kojima su zadovoljena oba uvjeta jest ako je A dvostruko stohastička matrica[2] te je $B(A)$ povezan.

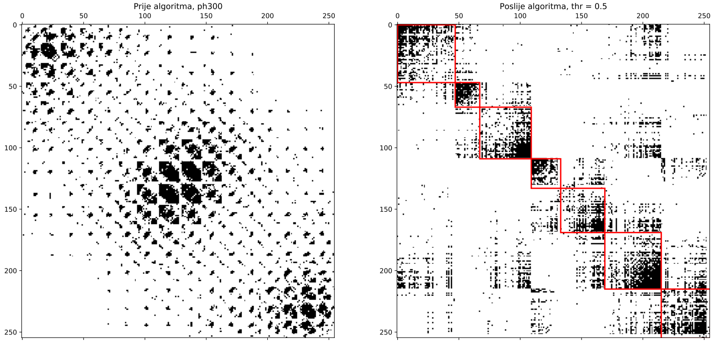
[2] stohastička i u redcima, i u stupcima

Algoritam

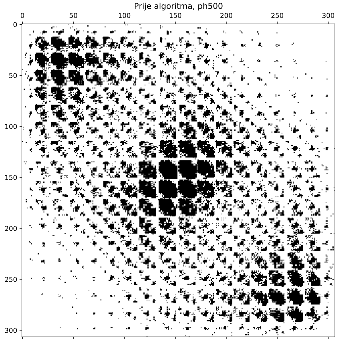
1. algoritam prima matricu B i vrijednost prihvaćanja $1 - \delta$;
2. izračunamo drugi singularni vektor matrice B i napravimo particiju na osnovu predznaka;
3. ako su novodobiveni blokovi B_1 i B_2 u $\nVdash$-normi veći od $1 - \delta$, prihvaćamo bisekciju i rekurzivno nastavljamo dijeliti svaki od blokova
4. ako nisu, završavamo taj korak

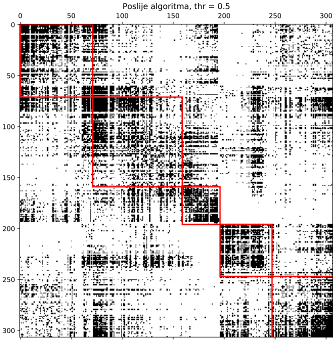
Algoritam vraća permutacijsku matricu P i veličine dobivenih blokova.

Ph300

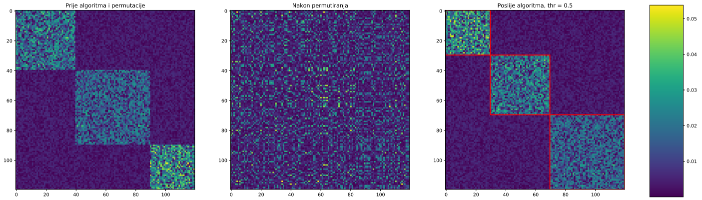

Prije algoritma, ph300
0
50
100
150
200
250
Poslije algoritma, thr = 0.5

Ph500

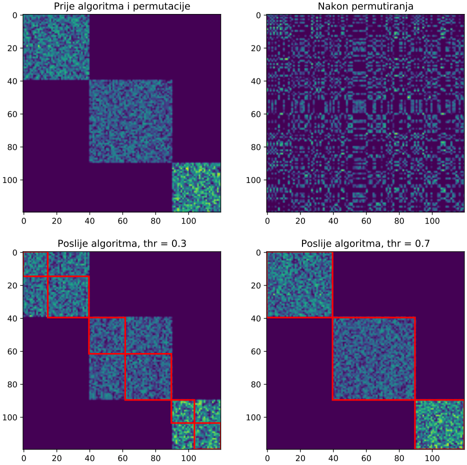

Prije algoritma, ph500
0
50
100
150
200
250
300


Poslije algoritma, thr = 0.5
0
50
100
150
200
250
300

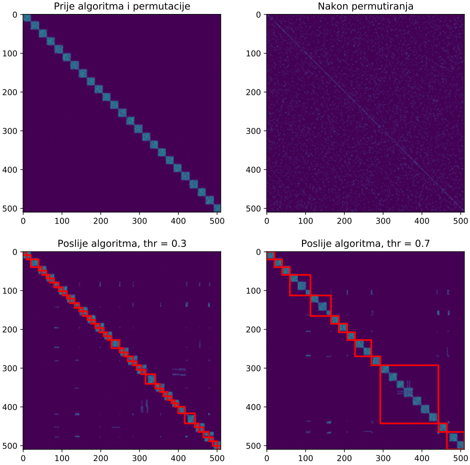
Slučajno generirane matrice



$1 - \delta$ je važan!



Osjetljivost na velike perturbacije



Osjetljivost na čiste cikluse