

# Sviluppi Teorici e Applicativi delle Metriche Entropiche di Rohlin

Dawid Crivelli

26 Aprile 2012

# Indice

## ① Distanze Entropiche

- Rappresentazione partizioni
- Operazioni sulle partizioni
- Distanza e riduzione

## ② Sequenze biologiche

- Virus dell'influenza
- Applicazione distanze di Rohlin

## ③ Sistemi magnetici

- Definizione hamiltoniana
- Lunghezza di correlazione "efficace"
- Ising 2D

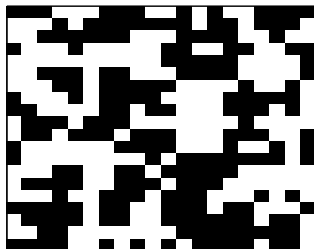
# Distanza di Rohlin

Distanza non tra configurazioni, ma tra **partizioni**

Requisiti:

- uno spazio di probabilità:  $(\mathbf{M}, \mathcal{M}, \mu)$
- un criterio per partizionare (relazione di equivalenza)
- usiamo  $\mathbf{M}$  discreto

Ogni sequenza, reticolo, grafo  $\Rightarrow$  array con relazioni non locali



da  $\mathcal{C}(\mathbf{M})$  a  $\mathcal{Z}(\mathbf{M})$



# Complessità di una partizione

Partizione  $\iff$  scomposizione in **atomi** disgiunti di *misura*  $\mu(A_k)$

Rappresentazione associando ad ogni sito un'etichetta (atomo):

$$A = \{ \underbrace{(1, 2, 3, 4)}_{A_1}, \underbrace{(5, 6)}_{A_2}, \underbrace{(7, 8, 9)}_{A_3}, \underbrace{(10, 11, 12, 13)}_{A_4} \}$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 & 11 & 12 & 13 \\ \color{red}{1} & \color{red}{1} & \color{red}{1} & \color{red}{1} & \color{green}{2} & \color{green}{2} & \color{blue}{3} & \color{blue}{3} & \color{blue}{3} & \color{orange}{4} & \color{orange}{4} & \color{orange}{4} & \color{orange}{4} \end{bmatrix}$$

**Entropia di Shannon:** misura della complessità di una partizione

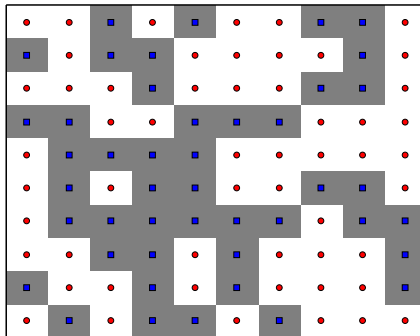
$$H(A) = - \sum_k^n \mu(A_k) \log(\mu(A_k))$$

$H = \log(n)$  (max)  $\iff$  partizione con  $n$  atomi equivalenti

$H = 0$  (min)  $\iff$  partizione banale  $\nu$

# Partizionamento

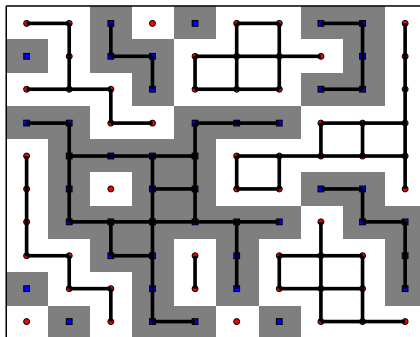
un partizione è una relazione di equivalenza,  $i \sim j \iff i, j \in A_k$



relazione locale(trai vicini)  $\Rightarrow$  partizione globale  
 $\Rightarrow$  colorazione di grafi, algoritmo Hoshen-Kopelman  $\mathcal{O}(N \log(N))$

# Partizionamento

un partizione è una relazione di equivalenza,  $i \sim j \iff i, j \in A_k$

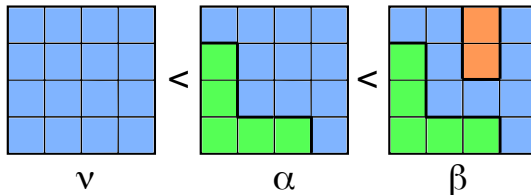


relazione locale(trai vicini)  $\Rightarrow$  partizione globale  
 $\Rightarrow$  colorazione di grafi, algoritmo Hoshen-Kopelman  $\mathcal{O}(N \log(N))$

# Ordinamento parziale e fattori

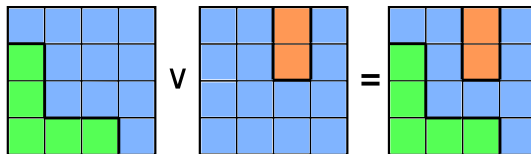
## Ordinamento

- $\alpha$  è **fattore** di  $\beta$
- $\beta$  è più fine di  $\alpha$
- $H(\alpha) < H(\beta)$



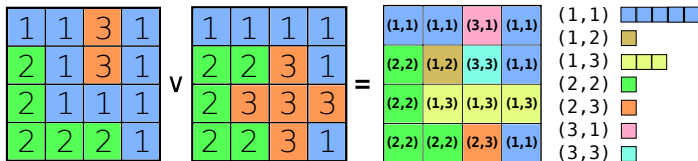
## Prodotto

- proprietà associativa
- elemento neutro  $\nu$
- ogni partizione è prodotto di fattori
- “**minimo comune multiplo**”

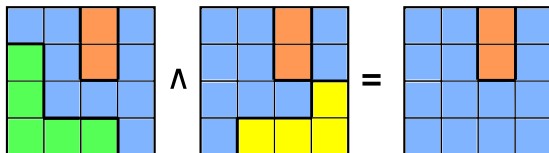


# Prodotti tra partizioni

Partizione prodotto  $\gamma = \alpha \vee \beta$ , più fine:



Partizione intersezione  $\sigma = \alpha \wedge \beta$ , meno fine:



è il “**massimo comune divisore**”

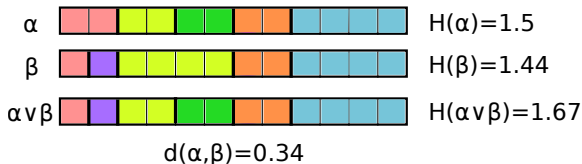


# Distanza di Rohlin

Distanza tra partizioni, tramite l'entropia del prodotto:

$$d_R(\alpha, \beta) = 2 H(\alpha \vee \beta) - H(\alpha) - H(\beta)$$

Partizioni simili hanno piccola distanza:



Funziona perché:

- prodotto idempotente  $\alpha \vee \alpha = \alpha$
- l'entropia del prodotto è crescente  $H(\alpha \vee \beta) \geq H(\alpha), \forall \beta$

Distanza piccola per partizioni estremamente frammentate...

# Riduzione e amplificazione della distanza

Ridurre le partizioni: eliminare il più possibile fattori comuni

Definiamo una mappa dalle partizioni alle ridotte

$$\alpha \otimes \beta \xrightarrow{\text{riduzione}} \hat{\alpha}(\alpha, \beta) \otimes \hat{\beta}(\alpha, \beta)$$

## Algoritmo

- scomposizione delle due partizioni in fattori
- confronto dei fattori tra le due partizioni
- scelta e scarto
- ricomposizione di ciascuna

La distanza è sempre amplificata:

$$R = \frac{d_R(\hat{\alpha} \otimes \hat{\beta})}{d_R(\alpha \otimes \beta)} \geq 1$$

# Confronto tra diverse riduzioni

## Fattori lineari

- **solo** partizioni lineari connesse
- ottimale come riduzione
- semplicissimo da implementare

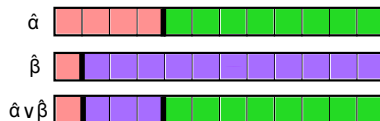
## Fattori dicotomici semplici

- ovunque applicabile
- oneroso computazionalmente
- peggiore nel caso lineare

Partizioni non ridotte



Riduzione tramite fattori lineari



Riduzione tramite fattori dicotomici



# Definizione topologica della distanza

Funzionale entropia indipendente dalla misura  $\mu$ :

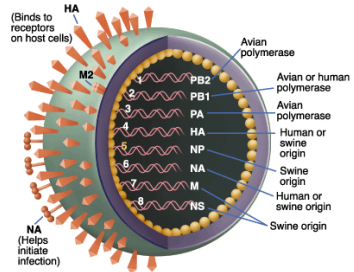
$$H_{\text{top}} = \log(n) \quad \begin{array}{l} n \text{ è il numero di atomi} \\ \text{vedi Adler, Konheim, McAndrew (1965)} \end{array}$$

Una distanza di Rohlin opportunamente definita:

$$d_{\text{top}}(\alpha, \beta) = 2 \log(n_{\alpha \vee \beta}) - \log(n_\alpha) - \log(n_\beta)$$

# Proteine dell'influenza H3N2

- proteine come stringhe
- approccio *black box*
- sequenze lunghe 566
- alfabeto di 24 lettere
- solo 10% mutazioni
- **antigenic drift**



Sequenze a confronto:

```

PGNDNSMATLCLGHHAVPNGTLVKITITNDQIEVTNATELVQSSSTGRICDSPHQILDGENCTLIDALLGDPHCDGFQ
PGNDNSTATLCLGHHAVPNGTLVKITITNDQIEVTNATELVQSSSTDRIICDSPHQILDGGNCTLIDALLGDPHCDGFQ
PGNDNSTATLCLGHHAVPNGTIVKITITNDQIEVTNATELVQSSSTGGICDSPHQILDGENCTLIDALLGDPQCDGFQ
PGNDNSTATLCLGHHAVPNGTIVKITITNDQIEVTNATELVQSSSTGGICDSPHQILDGENCTLIDALLGDPQCDGFQ
PGNDNSTATLCLGHHAVPNGTLVKITITNDQIEVTNATELVQSSSTDKICDSPHQILDGGNCTLIDALLGDPHCDGFQ
PGNDNSTATLCLGHHAVPNGTIVKITITNDQIEVTNATELVQSSSTGGICDSPHQILDGENCTLIDALLGDPQCDGFQ
PGNDNSTATLCLGHHAVPNGTLVKITITNDQIEVTNATELVQSSSTGRICDSPHQILDGENCTLIDALLGDPHCDGFQ

```

# Utilizzo misure entropiche

- 1 Selezione  $N$  sequenze da un database (FluDB, NCBI) e allineamento
- 2 Partizionamento delle sequenze
- 3 Calcolo matrice  $d_{ij}$  di  $N(N - 1)/2$  distanze tra partizioni
- 4  $N$  punti, distanti tra di loro  $d_{ij}$  — grafo completo tra le sequenze

# Utilizzo misure entropiche

- 1 Selezione  $N$  sequenze da un database (FluDB, NCBI) e allineamento
- 2 Partizionamento delle sequenze
- 3 Calcolo matrice  $d_{ij}$  di  $N(N-1)/2$  distanze tra partizioni
- 4  $N$  punti, distanti tra di loro  $d_{ij}$  — grafo completo tra le sequenze

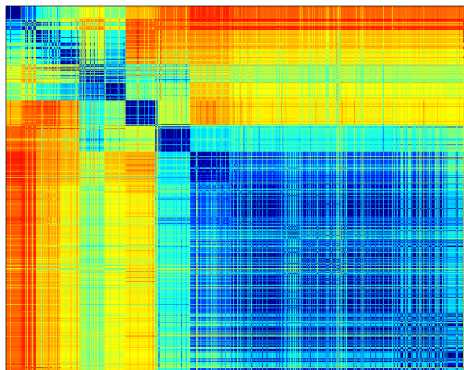
# Utilizzo misure entropiche

- 1 Selezione  $N$  sequenze da un database (FluDB, NCBI) e allineamento
- 2 Partizionamento delle sequenze
- 3 Calcolo matrice  $d_{ij}$  di  $N(N-1)/2$  distanze tra partizioni
- 4  $N$  punti, distanti tra di loro  $d_{ij}$  — grafo completo tra le sequenze



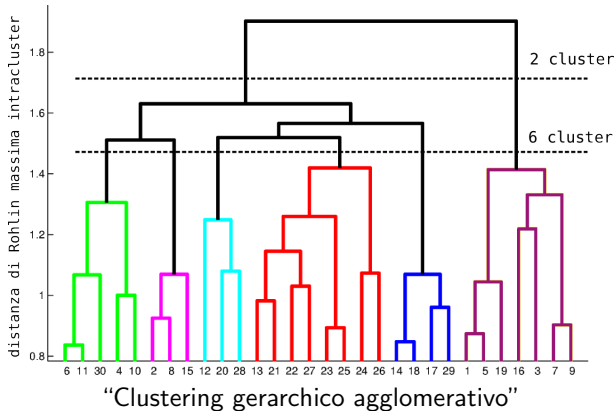
# Utilizzo misure entropiche

- ① Selezione N sequenze da un database (FluDB, NCBI) e allineamento
- ② Partizionamento delle sequenze
- ③ Calcolo matrice  $d_{ij}$  di  $N(N - 1)/2$  distanze tra partizioni
- ④ N punti, distanti tra di loro  $d_{ij}$  — grafo completo tra le sequenze



# Clustering di sequenze

Suddivisione di  $N$  sequenze in  $p$  **clusters**



Altri algoritmi: risultati qualitativamente indistinguibili

# Hamming è poco adatto

A={GHHAVPNGT**L**VKTITTG**R**ICGDP**H**CDGFQNK**E**W}

B={GHHAVPNGT**I**VKTITTG**E**ICGDP**Q**CDGFQNK**K**W}

$d_H(A, B) = \text{\#differenze}$

$d_H(A, B) = 4$

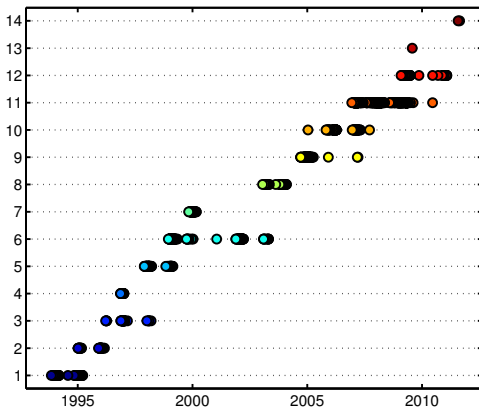
# Hamming è poco adatto

A={GHHAVPNGT**L**VKTITT**G**RICGDP**H**CDGFQNK**E**W}

B={GHHAVPNGT**I**VKTITT**E**ICGDP**Q**CDGFQNK**K**W}

$d_H(A, B) = \text{\#differenze}$

$d_H(A, B) = 4$



Antigenic drift

distanza  $\propto t$

# Distanza e partizionamento ottimale

## Partizioni di segmenti omogenei

L A T G M R N V P P E K T R G I F G A I



L A T **M** M R **C** V P P E K **R** R G I F G A I



$$d_R = 0.13$$

## Partizioni ridotte

# Distanza e partizionamento ottimale

## Partizioni di segmenti omogenei

L A T G M R N V P P E K T R G I F G A I



L A T **M** M R **C** V P P E K **R** R G I F G A I



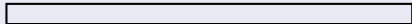
$$d_R = 0.13$$

## Partizioni ridotte

L A T G M R N V P P E K T R G I F G A I



L A T **M** M R **C** V P P E K **R** R G I F G A I



$$d_R = 1.07$$

# Distanza e partizionamento ottimale

## Partizioni di segmenti omogenei

L A T G M R N V P P E K T R G I F G A I



L A T M M R C V P P E K R R G I F G A I



$$d_R = 0.13$$

## Partizioni ridotte

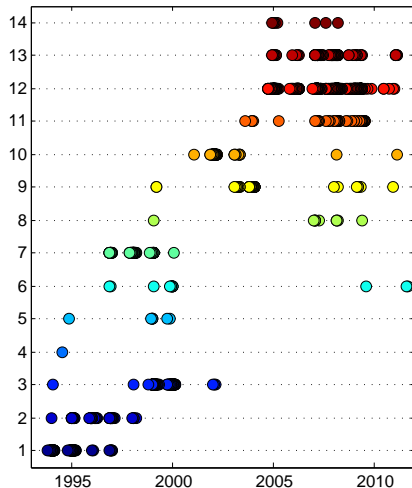
L A T G M R N V P P E K T R G I F G A I



L A T M M R C V P P E K R R G I F G A I



$$d_R = 1.07$$



# Sequenze lineari di spin (Ising 1D)

Modello di sequenza aperta di spin, lunga  $L$ :

$$H = - \sum_i J_{i,i+1} \sigma_i \sigma_{i+1} \quad i \in \{1, \dots, L\}$$

variabili di [link](#):

$$l_i = \sigma_i \sigma_{i+1} \operatorname{sgn}(J_i) \quad i \in \{1, \dots, L-1\}$$

gradi di libertà indipendenti:

$$H = - \sum_i |J_i| l_i$$

generazione indipendente:

$$p(l_i = +) = (1 + e^{-2\beta|J_i|})^{-1} \implies \sigma_{i+1} = l_i \sigma_i \operatorname{sgn}(J_i)$$

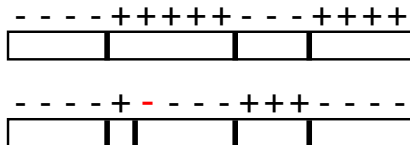


# Lunghezza di correlazione tra partizioni

Se  $J = \text{cost} > 0$

$$\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = \exp \left( -\frac{r}{\xi} \right) \quad \text{con } \xi = -\frac{1}{\log(\tanh \beta J)}$$

**Distanza di Rohlin:** sensibile solo ai bordi dei clusters



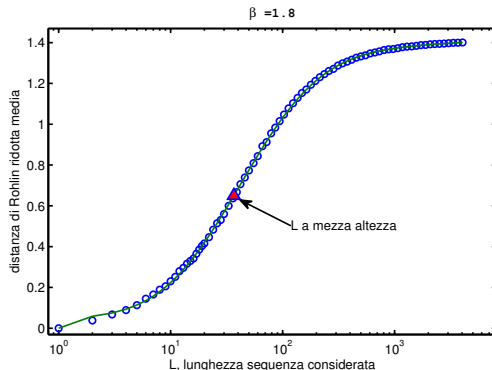
# Variazione lunghezza

il numero dei cluster  $n \propto p L = n(\beta, L) \implies$  entropia crescente in  $L$ !

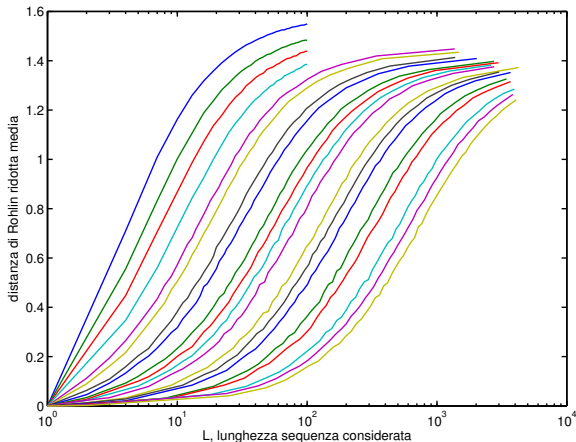
Maggiore complessità delle partizioni  $\implies$  maggiore distanza media

## Estrazione lunghezza

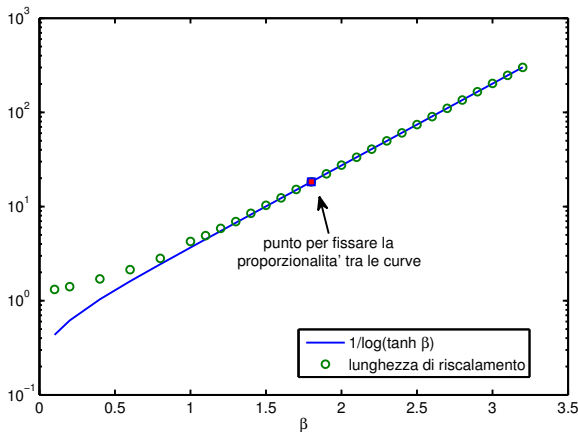
- ①  $\beta$  e  $L$  fissati
- ② generazione  $J_i$
- ③ generazione  $N$  sequenze  
a parametri fissati
- ④ distanza media tra  $N$   
sequenze
- ⑤ media su  $J$
- ⑥  $L_\xi(\beta) = L$  a metà  
altezza



# Dipendenza dalla temperatura

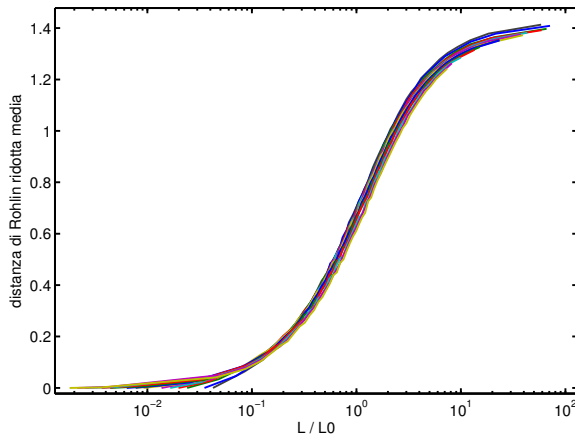


# Dipendenza dalla temperatura



- Corrispondenza perfetta
- Correzioni di reticolo finito
- Per  $J = \pm 1$

# Dipendenza dalla temperatura

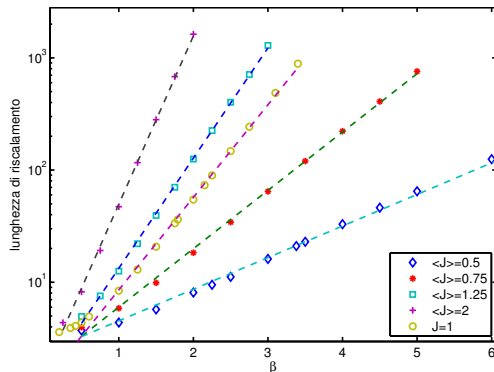


- Corrispondenza perfetta
- Correzioni di reticolo finito
- Per  $J = \pm 1$

# Tipi di disordine

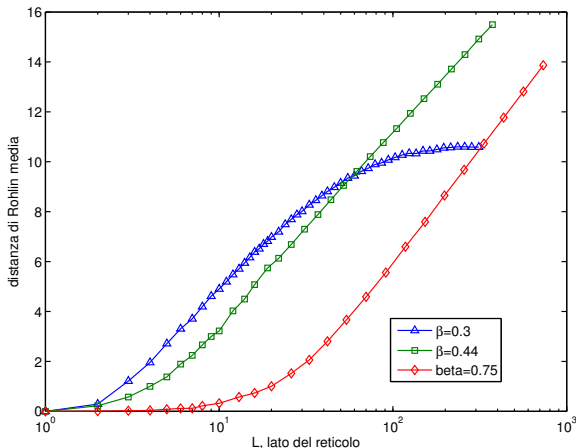
quando  $J$  è disordinato ( $J = \pm 1$ )?  $\langle \sigma_i \sigma_{i+r} \rangle = 0$

- se  $J = \pm 1$  nessuna differenza,  $L_\xi(\beta) \propto -(\log \tanh(\beta))^{-1}$
- se  $J \in [a, b]$ ,  $a > 0$ :  $L_\xi(\beta) \propto -(\log \tanh(\langle J \rangle \beta))^{-1}$
- se  $J \in [-1, 1]$ , la possibilità di  $J = 0$ :  $L_\xi(\beta) \propto \beta$



# Ising 2D, reticolo quadrato

- $T > T_C$ : distanza arriva a un massimo, si definisce  $L_\xi(\beta)$
- $T < T_C$ : la distanza diverge come  $\mathcal{O}(\log(N))$  – come l'integrale della correlazione sconnessa a due punti in 2D



# Conclusioni

Lavoro completato:

- Ottimizzazione algoritmi di partizionamento e riduzione
- Generalizzazione a grafi e strutture generiche
- Nuovi metodi di riduzione
- Confronto e scelta delle distanze per sequenze dell'influenza
- Analisi completa di Ising 1D all'equilibrio anche nel caso disordinato

Work in progress:

- Analisi della stagione influenzale 2011/2012
- Applicazioni a dinamiche conservate su grafi complessi
- Evoluzione temporale in fasi transienti per Ising 1D e 2D
- Calcolo lunghezza di correlazione in tutte le fasi per Ising 2D