# Pronalazak metastabilnih stanja Markovljevih lanaca

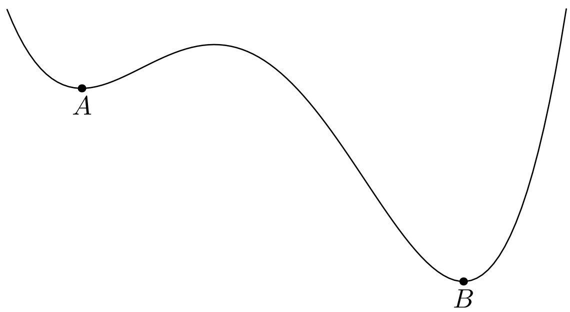
Luka Čabraja, Krunoslav Ivanović, Lucija Kovačević

Prosinac, 2022.

U ovom seminarskom radu bavit ćemo se metodama pronalaska metastabilnih stanja Markovljevih lanaca. Metode ćemo testirati na umjetnim primjerima koje ćemo sami generirati (uz diskusiju o metodi generiranja) te konkretnim primjerima iz prakse.

## 1. Metastabilna stanja

Metastabilnost je fenomen koji se javlja u raznim fizikalnim, kemijskim, biološkim, ekonomskim i drugim sustavima. Najjednostavniji fenomen u kojem se javlja metastabilnost je prikazan na slici.




Naime, zamislimo da imamo kuglu u gravitacijskom polju. Znamo da je stanje najmanje energije upravo ono koje je najniže u odnosu na naš referentni sustav, odnosno, konkretno, stanje $B$. Također, znamo da sustav prirodno teži stanju najmanje energije. No, ako promotrimo stanje $A$, vidimo da je ono lokalni minimum energije, pa ako se naša kugla nađe u stanju $A$, kugla će se u tom stanju zadržati sve dok ne doživi dovoljno velik vanjski impuls koji će je iz tog stanja izbaciti.

U našoj konkretnoj primjeni, promatramo metastabilna stanja proteina. Naime, znamo da 3D struktura proteina određuje njegova svojstva te da različita stanja imaju različitu energiju. Ako znamo prepoznati metastabilna stanja, možemo preko njih otkrivati više o strukturi molekula.

Teorija metastabilnosti je iznimno duboka teorija pa se mi ograničavamo isključivo na najjednostavniji slučaj. Prvo, promatramo sustav koji se može opisati Markovljevim lancem. Naime, kako je energija funkcija stanja, naš sustav nema „pamćenje" pa je primjereno opisati ga Markovljevim lancem. Također, svi Markovljevi lanci koje promatramo će biti zadani na konačnom skupu stanja.

## 2. Generalna teorija

Prije svega, moramo definirati neke pojmove koje ćemo koristiti te citirati lemme i teoreme koji su nam potrebni kroz ovaj seminar.

**Definicija 2.1.** Vektor, odnosno, matrica je **pozitivan** (u oznaci $v > 0$, odnosno, $T > 0$) ako su svi njeni elementi pozitivni.

**Definicija 2.2.** Matrica $T$ je **reducibilna** ako postoji permutacijska matrica $P \in \mathbb{R}^{n\times n}$ takva da je

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

gdje su $T_{11}$ i $T_{22}$ kvadratne matrice. Inače je matrica **ireducibilna**.

**Definicija 2.3.** Neka je $A$ kvadratna matrica reda $n$. Definiramo $\Gamma(A)$ kao usmjereni graf s $n$ vrhova $v_1, \dots, v_n$ takav da postoji brid iz $v_i$ u $v_j$ ako i samo ako je $a_{ij} \neq 0$.

**Definicija 2.4.** Neka je $G$ usmjeren graf s vrhovima $v_1, \dots, v_n$. Kažemo da je $G$ **strogo povezan** ako za sve $i \neq j$ postoji put iz $v_i$ u $v_j$. Kažemo da je $G$ **jednostavno povezan** ako za sve $i \neq j$ postoji ili put iz $v_i$ u $v_j$, ili put iz $v_j$ u $v_i$.

**Lemma 2.5.** Matrica $A$ je ireducibilna ako i samo ako je njen graf $\Gamma(A)$ strogo povezan.

**Definicija 2.6.** Matrica $T$ je **(strogo) dijagonalno dominantna** ako je

$$|t_{ii}| > \sum_{j\neq i} |t_{ij}|,$$

za sve $i = 1, 2, \dots, n$.

**Definicija 2.7.** Stohastički proces na konačnom skupu stanja $\{s_1, \dots, s_n\}$ je **vremenski homogen Markovljev lanac** ako vjerojatnosti prijelaza iz jednog stanja u drugo ovisi samo o trenutnom stanju (odnosno, ne ovisi o vremenu i prošlosti). Matrica $T = (t_{ij})$ za koju vrijedi $t_{ij} \geqslant 0$ te

$$\sum_{j=1}^{n} t_{ij} = 1, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

je **stohastička** matrica po redcima. Svaki Markovljev lanac na konačnom skupu stanja je jedinstveno određen početnom distribucijom i stohastičkom matricom koju zovemo **matricom prijelaza** Markovljevog lanca.

**Definicija 2.8.** Distribucija $\pi$ je stacionarna za Markovljev lanac $X$ s matricom prijelaza $T$ ako vrijedi

$$\pi^T T = \pi^T.$$

**Definicija 2.9.** Matrica $A$ je **blok-stohastička** matrica ako je blok-dijagonalna, tj. oblika

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

za neke matrice $A_i \in \mathbb{R}^{n_i \times n_i}$ koje su stohastičke te $\sum_{i=1}^{m} n_i = n$. Sa $S_i$ ćemo označavati stanja u bloku $A_i$, a s $A_{ij}$ podmatricu koja se sastoji od elemenata $a_{kl}$, gdje $k \in S_i$, $l \in S_j$.

**Teorem 2.10.** Neka je $T \geqslant 0$ 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 $\rho(T)$.

**Teorem 2.11.** Neka je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Tada, postoje ortogonalne matrice $U = [u_1, \dots, u_n] \in \mathbb{R}^{n\times n}$ i $V = [v_1, \dots, v_n] \in \mathbb{R}^{n\times n}$ takve da je

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

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

## 2.1. Ideje iza algoritama

U ovom seminaru ćemo analizirati dva algoritma, pri čemu veću pozornost obraćamo na SVD pristup. Prvo ćemo generalno iznijeti teoriju i problem kojim se bavimo, a onda u posebnim poglavljima analizirati ta dva pristupa i njihove razlike.

Prije svega, moramo definirati naš problem. Imamo Markovljev lanac na konačnom skupu stanja $S = \{s_1, \dots, s_n\}$ te želimo particionirati taj skup stanja tako da je vjerojatnost prijelaza iz jedne klase u drugu malo vjerojatan. Naravno, definicija "malo vjerojatnog" je dosta proizvoljna te ćemo kasnije ući u detalje.

U idealnom slučaju, imati ćemo takvu particiju da ako uđemo u jednu klasu, više iz nje ne možemo izaći, odnosno, želimo da postoji permutacijska matrica $P$ takva da je $PTP^T$ blok stohastička matrica, odnosno,

$$PTP^T = \begin{bmatrix} A_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & A_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & A_k \end{bmatrix},$$

gdje su $A_1, \dots, A_k$ kvadratne stohastičke matrice.

Naravno, u stvarnosti nećemo moći postići ovako savršen rezultat, nego ćemo u najboljem slučaju imati $PTP^T = A + E$, gdje je $A$ oblika kao gore, a $E$ matrica čiji su elementi dovoljno mali.

# 3. Pristup preko Perronovog clustera

U ovom pristupu, pretpostavljamo da je matrica prijelaza $T$ primitivna, odnosno, da postoji $m \in \mathbb{N}$ takav da je $T^m > 0$. Također, pretpostavljamo da je Markovljev lanac dan matricom $T$ reverzibilan, to jest, da vrijedi

$$\pi_i p_{ij} = \pi_j p_{ji},$$

za sve $i$ i $j$, gdje je $\pi$ stacionarna distribucija.

Osnovni teorem koji će nam trebati jest trivijalna posljedica Perron-Frobeniusovog teorema, no, svejedno ga navodimo.

**Teorem 3.1.** Ako je $P$ primitivna stohastička matrica, vrijedi sljedeće:

1. $\lambda = 1$ je po modulu najveća svojstvena vrijednost te je $\dim(P - I) = 1$;
2. postoje pozitivni lijevi i desni svojstveni vektori za $\lambda = 1$, jedinstveni do na multiplikativnu konstantu.

Štoviše, točno znamo što su nam ti svojstveni vektori. Naime,

$$P\mathbb{1} = \mathbb{1} = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}^T}_{\text{zbog stoh. matrice}}, \quad \pi^T P = \pi^T, \pi = \underbrace{\begin{bmatrix} \pi_1 & \pi_2 & \cdots & \pi_n \end{bmatrix}^T}_{\text{stac. distr.}}$$

Pretpostavljamo da je $\pi_i > 0$ za sve $i$ pa možemo definirati skalarni produkt $\langle \cdot, \cdot \rangle_\pi$ kao

$$\langle x, y \rangle_\pi := x^T \mathcal{D}^2 y = \sum_{i=1}^{n} \pi_i x_i y_i,$$

gdje je $\mathcal{D} = \operatorname{diag}(\sqrt{\pi_1}, \dots, \sqrt{\pi_n})$.

Zbog reverzibilnosti lanca, vrijedi sljedeće.

**Propozicija 3.1.** Ako je $P$ reverzibilna i primitivna stohastička matrica, tada je $P$ simetričan s obzirom na $\langle\cdot,\cdot\rangle_\pi$. Također, vrijedi i:

1. postoji baza $\pi$ ortogonalnih desnih svojstvenih vektora koja dijagonalizira $P$;
2. $\sigma(P) \subseteq [-1, 1]$;
3. $y = \mathcal{D}^2 x$ je bijekcija između lijevih i desnih svojstvenih vektora;
4. $\mathcal{D}P\mathcal{D}^{-1}$ je simetrična (ne nužno stohastička) matrica.

Trebamo definirati sljedeće pojmove.

**Definicija 3.2.** Dan nam je Markovljev lanac s matricom prijelaza $P$ i stacionarnom distribucijom $\pi$. Za dani skup indeksa $I$ definiramo karakteristični vektor

$$e_I = [\mathbb{1}_I(1) \cdots \mathbb{1}_I(n)].$$

Za skupove indeksa $A$ i $B$ definiramo **vjerojatnost prijelaza** iz $A$ u $B$, $w_\pi(A, B)$ kao

$$w_\pi(A,B) := \frac{\sum_{a\in A, b\in B} \pi_a p_{ab}}{\sum_{a\in A} \pi_a} = \frac{\langle e_B, Pe_A\rangle_\pi}{\langle e_A, e_A\rangle_\pi}.$$

**Definicija 3.3.** Ako je $A_1, \ldots, A_k$ particija stanja u $k$ klasa, tada stohastičku $k \times k$ matricu $W_\pi$ definiranu kao $(W_\pi)_{ij} = w_\pi(A_i, A_j)$, za $i, j = 1, \ldots, k$ zovemo **matricom sparivanja** za dekompoziciju.

U slučaju kada je $A = B$, $w_\pi(A, A)$ je vjerojatnost ostanka u $A$. Ako je $w_\pi(A, A) = 1$, kažemo da je klasa $A$ **invarijantna**. Markovljev lanac je **nesparen** ako postoji particija $A_1, \ldots, A_k$ takva da je $w_\pi(A_i, A_j) = \delta_{ij}$, gdje je $\delta_{ij}$ Kroeneckerov delta simbol. U slučaju da je Markovljev lanac nesparen, imamo onaj savršeni slučaj o kojem smo pričali u uvodu, odnosno, postoji permutacija $T$ takva da je

$$PTP^T = \begin{bmatrix} A_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & A_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & A_k \end{bmatrix},$$

gdje su $A_1, \ldots, A_k$ kvadratne stohastičke matrice simetrične s obzirom na $\langle\cdot,\cdot\rangle_\pi$.

U ovom slučaju, ako je svaka od $A_i$ također primitivna, možemo primijeniti teorem s početka poglavlja. Lagano vidimo da je svojstveni potprostor za svojstvenu vrijednost $\lambda = 1$ dimenzije $k$, štoviše, razapet je s $k$ vektora

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

Kao očitu posljedicu, vidimo da se bilo koja baza svojstvenih vektora $X_i$ pridruženih svojstvenoj vrijednosti $\lambda = 1$ može prikazati kao

$$X_i = \sum_{j=1}^{k} a_{ij} \chi_{A_j}.$$

Trivijalna posljedica je da svojstveni vektori pridruženi jedinici imaju konstantan predznak na invarijantnim stanjima. Iz toga, slijedi ključan teorem za našu analizu.

**Teorem 3.4.** Za danu blok-dijagonalnu matricu prijelaza $P$ koja se sastoji od reverzibilnih, primitivnih blokova, stacionarnu distribuciju $\pi > 0$ i $\pi$ ortogonalnu bazu $X_1, \dots, X_k$ svojstvenog potprostora za $\lambda = 1$, definiramo za svako stanje $i$ njegovu strukturu predznaka

$$s_i \mapsto (\text{sign}((X_1)_i), \dots, \text{sign}((X_k)_i)).$$

Tada:

1. invarijante klase su skupovi stanja s istom strukturom predznaka;

2. različite invarijantne klase imaju različite strukture predznaka.

Sada već vidimo kako bi u savršenom slučaju mogli naći dekompoziciju. Naime, nađemo bazu svojstvenog potprostora za $\lambda = 1$, nađemo sve strukture predznaka te nakon tog grupiramo zajedno stanja koja imaju istu strukturu predznaka. Naravno, problem kada nismo u savršenom slučaju je znatno kompliciraniji.

## 3.1. Skoro nespareni Markovljevi lanci

U ovom potpoglavlju želimo analizirati slučaj kada je $P = A + E$, gdje je $A$ blok-dijagonalna stohastička s primitivnim, reverzibilnih podmatricama, a $E$ je matrica šuma, $E = O(\varepsilon)$. Od velike koristi nam je teorija perturbacija u koju nećemo ulaziti, nego ćemo samo navesti rezultate koji će nam omogućiti analizu.

Kao prvo, puštamo da $\varepsilon$ bude slobodan parametar, odnosno, analiziramo strukturu $P(\varepsilon)$ u ovisnosti o perturbaciji $\varepsilon$. Znamo da postoji neki $\varepsilon_*$ takav da je $P = P(\varepsilon_*)$. Pretpostavljamo da vrijede **uvjeti regularnosti**, odnosno, neka je

$$P(\varepsilon) = P(0) + \varepsilon P^{(1)} + \varepsilon^2 P^{(2)} + \cdots$$

familija matrica analitička na domeni oko ishodišta u kompleksnoj ravnini, takva da je $P(\varepsilon)$ reverzibilna i stohastička za realne $\varepsilon$. Štoviše, neka je $P(\varepsilon)$ primitivna za realne $\varepsilon \neq 0$, a $P(0)$ blok-stohastička. Znamo da matrica $P(\varepsilon)$ ima jedinstvenu stacionarnu distribuciju $\pi(\varepsilon)$ za koju pretpostavljamo da je uniformno ograničena od nule, odnosno, postoji $C > 0$ takva da je $\pi_i(\varepsilon) \geqslant C$ za $i = 1, \dots, n$ i realne $\varepsilon$ uključujući i nulu.

Ovi uvjeti regularnosti nam daju da za dovoljno male $\varepsilon \in \mathbb{R}$ spektar matrice $P(\varepsilon)$ možemo podijeliti u tri dijela:

1. Perronova svojstvena vrijednost $\lambda_1(\varepsilon) = 1$;

2. klaster $k - 1$ svojstvenih vrijednosti $\lambda_2(\varepsilon), \dots, \lambda_k(\varepsilon)$ koje se približavaju jedinici kada $\varepsilon \to 0$;

3. ostatak spektra, koji je ograničen od jedinice, kada $\varepsilon \to 0$.

Jednostavno rečeno, za dovoljno male realne $\varepsilon$, postojati će $k$ svojstvenih vrijednosti blizu jedinice, a sve ostale će biti udaljene od jedinice. Taj klaster svojstvenih vrijednosti oko jedinice nazivamo **Perronovim klasterom**.

Ključan je sljedeći teorem.

**Teorem 3.5.** Neka je $P(\varepsilon)$ familija matrica koja zadovoljava gore navedene uvjete regularnosti. Neka je $\Pi_j$ $\pi$-ortogonalna projekcija na svojstveni potprostor razapet vektorom $X_j$ neperturbirane matrice prijelaza $P(0)$. Tada, za sve realne $\varepsilon$, postoje $\pi$ ortonormalni svojstveni vektori $X_1(\varepsilon), \dots, X_k(\varepsilon)$ za koje vrijedi:

1. svojstveni vektor pridružen Perronovoj svojstvenoj vrijednosti $\lambda_1(\varepsilon) = 1$, dan s

$$X_1(\varepsilon) = (1, \dots, 1)^T;$$

2. skup $k-1$ svojstvenih vektora koji odgovaraju ostalim svojstvenim vrijednostima Perronovog klastera blizu jedinice oblika

$$X_i(\varepsilon) = \sum_{j=1}^{k} \alpha_{ij} \chi_{A_j} + \varepsilon X_i^{(1)} + O(\varepsilon^2),$$

gdje

$$X_i^{(1)} = \sum_{j=1}^{k} b_{ij} \chi_{A_j} + \sum_{j=k+1}^{n} \frac{1}{1-\lambda_j} \Pi_j P^{(1)} X_i,$$

gdje su $A_1, \ldots, A_k$ invarijantne klase za $P(0)$, a $a_{ij}, b_{ij}$ realne konstante.

Ono što je zapravo bitno u ovome teoremu jest da imamo zapis u obliku

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

gdje vidimo da ovaj desni izraz $\varepsilon B + O(\varepsilon^2)$ može utjecati na strukturu predznaka, ali za dovoljno male $\varepsilon$ neće, dakle, ima nade za naš algoritam koji se temelji na prepoznavanju predznaka.

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 $\varepsilon$, a $B$ $n \times k$ matrica. U duhu perturbacija, vidimo da $\mathcal{A}$ možemo dobiti iz problema najmanjih kvadrata

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

## 3.2. Algoritam

Naposljetku, konačno smo došli do konkretnog algoritma. Algoritam je u načelu heuristički i naivno je očekivati egzaktno rješenje, no u dovoljno dobrim uvjetima, može raditi.

1. Prvo želimo identificirati stanja sa stabilnom strukturom predznaka. Naime, iz teorema znamo da će se vektori s većim elementima teže perturbirati pa je smisleno u svrhu stabilnosti uzimati veća stanja. Naravno, prvo trebamo nekako uniformno normirati te vektore. Postoji više načina, no, mi radimo sljedeće. Svojstveni vektor $X_i$ rastavimo na pozitivnu i negativnu komponentu, odnosno,

$$X_i = X_i^{+} + X_i^{-},$$

gdje

$$X_i^{+}(s) = \max(0, X_i(s)), \quad X_i^{-}(s) = \min(0, X_i(s)).$$

Sada stavimo

$$\tilde{X}_i = \frac{X_i^{+}}{\|X_i^{+}\|_\infty} + \frac{X_i^{-}}{\|X_i^{-}\|_\infty}.$$

Sada biramo proizvoljan $0 \ll \delta < 1$ i definiramo skup

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

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 na cijeli prostor stanja preko

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

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

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

Podjelu u $k$ grupa u drugom koraku radimo na sljedeći način. Za parametar $\theta$ i stanje $s$ definiramo

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

Ideja je da nas zanimaju samo pozicije koje su dovoljno velike. Neka je

$$\Sigma(\mathcal{S}, \theta) = \{\sigma(s, \theta) \mid s \in \mathcal{S}\},$$

skup svih struktura predznaka s obzirom na $\theta$. Kažemo da su strukture predznaka $\sigma_1$ i $\sigma_2$ ekvivalentne ($\sigma_1 \sim \sigma_2$) ako njihov umnožak po komponentama ima samo nenegativne članove (dakle, tamo gdje su oba različita od nule, imaju istu strukturu predznaka).

Definirajmo sada uređaj $<$ na $\Sigma(\mathcal{S}, \theta)$ gdje

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

Sada uzmemo skup svih maksimalnih elemenata s obzirom na ovu relaciju i induciramo graf na njemu, gdje postoji edge ako i samo ako te dvije strukture predznaka nisu u relaciji. Ako obojimo taj graf u $k$ boja, dobili smo particiju maksimalnog skupa, a ostale možemo staviti u istu klasu s njegovim maksimalnim elementom.

Bojanje na grafu radimo rekurzivno, koristeći greedy algoritam, gdje vrhove s najmanjim stupnjem bojamo zadnje. Kako je za $\theta = 1$ kromatski broj očito jednak 1, te on monotono otpada od $\theta = 0$, binarnim traženjem tražimo $\theta$ za koji možemo naći bojanje u točno $k$ boja.

Nažalost, zbog ograničenog vremena, algoritam nismo stigli implementirati.

# 4. SVD pristup

Ideja koju koristimo u ovom pristupu je načelno slična pristupu kod Perronovog klastera, odnosno, opet želimo iskoristiti strukturu predznaka. Prednost ovog algoritma je što ne moramo unaprijed znati broj klastera, a također je komputacijski jeftiniji, jer ne moramo računati cijeli spektar i svojstvene vektore nego samo drugi singularni vektor (što možemo bez ostatka spektra). Naravno, mi smo u našoj implementaciji koristili cijeli SVD s obzirom da je fokus bio isključivo na radećoj implementaciji.

Unatoč tome što se čini da je ovaj algoritam u svim komponentama bolji od pristupa preko Perronovog klastera, postoje neki problemi u pretpostavkama u originalnom radu vezanom uz ovaj algoritam pa ćemo i diskutirati i dodatne uvjete koji su nam potrebni.

## 4.1. Teorija

Postavke problema su iste kao u pristupu kod Perrona pa nećemo sve opet navoditi. Ključan teorem koji nam treba za ovaj algoritam jest sljedeći.

**Teorem 4.1.** Neka je $A$ blok-stohastička matrica s $m$ jednostavno povezanih dijagonalnih blokova reda $n_1, \dots, n_m$ označenih s $A_1, \dots, A_m$. Neka je $\mathcal{S}_i$ skup $n_i$ vrhova koji odgovaraju bloku $A_i$. Neka je

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

SVD dekomopozicija matrice $A$ i neka su $u_1, \dots, u_m$ $m$ lijevih singularnih vektora koji odgovaraju najvećim singularnim vrijednostima blokova $A_1, \dots, A_m$, redom. Asocirajmo sa svakim stanjem $s_i$ njegovu strukturu predznaka

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

Tada:

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

Jedan od ključnih problema ovog teorema je što ne vrijedi uz navedene pretpostavke, što ćemo kasnije i pokazati te vidjeti koje nam pretpostavke još trebaju.

Naravno, opet, u idealnom slučaju nemamo nikakvih problema, no, pitanje je što se događa pod perturbacijama. Neka je $B = A + \varepsilon R$ perturbirana stohastička matrica, gdje su $A$ i $B$ također stohastičke. Za dovoljno male $\varepsilon$, matrica $T(\varepsilon) = BB^T$ je linearan simetričan operator koji se može zapisati kao

$$T(\varepsilon) = T + \varepsilon T^{(1)} + O(\varepsilon^2),$$

gdje je $T(0) = T = AA^T$ neperturbirani operator. Algoritam se temelji na sljedećem rezultatu:

**Teorem 4.2.** Neka je $T(\varepsilon)$ kao gore i neka su $\lambda_1(\varepsilon) \geqslant \lambda_2(\varepsilon)$ 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

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

Nažalost, ni ovaj teorem nije uvijek istinit, no, kao i u slučaju kod Perronovog klastera, daje motivaciju i nadu da algoritam temeljen na strukturi predznaka može raditi.

Naposljetku, moramo definirati kontekst u kojem promatramo kvalitetu zatvorenosti klasa, što je opet slično kao u Perronovom slučaju.

**Definicija 4.3.** Neka je $B$ stohastička matrica reda $n$ i $v \in \mathbb{R}^n$ pozitivna distribucija. Neka su $S_k, S_l \subseteq \{1, 2, \dots, n\}$ disjunktni podskupovi i neka su $B_k = B(S_k, S_k)$, $B_l = B(S_l, S_l)$ odgovarajuće podmatrice. Tada definiramo **$v$-uvjetnu vjerojatnost prijelaza** iz $B_k$ u $B_l$ kao

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

**Definicija 4.4.** Za bilo koji vektor $v > 0$, definiramo **$v$-normu** matrice $B_{kl}$ kao

$$\|B_{kl}\|_v := w_v(B_k, B_l).$$

Prepoznajemo normu induciranu stacionarnom distribucijom kao poseban slučaj $v$-norme, a mi ćemo se u ovom poglavlju ograničit samo na slučaj $v = \mathbb{1} = [1 \cdots 1]^T$. Posebno, ako je $n_k$ kardinalnost skupa $S_k$, tada je

$$\|B_{kl}\|_1 = \frac{1}{n_k} \sum_{i \in S_k, j \in S_l} |b_{ij}|,$$

što prepoznajemo kao prosječnu sumu redaka matrice.

## 4.2. Algoritam

Algoritam je daleko jednostavniji nego u slučaju Perronovog klastera. Naime, vidimo da za dovoljno male $\varepsilon$, drugi singularni vektor naše matrice je linearna kombinacija singularnih vektora koji prate strukturu predznaka. Kako su singularni vektori ortogonalni, u drugom singularnom vektoru sigurno imamo promjenu u predznaku. Zbog strukture predznaka, znamo da su stanja s različitim predznacima sigurno u različitim klasama. Nakon toga, napravimo bisekciju stanja ovisno o predznaku. Provjerimo zadovoljavaju li naši dobiveni blokovi uvjet zatvorenosti. Ako da, izvršimo tu bisekciju i rekurzivno ponavljamo na svaki od blokova, ako ne, završavamo korak.

Kriterij prihvaćanja/odbacivanja za dobivene blokove $B_1$ i $B_2$ je uvjet

$$\|B_1\|_1 > \delta \quad \text{i} \quad \|B_2\|_1 > \delta,$$

odnosno, ako je uvjet zadovoljen, sa dovoljno velikom vjerojatnošću iz bloka $B_1$ i $B_2$ ostajemo u odgovarajućem bloku pa prihvaćamo bisekciju, a ako nije, onda odbacujemo.

## 4.3. Problem u pristupu

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

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

### 4.3.1. Ireducibilnost $AA^T$

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

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Tada je

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

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

Prije nego što iskažemo pravi slučaj u kojem vrijedi, potrebno je definirati neke nove pojmove.

**Definicija 4.5.** 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 $m_{ij} \neq 0$.

Vrijedi sljedeća propozicija:

**Propozicija 4.1.** Neka je $A$ stohastička matrica. Tada je $AA^T$ ireducibilna ako i samo ako $B(A)$ ima točno jednu povezanu komponentu[1]. Štoviše, $A^T A$ je ireducibilna ako i samo ako je $B(A)$ povezan.

### 4.3.2. Drugi singularni vektor kao linearna kombinacija

Teorem 4.2. je ključan i temelj našeg algoritma, no može se pokazati[2] da ne vrijedi.

Neka je

$$A = \text{diag}(A_1, \dots, A_m)$$

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 $\sigma_1(A_1), \dots, \sigma_1(A_m)$;
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 $\sigma_1(A_i)$;
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 $\varepsilon$ mora biti dovoljno malen da $\varepsilon R$ 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 $0 < \varepsilon < \delta$.

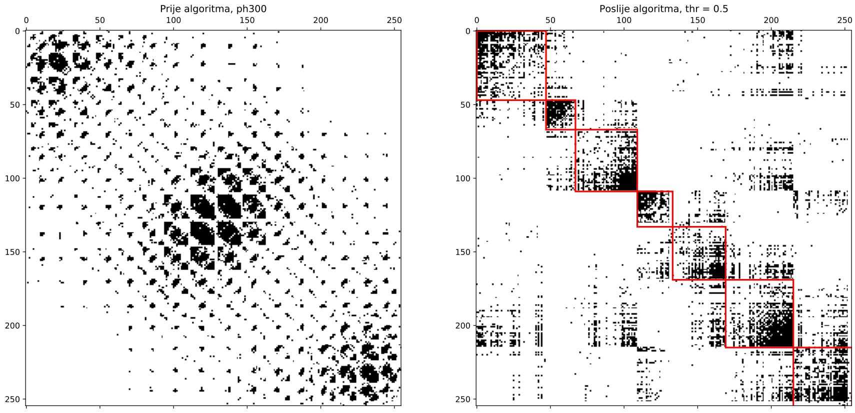
Jedan od konkretnih slučajeva u kojima su zadovoljena oba uvjeta jest ako je $A$ dvostruko stohastička matrica[3] te je $B(A)$ povezan.

## 4.4. Primjeri

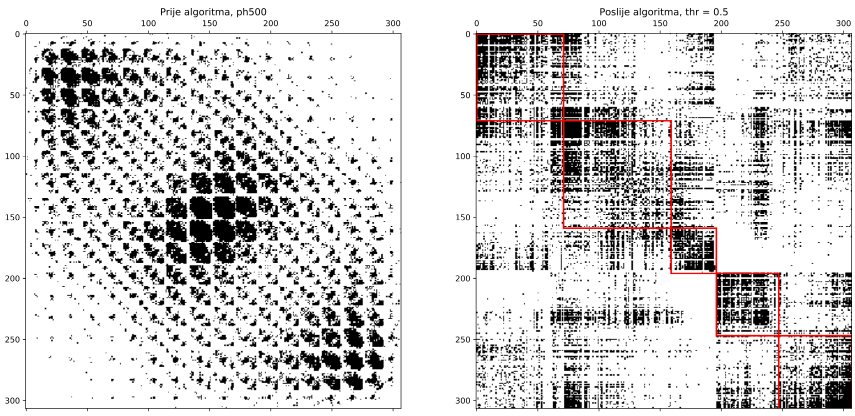
Algoritam smo implementirali u Pythonu te smo testirali na istim primjerima kao u radovima, no i na slučajno generiranim matricama. Rezultati koje smo dobili na danim primjerima su isti oni dobiveni u radovima.

Za ph300 file, dobili smo 7 blokova veličina $[47, 20, 42, 24, 36, 46, 40]$. Koristili smo granicu $1 - \delta = 0.5$.

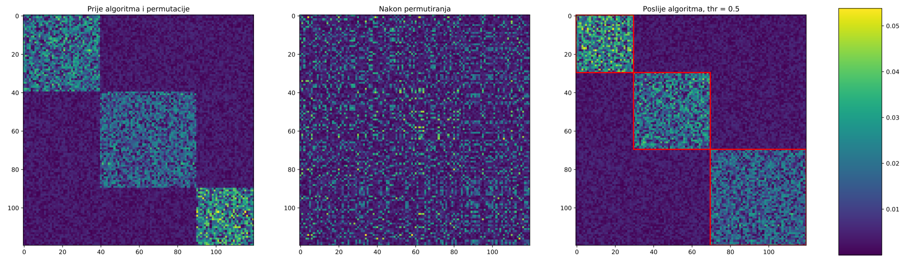
[1]dakle, graf se sastoji od nekog povezanog podgrafa i izoliranih vrhova
[2]u jednom od radova postoji eksplicitan kontraprimjer kojeg nema smisla prepisivati
[3]stohastička i u redcima, i u stupcima



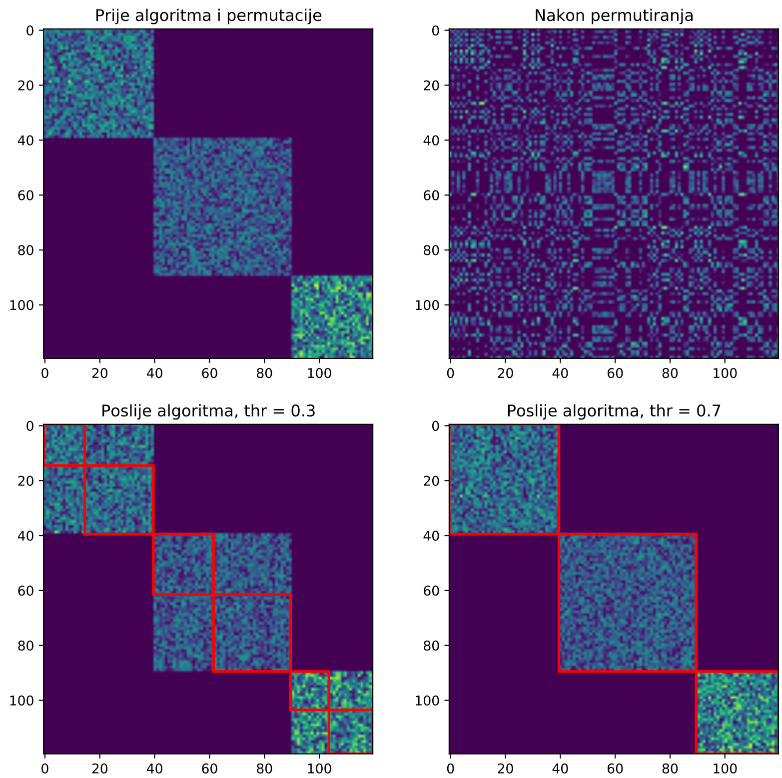

Za ph500 file, dobili smo 5 blokova veličina $[71, 88, 37, 51, 60]$. Koristili smo granicu $1 - \delta = 0.5$.



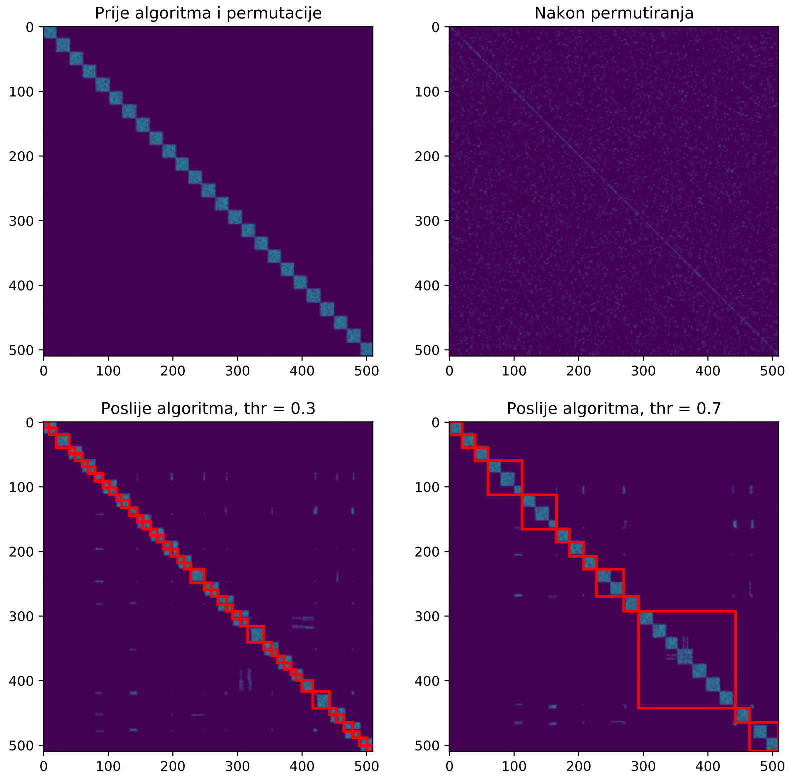

Također, algoritam smo testirali i na generiranim primjerima, gdje je postupak generacije opisan u appendixu.



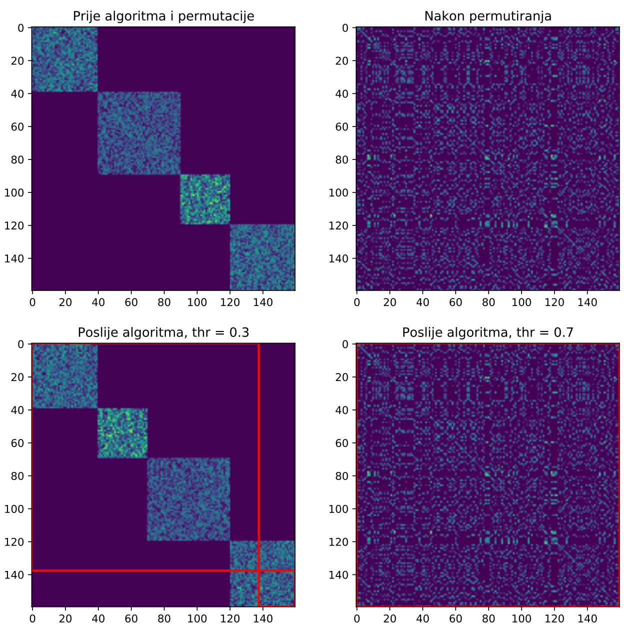

Eksperimentiranjem lagano vidimo da je odabir granice $1-\delta$ uistinu važan.




Također, lagano vidimo da ako je perturbacija prevelika, a struktura se sastoji od jako puno malih blokova (u ovom slučaju 25 blokova sa slučajno odabranim vrijednostima između 20 i 22, $\varepsilon = 10^{-3}$), algoritam neće dobro raditi s danim granicama.




Također, algoritam jako loše radi kada je matrica zapravo blok-stohastička, pretpostavljamo jer ne zna što raditi s nulama u singularnom vektoru.



Naravno, postoje razne modifikacije algoritma i različite metode testiranja kvalitete, no nismo osjetili potrebu za kompliciranjem.

## A. Generiranje stohastičkih matrica

Teorija generacije slučajnih matrica je bogata teorija u koju ovom prilikom nismo imali vremena ulazit. Naravno, postoje razne metode za generirati slučajnu matricu, no mi smo se, u duhu metoda u radovima, odlučili za najjednostavniju. Naime, generirali bi blok-stohastičku matricu, dodali element šuma i onda renormalizirali da opet dobijemo stohastičku matricu.