

# **DOKTORANDSKÉ DNY 2021**

sborník workshopu doktorandů FJFI  
oboru Matematické inženýrství

19. a 26. listopadu 2021

P. Ambrož, Z. Masáková (editoři)

**Doktorandské dny 2021**  
**sborník workshopu doktorandů FJFI oboru Matematické inženýrství**

P. Ambrož, Z. Masáková (editoři)  
Kontakt [petr.ambroz@fjfi.cvut.cz](mailto:petr.ambroz@fjfi.cvut.cz) / 224 358 569

Vydalo České vysoké učení technické v Praze  
Zpracovala Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Počet stran 180, Vydání 1.

# Seznam příspěvků

Tessellation-Based Kernel Density Estimation <i>V. Belov</i> . . . . .	1
Molecular Dynamics on GPUs in Nucleation of Gas Expanding to a Vacuum <i>D. Celný</i> . . . . .	11
Graph Coarsening Can Increase Learning Efficiency <i>M. Dědič</i> . . . . .	13
Fluid Flow Simulations through Distributor Plate Using Cumulant LBM <i>P. Eichler</i> . . . . .	23
Computing Funnel Using Numerical Optimization Based Falsifiers <i>J. Fejlek</i> . . . . .	25
Online Anomaly Detection with Density-Approximating Neural Networks <i>M. Flusser</i> . . . . .	27
Mathematical Modeling of the Multicomponent Flow in Porous Media <i>P. Gális</i> . . . . .	29
Stochastic Modeling and Dimension Estimation of Fractal Diffusion <i>F. Gašpar</i> . . . . .	31
Probabilistic Information Fusion for Estimation Serving to Decision Making <i>F. Hůla</i> . . . . .	43
Variational Inference with Weight Perturbated Adam <i>Z. Junek</i> . . . . .	45
Open-Source Data Structure for Distributed Meshes with GPU Support <i>J. Klinkovský</i> . . . . .	55
Preferred Axis in Universe and Neutrino Oscillations <i>J. Kňap</i> . . . . .	57
Causality in Reversed Time Series: Reversed or Conserved? <i>J. Kořenek</i> . . . . .	67
Kombinace handcrafted a learned features <i>V. Košík</i> . . . . .	69
WKBJ Approximation and RD Systems <i>J. Kováč</i> . . . . .	81
Superintegrability of Separable Systems with Magnetic Field <i>O. Kubů</i> . . . . .	83
A Numeration System for Fibonacci-like Wang Shifts <i>J. Lepšová</i> . . . . .	85

Fast Projections onto the Probability Simplex with Linear Constraints <i>V. Mácha</i> . . . . .	87
Minimal Surface Generating Flow for Space Curves of Non-vanishing Torsion <i>J. Minarčík</i> . . . . .	89
Probabilistic Modelling Opinion Formation in Social Interactions <i>P. Prábeli</i> . . . . .	91
Dynamic Mixture Ratio Model <i>M. Ruman</i> . . . . .	101
Conserved Quantities and Antilinear Symmetries in Non-Hermitian Systems <i>F. Růžička</i> . . . . .	103
Periodicity of Multidimensional CF and Matrices of Linear Transformation <i>H. Rada</i> . . . . .	105
Quantum-Walk-Based State-Transfer Algorithms on $M$ -Partite Graphs <i>S. Skoupý</i> . . . . .	117
Multi-Phase Compressible Compositional Simulations with Flash Computation <i>T. Smejkal</i> . . . . .	119
Left Ventricular Torsion in Patients with Repaired Tetralogy of Fallot <i>K. Škardová</i> . . . . .	121
Pedestrian Density Estimates and Their Real Applications <i>J. Vacková</i> . . . . .	123
Nové varianty reakčních členů pro rovnice fázového pole pro numerické simulace <i>A. Wodecki</i> . . . . .	125
Free-Running Data Acquisition System for the AMBER Experiment <i>M. Zemko</i> . . . . .	127
Doktorský studijní program Matematické inženýrství . . . . .	129

# Předmluva

Doktorandské dny jsou již tradičním setkáním studentů doktorského studia na Fakultě jaderné a fyzikálně inženýrské ČVUT v Praze. Doktorandi studijního programu Matematické inženýrství zajišťovaného katedrami matematiky, fyziky a softwarového inženýrství na nich prezentují výsledky své vědecké práce, jejichž tematika pokrývá všechny oblasti aplikované matematiky.

Letošní ročník je již šestnáctým vydáním workshopu, koná se ve dnech 19. a 26. listopadu 2021. Rok 2020 byl silně poznamenaný pandemií nemoci covid19, proto se workshop konal distanční formou. Věříme, že situace na podzim 2021 nebude díky očkování natolik závažná a konání workshopu tradiční formou bude uskutečnitelné.

Tento sborník přináší jak plné texty studentských příspěvků, tak i abstrakty s odkazy na články publikované ve sbornících významných konferencí či publikované nebo alespoň zasláné k publikaci v odborných časopisech. Rozsah příspěvků nám v tomto roce umožnil zařadit do sborníku i základní informace o studijním programu Matematické inženýrství podle akreditace z r. 2018, zejména přehled odborných předmětů nabízených pro zařazení do individuálních studijních plánů doktorandů.

Za materiální podporu děkujeme katedře matematiky FJFI a grantu Studentské vědecké konference SVK 30/21/F4.

Editoři



# Tessellation-Based Kernel Density Estimation\*

Vladislav Belov

2nd year of PGS, email: `belovvla@fjfi.cvut.cz`

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Radek Mařík, Department of Telecommunication Engineering

Faculty of Electrical Engineering, CTU in Prague

**Abstract.** Kernel density estimation is a complex task that plays an essential role in a variety of applications. In this paper, we introduce an approach to the task that converts the problem of bandwidth evaluation in the Parzen-window-like framework into the non-parametric evaluation of a fine-grained density estimate which can then be scaled by means of the Scale-Space theory to achieve the desired level of smoothness. The detailed estimate is realized through the Delaunay space tessellation method and properties of its output simplices. Additionally, in the experimental part of the paper, we showcase the new method and demonstrate its outputs at various scales, reaching results that perceptibly outperform its fixed-bandwidth-based counterpart. This work is an extension of research conducted in [3].

*Keywords:* Delaunay tessellation, kernel density estimation, Scale-Space theory

**Abstrakt.** Odhadování hustoty pravděpodobnosti je komplexní úloha, jež hraje důležitou roli ve mnoha aplikacích strojového učení. V tomto příspěvku formulujeme metodu, která konvertuje standardní přístup odhadování hustoty pomocí tzv. Parzenova okna do problému neparametrické evaluace jemné hustoty, jež se dá škálovat pomocí teorie Scale-space pro dosažení požadované úrovně hladkosti. Detailnost neškálovaných výsledků je zaručena Delaunayho teselací a vlastnostmi jejích výsledných simplexů. V experimentální části této práce ukazujeme novou metodu a demonstrujeme, že její výsledky v závislosti na škále jsou vnímatelně schopné přesahovat kvalitu výstupů Parzenova okna s konstantní šířkou. Tento příspěvek je rozšířením výsledků rešerše provedené v [3].

*Klíčová slova:* Delaunayho teselace, odhad hustoty pravděpodobnosti, teorie Scale-space

## 1 Introduction

Estimating unknown probability density functions is crucial for various Machine Learning applications, e.g., clustering, classification, statistical analysis, feature selection [9, 17, 29, 19]. Most of the time, density function estimates serve as inputs that assist models with training and further inference. Therefore, the estimation of densities is usually carried out in advance as a separate workflow. One of the most practical and time-honored approaches to the problem is the so-called Parzen, or Parzen-Rosenblatt, window (PRW) algorithm constructing density functions via viewing local neighborhoods in datasets through windows with given sizes. The selection of optimal window sizes, or bandwidths,

---

\*This work was supported by the Grant Agency of the Czech Technical University in Prague, grant No. SGS20/183/OHK4/3T/14.

is critical for obtaining successful results with the algorithm. However, the task is not an elementary one.

This paper introduces a kernel density estimation (KDE) method based on space tessellations, namely the Delaunay tessellation. One of its main advantages is that it is able to provide us with neighborhood-dependent variable bandwidths producing a fine-grained estimate of a density function of interest. Then, to adjust the amount of detail in results, we propose to utilize the Scale-Space theory. Consequently, our method converts the selection of multiple bandwidths into the task of choosing the appropriate scale for the final output.

In Sec. 2, we briefly describe the state of the art. Then, in the following Sec. 3, our method is introduced. The method definition is followed by the experimental part and discussion in Sec. 4 and 5, respectively. The results of this paper are concluded in Sec. 6.

This contribution is based on parts of our previous work [3], where only a brief introduction of the concept is present. Here, we extend the state-of-the-art research, showcase the method, and propose an enhancement in the form of scaling the outputs.

## 2 Related Work

### Kernel Density Estimation

One of the accepted and widely used techniques is the so-called Parzen-Rosenblatt window, firstly introduced in [18, 21]. Window size estimation is the primary step of the algorithm, which, when carried out unreliably, can lead to over-detailed or over-smoothed kernel density estimates. Over time, the problem was predominantly addressed in two arguably comprehensive ways: i) fixed window size over the whole dataset; ii) variable window size, depending on the position within the data space.

The fixed window size estimation can be done via multiple approaches, for instance, involving biased/unbiased cross-validation [4, 23] or utilizing bootstrap [25]. One of the most straightforward techniques is minimizing the asymptotic mean integrated squared error (MISE) [6].

The latter, variable-window-based, idea [5] is locally oriented and can also be approached in different ways. For example, in [26, 11], the option of estimation via the minimization of the asymptotic mean squared error is explored. In [14], the authors propose a technique that estimates the varying window size by means of confidence intervals intersections. The authors of [28] introduce a fast version of PRW by segmenting the space into a fixed number of either overlapping or non-overlapping sets of fixed-radii hyperballs containing data points and associating the created partitions with kernels fitting local distributions. In [13], the optimal window sizes are estimated via the optimization of the integrated squared error with regularization.

### Scale-Space Theory

Scale-Space is a theory describing how to handle data at different scales [12, 15]. As shown in [1, 16], for the operator responsible for such scaling to be able to avoid the creation of new structures when going from a fine scale to a coarser scale and to meet



other scale-space conditions such as linearity and shift/scale/rotation invariance, it must be a Gaussian filter.

### Delaunay Tessellation and Multidimensional Simplices

Multiple mechanisms for constructing the Delaunay tessellation exist, e.g., the local improvement, the incremental construction/insertion, higher-dimensional embedding, or the divide-and-conquer algorithms [7, 10]. In this work, we focus on the high-dimensional-embedding-based technique whose implementation in the Qhull library [20] is based on [2]. The downside of the approach is the fact that the number of Delaunay simplices increases exponentially with the number of dimensions [10].

Simplices within the simplicial complex of the Delaunay tessellation have multiple properties. Computation of circumradii, circumcenters, and hyper-volumes of multi-dimensional simplices is explored in detail in [3], inspired by [8, 24].

## 3 Tessellation-based KDE

The objective of arguably most KDE methods in its simplest form is the segmentation of the data space into spatial regions or multi-dimensional windows, and, consequently, the approximation of the density function using the number of samples within them:  $p(x) = \frac{n/N}{V}$  where  $n$  is the number of samples inside the window,  $N$  is the total number of samples,  $V$  is the hypervolume of the window. There exist two approaches to approximate the density function using regions: 1) fixed region volumes; 2) fixed number of samples. PRW falls under the category of fixed volumes.

To understand the logic behind PRW, we assume that windows have the hypercube shape of edge length  $h = 1$ . If the window is centered at the origin, then the kernel function, which, in this case, is an indicator of whether the point is within the window, has the following form for any  $x \in \mathbb{R}^d$ :

$$\kappa(x) = \begin{cases} 1, & \text{if } (\forall j \in \{1, 2, \dots, d\}) (|x^j| < \frac{1}{2}); \\ 0, & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (1)$$

Let  $\{x_i\}_{i=1}^N \subset \mathbb{R}^d$  be the data sample. Subsequently, to evaluate the value of the window function centered at arbitrary point  $x \in \mathbb{R}^d$  for  $x_j \in \mathbb{R}^d$ ,  $j \in \hat{N}$ , given edge length  $h > 0$ , one simply needs to calculate  $\kappa\left(\frac{x-x_j}{h}\right)$ . Then, to evaluate the number of samples  $n$ ,  $0 \leq n \leq N$ , present within this window, the summation is done:

$$n = \sum_{j=1}^N \kappa\left(\frac{x-x_j}{h}\right). \quad (2)$$

As a result, PRW with the hypercube kernel gives the following estimate of the density function at point  $x \in \mathbb{R}^d$ :

$$p(x) = \frac{1}{Nh^d} \sum_{j=1}^N \kappa \left( \frac{x - x_j}{h} \right). \quad (3)$$

It is not difficult to notice that PRW depends on two parameters: the kernel and the bandwidth (in case of the hypercube, it is the length of its edge). For instance, the general form of PRW with Gaussian kernel  $\kappa$  and fixed window size  $h$  is

$$p(x) = \frac{1}{N \cdot (\sqrt{2\pi})^d h^d} \cdot \sum_{j=1}^N \exp \left( -\frac{(x - x_j)^T (x - x_j)}{2h^2} \right). \quad (4)$$

We propose the application of space tessellations to approximate density function with a tessellation-based Gaussian mixture (TGM). Let  $\{S_i\}_{i=1}^s$  be simplices of the Delaunay tessellation [10]  $D$  constructed upon the multi-dimensional data  $\{x_i\}_{i=1}^N$ . The simplicial complex constructed by means of this method has the following properties:

- For each simplex  $S \in D$ , no vertices of foreign simplices  $\bar{S} \in D$ ,  $\bar{S} \neq S$ , are present within the circumradius of  $S$ ;
- Let  $S_1, S_2 \in D$ ,  $S_1 \neq S_2$ , then  $S_1 \cap S_2$  is either empty or is equal to one of their common  $(d - 1)$ -dimensional faces.

Subsequently, for each simplex  $S_i$ ,  $i \in \{1, 2, \dots, s\}$ , we are able to calculate its circumradius  $R_i > 0$  and its circumcenter  $c_i \in \mathbb{R}^d$ . Then our estimate of the density function, where radii  $\{R_i\}_{i=1}^s$  essentially take place of the bandwidth parameter, at any point  $x \in \mathbb{R}^d$  is the following Gaussian mixture:

$$p(x) = \frac{1}{s \cdot (\sqrt{2\pi})^d} \sum_{i=1}^s \frac{1}{R_i^d} \exp \left( -\frac{(x - c_i)^T (x - c_i)}{2R_i^2} \right). \quad (5)$$

In (5), the only values that are currently not known are the circumcenters  $\{c_i\}_{i=1}^s$  and the circumradii  $\{R_i\}_{i=1}^s$ . Evaluation of these values for  $d \leq 3$  is elementary. However, for  $d > 3$ , the process is not so straightforward. Nonetheless, by means of the Cayley-Menger matrices [24, 3], one can calculate the values of interest for any simplex through the inverse of the Cayley-Menger matrix.

All simplices in  $D$  have  $d+1$  vertices and, depending on the dimension, these simplices can be line segments for  $d = 1$ , triangles for  $d = 2$ , or tetrahedrons for  $d = 3$ , etc. Let  $V = \{0, 1, \dots, n\}$  be the set of vertices of a Delaunay simplex and  $d_{k,l}$  denote distances between vertices  $k$  and  $l$ , for all  $k, l \in V$ . Then, the Cayley-Menger matrix for the simplex is defined as follows:

$$M = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 1 & 0 & d_{0,1}^2 & \dots & d_{0,n}^2 \\ 1 & d_{1,0}^2 & 0 & \dots & d_{1,n}^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & d_{n,0}^2 & d_{n,1}^2 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Then,  $-2R_i^2 = [M^{-1}]_{11}$ ,  $\tilde{c}_i^r = [M^{-1}]_{1,r+2}$  where  $[M^{-1}]_{.,.}$  denotes the elements of the inverse of  $M$  and  $\tilde{c}_i^r$  lists the barycentric coordinates of the  $i$ -th circumcenter, for all  $i \in \{1, 2, \dots, s\}$ ,  $r \in \{0, 1, \dots, n\}$ .

A kernel density produced as a result of (5) can be viewed as a fine probabilistic representation of the dataset. This granular representation can be smoothed employing the Scale-Space theory [15]. The theory allows working with the outcome at different scales by means of applying a Gaussian filter on the results. Let  $g(x, t)$  be the Gaussian filter with scale  $t$ . Then, the scaled version of the estimated density is

$$p_t(x) = g(x, t) * p(x) \quad (7)$$

Where the convolution is performed only over the dimensions of  $x \in \mathbb{R}^d$ .

## 4 Experimental Setup

To produce the necessary results, we generate a random two-dimensional sparse dataset and apply the Delaunay tessellation to it. Then, the model defined in (5) is fitted on the constructed simplicial complex. In addition, we display the results of the PRW variation with the fixed bandwidth whose value is based on the "rule-of-thumb" heuristic known as Scott's factor [22, 27]. Secondly, we demonstrate the results produced in the same manner for a mixture of two independent two-dimensional Gaussian distributions.

After that, working with the same datasets, we display the behavior of (7) for various values of scale  $t \in [1, 10]$ , applying the Gaussian filters on the fine-grained results produced by (5).

## 5 Discussion

Fig. 1 displays the results of TGM applied on the datasets defined in the experimental setup. The main drawback of PRW is the choice of the bandwidth. Depending on it, the estimate may either contain a substantial number of spikes or be too smooth so that one might no longer be able to discern smaller clusters and comprehend the inner structure of data. The latter situation is the one that occurs on the right-hand side of Fig. 1a for the sparse uniform data. The former situation can be observed in Fig. 1b, where even though two Gaussian distributions were identified, the covariance matrix of the shifted one is smoothed in the erroneous direction. As for TGM, it manages to depict the local structure quite well (see the central diagrams in Fig. 1a and 1b). The TGM density in Fig. 1b might seem too detailed for the two Gaussian distributions. Nonetheless, this can be adjusted by viewing the estimate from different scales, modifying only the value of a single hyperparameter  $t$ .

In Fig. 2 and 3, TGM estimates from Fig. 1a and 1b are displayed at various scales. It is a straightforward observation that the application of scaling to fine-grained density estimates is able to achieve the same level of smoothness as PRW. Moreover, the diagrams empirically verify that the local structure produced by the granular estimates of TGM is preserved regardless of how the scale changes: the initially highlighted areas remain highlighted, merging with neighboring regions, and no further dependencies are inferred.

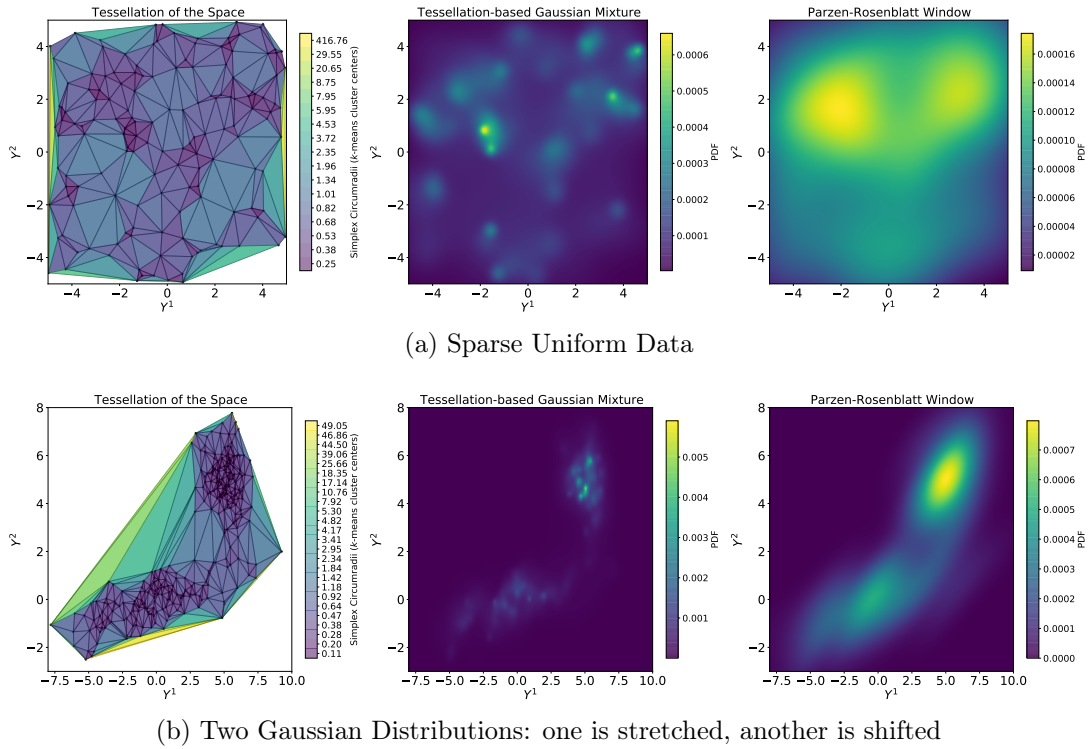


Figure 1: KDE of two datasets. On the left-hand side of both sub-figures, the tessellation of data is displayed, with points placed as vertices of individual simplices. In the center, the results of TGM are illustrated. On the right-hand side, we display the results of PRW with the window size estimated by means of Scott's factor [22, 27].

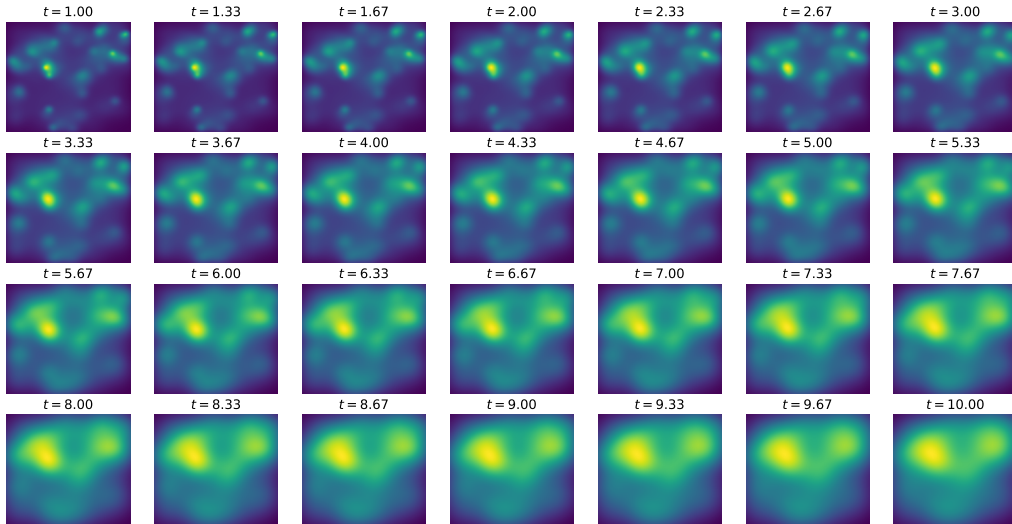


Figure 2: Scaled data from Fig. 1a for various values of scale parameter  $t \in [1, 10]$ .

Therefore, TGM is a valid contender for KDE. It can be considered a part of the window-based estimators family with variable bandwidth sizes. Nonetheless, the estimation of multiple bandwidths per dataset is transformed into working only with one parameter - the scale of output results. This fact is a consequence of the bandwidth sizes

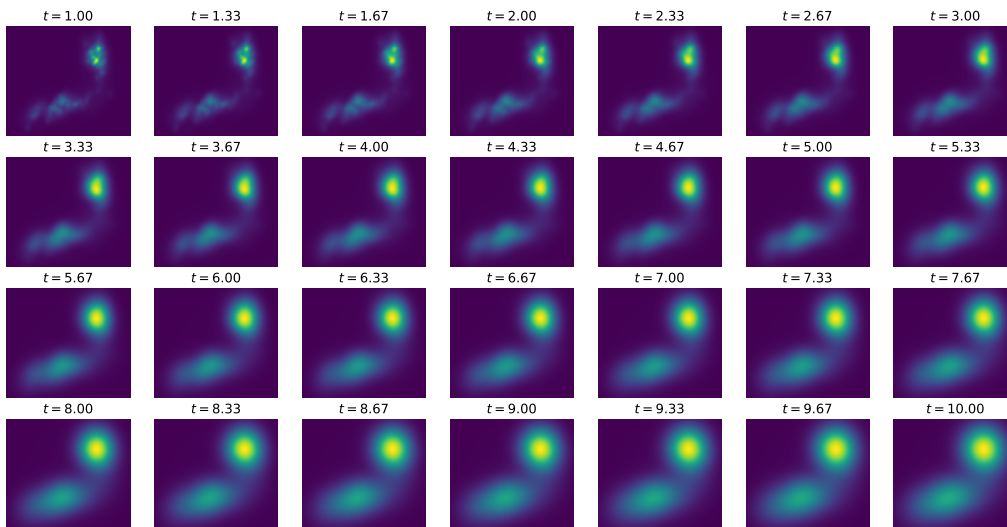


Figure 3: Scaled data from Fig. 1b for various values of scale parameter  $t \in [1, 10]$ .

being computed non-parametrically, producing a fine-grained density estimate that can be further scaled to construct coarser outputs.

## 6 Conclusion

In this paper, we introduced the Tessellation-based Kernel Density Estimation technique. The method segments the space into simplices through the Delaunay tessellation. Circumcenters and circumradii of the simplicial complex are then used to estimate the Gaussian mixture components, comprising the final density model that produces a fine-grained view of data. To process these detailed density estimates, we proposed viewing them at various scales by applying the Scale-Space theory. We showcase the method performance on two datasets and demonstrate that scaling indeed enables us to generate coarser representations of the density estimates.

The method can be further generalized by employing, for instance, the non-circular covariance instead of the circular one. Furthermore, other, faster or better suited for higher dimensions, tessellation techniques can be explored. These research areas and the detailed evaluation of the proposed method are suggested as possible extensions of this work.

## References

- [1] J. Babaud, A. P. Witkin, M. Baudin, and R. O. Duda. *Uniqueness of the Gaussian Kernel for Scale-Space Filtering*. IEEE Trans. Pattern Anal. Mach. Intell. **8** (January 1986), 26–33.
- [2] C. B. Barber, D. P. Dobkin, and H. Huhdanpaa. *The quickhull algorithm for convex hulls*. ACM Trans. Math. Softw. **22** (December 1996), 469–483.

- 
- [3] V. Belov. *Nonlinear Dimensionality Reduction*. Master’s Thesis, Czech Technical University in Prague (February 2020).
- [4] A. W. Bowman. *An alternative method of cross-validation for the smoothing of density estimates*. *Biometrika* **71** (1984), 353–360.
- [5] L. Breiman, W. Meisel, and E. Purcell. *Variable Kernel Estimates of Multivariate Densities*. *Technometrics* **19** (1977), 135–144.
- [6] S. Chen. *Optimal Bandwidth Selection for Kernel Density Functionals Estimation*. *J. Probab. Stat.* **2015** (2015), 1–21.
- [7] P. Cignoni, C. Montani, and R. Scopigno. *Dewall: A fast divide and conquer delaunay triangulation algorithm in ed*. *Computer-Aided Design* **30** (1998), 333 – 341.
- [8] H. Coxeter. *The circumradius of the general simplex*. *The Mathematical Gazette* **15** (1930), 229–231.
- [9] M. Ester, H.-P. Kriegel, J. Sander, and X. Xu. *A Density-Based Algorithm for Discovering Clusters in Large Spatial Databases with Noise*. In ‘Proceedings of the Second International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining’, KDD’96, 226–231, Portland, Oregon, (1996). AAAI Press.
- [10] J. E. Goodman, J. O’Rourke, and C. D. Tóth. *Handbook of Discrete and Computational Geometry, Third Edition*. CRC Press, Boca Raton, FL, (2017).
- [11] P. Hall, T. C. Hu, and J. S. Marron. *Improved Variable Window Kernel Estimates of Probability Densities*. *Ann. Stat.* **23** (1995).
- [12] T. Ijima. *Basic theory on normalization of pattern (in case of typical one-dimensional pattern)*. *Bull. Electrotech. Lab.* **26** (1962), 368–388. (in Japanese).
- [13] Y. Jin, Y. He, and D. Huang. *An Improved Variable Kernel Density Estimator Based on  $L_2$  Regularization*. *Mathematics* **9** (2021), 2004.
- [14] V. Katkovnik and I. Shmulevich. *Kernel density estimation with adaptive varying window size*. *Pattern Recognit. Lett.* **23** (2002), 1641–1648.
- [15] T. Lindeberg. *Scale-Space Theory: A Basic Tool for Analysing Structures at Different Scales*. *Journal of Applied Statistics* **21** (09 1994), 224–270.
- [16] T. Lindeberg. *Generalized Gaussian Scale-Space Axiomatics Comprising Linear Scale-Space, Affine Scale-Space and Spatio-Temporal Scale-Space*. *Journal of Mathematical Imaging and Vision* **40** (2011), 36–81.
- [17] L. McInnes, J. Healy, and S. Astels. *hdbscan: Hierarchical density based clustering*. *The Journal of Open Source Software* **2** (03 2017).
- [18] E. Parzen. *On Estimation of a Probability Density Function and Mode*. *Ann. Math. Statist.* **33** (1962), 1065–1076.

- [19] H. Peng, F. Long, and C. Ding. *Feature selection based on mutual information criteria of max-dependency, max-relevance, and min-redundancy*. IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence **27** (2005), 1226–1238.
- [20] Qhull Library Documentation Web-page. <http://www.qhull.org>. Accessed: 2019-11-17.
- [21] M. Rosenblatt. *Remarks on Some Nonparametric Estimates of a Density Function*. Ann. Math. Statist. **27** (1956), 832–837.
- [22] D. W. Scott. *Multivariate Density Estimation: Theory, Practice, and Visualization*. John Wiley & Sons, (1992).
- [23] D. W. Scott and G. R. Terrell. *Biased and Unbiased Cross-Validation in Density Estimation*. J. Am. Stat. Assoc. **82** (1987), 1131–1146.
- [24] D. Sommerville. *An Introduction to the Geometry of N Dimensions*. Methuen, (1959).
- [25] C. C. Taylor. *Bootstrap choice of the smoothing parameter in kernel density estimation*. Biometrika **76** (1989), 705–712.
- [26] G. R. Terrell and D. W. Scott. *Variable Kernel Density Estimation*. Ann. Stat. **20** (1992).
- [27] P. Virtanen, R. Gommers, T. E. Oliphant, M. Haberland, T. Reddy, D. Cournapeau, E. Burovski, P. Peterson, W. Weckesser, J. Bright, S. J. van der Walt, M. Brett, J. Wilson, K. J. Millman, N. Mayorov, A. R. J. Nelson, E. Jones, R. Kern, E. Larson, C. J. Carey, Í. Polat, Y. Feng, E. W. Moore, J. VanderPlas, D. Laxalde, J. Perktold, R. Cimrman, I. Henriksen, E. A. Quintero, C. R. Harris, A. M. Archibald, A. H. Ribeiro, F. Pedregosa, P. van Mulbregt, and SciPy 1.0 Contributors. *SciPy 1.0: Fundamental Algorithms for Scientific Computing in Python*. Nature Methods **17** (2020), 261–272.
- [28] X. Wang, P. Tino, M. A. Fardal, S. Raychaudhury, and A. Babul. Fast parzen window density estimator. 3267–3274, Atlanta, GA, USA, (2009). IEEE.
- [29] X.-Z. Wang, Y.-L. He, and D. D. Wang. *Non-Naive Bayesian Classifiers for Classification Problems With Continuous Attributes*. IEEE Transactions on Cybernetics **44** (2014), 21–39.





# Molecular Dynamics of Heterogeneous Systems on GPUs and Application to Nucleation in Gas Expanding to a Vacuum

David Celný

5th year of PGS, email: [celnydav@fjfi.cvut.cz](mailto:celnydav@fjfi.cvut.cz)

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisors:

Jiří Kolafa, Department of Physical Chemistry,  
Faculty of Chemical Engineering, UCT in Prague

Tomáš Oberhuber, Department of Mathematics  
Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

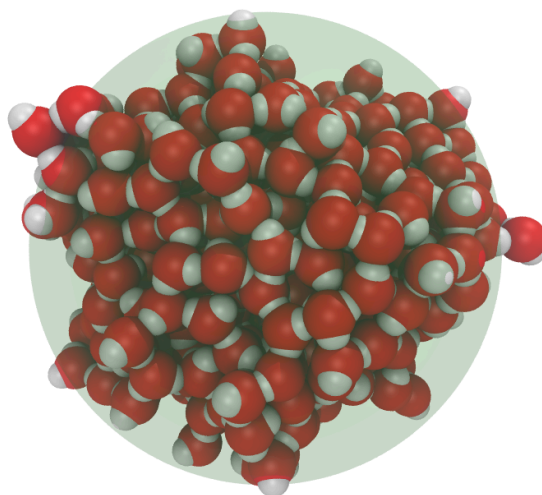
**Abstract.** Expansion of water vapor through a small orifice to a vacuum produces liquid or frozen clusters which in the experiment serve as model particles for atmospheric aerosols. Yet there are controversies about the shape of these clusters suggesting that the nucleation process is not fully understood. Such questions can be answered by molecular dynamics simulations; however, they require microsecond-scale runs with thousands of molecules and accurate energy conservation. Available highly parallel codes typically utilize domain decomposition and are inefficient for heterogeneous systems as clusters in dilute gas. In this work we present an implementation of molecular dynamics on graphics processing units based on the Verlet list, and apply it to several systems for which experimental data are available. We reproduce sufficiently sized clusters but not the experimentally observed clusters of irregular shape.


*Keywords:* MD simulation, nucleation, GPGPU, cluster, supersonic expansion

**Abstrakt.** Expanze vodní páry skrze trysku do vakua vytváří kapalně nebo dokonce zmrzlé clustery, které lze využít jako model atmosférických aerosolů. I tak jsou ale vedeny diskuse o tvaru zmíněných clusterů, což naznačuje, že samotný proces nukleace není zcela pochopen. V takovém případě lze k zodpovězení otázky použít molekulárních simulace. Je však nutné uvážit, že je nutné simulovat tisíce molekul po velmi dlouhé časy na úrovni mikrosekund, přičemž energie systému bude dostatečně zachována. Dostupné vysoce paralelní programy obvykle využívají domain decomposition metod a jsou neefektivní pro případ heterogenní systémy jako jsou clustery v řídkém plynu. V této práci proto prezentujeme molekulárně dynamickou implementaci na grafických kartách, která používá metodu Verletova listu. Software následně aplikujeme na několik experimentálně prozkoumaných systémů. V provedených simulacích se podařilo dostatečně rozměrné clustery reprodukovat avšak již bez experimentálně pozorované nepravidelnosti.

*Klíčová slova:* MD simulace, nukleace, GPGPU, cluster, supersonická expanze

**Full paper:** The paper is currently under second round of reviews at the *Journal of Chemical Theory and Computation*.



Cluster from 1  $\mu$ s expansion simulation  
containing 440 SPCE water molecules   
compared to perfect sphere of comparable size.

# Graph Coarsening Can Increase Learning Efficiency\*

Marek Dědič

2nd year of PGS, email: `dedicma2@fjfi.cvut.cz`

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisors:

Martin Holeňa, Department of Machine Learning

Institute of Computer Science, CAS

Lukáš Bajer, Cisco Systems, Inc.

**Abstract.** Graph based models are used for tasks with increasing size and computational demands. The paper focuses on leveraging methods for pretraining on coarser graphs with HARP as the method of choice. The method is generalized using partially injective homomorphisms, a concept from the field of data mining. Such a way of producing graph coarsenings is shown to be feasible and not to affect the performance of HARP in a negative way. Also, the performance-complexity characteristics of these methods are studied and HARP is established as a way of efficient pretraining which can reduce the amount of computational power needed to train graph-based models on large data.

*Keywords:* graph neural networks, graph coarsening, HARP, partially injective homomorphism

**Abstrakt.** Výpočetní modely založené na grafech se v současné době používají na data se stále se zvětšující velikostí a tedy i nároky na výpočetní výkon. Tento článek se zaměřuje na metody pro pretraining na hrubších grafech, konkrétně na metodu HARP. Tato metoda je zobecněna pomocí částečně injektivních homomorfismů, konceptu z oboru dolování z dat. Je ukázáno, že takový způsob generování hrubších grafů je prakticky použitelný a nijak negativně neovlivňuje výkonnost metody HARP. Poměr výkonnosti a výpočetní náročnosti byl také vyhodnocen a metoda HARP byla prokázána jako efektivní způsob pretrainingu, který může zmenšit výpočetní nároky modelů založených na velkých grafech.

*Klíčová slova:* grafové neuronové sítě, zhrubování grafů, HARP, částečně injektivní homomorfismus

## 1 Introduction

Graph-based models for machine learning are often used for task with millions of nodes and billions of edges. For such tasks, many machine learning algorithms may be computationally intractable. As a way to combat these growing demands, we look at the trade-off between performance, complexity and method generality. Our work in progress builds on HARP [1], a method for pretraining graph-based learning algorithms by first learning on

---

\*The research reported in this paper has been supported by the Czech Science Foundation (GAČR) grant 18-18080S.

scaled down versions of the graph in question. While in HARP, this downscaling of the graphs is done in a fixed way, we propose a formal generalization of such a downscaling using partially injective homomorphisms, a theoretical result with background in data mining. This generalization would in the future enable the downscaling method to be tailored or trained to the problem at hand. The performance characteristics of HARP are also studied in our work, with the focus being on comparing the performance of models with lower training costs, potentially enabling the use of graph-based algorithms on bigger datasets than previously possible.

In the next section, the graph learning algorithm HARP is presented, followed by a section presenting partially injective homomorphisms. Section 4 connects these ideas and Section 5 discusses the performance characteristics of HARP. Finally, Section 6 supports our theses with experimental evaluation.

## 2 HARP

### 2.1 Method overview

HARP is a method for improving the performance of graph-based learning algorithms such as DeepWalk [8], LINE [12], PTE [11] or node2vec [3]. The method is a combination of dataset augmentation and pre-training based on the general principle that graph-based models train more efficiently on smaller graphs and can thus be pre-trained on a coarsened representation of the graph task at hand. In an overview, the method consists of the following steps:

1. **Dataset augmentation.** The graph is consecutively reduced in size by the application of several graph coarsening schemas. In each step, the coarsened can be viewed as a representation of ever more global structure in the task.

After all the coarsened graphs are pre-computed, the method itself can be executed by repeating the following steps on the graphs from the coarsest to the finest:

2. **Training on an intermediary graph.** The model is trained on one of the pre-computed intermediary graphs.
3. **Embedding prolongation.** The embedding generated by the model is prolonged from a coarser graph to a finer one (with the original graph being the finest).

The first step is independent of the rest of the computation and can be done ahead of time. The last two steps can be seen as a form of pre-training for the model that is to be learnt on the original task.

### 2.2 Graph coarsening

Consider an undirected graph  $G$  with nodes  $V(G)$  and edges  $E(G)$ . The aim of the graph coarsening part of the algorithm is to generate a sequence of graphs  $G_0, G_1, G_2, \dots, G_L$  where  $G_0 = G$  and  $L \in \mathbb{N}$  is a hyperparameter of the method. In this sequence, each graph  $G_i$  is generated from the graph  $G_{i-1}$  by coarsening it – lowering the number of

nodes and edges while preserving the general structure of the graph. Following [1], let  $\psi_i$  denote the mapping between the graphs such that  $V(G_i) = \psi_i(V(G_{i-1}))$ .

In Section 4, a general framework for graph coarsening is presented. The authors of [1] instead introduce two particular coarsening relations  $\psi_i$  – **edge collapsing** and **star collapsing**. Edge collapsing is a very simple method – out of all the edges  $E(G_{i-1})$ , a subset  $E'$  is selected such that no two edges from  $E'$  are incident on the same node. Then, for each edge  $(u, v) \in E'$ ,  $u$  and  $v$  are merged into a single node  $w$ , with all edges incident on  $u$  or  $v$  being replaced with edges incident on  $w$ .

The edge collapsing algorithm is a good general way of lowering the number of nodes in a graph, however, some structures are not easily collapsed by it. An example of such a structure is a “star” – a single node connected to many other nodes. To coarsen graphs with such structures effectively, the star collapsing algorithm is proposed. For each such *hub* node  $u$ , its unconnected neighbouring nodes are taken and merged pairwise. Again, all edges incident on such nodes are replaced with edges incident on the corresponding newly created nodes. These two approaches are combined in HARP, with each coarsening step being a star collapsing step followed by an edge collapsing step.

## 2.3 Embedding prolongation

In each coarsening step, an embedding of the graph  $G_i$  is trained by one of the embedding algorithms. To continue training with a finer graph, this embedding  $\Phi_i : V(G_i) \rightarrow \mathbb{R}^d$  needs to be *prolonged* to create the finer embedding  $\Phi_{i-1} : V(G_{i-1}) \rightarrow \mathbb{R}^d$ . To achieve this, the representation of a node in the graph  $G_i$  is copied for each of the nodes in  $G_{i-1}$  it was created from (by the graph collapsing algorithm). That is,

$$\Phi_{i-1}(u) = \Phi_i(\psi_i(u)).$$

This is then taken as the starting point for the next training phase.

## 3 Partially injective homomorphism

In [10], the authors present the notion of **partially injective homomorphisms** as a bridge between the comparatively weak concept of a homomorphism and the much stronger concept of an injective homomorphism (i.e., a subgraph isomorphism). This section presents these concepts and explores some of their properties. In Section 4, graph homomorphisms are then used as a general framework for graph coarsening.

A **graph homomorphism** between graphs  $G$  and  $H$  is a mapping  $\varphi : V(G) \rightarrow V(H)$  that preserves edges, thus

$$(u, v) \in E(G) \implies (\varphi(u), \varphi(v)) \in E(H).$$

A homomorphism is **injective** iff  $\forall u, v \in V(G) \quad \varphi(u) = \varphi(v) \implies u = v$ . Finally, a homomorphism is **partially injective** iff  $\forall (u, v) \in \mathcal{C} \quad \varphi(u) = \varphi(v) \implies u = v$  for some  $\mathcal{C} \subseteq (V(G))^2 \setminus E(G)$ , that is,  $\mathcal{C}$  is a set of *non-edges* of the graph  $G$ . Observe that for any  $(u, v) \in E(G)$  the condition holds in general per the definition of a homomorphism on a graph without loops, which justifies the limitation of  $\mathcal{C}$  to non-edges of the graph.

For given graphs  $G$  and  $H$ , let  $\mathcal{L}$  denote the finite set of all partially injective homomorphisms between them. Let a particular partially injective homomorphism described by  $\mathcal{C}$  be denoted as  $\text{PIHom}(G, H, \mathcal{C})$ .  $\mathcal{L}$  has a natural partial order  $\preceq$  where  $\text{PIHom}(G, H, \mathcal{C}_1) \preceq \text{PIHom}(G, H, \mathcal{C}_2)$  iff  $\mathcal{C}_1 \subseteq \mathcal{C}_2$  and forms a lattice with order  $\preceq$ . The minimum of this lattice  $\text{PIHom}(G, H, \emptyset)$  corresponds to an ordinary homomorphism while the maximum  $\text{PIHom}(G, H, (V(G))^2 \setminus E(G))$  corresponds to an injective homomorphism.

## 4 HARP and partially injective homomorphisms

The connection between HARP and partially injective homomorphisms is a theoretical, yet useful one. If the HARP coarsenings could be restricted to partially injective homomorphisms or their compositions, general coarsenings could be learned for each task. In Section 6.3 we explore whether this restriction limits the performance of HARP.

When both the edge and star collapsing algorithms are used, the mapping  $\psi_i$  introduced in 2.2 is **not** a homomorphism nor a combination of homomorphisms due to its not meeting the injectivity condition on edges. However, it is met for the complementary graph (graph where edges are swapped with non-edges). For the complementary graph, the star collapsing algorithm is not a homomorphism, however, it can be replaced by homomorphisms that also collapses stars. We propose a coarsening that merges a hub node with half of its neighbours. Because merging a node with its neighbour only collapses an edge, this coarsening scheme is a composition of partially injective homomorphisms on the complementary graph. Such a model is studied in Section 6.3.

This theoretical connection gives a way of constructing more general graph coarsenings by setting a constraint on such relations and finding the maximum of a subset of  $\mathcal{L}$  that satisfies such a constraint. The authors of [10] present a way of effectively (in polynomial time for bounded tree-width graphs) searching for such maximally constrained homomorphisms.

## 5 HARP and the performance-complexity trade-off

Graph-based methods such as node2vec typically have a large number of parameters - on the widely used OGBN-ArXiv dataset (see [4]), the SOTA node2vec model has over 21 million parameters. At the same time, recent works have started to focus more heavily on simpler methods as a competitive alternative to heavy-weight ones (see [2, 5, 9, 13]). As the authors of [1] observed, HARP improves the performance of models when fewer labelled data are available. The proposed lower complexity models based on HARP could also improve performance in a setting where only low fidelity data are available for large parts of the graph. Coarser models could be trained on them, with a subsequent training of finer models using only a limited sample of high fidelity data.

As a core principle of HARP, lower level representations of the task are generated and a model is learnt on them. How good these models are remains in question. In order to test this, several models were compared. Each model  $M_i$  was trained on graphs  $G_L, \dots, G_i$  as with HARP, then the embeddings were prolonged on graphs  $G_{i-1}, \dots, G_0$

without training. On  $G_0$ , the models were then trained as they would be in an ordinary node2vec setup. With this schema,  $L$  models are obtained, each trained on graphs of different granularity. As the coarsers graphs are much smaller in size, the pretraining is much more efficient to compute than training on the original graph. To examine the performance-complexity trade-off of HARP, the trade-off between decreasing predictive accuracy and decreasing amount of training data was evaluated.

## 6 Experimental evaluation

The experiments proposed in the previous sections were run on the OGBN-ArXiv dataset (see [4]) with node2vec as the underlying graph learning algorithm. The experiments build upon the SOTA node2vec implementation for this dataset.

### 6.1 Experiment setup

The configurations of both the node2vec and the MLP models are taken from the PyTorch Geometric implementation of node2vec on the ogbn-arxiv dataset (a dataset of 169 343 computer science arXiv papers, see [7]), which was also used for the experiments. The node2vec model generated an embedding into  $\mathbb{R}^{128}$  from 10 random walks of length 80 for each node with a context window size of 20. The optimizer ADAM [6] was used with a learning rate of 0.01 and batches of 256 samples. The MLP classifier using the embeddings featured 3 linear layers of 256 neurons with batch normalization after each layer. Finally, a linear layer was used for the class prediction. ADAM with a learning rate of 0.01 and a dropout rate of 0.5 was used for 200 epochs of training with the cross-entropy loss function. The experiments were implemented using PyTorch<sup>1</sup> and PyTorch Geometric [7].

### 6.2 Effect of HARP pretraining

To assess the effect of HARP as a pretraining, the main question is how does HARP pretraining change the behaviour of the node2vec training? To this end, 10 different models  $M_0, \dots, M_9$  as defined in Section 5 were trained. The sizes of the respective graphs  $G_0, \dots, G_9$  are denoted in Table 1.

Figure 1 compares the accuracy of several models over learning epochs on the original graph  $G_0$ . An MLP using just dataset features and an ordinary node2vec model are provided as a reference. The models  $M_0, \dots, M_9$  are then compared.

As can be seen, there is no noticeable difference in the performance of a pretrained node2vec in comparison to an ordinary one when it comes to performance after 4 or more training epochs. Our explanation is that the configuration used for node2vec training already samples large parts of the graph thanks to a relatively high number of long random walks. There is, however, a noticeable improvement in the performance of models when only very few training epochs are available.

---

<sup>1</sup><https://pytorch.org/>

Graph	# of nodes	# of edges
$G_0$	169 343	2 315 598
$G_1$	67 496	1 886 875
$G_2$	29 408	1 558 368
$G_3$	15 039	1 252 276
$G_4$	9 273	815 493
$G_5$	6 768	433 795
$G_6$	5 607	197 876
$G_7$	4 994	86 307
$G_8$	4 655	42 441
$G_9$	4 404	29 167

Table 1: Size of the graphs generated at different coarsening levels.

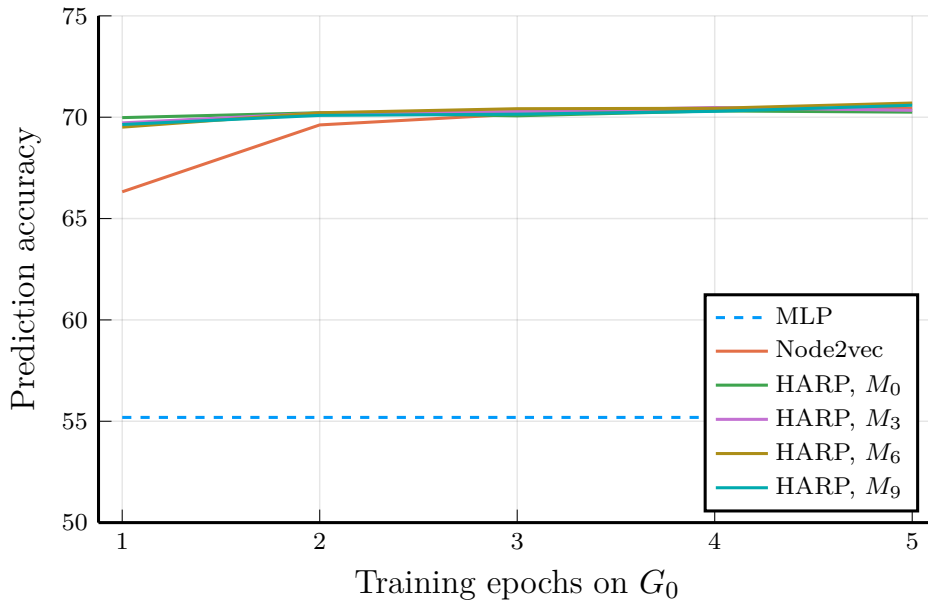


Figure 1: Performance over epochs of models pretrained on different coarsening levels.



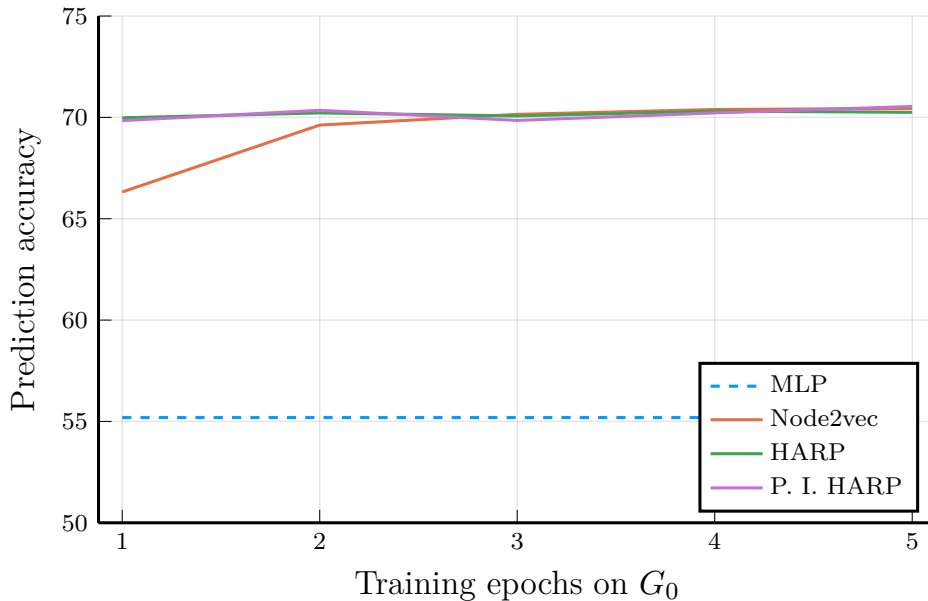


Figure 2: Standard HARP compared to the version built on partially injective homomorphisms.

### 6.3 Feasibility of partially injective transformations

In order to test the feasibility of HARP-like algorithms based purely on partially injective homomorphisms, ordinary HARP is compared to one with the coarsening proposed in Section 4. Figure 2 shows the performance of such a model compared to ordinary HARP, node2vec and purely feature-based MLP classifier. As can be seen, there is no meaningful difference between the two models.

## 7 Future work

In this work-in-progress, two properties of graph-based models are studied. While these properties seem to be unconnected at first, they are both highly relevant to the future progress of our work. The target use of these approaches is the detection of similar substructures in graphs of very large size. It is computationally unfeasible to use techniques such as graph convolution for extremely large graphs. With HARP, such graphs could be significantly reduced in size, enabling the use of such more computationally demanding techniques. Also, the way in which the graphs are coarsened can be specifically tailored in a way that either preserves, or collapses the subgraphs of interest. Using such tailored coarsening techniques would allow for scanning for a pre-determined structure in the graph.

The target application of this work lies in the domain of computer network security. Malware running on endpoint devices connects to remote resources, i.e. as a check for internet connectivity or a connection to a Command & Control server. From the traffic of regular user-induced behaviour as well as malware, a connection map can be built and

represented with a graph. A skilled analyst can recognize nodes and edges associated with malicious software, however, in the present time, some families of malware are either sold to multiple threat actors and set up with duplicate infrastructure or they change the infrastructure they use as a means of evading detection. Our work aims towards recognizing such duplications or changes in infrastructure previously marked as malicious by an analyst. Moreover, the methods studied could enable automatic recognition of new infrastructure employed by previously seen malware families and suggest it for manual review, thus dramatically reducing the time needed until the new infrastructure is discovered.

## 8 Conclusion

In our work in progress, a way to merge method generality, computational efficiency and high performance was explored. HARP and partially injective homomorphisms were presented and subsequently connected as a way to, in a future work, adapt graph coarsenings to a specific task. This connection was experimentally verified not to impact prediction performance. Furthermore, the effect of HARP pretraining on learning characteristics was studied and found to reduce the need for training on fine (and therefore large) graphs, making way for a more efficient training without sacrificing performance.

## References

- [1] H. Chen, B. Perozzi, Y. Hu, and S. Skiena. *HARP: Hierarchical Representation Learning for Networks*. Proceedings of the AAAI Conference on Artificial Intelligence **32** (April 2018). Number: 1.
- [2] F. Frasca, E. Rossi, D. Eynard, B. Chamberlain, M. Bronstein, and F. Monti. *SIGN: Scalable Inception Graph Neural Networks*. arXiv:2004.11198 [cs, stat] (November 2020). arXiv: 2004.11198.
- [3] A. Grover and J. Leskovec. node2vec: Scalable feature learning for networks. In 'Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining', 855–864, (2016).
- [4] W. Hu, M. Fey, M. Zitnik, Y. Dong, H. Ren, B. Liu, M. Catasta, and J. Leskovec. *Open Graph Benchmark: Datasets for Machine Learning on Graphs*. arXiv:2005.00687 [cs, stat] (February 2021). arXiv: 2005.00687.
- [5] Q. Huang, H. He, A. Singh, S.-N. Lim, and A. R. Benson. *Combining Label Propagation and Simple Models Out-performs Graph Neural Networks*. arXiv:2010.13993 [cs] (November 2020). arXiv: 2010.13993.
- [6] D. P. Kingma and J. Ba. *Adam: A Method for Stochastic Optimization*. arXiv:1412.6980 [cs] (January 2017). arXiv: 1412.6980.

- 
- [7] A. Paszke, S. Gross, F. Massa, A. Lerer, J. Bradbury, G. Chanan, T. Killeen, Z. Lin, N. Gimelshein, L. Antiga, A. Desmaison, A. Kopf, E. Yang, Z. DeVito, M. Raison, A. Tejani, S. Chilamkurthy, B. Steiner, L. Fang, J. Bai, and S. Chintala. PyTorch: An Imperative Style, High-Performance Deep Learning Library. In 'Advances in Neural Information Processing Systems 32', H. Wallach, H. Larochelle, A. Beygelzimer, F. d. Alché-Buc, E. Fox, and R. Garnett, (eds.), 8024–8035. Curran Associates, Inc., (2019).
- [8] B. Perozzi, R. Al-Rfou, and S. Skiena. Deepwalk: Online learning of social representations. In 'Proceedings of the 20th ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining', 701–710, (2014).
- [9] G. Salha, R. Hennequin, and M. Vazirgiannis. *Keep It Simple: Graph Autoencoders Without Graph Convolutional Networks*. arXiv:1910.00942 [cs, stat] (October 2019). arXiv: 1910.00942.
- [10] T. H. Schulz, T. Horváth, P. Welke, and S. Wrobel. Mining Tree Patterns with Partially Injective Homomorphisms. In 'Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases', M. Berlingerio, F. Bonchi, T. Gärtner, N. Hurley, and G. Ifrim, (eds.), Lecture Notes in Computer Science, 585–601, Cham, (2019). Springer International Publishing.
- [11] J. Tang, M. Qu, and Q. Mei. *PTE: Predictive Text Embedding through Large-scale Heterogeneous Text Networks*. In 'Proceedings of the 21th ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining', Association for Computing Machinery (August 2015), 1165–1174.
- [12] J. Tang, M. Qu, M. Wang, M. Zhang, J. Yan, and Q. Mei. Line: Large-scale information network embedding. In 'Proceedings of the 24th international conference on world wide web', 1067–1077, (2015).
- [13] Z. Zhang, P. Cui, J. Pei, X. Wang, and W. Zhu. *Eigen-GNN: A Graph Structure Preserving Plug-in for GNNs*. arXiv:2006.04330 [cs, stat] (June 2020). arXiv: 2006.04330.



# Fluid Flow Simulations through Distributor Plate Using Cumulant Lattice Boltzmann Method\*

Pavel Eichler

4th year of PGS, email: `eichlpa1@fjfi.cvut.cz`

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Radek Fučík, Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

**Abstract.** Fluidized bed boilers are modern devices for energy generation through the combustion of granular solid fuels, such as coal waste or woody biomass. Because of the complex geometry of the boiler and expensive experiments, CFD simulations are a useful tool to investigate complex phenomena occurring during the combustion process and optimize the boiler performance.

One of the fluidized boiler parts is the combustion chamber, where fossil fuel releases its energy to the surrounding area through combustion. It was observed that air space distribution plays a dominant role. Thus, there is a plate at the bottom of the combustion chamber. This plate contains tiny holes which should distribute the airflow uniformly in the combustion chamber. Furthermore, this plate prevents the falling of fuel particles to the other parts before the combustion chamber.

In this contribution, we consider an experimental model of the fluidized bed boiler and study the dependence of pressure drop at the distributor plate on the airflow rate. The experimental results are compared with the results of two numerical methods. The first numerical method is the cumulant lattice Boltzmann method. Next, the finite volume method implemented in ANSYS Fluent CFD software is used.

The numerical results of pressure drop with a low airflow rate match the experimental results well. As the airflow rate grows, the differences between numerical and experimental results grow, and ANSYS Fluent simulations better predict the experimental results. However, lattice Boltzmann method uses finer computational mesh, and thus it produces a detailed view of the air distribution behind the distributor holes. The obtained results can be utilized to design a simplified model of the distributor plate in our complex CFD tool for the simulation of multiphase flow and combustion in fluidized bed boilers.

*Keywords:* cumulant lattice Boltzmann method, turbulent fluid flow, pressure drop, direct numerical simulations.

**Abstrakt.** Kotle s fluidním ložem jsou moderní zařízení pro výrobu energie spalováním granulovaných tuhých paliv, jako je uhelný odpad nebo dřevní biomasa. Vzhledem ke složité ge-

---

\*The work was supported by the project Research center for low-carbon energy technologies, project of excellent research no. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000753, Operational Programme of Research, Development and Education, Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic (2018-2022).

ometrii kotle a nákladným experimentům jsou simulace CFD užitečným nástrojem pro zkoumání složitých jevů vyskytujících se během spalování a optimalizaci výkonu kotle.

Jednou z částí fluidního kotle je spalovací komora, kde se spaluje fosilní palivo a uvolňuje se energie do okolního prostředí. Bylo pozorováno, že rozložení proudění vzduchu ve spalovací komoře hraje významnou roli. Na dně spalovací komory je tak umístěna distributorová deska. Tento distributor obsahuje malé otvory, které by měly rovnoměrně distribuovat proud vzduchu ve spalovací komoře. Kromě toho tato deska zabraňuje pádu částic paliva do ostatních částí před spalovací komorou.

V tomto příspěvku budeme uvažovat proudění vzduchu v experimentálním fluidním kotli a budeme vyšetřovat tlakovou ztrátu na distributoru v závislosti na velikosti vstupního toku. Experimentální výsledky jsou porovnány s výsledky dvou numerických metod. První numerickou metodou je kumulantní mřížková Boltzmannova metoda. Druhou metodou je metoda konečných objemů implementovaná v softwaru ANSYS Fluent.

Numerické výsledky tlakové ztráty s nízkým průtokem vzduchu dobře odpovídají experimentálním výsledkům. S rostoucí hodnotou toku vzduchu rostou také rozdíly mezi numerickými a experimentálními výsledky. Výsledky získané pomocí softwaru ANSYS Fluent lépe aproximují experimentální výsledky. Mřížková Boltzmannova metoda však používá jemnější výpočetní síť, a tak poskytuje detailnější pohled na distribuci vzduchu za otvory distributoru. Získané výsledky lze použít k návrhu zjednodušeného modelu distributoru v našem vyvíjeném komplexním nástroji CFD pro simulaci vícefázového proudění a spalování v kotlích s fluidním ložem.

*Klíčová slova:* kumulantní mřížková Boltzmannova metoda, turbulentní proudění, tlaková ztráta, přímé numerické simulace.

**Full paper:** This paper [1] is under review in JJIAMP and summarizes results of the research group engaged in OPVVV project no. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000753.

## References

- [1] Beneš M., Eichler P., Fučík R., Hrdlička J., Klinkovský J., Kolář M., Smejkal T., Skopec P., Solovský J., Strachota P., Straka R., Žák A., Lattice Boltzmann Simulations of Air Flow through the Distributor Plate in an Experimental Bubbling Fluidized Bed Combustor. Under review in JJIAMP.

# Computing Funnels Using Numerical Optimization Based Falsifiers\*

Jiří Fejlek

4th year of PGS, email: [fejlejir@fjfi.cvut.cz](mailto:fejlejir@fjfi.cvut.cz)

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Stefan Ratschan, Department of Computational Mathematics

Institute of Computer Science, CAS

**Abstract.** An important task in motion planning is to follow a given state trajectory into some target set. This involves first designing a controller that tracks the desired state trajectory, and then determining a neighbourhood of the trajectory where this controller fulfils its goal of reaching the target set [7]. In this contribution, we present an efficient method for this second task.

A funnel is a time-varying set of states that contains the followed system trajectory, for which the evolution from within the funnel at any given time stays in the funnel. Thus, it generalizes the behaviour of the system trajectory to the states near it. In the literature [3, 8], funnel construction is usually based on sum-of-squares programming (SOS) [6], a relaxation technique for polynomial systems. However, such formulations are sensitive to numerical errors and scale poorly to high dimensions both in theory [2] and in practice [5].

Our algorithm is based on falsification that tackles the funnel computation task directly through numerical optimization. This method allows computation of accurate funnel estimates far more efficiently. We show in our computational experiments that the algorithm computes larger funnels in less time compared to SOS programming. The algorithm does not formally verify in itself. But even without the verification part, the falsifiers still provide upper estimates of control funnels which provides clear boundaries, beyond which controller will probably fail. Moreover, its result can then be formally verified using a well-known palette of verification techniques that includes—in addition to SOS programming—computer algebra [1] or interval computation [4].

*Keywords:* nonlinear systems, motion planning, Lyapunov methods

**Abstrakt.** Následování dané trajektorie systému je důležitou součástí plánování pohybu. Za tímto účelem je nejprve nutné navrhnout příslušné řízení, a následně určit okolí trajektorie, na kterém toto řízení navede systém do množiny cílových stavů [7]. V tomto příspěvku se zaměříme na tuto druhou část.

Funnel je časově proměnná množina stavů, která obsahuje sledovanou trajektorii systému a pro kterou časový vývoj stavů systému z tohoto funnelu zůstává uvnitř funnelu. Funnel tudíž zobecňuje chování systému podél sledované trajektorie i na stavy z okolí této trajektorie. Konstrukce funnelů je obvykle [3, 8] založená na sum-of-squares programování (SOS) [6], což je relaxační technika pro polynomiální systémy. Taková reformulace je ale citlivá na numerické chyby a škáluje se špatně v dimenzi úlohy a to jak teoreticky [2], tak prakticky [5].

---

\*This work was supported by the project GA21-09458S of the Czech Science Foundation GAČR and institutional support RVO:67985807

Náš algoritmus je založený na falzifikátoru, který řeší napočítávání funnelů přímo pomocí numerické optimalizace. Toto umožňuje rychle počítání přesných odhadů funnelů. Ukážeme, že naše metoda oproti SOS metodě napočítává na testovacích úlohách větší funnely rychleji. Algoritmus sám o sobě neobsahuje formální verifikaci. Přesto, i bez formální verifikace, falzifikátor poskytuje horní odhady funnelů, které představují jasnou hranici, za kterou řízení může selhat v dosažení cílové množiny. Výsledné odhady funnelů lze navíc následně formálně verifikovat například pomocí algebraických [1] a intervalových [4] metod.

*Klíčová slova:* nelineární systémy, plánování pohybu, Ljapunovské metody

**Full paper:** Jiří Fejlek and Stefan Ratschan, Computing Funnels Using Numerical Optimization Based Falsifiers, arXiv:2109.11420 (<https://arxiv.org/abs/2109.11420>), 2021.

## References

- [1] G. E. Collins and H. Hong. *Partial cylindrical algebraic decomposition for quantifier elimination*. Journal of Symbolic Computation **12** (1991), 299–328.
- [2] A. Majumdar, G. Hall, and A. A. Ahmadi. *Recent scalability improvements for semidefinite programming with applications in machine learning, control, and robotics*. Annual Review of Control, Robotics, and Autonomous Systems **3** (2020), 331–360.
- [3] A. Majumdar and R. Tedrake. *Funnel libraries for real-time robust feedback motion planning*. The International Journal of Robotics Research **36** (2017), 947–982.
- [4] S. Ratschan. *Efficient solving of quantified inequality constraints over the real numbers*. ACM Transactions on Computational Logic **7** (2006), 723–748.
- [5] H. Ravanbakhsh and S. Sankaranarayanan. *Learning control Lyapunov functions from counterexamples and demonstrations*. Autonomous Robots **43** (2019), 275–307.
- [6] W. Tan and A. Packard. *Searching for control Lyapunov functions using sums of squares programming*. Allerton conference on communication, control and computing (2004), 210–219.
- [7] R. Tedrake, I. R. Manchester, M. Tobenkin, and J. W. Roberts. *LQR-trees: Feedback motion planning via sums-of-squares verification*. The International Journal of Robotics Research **29** (2010), 1038–1052.
- [8] M. M. Tobenkin, I. R. Manchester, and R. Tedrake. *Invariant funnels around trajectories using sum-of-squares programming*. IFAC Proceedings Volumes **44** (2011), 9218–9223.



# Towards Online Anomaly Detection with Density-Approximating Neural Network Models

Martin Flusser

6th year of PGS, email: [flussmar@fjfi.cvut.cz](mailto:flussmar@fjfi.cvut.cz)

Department of Software Engineering

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisors:

Petr Somol, Avast Software &

Institute of Information Theory and Automation, CAS

Vladimír Jarý, Department of Software Engineering

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

Tomáš Pevný, Department of Computer Science

Faculty of Electrical Engineering, CTU in Prague

**Abstract.** Anomaly detection is gaining on importance with the massive increase of data we can observe in every domain of human activity. In many applications, the goal is to recognize objects or events of classes with unclear definitions and missing prior ground truth, while the only assumed certainty is that these entities should be different from what we know well.

The problem can thus be seen as the problem of modeling what is common and then identifying outliers. Anomaly detection is inherent in cybersecurity, is successfully applied in industrial quality control, banking and credit card fraud detection, in medicine it can help raise alarms when a patient's condition deteriorates, etc.

Traditionally, in anomaly detection context the common use of neural models is in the form of auto-encoders and generative adversarial models. These models often perform well but do not guarantee to perform as expected in all cases. A popular more direct way of modeling anomaly distribution is through  $k$ -Nearest Neighbor models. Although  $k$ NN can perform better than traditional models in some cases, their applicability can be seriously impaired by their space and time complexity especially with high-dimensional large-scale data.

In our previous work [1] [2], we proposed density-approximating neural network models for anomaly detection (DANNMAD), the alternative use of neural models in anomaly detection. Instead of modeling anomaly indirectly through reconstruction error as is common in auto-encoders, DANNMAD use a neural model to efficiently approximate anomaly as inferred by  $k$ -Nearest Neighbor, which is popular due to its good performance as an anomaly detector. Moreover, the neural model can achieve even better accuracy in case of noisy data as it allows better control of over-fitting through control of its expressivity.

In this contribution, we propose online learning for DANNMAD, an essential ability for many real-world application scenarios, especially for cybersecurity. Whereas the update process is not straightforward, we demonstrate and discuss the main challenges. We explain the trade-off between accuracy and memory requirements and introduce possible strategies at various trade-off levels. Finally, we focus on the strategy with the best compromise of the trade-off. We utilize two various evaluation schemes for the online learning and then we briefly evaluate the proposed

approach on both public (UCI) data and real-world computer network traffic data provided by Cisco Systems.

*Keywords:* Anomaly detection, neural network, nearest neighbor, computer network traffic, online anomaly detection

**Abstrakt.** Detekce anomálií nabírá stále většího významu s rostoucím objemem dat v každé doméně lidské aktivity. V mnoha oblastech je cílem této úlohy rozpoznat objekt nebo událost, jejichž podoba je neznámá, na základě odlišností od již známých pozorování. Tato úloha může být také chápána jako modelování známých objektů a následné rozeznávání objektů vybočujících z modelu. Detekce anomálií je nedílnou součástí kybernetické bezpečnosti, úspěšně se používá při kontrole kvality v průmyslu, detekci finanční kriminality v bankovníctví, nebo medicíně, kde se používá k automatizovanému hlídání stavu pacienta.

Typické použití neuronových sítí při detekci anomálií je ve formě auto-encoderu a generativních modelů. Auto-encodery nabízejí dobrý poměr rychlosti a kvality detekce, ale není zaručena optimální funkčnost ve všech případech. Nejznámější a zároveň velmi spolehlivý a přímý způsob modelování distribuce anomálií se provádí pomocí metody  $k$ -tého nejbližšího souseda ( $k$ NN). Přestože  $k$ NN v některých případech dokonce vykazuje lepší výsledky než auto-encodery, jeho použití je značně limitováno výpočetní a paměťovou náročností, zejména pro objemná a vysoko dimenzionální data.

V naší předchozí práci [1] [2] jsme představili metodu zvanou „density – approximating neural network“ (DANNMAD), která je alternativním přístupem pro použití neuronových sítí při detekci anomálií. Hlavní výhodou zmíněné neurální metody oproti auto-encoderu je přímé modelování distribuce anomálií, které je emitováno pomocí konvenčního  $k$ NN, jež dosahuje velmi dobrých výsledků při detekci anomálií. Tato aproximační metoda dosahuje srovnatelných výsledků s  $k$ NN při mnohem menší časové a paměťové náročnosti vzhledem k vlastnostem neuronové sítě. V některých případech dosahuje dokonce lepších výsledků než  $k$ NN díky lepšímu zobecnění a to zejména v případech kdy trénovací data obsahují větší množství šumu.

V tomto příspěvku navrhujeme metody pro online učení modelu DANNMAD. Online učení je základním předpokladem k úspěšnému nasazení zmíněného modelu na reálné problémy, zejména v oboru počítačové bezpečnosti. Vzhledem k tomu, že přechod k online učení není přímočarý, budeme diskutovat vzniklé problémy a jejich možná řešení. Vysvětlíme kompromis mezi přesností a paměťovou náročností a nastíníme několik strategií které operují na různých úrovních tohoto kompromisu. Nakonec se zaměříme na strategii která nabízí skvělé vlastnosti od obojího. Ukážeme dvě různá schémata pro evaluaci online učení a stručně shrneme dosavadní výsledky pomocí jak veřejně dostupných dat z UCI repozitáře tak reálných dat z oblasti počítačové bezpečnosti poskytnuté firmou Cisco Systems.

*Klíčová slova:* Detekce anomálií, auto-encoder, neuronové sítě, metoda nejbližšího souseda, provoz na počítačové síti, online detekce anomálií

## References

- [1] M. Flusser, T. Pevný, and P. Somol. *Density-approximating neural network models for anomaly detection*. ACM SIGKDD workshop on outlier detection de-constructed (2018).
- [2] M. Flusser and P. Somol. *Adaptive approach for density-approximating neural network models for anomaly detection*. In 'Conference on Complex, Intelligent, and Software Intensive Systems', 415–425. Springer, (2020).

# Mathematical Modeling of the Multicomponent Flow in Porous Media\*

Petr Gális

4th year of PGS, email: galispet@fjfi.cvut.cz

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Jiří Mikyška, Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

**Abstract.** The multicomponent flow modeling has many applications in various disciplines ranging from petroleum engineering (enhanced oil recovery) to geochemical engineering (groundwater contamination). In this work we consider the single-phase flow of miscible and compressible multicomponent fluids in porous media. The mathematical model consists of Darcy velocity, transport equations for components of a mixture, pressure equation and associated constitutive relations (e.g. equation of state or viscosity). We follow an approach of the previous works of [1, 2, 4, 5] based on the combination of the mixed-hybrid finite element for the approximation of the pressure and velocity fields and discontinuous Galerkin method for the approximation of transport equations. Although they used piecewise linear basis functions for the concentrations, they used only piecewise constant functions for the pressures and lowest-order approximation for the velocity field. They also used a different form of the pressure equation which seems to be more complicated than the one used in [3]. In contrast to classical IMPEC schemes, used in the previous works and which are known to have a mass-conservation problem, Chen, Fan and Sun [3] have rewritten the pressure equation with only one additional parameter to be determined and proposed a new fully mass-conservative IMPEC scheme where conservation of mass for all components holds true. So far only the lowest-order approximation for pressure and velocity field has been utilized in the models. In this work we show how to extend these ideas for the higher-order framework. In contrast to previous works we apply higher-order scheme not only for the transport of the species but also for the pressure and the velocity fields.

*Keywords:* Multicomponent flow, Mixed-hybrid finite element method, Discontinuous Galerkin method

**Abstrakt.** Modely vícesložkového proudění mají široké využití přes oblasti ropného průmyslu (těžba ropy) až po geochemické inženýrství (kontaminace podzemních vod). V této práci zkoumáme jednofázové proudění mísitelné vícesložkové směsi v porézním prostředí. Matematický model je popsán Darcyho rychlostí, rovnicí transportu pro každou složku směsi, tlakovou rovnicí a konstitučními vztahy (např. pro stavovou rovnici či viskozitu). K řešení jsme zvolili přístup jako v [1, 2, 4, 5] založený na kombinaci hybridní verze metody smíšených konečných prvků pro řešení tlakového a rychlostního pole a nespojitě Galerkinovy metody pro řešení transportních rovnic. Přestože je v těchto pracích použita aproximace koncentrací po částech lineární funkcí,

---

\*This work has been supported by the by the Czech Science Foundation project no. 21-09093S Multi-phase flow, transport, and structural changes related to water freezing and thawing in the subsurface, by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic under the OP RDE grant number CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000778 Centre for Advanced Applied Sciences, and by the Student Grant Agency of the Czech Technical University in Prague, grant no. SGS20/184/OHK4/3T/14.

pro tlakové a rychlostní pole je stále užita aproximace nejnižšího řádu. V uvedených pracích je dále použito standardní IMPEC schéma, které je známo svým problematickým chováním se zachováním hmoty. To je vyřešeno v [3], společně s uvedením tlakové rovnice v jednodušším tvaru, návrhem nové verze iterativního IMPEC schématu, kde je problém se zachováním hmoty odstraněn. Doposud je ve všech uvedených pracích použita aproximace nejnižšího řádu pro tlakové a rychlostní pole. V této práci jsou předešlé modely rozšířeny o použití metod vyššího řádu přesnosti. Vyšší řád aproximace je tedy použit jak pro koncentrace tak pro tlakové a rychlostní pole.

*Klíčová slova:* Proudění vícesložkové směsi, Hybridní verze metody smíšených konečných prvků, Nespojitá Galerkinova metoda

**Full paper:** Gális, Petr and Mikyška, Jiří. Mathematical Modeling of the Single-Phase Multicomponent Flow in Porous Media. *International Conference on Computational Science 2021, Proceedings, Part VI*, 2021.

## References

- [1] Hoteit H. and Firoozabadi A. Multicomponent Fluid Flow by Discontinuous Galerkin and Mixed Methods in Unfractured and Fractured Media. *Water Resources Research*, 375–391, 2005.
- [2] Hoteit H. and Firoozabadi A. Compositional Modeling By the Combined Discontinuous Galerkin and Mixed Methods. *Society of Petroleum Engineers*, 2006.
- [3] Chen H. and Fan X. and Sun S. A Fully Mass-Conservative Iterative IMPEC Method for Multicomponent Compressible Flow in Porous Media. *Journal of Computational and Applied Mathematics, Volume 362*, 1–21, 2019.
- [4] Moortgat J. and Firoozabadi A. Mixed-hybrid and Vertex-Discontinuous-Galerkin Finite Element Modeling of Multiphase Compositional Flow on 3D Unstructured Grids. *Journal Computational Physics, Volume 315*, 476–500, 2016.
- [5] Moortgat J. and Sun S. and Firoozabadi A. Compositional Modeling of Three-Phase Flow With Gravity Using Higher-Order Finite Element Methods. *Water Resources Research, Volume 47*, 2011.
- [6] Polívka O. and Mikyška J. Combined Mixed-Hybrid Finite Element–Finite Volume Scheme for Computation of Multicomponent Compressible Flow in Porous Media. *Numerical Mathematics and Advanced Applications*, 559–567, 2011.
- [7] Polívka O. and Mikyška J. Numerical Simulation of Multicomponent Compressible Flow in Porous Medium. *Journal of Math for Industry, Volume 3*, 53–60, 2013.

# Stochastic Modeling and Dimension Estimation of Fractal Diffusion\*

František Gašpar

3rd year of PGS, email: [gaspafra@fjfi.cvut.cz](mailto:gaspafra@fjfi.cvut.cz)

Department of Software Engineering

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Jaromír Kukal, Department of Software Engineering

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

**Abstract.** Stochastic models of diffusion in spatial domains of noninteger dimension are widely applicable as a basis of simulations. Obtaining data having fractal properties requires the construction of fine enough discrete lattices that is computationally expensive. This contribution presents a novel way of representing graph-based finite models using a generalized coordinate system. Fractal properties of obtained simulation data are tested using dimension estimates based on generalized linear regression.

*Keywords:* fractal diffusion, fractal dimension, spectral dimension, walk dimension

**Abstrakt.** Stochastické modely difúze v prostorech s neceločíselnou dimenzí jsou široce využívány pro účely simulací. Pro získání dat s fraktálními vlastnostmi je nutná konstrukce dostatečně jemných struktur, které jsou výpočetně náročné. Tento příspěvek představuje nový způsob reprezentace konečných modelů založených na grafech, který užívá zobecněný souřadnicový systém. Fraktální vlastnosti dat získaných ze simulací jsou testovány pomocí odhadů dimenze založených na zobecněné lineární regresii.

*Klíčová slova:* fraktální difuze, fraktální dimenze, spektrální dimenze, dimenze náhodné procházky

## 1 Introduction

Analysis on fractals was initially motivated by modelling of heat and wave transfer in distorted media [1]. Nature of these problems motivated mathematicians to present a new field *analysis on fractals* and to introduce differential operators on fractals such as Laplace operator [6]. As a reference for the introduction to fractals serves [7] or [11].

Several definitions of dimension exist. The Hausdorff dimension [7] based on the Hausdorff measure is the most general one. The similarity dimension [10] based on the scaling property of fractal sets can be used only for simple self-similar sets. For these sets the Hausdorff dimension and the similarity dimension take on the same value and are referred to as fractal dimension. Study of dynamic systems within fractal spaces further introduces walk dimension as discussed in [2, 4].

---

\*The research was supported by the internal grant of Czech Technical University in Prague SGS20/190/OHK4/3T/14. Computational resources were supplied by the project "e-Infrastruktura CZ" (e-INFRA CZ ID:90140) supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic

Above mentioned works assume known fractal dimensions as parameters of studied systems. Our focus is the inverse problem, finding the unknown values of the dimensions using observed properties of a given set. Most of the known methods for estimating the similarity dimension of fractal sets are based on the evaluation of a single geometric characteristic, e.g. box-counting [12]. Estimating dimensions by studying process within the fractal set, e.g. diffusion, and not the fractal set itself is a novel approach.

## 2 Diffusion over Fractal Substrate

### 2.1 Fractal Substrate

We will study the set of points  $\mathcal{F} \subset \mathbb{R}^d$  where  $d \in \mathbb{N}$  is traditional vector space dimension and  $\mathcal{F}$  is finite substrate considered as a model of fractal set. Firstly we introduce diffusion based on physical model that can be performed on regular evenly spaced grid which is defined as follows:

Let  $h > 0$  be constant grid spacing and  $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n \in \mathbb{R}^d$  be its normalized base:  $\|\mathbf{e}_i\| = h, \forall i \in \{1, \dots, n\}$ . The grid points are defined as  $\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n w_i \mathbf{e}_i$ , where  $\mathbf{w} \in \mathbb{Z}^n$ . The *regular grid* is infinite undirected graph  $\mathcal{G} = \langle \mathcal{V}, \mathcal{E} \rangle$ , where  $\mathcal{V} = \{\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n w_i \mathbf{e}_i : \mathbf{w} \in \mathbb{Z}^n\}$  is set of all grid points and  $\mathcal{E} = \{\{\mathbf{x}, \mathbf{y}\} : \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathcal{V}, \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2 = h\}$  is a set of grid points connections. In this paper, we will study square and hexagonal grids as discrete approximations of  $2D$  continuum.

The main subject of this paper is diffusion on finite discrete approximations of fractal sets. Therefore, we define *finite substrate*  $\mathcal{F}$  as finite compact sub-graph of graph  $\mathcal{G}$ , consisting of one edge at least. There are many cases of finite substrates related to finite depth approximations of Sierpinski Gasket and many other self-similar fractal sets.

## 3 Dimension Estimation

Fractal diffusion modeled as random walk  $\{X_t\}_{t=1}^N$  on finite substrate  $\mathcal{F}$  serves as a tool to simulate and study properties of modeled fractal sets. Assuming that  $X_t$  is isotropic on  $\mathcal{G}$  we limit our study on absolute travelled distance  $R_t = \|X_t - X_0\|_2$  where  $X_0$  is selected uniformly randomly from  $\mathcal{F}$ . The aim is to present estimates of walk dimension  $d_w$ , and spectral dimension  $d_s$  obtained only from i.i.d. realizations  $r_1, \dots, r_n \sim R_t$ .

### 3.1 Spectral Dimension

Base model giving distribution of mass on given fractal set from [2, 4] states that there exist  $A_1, A_2, Q_1, Q_2 \in \mathbb{R}$  for any  $\mathbf{x} \in \mathcal{F}, r = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|_2$  and  $t > 0$  so that

$$\begin{aligned} A_1 t^{-d_s/2} \exp\left(-Q_1 \left(\frac{r^{d_w}}{t}\right)^{1/(d_w-1)}\right) \\ \leq \Pr(R_t = r) \leq A_2 t^{-d_s/2} \exp\left(-Q_2 \left(\frac{r^{d_w}}{t}\right)^{1/(d_w-1)}\right). \end{aligned} \quad (1)$$

Inequalities (1) cannot be generally reduced to equality for  $A_1 = A_2 = A, Q_1 = Q_2 = Q$  because scaling is needed for varying scales of values of  $r$  and  $t$ .

To obtain advantageous relation to use as a base of spectral dimension estimate we reduce inequalities (1) by setting  $r = 0$  and reducing studied time on short time window  $t \in (t_1, t_2)$ . These concessions from generality allow us to assume return probability model

$$p_{0,t} = \Pr(R_t = 0) = A t^{-d_s/2}. \quad (2)$$

Having sample  $r_{1,t}, \dots, r_{n,t} \sim R_t$  we are able to obtain estimate of  $p_{0,t}$  as

$$\widehat{p}_{0,t} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \mathbf{1}(r_{i,t} = 0), \quad (3)$$

where  $\mathbf{1}$  is the indicator function. Let us note that given the construction of estimate  $\widehat{p}_{0,t}$  we can assume its binomial distribution.

### 3.2 Walk Dimension

Walk dimension  $d_w$ , linked together with fractal dimension  $d_f$  and spectral dimension  $d_s$  by relation

$$d_s = 2 \frac{d_f}{d_w}, \quad (4)$$

plays a role as power in the relation for moments  $m_\alpha(t) = \mathbb{E} R_t^\alpha$ . From inequalities (1) follows that for any  $\alpha > 0$  there exists  $C_1, C_2 \in \mathbb{R}^+$  for any  $\mathbf{x} \in \mathcal{F}, r = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_0\|_2$  and  $t > 0$  so that

$$C_1 t^{\alpha/d_w} \leq m_\alpha(t) \leq C_2 t^{\alpha/d_w}. \quad (5)$$

Similarly to the distribution inequalities (1) we must limit studied time to  $t \in (t_1, t_2)$  to be able to present moment model

$$m_2(t) = C t^{2/d_w}, \quad C > 0. \quad (6)$$

Using only second moments  $\alpha = 2$  allows us to discuss distribution of the second moment estimate

$$\widehat{m}_2(t) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n r_{i,t}^2 \quad (7)$$

as the sample estimate of the moment  $m_2(t_k)$ . Using  $\zeta(t) = X_t - X_0$  and denoting  $s > 0$  as a scale and we have

$$R_t^2 = \|\zeta(t)\|_2^2 = \sum_{i=1}^d \zeta_i^2(t), \quad \text{where } \zeta_i \sim \mathcal{N}(0, s_t^2), \quad (8)$$

for the case of diffusion in  $d \in \mathbb{N}$  space. In this case

$$m_2(t) = \mathbb{E} R_t^2 = s_t^2 d \quad (9)$$

but we study the estimate  $\widehat{m}_2(t)$  using scaling to obtain

$$\frac{n \cdot \widehat{m}_2(t)}{s_t^2} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^d \zeta_{i,j}^2(t), \quad (10)$$

where  $\zeta_{i,j}(t) \sim N(0, 1)$ . Therefore  $\frac{n \cdot \widehat{m}_2(t)}{s_t^2} \sim \chi_{n \cdot d}^2$  which can be generalized for noninteger values of dimension  $d_f \in \mathbb{R}^+$  as  $\frac{n \cdot \widehat{m}_2(t)}{s_t^2} \sim \Gamma(n \cdot d_f/2, 2)$  and also

$$\widehat{m}_2(t) \sim \Gamma\left(\frac{n \cdot d_f}{2}, \frac{2 s_t^2}{n}\right), \quad s_t^2 = \frac{m_2(t)}{d_f}, \quad m_2(t) = C t^{2/d_w}. \quad (11)$$

Models (2) and (6) together with distributions of used estimates allow us in Section 4.3 define and statistically test estimates of walk and spectral dimension.

## 4 Finite Substrate Representation

The Monte Carlo simulation of the modeled fractal diffusion process  $X_t$  serves as a source of random realizations of total travelled distances  $r_1, \dots, r_n \sim R_t$ , which represent distribution of the mass in the finite substrate  $\mathcal{F}$ . Initial inputs of the simulation are the number of simulation steps  $t$ , jump probability  $p$  and the model of finite substrate  $\mathcal{F}$  consisting of the set of vertexes  $\mathcal{V}$  coordinates and the set of edges  $\mathcal{E}$ .

For the each random walk realization the initial vertex is selected uniformly randomly from vertex set  $\mathcal{V}$ . For every following time step the new vertex is selected from the set of adjacent vertexes to the old vertex  $\mathbf{x}_{\text{new}} \in \{\mathbf{x} \in \mathcal{V} : \{\mathbf{x}, \mathbf{x}_{\text{old}}\} \in \mathcal{E}\} \cup \{\mathbf{x}_{\text{old}}\}$  in accordance with probability  $p$ .

For the following discussion we understand finite substrate  $\mathcal{F}$  as a undirected graph representing fractal set.  $\mathcal{F}$  can be generated and represented in various ways. For the needs of random walk simulations, large enough set of vertexes is needed so that effect of border vertexes is negligible even for random walk realizations with large number of time steps  $t$ . For self-similar fractal sets, number of vertexes grows exponentially with the level of fractal set model  $H$ . To be able to represent a very large graph  $\mathcal{F}$ , nontrivial method is needed.

### 4.1 Fractal Substrate Generation

For the simulation data presented in this work, representation of fractal set models was done only algorithmically, allowing for no need to generate or to store in memory large representations of graphs.

Let us assume graph  $\mathcal{F}_H = \langle \mathcal{V}_H, \mathcal{E}_H \rangle \subset \mathcal{G} = \langle \mathcal{V}, \mathcal{E} \rangle$  representing fractal substrate model of level  $H$ . For  $H = 0$  we further assume  $\mathcal{V}_0 = \{\mathbf{x}_0\}$ . Self-similar nature of modeled sets ensures existence of generating transforms  $T_{1,H}, T_{2,H}, \dots, T_{k,H} : \mathcal{V}_{H-1} \rightarrow \mathcal{V}_H$  such that  $\mathcal{V}_1 \equiv \{T_{i,1}(\mathbf{x}_0)\}_{i=1}^k$ . This generating property must hold for any value of level  $H$

$$\mathcal{V}_H \equiv \bigcup_{\mathbf{x} \in \mathcal{V}_{H-1}} \{T_{i,H}(\mathbf{x})\}_{i=1}^k. \quad (12)$$



Relation (12) implies that for any vertex  $\mathbf{x} \in \mathcal{V}_H$  there exists a sequence of  $H$  transform indexes  $i_1, \dots, i_H \in \{1, \dots, k\}$  such that

$$\mathbf{x} = (T_{i_1,1} \circ T_{i_2,2} \circ \dots \circ T_{i_H,H})(\mathbf{x}_0), \quad (13)$$

where function composition is used:  $(f \circ g)(x) = g(f(x))$ . We understand a vector of used transform indexes  $(i_1, \dots, i_H)$  as *recursive coordinates* of vertex  $\mathbf{x}$ .

Simple example to illustrate the use of recursive coordinates is construction of Sierpinski Gasket. Transforms defining recursive coordinates are defined as  $T_{i,H}(\mathbf{x}) = \mathbf{x} + \mathbf{v}_i 2^{-H+1}$  where unit translation vectors  $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3$ ,  $\mathbf{v}_i = (\cos(\phi_i), \sin(\phi_i))$  are used such that  $\phi_1 = \pi/2$ ,  $\phi_2 = 7\pi/6$ ,  $\phi_3 = 11\pi/6$ . Analogous construction can be applied for any Sierpinski Carpet. For Koch Curve the transformations are based on translation and rotation.

Having available just the set of  $k$  generating transforms defining self-similar fractal set we are able to uniformly randomly select any vertex  $\mathbf{x} \in \mathcal{V}_H$  by generating recursive coordinates  $(i_1, \dots, i_H)$ ,  $i_j \sim U(\{1, \dots, k\})$ . Let us also note that with growing value of level  $H$  complexity of presented algorithm grows only linearly.

## 4.2 Random Walk Modeling

Assumed random movement between two vertexes can have non zero probability if there is an edge connecting the vertexes. Having available recursive coordinate method of representing all vertexes we now discuss representation of edges  $\mathcal{E}$ .

For the purposes of random walk in finite substrate  $\mathcal{F}_H$  it is not necessary to have algorithmic way to generate all vertexes. We only focus of neighbouring vertexes  $\mathcal{N}_H(\mathbf{x}) = \{\mathbf{y} \in \mathcal{V}_H : \{\mathbf{y}, \mathbf{x}\} \in \mathcal{E}_h\}$  of the given vertex  $\mathbf{x} \in \mathcal{V}_H$  with recursive coordinates  $(i_1, \dots, i_H)$ . Finite substrate  $\mathcal{F}_H$  is a compact sub-graph of regular grid  $\mathcal{G}$ . This property guarantees that any edge from  $\mathcal{E}_H$  must align with a direction from the grid base  $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$ . Our aim is to determine whether or not movement from  $\mathbf{x}$  in direction  $\mathbf{e}_j$  corresponds to existing edge in  $\mathcal{E}_H$ .

Let us firstly note that all vertexes created from vertex  $(i_1, \dots, i_{H-1})$  from  $\mathcal{V}_{H-1}$  create set of vertexes from  $\mathcal{V}_H$  where edges are equivalent to  $\mathcal{E}_1$ . The set of edges  $\mathcal{E}_1$  therefore can be used to determine subset of the neighbourhood  $\mathcal{N}_H(\mathbf{x})$  by considering only the last coordinate  $i_H$  of vertex  $\mathbf{x}$ .

As an example can serve SG where  $\mathcal{E}_1$  forms a triangle and therefore any vertex  $(\dots, 1)$  shares an edge with vertex  $(\dots, 2)$  and  $(\dots, 3)$  for any depth  $H$ . Fact that only the last coordinate changes represents that movement was contained within only the last *level group* of fractal substrate.

We can represent edges  $\mathcal{E}_1$  of SG with direction arrows and recursive coordinate values: (1)  $\longrightarrow$  (2), (2)  $\longleftarrow$  (1), (2)  $\swarrow$  (3), (3)  $\searrow$  (2), (1)  $\nearrow$  (3), (3)  $\swarrow$  (1). Alternative representation is presented as values in boxes in adjacency schema in Table 1.

To obtain neighbouring vertexes not only from the last level group we must include edges connection the groups. These edges are equivalent to  $\mathcal{E}_2$  because we can observe multiple connected last level groups. All these edges from SG are represented in adjacency schema in Table 1. The schema shows how every coordinate value, not only the last one, can change if movement in given direction is executed. Boxes show always possible moves

corresponding to the moves in  $\mathcal{E}_1$ ,  $\times$  designates never allowed moves and the rest are the moves possible if there is an level  $H_0 \leq H$  that first  $H_0 - 1$  recursive coordinates remains the same. This schema is used as a rule on the change of the recursive coordinates from right to left until the  $H_0$ -th coordinate is achieved.

Let us present an example for SG for vertex  $(3, 2, 3, 3)$  from  $\mathcal{V}_4$ . Using adjacency schema in Table 1 we can obtain neighbouring vertexes firstly by examining the last recursive coordinate  $i_4 = 3$ . Always available movements from vertex  $(3)$  based on  $\mathcal{E}_1$ , shown as values in boxes, give us vertexes  $(3, 2, 3, 1)$  and  $(3, 2, 3, 2)$  corresponding to movements  $\swarrow$  and  $\searrow$ . Other two remaining possible movements are in directions  $\nearrow$  and  $\nwarrow$ . Applying these movements on recursive coordinates from right to left side and stopping if movement is not allowed  $\times$  or movement was contained in given level  $\square$  we obtain

$$\begin{aligned} (3, 2, 3, 3) &\nearrow (3, \times, 1, 1), \\ (3, 2, 3, 3) &\nwarrow (3, \boxed{3}, 2, 2), \end{aligned} \quad (14)$$

where vertex  $(3, 3, 2, 2)$  is obtained by allowed movements only. This shows that level  $H_0 = 2$ . Because all possible directions from vertex  $(3, 2, 3, 3)$  were discussed we have listed the full neighbourhood of this vertex.

Table 1: Adjacency schema for Sierpinski Gasket (SG). Schema pairs possible movements in hexagonal grid with recursive coordinates. Values in box show movements corresponding to edges  $\mathcal{E}_1$  which are always available.

	$\rightarrow$	$\nearrow$	$\nwarrow$	$\leftarrow$	$\swarrow$	$\searrow$
1	$\boxed{2}$	$\boxed{3}$	$\times$	2	3	$\times$
2	1	$\times$	$\boxed{3}$	$\boxed{1}$	$\times$	3
3	$\times$	1	2	$\times$	$\boxed{1}$	$\boxed{2}$

Adjacency schemas based on recursive coordinates and base directions of regular grid are well suited for description of edges from range of possible variation of Sierpinski Gaskets, Sierpinski Carpets and their higher dimension analogues. For curves like fractals such as Koch Curve and similar ones, where rotation is included, a simple alternative for representation of edges is available. For curves, only two directions are possible "left" and "right" no matter the orientation of the shape. These movements can be represented by numbering the generating transforms starting from zero  $T_{0,H}, \dots, T_{k-1,H}$  and understanding recursive coordinates as  $k$ -adic number. Movement on the line then corresponds to adding or subtracting one. In the case of KC and vertex  $(0, 3, 1, 0)$  from  $\mathcal{V}_4$  we can directly obtain neighbouring vertex  $(0, 3, 0, 3)$  and  $(0, 3, 1, 1)$ . Random walk on finite substrate  $\mathcal{F}_H$  of KC is therefore mapped on random walk on  $\{0, \dots, 4^H - 1\} \subset \mathbb{Z}$ .

### 4.3 Random Walk Statistics

Reliable source of independent realizations  $r_1, \dots, r_n \sim R_t$  allows us to utilize return model (2) and moment model (6) together with known distributions of estimates of return probability  $\widehat{p}_{0,t}$  and second moment  $\widehat{m}_2(t)$  to define estimates  $\widehat{d}_w$  and  $\widehat{d}_s$ .

Given exponential form of models (2, 6) *generalized liner model* approach was selected for the model regression. We assume relation

$$\mu = \exp(\beta_0 + \beta_1 \log(t)), \quad (15)$$

where the response variable  $\mu$  has distribution  $F$  and logarithmic link function is used. Regression produces estimates from which  $\hat{\beta}_1$  is our main focus.

To compare obtained estimate  $\hat{\beta}_1$  with previously known value  $\beta$  of the estimated parameter we also assume offset model

$$\mu + \omega = \exp(\gamma_0 + \gamma_1 \log(t)), \quad (16)$$

where  $\omega = \omega(\beta, t)$  present values calculated with previously known value of  $\beta$ . Standard  $p$ -value for test  $H_0 : \gamma_1 = 0$ ,  $H_1 : \gamma_1 \neq 0$  allows us to validate test

$$H_0 : \beta_1 = \beta, \quad H_1 : \beta_1 \neq \beta. \quad (17)$$

Considering return model (2) we obtain spectral dimension estimate  $\hat{d}_s$  using binomial distribution  $F$ ,  $\mu_i = \widehat{p}_{0,t_i}$ ,  $\beta_1 = -d_s/2$ , and  $\omega_i = -2d_s \log(t_i)$ .

Considering moment model (6) we obtain walk dimension estimate  $\hat{d}_w$  using gamma distribution  $F$ ,  $\mu_i = \widehat{m}_2(t_i)$ ,  $\beta_1 = 2/d_w$ , and  $\omega_i = 2/d_w \log(t_i)$ .

## 5 Experimental Part

For the purposes of this work, large scale Monte Carlo simulations were realized to obtain samples of total travelled distance  $r_1, \dots, r_n \sim R_t$  for various fractal sets and time  $t$ . Jump probability of random walks was set for all sets to be uniform for all neighbouring vertexes while having probability of staying in current vertex equal to zero. For every fractal set  $n = 10^6$  realizations of  $R_t$  was generated for time steps  $t = 10, \dots, 10^4$ . In every time step  $t$  estimates  $\widehat{p}_{0,t}$  and  $\widehat{m}_2(t)$  were calculated producing sets

$$\left( t, \widehat{p}_{0,t} \right)_{t=10}^{10^4}, \quad \left( t, \widehat{m}_2(t) \right)_{t=10}^{10^4}. \quad (18)$$

Because random walk cannot stay in the same vertex two time steps in the row, it is not possible in geometries such as SC and KC for random walk to return to origin in odd number of time steps. For these fractal sets and return model (2), even time steps are used only.

Simulation results presented in this work are obtained using implementation of recursive coordinate based algorithms in MATLAB while using Combined multiple recursive generator [8] as a source of pseudo-random variables. This generator was chosen for its support of multi-threading calculations, its availability in MATLAB scripting environment, and its sufficiently large period,  $2^{63}$  streams of length  $2^{127}$ .

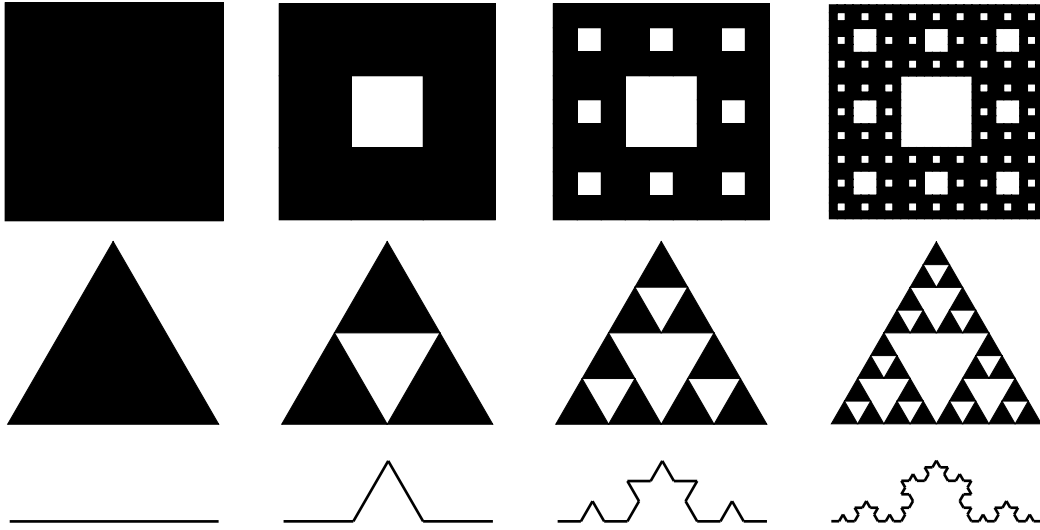


Figure 1: Illustrations of Sierpinski Carpet (SC), Sierpinski Gasket (SG), and Koch Curve (KC), for levels  $H = 0, 1, 2, 3$ .

## 5.1 Involved Substrates

Diffusion simulations for Sierpinski Carpet, Sierpinski Gasket, and Koch Curve were realized. Illustration of these sets presents Figure 1.

For the purposes of testing obtained estimates, used theoretical values of dimension are summarised in Table 2. For Sierpinski Carpet (SC) the theoretical values of walk and spectral dimension are not available. While various approximation methods are available [3, 5, 9, 13, 14], to be able to compare our dimension estimates with fixed values we use values of spectral dimension from [3] and calculate value of  $d_f$  from relation (4). Table 2 also includes used values of finite substrate level  $H$ .

Table 2: Studied fractal sets with assumed values of fractal dimension  $d_f$ , walk dimension  $d_w$  and spectral dimension  $d_s$  together with values of used finite substrate levels  $H$ .

Set	Abbrev.	$d_f$	$d_w$	$d_s$	$H$
Sierpinski Carpet	SC	$\frac{\log 8}{\log 3} \doteq 1.8928$	$\widehat{d}_w = 2.09698$	$\widehat{d}_s = 1.80525$	15
Sierpinski Gasket	SG	$\frac{\log 3}{\log 2} \doteq 1.5850$	$\frac{\log 5}{\log 2} \doteq 2.3219$	$2 \frac{\log 3}{\log 5} \doteq 1.3652$	15
Koch Curve	KC	$\frac{\log 4}{\log 3} \doteq 1.2619$	$\frac{\log 16}{\log 3} \doteq 2.5237$	1	30

## 5.2 Conditions for Unbiased Estimation

Equalities in models (2, 6) are limited for short time window, therefore it is not possible to use full range of time steps of available data sets (18)  $t = 10, \dots, 10^6$ . We introduce data set time window  $W(t_0, w) = \{t \in \mathbb{N} : t \geq t_0, t \leq t_0 + w - 1\}$  where  $|W| = w$  is a window

width. For the fixed window width  $w$  we obtain estimates for multiple initial times  $t_0$ . Because with each dimension estimate we obtain  $p$ -values of tested hypothesis (17) it is necessary to combat false discovery rate. We utilise Benjamini–Yekutieli procedure to obtain  $\alpha_{\text{FDR}(0.05)}$  threshold for confidence level 0.05. Method is used under arbitrary dependence of overlapping time windows and uses sum of harmonic series.

### 5.3 Results

Time window method applied both for estimation of walk and spectral dimension gives set of estimates. To present singular value estimate we use weighted average. For any estimate  $\hat{\theta}_i$  with standard error  $s_i$  we understand weighted estimate  $\bar{\theta}$  as

$$\bar{\theta} = \sum_i w_i \hat{\theta}_i, \quad w_i = C s_i^{-2}, \quad \sum_i w_i = 1, \quad (19)$$

while initial estimates  $\hat{\theta}_i$  are independent. To apply this for time window estimates we average only over estimates from non-overlapping time windows. Furthermore we exclude estimates from time window  $W(t_0, w)$  such that  $t_0 < w$  to exclude improperly scaled initial estimates. Values of standard error of time window estimates are obtained from fitted generalized linear models. Results are summarised in Table 3 for time window widths  $w = 500, 1000$ . Results for hypothesis (17) test for window width  $w = 1000$  are shown in Figure 2.

Table 3: Obtained averaged estimates for used time window width  $w$ .

Set	$d_w$	$d_s$	$w = 500$		$w = 1000$	
			$\frac{w}{d_w}$	$\frac{w}{d_s}$	$\frac{w}{d_w}$	$\frac{w}{d_s}$
KC	2.5237	1	2.5219	1.0032	2.5229	1.0000
SG	2.3219	1.3652	2.3211	1.3711	2.3214	1.3595
SC	2.0969	1.8052	2.0954	1.8543	2.0958	1.7986

## 6 Conclusion

The paper presents full framework from modeling of fractal diffusion and estimating dimensions from simulated data. Discrete model of self-similar fractal sets is discussed as finite substrate. Using recursive coordinates, self-similar graph based structures can be represented algorithmically allowing for efficient implementation of large sets. Estimates of both walk dimension and spectral dimension are derived using observations in short time window. Regression and statistical testing is done using standard tools of generalized linear models. Presented statistical tests of dimension estimates show that obtained values of dimensions are in accordance with the theoretical values or with the previously published results.

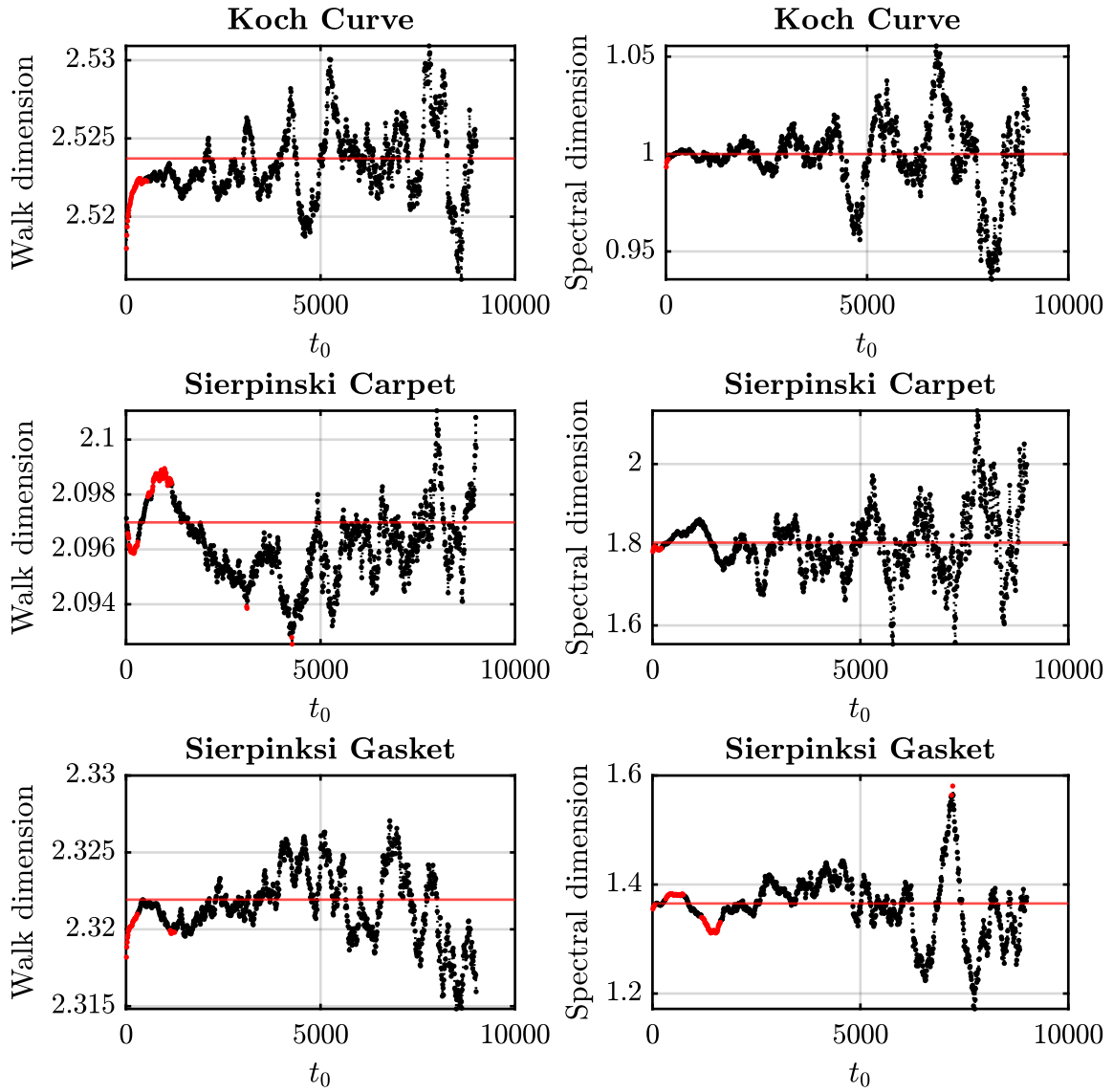


Figure 2: Results of time window estimates for walk dimension estimates  $\widehat{d}_w$  and spectral dimension estimates  $\widehat{d}_s$ . Each dot represents dimension estimate from time window  $W(t_0, 1000)$ . Red dots represent estimates for which  $H_0$  in (17) was rejected. The red lines represent values of  $d_w$  and  $d_s$  from Table 2 used in hypothesis testing (17).

## References

- [1] S. Alexander and R. Orbach. *Density of states on fractals: «fractons»*. Journal de Physique Lettres **43** (1982), 625–631.
- [2] M. T. Barlow. *Diffusions on fractals*. In 'Lectures on probability theory and statistics', Springer (1998), 1–121.
- [3] M. T. Barlow, R. Bass, and J. Sherwood. *Resistance and spectral dimension of sierpinski carpets*. Journal of Physics A: Mathematical and General **23** (1990), L253.
- [4] M. T. Barlow and R. F. Bass. *Brownian motion and harmonic analysis on sierpinski carpets*. Canadian Journal of Mathematics **51** (1999), 673–744.
- [5] M. T. Barlow and R. Bass. *On the resistance of the sierpiński carpet*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences **431** (1990), 345–360.
- [6] G. Derfel, P. J. Grabner, and F. Vogl. *Laplace operators on fractals and related functional equations*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **45** (2012), 463001.
- [7] K. Falconer. *Fractal geometry: mathematical foundations and applications*. John Wiley & Sons, (2004).
- [8] G. Fischer, Z. Carmon, G. Zauberman, and P. L'Ecuyer. *Good parameters and implementations for combined multiple recursive random number generators*. Operations Research **47** (02 1999), 159–164.
- [9] A. Grigor'yan and M. Yang. *Determination of the walk dimension of the sierpiński gasket without using diffusion*. Journal of Fractal Geometry **5** (2018), 419–460.
- [10] M. Kirkby. *The fractal geometry of nature. benoit b. mandelbrot. wh freeman and co., san francisco, 1982. no. of pages: 460. price:£ 22.75 (hardback)*. ESPL **8** (1983), 406–406.
- [11] B. B. Mandelbrot. *The fractal geometry of nature/ revised and enlarged edition*. whf (1983).
- [12] N. Sarkar and B. B. Chaudhuri. *An efficient differential box-counting approach to compute fractal dimension of image*. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics **24** (1994), 115–120.
- [13] C. Schulzky, A. Franz, and K. H. Hoffmann. *Resistance scaling and random walk dimensions for finitely ramified sierpinski carpets*. ACM SIGSAM Bulletin **34** (2000), 1–8.
- [14] C. D. Van Sicen. *Percolation properties of the classic sierpinski carpet and sponge*. arXiv preprint arXiv:1706.03410 (2017).





# Fusion of Probabilistic Unreliable Indirect Information into Estimation Serving to Decision Making\*

František Hůla

4th year of PGS, email: [hula@utia.cas.cz](mailto:hula@utia.cas.cz)

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Tatiana Valentine Guy, Department of Adaptive Systems

Institute of Information Theory and Automation, CAS

**Abstract.** Bayesian decision-making (DM) quantifies information by the probability density (pd) of treated variables. Gradual accumulation of information during acting increases the DM quality reachable by an agent exploiting it. The inspected accumulation way uses a parametric model forecasting observable DM outcomes and updates the posterior pd of its unknown parameter. In the thought multi-agent case, a neighbouring agent, moreover, provides a privately-designed pd forecasting the same observation. This pd may notably enrich the information of the focal agent. Bayes' rule is a unique deductive tool for a lossless compression of the information brought by the observations. It does not suit to processing of the forecasting pd. The paper extends solutions of this case. It: i) refines the Bayes'-rule-like use of the neighbour's forecasting pd, ii) deductively complements former solutions so that the learnable neighbour's reliability can be taken into account, iii) specialises the result to the exponential family, which shows the high potential of this information processing, iv) cares about exploiting population statistics.

*Keywords:* Kullback-Leibler divergence, information fusion, parameter estimation, decision-making, Bayesian paradigm

**Abstrakt.** Bayesovské rozhodování kvantifikuje informaci pomocí hustoty pravděpodobnosti (hp) užitých proměnných. Postupná akumulace informace zvyšuje kvalitu rozhodování dosažitelnou agentem. Zkoumaný způsob akumulace využívá parametrický model předpovídající pozorovatelné výsledky rozhodování a aktualizuje aposteriorní hp neznámého parametru. Navíc v multi-agentním případě sousední agent poskytuje vlastní hp předpovídající stejná pozorování. Tato hp může zejména obohatit informaci należící původnímu agentovi. Bayesovo pravidlo je jedinečný deduktivní nástroj pro bezztrátovou kompresi informace dodanou jednotlivými pozorováními, avšak nevyhovuje zpracování prediktivní hp. Článek rozšiřuje řešení výše zmíněného a to: i) upřesněním použití Bayesova pravidla pro prediktivní hp sousedního agenta, ii) deduktivně doplňuje dřívější řešení tak, aby bylo možné zohlednit spolehlivost sousedního agenta, iii) speciálně aplikuje výsledky na rodinu exponenciálních hp, která vykazuje vysoký potenciál takového zpracování informací, iv) bere v úvahu využití populačních statistik.

*Klíčová slova:* Kullbackova–Leiblerova divergence, informační fúze, rozhodování, odhadování parametru, Bayesovské paradigma

---

\*This work has been supported by grants MŠMT ČR LTC18075 and EU-COST Action CA16228.

**Full paper:** Kárný, M., Hůla, F. *Fusion of probabilistic unreliable indirect information into estimation serving to decision making*. International Journal of Machine Learning and Cybernetics (2021): 1–12. <https://doi.org/10.1007/s13042-021-01359-9>

# Variational Inference with Weight Perturbated Adam

Zdeněk Junek

1st year of PGS, email: `Zdenek.Junek@jfifi.cvut.cz`

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Václav Šmídl, Department of Adaptive Systems

Institute of Information Theory and Automation, CAS

**Abstract.** Deep neural networks became popular machine learning methodology within last years. However, classical frequentist learning algorithms of neural nets are not suitable to express model uncertainty and might be prone to overfitting if too complex model is selected. Bayesian machine learning addresses these drawbacks with introducing prior distributions into learning. To estimate posterior distribution of model parameters, common approach is variational inference searching for a distribution approximating the posterior. In this article, weight perturbated variational Adam algorithm, where model parameters are sampled around its estimated mean when computing the gradients of optimization algorithm, is presented and experimentally analyzed. It is shown that such algorithm might be a powerful tool to prevent from overfitting of more complex non-linear classifiers.

*Keywords:* Bayesian learning, variational inference, Vadam, classification, overfitting

**Abstrakt.** Hluboké neuronové sítě jsou populárním učícím algoritmem posledních let. Nicméně klasické algoritmy pro učení neuronových sítí zpravidla nedokáží dobře popsat neurčitost modelů a mohou být náchylné k přetrénování. Tyto nedostatky se snaží odstranit Bayesovské strojové učení, které vnáší do modelu apriorního rozdělení jeho parametrů. K odhadu aposteriorního rozdělení se často používá variační inference, která hledá jeho aproximativní distribuci. V tomto článku je představen a analyzován algoritmus Vadam (weight perturbated variational Adam), který při výpočtu gradientů používá vzorkování kolem odhadovaných vah. Zejména je ukázáno, jak algoritmus pomáhá s možným přetrénováním.

*Klíčová slova:* Bayesovské učení, variační inference, Vadam, klasifikace, přetrénování

## 1 Introduction

Deep learning methods became state-of-the-art of learning algorithms, among others thanks to its flexibility and ability to fit complicated structures in the data. However, classical learning methods, based on minimization of loss functions (which is usually corresponding to maximization of model likelihood), usually give only point estimate of outputs and cannot thus express uncertainty in the model and its outputs. Also, such methods might be prone to overfitting if too complex model or methodology is chosen for learning. Then, applying the model on different set of data than the training set might demonstrate poor performance.

To overcome these drawbacks, Bayesian learning might be applied as a probabilistic approach to learning algorithms if prior belief is introduced into model (other frequent methodologies include dropout [12] or ensemble [7] methods). Central focus of Bayesian learning is posterior distribution of model parameters. However, such distribution is often explicitly intractable and must be estimated. Distinct methodologies are being used for this purpose, including Monte Carlo Markov chain methods (MCMC) [13], variational or Monte Carlo dropout [2, 6] or variational inference (VI) where posterior is approximated by probability distribution from selected family of distributions.

In this article, weight perturbed variational Adam algorithm, as possible VI algorithm, is described and experimentally analyzed. Key focus is given to performance of models with varying complexity and how the algorithm can help to prevent from overfitting.

## 2 Weight-perturbated Adam algorithm

In Bayesian deep learning, prior belief of model behavior is introduced into model. Considering model  $\mathcal{M}$  with parameters  $\mathbf{w} = (w_i)_{i=1}^M$  (e.g. neural network weights), prior belief is expressed by prior distribution  $p(\mathbf{w})$ . Having data set  $\mathcal{D} = (\mathbf{X}, \mathbf{y})$  with targets  $\mathbf{y} = (y_i)_{i=1}^N$ , regressors  $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_i)_{i=1}^N$  and likelihood  $p(\mathbf{y}|\mathbf{X}, \mathbf{w})$  (hereinafter, the dependence on  $\mathbf{X}$  is suppressed from the notation to make it uncluttered), key focus of Bayesian methods is to derive or estimate the posterior distribution  $p(\mathbf{w}|\mathbf{y})$  expressed by the Bayes rule

$$p(\mathbf{w}|\mathbf{y}) = \frac{p(\mathbf{y}|\mathbf{w})p(\mathbf{w})}{p(\mathbf{y})}.$$

While calculating or estimating the mode of the distribution, i.e. the so called maximum a posteriori (MAP), might be relatively easy, expressing the whole distribution is usually computationally demanding or even impossible due to normalization  $p(\mathbf{y})$ . However, expressing the whole distribution is a desired property to analyze and describe uncertainty in the model and its output.

Variational inference (VI) is a common approach to approximate the posterior distribution. For the preselected family of distribution, the aim is to choose such distribution or its parametrization that minimizes the Kullback-Leibler divergence between the approximative and posterior distributions. This is usually done by maximizing the so called ELBO (evidence lower bound)

$$\mathcal{L}(q) = \mathbb{E}_{q(\mathbf{w})}[\log p(\mathbf{y}, \mathbf{w}) - \log q(\mathbf{w}|\boldsymbol{\theta})]$$

where  $q(\mathbf{w}|\boldsymbol{\theta})$  is the approximative distribution parametrized by  $\boldsymbol{\theta}$ . Using reparametrization trick, ELBO is usually optimized by first order optimization algorithms using stochastic gradient descent (SGD), i.e. in the easiest form it holds for the optimization update

$$\boldsymbol{\theta}_{t+1} = \boldsymbol{\theta}_t + \gamma_t \nabla_{\boldsymbol{\theta}} \mathcal{L}(q)$$

where  $\gamma_t$  is (possibly adaptive) learning rate. Such method is a powerful tool, however, it requires more computation, memory, and especially implementation error compared to classical likelihood methods.

In this section, weight-perturbated variational Adam algorithm (called hereinafter as Vadam) is described. Key characteristics differentiating Vadam from other VI algorithms are as follows. First, natural momentums are introduced into optimization to allow usage of “Adam-like” algorithm. Hence, existing code basis might be easier adapted for implementation and the algorithm requires less memory and computation compared to other usual VI methods. Second, model parameters are sampled around its estimated mean when computing the gradients (hence the weight perturbation in the algorithm name), using estimated variance that is also being optimized from KL divergence perspective. Third, natural gradients are used in optimization instead of classical SGD to exploit geometry of approximative distribution.

## 2.1 Natural gradient variational inference

Prior and approximative distributions are assumed to be Gaussians in the following form

$$p(\mathbf{w}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{w}|\mathbf{0}, \lambda^{-1}\mathbf{I}), \quad q(\mathbf{w}) \sim \mathcal{N}(\mathbf{w}|\boldsymbol{\mu}, \text{diag}(\boldsymbol{\sigma}^2)).$$

**Remark.** Let us remark that exponential family (EF) is a set of distribution in a form  $p(\mathbf{x}|\boldsymbol{\theta}) = h(\mathbf{x}) \exp[\langle \phi(\mathbf{x}) | \boldsymbol{\eta} \rangle - A(\boldsymbol{\theta})]$ , where  $\phi(\mathbf{x})$  is the sufficient statistics and  $\boldsymbol{\eta}$  the natural parameter and so called expectation parameters are defined as  $\mathbf{m} = \mathbf{E}[\phi(\mathbf{x})]$ . Natural and expectation parameters of Gaussian distribution are in (3).

First characteristics of Vadam algorithm is usage of natural gradients in natural parametric space, i.e. using Fisher information matrix (FIM) in the optimization of natural parameters of approximative distribution

$$\boldsymbol{\eta}_{t+1} = \boldsymbol{\eta}_t + \gamma_t F(q_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{w}))^{-1} \nabla_{\boldsymbol{\eta}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\eta}), \quad (1)$$

where  $\boldsymbol{\eta}$  is a vector of natural parameters. If there is one-to-one mapping from natural parameter space to expectation parameters  $\mathbf{m}$  of approximative distribution (which is the case for Gaussian  $q(\mathbf{w})$ ), it can be shown that

$$\nabla_{\mathbf{m}} \mathcal{L}_*(\mathbf{m}) = F(q_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{w}))^{-1} \nabla_{\boldsymbol{\eta}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\eta}) \quad (2)$$

(refer to [10] for more details), hence

$$\boldsymbol{\eta}_{t+1} = \boldsymbol{\eta}_t + \gamma_t \nabla_{\mathbf{m}} \mathcal{L}_*(\mathbf{m})$$

without a necessity to explicitly calculate FIM.  $\mathcal{L}_*(\mathbf{m})$  denotes the objective function if expressed in terms of expectation parameters  $\mathbf{m}$ .

**Remark.** Let us remind that FIM for distribution  $q_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{w})$  is a matrix with elements

$$F(q_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{w}))_{i,j} = \mathbf{E} \left[ \frac{\partial^2}{\partial \theta_i \partial \theta_j} \log q_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{w}) \right].$$

For Gaussian approximative, using notation  $\boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}(\boldsymbol{\sigma}^2)$ , it holds

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\eta}^{(1)} &= \boldsymbol{\Sigma}^{-1} \boldsymbol{\mu}, & \boldsymbol{\eta}^{(2)} &= -\frac{1}{2} \boldsymbol{\Sigma}^{-1}, \\ \mathbf{m}^{(1)} &= \boldsymbol{\mu}, & \mathbf{m}^{(2)} &= \boldsymbol{\mu} \boldsymbol{\mu}^T + \boldsymbol{\Sigma}. \end{aligned} \quad (3)$$

Using the chain rule for derivatives and the previous equalities

$$\begin{aligned}\nabla_{\mathbf{m}^{(1)}} \mathcal{L}_* &= \nabla_{\mathbf{u}} \mathcal{L} - 2(\nabla_{\Sigma} \mathcal{L}) \boldsymbol{\mu}, \\ \nabla_{\mathbf{m}^{(2)}} \mathcal{L}_* &= \nabla_{\Sigma} \mathcal{L}.\end{aligned}$$

Inserting this into (3), we get after couple of edits the natural gradient updates for Gaussian approximative distribution (given Gaussian prior)

$$\begin{aligned}\Sigma_{t+1}^{-1} &= \Sigma_t^{-1} - 2\gamma_t (\nabla_{\Sigma} \mathcal{L}_t), \\ \boldsymbol{\mu}_{t+1} &= \boldsymbol{\mu}_t + \gamma_t \Sigma_{t+1} (\nabla_{\boldsymbol{\mu}} \mathcal{L}_t),\end{aligned}\tag{4}$$

where  $\mathcal{L}_t$  is the objective function calculated with parameters from time step  $t$ .

It left to express the terms  $\nabla_{\Sigma} \mathcal{L}_t$  and  $\nabla_{\boldsymbol{\mu}} \mathcal{L}_t$ . Recall that

$$\mathcal{L}(q) = \mathbb{E}_{q(\mathbf{w})}[-N\mathbf{f}(\mathbf{w}) + \log p(\mathbf{w}) - \log q(\mathbf{w})]$$

where we denoted by  $\mathbf{f}(\mathbf{w})$  the likelihood term  $\mathbf{f}(\mathbf{w}) = -\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log p(y_i|\mathbf{w})$ . First, Bonnet's and Price's theorems (see [9] for more details) are used for the likelihood part

$$\begin{aligned}\nabla_{\boldsymbol{\mu}} \mathbb{E}_q[\mathbf{f}(\mathbf{w})] &= \mathbb{E}_q[\nabla_{\mathbf{w}} \mathbf{f}(\mathbf{w})] = \mathbb{E}_q[\mathbf{g}(\mathbf{w})], \\ \nabla_{\Sigma} \mathbb{E}_q[\mathbf{f}(\mathbf{w})] &= \frac{1}{2} \mathbb{E}_q[\nabla_{\mathbf{w}\mathbf{w}}^2 \mathbf{f}(\mathbf{w})] = \mathbb{E}_q[\mathbf{H}(\mathbf{w})],\end{aligned}$$

where we denote by  $\mathbf{g}(\mathbf{w})$  and  $\mathbf{H}(\mathbf{w})$  the gradient and Hessian of  $\mathbf{f}(\mathbf{w})$ , respectively. Then for the expectation

$$\begin{aligned}\nabla_{\boldsymbol{\mu}} \mathcal{L}_t &= \nabla_{\boldsymbol{\mu}} \mathbb{E}_q[-N\mathbf{f}(\mathbf{w}) + \log p(\mathbf{w}) - \log q(\mathbf{w})] \\ \nabla_{\boldsymbol{\mu}} \mathcal{L}_t &= -\mathbb{E}_q[N\mathbf{g}(\mathbf{w})] + \underbrace{\nabla_{\boldsymbol{\mu}} \mathbb{E}_q[\log p(\mathbf{w})]}_{=-\lambda\boldsymbol{\mu}} - \underbrace{\nabla_{\boldsymbol{\mu}} \mathbb{E}_q[\log q(\mathbf{w})]}_{=0} \\ \nabla_{\boldsymbol{\mu}} \mathcal{L}_t &= -(\mathbb{E}_q[N\mathbf{g}(\mathbf{w})] + \lambda\boldsymbol{\mu})\end{aligned}$$

where we used the fact that  $\nabla_{\boldsymbol{\mu}} \mathbb{E}_q[\log q(\mathbf{w})]=0$  because differential entropy of Gaussian is not depending on its expectation  $\boldsymbol{\mu}$  and  $\nabla_{\boldsymbol{\mu}} \mathbb{E}_q[\log p(\mathbf{w})]=-\lambda\boldsymbol{\mu}$  thanks to properties of cross entropy of two Gaussians. Similarly for the variance part

$$\begin{aligned}\nabla_{\Sigma} \mathcal{L}_t &= \nabla_{\Sigma} \mathbb{E}_q[-N\mathbf{f}(\mathbf{w}) + \log p(\mathbf{w}) - \log q(\mathbf{w})] \\ \nabla_{\Sigma} \mathcal{L}_t &= \frac{1}{2} [-\mathbb{E}_q[N\mathbf{H}(\mathbf{w})] - \lambda\mathbf{I} + \Sigma^{-1}].\end{aligned}$$

Inserting into (4), denoting  $\mathbf{S}_t = \frac{(\Sigma_t^{-1} - \lambda\mathbf{I})}{N}$  and approximating the expectations as Monte Carlo estimate with one sample, we get the following optimization update

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\mu}_{t+1} &= \boldsymbol{\mu}_t - \gamma_t \left( \frac{\mathbf{S}_{t+1} + \lambda\mathbf{I}}{N} \right)^{-1} \left( \mathbf{g}(\mathbf{w}_t) + \frac{\lambda\boldsymbol{\mu}_t}{N} \right), \\ \mathbf{S}_{t+1} &= (1 - \gamma_t) \mathbf{S}_t + \gamma_t \mathbf{H}(\mathbf{w}_t).\end{aligned}$$

## 2.2 Natural momentum update

In the next step, momentums are added into algorithm, i.e. adaptive term  $\delta_t (\boldsymbol{\eta}_t - \boldsymbol{\eta}_{t-1})$  is added into (1) that turns into

$$\boldsymbol{\eta}_{t+1} = \boldsymbol{\eta}_t + \gamma_t F(q_{\boldsymbol{\eta}}(\mathbf{w}))^{-1} \nabla_{\boldsymbol{\eta}} \mathcal{L}(\boldsymbol{\eta}) + \delta_t (\boldsymbol{\eta}_t - \boldsymbol{\eta}_{t-1}).$$

Similarly to (2), it can be shown that the optimization update can be expressed in terms of gradient w.r.t. expectation parameters (see [4] for more details)

$$\boldsymbol{\eta}_{t+1} = \boldsymbol{\eta}_t + \gamma_t \nabla_{\mathbf{m}} \mathcal{L}_*(\mathbf{m}) + \delta_t (\boldsymbol{\eta}_t - \boldsymbol{\eta}_{t-1}).$$

Using the same approach as in (4), following updates are derived

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma}_{t+1}^{-1} &= \boldsymbol{\Sigma}_t^{-1} - 2\gamma_t (\nabla_{\boldsymbol{\Sigma}} \mathcal{L}_t), \\ \boldsymbol{\mu}_{t+1} &= \boldsymbol{\mu}_t + \gamma_t \boldsymbol{\Sigma}_{t+1} (\nabla_{\boldsymbol{\mu}} \mathcal{L}_t) + \delta_t \boldsymbol{\Sigma}_{t+1} \boldsymbol{\Sigma}_{t+1}^{-1} (\boldsymbol{\mu}_t - \boldsymbol{\mu}_{t-1}). \end{aligned}$$

Applying again Bonnet's and Price's theorem, denoting  $\tilde{\lambda} = \frac{\lambda}{N}$  and approximating the expectations as Monte Carlo estimate with one sample, the following is obtained

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{t+1} &= (1 - \gamma_t) \mathbf{S}_t + \gamma_t \mathbf{H}(\mathbf{w}_t), \\ \boldsymbol{\mu}_{t+1} &= \boldsymbol{\mu}_t - \gamma_t (\mathbf{S}_{t+1} + \tilde{\lambda} \mathbf{I})^{-1} (\mathbf{g}(\mathbf{w}_t) + \tilde{\lambda} \boldsymbol{\mu}_t) + \delta_t (\mathbf{S}_{t+1} + \tilde{\lambda} \mathbf{I})^{-1} (\mathbf{S}_t + \tilde{\lambda} \mathbf{I}) (\boldsymbol{\mu}_t - \boldsymbol{\mu}_{t-1}). \end{aligned}$$

Estimating the Hessian by the so called gradient magnitude  $\hat{\mathbf{H}}(\mathbf{w}_t) = [\mathbf{g}(\mathbf{w}_t)]^2$ , utilizing diagonality of  $\boldsymbol{\Sigma}$  and defining  $\mathbf{s}_t$  by  $\boldsymbol{\sigma}_t = \frac{1}{N(\mathbf{s}_t + \tilde{\lambda})}$ , we get

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_{t+1} &= (1 - \gamma_t) \mathbf{s}_t + \gamma_t [\mathbf{g}(\mathbf{w}_t)]^2, \\ \boldsymbol{\mu}_{t+1} &= \boldsymbol{\mu}_t - \gamma_t \frac{\mathbf{g}(\mathbf{w}_t) + \tilde{\lambda} \boldsymbol{\mu}_t}{\sqrt{\mathbf{s}_{t+1}} + \tilde{\lambda}} + \delta_t \frac{\sqrt{\mathbf{s}_t} + \tilde{\lambda}}{\sqrt{\mathbf{s}_{t+1}} + \tilde{\lambda}} (\boldsymbol{\mu}_t - \boldsymbol{\mu}_{t-1}), \end{aligned} \quad (5)$$

where  $\mathbf{w}_t$  is sampled by  $\mathcal{N}(\boldsymbol{\mu}_t, \boldsymbol{\Sigma}_t)$  (hence the weight perturbation in algorithm name).

**Remark.** Let us remark that update of classical Adam algorithm can be expressed as (original derivation can be found in [5])

$$\begin{aligned} \mathbf{m}_{t+1} &\leftarrow \beta_1 \mathbf{m}_t + (1 - \beta_1) \mathbf{g}(\boldsymbol{\theta}_t) \\ \mathbf{s}_{t+1} &\leftarrow \beta_2 \mathbf{s}_t + (1 - \beta_2) [\mathbf{g}(\boldsymbol{\theta}_t)]^2 \\ \hat{\mathbf{m}}_{t+1} &\leftarrow \frac{\mathbf{m}_{t+1}}{1 - \beta_1^t} \\ \hat{\mathbf{s}}_{t+1} &\leftarrow \frac{\mathbf{s}_{t+1}}{1 - \beta_2^t} \\ \boldsymbol{\theta}_{t+1} &\leftarrow \boldsymbol{\theta}_t - \alpha \frac{\hat{\mathbf{m}}_{t+1}}{\sqrt{\hat{\mathbf{s}}_{t+1}} + \psi} \end{aligned}$$

It can be shown that this is equivalent to heavy ball expression

$$\boldsymbol{\theta}_{t+1} = \boldsymbol{\theta}_t - \gamma_t \frac{\mathbf{g}(\mathbf{w}_t)}{\sqrt{\hat{\mathbf{s}}_{t+1}} + \psi} + \delta_t \frac{\sqrt{\hat{\mathbf{s}}_t} + \psi}{\sqrt{\hat{\mathbf{s}}_{t+1}} + \psi} (\boldsymbol{\mu}_t - \boldsymbol{\mu}_{t-1}) \quad (6)$$

(see [14] for more details).

Previous remark will be now utilized for final derivation. We can see that the update equation (5) is in the same form as (6), hence we can use the equivalence from the remark to deduce final Vadam algorithm as shown in Algorithm 1. Key difference w.r.t. to classical Adam is that gradients are calculated at sampled weights  $\mathbf{w}_t \sim \mathcal{N}(\mathbf{w}_t | \boldsymbol{\mu}_t, \boldsymbol{\Sigma}_t)$ , not directly at the estimated weights from previous update.

---

**Algorithm 1** Vadam algorithm (Variational weight perturbed Adam)

---

- 1: **while** not converged **do**
  - 2:    $\mathbf{w} \leftarrow \boldsymbol{\mu} + \boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\varepsilon}, \quad \boldsymbol{\varepsilon} \sim \mathcal{N}(\mathbf{0}, \mathbf{I}), \quad \boldsymbol{\sigma}_t = \frac{1}{\sqrt{N\mathbf{s}_t + \lambda}}$
  - 3:   Select minibatch from training data set  $\mathcal{D}_i$
  - 4:    $\mathbf{g} \leftarrow -\nabla \log p(\mathcal{D}_i | \mathbf{w})$
  - 5:    $\mathbf{m} \leftarrow \beta_1 \mathbf{m} + (1 - \beta_1) \left( \mathbf{g} + \frac{\lambda \boldsymbol{\mu}}{N} \right)$
  - 6:    $\mathbf{s} \leftarrow \beta_2 \mathbf{s} + (1 - \beta_2) (\mathbf{g} \circ \mathbf{g})$             $\triangleright \mathbf{a} \circ \mathbf{b}$  denotes element-wise multiplication
  - 7:    $\hat{\mathbf{m}} \leftarrow \frac{\mathbf{m}}{1 - \beta_1^t}, \quad \hat{\mathbf{s}} \leftarrow \frac{\mathbf{s}}{1 - \beta_2^t}$
  - 8:    $\boldsymbol{\mu} \leftarrow \boldsymbol{\mu} - \alpha \frac{\hat{\mathbf{m}}}{\sqrt{\hat{\mathbf{s}} + \frac{\lambda}{N}}}$
  - 9:    $t \leftarrow t + 1$
- 

### 3 Experiment

We have experimentally analyzed Vadam algorithm on classification problem and compared the results to classical maximum likelihood (MLE) methods. Primary attention has been paid to preventing from overfitting.

It has been tested on binary classification problem on the Spirals data set for  $N = 600$  data points. Here, regressors  $\mathbf{X}$  are 2D coordinates and targets  $\mathbf{y}$  are two colors. The data set has been randomly split into training set of  $N_{tr} = 470$  data points and testing set of  $N_{te} = 130$  points. Behavior of train and test error on the model with varying complexity has been analyzed. We have used a neural network with one hidden layer with variable layer width of  $k$  neurons, i.e. the model

$$\hat{y} = \sigma \left( \sum_{j=1}^k w_j^{(2)} \left( \sum_{i=1}^2 w_{i,j}^{(1)} x^{(i)} \right) \right).$$

As a measure of goodness-of-fit, negative log-likelihood (NLL), i.e. the binary cross-entropy, has been used. Vadam algorithm with different parameters  $\lambda$  of prior distribution ( $\lambda \in [0.01, 0.1, 1]$ ) has been compared to MLE approach.

As can be seen from Figure 1, in case of MLE approach, both train and test error first improves fastly with increasing model complexity. However, when widening further the hidden layer of neural network, test error starts to dramatically deteriorate. This is well-know behavior of classical likelihood approach.

On the contrary, train and test errors of Vadam algorithm remain stable also for models with higher complexity, while maintaining small difference between train and test NLL. Surprisingly, this characteristic is relatively stable for various prior parameters  $\lambda$  and holds even for more "extreme" selection of such parameter to both sides.



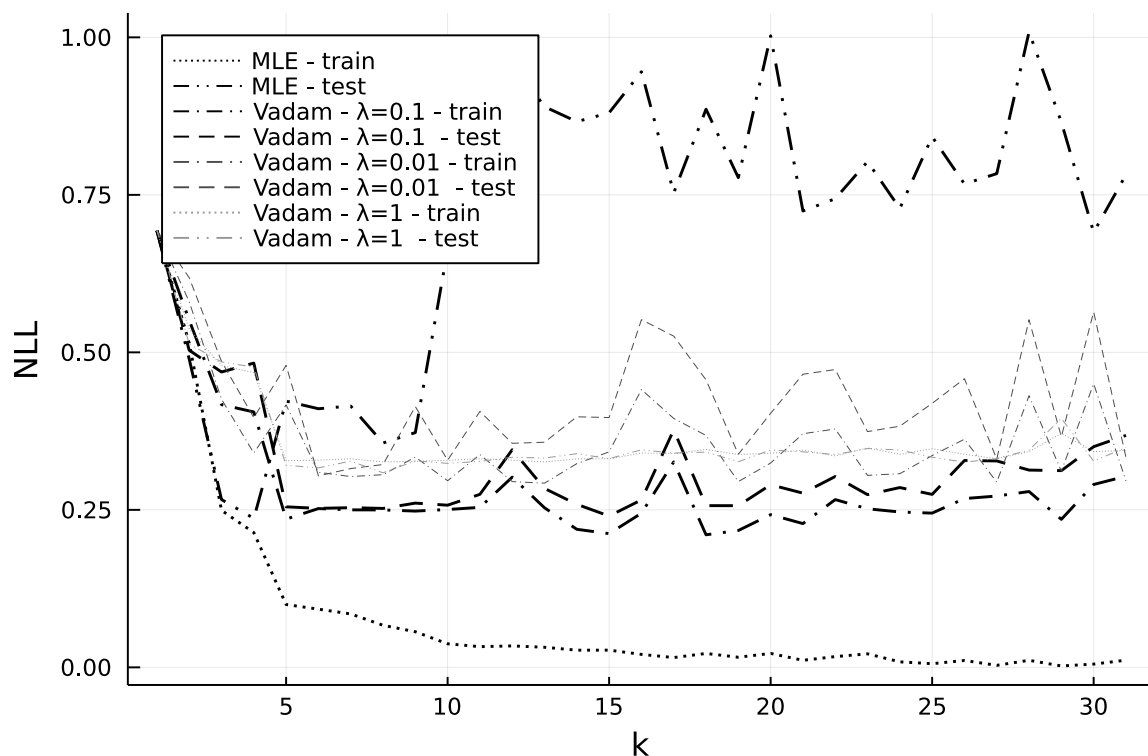


Figure 1: Train and test error of Vadam algorithm and MLE approach for varying NN hidden layer width.

It shall be remarked that best result for test error is still attained by MLE method, however, this holds only for very specific model selection, while Vadam demonstrates more stable behavior of test NLL for various neural network widths.

## 4 Conclusion and future work

In this article, we have described and experimentally analyzed weight-perturbated variational Adam algorithm (Vadam) and compared it to classical MLE method on binary classification problem with non-linear model. Key focus has been paid to goodness-of-fit of the testing sample. It has been shown that while MLE method is very prone to overfitting for increasing complexity of the model, Vadam test error remains stable and close to train error also for models with wider neural network layers.

However, when testing on more complex problems with substantially larger data sets, such robust behavior has not been always demonstrated in terms of convergence to global optimum. As a result, future work involves analysis of the algorithm with more heavy-tailed prior and approximative distribution (e.g. Student's probability density).

Also, the goal of future work is implementation of Vadam algorithm and its extensions on multiple-instance learning problems, esp. on problems with hierarchical input data, and analysis of its behavior on such problems.

## References

- [1] C. M. Bishop. *Pattern Recognition and Machine Learning*. Springer (2006).
- [2] Y. Gal and Z. Ghahramani. *Dropout as a Bayesian approximation: representing model uncertainty in deep learning*. Proceedings of the 33rd International Conference on International Conference on Machine Learning (2016), pp. 1050–1059.
- [3] M. E. Khan, D. Nielsen, V. Tangkaratt, W. Lin, Y. Gal, A. Srivastava. *Fast and Scalable Bayesian Deep Learning by Weight-Perturbation in Adam*. Proceedings of the 35th International Conference on Machine Learning (2018), pp. 2611–2620.
- [4] M. E. Khan, W. Lin. *Conjugate-computation variational inference: Converting variational inference in non-conjugate models to inferences in conjugate models*. In Artificial Intelligence and Statistics (2017), pp. 877–887.
- [5] D. Kingma, J. Ba. *Adam: A method for stochastic optimization*. In International Conference on Learning Representations (2015).
- [6] D. P. Kingma, T. Salimans, M. Welling. *Variational Dropout and the Local Reparameterization Trick*. Proceedings of the 29th Annual Conference on Neural Information Processing Systems (2015), pp. 2575–2583.
- [7] B. Lakshminarayanan, A. Pritzel, and C. Blundell. *Simple and Scalable Predictive Uncertainty Estimation using Deep Ensembles*. Advances in Neural Information Processing Systems (2017).
- [8] C. Louizos, K. Ullrich, M. Welling. *Bayesian Compression for Deep Learning*. Proceedings of the 31st International Conference on Neural Information Processing Systems (2017), pp. 3290–3300.
- [9] W. Lin, M. E. Khan, M. Schmidt. *Stein’s Lemma for the Reparameterization Trick with Exponential Family Mixtures*. <https://github.com/yorkerlin/VB-MixEF/blob/master/report.pdf> (2019).
- [10] W. Lin, M. E. Khan, M. Schmidt. *Fast and Simple Natural-Gradient Variational Inference with Mixture of Exponential-family Approximations*. Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning (2019), pp. 3992–4002.
- [11] E. Nalisnick, J. M. Hernandez-Lobato, P. Smyth. *Dropout as a Structured Shrinkage Prior*. Proceedings of the 36th International Conference on Machine Learning (2019), pp. 4712–4722.
- [12] N. Srivastava, G. Hinton, A. Krizhevsky, I. Sutskever, R. Salakhutdinov. *Dropout: A simple way to prevent neural networks from overfitting*. Journal of Machine Learning Research 15 (2014), pp. 1929–1958.
- [13] M. Welling, Y. W. Teh. *Bayesian learning via stochastic gradient Langevin dynamics*. Proceedings of the 28th International Conference on Machine Learning (2011), pp. 681–688.

- [14] A. C. Wilson, R. Roelofs, M. Stern, N. Srebro, B. Rech. *The Marginal Value of Adaptive Gradient Methods in Machine Learning*. In Advances in Neural Information Processing Systems (2017), pp. 4151—4161.



# Configurable Open-Source Data Structure for Distributed Conforming Unstructured Homogeneous Meshes with GPU Support

Jakub Klinkovský

5th year of PGS, email: [klinkjak@fjfi.cvut.cz](mailto:klinkjak@fjfi.cvut.cz)

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisors:

Tomáš Oberhuber, Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

Radek Fučík, Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

**Abstract.** A general multi-purpose data structure for an efficient representation of *conforming unstructured homogeneous* meshes for scientific computations on CPU and GPU-based systems is presented in the paper [1]. The data structure is provided as open-source software as part of the TNL library (<https://tnl-project.org/>) [2]. The abstract representation supports almost any cell shape and common 2D quadrilateral, 3D hexahedron and arbitrarily dimensional simplex shapes are currently built into the library. The implementation is highly configurable via templates of the C++ language, which allows to avoid the storage of unnecessary dynamic data. The internal memory layout is based on state-of-the-art sparse matrix storage formats, which are optimized for different hardware architectures in order to provide high performance computations. The proposed data structure is also suitable for meshes decomposed into several subdomains and distributed computing using the Message Passing Interface (MPI). The efficiency of the implemented data structure on CPU and GPU hardware architectures is demonstrated on several benchmark problems. Its applicability to advanced numerical methods is demonstrated with an example problem of two-phase flow in porous media using a numerical scheme based on the mixed-hybrid finite element method (MHFEM). We show GPU speed-ups that rise above 20 in 2D and 50 in 3D when compared to sequential CPU computations, and above 2 in 2D and 9 in 3D when compared to 12-threaded CPU computations.

*Keywords:* unstructured mesh, data structure, GPGPU, MPI, performance evaluation

**Abstrakt.** V článku [1] je prezentována obecná datová struktura pro efektivní reprezentaci *konformních nestrukturovaných homogenních* sítí pro vědecké výpočty na CPU a GPU. Předmětná datová struktura je k dispozici jako open-source software v rámci knihovny TNL (<https://tnl-project.org/>) [2]. Použitá abstraktní reprezentace podporuje téměř jakékoliv tvary buněk a běžné 2D čtyřúhelníky, 3D šestistěny a simplexy libovolné dimenze jsou aktuálně implementovány v dané knihovně. Implementace datové struktury je vysoce konfigurovatelná pomocí šablon jazyka C++, což umožňuje vyhnout se nutnosti ukládat nepotřebná dynamická data. Interní návrh datové struktury je založen na moderních formátech pro ukládání řídkých matic, které jsou optimalizované pro různé hardwarové architektury umožňující vysoce výkonné výpočty. Daná datová struktura je také vhodná pro reprezentaci sítí rozdělených na několik komponent a zpracovávaných pomocí distribuovaných výpočtů skrze rozhraní MPI. Efektivita imple-

mentované datové struktury na hardwarových architekturách CPU a GPU je ukázána na několika testovacích úlohách. Použitelnost datové struktury v pokročilých numerických metodách je ukázána na příkladu úlohy dvoufázového proudění v porézním prostředí s využitím numerického schématu založeného na smíšené metodě hybridních konečných prvků (MHFEM). Urychlení výpočtů na GPU oproti sekvenčním výpočtům na CPU přesahují hodnoty 20 ve 2D a 50 ve 3D, a ve srovnání s 12-vláknovými výpočty na CPU přesahují urychlení na GPU hodnoty 2 ve 2D a 9 ve 3D.

*Klíčová slova:* nestrukturované sítě, datová struktura, GPGPU, MPI, vyhodnocení výkonnosti

## Acknowledgement

The work was supported by the Ministry of Education, Youth and Sports of the Czech Republic under the OP RDE grant no. CZ.02.1.01/0.0/0.0/16\_019/0000765: *Research Center for Informatics*, the Ministry of Health of the Czech Republic project no. NV19-08-00071, the Czech Science Foundation project no. 21-09093S, and the Student Grant Agency of the Czech Technical University in Prague project no. SGS20/184/OHK4/3T/14.

## References

- [1] J. Klinkovský, T. Oberhuber, R. Fučík, and V. Žabka. *Configurable open-source data structure for distributed conforming unstructured homogeneous meshes with gpu support*. *Transactions on Mathematical Software* (2021). Under review.
- [2] T. Oberhuber, J. Klinkovský, and R. Fučík. *TNL: Numerical library for modern parallel architectures*. *Acta Polytechnica* (2020).

# Preferred Axis in Universe and Neutrino Oscillations\*

Jaroslav Kňap

3rd year of PGS, email: [knapjaro@fjfi.cvut.cz](mailto:knapjaro@fjfi.cvut.cz)

Department of Physics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Petr Jizba, Department of Physics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

**Abstract.** Our observable universe is very homogeneous and isotropic on largest scales, this fact rests at the core of  $\Lambda$ CDM model of cosmology. However various measurements ([1], [2], [3]) display various levels of anisotropies, from these the most famous is observation of anisotropies in relict background radiation (CMB). The origin of these anisotropies could provide hints towards beyond SM physics. In this article, we wish to focus in particular on observations hinting at potential existence of preferred axis and in this context we will also study dynamics of neutrino oscillations along the lines proposed in [6]. In particular we show that oscillating neutrinos (flavour mixing) can be viewed as non-oscillating Dirac flavour fields that interact via minimal coupling with the Nambu-Goldstone vector field. The Nambu-Goldstone modes in question correspond to long-wavelength fluctuation of the order parameter that is related to spontaneous breakdown of the pseudo-orthogonal group down to its maximal compact subgroup. In this article we will focus on 2+1 toy model, so the group in question is  $SO(2,1)$  breaking down to  $U(1)$ .

*Keywords:* cosmological anisotropies, neutrino oscillations, symmetry breaking

**Abstrakt.** Náš pozorovatelný vesmír je na největších škálách velmi homogenní a izotropní, tato fakta slouží jako podklad  $\Lambda$ CDM modelu kosmologie, v současnosti nejúspěšnějšího kosmologického modelu. Ovšem různá pozorování ([1], [2], [3]) vykazují různé míry anisotropie, z nich nejslavnější je pozorování anisotropií v reliktním záření pozadí. Původ těchto anizotropií by mohl poskytnout náznaky k fyzice překračující Standardní model. V tomto článku se chceme primárně soustředit na pozorování naznačující možnou existenci preferované kosmologické osy a v tomto kontextu studovat dynamiku oscilací neutrin ve smyslu navrženém v [6]. Konkrétně ukážeme že na oscilující neutrina lze pohlížet jako na neoscilující Diracovo flavour pole, která spolu interagují skrze minimální interakci s Nambu-Goldstone vektorovým polem. Tyto Nambu-Goldstonovi módy pak korespondují s dlouhovlnnými fluktuacemi parametru uspořádání který je spojen se spontánním narušením symetrie pseudo-ortogonální grupy na její maximální kompaktní podgrupu. V tomto článku se budeme primárně soustředit na zjednodušený 2+1 dimenzionální model, tedy grupa symetrií bude  $SO(2,1)$  zlomená na  $U(1)$ .

*Klíčová slova:* kosmologické anisotropie, oscilace neutrin, narušení symetrie

---

\*This work has been supported by the grant SGS19/183/OHK4/3T/14.

## 1 Introduction

The standard model of cosmology,  $\Lambda$ CDM model, has at its core two assumptions, spatial isotropy and homogeneity of universe. However as various observatories gather data of ever increasing accuracy and scope, some observations hint that these assumptions might not hold as strongly as we would like. The most famous observed anisotropy is the anisotropy of CMB, which is generally explained as due to coupling of matter fluctuations to temperature fluctuations in early universe. But even in CMB there are features that defy explanation for example the so-called 'Axis of Evil' [2], or low  $l$  deficit in TT angular power spectrum [1]. Another would be dipole, which is generally taken to be due to peculiar motion of Earth, however existence of intrinsic dipole is not strictly ruled out [4]. Another place where we can see break from isotropy is in alignment of active galactic axii in quasars, which seem to be aligned to the large-scale structure they are found in [3].

All of these facts suggest that it makes sense to look at physics that could potentially lead to existence of preferred directions. This direction of study can be useful in exploring flavour oscillations of neutrinos, along the lines proposed in [6]. There it is suggested that flavour oscillations can be alternatively explained by having neutrinos interact with Nambu-Goldstone vector field, which would have some preferred direction. To explore this idea we will analyse a toy model in 2+1 dimensions, where we will have simplified the symmetry group ( $SO(2,1)$  instead of  $SO(3,1)$ ), however we will also have increased complexity of fermionic field (due to existence of inequivalent representations of Dirac matrices). Since we can generate the kinetic term of the field through corresponding coherent state-functional, as a result the Nambu-Goldstone vector field can be considered dynamical. This would then imply that oscillations should not be uniform across space-time, but should vary. If such variation in oscillation times was detected, this would serve as an indirect proof of this hypothesis.

## 2 Anisotropies in the universe

In this section we will discuss some interesting observed anisotropies of our universe. In particular, we will place the focus on observations hinting at the existence of preferred axis, i.e. dipole anisotropies. A couple of observations of anisotropies we will focus on are

- CMB anisotropy
- 'Axis of Evil' (alignment of directions of quadrupole and octopole in CMB)
- Alignment of galactic axii

All of these and others cast the assumption of isotropy in question, and of homogeneity as well, or to be more specific of *homogeneity scale*. Below we will highlight some of the main characteristics of the chosen set of observations.

Before going into more details regarding the above mentioned observations, we would also like to note possible consequence of finite speed of propagation in universe. If the



anisotropies have origin in spontaneous breakdown of some symmetry, then due to finite propagation speed we should expect there to be multiple domains with different preferred directions. This is because when symmetry breaks down, the value of broken symmetry operators is arbitrary, and there is no reason why the same choice should be made everywhere in physical system. As a result we would see different apparent preferred axis in different parts of universe. Interestingly enough, galactic axii seem to be aligned along the direction of the superstructure they are included in, indicating some preference. The possible exception to this would be if the symmetry broke before inflation, as then our universe could be wholly included in just one such region.

## 2.1 CMB anisotropy

Observation of CMB and its anisotropies is one of the great success of astronomy in 20th century. It provides look into earliest times in existence of universe, providing us with a unique look. The observed temperature anisotropies are thought to be imprint of density anisotropies of dark matter, due to quantum fluctuations which were 'blown up' during inflation into larger size. Among the features observed is suppression of odd peaks in power, low  $l$  deficit in TT angular power spectrum and alignment of dipole and quadrupole moments.

What is most interesting to us, is measurement of dipole anisotropy. This anisotropy has magnitude of  $3.3621 \pm 0.0010$  mK [4] and is generally interpreted as being the result of the movement of measurement instrument (and hence also of Earth) with respect to rest frame of the matter at time of last scattering. However, while the latest data from Planck strengthens this explanation we would still expect to see intrinsic dipole of magnitude  $10^{-5}$  K and systemic and statical artefacts in analysis are still large enough to not be conclusive. For these reasons it is reasonable to explore ideas of what could be origin of potential intrinsic CMB dipole.

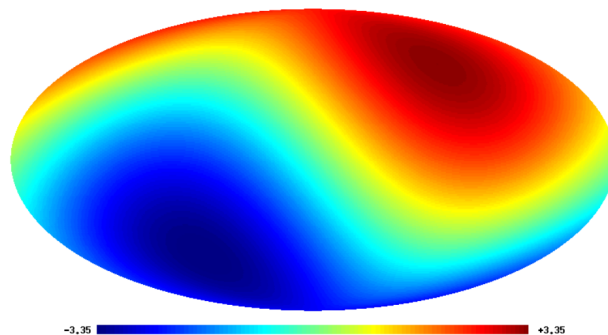


Figure 1: CMB dipole with temperature in  $mK$ . [5]

## 2.2 'Axis of Evil' (alignment of directions of quadrupole and octopole in CMB)

In 2003 Tegmark et. al analysed WMAP data and found that both the quadrupole and octopole of CMB point to preferred directions, and that these are strongly aligned with each other [2]. This preferred direction was poetically named 'Axis of Evil', as this anomaly appears to give some preference to plane of Solar System and hence presents departure from Copernican principle.

This alignment was later confirmed by alternate methods, strengthening the argument, some even extended the results to low multipoles up to  $l = 5$ . This then presents significant violation of the random Gaussian assumption for the primordial fluctuations. Similarly even recent Planck collaboration data determined that their preferred directions align with angular difference of only  $12.3^\circ$ , with the significance being 96.8%.

As we have mentioned in the discussion of the dipole, movement with respect to the CMB rest frame introduces kinematic effects. When accounting for this kinematic quadrupole, the quadrupole-octopole alignment becomes more consistent, with mis-alignment angle decreasing to  $8^\circ$  and the significance increasing to 99% [5].

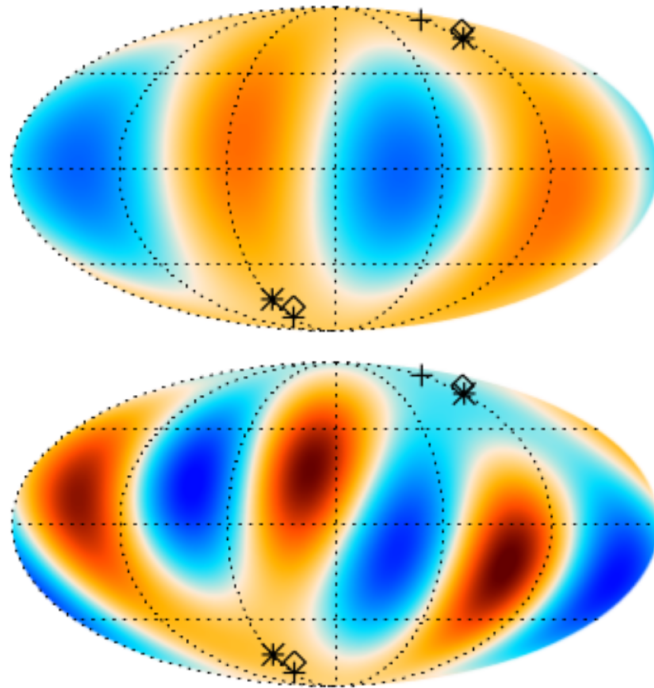


Figure 2: Upper panel is the derived quadrupole (axis denoted by plus symbols), the lower panel is the derived octopole (axis denoted by star symbols) Both images have temperature ranges  $\pm 35 \mu K$ . The diamond symbol corresponds to axis of the quadrupole after correcting for the kinematic quadrupole. [5]

### 2.3 Alignment of quasar axii

Recent surveys have observed that polarization of light coming from quasars is polarized either parallel or perpendicular to the primary direction of the large scale structure (i.e. cosmic filament) they reside in [3]. That such alignment would be result of random chance is highly improbable, with less than 1% chance. Polarization of light in quasars is generally either parallel or perpendicular to the accretion disk axis, and those with perpendicular polarization also have greater emission widths. These facts combined with observations suggest that it is the spin axis of the quasars are aligned with that of host structure.

At the very least this suggests existence of emergent proffered direction within given superstructure. Various explanations have been proposed, which can be broadly divided into either *photon path effects*, or *structural axis alignment*. Recent work suggests that photon path effects cannot account for the size of observed effect, with for example effect of cosmic dust being negligible [7]. Optical correlations being redshift dependent [8] also makes this observations difficult to explain using galactic foreground. However for radio correlations such explanations are still viable.

Clear explanation of the origin of this effect is yet to be found, however characteristic size of correlation could indicate departures from isotropy of the Universe.

## 3 Neutrinos in 2+1 dimensions

The discussion in previous sections shows that there is some evidence for existence of preferred direction. In light of these facts, we shall now investigate flavour oscillations in neutrinos along the lines suggested in article [6].

By now, flavour mixing and associated flavour oscillations are firmly established parts of particle physics. However, the origins of mixing are still unknown. The common picture views it as intrinsic property of particles, which are described by non-diagonal mass matrix, with the non-diagonal terms being responsible for flavour mixing. Recently new idea was put forward [6]. The idea is to view mixing as the effect of the interaction of particles with external vector field which couples minimally. In this, we wish to elaborate on this by arguing that the vector field should be Nambu-Goldstone vector field, resulting from spontaneous symmetry breaking of the space-time symmetry group. One result of this theory is that oscillation length will not necessarily be uniform.

In the following, we will be analysing the example in 2+1 dimensions, as the the space-time symmetry group is much simpler in this case, being  $SO(2,1)$ . Downside is that in odd space-time dimensions there exist two inequivalent representation of gamma matrices (and so also of Dirac matrices), so description of fermions is more complicated.

The two representations are

$$\begin{aligned}\gamma^0 &= \sigma_3, \quad \gamma^1 = i\sigma_1, \quad \gamma^2 = i\sigma_2 \\ \gamma^0 &= \sigma_3, \quad \gamma^1 = i\sigma_1, \quad \gamma'^2 = -i\sigma_2.\end{aligned}$$

Since we don't want to comprise our results by the choice of representation, we will work in generic representation defined as

$$\gamma^0 = \sigma_3, \quad \gamma^1 = i\sigma_1, \quad \gamma^2 = z\sigma_2 \tag{1}$$

At the end of any specific calculation, we can set  $z$  to be equal to  $\pm i$  and explore either representation.

We start with the Lagrangian describing mixing of two neutrino fields

$$\mathcal{L} = \bar{\nu}_e (i \not{\partial} - m_e) \nu_e + \bar{\nu}_\mu (i \not{\partial} - m_\mu) \nu_\mu - m_{e\mu} (\bar{\nu}_e \nu_\mu + \bar{\nu}_\mu \nu_e) \quad (2)$$

We can directly obtain equations of motion from (2)

$$i\partial_0 \nu_e = [-i(\alpha^1 \partial_1 + \alpha^2 \partial_2) + \beta m_e] \nu_e + \beta m_{e\mu} \nu_\mu \quad (3)$$

$$i\partial_0 \nu_\mu = [-i(\alpha^1 \partial_1 + \alpha^2 \partial_2) + \beta m_\mu] \nu_\mu + \beta m_{e\mu} \nu_e, \quad (4)$$

where

$$\alpha^i = \gamma^0 \gamma^i, \quad \beta = \gamma^0. \quad (5)$$

The equations of motion can be compactly rewritten as

$$iD_0 \nu_f = \left( -i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla}_2 + \beta M_d \right) \nu_f, \quad (6)$$

where  $\nu_f = (\nu_e, \nu_\mu)^T$  is the flavour doublet,  $M_d = \text{diag}(m_e, m_\mu)$  is the diagonal mass matrix and  $\vec{\nabla}_2 = (\partial_1, \partial_2)^T$ . We have also defined the time-component of a covariant derivative  $D_0$  as

$$D_0 = \partial_0 + i(\sigma_1 \otimes \beta) m_{e\mu}. \quad (7)$$

This e.o.m. can be derived from the following Lagrangian density

$$\mathcal{L} = \bar{\nu}_f (i \not{D}_0 - M_d) \nu_f + \bar{\nu}_f i \not{\nabla} \nu_f. \quad (8)$$

While we have derived the Lagrangian (8) via (7), it is fully equivalent with the Lagrangian (2).

Now we see that flavour mixing can be alternatively understood as an interaction of flavour field  $\nu_f$  with a vector field having in the chosen reference frame structure

$$\mathbf{A}_\mu = n_\mu \frac{\delta m}{2} (\sigma_1 \otimes \beta), \quad n^\mu \equiv (1, 0, 0)^T, \quad \delta m = m_\mu - m_e \quad (9)$$

where  $\mathbf{A}_\mu \equiv A_\mu (\sigma_1 \otimes \beta)$  is a matrix-valued time-like vector field. We note that globally defined time-like vector field can exist only on manifold that is time-orientable, general Lorentzian manifold does not necessarily have such a field.

We are now interested in writing e.o.m. (7) in manifestly covariant form, to that end we use identity  $m_{e\mu} = \frac{\delta m}{2} \tan 2\theta$ . We can write

$$D_\mu = \partial_\mu + ig \mathbf{A}_\mu, \quad (10)$$

where we have defined  $g \equiv \tan 2\theta$ . With the help of (10) the e.o.m. for mixed fields can be written in the form

$$(i\gamma^\mu D_\mu - M_d) \nu_f = 0, \quad (11)$$

and the resulting Lagrangian density has the form of a doublet of spinor fields interacting with an external (non-dynamical) minimally coupled vector field,

$$\mathcal{L} = \bar{\nu}_f (i\gamma^\mu D_\mu - M_d) \nu_f. \quad (12)$$

The Lagrangian (12) describes the same dynamics as Lagrangian (2), however instead of having oscillating flavour fields  $\nu_f$ , we have flavour fields interacting with a static vector field  $n_\mu$  via minimal interaction. Also in the (12) the fields have simultaneously definite mass and flavour, in contrast to (2) where we need to choose to work with either mass states or flavour states.

### 3.1 $SO(2,1)$ coherent state functional integral

So far the field responsible for flavour oscillation has been static, however we can promote it to a dynamical one by adding a kinetic term for  $A_\mu$  (or  $n_\mu$ ) into the Lagrangian. By adding such a term, it becomes clear that mixing and flavour oscillations cannot remain uniform across space-time, as the field can now vary.

In general frame we will have  $n_\mu n^\mu = 1$ ,  $n_0 > 0$ , implying that the dynamics of the field  $A_\mu$  take place in Lobachevsky 3D target space, i.e. quotient  $\mathcal{M} = SO(2,1)/SO(2)$ . This effectively describes space of Nambu-Goldstone modes after  $SO(2,1)$  symmetry (analogue of Lorentz symmetry) is broken down to the rotational symmetry.

We would like to point out that in contrast to the usual case of spontaneous symmetry breakdown (SSB) where it is an *internal symmetry* that is being broken, here we have spontaneous breakdown of *Lorentz symmetry* (or its analogue). This means that instead of having *scalar* Nambu-Goldstone field, we have Nambu-Goldstone *vector* field [9]. Massless field theories where the target space is the group coset space are known as non-linear  $\sigma$  models, they typically describe dynamics of Nambu-Goldstone bosons. The  $\sigma$  model in question here is an analogue of *space-time  $\sigma$  model* [10]. It is known that with a suitable choice of interaction Hamiltonian, the generalized coherent state functional integrals describe low-energy effective field theories, i.e. Nambu-Goldstone fields, including their interactions.

Let us consider the corresponding  $SO(2,1)$  coherent state-functional, as this is the natural arena for discussing the quantum dynamics of Nambu-Goldstone field ([6], [11]). We will do this in terms of the unit-vector parameters  $n_\mu$ .

First we note that  $SO(2,1)$  is isomorphic to  $SU(1,1)$ , and since  $SO(2)$  is isomorphic to  $U(1)$  the coset space is also isomorphic  $SO(2,1)/SO(2) \cong SU(1,1)/U(1)$ . As this space represents the upper sheet of two-sheet hyperboloid, we can choose the coordinates on this space as

$$n_\mu = (\cosh \tau, \sinh \tau \cos \varphi, \sinh \tau \sin \varphi). \quad (13)$$

Since the group  $SU(1,1)$  has an indefinite Casimir operator, there are four classes of unitary irreducible representations. Following the discussion in [6] we restrict ourselves only to certain subset (that for which  $U(1)$  also has unitary representation), and we can write for coherent states

$$|0(n_\mu)\rangle = |0(\tau, \varphi)\rangle = D(\tau, \varphi) |0\rangle = \exp[i\tau(\mathbf{J} \cdot \mathbf{u})] |0\rangle, \quad (14)$$

where  $\mathbf{u} = (0, \sin \varphi, \cos \varphi)$  is a unit vector, and we choose 'ground' state as  $|0\rangle = |j, -j\rangle$ , i.e. as state annihilated by  $J_-$ . We have also defined  $\mathbf{J} = (J_0, J_1, J_2)$  with  $J_0 = J_3$ . The  $J_i$  are generators of the group and this relabelling is done to keep indices consistent with the previous discussion. As a result the commutation relations of the algebra now read

$$[J_+, J_-] = -2J_0, \quad J_\pm = J_1 \pm iJ_2. \quad (15)$$

Using Gauss decomposition we can write

$$|0(\tau, \varphi)\rangle = (1 - |\zeta|^2)^{|j|} e^{\zeta J_+} |0\rangle \equiv |0(\zeta)\rangle, \quad \zeta = \tanh \frac{\tau}{2} e^{i\varphi}. \quad (16)$$

The transition probability between two coherent states can be written as

$$\begin{aligned} |\langle 0(\zeta') | 0(\zeta)\rangle|^2 &= \left( \frac{1 - 2\Re(\zeta'^* \zeta) + |\zeta'|^2 |\zeta|^2}{(1 - |\zeta'|^2)(1 - |\zeta|^2)} \right)^{-2|j|} \\ &= \left( \frac{1 + n'_\mu n^\mu}{2} \right)^{-2|j|}. \end{aligned} \quad (17)$$

We now promote the  $\zeta$  (and so also the parameter  $n_\mu$ ) to a field,  $\zeta \rightarrow \zeta(x)$ .

For the path integral of  $SO(2, 1)$  coherent states we can now write (along the same lines as in [6])

$$\begin{aligned} \langle 0(\zeta_f), x_f | 0(\zeta_i), x_i \rangle &= \int_{\zeta(x_i)}^{\zeta^*(x_f)} \mathcal{D}\mu(\zeta, \zeta^*) \exp \left[ i \int_{x_i}^{x_f} dx_\mu \left( i \langle 0(\zeta) | \frac{\partial}{\partial x_\mu} | 0(\zeta) \rangle \right) \right] \\ &= \int_{\zeta(x_i)}^{\zeta^*(x_f)} \mathcal{D}\mu(\zeta, \zeta^*) \exp \left[ i \int_{x_i}^{x_f} dx_\mu \left( i \frac{|j| \left( \zeta^* \frac{\partial \zeta}{\partial x_\mu} - \frac{\partial \zeta^*}{\partial x_\mu} \zeta \right)}{1 - |\zeta|^2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

Now, as the analysis of neutrinos was done using field  $n_\mu(x)$ , we need to rewrite (18) in terms of the field  $n_\mu$ . To do so we use definition of  $\zeta$  and identities for hyperbolic functions. We can write

$$\begin{aligned} i \frac{|j| (\zeta^* d\zeta - d\zeta^* \zeta)}{1 - |\zeta|^2} &= -2|j| \sinh \frac{\tau}{2} d\varphi \\ &= -|j| \frac{n_1 dn_2 - n_2 dn_1}{r(n_0 + r)}, \end{aligned} \quad (19)$$

where  $r = \sqrt{n_\mu n^\mu}$ . We are not going to simplify this, as the target space constraint  $n_\mu n^\mu = 1$  can be introduced in the functional integral measure, i.e.

$$\mathcal{D}n^\mu \delta[n^\mu n_\mu] = \mathcal{D}\lambda \mathcal{D}n^\mu \exp \left[ i \int d^4x \lambda(x) (n^\mu(x) n_\mu(x) - 1) \right]. \quad (20)$$

For the coherent state integral we can now write

$$\begin{aligned} &\int \mathcal{D}\lambda \mathcal{D}n_\mu \exp \left[ i \int d^4x \lambda(x) (n^\mu(x) n_\mu(x) - 1) \right] \\ &\times \exp \left[ i \int dx_\mu \left( -|j| \frac{n_1(x) \frac{\partial n_2(x)}{\partial x_\mu} - n_2(x) \frac{\partial n_1(x)}{\partial x_\mu}}{r(n)(n_0(x) + r(n))} \right) \right], \end{aligned} \quad (21)$$

where the second exponent represents the derived low-energy kinetic term for field  $n_\mu$ .

## 4 Conclusion

In this note we have reviewed some of the evidence regarding existence of preferred direction on cosmological scales. While the evidence is not necessarily conclusive, there are undeniable hints of possibility of such direction. We have used this observation as a spring board for a discussion of alternate explanation of flavor oscillations observed in neutrinos. The analysis was done on a toy model in 2+1 dimensions, where we traded decreased complexity of symmetry group ( $SO(2,1)$  instead of  $SO(3,1)$ ) for mildly increased complexity of fermionic field (due to existence of inequivalent representations of Dirac matrices). The analysis demonstrates that an interaction of flavour fields with a Nambu-Goldstone vector field with preferred direction can result in apparent oscillation of flavours. We then generate the kinetic term of the field through corresponding coherent state-functional, as a result the Nambu-Goldstone vector field can be considered dynamical. This then implies that oscillations should not be uniform across space-time, but should vary. If such variation in oscillation times was detected, it could be considered as an indirect evidence in favour of this analysis. The goal of further work is to extend the analysis to 3+1 dimensions, however the increased complexity of the group is making it difficult for time being.

## References

- [1] Planck Collaboration, *Planck 2018 results. I. Overview and the cosmological legacy of Planck*, (A&A, Vol 641, A1) (2020) [<https://www.aanda.org/articles/aa/pdf/2020/09/aa33880-18.pdf>]
- [2] M. Tegmark, A. de Oliveira-Costa and A. Hamilton, *High resolution foreground cleaned CMB map from WMAP* Phys. Rev. D 68, 123523 (2003)
- [3] D. Hutsemekers, L. Braibant, V. Pelgrims, D. Sluse, *Alignment of quasar polarization with large-scale structures*, (A&A, Volume 572, A18) (2014) [arXiv:1409.6098v1]
- [4] Planck Collaboration, *Planck 2013 results. XXVII. Doppler boosting of the CMB: Eppur si muove*, (A&A, Vol 571, A27) (2014) [<https://www.aanda.org/articles/aa/pdf/2014/11/aa21556-13.pdf>]
- [5] Planck Collaboration, *Planck 2013 results. XXIII. Isotropy and statistics of the CMB*, (A&A 571, A23) (2014) [<https://www.aanda.org/articles/aa/pdf/2014/11/aa21534-13.pdf>]
- [6] M. Blasone, P. Jizba and G. Vitiello, *Quantum Field Theory and its Macroscopic Manifestations*, (World Scientific & ICP, London, 2010).
- [7] V. Pelgrims, *Cosmological-scale coherent orientations of quasar optical polarization vectors in the Planck era*, (A&A, Volume 622, A145) (2019) [<https://www.aanda.org/articles/aa/pdf/2019/02/aa31294-17.pdf>]

- 
- [8] A. Payez, D. Hutsemekers, J. R. Cudell, *Large-scale coherent orientations of quasar polarisation vectors: interpretation in terms of axion-like particles* (AIP Conference Proceedings 1274, 144) (2010) [arXiv:1003.2213v2]
- [9] J.L. Chkareuli, C.D. Froggatt and H.B. Nielsen, *Phys. Rev. Lett.* **87** (2001) 091601; *Nucl. Phys.* **B609** (2001) 46.
- [10] C.D. Froggatt and H.B. Nielsen, *Origin of Symmetries*, (World Scientific, Singapore, 1991).
- [11] M. Blasone and P. Jizba, [arXiv:1111.3228]



# Causality in Reversed Time Series: Reversed or Conserved?\*

Jakub Kořenek

5th year of PGS, email: [korenjak@fjfi.cvut.cz](mailto:korenjak@fjfi.cvut.cz)

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Jaroslav Hlinka, Department of Complex Systems

Institute of Computer Science, CAS

**Abstract.** The inference of causal relations between observable phenomena is paramount across scientific disciplines, however the means for such enterprise without experimental manipulation are limited. A commonly applied principle is that of the cause preceding and predicting the effect, taking into account other circumstances. Intuitively, when the temporal order of events is reverted, one would expect the cause and effect to apparently switch roles. This has been previously demonstrated in bivariate linear systems and utilized in design of improved causal inference scores, while such behaviour in linear systems has been put in contrast with nonlinear chaotic systems where the inferred causal direction appears unchanged under time reversal. The presented work explores the conditions under which the causal reversal happens - either perfectly, approximately, or not at all - using theoretical analysis, low-dimensional examples and network simulations, focusing on the simplified yet illustrative linear vector autoregressive process of order one. We start by theoretical analysis that demonstrates that a perfect coupling reversal under time reversal occurs only under very specific conditions, followed up by constructing low-dimensional examples where indeed the dominant causal direction is even conserved rather than reversed. Finally, simulations of random as well as realistically motivated network coupling patterns from brain and climate show that level of coupling reversal and conservation can be well predicted by asymmetry and anormality indices introduced based on the theoretical analysis of the problem. The consequences for causal inference are discussed.

*Keywords:* causality, time reversal, temporal symmetry, reversed time series, vector autoregressive process, random networks

**Abstrakt.** Určení příčinných vztahů mezi pozorovatelnými jevy je jedna ze základních otázek napříč vědními obory. Bez možnosti experimentální manipulace v rámci systému jsou však nástroje pro tento typ výzkumu značně omezené. Jedním ze základních principů je princip kauzality, tedy že příčina předchází a může predikovat důsledek, nikdy ne naopak. Pokud bychom změnilí časový sled událostí, intuitivně by se dalo očekávat, že příčina a následek změní své role. Tato premisa byla již dříve využita v biviariálních lineárních systémech při návrhu zpřesnění odhadů kauzálních indexů (např. koeficient Grangerovy kauzality). V rámci této práce zkoumáme podmínky, za kterých dochází ke kauzálnímu obratu - buď dokonale, přibližně, nebo vůbec - u systémů popsaných vektorovým autoregresním procesem řádu 1, a to pomocí teoretické analýzy a numerických simulací. Teoretická analýza ukazuje, že k dokonalému obrácení

---

\*This work was supported by the Czech Science Foundation projects No. 19-11753S, No. 21-32608S, No. 21-17211S, by Ministry of Health Czech Republic – DRO 2021 („National Institute of Mental Health – NIMH, IN: 00023752“) and by Grant Agency of the Czech Technical University in Prague, grant No. SGS20/183/OHK4/3T/14.

směru vazby v rámci časového obrácení dochází pouze za velmi specifických podmínek. Dále konstruujeme příklady systémů nízké dimenze ( $n = 3$ ), ve kterých, navzdory původní intuitivní myšlence, je dominantní směr vazby při otočení směru času zachován. Simulace náhodných i realisticky motivovaných systémů imitující časové řady mozkové aktivity či globálního klimatu ukazují, že úroveň zachování či převrácení směru vazby lze dobře předpovědět pomocí indexů asymetrie a anormality zavedených na základě teoretické analýzy problému.

*Klíčová slova:* kauzalita, časová symetrie, obrácení směru času, reverzní časové řady, vektorový autoregresní proces, náhodné sítě

**Full paper:** Kořenek, J.; Hlinka, J. Causality in Reversed Time Series: Reversed or Conserved? *Entropy* 2021, 23, 1067. <https://doi.org/10.3390/e23081067>

# Kombinace handcrafted a learned features

Václav Košík

2. ročník PGS, email: [kosikvac@fjfi.cvut.cz](mailto:kosikvac@fjfi.cvut.cz)

Katedra matematiky

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze

školitel: Jan Flusser, Oddělení zpracování obrazové informace

Ústav teorie informace a automatizace, AV ČR

**Abstract.** This work deals with the problematics of image features. First, it reveals their division into handcrafted and learned features and summarizes advantages and disadvantages of both approaches. From the perspective of success rate in image classification, it's known which of these approaches is more suitable for a particular task. A natural continuation of the future research could be, in our opinion, a possibility of a combination of these two types of features. The work gives an overview of all attempts of such a combination. There is not a lot of them and most of them uses merely a fusion of both types of features into one vector. In the end, we present our idea of our future research in this topic.

*Keywords:* convolutional neural network, handcrafted features, learned features

**Abstrakt.** Tato práce se zabývá problematikou volby features u obrázků. Nejdříve vysvětluje jejich dělení na handcrafted a learned features a shrnuje výhody a nevýhody obou přístupů. Z hlediska success rate obrázkové klasifikace se ví, který z přístupů je při dané úloze vhodnější. Přirozeným pokračováním dalšího výzkumu by proto podle nás mohla být možnost kombinace těchto dvou druhů features. Práce se proto zabývá shrnutím všech dosavadních pokusů o takovou kombinaci. Není jich mnoho a většina z nich používá pouhou fúzi obou features do jednoho vektoru. Na konci představujeme plán našeho dalšího výzkumu v této oblasti.

*Klíčová slova:* handcrafted features, konvoluční neuronové sítě, learned features

## 1 Úvod

Mnoho algoritmů pro klasifikaci obrázků je založeno na výpočtu features. Tyto features se snaží objekt na obrázku dostatečně charakterizovat, abychom na základě přiřazených features byli schopni obrázku co nejúspěšněji rozklasifikovat do správných kategorií. Existují dva přístupy k výpočtu features. První z nich je manuální příprava veličin s předem definovaným výpočtem. Vybíráme takové veličiny, které budou jednak obrázek dobře charakterizovat a navíc budou robustní proti modifikacím, které mohou nastat. Tou může být například rozmazání obrázku. Druhou kategorií jsou tzv. learned features, které počítač sám optimalizuje podle konkrétních dat. V dosavadních metodách se oba přístupy obvykle oddělovaly. Tento článek je rešerší dosavadních pokusů o kombinaci obou přístupů dohromady.

V následující sekci představujeme stručný úvod do obrázkové klasifikace. V Sekci 3 dopodrobna rozebíráme rozdíl mezi handcrafted a learned features. Vysvětlujeme výhody a nevýhody obou přístupů. Zároveň zmiňujeme, kdy daný přístup dopadne lépe z hlediska

success rate klasifikace. Sekce 4 je rešerší metod, které využívají nějakou formu kombinace obou druhů features. V poslední sekci potom nastiňujeme náš budoucí výzkum.

## 2 Klasifikace obrázků

Mějme obrázek a předpokládejme, že obsahuje právě jeden z objektů  $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_n$ . Obrazková klasifikace je proces, při kterém algoritmus rozpoznává, který z těchto objektů obrázek obsahuje. Příkladem takové úlohy může být rozpoznávání osoby z portrétní fotografie nebo rozpoznávání zvířete. V takovém případě ale musíme předem definovat množinu všech osob nebo zvířat, které se mohou na obrázku vyskytnout.

Představme si, že se z obrázků snažíme naučit rozpoznávat rostliny. Abychom se naučili rozpoznat konkrétní rostlinu, potřebujeme k tomu předtím vidět nějaký počet obrázků, kdy předem víme, že se o tuto rostlinu jedná. Množině takových obrázků se říká trénovací množina. Poté se budeme chtít otestovat, jak dobře jsme se naučili rozpoznávat. K tomu nám bude sloužit tzv. testovací množina, která obsahuje obrázky, které jsme během našeho učení neviděli. Budeme určovat, kterou rostlinu testovací obrázky obsahují a potom zpětně zkontrolujeme, jak úspěšní jsme byli. Stejně funguje i naprostá většina dnešních počítačových algoritmů. Počítači předložíme dostatečný počet příkladů daného objektu, tj. načteme trénovací množinu. Algoritmus se následně snaží generalizovat informaci z této trénovací množiny, aby potom rozpoznal i obrázek, který v trénovací množině nefiguroval, tj. algoritmus se podle něj neučil. Když se náš algoritmus naučí přiřazovat objekt k obrázku, zajímá nás, jak úspěšně si vede. Proto ne všechny obrázky z datasetu dáváme do trénovací množiny, ale necháváme si část, například 20 %, stranou. Takové množině se říká testovací. Existuje mnoho možností, jak vyhodnotit úspěšnost takového algoritmu. Vždy záleží, jaký druh chyby je pro nás méně přijatelný. Jeden ze způsobů je třeba success rate, který nabývá hodnoty v intervalu  $[0, 1]$  a počítá se jako počet všech správně rozpoznaných obrázků z testovací množiny ku počtu všech obrázků v testovací množině.

Přestože je Image processing velmi populární oblast výzkumu, tak i přes desítky let intenzivního zkoumání je lidský mozek stále mnohem lepší v detekci objektu na obrázku než počítač. Jedna z výhod je například velikost trénovací množiny, kterou potřebujeme, abychom se něco naučili rozpoznávat. K tomu, abychom se dobře naučili poznat nějakou rostlinu, nám pravděpodobně bude stačit deset, maximálně dvacet obrázků. S tolika obrázky by si ale počítač nehledě na algoritmus pravděpodobně nevystačil, byly by jich třeba minimálně stovky, ideálně tisíce. Dalším z mnoha výhod člověka je například jeho schopnost kontextového vnímání. Ze své zkušenosti například předpokládáme, že když se na obrázku objeví člověk s vodítkem, tak na konci vodítka bude pravděpodobně pes. Navíc nám nevadí, že na obrázku je jen půlka psa nebo že je pes zakrytý, dokážeme si domyslet, jak ve skutečnosti pes vypadal. Počítač může ale taková skutečnost velmi zmást. Skutečnost, že pro člověka je oproti počítači obrazková klasifikace lehkým úkolem, ovlivnila například vývoj neuronových sítí, které se snažily fungování lidského mozku napodobit.

### 3 Handcrafted vs. learned features

Prvním krokem v rozpoznání obrazu je výpočet tzv. features, což jsou kvantitativní veličiny, které se přiřazují každému obrázku. Může se jednat například o  $n$ -tice nebo matice reálných nebo komplexních čísel. Doufáme, že tyto veličiny budou schopny daný objekt na obrázku nějak charakterizovat. Pokud například rozpoznáváme tři kategorie objektu a počítáme feature jako  $n$ -tici reálných čísel, potom chceme, aby tyto tři kategorie vytvořily v  $\mathbb{R}^n$  tři oddělitelné klastry. Úplně nejzákladněji lze features dělit do dvou kategorií – handcrafted a learned features.

Handcrafted features se počítají předem definovaným způsobem. Často se snaží charakterizovat nějakou konkrétní vlastnost obrázku, například rozložení orientovaných gradientů, hrany, textury nebo histogramy intenzit. Dalším příkladem handcrafted features jsou momenty, což jsou projekce obrázku do polynomiální báze. Podle volby polynomiální báze rozlišujeme různé typy momentů. Více o momentech se lze dočíst v [1]. Důležitou vlastností, která se po features často požaduje, je invariance na nějaký speciální typ transformace. Tím může být například rotace, translace, škálování nebo také rozmazání obrázku. Požadujeme například, aby daný objekt, který je na obrázku otočený, byl stále klasifikován jako tentýž objekt. Proto je nutné, aby takovému obrázku byla přiřazená stejná nebo alespoň velmi podobná hodnota dané feature, což není automaticky splněno. Například momenty tedy musí být chytře voleny tak, aby byly (nejen) rotačně invariantní.

Learned features jsou oproti tomu numericky optimalizovány počítačem podle konkrétních dat. Dnes jsou spojeny zejména s neuronovými sítěmi, které začaly vznikat v padesátých letech a zejména v posledních letech jsou velmi populární. Neuronová síť je organizovaná do tzv. vrstev, každou vrstvu tvoří neurony se svými hodnotami. Neuron v každé vrstvě kromě první přijímá výsledek z nějakého počtu neuronů z předchozí vrstvy. Zpravidla se hodnoty těchto neuronů násobí tzv. vahami, sečtou se a transformují se nějakou funkcí. Jedná se tedy o transformaci lineární kombinace. První vrstva obsahuje input, tedy například pixely. Poslední vrstva počítá hodnotu outputu. Síť je inicializovaná náhodně, což znamená, že jí jsou náhodně přidělené váhy a output vůbec neodpovídá reálnému outputu. Poté se pomocí tréninkové množiny a gradient descent algoritmu v krocích učí na konkrétních datech. Dnes se na klasifikaci obrázků používají zejména konvoluční neuronové sítě (CNN), které mezi vrstvami komunikují prostřednictvím konvolucí. Jejich výhodou oproti plně propojeným sítím je invariance na translaci objektu na obrázku a také o hodně menší počet parametrů, tj. vah, které musíme optimalizovat.

Velkou nevýhodou neuronových sítí je neinterpretovatelnost jejich výsledků. Váhy se aktualizují automaticky, a proto nelze zjistit, proč je síť nastavila daným způsobem. To znamená, že není možné zjistit, co přesně se naučila v obrázku rozeznávat. Někdy však potřebujeme vědět, na základě čeho jsme daný obrázek klasifikovali. Tato neinterpretovatelnost navíc může vést k mnoha zavádějícím chybám při nešťastném výběru trénovací a testovací množiny, které nejsme schopni poznat pomocí testování. Představme si, že neuronovou síť budeme chtít naučit rozeznávat dva objekty. Do trénovací množiny pořídíme dostatek obrázků, ale nejdříve budeme fotografovat dostatečný počet vzorků prvního objektu a jiný den druhého objektu. Je dost možné, že světelné podmínky v těchto dvou dnech byly jiné a neuronová síť se vůbec nenaučí rozeznávat dané objekty, ale pouze světelné podmínky na obrázcích. Při handcrafted features by to nemusel být nutně problém,

kdybychom je tomu přizpůsobili, třeba invariancí na změnu intenzity.

Konvoluční neuronové sítě jsou invariantní na translaci. Ale další základní transformace jako rotace jim dělají problémy. To se zpravidla řeší augmentací trénovací množiny. To znamená, že do trénovací množiny přidáme například rotace obrázků, které trénovací množina obsahuje. To ovšem vede ke značnému zvýšení výpočetní náročnosti při trénování. Stejně tak je problém, pokud neuronovou síť učíme pouze na ostrých obrázcích a budeme od ní očekávat správné výsledky na rozmazaných obrázcích. V tomto případě je opět třeba augmentovat trénovací množinu o rozmazané obrázky. Každý obrázek musíme do trénovací množiny přidat několikrát s různou mírou rozmazání. Otázkou je také druh rozmazání. Tento problém lze vyřešit pomocí speciálních handcrafted features navržených tak, aby byly invariantní na rozmazání, viz [1].

Výhodou neuronových sítí ovšem je, že se nic nemusí připravovat ručně. Je třeba pouze pečlivě připravit trénovací množiny a odladit gradient descent optimalizaci, ale nemusíme se zabývat, čím bychom mohli danou třídu obrázků charakterizovat, protože neuronová síť to udělá za nás. Navíc lze často použít už naučené sítě na jiném datasetu, které jsou úspěšné a odzkoušené, a mírně je přizpůsobit na náš dataset. Tomu se říká fine-tuning.

Neuronové sítě získaly v posledních letech velkou popularitu, protože uměly vyřešit řadu úloh s obrovskou úspěšností, které pomocí handcrafted features dosáhnout nešlo. Je známo, v jakých případech bude neuronová síť úspěšnější než hand-crafted features a v jakých případech to dopadne naopak. Hand-crafted features úlohu vyřeší lépe, pokud existuje transformace, která obrázky převede do tzv. feature space tak, že jsou v něm jednotlivé kategorie separovatelné. To ovšem není vždy možné. Pokud se jedná například o rozeznávání pohlaví z portrétní fotografie, potom jde o tak komplexní úlohu s tak velkou variabilitou možných dat, že takovou transformaci najít nelze. Pokud ale se jedná například pouze o rozeznávání konkrétní osoby, pak už takovou transformaci obvykle najít lze.

## 4 Kombinace handcrafted a learned features

Zatímco otázka, které features je vhodné použít na kterou úlohu, je vyřešena, přirozenou oblastí zkoumání je potom možnost kombinace obou druhů features dohromady. Cíle tohoto kombinování mohou být dva. Buď se snažíme zvýšit úspěšnost rozpoznávání nebo je cílem při zachování úspěšnosti výrazněji zmenšit dobu trénování. Jak bylo zmíněno v předchozí sekci, neinvariance neuronových sítí na různé typy častých transformací se obvykle řeší augmentací trénovací množiny, což vede k násobně většímu počtu dat a tedy výrazně delšímu času učení. Naším nápadem je implementování handcrafted features do neuronových sítí tak, aby se využila právě invariance těchto features na požadované transformace. Může jít například o rotaci nebo rozmazání obrázku. Potom by nebylo třeba augmentovat trénovací množinu a čas potřebný k učení by se výrazně snížil. Zároveň nevíme o žádné literatuře, která by se touto možností zabývala. Přinášíme tedy alespoň rešerši všech dosavadních pokusů o nějakou kombinaci learned a handcrafted features. Začínáme ovšem článkem, kde autoři k problému neinvariance CNN na různé typy transformace přistupují jiným způsobem.

## 4.1 Zobecněná definice konvoluce v CNN

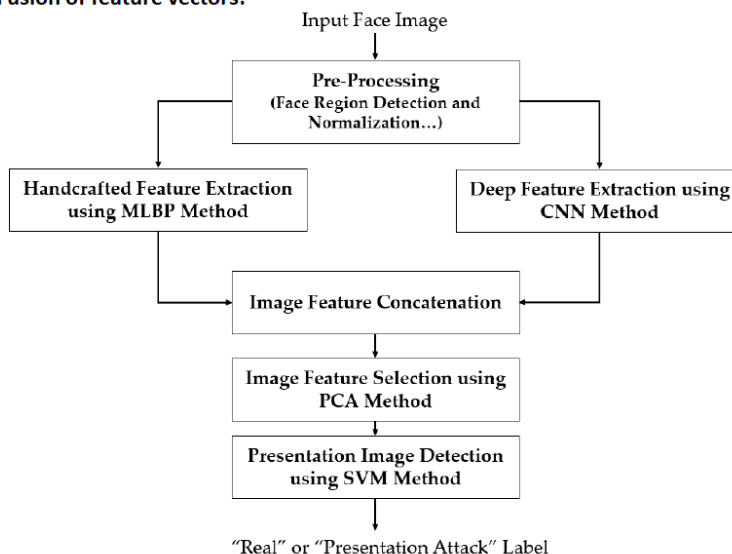
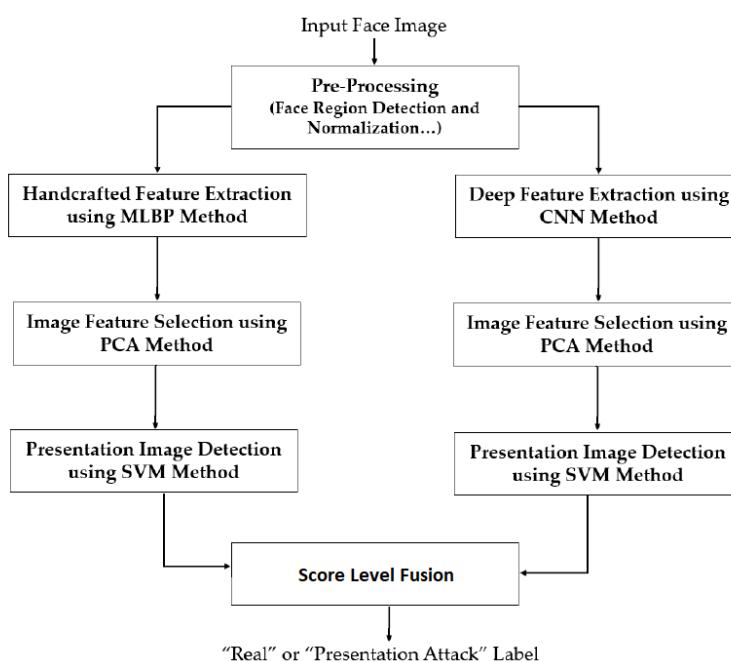
V [2] autoři konstruují CNN se zobecněnou definicí konvoluce, kterou nazývají  $G$ -konvoluce, kde  $G$  je diskrétní grupa transformací. Může se jednat například o grupu všech translací a rotací o násobek  $\pi/2$ . V takovém případě se jednotlivé příznakové mapy CNN v podstatě augmentují o rotace filtrů a v důsledku je CNN invariantní na rotace o násobek  $\pi/2$ . Obecně však definují podobu konvoluce tak, aby daná CNN, kterou nazývají  $G$ -CNN, byla invariantní na obecnou grupu diskrétních transformací  $G$ . Problémem ovšem je, že pouze diskrétních.  $G$ -CNN tedy nemůže být invariantní na jakoukoliv rotaci, pouze konečný počet rotací. Daná konstrukce navíc vede ke zvýšení výpočetní náročnosti i ke zvýšení počtu parametrů. Svou metodu testují právě pro případ grupy všech translací a rotací o  $\pi/2$  na databázích náhodně rotovaných MNIST (ručně psané číslice) a CIFAR10. V obou případech testují nejdříve obyčejnou CNN a poté  $G$ -CNN, kde ovšem sníží počet příznakových map tak, aby počet parametrů  $G$ -CNN zůstal přibližně stejný jako u CNN.  $G$ -CNN vždy významně sníží error rate klasické CNN a vychází na obou databázích lépe než všechny doposud publikované výsledky.

## 4.2 Fúze modelů učených na handcrafted a learned features zvlášť

Naprostá většina pokusů kombinovat handcrafted a learned features, o kterých víme, používala fúzi learned features a handcrafted features jako input do Support Vector Machines (SVM) nebo podobných klasifikátorů. Dalším, ještě jednodušším nápadem, je použít vážený průměr outputu z SVM trénovaným pouze na learned features a outputu z SVM trénovaným na handcrafted features.

Článek [3] využívá fúzi obou druhů features v úloze detekce podvodů při nahrávání pasové fotografie do mobilních aplikací, identifikačních karet apod. Podvodem může být například vyfocení vytisknuté fotografie. Autoři zdůrazňují, že v této úloze závisí úspěch silně na dané databázi a nedá se říct, zda je lepší přístup s handcrafted features nebo learned features. Jako handcrafted feature používají zobecněnou verzi texturového LBP, tzv. MLBP který se v předchozích zkoumáních osvědčil. Testují dva přístupy kombinace. V prvním přístupu natrénují SVM na learned a handcrafted features zvlášť a výsledné skóre počítají váhovým součtem výstupu těchto dvou SVM. Ve druhém přístupu spojí oba typy features do jednoho vektoru a trénují pouze jedno SVM, viz Obrázek 1. V obou případech využívají PCA k redukci dimenzionality, protože CNN produkuje 4096-dimenzionální vektor, MLBP potom 3732-dimenzionální vektor. Všechny modely jsou testovány na databázích NUAA o 12 614 obrázcích a CASIA o 110 674 obrázcích. Úspěšnost modelu měří tzv. average classification error rate, který se počítá jako procento všech špatně klasifikovaných obrázků lomeno dvěma. NUAA je příklad databáze, kde si handcrafted features vedou lépe. V článku se použití MLBP dostává na ACER = 0.67 % a CNN pouze na 11.25 %. Váhový součet skóre z obou modelů vylepšuje výsledek na ACER = 0.63 %, spojení obou vektorů do jednoho dokonce na 0.46 %. Na databázi CASIA dopadá lépe CNN s ACER 2.17 %, oproti 10.57 % v případě MLBP. Váhový součet skóre potom vrací 1.79 % a fúze dvou vektorů do jednoho SVM nakonec 1.70 %. To znamená, že oba druhy features obsahují komplementární informace, které klasifikátor umí využít.

Publikace [4] hledá features, které by nemusely nutně dávat nejlepší výsledek na nějaké

**1: Fusion of feature vectors:****2: Score level fusion:**

Obrázek 1: Dva různé přístupy ke kombinaci handcrafted a learned features v článku [3]. V prvním přístupu dochází ke spojení obou features do jednoho vektoru, který se posílá jako input do SVM. V druhém přístupu se naučí SVM na obou features zvlášť a výsledkem je váhový součet výstupu z obou SVM. Obrázek je převzat z [3].

konkrétní databázi, ale které by dostatečně dobře fungovaly obecně na co nejvíce databázích s co nejvíce různými problémy. Jako klasifikátor pro danou úlohu používá SVM. Learned features jsou brány z různých hlubokých vrstev několika CNN natrénovaných na různé problémy. Protože takové features mají velmi vysoké dimenze, k redukci dimenzio-



nality je použita metoda PCA. Pro handcrafted features testují mnoho různých přístupů. Nejlépe vychází features založené na LBP a právě na nich testují fúzi s learned features na 18 různých databázích s různým počtem kategorií. Ve 14 případech tato fúze zlepšila úspěšnost modelu, která je měřena pomocí AUC.

Podobné nápady fúze handcrafted a learned features jsou použity například v [5], [6] nebo [7].

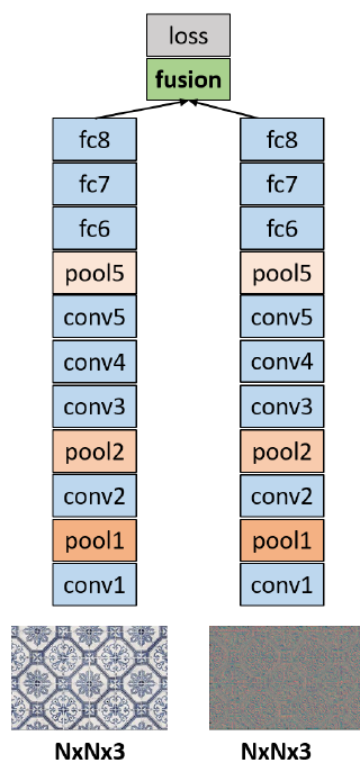
### 4.3 Handcrafted features jako input do CNN

Článek [8] z roku 2018 využívá handcrafted features, konkrétně LBP, jako inputu do CNN. Je inspirován článkem [9], který využívá stejnou ideu. V [8] testují dvě architektury CNN, které učí zvláště na RGB inputu, tedy pixelové reprezentaci, a zvláště na LBP příznaku, viz Obrázek 2. LBP příznak je ovšem uspořádaná n-tice čísel, na které se nedá počítat 2D konvoluce. Návod, jak uspořádat LBP příznak do matice a vizualizovat ho, dává právě článek [9]. Výstup z obou konvolučních sítí na konci fúzují dohromady. Obě sítě učí na rozsáhlé databázi ImageNet o 1,3 milionech obrázcích, 1000 kategorií. K vyhodnocení používají top-n error, což je procento obrázků, jejichž pravá kategorie nebyla ani mezi n nejpravděpodobnějšími kategoriemi, které určil model. Výsledek vždy porovnávají s klasickou CNN naučenou pouze na pixelové reprezentaci. U ImageNet došlo ke zvýšení top-1 error z 37,6 % na 34,4 % a top-5 error z 15,9 % na 13,8 % v případě první architektury. V případě druhé architektury se zvýšil top-1 error z 24,4 % na 23,7 % a top-5 error z 8,0 % na 7,0 %. Sítě naučených na ImageNet dále využívají jako extraktor příznaků a testují je nejprve na 4 databázích s rozpoznáváním textury a na 8 databázích s rozpoznáváním objektů na leteckých snímcích. Ve všech případech přidává CNN učená na dvou reprezentacích významný příspěvek do úspěšnosti klasifikace oproti klasické CNN.

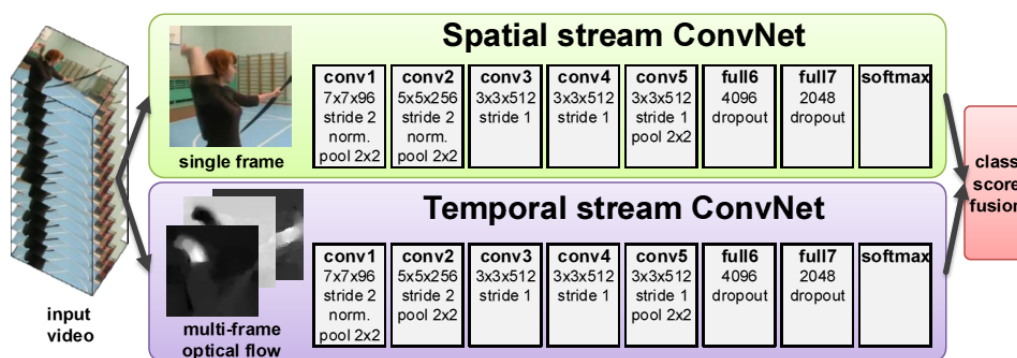
Podobný koncept je využit v [10], kde staví model pro rozpoznávání typu pohybu z videa. Pro model jsou použity dvě konvoluční neuronové sítě, přičemž první je trénovaná na obrázcích z videa a učí se tedy ze statické informace. Druhá konvoluční síť je trénovaná na předem vypočítaném optical flow, což je handcrafted feature uspořádaný do matice obsahující vektorové pole pohybu na videu, který se počítá z několika po sobě jdoucích snímků. Výstup z obou konvolučních sítí je potom poslán do SVM, viz Obrázek 3. První síť je klasická CNN, která se učí z obrázků, a proto ji nejdříve natrénují na široké databázi Imagenet a potom pouze lehce přizpůsobí na danou úlohu. Druhou síť musí natrénuvat pouze na menších databázích UCF-101 a HMDB-51, na kterých i testují výsledky. Na UCF-101 dává nejlepší síť z obrázků success rate 73 % a nejlepší síť učená na optical flow 83,7 %, jejich spojením dosahují 88 %. V případě druhé databáze je to potom posun z 40,5 % a 54,6 % na 59,4 %.

## 5 Náš budoucí výzkum

V našem budoucím výzkumu se budeme soustředit na speciální typ handcrafted features, které jsou invariantní na rozmazání, tzv. blur invarianty. Rozmazání obrázku může být způsobeno mnoha faktory jako třeba špatné zaostření, pohyb fotoaparátu nebo scény,



Obrázek 2: Metoda použitá v publikaci [8], obrázek je odtud rovněž převzat. V levé části se pět konvolučních vrstev učí z pixelové reprezentace obrázku a následují tři plně propojené vrstvy. V pravé části obrázku se stejná neuronová síť učí z LBP reprezentace. Výsledky se fúzí na výstupu z obou sítí.



Obrázek 3: Dvě stejné konvoluční sítě z článku [10] s pěti vrstvami následované dvěma plně propojenými vrstvami a softmax výstupem. První je trénovaná na obrázcích, druhá na optical flow. Obrázek je převzat z [10].

vibrace fotoaparátu a další. V některých případech je rozmazání malé a můžeme ho ignorovat. Ale v mnoha případech je to primární zdroj degradace obrázku.

Pokud předpokládáme dostatečně malý expoziční čas pořízení fotografie tak, že faktory rozmazání se nemění v průběhu času, a také předpokládáme stejné rozmazání pro



Obrázek 4: Rozmazání modelované podle rovnice (2). Zleva doprava se jedná o čistý obrázek, rozmazání vlivem pohybu, Gaussovské rozmazání, uniformní rozmazání a náhodné rozmazání. Od první řádky po třetí se zvětšuje intenzita rozmazání. Obrázek je převzatý z [11].

všechny barvy, můžeme aproximovat rozmazání původní scény  $f$  jako

$$g(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(s, t) h(x, y, s, t) ds dt, \quad (1)$$

kde  $g$  je pořízená fotografie a  $h$  je tzv. rozptylová funkce. Pokud navíc předpokládáme, že rozmazání je ve všech částech obrázku stejné, neboli

$$h(x, y, s, t) = h(x - s, y - t),$$

můžeme navíc (1) zjednodušit do obyčejné konvoluce

$$g(x, y) = (f * h)(x, y). \quad (2)$$

Rovnice (2) je tedy zjednodušení skutečného rozmazání tak, aby dobře aproximovalo mnoho reálných druhů rozmazání, a zároveň je to matematicky dostatečně jednoduchá formulace, aby se s ní dalo dobře pracovat.

Nechť  $I$  je vektorový prostor všech obrázků (ten můžeme definovat například jako prostor všech po částech spojitých funkcí  $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}^3$  s omezeným nosičem) a  $S$  vektorový podprostor  $I$ , který je uzavřený na konvoluci. Do  $S$  zahrnujeme všechny přípustné rozptylové funkce  $h$ , tedy všechny funkce, které mohou způsobit rozmazání obrázku podle (2). Blur invariant je potom takový funkcionál  $\mathcal{I}$ , pro který platí

$$\mathcal{I}(f) = \mathcal{I}(f * h),$$

pro všechny  $h \in S$ .

Množina  $S$  musí být volena obezřetně. Pokud bychom ji zvolili příliš malou, například pouze jako  $S = \{\delta\}$ , potom bychom nepokryli žádné příklady rozmazání. Pokud bychom do ní naopak zahrnuli příliš a zvolili ji jako  $S = I$ , potom by pro všechny dva obrázky  $f_1, f_2$  platilo  $\mathcal{I}(f_1) = \mathcal{I}(f_1 * f_2) = \mathcal{I}(f_2 * f_1) = \mathcal{I}(f_2)$  a funkcionál  $\mathcal{I}$  by neměl žádnou diskriminační sílu, tj. pro všechny obrázky by vracel stejnou hodnotu.

Nechť  $A$  je doplněk  $S$  do  $I$ . Potom můžeme každý obrázek napsat jako  $f = Pf + f_A$ , kde  $P$  je lineární projektor na  $S$ . Nakonec ještě předpokládejme, že  $g * h \in A$  pro všechny  $g \in A$  a  $h \in S$ . Pokud  $P$  je ortogonální projektor a navíc  $S$  je kromě konvoluce uzavřena i na kroskorelaci, pak je tento předpoklad vždy splněn. Za těchto předpokladů už je lehké ukázat, že

$$\mathcal{I}(f) = \frac{\mathcal{F}(f)}{\mathcal{F}(Pf)}, \quad (3)$$

kde  $\mathcal{F}$  je Fourierova transformace, je blur invariant pro daný podprostor rozptylových funkcí  $S$ .

Schopnost konvolučních neuronových sítí rozpoznat rozmazané obrázky, pokud byly trénované pouze na čistých obrázcích, je nízká. Vliv rozmazání na jejich úspěšnost byl studován například v [11] nebo [12]. Tento problém se řešil masivní augmentací trénovací množiny. Naší ideou je zapojení blur invariantů ve tvaru (3) do vyšších vrstev CNN tak, abychom využili jejich robustnost na rozmazání a mohli se tak vyhnout masivní augmentaci, a zároveň alespoň zachovali klasifikační sílu CNN.

## Literatura

- [1] Flusser, Jan & Suk, Tomáš & Zitová, Barbara. (2016). 2D and 3D Image Analysis by Moments. i-xxiii. 10.1002/9781119039402.fmatter.
- [2] Cohen, Taco & Welling, Max. (2016). Group equivariant convolutional networks. In International conference on machine learning (pp. 2990-2999).
- [3] Nguyen, Dat & Pham, Tuyen & Baek, Na & Park, Kang. (2018). Combining Deep and Handcrafted Image Features for Presentation Attack Detection in Face Recognition Systems Using Visible-Light Camera Sensors. Sensors. 18. 699. 10.3390/s18030699.
- [4] Nanni, Loris & Ghidoni, Stefano & Brahmam, Sheryl. (2017). Handcrafted vs learned Features for computer vision classification. Pattern Recognition. 71. 10.1016/j.patcog.2017.05.025.
- [5] Egede, Joy & Valstar, Michel & Martinez, Brais. (2017). Fusing Deep Learned and Hand-Crafted Features of Appearance, Shape, and Dynamics for Automatic Pain Estimation. 10.1109/FG.2017.87.
- [6] Yadav, Daksha & Kohli, Naman & Agarwal, Akshay & Vatsa, Mayank & Singh, Richa & Noore, Afzel. (2018). Fusion of Handcrafted and Deep Learning Features for Large-Scale Multiple Iris Presentation Attack Detection. 10.1109/CVPRW.2018.00099.

- 
- [7] Majtner, Tomas & Yildirim Yayilgan, Sule & Hardeberg, Jon. (2016). Combining Deep Learning and Hand-Crafted Features for Skin Lesion Classification. Proceedings of the IEEE. 10.1109/IPTA.2016.7821017.
  - [8] Anwer, Rao & Khan, Fahad & Weijer, Joost & Molinier, Matthieu & Laaksonen, Jorma. (2018). Binary patterns encoded convolutional neural networks for texture recognition and remote sensing scene classification. ISPRS Journal of Photogrammetry and Remote Sensing. 138. 10.1016/j.isprsjprs.2018.01.023.
  - [9] Levi, Gil & Hassner, Tal. (2015). Emotion Recognition in the Wild via Convolutional Neural Networks and Mapped Binary Patterns. 503-510. 10.1145/2818346.2830587.
  - [10] Simonyan, Karen & Zisserman, Andrew. (2014). Two-Stream Convolutional Networks for Action Recognition in Videos. Advances in Neural Information Processing Systems. 1.
  - [11] Flusser, Jan & Lébl, Matěj & Šroubek, Filip. (2021). Impact of image blur on classification and augmentation of Deep Convolutional Networks. To appear.
  - [12] Vasiljevic Igor & Chakrabarti, Ayan & Shakhnarovich Gregory. (2016). Examining the impact of blur on recognition by convolutional networks. arXiv preprint arXiv:1611.05760,



# WKBJ Approximation for Linearly Coupled Systems: Asymptotics of Reaction-Diffusion Systems

Juraj Kováč

2. ročník PGS, email: kovacjur@fjfi.cvut.cz

Katedra matematiky

Fakulta jadrová a fyzikálne inžinierska, ČVUT v Praze

školiťel: Václav Klika, Katedra matematiky

Fakulta jadrová a fyzikálne inžinierska, ČVUT v Praze

**Abstract.** A new range of mathematical tools and approaches is required to obtain a more complex and advanced analysis of pattern formation in reaction-diffusion (RD) systems. This is especially true when considering generalizations to the original model, such as spatial heterogeneity or domain growth. Asymptotic analysis has become one of these novel approaches in investigations of the more complex models, e.g. RD systems in a spatially heterogeneous environment where finding an analytic solution even to the linearized equations is generally not possible. The WKBJ method, one of the more robust asymptotic methods for investigating dissipative phenomena captured by linear equations, has recently been applied to the Turing model in such an environment.[2] It demonstrated the anticipated modifications to the results obtained in a homogeneous setting, such as localized patterns and local Turing conditions. Motivated by this research, we attempt a generalization of the scalar WKBJ theory to multicomponent systems. Our broader mathematical approach results in general approximation theorems for linear systems of ODEs. Note however, that the solutions are not represented using the usual (exponential) 1st-order WKBJ modes, but rather in terms of special functions with corresponding asymptotic behaviour, namely the Airy functions. For more clarity, we first discuss the cases of exponential and oscillatory behaviour separately before treating the general case. Unsurprisingly, it is the spectral properties of the system in question that allow for a distinction between these qualitatively different cases. These spectral properties, along with the properties of the Airy functions, are also largely relied upon in the proof of the approximation theorems. Here, our line of approach is via showing the asymptotic closeness of the solution to a linear combination of Airy functions using a suitable set of weight functions for measuring the error of the approximation. Subsequently, we demonstrate the key spectral properties utilized in the approximation theorems for a typical Turing system in the limit of large growth rates, hence suggesting that such an approximation is reasonable.

*Keywords:* WKBJ, singular perturbation, reaction-diffusion systems, Airy functions

**Abstrakt.** Snaha o čoraz komplexnejšiu a pokročilejšiu analýzu formovania vzoru v reakčno-difúzných (RD) systémoch si vyžaduje využívanie rozširujúceho sa spektra matematických nástrojov a prístupov. Obzvlášť to platí v prípadoch, keď uvažujeme rozšírenia pôvodného modelu ako napríklad priestorovú heterogenitu či rastúcu oblasť. Jedným z týchto nástrojov skúmania najmä zložitejších modelov - napr. RD modelov v heterogénnom prostredí, kde je nájdenie analytického riešenia hoci len pre linearizované rovnice vo všeobecnosti prakticky nemožné - je aj asymptotická analýza. Práve na skúmanie takéhoto modelu bola v nedávnom

článku[2] použitá WKBJ metóda ako jedna z robustnejších asymptotických metód analýzy dissipatívnych javov popísaných lineárnymi rovnicami. Výsledkom tejto analýzy boli očakávané modifikácie v porovnaní s homogénnym prostredím ako napríklad lokalizované vzory či lokálne turingovské podmienky. Motivovaný týmto výskumom sa pokúsime o zovšeobecnenie skalárnej WKBJ teórie na viaczložkové systémy. Výsledkom nášho širšieho matematického prístupu sú všeobecné aproximačné teorémy pre lineárne systémy ODR. Riešenia však neaproximujeme zvyčajnými (exponenciálnymi) WKBJ módmi 1. rádu. Miesto toho používame špeciálne funkcie s príslušným asymptotickým správaním, totiž Airyho funkcie. Pre väčšiu prehľadnosť najskôr podávame zvlášť analýzu v prípade exponenciálneho a oscilačného správania systému, ktorú následne využijeme pri analýze všeobecného systému. Neprekvapivo sú to spektrálne vlastnosti systému, ktoré nám umožňujú rozlišovať medzi týmito kvalitatívne odlišnými prípadmi. Práve tieto spektrálne vlastnosti - spolu s vlastnosťami Airyho funkcií - sú tiež základom dôkazu oných aproximačných teorémov. V nich ukazujeme asymptotickú blízkosť presného riešenia s lineárnou kombináciou Airyho funkcií prostredníctvom odhadu chyby takejto aproximácie za pomoci vhodne zvolených váhových funkcií. Následne demonštrujeme, že práve tie spektrálne vlastnosti, na ktorých sú založené uvedené dôkazy, má aj typický turingovský systém v limite (neobmedzene) veľkých rastových koeficientov, čo opodstatňuje využitie týchto metód na jeho skúmanie.

*Kľúčové slová:* WKBJ, singulárne perturbácie, reakčno-difúzne systémy, Airyho funkcie

## Literatúra

- [1] V. Klika and J. Kováč. *WKBJ approximation for linearly coupled systems: asymptotics of reaction-diffusion systems* (2021). Manuscript submitted for publication.
- [2] A. Krause, V. Klika, T. Woolley, and E. Gaffney. *From one pattern into another: analysis of Turing patterns in heterogeneous domains via WKBJ*. *Journal of The Royal Society Interface* **17** (01 2020), 20190621.



# Superintegrability of Separable Systems with Magnetic Field: The Cylindrical Case\*

Ondřej Kubů

2nd year of PGS, email: `ondrej.kubu@fjfi.cvut.cz`

Department of Physics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Libor Šnobl, Department of Physics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

**Abstract.** In this paper, we continue our work on classification of superintegrable systems with magnetic fields.

We first present a general method simplifying the search for additional integrals of motion for three dimensional systems possessing at least one conserved canonical momentum in a suitable coordinates system. It reduces the problem either to consideration of lower dimensional systems or of particular constrained forms of the hypothetical integral. In particular, it is applicable to all separable systems in the Euclidean space since they possess at least one cyclic coordinates when magnetic field is present.

Next, we focus on systems which separate in the cylindrical coordinates. Using our method, we are able to classify all superintegrable systems of this kind under the assumption that all considered integrals are at most second order in the momenta. In addition to already known systems, several new minimally superintegrable systems are found and we show that no quadratically maximally superintegrable ones can exist. We also construct some examples of systems with higher order integrals.

*Keywords:* superintegrability, magnetic field, separability, classical mechanics, cylindrical coordinates

**Abstrakt.** V tomto článku pokračujeme v práci na klasifikaci superintegrabilních systémů s magnetickými poli.

Nejprve představujeme obecnou metodu zjednodušující hledání dalších integrálů pohybu pro trojrozměrné systémy, které mají alespoň jeden zachovávaný se kanonický moment hybnosti ve vhodné soustavě souřadnic. Tím se problém redukuje buď na úvahy o systémech nižších rozměrů, nebo na konkrétní omezené formy hypotetického integrálu. Zejména je použitelný pro všechny separabilní systémy v euklidovském prostoru, které mají v přítomnosti magnetického pole alespoň jednu cyklickou souřadnici.

Dále se zaměříme na systémy, které se separují ve cylindrických souřadnicích. Pomocí naší metody plně klasifikujeme superintegrabilní systémy tohoto druhu se všemi integrály nejvýše druhého řádu v hybnostech. Kromě již známých systémů nalézáme několik nových minimálně superintegrabilních systémů a ukazujeme, že žádné kvadraticky maximálně superintegrabilní systémy neexistují. Konstruujeme také několik systémů s integrály vyššího řádu.

*Klíčová slova:* superintegrabilita, separabilita, klasická mechanika, cylindrické souřadnice

---

\*This work has been supported by the Grant Agency of the Czech Technical University in Prague, grant No. SGS19/183/ OHK4/3T/14

**Full paper:** O. Kubû, A. Marchesiello, L. Šnobl. *Superintegrability of separable systems with magnetic field: the cylindrical case*. Accepted in Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical on 7 September 2021, DOI <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ac2476>

# A Numeration System for Fibonacci-like Wang Shifts\*

Jana Lepšová

2. ročník PGS, email: lepsojan@fjfi.cvut.cz

Katedra matematiky

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze

školitelé:

Ľubomíra Dvořáková, Katedra matematiky

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze

Sébastien Labbé, Laboratoire Bordelais de Recherche en Informatique

CNRS (UMR 5800), Université de Bordeaux, Bordeaux INP

**Abstract.** A theorem of Cobham (1972) states that a sequence  $u = (u_n)_{n \geq 0}$  is  $k$ -automatic with  $k \geq 2$  if and only if it is the image, under a coding, of a fixed point of a  $k$ -uniform morphism [2, Theorem 6.3.2]. This result was extended to non-uniform morphisms [6], see also [3, Theorem 3.4.1], by replacing the usual base- $k$  expansion of non-negative integers by an abstract numeration system and a regular language [5]. It was later extended to configurations  $x : \mathbb{N}^d \rightarrow \Sigma$  in dimension  $d \geq 1$  based on the notion of shape-symmetric morphic words [4], see also [3, Theorem 3.4.26] and [1, § 5].

In this article, we explore an extension of Cobham's result beyond the non-negative octant  $\mathbb{N}^d$  to include configurations  $x : \mathbb{Z}^d \rightarrow \Sigma$  defined on the whole lattice  $\mathbb{Z}^d$ . We concentrate on one example in dimension  $d = 2$ .

Motivated by the study of Fibonacci-like Wang shifts, we define a numeration system  $\mathcal{F}$  for  $\mathbb{Z}$  and  $\mathbb{Z}^2$  based on the binary alphabet  $\{0, 1\}$ . We introduce a set of 16 Wang tiles  $\mathcal{Z}$  which generates an aperiodic minimal self-similar Wang shift  $\Omega_{\mathcal{Z}}$ . Our main theorem states that there exists a valid Wang configuration  $x \in \Omega_{\mathcal{Z}}$  and a deterministic finite automaton with output  $\mathcal{A}$  which describes the Wang configuration  $x$  – taking as input the representation of a position  $(m, n) \in \mathbb{Z}^2$  in the numeration system  $\mathcal{F}$ , the automaton  $\mathcal{A}$  outputs a Wang tile at position  $(m, n) \in \mathbb{Z}^2$  in the configuration  $x \in \Omega_{\mathcal{Z}}$ .

*Keywords:* Wang shift, Cobham's theorem, Numeration system

**Abstrakt.** Cobhamův teorém (1972) říká, že nekonečné slovo  $u = (u_n)_{n \geq 0}$  je  $k$ -automatické pro  $k \geq 2$  tehdy a jen tehdy pokud je obrazem pevného bodu  $k$ -uniformního morfismu [2, Theorem 6.3.2]. Tento výsledek byl zobecněn pro jakýkoli morfismus [6], [3, Theorem 3.4.1], nahrazením rozvoje přirozených čísel v číselné soustavě s bází  $k$  abstraktním numeračním systémem a regulárním jazykem [5]. Později byl výsledek rozšířen na konfigurace  $x : \mathbb{N}^d \rightarrow \Sigma$  pro dimenzi  $d \geq 1$  s použitím pojmu shape-symetrických morfických slov [4], [3, Theorem 3.4.26], [1, § 5].

V tomto článku směřujeme ke zobecnění Cobhamova teorému pro konfigurace  $x : \mathbb{Z}^d \rightarrow \Sigma$  definované na celém  $\mathbb{Z}^d$ . Soustředíme se na jeden příklad pro  $d = 2$ .

---

\*This work was supported by the Agence Nationale de la Recherche through the project Codys (ANR-18-CE40-0007) and by the Grant Agency of the Czech Technical University in Prague, grant No. SGS20/183/OHK4/3T/14.

Definujeme numerační systém  $\mathcal{F}$  pro  $\mathbb{Z}$  a  $\mathbb{Z}^2$  na binární abecedě  $\{0, 1\}$ . Zavedeme množinu  $\mathcal{Z}$  16 Wangových dlaždic, která generuje aperiodickou minimální sobě-podobnou množinu (Wang shift)  $\Omega_{\mathcal{Z}}$ . Náš hlavní výsledek říká, že existuje validní Wangova konfigurace  $x \in \Omega_{\mathcal{Z}}$  a deterministický konečný automat s výstupem  $\mathcal{A}$ , který popisuje danou Wangovu konfiguraci  $x$  – pokud automat  $\mathcal{A}$  na vstupu obdrží reprezentaci pozice  $(m, n) \in \mathbb{Z}^2$  v numeračním systému  $\mathcal{F}$ , na výstupu dá Wangovu dlaždici na dané pozici  $(m, n) \in \mathbb{Z}^2$  v konfiguraci  $x \in \Omega_{\mathcal{Z}}$ .

*Klíčová slova:* Wangovo dláždění, Cobhamův teorém, Numerační systém

**Full paper:** Labbé S., Lepšová J. (2021) A Numeration System for Fibonacci-Like Wang Shifts. In: Lecroq T., Puzynina S. (eds) Combinatorics on Words. WORDS 2021. Lecture Notes in Computer Science, vol 12847. Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-030-85088-3\\_9](https://doi.org/10.1007/978-3-030-85088-3_9)

## Literatura

- [1] S. Akiyama and P. Arnoux, (eds.). *Substitution and tiling dynamics: introduction to self-inducing structures. CIRM Jean-Morlet Chair, Marseille, France, Fall 2017*, volume 2273. Cham: Springer, (2020).
- [2] J.-P. Allouche and J. Shallit. *Automatic sequences*. Cambridge University Press, Cambridge, (2003). Theory, applications, generalizations.
- [3] V. Berthé and M. Rigo, (eds.). *Combinatorics, automata, and number theory*, volume 135. Cambridge: Cambridge University Press, (2010).
- [4] E. Charlier, T. Kärki, and M. Rigo. *Multidimensional generalized automatic sequences and shape-symmetric morphic words*. *Discrete Math.* **310** (2010), 1238–1252.
- [5] P. B. A. Lecomte and M. Rigo. *Numeration systems on a regular language*. *Theory Comput. Syst.* **34** (2001), 27–44.
- [6] M. Rigo and A. Maes. *More on generalized automatic sequences*. *J. Autom. Lang. Comb.* **7** (2002), 351–376.

# Fast Projections onto the Probability Simplex with Linear Constraints

Václav Mácha

5. ročník PGS, email: machava2@fjfi.cvut.cz

Katedra matematiky

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze

školitelé:

Václav Šmídl, Oddělení adaptivních systémů

Ústav teorie informace a automatizace, AV ČR

Lukáš Adam, Katedra počítačů

Fakulta elektrotechnická, ČVUT v Praze

**Abstract.** In this work, we studied distributionally robust optimization. We showed that finding the worst case with respect to distribution can be equivalently rewritten to the form of the projection onto the probability simplex with additional linear inequality constraint. We considered  $l_1$ ,  $l_2$  and  $l_\infty$  norms as well as several  $\phi$ -divergence to measure the distance of distributions. Furthermore, we showed that the resulting optimization problems are equivalent to finding a root of real-valued functions. We proved that these functions possess nice properties such as monotonicity or convexity. Additionally, we designed optimization algorithms with guaranteed convergence and derived their theoretical complexity. Finally, we experimentally demonstrated that our algorithms have (almost) observed linear complexity.

*Keywords:* projection, probability simplex, distributionally robust optimization

**Abstrakt.** V této práci jsme studovali robustní optimalizaci vzhledem k distribuci. Ukázali jsme, že hledání nejhoršího případu vzhledem k distribuci lze ekvivalentně zapsat ve formě projekce na pravděpodobnostní simplex s dodatečným omezením ve tvaru lineární nerovnosti. Pro měření vzdáleností distribucí jsme uvažovali  $l_1$ ,  $l_2$  and  $l_\infty$  normy a také několik  $\phi$ -divergencí. Dále jsme ukázali, že vzniklé optimalizační problémy jsou ekvivalentní hledání kořene reálných funkcí. Dokázali jsme, že tyto reálné funkce mají hezké vlastnosti jako jsou monotónnost nebo konvexita. Navíc jsme navrhli optimalizační algoritmy s garantovanou konvergencí a odvodili jejich teoretickou komplexitu. Nakonec jsme experimentálně prokázali, že naše algoritmy mají (téměř) lineární pozorovanou složitost.

*Klíčová slova:* projekce, pravděpodobnostní simplex, robustní optimalizace vzhledem k distribuci

**Plná verze:** L. Adam, V. Mácha. *Projections onto the canonical simplex with additional linear inequalities.* Optimization Methods and Software (2020), 1–29.



# Minimal Surface Generating Flow for Space Curves of Non-vanishing Torsion

Jiří Minarčík

4th year of PGS, email: `jiri.minarcik@fjfi.cvut.cz`

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Michal Beneš, Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

**Abstract.** This article introduces new geometric flow for space curves with positive curvature and torsion. Curves evolving according to this motion law trace out a zero mean curvature surface. First, the geometry of surfaces defined as trajectories of moving curves is analyzed and the minimal surface generating flow is derived. Then, an upper bound for the area of the generated minimal surface and for the terminating time of the flow is provided.

*Keywords:* geometric flows, minimal surfaces, Plateau's problem

**Abstrakt.** Tento příspěvek popisuje geometrický tok prostorových křivek s kladnou křivostí a torzí, jehož trajektorií je plocha s nulovou střední křivostí. Nejprve popíšeme vlastnosti ploch vyřatých obecným pohybovým zákonem a poté odvodíme pohyb generující minimální plochy. Dále popíšeme horní odhad povrchu vzniklé plochy a maximálního času existence pohybu.

*Klíčová slova:* geometrický tok, minimální plochy, Plateauův problém

## References

- [1] J. Minarčík, M. Kimura, M. Beneš. *Comparing Motion of Curves and Hypersurfaces in  $\mathbb{R}^m$* . Discrete and Continuous Dynamical Systems Series B, 2019 (24), 4815–4826.
- [2] J. Minarčík, M. Beneš. *Long-term properties of curve shortening flow in  $\mathbb{R}^3$* . SIAM Journal on Mathematical Analysis, 2020(52), 1221–1231.
- [3] J. Minarčík, M. Beneš. *Minimal surface generating flow for space curves of non-vanishing torsion*. Preprint, 2021.





# Probabilistic Modelling Opinion Formation in Social Interactions\*

Peter Příbeli

3rd year of PGS, email: `pribeli@utia.cas.cz`

Department of Software Engineering

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Tatiana Valentine Guy, Department of Adaptive Systems

Institute of Information Theory and Automation, CAS

**Abstract.** The global adoption of social networks and technology in general indicates a change in the process of opinion formation. Social networks and digital media have created a powerful platform for information exchange. Thus a user's opinion can be solely formed based on information and opinions shared by information sources and/or other users (followers, friends, etc.) of the network. This created a possibility to purposefully influence users' opinions. Misinformation and fake-news are believed to thrive in echo chambers which are homogeneous groups of agents with very similar opinions. The spread of misinformation has an irrevocable effect on the political discourse. One of the pivotal problems therein is to model the formation and evolution of opinions within a network. This contribution reports the preliminary results on a developed simulation testbed for studying dynamics of opinion formation on an agent-centric basis.

*Keywords:* opinion formation, decision making, echo chambers

**Abstrakt.** Průběh formování názoru prošel v důsledku celosvětového přijetí sociálních sítí značnou změnou. Sociální síť přinesly efektivní metody na výměnu informace. Názor uživatele sociální sítě se někdy může formovat pouze na základě informací sdílených informačními zdroji a jinými uživateli sociální sítě. Tento fenomén umožnil účelově ovlivňovat názory uživatelů. Desinformace a *fake-news* se pravděpodobně především šíří v prostředích s jednoduchými skupinami agentů se značně zhodnými názory. Tento rozmach šíření desinformací má nevratný vliv na politické snažení. Jedním ze stežejních problémů této tematiky je modelování tvoření názoru a jeho vývoj na sociální síti v čase. Tento příspěvek referuje předběžné výsledky vývoje simulace formování názoru z pohledu jednotlivého agenta.

*Klíčová slova:* tvorba názoru, teorie rozhodování, komnata ozvěn

## 1 Introduction

Social networks and online media in general have had an irrevocable impact on opinion formation [4]. Nowadays, social networks facilitate a considerable part of human interaction and thus also greatly influence the opinion formation of its users. A soaring amount of misinformation and fake content can significantly influence a user's opinion and lead to opinion polarisation and cause erroneous decisions[2]. They provide a fertile ground for opinion polarisation where opinions are shifted towards the extremes. Particularly, *echo*

---

\*This work has been supported by the MŠMT project LTC18075.

*chambers*<sup>1</sup> play a significant role in this polarisation of opinions. In the past decades a lot of attention has been paid to modelling opinion dynamics in social networks as well as ways of its influence [1], [3], [5]. However so far, no satisfactory approach has been found. This contribution reports on a work in progress that aims to reliably and efficiently model opinion formation allowing further identification of echo chambers and their influence on the users.

## 2 Agent-centred approach to opinion formation

In the context of social nets **opinion formation** can be regarded as a mechanism how the agent combines different sources of information<sup>2</sup> to form opinion about a particular topic. Opinion formation depends on trust the agent assign to other agents as the influence of a trusted individual is much higher and his opinion has higher impact<sup>3</sup>. So the agent weights others' opinions by trust value associated with the source providing this opinion. In many cases topic can be characterised by a number of **features** representing specific details of the topic. For instance when considering buying a computer the user may consider values of CPU, RAM, screen size, weight, price, and many other factors. Each of the features may be rated by the user in the range from absolutely positive value (1) down to an absolutely negative (0) value. Note that sub-selection of features is fully determined by the user and it's goal, and indirectly reflects the user's DM preferences in he subsequent DM task (for instance which computer to buy).

Let us summarise the introduced notions. The user of a social network is modelled as an **agent** that carries out decisions. These agents hold **opinions** on **topics** and assign **trust** to other agents. A topic can be any entity, for instance an organisation, event, person, product/service, etc. characterised by the set of features selected by the agent.

Consider a topic  $\tau \in \mathcal{T}$  with  $m \in \mathbb{N}$  features. Let us assume that the agents attitude to each feature is expressed by a probability mass function on previously selected  $n \in \mathbb{N}$  discrete values. The assumption is not limiting as we can consider a sufficiently large range of values. For instance  $n = 5$  covers a quantification broadly used in sentiment analysis (strong positive, positive, neutral, negative, strong negative). Let the **opinion**  $\mathbf{O}^\tau \in \mathbb{R}^{m,n}$  on a topic  $\tau$  be represented by a real normalised matrix

$$\mathbf{O} = \begin{pmatrix} o_{1,1} & \cdots & o_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ o_{m,1} & \cdots & o_{m,n} \end{pmatrix}. \quad (1)$$

In (1) the  $i$ -th row  $o_{i,\bullet} = (o_{i,1}, \dots, o_{i,n})$  represents the agent's attitude towards the  $i$ -th feature, which is modelled as a discrete random variable whose probability mass function represented by the row  $o_{i,\bullet}$ . This is designed to be compatible with the way opinion

<sup>1</sup>Echo chambers are clusters of users where similar, extreme opinions are *echoed* among its members. An echo chamber can be viewed as an extreme manifestation of the confirmation bias where only similar opinions are reinforced between its members.

<sup>2</sup>It may include prior opinion of the agent; opinions of other agents in the neighbourhood (friends, followers, etc.); information provided by social media; information content; data/experience and possibly other sources.

<sup>3</sup>trust can be regarded as reliability or reputation of the information source

data are usually gathered. When one gathers postings of agents from a social network e.g. tweets from Twitter, it is possible to assign a sentiment value to the posting that represents the the (dis)agreement expressed in the posting towards a topic. Gathering several postings gives a set of sentiments from an agent towards a topic. This set then corresponds to a row of the opinion matrix  $\mathbf{O}$ .

### Example 1

Consider an illustrative example where an agent, *Alice*, aims to form an opinion on a specific **topic**, for instance a *Political party*. Her DM is to vote the party which reflects *Alice*'s priorities and needs in the best way. In order to do that and elaborate them while considering her own priorities, she gathers information from available information sources and other agents. **Information sources** are special types of agents which provide opinions on a larger scale, for instance mass media, blogs, etc. *Alice* considers a newspaper with relevant information on the *Political party* and updates her opinion on the *Political party* considering the opinion of the newspaper. *Alice* can also update her opinion based on the opinions of her peers. She may select agents whom she trusts and updates her opinion based on theirs. The party programmes in different aspects (*healthcare, education, social politics, taxes, childcare, ecology, pension,...*) form the whole set of features. *Alice* determines subset of features that reflects her DM priorities. For instance if *Alice* is a student will consider a subset of features like *healthcare, education, taxes* while a agent-senior will more likely select *healthcare, pension*. Thus an opinion of a voter (*Alice*) will then be formed based on a subset of selected features and values assigned to them.

## 2.1 Opinion formation algorithm

The proposed algorithm of the simulation progresses as follows. As a first steps, the topics are initialized. Then information sources are created with a chosen prior opinion configuration. Subsequently all agents are initialized with a chosen prior opinion. Additionally, each agent gets assigned its information sources.

After the initialization, the main iteration loop is started. Since all agents will learn from their neighbors, a k-nearest neighbors (kNN) tree of agents is recalculated. The euclidean metric in the opinion space is used to construct the nearest neighbor tree.

Then, each agent performs an update of its own opinion on all topics based on the opinions of both information sources, and of their neighbors inside a predefined kNN radius.

The learning from information sources is straight forward. The random assignment of a subset of information sources to agents at the initialization phase is intended to simulate the preferences of an agent. The opinions of all information sources assigned to an agent are hence considered and updated from. The update of opinion  $\mathbf{o}_{i,\bullet}^A$  of an agent *A* on a subtopic  $\tau_i$  is done by taking the row  $\mathbf{o}_{i,\bullet}$  of  $\mathbf{O}$ , normalizing it by

$$\mathbf{o}_{i,j}^{B,\text{NORM}} = \frac{\mathbf{o}_{i,j}^B}{\sum_k \mathbf{o}_{i,k}^B}, \quad (2)$$

the opinions are then updated as

$$\mathbf{o}_{i,\bullet}^A = \mathbf{o}_{i,\bullet}^A + \mathbf{o}_{i,\bullet}^{B,\text{NORM}} \quad (3)$$

The learning from the agents neighbors proceeds in a similar fashion. The neighbors in a given radius are queried for updates. The updating is done similarly with an additional factor of a *trust* vector which represents the value of the trust an agent holds towards a neighbor. The elements of the trust vector  $\mathbf{t}^{A,B} \in \mathbb{R}^{1,m}$  represent the weight with which agent *A* trusts agent *B* in each subtopic. In this example, the trust values are fixed, however they can also undergo learning.

The pseudocode of the algorithm is as follows.

---

**Algorithm 1:** Opinion dynamics simulation algorithm
 

---

```

Input: num_epochs
Input: kNN_radius
topics  $\leftarrow$  initialize topics;
information_sources  $\leftarrow$  initialize information sources;
agents  $\leftarrow$  initialize agents;
while  $n \leftarrow 0 < num\_epochs$  do
  update neighbors tree with kNN_radius;
  for agent in agents do
    /* Learn from information sources */
    inf_sources  $\leftarrow$  information sources of agent;
    trusts  $\leftarrow$  trusts of inf_sources;
    for (inf_source, trust) in (inf_sources, trusts) do
      for topic in topics do
        | agent.opinion [topic]  $\leftarrow$  update with inf_source and trust;
      end
    end

    /* Learn from neighbors */
    neighbors  $\leftarrow$  neighbors of agent;
    for neighbor in neighbors do
      for topic in topics do
        | agent.opinion [topic]  $\leftarrow$  update with neighbor.opinion [topic];
        | /*eq. (2), (3)*/
      end
    end
  end
  n  $\leftarrow$  n + 1;
end

```

---

## 2.2 Experiment setup

The experiment was set up in the following way (The values of the parameters are summarised in Table 1):

- Two topics are considered for the ease of visualisation. They are dubbed *Topic A* and *Topic B*.

- The number of features determining a topic was set to 1 for ease of visualisation. The opinion matrix (1) has thus only one row.
- Opinion formation is modelled in an agent-centric way, i.e. each user is an autonomous agent that can both observe other opinions and update own opinions. So a collective opinion of the agents is not modelled.
- The agent's attitude towards a topic is discretised into bins that correspond to counts of social media postings with incremental values of positive/negative sentiment.
- Two bins of sentiment discretisation were considered. This can be viewed as the count of positive and negative postings by the agent.
- The prior values of (1) were initiated randomly by choosing the counts ( $\mathbf{o}_{1,1}$  and  $\mathbf{o}_{1,2}$ ) uniformly randomly as integers between 1 and 10.
- The opinions of agents on *Topic A* and *Topic B* are visualised via coordinates of agent's position on 2D chart, see Figure 1 and 2. For instance the position (0;1) means that the agent is neutral towards *Topic A* and strongly positive on *Topic B*.
- The number of agents in the social network (num\_agents) was set to 100.
- Information sources are implemented as agents with fixed opinions. They are marked by red markers at the coordinates reflecting their fixed opinions  $(-0.9, -0.9)$ ,  $(0.9, -0.9)$ ,  $(0.9, 0.9)$  and  $(-0.9, 0.9)$ , see 1 and 2.
- Each agent chooses uniformly randomly a subset of the aforementioned information sources at initialisation.
- The neighbours of an agent are determined by searching the nearest neighbors within a radius in the topic space. The nearest neighbor radius has been set to 0.2.
- The weight of the neighbouring agents opinion is set to 0.4. This parameter represents the extend to which agents undergo influence from neighbouring agents. The higher this parameter, the stronger agents influence each other increase their tendency to cluster. For lower values, the prior opinion of an agent dominates.
- The updating (governed by (3)) of an agents opinion is organised sequentially. First an agent updated its opinion from its chosen information sources and then goes sequentially through its neighbors and updates its opinion.
- The number of epochs has been set to 100. In each epoch, the nearest neighbors of all agents are recalculated (by populating a  $k - d$  tree) and all agents learn from their information sources and their neighbors sequentially.

parameter	value
num_epochs	90
num_agents	100
num_inf_sources	4
num_topics	2
learn_neighbors	False
neighbors_weight	None
knn_radius	None
neighbors_weight	None

parameter	value
num_epochs	90
num_agents	100
num_inf_sources	4
num_topics	2
learn_neighbors	True
neighbors_weight	0.4
knn_radius	0.3
neighbors_weight	0.2

Table 1: **(Left)**: The experiment configuration without neighbors learning disabled. **(Right)**: The experiment configuration with neighbors learning enabled.

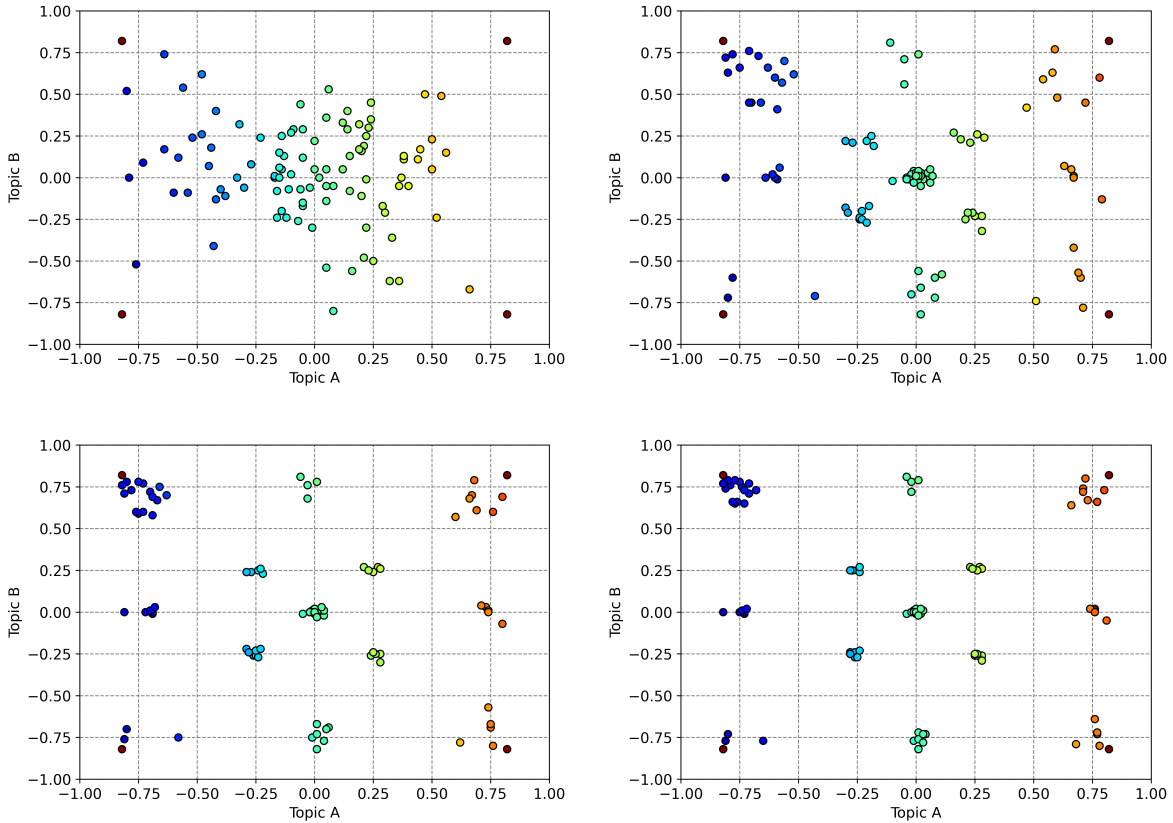


Figure 1: The evolution of opinions on two topics starting with uniformly random prior opinion distributions. Agents only learn from four information sources with fixed opinions  $(-0.9, -0.9)$ ,  $(0.9, -0.9)$ ,  $(0.9, 0.9)$  and  $(-0.9, 0.9)$ . The information sources do not change opinions and are marked by red markers. Agents do not respect opinions of their neighbors.

## 2.3 Results

The obtained results of the simulation are visualised in Figures 1 and 2. The figures represent a time evolution from top-left to bottom-right. The first experiment (Fig.

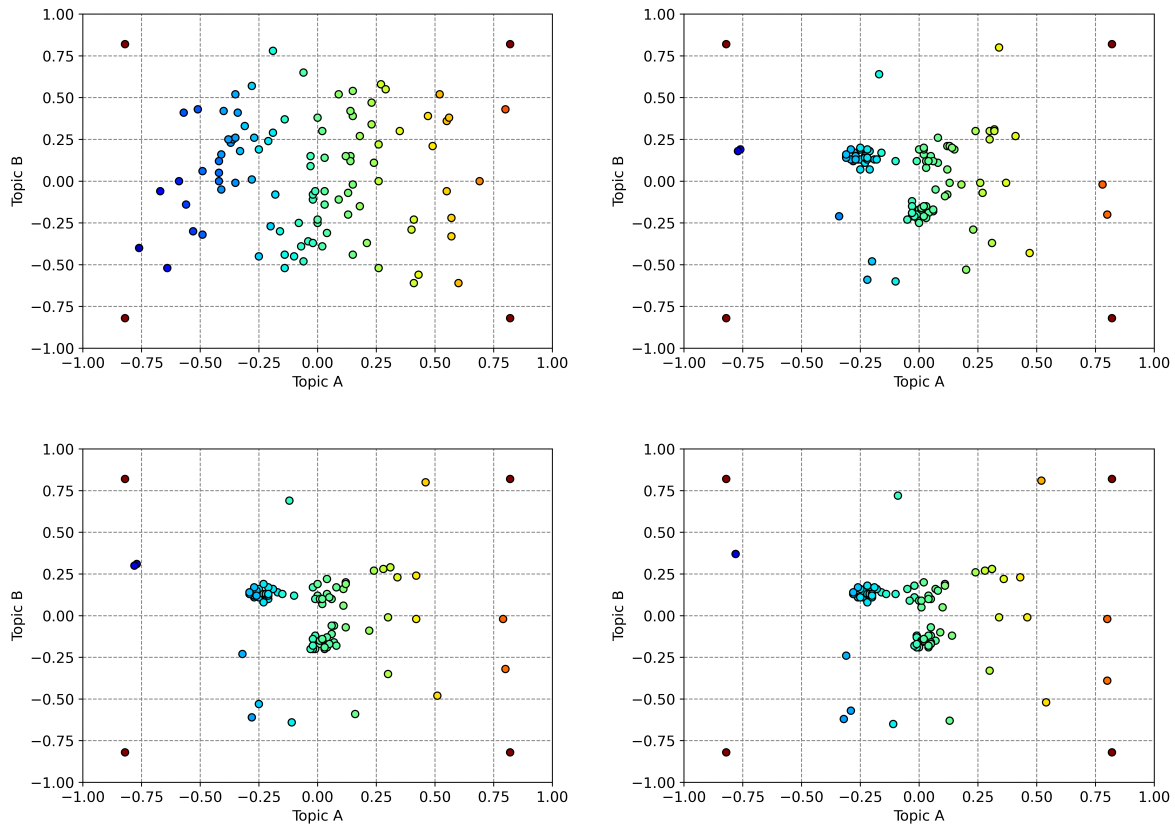


Figure 2: The evolution of opinions on two topics starting with uniformly random prior opinion distributions. Agents learn from four information sources with fixed opinions  $(-0.9, -0.9)$ ,  $(0.9, -0.9)$ ,  $(0.9, 0.9)$  and  $(-0.9, 0.9)$  as well as from their neighbors within a radius of 0.2 in the topic space. The information sources are marked by red markers. The learning from neighboring agents is taken into account with a weight of 0.4 (only 40% of the neighbouring agents opinion is transferred).

1) suggests no interaction between agents. As expected, the agents tend towards the centres of mass of their chosen subset of information sources. One can observe clusters forming around the information sources (agents that only chose that one information source) around the neutral opinion  $(0, 0)$  (agents that chose all four information sources). Clusters also form on the perimeter with the information sources as the vertices (agents with two information sources) and at an "inner" perimeter square (agents with three information sources). This configuration might be viewed as an approximation of the *status quo* before the onset of social networks. Before social networks, the influencing of agents neighbouring the in the topic space was minimal as agents close in the topic space may not necessarily be close in the real world as well, thus the communication with clusters was suppressed.

The second experimental setup (Fig. 2) reflected the case with an influence between agents with a proximity in topic space. This is ought to reproduce the effects of the introduction of social networks as they gave the ability to each agent to generate a representation of its opinion and share it with other agents. In this scenario, the agents

tend to form clusters at seemingly random points in the opinion space. One can also observe an increased number of outliers that do not belong to a cluster and usually have more polarised opinions. This is expected as if an agent is not "caught" by a forming cluster early on after the initialisation, the learning from information sources takes over and the agents opinion gets drifted closer to the information source.

### 3 Conclusion

The opinion formation dynamics is of great interest in the contemporary evolution of social networks and digital technologies. This contribution explores a novel simulation approach to opinion dynamics modelling. The dynamics is modelled from an agent-centric point of view where each user of a social network is an agent that modifies its opinion independently. The simulation scenario involved special agents (information sources) that did not modify their opinions and are rather intended to simulate large-scale disseminators of information e.g. newspaper outlets. A Monte Carlo simulation of two configurations was carried out.

First the interaction between agents was turned off. Agents could only modify their opinions based on the opinions of a number of information sources. It became clear that in this simulation scenario, the agents gravitate towards the centres of mass of the convex span of the information sources as seen in Fig 1. This was intended to mimic the dynamics before the widespread adoption of social networks as agents did not possess the ability to communicate their opinions to other agents.

The second scenario involved the interaction between agents. In each epoch, agents first learned from information sources and then from agents in their vicinity. The behaviour of this system lead to the formation of clusters at seemingly random locations in the opinion space. It also exhibited significantly more outliers that were usually more extreme in their opinions. This is due to the fact that these outliers are predominantly influenced by information sources which are placed at relatively extreme opinions.

A future study may include

- Enhance the trivial formulation (2), (3) with a more sophisticated formula based on the proximity of opinions.
- Respect the trust (and learn it) towards other agents base od past experience.
- Respect not only opinions but also reflect upon observed data, that will help o make opinion formation ore realistic and connected to the subsequent DM.

### References

- [1] F. Baumann, P. Lorenz-Spreen, I. Sokolov, and M. Starnini. *Modeling echo chambers and polarization dynamics in social networks*. Physical Review Letters (01 2020).
- [2] B. Collins, D. T. Hoang, N. T. Nguyen, and D. Hwang. *Trends in combating fake news on social media – a survey*. Journal of Information and Telecommunication **5** (2021), 247–266



- [3] W. Cota, S. C. Ferreira, R. Pastor-Satorras, and M. Starnini. *Quantifying echo chamber effects in information spreading over political communication networks*. EPJ Data Science **8** (2019), 35.
- [4] W. Quattrociocchi, G. Caldarelli, and A. Scala. *Opinion dynamics on interacting networks: media competition and social influence*. Scientific Reports **4** (2014), 4938.
- [5] R. Ureña, G. Kou, Y. Dong, F. Chiclana, and E. Herrera-Viedma. *A review on trust propagation and opinion dynamics in social networks and group decision making frameworks*. Information Sciences **478** (2019), 461–475.



# Dynamic Mixture Ratio Model\*

Marko Ruman

4th year of PGS, email: [ruman@utia.cas.cz](mailto:ruman@utia.cas.cz)

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisors:

Tatiana Valentine Guy, Department of Adaptive Systems

Institute of Information Theory and Automation, CAS

Miroslav Kárný, Department of Adaptive Systems

Institute of Information Theory and Automation, CAS

**Abstract.** Any knowledge extraction from data sets implicitly or explicitly relies on hypothesis about relations between data records. The inspected black-box methodology uses universally approximating mapping describing a wide class of relations. The knowledge incompleteness, the ever present uncertainty and the ultimate use in a subsequent decision making (DM) single out probabilistic models as adequate. Among them, the use of finite mixtures with components in the exponential family (EF) dominate. Their dominance stems from their flexibility, cluster interpretability and the availability of a range sophisticated algorithms suitable for high-dimensional data streams. They are even used in dynamic situations with mutually dependent data records. The dependence is modelled by employing regression and auto-regression components. However, with a few specialised exceptions, these dynamic models assume data-independent weights of mixture components. Their use is illogical as it assumes independent (memoryless) transitions between dynamic mixture components. The restricted nature of such mixtures follows from the fact that the set of finite probabilistic mixtures is not closed with respect to the conditioning, which is the key learning operation. The paper overcomes this restriction by using ratios of finite mixtures as dynamic parametric models. It motivates them, elaborates their approximate Bayesian stream learning. The paper reveals their application potential stemming predominantly from their inherent ability to process unbalanced data sets. This is vital when a the portion of interesting data, reflecting for instance failures or attacks, is small.

*Keywords:* Dynamic systems, Bayesian learning, mixture models, mixture ratio

**Abstrakt.** Jakákoli extrakce znalostí z dat implicitně nebo explicitně závisí na hypotéze o vztazích mezi datovými záznamy. Navržená metodologie používá univerzálně aproximující zobrazení popisující širokou třídu vztahů. Neúplnost znalostí, stále přítomná nejistota a konečné použití v následném rozhodování vynucuje použití pravděpodobnostních modelů. Jedním z používaných modelů jsou konečné směsi se složkami z exponenciální rodiny. Jejich výhody pramení z jejich flexibility, klastrové interpretovatelnosti a dostupnosti řady sofistikovaných algoritmů vhodných pro vysoce dimenzionální data. Používají se dokonce v dynamických situacích se vzájemně závislými datovými záznamy. Závislost je modelována pomocí regresních a autoregresních komponent. Až na několik specializovaných výjimek však tyto dynamické modely předpokládají váhy komponent nezávislé na datech. Jejich použití je nelogické, protože předpokládá nezávislé přechody mezi komponentami dynamické směsi. Omezenost takových směsí plyne

---

\*The research was supported by the research project MŠMT ČR LTC18075 and CA1622.

ze skutečnosti, že množina konečných pravděpodobnostních směsí není uzavřena s ohledem na podmínění, což je klíčová operace učení. Tato práce toto omezení překonává použitím poměrů konečných směsí jako dynamických parametrických modelů. Motivuje je a rozpracovává jejich přibližné bayesovské učení. Příspěvek odhaluje jejich aplikační potenciál pramenící převážně z jejich vlastní schopnosti zpracovávat nevyvážené datové sady.

*Klíčová slova:* dynamické systémy, Bayesovské učení, směšové modely, podílové směsy

## References

- [1] Kárný, M, Ruman, M. *Mixture ratio modeling of dynamic systems*. Int J Adapt Control Signal Process. 2021; 35: 660– 675. <https://doi.org/10.1002/acs.3219>

# Conserved Quantities, Exceptional Points, and Antilinear Symmetries in Non-Hermitian Systems

František Růžička

6th year of PGS, email: fruzicka@gmail.com

Department of Physics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Miloslav Znojil, Department of Theoretical Physics

Nuclear Physics Institute, CAS

**Abstrakt.** Otevřené systémy (popisované nehermitovskými Hamiltoniány) se během posledních dvou dekad staly předmětem intenzivního výzkumu. Mezi tyto systémy patří jak klasické systémy s vyváženým poměrem přírůstku a ztráty energie, semiklasické systémy pro vybrané hodnoty ztrát energie, a také minimální kvantové systémy. Výzkum těchto systémů se v tuto chvíli zaměřuje zejména na široké spektrum nových efektů, které poskytují.

V tomto článku zodpovíme následující otázky: existují pro tyto otevřené systémy nějaké netriviální zachovávající se veličiny? Pokud ano, jaké jsou jejich důsledky? Použitím jednak spektrálního rozkladu a jednak explicitních rekurzivních formulí dokážeme zkonstruovat úplný systém zachovávajících se veličin pro obecné  $PT$  symetrické systémy. Následně naše úvahy zobecníme na Hamiltoniány s jinými antilineárními symetriemi, a vyšetříme fyzikální důsledky zkonstruovaných zachovávajících se veličin. Naše výsledky také ilustrujeme pomocí několika fyzikálně relevantních příkladů.

*Klíčová slova:* zachovávající se veličiny,  $PT$  symetrie, nehermitovské Hamiltoniány

**Abstract.** Over the past two decades, open systems that are described by a non-Hermitian Hamiltonian have become a subject of intense research. These systems encompass classical wave systems with balanced gain and loss, semiclassical models with mode selective losses, and minimal quantum systems, and the meteoric research on them has mainly focused on the wide range of novel functionalities they demonstrate.

Here, we address the following questions: Does anything remain constant in the dynamics of such open systems? What are the consequences of such conserved quantities? Through spectral-decomposition method and explicit, recursive procedure, we obtain all conserved observables for general  $PT$ -symmetric systems. We then generalize the analysis to Hamiltonians with other antilinear symmetries, and discuss the consequences of conservation laws for open systems. We illustrate our findings with several physically motivated examples.

*Keywords:* conserved quantities,  $PT$  symmetry, non-hermitian Hamiltonians

**Full paper:** Conserved quantities, exceptional points, and antilinear symmetries in non-Hermitian systems (2021), Frantisek Ruzicka, Kaustubh S. Agarwal and Yogesh N. Joglekar, J. Phys. Conf. Series, accepted.



# Periodicity of Multidimensional Continued Fractions and Matrices of Linear Transformation\*

Hanka Řada

4th year of PGS, email: [hanka.rada@gmail.com](mailto:hanka.rada@gmail.com)

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Štěpán Starosta, Department of Applied Mathematics

Faculty of Information Technology, CTU in Prague

**Abstract.** In this work we present a new approach to the problem of periodicity of multidimensional continued fractions. We study the properties of matrices of linear transformations and we use these matrices for the description of the matrix of repetend of a multidimensional continued fraction expansion.

Using this theory, we prove that there exist some vectors that can not have a purely periodic expansion in any well-defined multidimensional continued fraction algorithm.

*Keywords:* multidimensional continued fractions, periodicity, matrices of linear transformation

**Abstrakt.** Prezентujeme nový přístup k řešení otázky periodičnosti vícerozměrných řetězových zlomků. Zabýváme se vlastnostmi matic lineární transformace v určité bázi a ukazujeme, jak lze tyto matice použít pro popis matic repetendu vícerozměrných řetězových zlomků.

Pomocí těchto výsledků ukazujeme, že existují vektory, které nemohou mít čistě periodický rozvoj v žádném dobře definovaném algoritmu vícerozměrných řetězových zlomků.

*Klíčová slova:* vícerozměrné řetězové zlomky, periodičita, matice lineárních transformací

## 1 Introduction

In 1839 [4] Hermite asked Jacobi if there is an algorithm that would detect the algebraic degree of any algebraic number (for definitions of these terms see Preliminaries). For the rational numbers (numbers of degree 1) is such an algorithm the decimal expansion of a number. In the case of quadratic numbers (the numbers of degree 2) is such a system also well-known. Namely, it is the regular continued fraction representation. However, we still do not have a satisfactory answer for numbers of degree three and higher.

In order to solve this question, there were introduced many multidimensional continued fraction (or MCF for short) algorithms. We will focus only on the vectorial algorithms. That are the algorithms that can be written as a matrix multiplication. For more information about the other type of MCF algorithms, the geometric algorithms, see [5].

The first and the most often studied MCF algorithm is the Jacobi-Perron algorithm, introduced by Jacobi (1868, [3]) and later generalised by Perron (1935, [7]). Other

---

\*The work was supported by the Grant Agency of the Czech Technical University in Prague, grant No. SGS20/183/OHK4/3T/14.

well-known algorithms are Poincaré algorithm (1884, [8]), Brun algorithm (1920, [2]), Selmer algorithm (1961, [11]) and Fully subtractive algorithm (1995, [9]). There exist also many modifications of this algorithms, for example the Algebraic Jacobi-Perron algorithm (AJPA) by Tamura and Yasutomi (2009 [12]). For a detail description of the well-know MCF algorithms and their properties see the books [1] and [10]. A good overview of these MCF algorithms is also in [6].

In this text we want to present another approach to this problem. We will study mainly the matrix properties of the MCF algorithms. In the third section of this text, we study the properties of matrices of linear transformation. In Theorem 7 we show that there is a mapping  $\mathcal{Q}$  using which we can determine the elements of matrix of multiplication by some number, only with the knowledge of the elements of some row of this matrix.

In the next section, we introduce the main theorem of this text, Theorem 13, which says that the matrices of repetition of a MCF expansion are equal to matrices of some linear transformation. Using these two main results, we show that there exist some vectors that can not have a purely periodic expansion in any weakly convergent MCF algorithm (Theorem 15).

We want to address a broad spectrum of readers and therefore we introduce the whole problematic using a simple example.

## 2 Preliminaries

A number  $x \in \mathbb{C}$  is *algebraic* (over  $\mathbb{Q}$ ) if it is a root of some polynomial  $f \in \mathbb{Q}[x]$ . The set of algebraic numbers (over  $\mathbb{Q}$ ) is denoted by  $\mathbb{A}$ . Algebraic numbers of degree two are called *quadratic* and algebraic numbers of degree three are called *cubic* (they are roots of *quadratic* respectively *cubic* polynomial with rational coefficients).

Let  $\alpha \in \mathbb{A}$ . The *number field*  $\mathbb{Q}(\alpha)$  is defined by

$$\mathbb{Q}(\alpha) := \bigcap \{T \mid T \text{ is a subfield of } \mathbb{C}, \alpha \in T\}.$$

The *degree* of the number field  $\mathbb{Q}(\alpha)$  is the dimension of  $\mathbb{Q}(\alpha)$  as a vector space over  $\mathbb{Q}$ . If  $\alpha$  is an algebraic number of degree  $n$ , then

$$\mathbb{Q}(\alpha) = \{a_0 + a_1\alpha + \cdots + a_{n-1}\alpha^{n-1} \mid a_i \in \mathbb{Q}\}.$$

A number  $\beta \in \mathbb{C}$  is called *an algebraic integer* if there is a monic polynomial  $f \in \mathbb{Z}[x]$  such that  $f(\beta) = 0$ . The set of all algebraic integers is denoted by  $\mathbb{B}$ . Let  $K$  be a number field. Then *the ring of integers* of the number field  $K$  is the set  $\mathcal{O}_K := K \cap \mathbb{B}$ .

A *unit* in a ring  $R$  with identity  $1_R$  is an element  $u$  of  $R$  for which there exists an element  $v \in R$  such that  $uv = vu = 1_R$ . The units of a ring  $R$  form a group under multiplications, we call it the *group of units*  $U(R)$  of  $R$ .

We will also need some notation from the combinatorics on words.

An *alphabet*  $\mathcal{A}$  is a set of symbols, called *letters*. A sequence of letters is called a *word*. The unique sequence having zero elements is *the empty word* and it is denoted by  $\varepsilon$ . The number of elements of a finite word  $w$  is called *its length* and it is denoted by  $|w|$ . If  $v, w$  are two words, then  $vw$  denotes the concatenation of words  $v$  and  $w$ . The word  $v$  is a



factor of  $w$  if there exists words  $s, t$  such that  $w = svt$ . Moreover, if  $s = \varepsilon$ , then  $v$  is a prefix of  $w$  and if  $t = \varepsilon$ , then  $v$  is a suffix of  $w$ .

A word  $w$  is (eventually) periodic if there exists a finite word  $u$  and a word  $v$  such that  $w = uv^\omega$  where  $\omega$  denotes the infinite concatenation  $vvv\dots$ . The word  $u$  is called a preperiodic part and the word  $v$  is called a repetend and they are not unique (for example, we can write also  $w = uv(vv)^\omega$ ). The number  $|u|$  is called the preperiod the number  $|v|$  is called the period. Moreover, if  $u = \varepsilon$ , then  $w$  is purely periodic.

Now we introduce the algorithm of multidimensional continued fractions.

### 2.1 Multidimensional continued fraction algorithm

Let  $n \geq 1$ ,  $I = \{I_1, I_2, \dots\}$  be a countable set of subsets of  $\mathbb{R}_+^{n+1}$  and  $\mathcal{A} = \{A_1, A_2, \dots\}$  be a set of invertible matrices from  $\mathbb{R}^{n+1, n+1}$  such that the cardinality of  $\mathcal{A}$  is the same as the cardinality of  $I$ .

**Algorithm 1** (Multidimensional continued fraction algorithm). Let  $\vec{v} \in \mathbb{R}_+^{n+1}$ .

Set  $\vec{v}^{(0)} := \vec{v}, i := 0$ .

Repeat:

Let  $j$  be some index such that  $\vec{v}^{(i)} \in I_j$ . If there is no such  $j$ , the algorithm stops. Otherwise set

$$\vec{v}^{(i+1)} := A_j^{-1}\vec{v}^{(i)}$$

and  $A^{(i)} := A_j$ . Set  $i := i + 1$ .

**Definition 2.** The sequence  $(A^{(i)})_{i=0}^\infty$  from Algorithm 1 is called an  $(I, \mathcal{A})$  n-dimensional continued fraction expansion of the vector  $\vec{v}$ . The product  $\prod_{i=0}^\infty A^{(i)}$  is the matrix of the  $(I, \mathcal{A})$  n-dimensional continued fraction expansion of the vector  $\vec{v}$ .

In what follows, when we mention a MCF algorithm, we mean a MCF algorithm for some given  $(I, \mathcal{A})$  and  $n$ .

**Definition 3.** Let  $(M^{(s)})_{s=0}^{+\infty}$  be a sequence of matrices such that there exists  $P$  such that  $M^{(P)}$  is positive. We say it weakly converges to  $\vec{v}$  with respect to  $k$ -th row and  $j$ -th column if the sequence

$$\left( \frac{M_{i,j}^{(s)}}{M_{k,j}^{(s)}} \right)_{s=P}^{+\infty}$$

converges to  $\frac{\vec{v}_i}{\vec{v}_k}$  for all  $i$ .

The  $(I, \mathcal{A})$  n-dimensional MCF algorithm is weakly convergent if for every vector  $\vec{v} = \begin{pmatrix} v_n \\ \vdots \\ v_1 \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}_+^{n+1}$ , whose expansion is  $A^{(0)}A^{(1)}\dots$  with  $M^{(s)} = A^{(0)}A^{(1)}\dots A^{(s)}$ , the sequence  $M^{(s)}$  weakly converges to  $\vec{v}$  with respect to the first row and  $j$ -th column for every  $j$ .

By a *well-defined* MCF algorithm we will understand a weakly convergent algorithm for which  $\mathcal{A} \subset \mathbb{Q}_{0,+}^{n+1,n+1}$ . Such algorithms are for example the JP algorithm and the Brun algorithm.

Now we introduce the basic theorem about the periodicity of MCFs.

**Theorem 4** ([1], Theorem 3.1. ). Let  $\vec{v} = \begin{pmatrix} v_n \\ \vdots \\ v_1 \\ v_0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}_+^{n+1}$ ,  $\vec{v} = NM^\omega$  in a given MCF

algorithm,  $N$  be a matrix of the preperiodic part and  $M$  a matrix of a repetend of  $\vec{v}$ . Moreover, let  $N^{-1}\vec{v} = \vec{w} \in \mathbb{R}_+^{n+1}$ . We have

$$\vec{w} = \lambda M\vec{w},$$

where  $\lambda \in \mathbb{R}$  and:

- $\lambda$  is an algebraic unit of degree at most  $n + 1$ .
- If the degree of  $\lambda$  equals  $n + 1$ , then the numbers  $\frac{v_0}{v_n}, \dots, \frac{v_n}{v_n}$  constitute a basis of the number field  $\mathbb{Q}(\lambda)$ .

The proof of this theorem is based on the fact that  $\vec{w}$  is an eigenvector of  $M$  and  $\lambda$  is the corresponding eigenvalue.

We cannot omit the condition on the degree of  $\lambda$ , because if  $\deg(\lambda) \leq n$ , we can have  $\frac{v_j}{v_n} \notin \mathbb{Q}(\lambda)$ . For an example of such a vector and algorithm see Remark (1) in [1].

Now we can see that the Hermite's question, which is discussed in the introduction, can

be reformulated as: Is there a MCF algorithm for which every vector  $\vec{v} = \begin{pmatrix} v_n \\ \vdots \\ v_1 \\ 1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}_+^{n+1}$ ,

such that the numbers  $\frac{v_0}{v_n}, \dots, \frac{v_n}{v_n}$  constitute a basis of some number field, has an eventually periodic expansion? In what follows, we show a new approach to this problem. This approach is based on a theory which is described in the next section.

### 3 Matrices of linear transformation

In this section, we introduce the matrices  $T_\lambda^{\vec{v}}$  of multiplication by a number  $\lambda$  in a basis  $\vec{v}$ . Then we present the main theorem of this section. This theorem says that there is a mapping  $\mathcal{Q}_{\ell,\vec{v}}$  such that  $T_\lambda^{\vec{v}} = \mathcal{Q}_{\ell,\vec{v}}\left((T_\lambda^{\vec{v}})_{\ell,\bullet}\right)$ . At the end of this section, we show, how

to construct the mapping  $\mathcal{Q}_{1,\vec{v}}$  for arbitrary vector  $\vec{v} = \begin{pmatrix} y^n \\ \vdots \\ y \\ 1 \end{pmatrix}$ , where  $y$  is an algebraic

number of degree  $n$ , using the knowledge of its minimal polynomial. We do all of this using a simple example.

Example 5. Let

$$\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} y_1^2 \\ y_1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt[3]{4} \\ \sqrt[3]{2} \\ 1 \end{pmatrix} \text{ and } \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} y_2^2 \\ y_2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt[3]{4} \\ -\sqrt[3]{2} \\ 1 \end{pmatrix}.$$

The elements  $y_1$  and  $y_2$  are cubic numbers with minimal polynomials equal to

$$y_1^3 - 2 = 0 \text{ and } y_2^3 + 2 = 0.$$

Let  $\beta_0, \beta_1, \beta_2 \in \mathbb{Q}$  and  $\lambda_1 = \beta_0 + \beta_1 y_1 + \beta_2 y_1^2$ .

We start by computing the matrices  $T_{\lambda_1}^{\vec{v}_1}$  and  $T_{\lambda_2}^{\vec{v}_2}$  of multiplication by a number  $\lambda_1$  in the basis  $\vec{v}_1$  and by a number  $\lambda_2$  in the basis  $\vec{v}_2$ . Let  $u = a + by_1 + cy_1^2$ . We have

$$\lambda_1 u = \beta_0 a + \beta_0 b y_1 + \beta_0 c y_1^2 + \beta_1 a y_1 + \beta_1 b y_1^2 + 2\beta_1 c + \beta_2 a y_1^2 + 2\beta_2 b + 2\beta_2 c y_1.$$

Using this equation, we get

$$T_{\lambda_1}^{\vec{v}_1} = \begin{pmatrix} \beta_0 & \beta_1 & \beta_2 \\ 2\beta_2 & \beta_0 & \beta_1 \\ 2\beta_1 & 2\beta_2 & \beta_0 \end{pmatrix}.$$

Remark 6. We study the properties of the matrices of multiplication by an element  $\lambda$  because we use them for description of the matrices of repetends of multidimensional continued fractions. However, in this concept, we use always the transposition of these matrices. Because of that, we use the transpositions also in the rest of this section. We hope that this will help the reader to understand the main part of this work, although it can look a little unnaturally at this point.

This means that we have

$$(T_{\lambda_1}^{\vec{v}_1})^T = \begin{pmatrix} \beta_0 & 2\beta_2 & 2\beta_1 \\ \beta_1 & \beta_0 & 2\beta_2 \\ \beta_2 & \beta_1 & \beta_0 \end{pmatrix}.$$

We can easily reparametrise the elements of  $(T_{\lambda_1}^{\vec{v}_1})^T$  using the elements of its first, second or third column instead of the numbers  $\beta_0, \beta_1, \beta_2$ . We get

$$(T_{\lambda_1}^{\vec{v}_1})^T = \begin{pmatrix} x_0 & 2x_2 & 2x_1 \\ x_1 & x_0 & 2x_2 \\ x_2 & x_1 & x_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z_1 & z_0 & 2z_2 \\ z_2 & z_1 & z_0 \\ \frac{z_0}{2} & z_2 & z_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} w_2 & w_1 & w_0 \\ \frac{w_0}{2} & w_2 & w_1 \\ \frac{w_1}{2} & \frac{w_0}{2} & w_2 \end{pmatrix}.$$

Analogously, we get

$$(T_{\lambda_2}^{\vec{v}_2})^T = \begin{pmatrix} \hat{x}_0 & -2\hat{x}_2 & -2\hat{x}_1 \\ \hat{x}_1 & \hat{x}_0 & -2\hat{x}_2 \\ \hat{x}_2 & \hat{x}_1 & \hat{x}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{z}_1 & \hat{z}_0 & -2\hat{z}_2 \\ \hat{z}_2 & \hat{z}_1 & \hat{z}_0 \\ -\frac{\hat{z}_0}{2} & \hat{z}_2 & \hat{z}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{w}_2 & \hat{w}_1 & \hat{w}_0 \\ -\frac{\hat{w}_0}{2} & \hat{w}_2 & \hat{w}_1 \\ -\frac{\hat{w}_1}{2} & -\frac{\hat{w}_0}{2} & \hat{w}_2 \end{pmatrix}.$$

The following theorem shows that we can do this also in general.

**Theorem 7.** Let  $\vec{v} = \begin{pmatrix} v_n \\ \vdots \\ v_1 \end{pmatrix}$  be a basis (of a finite field extension of order  $n$ ) and  $\lambda_s \in \mathbb{Q}(v_1, \dots, v_n)$ . There exists a mapping  $\mathcal{Q}_{\ell, \vec{v}} : \mathbb{R}^n \mapsto \mathbb{R}^{n,n}$  such that for all sequences  $(M^{(s)})_{s=0}^{+\infty}$  satisfying

1. for all  $s$ ,  $(M^{(s)})^T$  is equal to a matrix of multiplication by  $\lambda_s$  in the basis  $\vec{v}$  with  $\lambda_s \in \mathbb{Q}(v_1, \dots, v_n)$ ;
2.  $(M^{(s)})_{s=0}^{+\infty}$  weakly converges to  $\vec{v}$  with respect to  $k$ -th row and  $\ell$ -th column;

we have

$$M^{(s)} = \mathcal{Q}_{\ell, \vec{v}} \left( M_{\bullet, \ell}^{(s)} \right) \quad \text{for any } s.$$

*Proof.* Because  $\vec{v}$  is a basis of a finite field extension and  $\lambda_s \in \mathbb{Q}(v_1, \dots, v_n)$  for all  $s$ , we can find vectors  $\vec{\beta}^{(s)}$  such that  $\vec{\beta}^{(s)} = \begin{pmatrix} \beta_n^{(s)} \\ \vdots \\ \beta_1^{(s)} \end{pmatrix} \in \mathbb{Q}^n$  and  $\lambda_s = \beta_1^{(s)}v_1 + \dots + \beta_n^{(s)}v_n$ .

Moreover, we know that  $M^{(s)}$  are matrices of linear transformation  $t_{\lambda_s}$  in the basis  $\vec{v}$ . This means that the elements of  $M^{(s)}$  are linear combinations of the parameters  $\beta_1^{(s)}, \dots, \beta_n^{(s)}$ . This in other words means that for all  $i, j \in \{1, \dots, n\}$  we have  $(M^{(s)})_{i,j} = f_{i,j}^{\vec{v}}(\beta_1^{(s)}, \dots, \beta_n^{(s)})$ , where  $f_{i,j}^{\vec{v}}$  are functions linear in  $\beta_1^{(s)}, \dots, \beta_n^{(s)}$  (without the constant element). These functions are independent of the index  $(s)$  of the member of the sequence and also of the concrete choice of the sequence. They depend only on the vector  $\vec{v}$ .

Let  $F^{\vec{v}} \in \mathbb{Q}^{n,n}$  be a matrix such that  $F_{i,\bullet}^{\vec{v}} \vec{\beta}^{(s)} = f_{i,\ell}^{\vec{v}}(\beta_1^{(s)}, \dots, \beta_n^{(s)})$ . This means that  $F^{\vec{v}} \vec{\beta}^{(s)} = M_{\bullet, \ell}^{(s)}$ .

We show that  $F^{\vec{v}}$  is an invertible matrix. Suppose otherwise. In that case there would be a vector  $\vec{x} \in \mathbb{Q}^n$  such that  $\vec{x}F^{\vec{v}} = \vec{0}^T$ . We have

$$\vec{x}M_{\bullet, \ell}^{(s)} = \vec{x}F^{\vec{v}}\vec{\beta}^{(s)} = \vec{0}^T\vec{\beta}^{(s)} = 0$$

for all  $s$ . This means that there exists a linear combination of the elements of the  $\ell$ -th column of the matrix  $M^{(s)}$  which is for all  $s$  equal to zero.

On the other hand,  $(M^{(s)})_{s=0}^{+\infty}$  weakly converges to  $\vec{v}$  with respect to  $k$ -th row and  $\ell$ -th column and  $\vec{v}$  is a basis. This is a contradiction.

Therefore, we have  $\vec{\beta}^{(s)} = (F^{\vec{v}})^{-1}M_{\bullet, \ell}^{(s)}$  and this means that from the knowledge of  $M_{\bullet, \ell}^{(s)}$  and the functions  $f_{i,j}^{\vec{v}}$  we can determine the whole matrix  $M^{(s)}$ . This proves the claim. □

*Remark 8.* Let  $\alpha \in \mathbb{R}$ . If  $M$  is a matrix of a linear transformation  $T_\lambda$  in the basis  $\vec{v}$  then it is also a matrix of the same linear transformation in the basis  $\alpha\vec{v}$ . Moreover, from the definition of weak convergence follows that the limit is unique up to the multiple of the vector.

Therefore, we have

$$\mathcal{Q}_{\ell, \vec{v}} = \mathcal{Q}_{\ell, \alpha \vec{v}}$$

for all  $\alpha \in \mathbb{R}$ .

*Remark 9.* We do not use that the weak limit of the matrices  $M^{(s)}$  is  $\vec{v}$  in the proof of the last theorem. In fact, the proof would work also if the limit was an arbitrary basis. On the other hand, we will use this theorem only for matrices that are (or potentially could be) matrices of repetend of an expansion of  $\vec{v}$  in a weakly convergent MCF algorithm. Such matrices always converge weakly to  $\vec{v}$ . Therefore, for the sake of simplicity, we introduced the last theorem in this form.

Now, we introduce a notation to explicitly represent the action of the mapping  $\mathcal{Q}_{\ell, \vec{v}}$ .

*Notation 10.* Let  $\mathcal{Q}_{\ell, \vec{v}}$  be the function from Theorem 7. We associate it with the matrix  $Q_{\ell, \vec{v}} \in \mathbb{Q}^{n^2, n}$  defined by

$$\left( \mathcal{Q}_{\ell, \vec{v}} \left( M_{\bullet, \ell}^{(s)} \right) \right)_{i, j} = \left( Q_{\ell, \vec{v}} M_{\bullet, \ell}^{(s)} \right)_{(j-1)n+i}.$$

Now we continue with our example and modify it a little bit to fit exactly in Theorem 7.

*Example 11.* Let  $\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} \sqrt[3]{4} \\ \sqrt[3]{2} \\ 1 \end{pmatrix}$ . Then  $Q_{1, \vec{v}_1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ . This means (as we have

already seen) that

$$Q_{1, \vec{v}_1} \left( \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} x_0 & 2x_2 & 2x_1 \\ x_1 & x_0 & 2x_2 \\ x_2 & x_1 & x_0 \end{pmatrix}.$$

We take a matrix  $M = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$  and a sequence  $M^{(s)} = M^s$ . The matrix  $(M^{(s)})^T$

is a matrix of multiplication by  $\varepsilon$  in the basis  $\vec{v}$ , where  $\varepsilon$  is some unit in  $\mathbb{Q}(\sqrt[3]{2})$  and  $M^s$  converges weakly to  $\vec{v}$  with respect to third row and first column.

We have

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} = \mathcal{Q}_{1, \vec{v}} \left( \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} 1+0+0 & 0+0+2 & 0+2+0 \\ 0+1+0 & 1+0+0 & 0+0+2 \\ 0+0+1 & 0+1+0 & 1+0+0 \end{pmatrix},$$

$$M^2 = \begin{pmatrix} 5 & 6 & 8 \\ 4 & 5 & 6 \\ 3 & 4 & 5 \end{pmatrix} = \mathcal{Q}_{1, \vec{v}} \left( \begin{pmatrix} 5 \\ 4 \\ 3 \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} 5+0+0 & 0+0+2 \cdot 3 & 0+2 \cdot 4+0 \\ 0+4+0 & 1 \cdot 5+0+0 & 0+0+2 \cdot 3 \\ 0+0+3 & 0+1 \cdot 4+0 & 1 \cdot 5+0+0 \end{pmatrix},$$

$$M^3 = \begin{pmatrix} 19 & 24 & 30 \\ 15 & 19 & 24 \\ 12 & 15 & 19 \end{pmatrix} = Q_{1, \vec{v}} \left( \begin{pmatrix} 19 \\ 15 \\ 12 \end{pmatrix} \right) = \begin{pmatrix} 19+0+0 & 0+0+2 \cdot 12 & 0+2 \cdot 15+0 \\ 0+15+0 & 1 \cdot 19+0+0 & 0+0+2 \cdot 12 \\ 0+0+12 & 0+1 \cdot 15+0 & 1 \cdot 19+0+0 \end{pmatrix}$$

and so on.

If  $\vec{v}$  is a canonical basis, we can use the following simple instructions to construct the matrix  $Q_{1, \vec{v}}$ .

**Theorem 12.** *Let  $y$  be an algebraic number of degree  $n$  with minimal polynomial  $\sum_{\ell=0}^{n-1} \alpha_\ell y^\ell + y^n = 0$ , where  $\alpha_\ell \in \mathbb{Q}$ ,*

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} y^{n-1} \\ \vdots \\ y \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Let  $i, j, k \in \{1, \dots, n\}$ . We have

$$(Q_{1, \vec{v}})_{(i-1)n+j, k} = \begin{cases} 1 & \text{for } i \leq j, k = j - i + 1 \\ \alpha_{n-i+1+j-k} & \text{for } 2 \leq i \leq j, k \in \{j - i + 2, \dots, j\} \\ -\alpha_{n-i+1+j-k} & \text{for } j < i, j + 1 \leq k \leq n + j - i + 1 \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases}.$$

*Proof.* We will use Theorem 7. We compute the values of the functions  $f_{i,j}$  from the proof of this theorem and then we compute the concrete values of  $Q_{1, \vec{v}}$ .

Let  $\lambda = \sum_{j=0}^{n-1} \beta_j y^j$  for some  $\beta_j \in \mathbb{Z}$ . We put  $\beta_i = 0$  for all  $i < 0$ .

From the definition of the matrix  $T_\lambda^{\vec{v}}$  we get

$$(T_\lambda^{\vec{v}})_{i,j} = \beta_{-i+j} + \sum_{k=j}^{n-1} \beta_k \sum_{\ell=0}^{\min\{k-j, n-i\}} \alpha_{n-j-\ell} \sum_{\substack{p_1 \dots p_m \\ m \leq k-j-\ell \\ p_s \geq 1 \\ \sum_{s=1}^m p_s = k-j-\ell}} (-1)^{m+1} \alpha_{n-p_1} \dots \alpha_{n-p_m}.$$

Moreover, if we put  $x_j = (T_\lambda^{\vec{v}})_{1,j}$  and  $\alpha_j = 0$  for all  $j < 0$  we get

$$(T_\lambda^{\vec{v}})_{1,j} = x_j, \quad (T_\lambda^{\vec{v}})_{2,j} = x_{j-1} + x_j \alpha_{n-1}$$

for all  $j \in \{1, \dots, n\}$ ,

$$(T_\lambda^{\vec{v}})_{i,j} = x_{j-i+1} + x_{j-i+2} \alpha_{n-1} + \dots + x_j \alpha_{n-i+1}$$

for all  $i \in \{3, \dots, n\}, j \in \{1, \dots, n\}, i \leq j$  and

$$(T_\lambda^{\vec{v}})_{i,j} = \sum_{m=1}^{n-j} -x_{j+m} \alpha_{n-i-m+1}$$

for all  $i, j \in \{1, \dots, n\}, i > j$ .

Now it remains to realize that  $(Q_{1, \vec{v}})_{(i-1)n+j, k}$  is equal to the coefficient of  $x_k$  in the expression equal to  $(T_\lambda^{\vec{v}})_{i,j}$ . □

We can also use the last theorem the other way around and determine the coefficients  $\alpha_\ell$  of the minimal polynomial of  $y$  directly from the elements of the matrix  $Q_{1,\vec{v}}$ .

Now we show, how this is connected to the theory of multidimensional continued fractions.

### 4 Application in the theory of MCF

The following theorem shows that we can use the matrices of multiplication by some number to describe the matrices of repetend of a MCF expansion.

**Theorem 13.** Let  $\vec{v} = \begin{pmatrix} y_{n-1} \\ \vdots \\ y_1 \\ 1 \end{pmatrix}$  be a basis of  $\mathbb{Q}(y_1)$ , where  $y_1$  is an algebraic number of degree  $n$ . Moreover, let  $M$  be a matrix of repetend of a MCF expansion of  $\vec{v}$ . We have

$$M = (T_\varepsilon^{\vec{v}})^T,$$

where  $\varepsilon \in U(\mathbb{Z}[y_1, \dots, y_{n-1}])$  and  $T_\varepsilon^{\vec{v}}$  is a matrix of multiplication by  $\varepsilon$  in the basis  $\vec{v}$ .

*Proof.* By Theorem 4 we have

$$M\vec{v} = \varepsilon\vec{v}, \tag{1}$$

where  $\varepsilon$  is an algebraic unit. Moreover,  $M$  is an integer matrix and therefore  $\varepsilon \in U(\mathbb{Z}[y_1, \dots, y_{n-1}])$ .

By the definition of linear transformation  $t_\varepsilon$  we have

$$(T_\varepsilon^{\vec{v}})^T \vec{v} = \varepsilon\vec{v}.$$

We show that there exists only one matrix  $M$  for which (1) holds and this already implies that  $M = (T_\varepsilon^{\vec{v}})^T$ .

We know, that  $\mathbb{Q}(y_1, \dots, y_{n-1})$  is an algebraic number field of degree  $n$ ,  $\vec{v}$  is a basis of that field and  $\varepsilon \in \mathbb{Q}(y_1, \dots, y_{n-1})$ . Let  $\sigma_i$  for  $i \in \{1, \dots, n\}$  be the  $n$  distinct monomorphisms from  $\mathbb{Q}(y_1, \dots, y_{n-1})$  to  $\mathbb{C}$ .

Now let  $\vec{v}_i = \sigma_i(\vec{v})$  and  $\varepsilon_i = \sigma_i(\varepsilon)$ . We have

$$M\vec{v}_i = \varepsilon_i\vec{v}_i$$

for all  $i \in \{1, \dots, n\}$ .

Moreover, the elements of  $\vec{v}$  constitute a basis of  $\mathbb{Q}(y_1, \dots, y_{n-1})$  and therefore  $\vec{v}_i \neq \vec{v}_j$  for  $i \neq j$ . This gives us all the eigenvectors and eigenvalues of  $M$ .

Let, for a contradiction, suppose that there are two distinct matrices  $M_1, M_2$  for which (1) holds. We put  $L$  to be the Jordan normal form of  $M_1$ . We know, that  $M_1$  and  $M_2$  have the same eigenvalues and eigenvectors and therefore,  $L$  is also the Jordan normal form of  $M_2$ . This means that there exist invertible matrices  $P_1$  and  $P_2$  such that  $M_1 = P_1LP_1^{-1}$  and  $M_2 = P_2LP_2^{-1}$ .

Now we show that  $P_1 = P_2$ . We know that the eigenvalues of  $L$  are  $\varepsilon_i$  and the eigenvectors are  $\vec{w}_i$  where  $(\vec{w}_i)_j = 0$  for  $i \neq j$  and  $(\vec{w}_i)_i = 1$ . At the same time, the

equation (1) holds for  $M_1$  and  $M_2$  and therefore  $\vec{w}_i = P_1 \vec{v}_i = P_2 \vec{v}_i$ . This means that both  $P_1$  and  $P_2$  are unique and  $P_1 = P_2$  which is a contradiction.

This already means that  $M = (T_\varepsilon^{\vec{v}})^T$ .

□

Again, we use our example to illustrate the last theorem.

*Example 14.* The matrix  $M$  of repetend of the Brun algorithm of the vector  $\vec{v}_1$  is

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}^5.$$

The expansion has preperiod 1 and period 18 and it is equal to

$$T_{12}(T_{23}T_{31}^3T_{12}T_{21}^3T_{12}T_{23}^3T_{31}T_{13}T_{32}T_{21}T_{13}T_{32})^\omega,$$

where

$$\begin{aligned} T_{12} &= \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & T_{13} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & T_{21} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ T_{23} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & T_{31} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & T_{32} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Now we use the results of the previous section to prove that there are some vectors that can not have a purely periodic expansion in an arbitrary well-defined MCF algorithm.

**Theorem 15.** *Let  $y$  be an algebraic number of degree  $n$  with minimal polynomial equal to*

$$\sum_{j=0}^{n-1} \alpha_j y^j + y^n = 0,$$

where  $\alpha_j \in \mathbb{Q}$  and  $\alpha_0 > 0$ .

The vector  $\vec{v} = \begin{pmatrix} y^{n-1} \\ \vdots \\ y \\ 1 \end{pmatrix}$  **does not have a purely periodic expansion in any well-**

*defined  $(n-1)$ -dimensional MCF algorithm.*

*Proof.* We show that  $\{T_\varepsilon^{\vec{v}} | \varepsilon \in U(\mathbb{Z}(v_1, \dots, v_n))\} \cap \text{SL}(n, \mathbb{N}) = \text{Id}$ . Let  $\varepsilon$  be an arbitrary unit in  $U(\mathbb{Z}[y])$ . Using the notation from Theorem 12 we get that

$$(T_\varepsilon^{\vec{v}})_{1,j} = x_j,$$

for all  $j \in \{1, \dots, n\}$ , and

$$(T_\varepsilon^{\vec{v}})_{n,j} = -x_{j+1}\alpha_0,$$

for all  $j \in \{1, \dots, n-1\}$ .

This means that there does not exist an  $\varepsilon$  such that  $T_\varepsilon^{\vec{v}} \in \text{SL}(n, \mathbb{N})$  is not equal to identity. Therefore, there does not exist a matrix of repetend for the vector  $\vec{v}$  which means, that every well-defined MCF algorithm of  $\vec{v}$  is not purely periodic. □



An example of a vector from Theorem 15 is our vector  $\vec{v}_2$ .

*Example 16.* As we have already seen, we have

$$(T_{\lambda_2}^{\vec{v}_2})^T = \begin{pmatrix} \widehat{x}_0 & -2\widehat{x}_2 & -2\widehat{x}_1 \\ \widehat{x}_1 & \widehat{x}_0 & -2\widehat{x}_2 \\ \widehat{x}_2 & \widehat{x}_1 & \widehat{x}_0 \end{pmatrix}$$

for an arbitrary  $\lambda_2 \in \mathbb{Q}(y_2)$ . This holds especially for every  $\lambda_2 = \varepsilon \in U(\mathbb{Z}(v_1, \dots, v_n))$ .

We can easily see that  $(T_{\lambda_2}^{\vec{v}_2})^T \cap \text{SL}(3, \mathbb{N}) = \text{Id}$ . This means that the vector  $\vec{v}_2$  can not have a purely periodic expansion in any well-defined MCF algorithm.

*Remark 17.* In the sake for simplicity, we used this example. However, this example is somewhat problematic because one of the elements of the vector  $\vec{v}_2$  is negative. On the other hand, the theorem Theorem 15 gives us instructions how to find also the vector that have all elements positive and which can not have a purely periodic expansion.

## 5 Conclusion

In this work we showed a new approach of dealing with the problem of periodicity of multidimensional continued fractions. We studied the properties of matrices of multiplication by an element  $\lambda$  in a basis  $\vec{v}$ . In Theorem 7 we showed that the elements of such matrices are functions of the elements of the first row of these matrices.

This theorem can be used in the theory of MCFs because, as we have proven in Theorem 13, every matrix of repetend of an expansion in a well-defined MCF algorithm is equal to a matrix of multiplication by some unit.

Putting these two theorems together, we showed (Theorem 15) that there exist some vectors that can not have a purely periodic expansion in any well-defined MCF algorithm.

## References

- [1] A. J. Brentjes. *Multi-dimensional continued fraction algorithms*. MC Tracts (1981).
- [2] V. Brun. *En generalisation av Kjedebröken*. na, (1920).
- [3] E. Heine and C. Jacobi. *Allgemeine Theorie der kettenbruchähnlichen Algorithmen, in welchen jede Zahl aus drei vorhergehenden gebildet wird*. Journal für die reine und Angewandte Mathematik **69** (1868), 29–64.
- [4] C. Hermite. *Letter to CDJ Jacobi*. J. Reine Angew. Math **40** (1839), 286.
- [5] O. Karpenkov. *Geometry of continued fractions*, volume 26. Springer Science & Business Media, (2013).
- [6] S. Labbé. *3-dimensional continued fraction algorithms cheat sheets*. arXiv preprint arXiv:1511.08399 (2015).
- [7] O. Perron. *Ein Satz über Jacobi-Ketten zweiter Ordnung*. Annali della Scuola Normale Superiore di Pisa-Classe di Scienze **4** (1935), 133–138.

- 
- [8] H. Poincaré. *Sur une généralisation des fractions continues*. CR Acad. Sci. Paris. Ser **1** (1884), 1014–1016.
- [9] F. Schweiger. *Invariant measures for fully subtractive algorithms*. Anz. Österreich. Akad. Wiss. Math.-Natur. Kl **131** (1995), 25–30.
- [10] F. Schweiger. *Multidimensional continued fractions*. Oxford University Press on Demand, (2000).
- [11] E. S. Selmer. *Om flerdimensjonal kjedebrøk*. Nordisk Matematisk Tidsskrift (1961), 37–43.
- [12] J.-i. Tamura and S.-i. Yasutomi. *A new multidimensional continued fraction algorithm*. Mathematics of computation **78** (2009), 2209–2222.

# Quantum-Walk-Based State-Transfer Algorithms on the Complete $M$ -Partite Graph\*

Stanislav Skoupý

5th year of PGS, email: [Stanislav.Skoupý@fjfi.cvut.cz](mailto:Stanislav.Skoupý@fjfi.cvut.cz)

Department of Physics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Martin Štefaňák, Department of Physics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

**Abstract.** We investigate coined quantum walk search and state transfer algorithms, focusing on the complete  $M$ -partite graph with  $N$  vertices in each partition. First, it is shown that by adding a loop to each vertex the search algorithm finds the marked vertex with unit probability in the limit of a large graph. Next, we employ the evolution operator of the search with two marked vertices to perform a state transfer between the sender and the receiver. We show that when the sender and the receiver are in different partitions the algorithm succeeds with fidelity approaching unity for a large graph. However, when the sender and the receiver are in the same partition the fidelity does not reach exactly one. To amend this problem we propose a state transfer algorithm with an active switch, whose fidelity can be estimated based on the single vertex search alone.

*Keywords:* quantum walk, search algorithm, state transfer algorithm,  $M$ -partite graph

**Abstrakt.** Zkoumáme algoritmy pro vyhledávání a přenos stavu založených na kvantových procházkách s mincí, konkrétně jak fungují na kompletním  $M$ -partitním grafu s  $N$  vrcholy v každé části. Nejprve ukážeme, že v případě přidání smyček na každý vrchol, vyhledávací algoritmus najde označený vrchol s jednotkovou pravděpodobností v limitě velkého grafu. Dále využijeme evoluční operátor vyhledávání pro dva označené vrcholy k dosažení úplného přenosu stavu mezi odesílatelem a příjemcem. Ukážeme, že v případě, kdy odesílatel a příjemce jsou v různých částech grafu, algoritmus pro přenos stavu uspěje s pravděpodobností přenosu blížící se jedné pro velké grafy. Nicméně v případě, kdy odesílatel a příjemce jsou ve stejné části, pravděpodobnost přenosu nedosáhne přesně jedné. Abychom odstranili tento problém, zavedeme algoritmus pro přenos stavu s aktivním přepnutím, jehož úspěšnost může být odhadnuta již na základě výsledků pro vyhledávání jednoho vrcholu.

*Klíčová slova:* kvantová procházka, vyhledávací algoritmus, algoritmus pro přenos stavu,  $M$ -partitní graf

**Full paper:** S. Skoupý, M. Štefaňák. *Quantum-walk-based state-transfer algorithms on the complete  $M$ -partite graph*, Phys. Rev. A 103, 042222, (2021).

---

\*This work was supported from Student Grant Competition of Czech Technical University in Prague under Grant SGS19/186/OHK4/3T/14, from GAČR under Grant No. 17-00804S and project CAAS.



# Multi-Phase Compressible Compositional Simulations with Phase Equilibrium Computation in the *VTN* Specification\*

Tomáš Smejkal

5th year of PGS, email: `tomas.smejkal@fjfi.cvut.cz`

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Jiří Mikyška, Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

**Abstract.** The mathematical modeling of compositional flow in a porous medium is an important topic in chemical engineering and has many applications in the industry, e.g., CO<sub>2</sub> sequestration or enhanced oil recovery. The mathematical model has to include a transport equation for each component in the mixture and a thermodynamical model describing the local equilibrium behavior. Traditionally, the *PTN* approach (constant pressure, temperature, and moles) [4, 6] is used to determine the composition of equilibrium phases. No matter how widespread the *PTN*-specification is, the approach has some limitations [5, 7], e.g., the equilibrium state of the system is not always determined uniquely. Alternatively, the *VTN* approach (constant volume, temperature, and moles) [5, 3, 1] can be used to determine the equilibrium state. Since most equations of state are given explicitly in pressure, i.e.,  $p = p(T, V, N_1, \dots, N_n)$ , the *VTN*-approach has some benefits, e.g., the inversion of the equation of state does not have to be performed, and the equilibrium states are uniquely determined.

In this contribution, we present a new numerical solution of a multi-phase compressible Darcy's flow of a multi-component mixture in a porous medium. The mathematical model consists of mass conservation equation of each component, extended Darcy's law for each phase, and an appropriate set of the initial and boundary conditions. The phase split is computed using the phase equilibrium computation in the *VTN*-specification (known as *VTN*-flash).

The numerical solution is based on a novel iterative IMPEC scheme [2] that was originally developed for the single-phase compositional flow. In this contribution, we extend this method to multi-phase problems. We provide examples showing the performance of the numerical scheme.

*Keywords:* Compositional simulations, Multi-phase flow, Phase equilibrium computation, Mixed-hybrid finite element method, *VTN*-flash, *VTN*-stability, Iterative IMPEC, Darcy's flow.

**Abstrakt.** Matematické modelování kompozičního proudění v porézním prostředí je důležitým tématem v chemickém inženýrství a má mnoho aplikací v průmyslu, např. sekvestrace CO<sub>2</sub> nebo zdokonalená těžba ropy. Matematický model musí zahrnovat transportní rovnici pro každou složku směsi a termodynamický model popisující lokální rovnovážný stav. Ke stanovení rovnovážného stavu se tradičně používá specifikace *PTN* (konstantní tlak, teplota a látková

---

\*This work has been supported by the project Development and application of advanced methods for mathematical modeling of natural and industrial processes using high-performance computing, project no. SGS20/184/OHK4/3T/14 of the Student Grant Agency of the Czech Technical University in Prague, and the project Multiphase flow, transport, and structural changes related to water freezing and thawing in the subsurface, project no. 21-09093S of the Czech Science Foundation.

množství) [4, 6]. Bez ohledu na to jak rozšířená je specifikace  $PTN$ , má určitá omezení [5, 7], např. rovnovážný stav systému není vždy určen jednoznačně. Alternativně lze ke stanovení rovnovážného stavu použít specifikaci  $VTN$  (konstantní objem, teplota a látková množství) [5, 3, 1]. Jelikož je většina stavových rovnic explicitní v tlaku, tj.  $P = p(T, V, N_1, \dots, N_n)$ , má specifikace  $VTN$  určité výhody, např. inverze stavové rovnice není nutná a rovnovážné stavy jsou jednoznačně určeny.

V tomto příspěvku představíme numerické řešení vícefázového stlačitelného Darcyho proudění vícesložkové směsi v porézním prostředí. Matematický model se skládá z rovnice zachování hmoty každé složky, rozšířeného Darcyho zákona pro každou fázi a vhodné sady počátečních a okrajových podmínek. Rovnovážený stav se vypočítá pomocí výpočtu fázové rovnováhy ve specifikaci  $VTN$  (známé jako  $VTN$ -flash). Numerické řešení je založeno na novém iterativním IMPEC schématu [2], které bylo původně vyvinuto pro jednofázové proudění. V tomto příspěvku tuto metodu rozšíříme na vícefázové problémy. Výkon numerického schématu je demonstrován na příkladech různé složitosti.

*Klíčová slova:* Kompoziční simulace, Vícefázové proudění, Výpočet fázové rovnováhy, Smíšená hybridní metoda konečných prvků,  $VTN$ -flash, specifikace  $VTN$ , Iterativní IMPEC, Darcyho proudění.

**Full paper:** T. Smejkal and J. Mikyška. *Multi-phase compressible compositional simulations with phase equilibrium computation in the VTN specification*. In M. Paszynski, D. Kranzlmüller, V. V. Krzhizhanovskaya, J. J. Dongarra, and P. M. A. Sloot, editors, Computational Science – ICCS 2021, Cham. Springer International Publishing (2021), 159–172.

## References

- [1] M. Castier. *Helmholtz function-based global phase stability test and its link to the isothermal-isochoric flash problem*. Fluid Phase Equilibria **379** (2014), 104–111.
- [2] H. Chen, X. Fan, and S. Sun. *A fully mass-conservative iterative IMPEC method for multicomponent compressible flow in porous media*. Journal of Computational and Applied Mathematics **362** (2019), 1–21.
- [3] T. Jindrová and J. Mikyška. *General algorithm for multiphase equilibria calculation at given volume, temperature, and moles*. Fluid Phase Equilibria **393** (2015), 7–25.
- [4] M. L. Michelsen. *The isothermal flash problem, part 2. Phase-split computation*. Fluid Phase Equilibria **9** (1982), 21–40.
- [5] J. Mikyška and A. Firoozabadi. *Investigation of mixture stability at given volume, temperature, and moles*. Fluid Phase Equilibria **321** (2012), 1–9.
- [6] Z. Li and A. Firoozabadi. *General strategy for stability testing and phase-split calculation in two and three phases*. Society of Petroleum Engineers **17** (2012), 1096–1107.
- [7] O. Polívka and J. Mikyška. *Compositional modeling in porous media using constant volume flash and flux computation without the need for phase identification*. Journal of Computational Physics **272** (2014), 149–179.

# Left Ventricular Torsion Obtained Using Equilibrated Warping in Patients with Repaired Tetralogy of Fallot\*

Kateřina Škardová

3rd year of PGS, email: [katerina.skradova@fjfi.cvut.cz](mailto:katerina.skradova@fjfi.cvut.cz)

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisor: Tomáš Oberhuber, Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

**Abstract.** Patients after surgical repair of Tetralogy of Fallot (rTOF) may suffer a decrease in left ventricular (LV) function. The aim of our study is to evaluate a novel method of assessing LV torsion in patients with rTOF, as an early indicator of systolic LV dysfunction. Torsion, also known as twist, is a characteristic feature of the ventricular contraction. It is defined as the maximal difference in rotation between the LV apex and base and is expressed in degrees. In order to deal with the differences in LV dimensions between patients, the torsion can be divided by the distance between base and apex.

In this study, image intensity based registration method with regularization based on the equilibrium gap principle, known as equilibrated warping, was employed to assess LV torsion. The equilibrium gap regularization [1] represents a regularization with strong mechanical basis, suitable for cardiac image analysis. The method was implemented using FEniCS and VTK, and is distributed as a freely available python library.

Seventy-six cases of rTOF and ten normal controls were included in the study. Patients were divided into two groups: normal vs. loss of torsion. Torsion by equilibrated warping was successfully obtained in 68 of 76 (89%) patients and 9 of 10 (90%) controls. Loss of torsion was noted in 32 of the 68 (47%) patients with rTOF. There was no difference in LV or RV volumes or ejection fraction between these groups.

The assessment of LV torsion using the proposed image registration method with equilibrated warping regularisation is feasible and shows good reliability.

*Keywords:* Image registration, torsion of left ventricle

**Abstrakt.** U pacientů po chirurgické korekci Fallotovy tetralogie (rTOF) může dojít ke snížení funkce levé komory. Cílem této studie je vyhodnotit využití nové metody pro určení torze levé komory u pacientů s rTOF, jakožto včasného ukazatele dysfunkce levé komory. Torze, označovaná také jako twist, je charakteristickým rysem kontrakce komory. Je definována jako maximální rozdíl v rotaci mezi základnou a hrotem komory a udává se ve stupních. Hodnotu torze je možné normalizovat vydělením vzdáleností mezi základnou a hrotem.

---

\*This work has been supported from by the W. B. & Ellen Gordon Stuart Trust, The Communities Foundation of Texas, and by the Pogue Family Distinguished Chair. Research reported in this publication was supported by Children's HealthSM but the content is solely the responsibility of the authors and does not necessarily represent the official views of Children's HealthSM. The study was also partially supported by the Inria-UTSW Associated Team TOFMOD. K. Škardová and R. Chabiniok were partially supported by project No. NV19-08-00071 of the Ministry of Health of the Czech Republic.

Pro vyhodnocení torze levé komory byla v této práci použita metoda pro registraci obrazu, založená na zachování intenzity obrazu, s regularizací založenou na tzv. *equilibrated warping*. *Equilibrated warping* [1] představuje regularizaci se silným mechanickým základem, vhodnou zejména pro registraci snímků srdce. Metoda byla implementována pomocí FEniCS a VTK knihoven a je distribuována jako volně dostupná knihovna pro Python.

Do studie bylo zahrnuto sedmdesát šest případů rTOF a deset kontrolních případů. Pacienti byli rozděleni do dvou skupin: normální vs. se ztrátou torze. Hodnota torze byla pomocí navržené metody úspěšně vyhodnocena u 68 ze 76 (89 %) rTOF pacientů a u 9 z 10 (90 %) kontrolních případů. Ztráta torze byla zaznamenána u 32 z 68 (47 %) pacientů s rTOF. U dalších parametrů, jako je rozdíl v objemech levé a pravé komory nebo ejekční frakce, nebyl mezi oběma skupinami zjištěn rozdíl.

Studie ukázala, že pomocí navržené metody pro registraci obrazu s regularizací založenou na *equilibrated warping* je možné spolehlivě určit torzi levé komory.

*Klíčová slova:* Registrace obrazu, torze levé komory

**Full paper:** Castellanos, D. A., Škardová, K., Bhattaru, A., Berberoglu, E., Greil, G., Tandon, A., ... & Chabiniok, R. *Left Ventricular Torsion Obtained Using Equilibrated Warping in Patients with Repaired Tetralogy of Fallot*. *Pediatric Cardiology* (2021): 1–9.

## References

- [1] Genet, M., Stoeck, C. T., Von Deuster, C., Lee, L. C., & Kozerke, S. *Equilibrated warping: Finite element image registration with finite strain equilibrium gap regularization*. (2018) *Medical image analysis*, 50, 1-22.



# Pedestrian Density Estimates and Their Real Applications\*

Jana Vacková

5th year of PGS, email: [janca.vackova@fjfi.cvut.cz](mailto:janca.vackova@fjfi.cvut.cz)

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisors:

Milan Krbálek, Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

Marek Bukáček, Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

**Abstract.** Flow, velocity and density are considered fundamental quantities in the both traffic flow and pedestrian dynamics [4]. Primal models discovered relationship between these essentials in a plain macroscopic way. Although they describe the current phase of the system, they make it without any specific information about the dynamics inside the whole. It is possible to obtain two systems under very different internal conditions, however they both achieve the same value of flow or density.

Therefore the following approach is used here to estimate the density which was introduced in [5] and applied in [2, 6]. Every single pedestrian is assumed to be a source of individual density distribution. This assumption enable us to apply kernel distribution theory and obtain results which can be evaluated also in a microscopic way. In this contribution, the influence of kernel choice and its size on the density is examined - using our experimental data E4 [1] and simple static detector located at the exit area.

It is observed that every symmetric kernel in this study (conic, cylindrical, Gaussian, Bor-salino [3]) leads to the similar results. They depend more on the percentage of kernel mass assigned in the specific distance (from the pedestrian location) than the type of kernel. Beside, Voronoi diagram give results which have suitable alternatives among kernels mentioned above. Moreover, all metrics used for describing and comparing densities among different kernels give very similar outputs for all states of system (stable cluster, congestion) except the free flow. Thus the free flow requires the specific treatment in choosing parametric settings.

*Keywords:* Pedestrian Density, Static Detector, Kernel Distribution, Pedestrian Dynamics, Dense crowd behaviour

**Abstrakt.** Tok, rychlost a hustota jsou základní veličiny jak pro popis dopravního proudu, tak i pro vyhodnocení dynamiky pohybu chodců [4]. Prvotní modely se zabývaly čistě makroskopickými závislostmi mezi těmito veličinami. Ačkoliv makroskopické varianty těchto veličin popisují, v jaké fázi se systém aktuálně nachází, nedávají nám žádnou informaci o dynamice odehrávající se uvnitř pozorovaného celku. Zároveň je možné pro jednu hodnotu toku nebo hustoty získat dva odlišné stavy systému.

---

\*This work has been supported by the Grant SGS18/188/OHK4/3T/14 provided by the Ministry of Education, Youth, and Sports of the Czech Republic (MŠMT ČR).

Proto je zde zkoumána následující metoda odhadu hustoty, která byla představena v [5] a posléze aplikována v [2, 6]. Každý chodec je uvažován jako zdroj individuální hustotní distribuce, což nám umožňuje aplikovat teorii jádrových distribucí a získat výsledky, které můžou být vyhodnocovány i v mikroskopickém pohledu. Tento příspěvek se pak zabývá vlivem volby jádra a jeho velikosti na výslednou hustotu - přičemž jsou k tomu použita data z experimentu E4 [1] a jednoduchý statický detektor umístěný u východu z místnosti.

Lze pak pozorovat, že každé použité symetrické jádro (kuželové, válcové, Gaussovo, Borsalino [3]) vede na obdobné výsledky. Jak je ukázáno, tyto výsledky závisí spíše na množství hmoty jádra, která je umístěna do určité vzdálenosti od pozice chodce, než na typu použitého jádra. Vedle toho Voronoiův diagram produkuje hustoty, ke kterým je možné najít blízké alternativy mezi ostatními jádry. Navíc, všechny metriky, které byly použity pro popis a porovnávání hustot napříč různými jádry, dávají velmi podobné výsledky pro všechny stavy systému (stabilní shluk, kongesce) kromě volného toku. Volný tok tedy vyžaduje při volbě parametrů specifické zacházení.

*Klíčová slova:* Chodecká hustota, Statický detektor, Jádrová distribuce, Dynamika pohybu chodců, Chování hustého davu

**Full paper:** Vacková, Jana and Bukáček, Marek. Pedestrian Density Estimates and Their Real Applications. *Stochastic and Physical Monitoring Systems*, 2021.

## References

- [1] Bukáček, Marek and Hrabák, Pavel and Krbálek, Milan Microscopic travel-time analysis of bottleneck experiments. *Transportmetrica A: transport science*, 375–391, Taylor & Francis, 2018.
- [2] Bukáček, Marek and Vacková, Jana. Evaluation of pedestrian density distribution with respect to the velocity response. *Traffic and Granular Flow'17*, Springer, 2019.
- [3] Krbálek, Milan and Krbálková, Michaela. 3s-Unification for Vehicular Headway Modeling *Stochastic and Physical Monitoring Systems*, arXiv:1811.05325, 2018.
- [4] Schadschneider, Andreas and Chraïbi, Mohcine and Seyfried, Armin and Tordeux, Antoine and Zhang, Jun. Pedestrian Dynamics: From Empirical Results to Modeling. *Crowd Dynamics, Volume 1*, 63–102, Springer, 2018.
- [5] Steffen, Bernhard and Seyfried, Armin. Methods for measuring pedestrian density, flow, speed and direction with minimal scatter. *Physica A: Statistical mechanics and its applications*, 1902–1910, Elsevier, 2010.
- [6] Vacková, Jana and Bukáček, Marek Follower-Leader Concept in Microscopic Analysis of Pedestrian Movement in a Crowd. *Pedestrian and Evacuation Dynamics 2018*, Collective Dynamics, 2020.

# Nové varianty reakčních členů pro rovnice fázového pole vhodné pro numerické simulace\*

Aleš Wodecki

3. ročník PGS, email: aleswodecki@gmail.com

Katedra matematiky

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze

školitelé:

Tomáš Oberhuber, Katedra matematiky

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze

Pavel Strachota, Katedra matematiky

Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská, ČVUT v Praze

**Abstract.** We deal with pure substance solidification of a supercooled melt using the phase field model. This model is composed of the heat equation and the phase field equation coupled with suitable initial and boundary conditions. Using this formulation, we simulate the evolution of dendritic structures numerically. When doing this, one encounters numerical phenomena that call for subtle, but meaningful modifications to the phase field equations. The object of interest is the reaction term of the phase field equation. This term is responsible for the spatial distribution of latent heat release during solidification. Using the known results that asymptotic analysis provides, we propose new forms of the reaction terms that are compatible. These terms fully agree with the known physical dependencies and exhibit favorable properties in numerical simulations. The new reaction terms are then tested in a variety of numerical experiments that focus on mesh-dependence and model parameter settings. The forms of the reaction terms allow the interface thickness to be large compared to capillary length while still maintaining agreement with previous models. One of the models is also used to demonstrate good quantitative agreement with experimental data for the rapid solidification of Nickel.

*Keywords:* phase field, anisotropic crystal growth, asymptotic analysis

**Abstrakt.** Za užití modelu fázového pole simulujeme solidifikaci čisté směsi. Použitý model se skládá z rovnice vedení tepla a rovnice fázového pole a je doplněn vhodnými okrajovými a počátečními podmínkami. Tuto formulaci využíváme pro numerické simulace dendritického růstu. Při této snaze se setkáváme s jevy, které neodpovídají fyzikální realitě. Proto je smysluplné modifikovat model tak, aby si zachoval fyzikální interpretaci a současně došlo k potlačení nežádoucích jevů. Za tímto účelem modifikujeme reakční člen v rovnici fázového pole. Tento člen určuje prostorovou distribuci uvolňování latentního tepla. Za užití klasických výsledků asymptotické analýzy navrhujeme nové reakční členy, které upravují uvolňování latentního tepla. Přitom jsou respektovány základní závislosti vyplývající z fyzikálního odvození rovnice fázového pole a je dosaženo příznivých numerických vlastností. Nové reakční členy jsou testovány řadou simulací kde je zkoumána závislost na síti a nastavení parametru modelu. V mnoha simulacích

---

\*Tato práce byla podpořena grantem grantové agentury ČVUT v Praze, grant No. SGS17/194/OHK4/3T/14.

reakční členy umožňují nastavit širší rozhraní než je kapilární délka, což zaručuje proveditelnost simulace. Jeden z modelů je také použit v simulaci, která demonstruje kvantitativní shodu při simulování rychlého tuhnutí niklu.

*Klíčová slova:* rovnice fázového pole, anisotropický růst krystalů, asymptotic analysis

**Plná verze:** Strachota, P., Wodecki, A., Beneš, M.: Focusing the latent heat release in 3D phase field simulations of dendritic crystal growth. *Modelling Simul. Mater. Sci. Eng.* 29 065009 (2021). ISSN: 0965-0393. <https://doi.org/10.1088/1361-651X/ac0f55>.

## Literatura

- [1] M. Beneš. *Diffuse interface treatment of the anisotropic mean-curvature flow*. *Appl. Math- Czech.* 48, 2003, no. 6, pp. 437–453
- [2] R. Eymard. *Finite volume methods, Handbook of Numerical Analysis, vol. 7*. Elsevier, 2000, pp. 715–1022.
- [3] P. Strachota. *Analysis and Application of Numerical Methods for Solving Non linear Reaction-Diffusion Equations*. Czech Technical University in Prague Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, Dissertation, 2012

# Free-Running Data Acquisition System for the AMBER Experiment

Martin Zemko\*

1st year of PGS, email: [martin.zemko@fjfi.cvut.cz](mailto:martin.zemko@fjfi.cvut.cz)

Department of Mathematics

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

advisors:

Miroslav Virius, Department of Software Engineering

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, CTU in Prague

Giovanna Lehmann Miotto, Experimental Physics Department, CERN

**Abstract.** Triggered data acquisition systems provide only limited possibilities of triggering methods. In our paper, we propose a novel approach that completely removes the hardware trigger and its logic. It introduces an innovative free-running mode instead, which provides unprecedented possibilities to physics experiments. We would like to present such system, which is being developed for the AMBER experiment at CERN. It is based on an intelligent data acquisition framework including FPGA modules and advanced software processing. The system provides a triggerless mode that allows more time for data filtering and implementation of more complex algorithms. Moreover, it utilises a custom data protocol optimized for needs of the free-running system. The filtering procedure takes place in a server farm playing the role of the high-level trigger. For this purpose, we introduce a high-performance filtering framework providing optimized algorithms and load balancing to cope with excessive data rates. Furthermore, this paper also describes the filter pipeline as well as the simulation chain that is being used for production of artificial data, for testing, and validation.

*Keywords:* data acquisition, high-level filter, streaming, optimized algorithms

**Abstrakt.** Systémy pre zber údajov, ktoré využívajú spúšťačiaci systém, poskytujú len obmedzené možnosti filtračných metód. V tomto článku preto uvádzame nový prístup, ktorý úplne odstraňuje hardvérový spúšťač a jeho logiku. Namiesto toho využíva inovatívny voľne bežiaci režim, ktorý ponúka nebývalé možnosti fyzikálnym experimentom. Radi by sme popísali takýto systém, ktorý je aktuálne vyvíjaný pre experiment AMBER v CERNe. Je založený na inteligentnom rámci pre zber údajov, ktorý využíva FPGA moduly a pokročilé softwarové spracovávanie údajov. Tento systém poskytuje režim bez spúšte, ktorý dáva viac času filtrovaniu údajov a súčasne umožňuje implementáciu komplexnejších filtrovacích algoritmov. Okrem toho využíva vlastný komunikačný protokol, ktorý je optimalizovaný pre potreby voľne bežiacieho systému. Filtračná procedúra sa vykonáva na serverovej farme, ktorá plní úlohu vysoko-úrovňového filtra. Pre tento účel predstavujeme vysoko výkonný filtrovací rámec, ktorý poskytuje optimalizované algoritmy a vyvažovanie záťaže tak, aby zvládol nadmerný tok údajov. Tento článok navyše popisuje filtračnú a simulačnú reťaz, ktoré sú použité pri tvorbe umelých údajov určených na testovanie a validáciu.

*Kľúčová slova:* zber údajov, vysoko-úrovňový filter, streamovanie, optimalizované algoritmy

---

\*Co-authors: Vladimir Frolov, Stefan Huber, Vladimir Jary, Igor Konorov, Antonin Kveton, Dmytro Levit, Josef Novy, Dominik Steffen, Benjamin Moritz Veit, Miroslav Virius

**Full paper:** M. Zemko, V. Frolov, S. Huber, V. Jary, I. Konorov, A. Kveton, D. Levit, J. Novy, D. Steffen, B. Moritz Veit and M. Virius. *Free-running data acquisition system for the AMBER experiment*. EPJ Web Conf., 251 (2021) 04028, doi: <https://doi.org/10.1051/epjconf/202125104028>.

## References

- [1] B. Adams, C. Aidala, G. Alexeev, et al. COMPASS++/AMBER: Proposal for Measurements at the M2 beam line of the CERN SPS Phase-1: 2022-2024. Technical report, CERN, Geneva, (May 2019).
- [2] Y. Bai, M. Bodlak, V. Frolov, V. Jary, S. Huber, I. Konorov, D. Levit, J. Novy, D. Steffen, and M. Virius. *Overview and future developments of the FPGA-based DAQ of COMPASS*. JINST **11** (2016), C02025.
- [3] M. Bodlak, V. Frolov, V. Jary, S. Huber, I. Konorov, D. Levit, J. Novy, R. Salac, and M. Virius. *Fpga based data acquisition system for compass experiment*. Journal of Physics: Conference Series **513** (Jun 2014), 012029.
- [4] M. Bodlak, V. Frolov, V. Jary, S. Huber, I. Konorov, D. Levit, J. Novy, R. Salac, and M. Virius. *Development of new data acquisition system for COMPASS experiment*. Nucl. Part. Phys. Proc. **273–275** (2016), 976–981.
- [5] M. L. Fredman, J. Komlós, and E. Szemerédi. *Storing a Sparse Table with  $0(1)$  Worst Case Access Time*. volume 31, 538–544, (1984).
- [6] S. Huber, I. Konorov, A. Kveton, D. Levit, J. Novy, D. Steffen, B. M. Veit, M. Virius, M. Zemko, and S. Paul. *Data Acquisition System for the COMPASS++ / AMBER Experiment*. IEEE Transactions on Nuclear Science (to be published) (2020).
- [7] D. Steffen, M. Bodlak, V. Frolov, S. Huber, V. Jary, I. Konorov, A. Kveton, D. Levit, J. Novy, O. Subrt, J. Tomsa, and M. Virius. *Intelligence Elements and Performance of the FPGA-based DAQ of the COMPASS Experiment*. PoS **TWEPP-17** (2018).
- [8] O. Subrt, M. Bodlak, V. Frolov, S. Huber, M. Jandek, V. Jary, I. Konorov, A. Kveton, D. Levit, J. Novy, D. Steffen, J. Tomsa, and M. Virius. *The continuously running ifdaq of the compass experiment*. EPJ Web of Conferences **214** (01 2019), 01032.
- [9] T. Szameitat. *New geant4-based Monte Carlo software for the COMPASS-II experiment at CERN*. PhD thesis, (01 2017).
- [10] Y. Bai., et al. *The communication library DIALOG for iFDAQ of the COMPASS experiment*. International Journal of Physical and Mathematical Sciences **11** (2017), 401–410.
- [11] Y. Zhu and D. Shasha. *Efficient elastic burst detection in data streams*. In 'Proceedings of the Ninth ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining', KDD '03, 336–345, New York, NY, USA, (2003). Association for Computing Machinery.

# Doktorský studijní program

## Matematické inženýrství

---

Název studijního programu	Matematické inženýrství
Typ studijního programu	doktorský
Profil studijního programu	akademicky zaměřený
Forma studia	prezenční / kombinovaná
Standardní doba studia	4 roky
Jazyk studia	český
Udělovaný akademický titul	„doktor“ (ve zkratce Ph.D. uváděné za jménem)
Garant studijního programu	prof. Ing. Zuzana Masáková, Ph.D.
Oblast vzdělávání	č. 17 matematika

---

## Cíle studia ve studijním programu

Cílem doktorského studia v programu Matematické inženýrství je připravit studenty na základní i aplikovaný výzkum v různých oblastech aplikované matematiky. Doktorandi jsou školeni v klasických i moderních partiích matematiky, teoretické a matematické fyziky a teoretické informatiky a v jejich použití v nejrůznějších oblastech. Příprava studentů reflektuje nejnovější světové poznatky v těchto oborech. Rozmanitost dotčených oblastí vyžaduje jednak široké spektrum nabízených odborných předmětů, jednak náročnou přípravu spojenou s proniknutím do hloubky dané oblasti, předcházející vlastní tvůrčí práci doktoranda. Některé disertační práce jsou zaměřeny více na teoretické výsledky, jiné práce akcentují aplikace dosažených výsledků a jsou dovedeny ke konkrétním výstupům typu počítačového programu nebo numerické simulace. Vždy jsou ale závěry výzkumu prezentované na mezinárodním fóru formou vystoupení na konferencích a publikací v renomovaných impaktovaných odborných časopisech s recenzním řízením.

## Profil absolventa studijního programu

Doktorský program Matematické inženýrství navazuje na solidní vzdělání získané na magisterské úrovni a dále je prohlubuje pokročilejšími a/nebo speciálnějšímými disciplínami. Obor má interdisciplinární povahu založenou na aplikaci teoretických poznatků v dalších vědních oborech a v inženýrské praxi, v oblasti numerického a stochastického modelování dějů v přírodě, technice a při ochraně životního prostředí, v oblasti moderních partií matematické fyziky, v oblasti teoretické informatiky a diskrétní matematiky a v oblasti softwarového inženýrství aplikovaného zejména v přírodních vědách.

Profil absolventa tohoto studia tvoří přehled o širší oblasti moderní matematiky (např. pokročilá funkcionální analýza, algebraické struktury, stochastické procesy, kvantová mechanika, aperiodické struktury, nelineární parciální diferenciální rovnice) stejně jako přehled o širší oblasti aplikací (např. částicová fyzika, materiálové vědy, moderní metody informatiky, ochrana životního prostředí). V tematické oblasti své disertační práce získá absolvent jednak hluboké znalosti z vybrané partie moderní matematiky, jednak poznatky z oboru aplikace dostačující k tvůrčí aktivitě interdisciplinárního charakteru. K tomu výraznou měrou přispívá také to, že všichni doktorandi po celou dobu studia pracují ve výzkumných týmech na FJFI, ve spolupracujících institucích, zejména v ústavech ÚI a ÚTIA AV ČR, a nezdá se, že by někdy na rozsáhlých projektech nadnárodních týmů v zahraničí. Často probíhá studium pod dvojím vedením společně s významnou zahraniční univerzitou. Doktorandi jsou vedeni k prezentaci výsledků na mezinárodních konferencích a publikují je v odborných recenzovaných časopisech.

Absolventi mají dostatečné zkušenosti pro další úspěšnou kariéru jak v základním výzkumu, tak v oblasti aplikací a ve společenské praxi. Po skončení studia snadno nacházejí zaměstnání. Získávají postdoktorandská stipendia na domácích i zahraničních univerzitách, pokračují v akademické kariéře na vysokých školách, pracují v ústavech AV ČR, nebo výzkumných odděleních soukromých firem. Často odcházejí do oblasti finančnictví nebo se uplatní v softwarových a počítačových firmách. Nezdá se, že by někdy nacházejí uplatnění v manažerských pozicích.



## Studijní povinnosti

Studijní povinnosti doktoranda spočívají ve splnění podmínek studijního bloku stanoveném v rámci individuálního studijního řádu. Jde o složení zkoušek ze 4–6 jednosemestrálních odborných předmětů, absolvování jazykové přípravy z nejméně jednoho světového jazyka (zpravidla AJ) a sepsání studie k dizertační práci. Studijní blok je rozvržen do 4 (pro prezenční) resp. 6 (pro kombinovanou formu studia) semestrů od zahájení studia.

## Požadavky na tvůrčí činnost

Požadavek na tvůrčí činnost doktoranda je upřesněn Řádem doktorského studia FJFI. Podle něj musí disertace obsahovat tvůrčí výsledky dosažené doktorandem a publikované či doložitelně přijaté k publikaci v oborově příslušných impaktovaných časopisech. Nutným předpokladem pro odevzdání dizertační práce je proto autorský podíl doktoranda na alespoň jedné publikaci publikované nebo přijaté k publikaci v impaktovaném časopise (dle Web of Science Core Collection či jeho případného budoucího nástupce).

## Požadavky na absolvování stáží

Absolvování stáže v zahraničí není z ekonomických důvodů stanoveno jako povinnost, nicméně je obvyklé. Studenti často absolvují doktorát pod dvojitým vedením se zahraniční VŠ, kdy jsou vzájemně uznávány studijní povinnosti splněné na partnerských pracovištích. Standardem je zapojení doktorandů do vědeckých týmů svých školitelů, které jsou zpravidla podpořeny granty GAČR, TAČR, MŠMT, atd. Školitelé využívají svých kontaktů na zahraničních pracovištích pro vyjednání studijních a výzkumných pobytů svých doktorandů. Počítáme s finanční podporou z externích zdrojů, např. programů Erasmus Plus, CEEPUS, Aktion, DAAD, Marie-Curie Fellowship, apod.

## Další studijní povinnosti

Základní povinnosti jsou dány Studijním a zkušebním řádem pro studenty ČVUT v Praze a Řádem doktorského studia FJFI. Další povinnosti doktorandů jsou:

- Pracovat ve výzkumných týmech působících na FJFI nebo na školícím pracovišti mimo FJFI. Vedoucí týmů pověřují doktorandy dílčími úkoly se vzrůstající náročností a kontrolují jejich plnění.
- Aktivně se účastnit seminářů na školících pracovištích.
- Účastnit se a vystupovat na mezinárodních konferencích.
- Jedenkrát za rok předložit hodnocení doktoranda školitelem, které je schvalováno na zasedání Oborové rady.
- Jedenkrát ročně prezentovat výsledky své výzkumné práce před školiteli a členy ORO na Doktorandských dnech. Přednesené příspěvky jsou zařazeny do každoročně vydávaného sborníku.

Všichni studenti prezenční formy doktorského studijního programu se účastní pedagogické činnosti na FJFI, a to zejména vedením cvičení v bakalářských programech.

## Personální zabezpečení – přehled

### Oborová rada programu

---

prof. Dr. Ing. Michal Beneš	FJFI ČVUT
doc. Ing. Petr Cintula, Ph.D.	ÚI AV ČR
prof. Ing. Jan Flusser, DrSc.	ÚTIA AV ČR
prof. Ing. Jaroslav Fořt, CSc.	FS ČVUT
prof. RNDr. Ladislav Hlavatý, DrSc.	FJFI ČVUT
doc. RNDr. Daniel Hlubinka, Ph.D.	MFF UK
prof. Ing. RNDr. Martin Holeňa, CSc.	ÚI AV ČR
doc. Mgr. Štěpán Holub, Ph.D.	MFF UK
Ing. Vít Jakubský, Ph.D.	ÚJF AV ČR
prof. Ing. Igor Jex, DrSc.	FJFI ČVUT
doc. Mgr. Petr Knobloch, Dr.	MFF UK
doc. Mgr. Milan Krbálek, Ph.D.	FJFI ČVUT
doc. Ing. Tomáš Kroupa, Ph.D.	ÚTIA AV ČR
prof. Ing. Zuzana Masáková, Ph.D.	FJFI ČVUT – předsedkyně
prof. Ing. Edita Pelantová, CSc.	FJFI ČVUT
doc. Ing. Libor Šnobl, Ph.D.	FJFI ČVUT
prof. Ing. Pavel Šťovíček, DrSc.	FJFI ČVUT

---

### Školitelé a přednášející

prof. Dr. Ing. Michal Beneš	prof. Ing. Zuzana Masáková, Ph.D.
prof. RNDr. Čestmír Burdík, DrSc.	doc. Ing. Jiří Mikyška, Ph.D.
doc. Ing. Petr Cintula, Ph.D.	Ing. Jaroslav Novotný, Ph.D.
doc. Ing. Lubomíra Dvořáková, Ph.D.	Ing. Tomáš Oberhuber, Ph.D.
prof. Ing. Jan Flusser, DrSc.	prof. Ing. Edita Pelantová, CSc.
Ing. Radek Fučík, Ph.D.	doc. Ing. Severin Pošta, Ph.D.
doc. Ing. Jiří Fürst, Ph.D.	doc. Ing. Štěpán Starosta, Ph.D.
doc. Ing. Tomáš Hobza, Ph.D.	Ing. Pavel Strachota, Ph.D.
prof. RNDr. Ing. Martin Holeňa, CSc.	doc. Ing. Václav Šmídl, Ph.D.
Ing. Jiří Hrivnák, Ph.D.	doc. Ing. Libor Šnobl, Ph.D.
prof. Ing. Igor Jex, DrSc.	doc. Ing. Filip Šroubek, Ph.D., DSc.
Ing. Petr Jizba, Ph.D.	doc. Ing. Martin Štefaňák, Ph.D.
doc. Ing. Václav Klika, Ph.D.	prof. Ing. Pavel Šťovíček, DrSc.
doc. Mgr. Milan Krbálek, Ph.D.	doc. Ing. Jan Vybíral, Ph.D.
doc. Mgr. David Krejčířík, Ph.D. DSc.	doc. RNDr. Barbara Zitová, Ph.D.
Ing. Václav Kůs, Ph.D.	

## Předměty pro studijní plán

Doktorandi si do svých ISP volí předměty z následujícího seznamu, případně další doktorské předměty z příbuzných studijních programů na ČVUT.

Matematické modelování	Metody analýzy nelineárních evolučních úloh	Beneš
	Metoda konečných prvků pro parabolické problémy	Beneš
	Proudění a transport v porézním prostředí	Fučík, Mikyška
	Aplikace metody konečných objemů	Fürst
	Iterační metody pro řešení soustav rovnic	Mikyška
	Výpočetní metody v termodynamice směsí	Mikyška
	Pokročilé partie paralelních algoritmů a architektur	Oberhuber
	Dynamika křivek a ploch	Oberhuber
	Dynamika kontinua	Strachota, Fučík
	Metoda konečných objemů v termodynamice tekutin	Strachota, Beneš
Stochastické metody	Speciální funkce a transformace ve zpracování obrazu	Flusser, Zitová
	Speciální seminář ze zpracování obrazu	Flusser, Zitová
	Variační metody ve zpracování obrazu	Šroubek
	Dynamické rozhodování za neurčitosti	Guy, Kárný
	Pokročilé metody teorie informace	Hobza
	Divergenční statistické metody	Kůs
	Prediktivní nástroje pro agentní systémy	Krbálek
	Bayesovské strojové učení	Šmídl
	Stochastické systémy	Vybíral, Franc
Harmonická analýza	Vybíral	
Mat. informatika	Logika pro matematiky	Cintula
	Logika v informatice	Noguera
	Kombinatorika na slovech	Dvořáková
	Aperiodické struktury	Pelantová
	Číselné soustavy	Pelantová, Svobodová
	Symbolické dynamické systémy	Starosta
	Pokročilé partie teorie čísel	Masáková
Matematická fyzika	Kvantová teorie rozptylu	Šťovíček
	Poruchová teorie operátorů	Šťovíček
	Kvantové grupy	Burdík
	Spektrální geometrie	Krejčířík
	Schrödingerovy operátory	Krejčířík
	Mat. aspekty kvan. fyziky s nesamosdruženými operátory	Krejčířík
	Úvod do teorie semigrup	Klika
	Formulace termodynamicky konzistentních modelů	Klika
	Vybrané partie ze statistické fyziky	Jex
	Nerovnovážné systémy	Jex
	Kvantová informace a komunikace 1, 2	Jex, Štefaňák
	Otevřené kvantové systémy	Novotný
	Coxeterovy grupy	Hrivnák
	Symetrie diferenciálních rovnic	Šnobl
	Klasifikace a identifikace Lieových algeber	Šnobl
	Dráhový integrál	Jizba
Funkcionální integrál 1, 2	Jizba	

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Metody analýzy nelineárních evolučních úloh
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	prof. Dr. Ing. Michal Beneš

---

### Prerekvizity

Znalosti základů funkcionální analýzy, rovnic matematické fyziky, variačních metod a základů matematických metod v dynamice kontinua

### Stručná anotace předmětu

Předmět se zabývá matematickou analýzou řešení nelineárních okrajových a smíšených úloh pro parciální diferenciální rovnice eliptického a parabolického typu. Součástí výkladu jsou metody získávání odhadů pro slabá řešení, posloupností jejich aproximací, metody pro limitní přechody a způsoby určování jednoznačnosti řešení.

### Osnova

1. Slabé řešení pro eliptickou a parabolickou nelineární parciální diferenciální rovnici.
2. Apriorní odhady posloupnosti aproximací.
3. Zobecnění principu maxima a srovnávací postupy.
4. Věty o spojitém a kompaktním vnoření.
5. Limitní přechod v posloupnosti aproximací.
6. Metoda monotonie a kompaktnosti.
7. Jednoznačnost slabého řešení.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] J. L. Lions: Quelques méthodes de résolution des problèmes aux limites non linéaires. Paris, Dunod, 1969.
- [2] L. C. Evans: Partial Differential Equations, AMS, Graduate Studies in Mathematics, volume 19, Providence, Rhode Island, 2010.
- [3] R. E. Showalter: Monotone Operators in Banach Space and Nonlinear Partial Differential Equations, Mathematical Surveys and Monographs, volume 49, Providence, Rhode Island, 1997.
- [4] S. Bulent Biner: Programing Phase-Field Modeling, Springer Switzerland, 2017.
- [5] S. Fučík and A. Kufner: Nonlinear Differential Equations, Studies in Applied Mechanics 2, Amsterdam-New York, Elsevier Scientific Publ. Co., 1980.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Metoda konečných prvků pro parabolické problémy
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	prof. Dr. Ing. Michal Beneš

---

### Prerekvizity

Znalosti základů funkcionální analýzy, numerické matematiky, variačních metod a základů metody konečných prvků pro lineární okrajové úlohy pro eliptické parciální diferenciální rovnice; základní znalosti operačního systému LINUX a programování v jazyce C.

### Stručná anotace předmětu

Obsahem předmětu je výklad použití konečných prvků pro řešení nelineárních okrajových a smíšených úloh pro parciální diferenciální rovnice. Jsou uvedeny matematické vlastnosti metody, odvozeny odhady chyby při aproximaci touto metodou a vyloženy postupy při zajištění limitního procesu. Součástí výuky je použití vhodných prostředků pro implementaci MKP.

### Osnova

1. Slabé řešení smíšené úlohy pro parabolickou nelineární parciální diferenciální rovnici.
2. Faedo-Galerkinova metoda.
3. Řešení konečně-rozměrné nelineární soustavy rovnic vzniklé z metody konečných prvků.
4. Apriorní odhady a omezenost ve vhodných funkcionálních prostorech.
5. Konvergenční proces v lineárních a nelineárních členech Faedo-Galerkinovy aproximace.
6. Vlastnosti slabého řešení.
7. Implementace vybrané úlohy.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] S. C. Brenner and L. Ridgway Scott: The mathematical theory of finite element methods, New York, Springer, 1994.
- [2] P. G. Ciarlet: The finite element method for elliptic problems, Amsterdam, North-Holland, 1978.
- [3] V. Thomée: The Galerkin finite element methods for parabolic problems, LNM 1054, Berlin, Springer, 1984.
- [4] S. A. Ragab, H. E. Fayed: Introduction to Finite Element Analysis for Engineers, CRC Press, Taylor Francis, 2017.
- [5] P. Grisvard: Elliptic problems in non-smooth domains, Boston, Pitman, 1985.
- [6] K. Rektorys: Metoda časové diskretizace a parciální diferenciální rovnice, SNTL Praha, 1985.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Kvantové grupy
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	prof. RNDr. Čestmír Burdík DrSc.

---

### Prerekvizity

Znalosti základů algebry a teorie reprezentací Lieových algeber.

### Stručná anotace předmětu

Předmět se zabývá matematickou analýzou řešení integrabilních modelů. Seznamuje posluchače se základními pojmy a konstrukcemi v kvantových grupách.

### Osnova

1. Opakování Lieovy algebry a Lieovy grupy.
2. Hopfovy algebry.
3. Klasická a kvantová Yang-Baxterova rovnice.
4. Poissonovy algebry.
5. Drinfeld-Jimbova formulace kvantových grup.
6. Woronowiczova formulace kvantových grup.
7. Základy nekomutativní geometrie.
8. Aplikace v matematice a matematické fyzice.
9. Integrabilní modely.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] A. Klimyk, K. Schmudgen: Quantum Groups and Their Representation, Springer, Berlin, 1997.
- [2] G. Lusztig: Introduction to Quantum Groups, Birkhauser, Boston, 1993.
- [3] Ch. Kassel: Quantum Groups, Graduate Texts in Mathematics, Springer, New York, 2012.
- [4] E. Abe: Hopf algebras, Cambridge Tracts in Mathematics, Univ. Press. Cambridge, 2008.
- [5] J. Dixmier: Enveloping Algebra, North-Holland, Amsterdam, 1997.
- [6] A. Connes: Non-Commutative Geometry, Academic Press, New York 1994.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Logika pro matematiky
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Ing. Petr Cintula, PhD.

---

### Prerekvizity

Znalosti základů matematické logiky.

### Stručná anotace předmětu

Logika je zároveň objektem, který matematika studuje, i jazykem, ve kterém je matematika formulována a pomocí kterého je zkoumána. Cílem předmětu je představit matematickou logiku v obou těchto rolích s důrazem na jejich interakci a na důsledky pro jiné oblasti matematiky jako je aritmetika, teorie grafů a algebra. Pozornost bude též věnována základům teorie důkazů s důrazem na formalizovanou matematiku a automatické dokazování.

### Osnova

1. Úvod: Logika jako jazyk matematiky.
2. Klasická výroková a predikátová logika: formální logika jako objekt matematiky.
3. Důkazy nemožnosti v geometrii, teorii množin a aritmetice.
4. Základy teorie modelů a její aplikace v algebře a teorii grafů.
5. Základy teorie důkazů, formalizovaná matematika, automatické dokazování.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] P. Pudlák: Logical Foundations of Mathematics and Computational Complexity: A Gentle Introduction. Springer, 2014.
- [2] J. D. Barrow: Pí na nebesích. Mladá fronta, Praha, 2000.
- [3] Y. I. Manin: A Course in Mathematical Logic for Mathematicians. Springer-Verlag, New York, 2010.
- [4] V. Švejdar: Logika: neúplnost, složitost a nutnost. Academia, Praha, 2002.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Kombinatorika na slovech
Rozsah studijního předmětu	13p + 13s
Garant předmětu	doc. Ing. Ľubomíra Dvořáková, Ph.D.

---

### Osnova

1. Kombinatorika na slovech: přehled pojmů a výsledků.
2. Volný monoid, volná grupa, rovnice na slovech.
3. Míry kombinatorické složitosti – faktorová, palindromická, abelovská, aritmetická komplexita.
4. De Bruijnovy a Rauzyho grafy – návratová slova, derivovaná slova.
5. Palindromický a antipalindromický uzávěr.
6. Sturmovská slova a jejich zobecnění – slova kódující výměnu intervalů, Arnoux-Rauzyho slova.
7. Pevné body morfizmů a jejich vlastnosti.
8. Slova bez výskytu zvolených konfigurací: slova bez překryvu, čtvercuprostá slova.
9. Algoritmy v kombinatorice na slovech.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] M. Lothaire: *Combinatorics on Words*, 2nd edition, Cambridge, 1997.
- [2] P. Fogg: *Substitutions in Dynamics, Arithmetics and Combinatorics*, Springer, 2002.
- [3] J. Berstel et al.: *Combinatorics on Words, Christoffel Words and Repetitions in Words*, CRM Series, AMS, 2009.
- [4] *Combinatorics, Words and Symbolic Dynamics*, V. Berthé and M. Rigo, eds., *Encyclopedia of Mathematics and its Applications*, Cambridge, 2016.
- [5] *Sequences, Groups, and Number Theory*, V. Berthé and M. Rigo, eds., *Trends in Mathematics*, Birkhäuser Basel, 2018.



## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Speciální funkce a transformace ve zpracování obrazu
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	prof. Ing. Jan Flusser, DrSc.

---

### Prerekvizity

Znalosti základů zpracování obrazu v rozsahu předmětů ROZ1, ROZ2.

### Stručná anotace předmětu

Předmět je určen pro pokročilé studenty. Hlavní pozornost je věnována použití některých speciálních funkcí a transformací (zejména momentových funkcí a waveletové transformace) pro vybrané úlohy zpracování obrazu – detekce hran, potlačení šumu, rozpoznávání deformovaných objektů, registrace obrazu, komprese apod. Vedle teorie bude probírána i řada praktických aplikací.

### Osnova

1. Geometrické a komplexní momenty, definice a základní vlastnosti.
2. Momentové invarianty vzhledem k otáčení a měřítku obrazu, úplnost, nezávislost, konstrukce báze.
3. Momentové invarianty vzhledem k afinní transformaci obrazu.
4. Momentové invarianty vzhledem ke konvoluci, kombinované invarianty.
5. Ortogonální momenty (Legendrovy momenty, Fourier-Mellin momenty, Zernikovy momenty).
6. Diskrétní momenty a algoritmy pro jejich výpočet.
7. Waveletová transformace (WT) – matematické základy.
8. Použití WT pro detekci hran a význačných bodů v obrazu.
9. Potlačení šumu pomocí WT.
10. Použití WT pro registraci a fúze obrazu.
11. Komprese obrazu pomocí WT a blokového kvantování.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] J. Flusser, T. Suk, B. Zitová: 2D and 3D Image Analysis by Moments, Wiley & Sons Ltd., 2016.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Proudění a transport v porézním prostředí
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	Ing. Radek Fučík, Ph.D.

---

### Prerekvizity

Znalosti základů funkcionální analýzy, numerické matematiky, variačních metod a základů metody konečných prvků pro parciální diferenciální rovnice.

### Stručná anotace předmětu

Předmět se zabývá problematikou proudění tekutin v porézním prostředí a skládá se ze dvou hlavních částí. První část je zaměřena na matematickou formulaci zákonů zachování hmoty, hybnosti a energie pro jednotlivé komponenty a fáze a tyto jsou doplněné o konstitutivní vztahy. Ve druhé části jsou probrány vybrané typové úlohy a diskutovány výpočetní metody (analytické, semi-analytické a numerické) použitelné pro řešení těchto úloh s důrazem na problémy vznikající při praktické implementaci těchto metod.

### Osnova

1. Základní pojmy a veličiny, kapilarita. Formulace zákonů zachování hmoty, hybnosti a energie, konstitutivní vztahy.
2. Úlohy s analytickým řešením: Buckleyho-Leverettovo řešení v 1D.
3. Úlohy se semi-analytickým řešením: McWhorterovo-Sunadovo řešení v 1D a 2D, zobecněné řešení v obecné dimenzi (Fučík a kol. 2016).
4. Úloha dvoufázového nemísivého proudění a její numerické řešení metodou KP.
5. Úloha dvoufázového kompozičního proudění a její numerické řešení metodou KP.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] J. Bear: Modeling Phenomena of Flow and Transport in Porous Media, Springer, 2018.
- [2] R. Helmig: Multiphase Flow and Transport Processes in the Subsurface, A contribution to the Modelling of Hydrosystems, Springer, 1997.
- [3] R. Fučík, T. H. Illangasekare and M. Beneš: Multidimensional self-similar analytical solutions of two-phase flow in porous media, Advances in Water Resources, volume 90, pages 51–56, 2016.
- [4] R. J. LeVeque: Finite volume methods for hyperbolic problems, volume 31, Cambridge university press, 2002.
- [5] F. Brezzi and M. Fortin: Mixed and hybrid finite element method,, volume 15, Springer Science & Business Media, 2012.
- [6] Z. Chen, G. Huan, Y. Ma: Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media, SIAM, 2006.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Aplikace metody konečných objemů
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Ing. Jiří Fürst, Ph.D.

---

### Stručná anotace předmětu

Předmět se zabývá numerickým řešením systému Navierových-Stokesových rovnic pomocí metody konečných objemů. Posluchač se seznámí s principy tvorby sítí pro vícerozměrné problémy a s algoritmy používanými pro řešení soustav rovnic pro nestlačitelné a stlačitelné proudění.

### Osnova

1. Principy tvorby sítí pro vícerozměrné úlohy.
2. Algebraický, eliptický a hyperbolický generátor sítě.
3. Nestrukturovaná síť, triangulace.
4. Navierovy-Stokesovy rovnice pro nestlačitelné proudění, formulace vybraných úloh.
5. Princip projekčních metod, Helmholtzova projekce.
6. Metoda SIMPLE pro Stokesův problém.
7. Metoda SIMPLE pro Navierovy-Stokesovy rovnice.
8. Metoda PISO pro Navierovy-Stokesovy rovnice.
9. Rozšíření metod pro stlačitelné proudění.
10. Sdružené metody pro stlačitelné proudění.
11. Aplikace probraných metod na řešení vybraných úloh.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] J. Blazek: Computational Fluid Dynamics, Principles and Applications, Elsevier, 2005.
- [2] J. H. Ferziger, M. Peric: Computational methods for fluid dynamics, Springer, 1996.
- [3] J. W. Thomas: Numerical Partial Differential Equations: Finite Difference Methods, Springer Science & Business Media, 2013
- [4] J. Fürst, K. Kozel: Numerická řešení problémů proudění I, skripta ČVUT, 2001.
- [5] T. J. Chung: Computational Fluid Dynamics, Cambridge University Press, 2002.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Dynamické rozhodování za neurčitosti
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	Dipl.-Eng Tatiana V. Guy, Ph.D.

---

### Prerekvizity

Znalosti matematické analýzy, algebry, teorie pravděpodobnosti a matematické statistiky, znalosti základů teorie informace a statistického rozhodování.

### Stručná anotace předmětu

Tento kurz se zabývá dynamickým rozhodováním (DM) jako důležitou oblastí výzkumu. Kurz je vhodný pro studenty doktorandského studia zaměřené na výzkum a vývoj v oblastech využívajících dynamické rozhodování nebo tomuto rozhodování sloužících, například stochastické a adaptivní řízení, optimalizace, učení, umělá inteligence, detekce a izolace poruch, rozpoznávání a jiné.

### Osnova

1. Rekapitulace dynamického rozhodování (DR) za neurčitosti a neúplné znalosti.
2. Distribuované rozhodování jako univerzální způsob řešení složitosti.
3. Rozhodovací úlohy vyvolané distribuovaným DR (spolupráce, vyjednávání).
4. Pokročilé způsoby získávání znalostí.
5. Pokročilé způsoby získávání preferencí.
6. Přenos znalostí a líné učení (lazy learning).
7. Respektování osobnostních rysů nebo emocí lidských rozhodovaců.
8. Případové studie týkající se PhD témat zapojených studentů.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] L. Savage: The Foundations of Statistics, Wiley, Foundations of decision theory, 1954.
- [2] D. P. Bertsekas: Dynamic Programming and Optimal Control, vol. 1.,2., Athena Sci. Press, 2005.
- [3] M. Kárný, J. Bohm, T. V. Guy, L. Jirsa, I. Nagy, P. Nedoma, L. Tesař: Optimized Bayesian Dynamic Advising: Theory and Algorithms, Springer, 2006.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Pokročilé metody teorie informace
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Ing. Tomáš Hobza, Ph.D.

---

### Prerekvizity

Znalosti základů teorie pravděpodobnosti a matematické statistiky, znalosti základních pojmů a metod teorie informace.

### Stručná anotace předmětu

Předmět se věnuje pokročilejším partiím teorie informace a zároveň zkoumá vztah mezi teorií informace a statistikou. Konkrétně se zabývá definicí a vlastnostmi entropie a informace pro spojité náhodné veličiny, vztahy mezi diskrétní a diferenciální entropií, rozděleními s maximální entropií a rychlostí entropie náhodných procesů. Součástí výkladu je i metoda typů a její použití pro výpočet pravděpodobností extrémálních událostí a pro ukázkou existence univerzálního kódu zdroje. Dále je studován problém testování hypotéz a role Fisherovy informace v odhadování parametrů pravděpodobnostních rozdělení.

### Osnova

1. Diferenciální entropie.
2. Relativní entropie a informace pro spojité náhodné veličiny.
3. Asymptotická ekvipartiční vlastnost pro spojité náhodné veličiny.
4. Rozdělení s maximální entropií.
5. Rychlost entropie pro gaussovský proces.
6. Metoda typů.
7. Testování hypotéz a Steinovo lemma.
8. Odhady parametrů a Fisherova informace.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] I. Vajda: Teorie informace. Vydavatelství ČVUT, Praha, 2004.
- [2] T. M. Cover, J. A. Thomas: Elements of information theory, John Wiley & Sons, NewYork, 2012.
- [3] D. J. C. MacKay: Information Theory, Inference, and Learning Algorithms, Cambridge University Press, Cambridge, 2003.
- [4] I. Csiszár, J. Körner: J. Information theory: coding theorems for discrete memoryless systems, Cambridge University Press, Cambridge, 2011.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Coxeterovy grupy
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	Ing. Jiří Hrivnák, Ph.D.

---

### Osnova

1. Zrcadlení a grupy zrcadlení.
2. Kořenové systémy, krystalografické kořenové systémy.
3. Weylovy komory a fundamentální systémy.
4. Funkce délky a nadroviny zrcadlení.
5. Parabolické podgrupy a stabilizéry.
6. Coxeterovy grupy a Coxeterovy systémy.
7. Bilineární formy Coxeterových systémů.
8. Klasifikace Coxeterových systémů a grup zrcadlení.
9. Weylovy grupy, kořenové mříže, fundamentální váhy a váhová mříž.
10. Klasifikace krystalografických kořenových systémů.
11. Afinní Weylovy grupy, afinní kořenové systémy, fundamentální domény.
12. Borel-de Siebenthalův teorém.
13. MacDonalдова identita, Weylova identita.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] R. Kane: Reflection Groups and Invariant Theory , CMS books in Mathematics, Springer, 2001.
- [2] J. E. Humphreys: Reflection groups and Coxeter groups, Cambridge Advanced Studies in Mathematics, no. 29, Cambridge University Press, Cambridge, 1990.
- [3] C. T. Benson, L. C. Grove: Finite Reflection Groups, Second Edition, Springer, 2010.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Kvantová informace a komunikace 1
Rozsah studijního předmětu	13p + 13s
Garant předmětu	prof. Ing. Igor Jex, DrSc.

---

### Osnova

1. Základy kvantové teorie.
2. Provázané stavy a matice hustoty.
3. Modely počítání.
4. Komplexicita.
5. Kvantové brány a kvantové obvody.
6. Kvantová Fourierova transformace.
7. Prohledávací algoritmy.
8. Realizace kvantových počítačů.
9. Korekce chyb.
10. Kvantové operace.
11. Kryptografie.
12. Kvantová kryptografie.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] M. A. Nielsen, I. L. Chuang: Quantum computation and quantum information, Cambridge Univ. Press, 2010.
- [2] M. Dušek: Koncepční otázky kvantové teorie, Olomouc, 2002.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Nerovnovážné systémy
Rozsah studijního předmětu	13p + 13s
Garant předmětu	prof. Ing. Igor Jex, DrSc.

---

### Osnova

1. Matematický popis nestabilit.
2. Teorie laseru a nestability.
3. Samoorganizace v chemii.
4. Morfogeneze.
5. Dynamika sociologických systémů.
6. Stochastické procesy.
7. Nestability v ekonomii.
8. Samoorganizace v kosmologii.
9. Chaotická dynamika.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] R. Feistel, W. Ebeling: Physics of Self-Organization and Evolution, Wiley, Berlin, 2011.
- [2] H. Haken: Synergetics, Springer, Berlin, 1970.
- [3] G. Nicolis, C. Nicoli: Foundations of complex systems, World Scientific, 2007.



## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Vybrané partie ze statistické fyziky
Rozsah studijního předmětu	13p + 13s
Garant předmětu	prof. Ing. Igor Jex, DrSc.

---

### Osnova

1. Základy statistické fyziky.
2. Statistický operátor v klasické a kvantové teorii.
3. Neideální plyny I, viriálová stavová rovnice.
4. Neideální plyny II, klastrový rozvoj.
5. Fermiho plyn.
6. Boseho-Einsteinův plyn.
7. Boseho-Einsteinova kondenzace.
8. Mikroskopické modely fázových přechodů.
9. Isingův model.
10. Základy kinetické teorie a transportní jevy.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] R. Balian: From microphysics to macrophysics I, II, Springer, New York, 2007.
- [2] J. Kvasnica: Termodynamika, SNTL Praha, 1965.
- [3] J. Kvasnica: Statistická fyzika, Academia Praha, 2003.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Dráhový integrál
Rozsah studijního předmětu	26p+13cv
Garant předmětu	Ing. Petr Jizba, Ph.D.

---

### Prerekvizity

Znalosti základů kvantové mechaniky a analytické mechaniky.

### Stručná anotace předmětu

Předmět si klade za cíl seznámit posluchače s technickou a aplikační stránkou Feynmanova dráhového integrálu. Důraz bude kladen na aplikace v současných problémech kvantové a statistické fyziky.

### Osnova

1. Úvod a motivace: evoluční kernel, Lie-Trotterova součinnová formule, dráhový integrál v konfiguračním prostoru.
2. Kernel pro volnou částici a harmonický oscilátor: semiklasická aproximace, WKB metoda a výpočet fluktuačního faktoru.
3. Poruchové metody: variační poruchová metoda a anharmonický oscilátor, delta rozvoj, poruchové metody pro Greenovy funkce.
4. Dráhové integrály ve fázovém prostoru a Klauderův dráhový integrál: Wickova rotace a Euklidovské dráhové integrály, jednoduché aplikace ve statistické fyzice a fyzice instantonů.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] L. S. Schulman, Techniques and Applications of Path Integrals, Dover, London, 2010.
- [2] H. Kleinert, Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial markets, World Scientific, Singapore, 2014.
- [3] R. P. Feynman and A. R. Hibbs, Quantum Mechanics and Path Integrals, Dover, New York, 2010.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Funkcionální integrál 2
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	Ing. Petr Jizba, Ph.D.

---

### Prerekvizity

Znalosti na úrovni základního kurzu kvantové teorie pole a předmětu Funkcionální integrál 1.

### Stručná anotace předmětu

Přednáška je určena především pro ty studenty, kteří si přejí prohloubit své znalosti v moderních pasážích kvantové teorie pole a statistické fyziky. Prednášený materiál může také sloužit jako vhodný základ pro další studium, např. v oblasti exaktně řešitelných systémů nebo v teorii kondenzované fáze. Podstatná část přednášek bude sestávat z řešení problémů. Příkladové archy budou poskytnuty.

### Osnova

1. Poruchový počet Greenových funkcí prostřednictvím Feynmanových diagramů: bosonovská pole, fermionovská pole.
2. Teorie Yang-Millsových polí: Faddeev-Popovova duchová pole, Feynmanovy diagramy.
3. Spontánní narušení symetrie: Goldstonův teorém, Higgsův mechanismus.
4. Kolektivní jevy.
5. Renormalizační grupa: Callan-Symanzikova rovnice, Wetterich-Polchinski funkcionální RG.
6. Topologické systémy.
7. Kvantová teorie pole při konečných teplotách.
8. Nerovnovážné kvantově polní systémy.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] M. Blasone, P. Jizba and G. Vitiello, Quantum Field Theory and its Macroscopic Manifestations, Boson Condensation, Ordered Patterns and Topological Defects, Imperial College Press, London, 2011.
- [2] A. Altland and B. Simons, Condensed Matter Field Theory, Cambridge University Press, Singapore, New York, 2013.
- [3] E. Fradkin, Field Theories of Condensed Matter Physics, Cambridge University Press, New York, 2013.
- [4] H. Kleinert, Particles and Quantum Fields, World Scientific, London, 2017.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Funkcionální integrál 1
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	Ing. Petr Jizba, Ph.D.

---

### Prerekvizity

Znalosti na úrovni základního kursu fyziky, kvantové mechaniky, absolvování předmětu Dráhový integrál.

### Stručná anotace předmětu

Přednáška je určena především pro ty studenty, kteří si přejí prohloubit své znalosti v moderních pasážích kvantové teorie pole a teorie strun. Přednášený materiál může také sloužit jako vhodný základ pro další studium, např. v oblasti exaktně řešitelných systémů nebo v teorii pevných látek. Podstatná část přednášek bude sestávat z řešení problémů. Příkladové archy budou poskytnuty.

### Osnova

1. Konstrukce akcí pro relativistickou bezspinovou částici a relativistickou bosonovou strunu: diskuse symetrií pro Wheelerovu akci relativistické částice a Polyakovovu akci bosonové struny, teorém Emmy Noetherové a Wardovy identity
2. Kvantování relativistické částice a světočárová reprezentace Klein-Gordonova propagátoru, Kvantování bosonové struny Polyakovovou metodou
3. Úvod do kvantové teorie pole: světočárové reprezentace, Klein-Gordonovo pole a quartický potenciál, poruchový počet
4. Kvantování Diracovského pole ve světočárové reprezentaci: světočárové reprezentace pro fermiony, quartický potenciál, poruchový počet.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] H. Kleinert, *Particles and Quantum Fields*, World Scientific, London, 2017.
- [2] H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistics, Polymer Physics and Financial markets*, World Scientific, Singapore, 2014.
- [3] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Clarendon Press, Oxford, 2002.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Formulace termodynamicky konzistentních modelů
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Ing. Václav Klika, PhD.

---

### Prerekvizity

Znalosti rovnic matematické fyziky, diferenciální geometrie, termodynamiky a statistické fyziky; znalost základů matematických metod v dynamice kontinua je výhodou.

### Stručná anotace předmětu

Předmět se zabývá problematikou nalezení fyzikálně konzistentních modelů pro různé procesy s cílem získat relativně obecný rámec pro formulaci fyzikálních, chemických či biologických modelů popisující chování nerovnovážných systémů.

### Osnova

1. Rovnovážná termodynamika.
2. Zákony zachování, intuitivní zavedení konceptu vratnosti-nevratnosti.
3. Klasická nerovnovážná termodynamika.
4. Omezení na fenomenologické koeficienty – konstitutivní teorie (Onsager-Casimir reciproční relace, funkcionální omezení, racionální termodynamika a rámec Coleman-Noll).
5. Kvalitativní analýza některých modelů – Parabolické vs. hyperbolické evoluční rovnice, role nelineárních členů, princip maxima z teorie parciálních diferenciálních rovnic.
6. Širší souvislosti – úvod do GENERIC nerovnovážné termodynamiky, Poissonovy a disipační závorky.
7. Princip maxima entropie a přechody mezi úrovněmi popisu: Liouvilleova rovnice, Boltzmannova rovnice, klasická hydrodynamika.
8. GENERIC, vratnost a nevratnost.
9. Aplikace na vybrané problémy.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] M. Pavelka, V. Klika, M. Grmela: Multiscale Thermo-Dynamics, DeGruyter, 2018.
- [2] S. R. De Groot and P. Mazur: Non-equilibrium thermodynamics, Courier Corporation, 2013.
- [3] G. Lebon, D. Jou, and J. Casas-Vázquez: Understanding non-equilibrium thermodynamics, Vol. 295, Berlin: Springer, 2008.
- [4] D. Jou, G. Lebon and J. Casas-Vázquez: Extended Irreversible Thermodynamics, Springer, 2014.
- [5] H. B. Callen: Thermodynamics and an Introduction to Thermostatistics, Wiley, 1985.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Úvod do teorie semigrup
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Ing. Václav Klika, PhD.

---

### Prerekvizity

Znalosti základů funkcionální analýzy, rovnic matematické fyziky a moderní teorie parciálních diferenciálních rovnic.

### Stručná anotace předmětu

Pro systém lineárních obyčejných diferenciálních rovnic je známo, že řešení je získatelné ve tvaru exponenciály matice. Rozšíření na parciální diferenciální rovnice však není přímočaré. Například pro vedení tepla je matice nahrazena Laplaceovým operátorem, který je neomezený a exponenciální řada tedy ani nekonverguje. Navíc řešení lineární rovnice vedení tepla obecně existují jen dopředu v čase, a tedy řešící operátor může být maximálně semigrupou.

Cílem předmětu je poskytnout matematický základ pro tento typ problémů a rozšířit pojem stability z obyčejných diferenciálních rovnic, který opět bude dán do souvislosti se spektrem lineárního operátoru.

### Osnova

1. Exponenciála matice, omezeného operátoru a možná rozšíření na neomezené operátory.
2. Silně spojitě semigrupy.
3. Stejněměrně spojitě semigrupy.
4. Analytické semigrupy.
5. Generátory semigrup.
6. Hille-Yoshida teorém.
7. Lumer-Phillips teorém.
8. Koncepty stability.
9. Aplikace na vybrané problémy: souvislost spektra a stability, exponenciála neomezeného operátoru.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] K. J. Engel, R. Nagl: A Short Course on Operator Semigroups, Springer, New York, 2006.
- [2] A. Pazy: Semigroups of Linear Operators and Applications to Partial Differential Equations, Springer, New York, 1983.
- [3] L. C. Evans: Partial Differential Equations, 2nd ed., Amer. Mat. Soc., Providence, 2010.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Prediktivní nástroje pro agentní systémy
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Mgr. Milan Krbálek, Ph.D.

---

### Prerekvizity

Znalosti základů metod matematické fyziky, matematických metod v dynamice dopravního proudění a matematiky částicových systémů.

### Stručná anotace předmětu

Cílem předmětu je pochopit matematické pozadí problematiky agentních systémů se socio-dynamickými interakcemi mezi jednotlivými agenty. Součástí výkladu jsou metody pro uniformní analýzu všech takových systémů a teoretický aparát vystavěný nad unifikovanou třídou těchto systémů.

### Osnova

1. Empirické pozadí problematiky a matematická klasifikace agentních systémů.
2. Podmínky balančnosti agentního systému.
3. Unfoldovací procedury a vyhodnocení jejich kvality.
4. Statistické instrumenty teorie náhodných matic a jejich alternativy.
5. Standardizace statistického popisu balančního částicového systému.
6. Integrální transformace nad třídou balančních hustot.
7. Hladinové procesy a jejich zákonitosti.
8. Teorie statistické rigidity hladinových procesů.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] D. Helbing: Quantitative Sociodynamics: Stochastic Methods and Models of Social Interaction Processes, Springer-Verlag: Berlin, 2010.
- [2] M. Krbálek, P. Šeba: Spectral rigidity of vehicular streams (Random Matrix Theory approach), J. Phys. A: Math. Theor., volume 42, 2009.
- [3] M. L. Mehta: Random matrices (Third Edition), New York: Academic Press, 2004.
- [4] G. Grimmett, D. Stirzaker: Probability and Random Processes, Oxford University Press, 2001.
- [5] M. Krbálek: Theoretical predictions for vehicular headways and their clusters, J. Phys. A: Math. Theor., volume 46, 2013.
- [6] M. Krbálek et al.: Three methods for estimating a range of vehicular interactions, Physica A, volume 491, pages 112–126, 2018.

## Charakteristika studijního předmětu

Název studijního předmětu	Matematické aspekty kvantové teorie s nesamosdruženými operátory
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Mgr. Krejčířík David, Ph.D. DSc.

### Prerekvizity

Pokročilejší znalosti funkcionální analýzy, spektrální teorie Schrödingerových operátorů a teorie eliptických parciálních diferenciálních rovnic.

### Stručná anotace předmětu

Předmět je motivován novým konceptem v kvantové mechanice, kdy jsou fyzikální pozorovatelné reprezentovány nesamosdruženými operátory. Cílem přednášky je seznámit studenty s matematickými výzvami spektrální teorie lineárních diferenciálních operátorů v situacích, kdy spektrální teorém a variační principy nejsou k dispozici.

### Osnova

1. Motivace. Kvazi-hermitovská a pseudo-hermitovská kvantová mechanika. Otevřené systémy.
2. Uzavřené operátory na Hilbertových prostorech. Bodová, spojitá a reziduální spektra. Numerický obor hodnot. Normální, symetrické a komplexně symetrické operátory, fyzikální symetrie.
3. Definitice Schrödingerových operátorů s komplexními potenciály coby uzavřených operátorů na Hilbertově prostoru. Sektoriální operátory a kvadratické formy. Akretivní operátory a Kato nerovnost. Neakretivní operátory.
4. Kompaktnost a diskretní spektra, operátory s kompaktní rezolventou. Fredholmovy operátory a rozličné definice esenciálního spektra. Stabilita esenciálního spektra.
5. Spektrální analýza. Nerovnosti Lieb-Thirringova typu pro Schrödingerovy operátory s komplexními potenciály. Metoda násobitelů.
6. Podobnost k normálním a samosdruženým operátorům. Kvazi-samosdružené operátory. Bazické vlastnosti vlastních funkcí.
7. Pseudospektrální analýza. Přibližné vlastní hodnoty a vlastní funkce. Mikrolokální metody. WKB konstrukce pseudomódů.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] D. Krejčířík and P. Siegl: Elements of Spectral Theory without the Spectral Theorem, in “Non-Selfadjoint Operators in Quantum Physics: Mathematical Aspects”, F. Bagarello, J.-P. Gazeau, F. H. Szafraniec, and M. Znojil, Eds., Wiley-Interscience, 2015.
- [2] T. Kato: Perturbation theory for linear operators, Springer-Verlag, Berlin, 1966.



## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Schrödingerovy operátory
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Mgr. David Krejčířík, Ph.D. DSc.

---

### Prerekvizity

Základní znalosti funkcionální analýzy, kvantové mechaniky a teorie eliptických parciálních diferenciálních rovnic.

### Stručná anotace předmětu

Cílem přednášky je přehled klasických, jakož i moderních metod v nerelativistické kvantové mechanice.

### Osnova

1. Motivace. Krize klasické fyziky a vzestup kvantové mechaniky. Matematická formulace kvantové teorie. Kvantová stabilita hmoty.
2. Definice Schrödingerových operátorů coby samosdružených operátorů na Hilbertově prostoru. Zdola omezené kvadratické formy. Samosdružená rozšíření symetrických operátorů.
3. Kvalitativní rysy spektra neomezených operátorů. Diskrétní a esenciální spektrum. Volný hamiltonián a dimenzionální vlastnosti eukleidovského prostoru. Hardyho nerovnosti a virtuální vázané stavy.
4. Slabé vázané vlastní stavy. Birman-Schwingerova analýza. Analytická versus asymptotická poruchová teorie.
5. Silně vázané vlastní stavy. Semiklasická limita. Lieb-Thirringovy nerovnosti.
6. Povaha esenciálního spektra. Absolutně a singulárně spojitá spektra, vnořené vlastní hodnoty. LAP (limiting absorption principle). Komutátorové metody a Mourrova teorie.
7. Magnetické Schrödingerovy operátory. Diamagnetická nerovnost. Magnetické Hardyho nerovnosti. Chování rovnice vedení tepla a její semigrupy pro velké časy.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] W. O. Amrein, A. Boutet de Monvel and V. Georgescu: C0-groups, commutator methods and spectral theory of N-body Hamiltonians, Progress in Math. Ser., vol. 135, Birkhäuser, 1996.
- [2] H. L. Cycon, R. G. Froese, W. Kirsch, and B. Simon: Schrödinger operators, with application to quantum mechanics and global geometry, Springer-Verlag, Berlin, 2008.
- [3] N. Raymond: Bound states of the magnetic Schrödinger operator, EMS, 2017.
- [4] M. Reed and B. Simon: Methods of modern mathematical physics, I-IV, Academic Press, New York, 1972–1978.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Spektrální geometrie
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Mgr. David Krejčířík, Ph.D. DSc.

---

### Prerekvizity

Základní znalosti funkcionální analýzy a teorie eliptických parciálních diferenciálních rovnic.

### Stručná anotace předmětu

Cílem přednášky je seznámit studenty se spektrálními metodami parciálních diferenciálních rovnic pocházejících z fyziky a geometrie. Zvláštní důraz bude kladen na geometrii indukované spektrální vlastnosti kvantově-mechanických a vibračních systémů.

### Osnova

1. Motivace. Spektrální problémy v klasické a moderní fyzice. Geometrické aspekty.
2. Definice laplaciánu coby samosdruženého operátoru na Hilbertově prostoru. Dirichletovy, Neumannovy a Robinovy hraniční podmínky. Sobolevovy prostory a eliptická regularita.
3. Glazmanova klasifikace eukleidovských oblastí. Základní spektrální vlastnosti.
4. Kvazi-konické oblasti. Lokalizace esenciálního spektra. Kritikalita versus subkritikalita.
5. Kvazi-omezené oblasti. Kompaktnost Sobolevova vnoření a protipříklady.
6. Omezené oblasti. Symetrické přerovnání a Faber-Krahnova nerovnost. Vlastnosti nodálních množin. Vibrační systémy.
7. Kvazi-válcové oblasti. Geometrií indukované diskrétní spektrum a Hardyho nerovnosti v trubicích. Kvantové vlnovody.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] B. Davies: Spectral theory and differential operators, Cambridge University Press, 1995.
- [2] D. E. Edmunds and W. D. Evans: Spectral theory and differential operators, Oxford University Press, 1987.
- [3] Grigor'yan: Heat kernel and analysis on manifolds, AMS, 2009.
- [4] A. Henrot: Extremum problems for eigenvalues of elliptic operators, Frontiers in Mathematics, Birkhäuser, Basel, 2006.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Divergenční statistické metody
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	Ing. Václav Kůs, Ph.D.

---

### Stručná anotace předmětu

Předmět se zabývá metodami statistiky používajícími informačně-teoretické principy minimálních vzdáleností, disparit a divergencí. Součástí výkladu jsou metrické i nemetrické míry na prostorech pravděpodobnostních distribucí, jejich vlastnosti, vztahy mezi nimi, vzájemná dominance, vlastnosti konsistence a robustnosti příslušných odhadů parametrů statistického modelu.

### Osnova

1. Postavení odhadů s minimální vzdáleností ve statistické teorii rozhodování, ztrátové funkce, rizikové funkce, MD.
2. Kolmogorovská, Lévyho, Cramérova vzdálenost, skórové funkce, phi-divergence (Hellinger, LeCam, Power, ...).
3. Dominační vztahy mezi divergencemi (lokální, stejnoměrná, lokálně stejnoměrná) a jejich aplikace.
4. Věty o existenci odhadů s minimální vzdáleností, konvexní analýza, exponenciální třídy hustot.
5. Konsistence parametrických odhadů s minimální vzdáleností a různé řady konsistencí (Devroye, Yatracos, ...).
6. Kolmogorovská entropie, Vapnik-Červonenkisova dimenze, DV a LDV Stupeň variací rodiny pravd. hustot.
7. Robustnost stat. odhadů a testů, Cramér-Kolmogorov, Hellinger, Lindsay, simulční experimenty ve statistice.
8. Statistické phi-divergenční testy (normality, dobré shody, shody dvou výběrů, HEP aplikace).
9. Neparametrické a semiparametrické konsekvence, diskriminace pravděpodobnostních modelů.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] I. Vajda: Information-Theoretic Methods in Statistics, RR 1834, Praha, ÚTIA AV ČR, 1995.
- [2] L. Pardo: Statistical Inference Based on Divergence Measures, Chapman & Hall/CRC 2006.
- [3] F. Liese et al.; On Divergences and Informations in Statistics and Information Theory, IEEE Trans. on Information Theory, 52 (2006).
- [4] J. Hrabáková, V. Kůs: The Consistency and Robustness of Modified Cramér-Von Mises and Kolmogorov-Cramér Estimators, Communication in Statistics – Theory and Method 42, 3665–3677, 2013.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Pokročilé partie teorie čísel
Rozsah studijního předmětu	13p + 13s
Garant předmětu	prof. Ing. Zuzana Masáková, Ph.D.

---

### Osnova

1. Distribuce mod 1 – Weylovo kritérium, diskrepance.
2. Zlomkové části mocnin reálných čísel – Pisotova a Pisot-Vijayaraghavanova čísla, Salemova čísla.
3. Normální čísla – normalita a stejnoměrné rozdělení, normalita vzhledem k různým bázím, bloková komplexita.
4. Diofantická aproximace – aproximační exponenty, kritérium transcendence.
5. Markovovo spektrum, špatně aproximovatelná čísla.
6. Zobecněné řetězové zlomky – komplexní řetězové zlomky, vícedimenzionální algoritmy.
7. Noetherovské okruhy, Dedekindovy obory.
8. Ideálová teorie – maximální ideály, prvoideály, lomené ideály.
9. Obory s diskrétní valuací, p-adická čísla.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] Y. Bugeaud: *Distribution Modulo One and Diophantine Approximation*, Cambridge Tracts in Mathematics 193, Cambridge, 2012.
- [2] D. Hensley: *Continued fractions*, World Scientific, 2006.
- [3] O. Karpenkov: *Geometry of Continued Fractions, Algorithms and Computation in Mathematics*, Springer, 2013.
- [4] E. B. Burger: *Exploring the Number Jungle: A Journey into Diophantine Analysis*, AMS, 2000.
- [5] H. Li: *An introduction to commutative algebra: from the viewpoint of normalization*, Singapore: World Scientific, 2004.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Iterační metody pro řešení soustav rovnic
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Ing. Jiří Mikyška, Ph.D.

---

### Prerekvizity

Základy matematické analýzy, lineární algebry a numerické matematiky; znalost základů funkcionální analýzy výhodou.

### Stručná anotace předmětu

Cílem kurzu je uvést přehled moderních iteračních metod pro řešení velkých řídkých soustav lineárních algebraických rovnic.

### Osnova

1. Základní iterační metody (Jacobi, Gauss-Seidel, SOR), blokové verze, podmínky konvergence, iterační matice a předpodmínění.
2. Metody Krylovových podprostorů – Arnoldiho algoritmus, GMRES, Lanczosův algoritmus, metoda sdružených gradientů, MINRES, Lanczosova biortogonalizace, BiCGStab, QMR.
3. Předpodmiňování iteračních metod, příklady jednoduchých předpodmínění, neúplné LU rozklady (ILU), resp. neúplné Choleskiho rozklady (IC).
4. Multigradní metody a metody rozkladu na podoblasti (domain decomposition), multigrad jako řešič, multigrad jako předpodmínění pro krylovovské metody.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] J. D. Tebbens, I. Hnětynková, M. Plešinger, Z. Strakoš, P. Tichý: Analýza metod pro maticové výpočty – Základní metody, MatfyzPress 2012.
- [2] A. Greenbaum: Iterative Method for Solving Linear Systems, SIAM Frontiers in Applied Mathematics Series; Vol. 17, 1996.
- [3] J. Liesen, Z. Strakoš: Krylov Subspace Methods: Principles and Analysis, Oxford University Press, 2012.
- [4] P. Wesseling: Introduction to Multigrad Methods, Edwards, 2004.
- [5] M. A. Olshanskii, E. E. Tyrtyshnikov: Iterative Methods for Linear Systems: Theory and Applications, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2014.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Výpočetní metody v termodynamice směsí
Rozsah studijního předmětu	20p + 6cv
Garant předmětu	doc. Ing. Jiří Mikyška, Ph.D.

---

### Prerekvizity

Základy matematické analýzy, lineární algebry a numerických metod; znalost základů termodynamiky je výhodou.

### Stručná anotace předmětu

Cílem předmětu je podat přehled základních numerických metod používaných v termodynamice směsí – vyšetřování stability vícesložkové směsi, výpočet fázové rovnováhy, kritického bodu směsí a přidružené úlohy. Náplň kurzu může být po dohodě s přednášejícím upravena s ohledem na potřeby posluchačů a jejich předchozí znalosti.

### Osnova

1. Základy termodynamiky směsí – základní termodynamické veličiny, první a druhý zákon termodynamiky, termodynamické potenciály.
2. Stavové rovnice reálného plynu (kubické rovnice, kubická rovnice s asociací), výpočet termodynamických veličin ze stavových rovnic.
3. Gibbsovo kritérium fázové stability, podmínky fázové rovnováhy, kritérium kritického bodu.
4. Testování fázové rovnováhy – TPD funkce, metoda postupných aproximací, Newtonova metoda.
5. Výpočet fázové rovnováhy vícesložkové směsi při zadaném tlaku, teplotě a chemickém složení směsí – konvenční metoda, metoda založená na objemu, metoda postupných aproximací, Newtonova metoda.
6. Výpočet kritického bodu vícesložkové směsi.
7. Alternativní formulace výše uvedených úloh – zejména test fázové stability a výpočet fázové rovnováhy při specifikaci VTN (objem, teplota, látková množství) a UVN (vnitřní energie, objem, látková množství).

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] A. Firoozabadi: Thermodynamics and Applications in Hydrocarbon Energy Production, McGraw Hill, 2016.
- [2] M. L. Michelsen, J. Mollerup: Thermodynamic Models: Fundamentals and Computational Aspects, 2nd edition, Tie-Line Publications, 2007.
- [3] L. T. Biegler: Nonlinear Programming – Concepts, Algorithms, and Applications to Chemical Processes, MOS-SIAM Series on Optimization, 2010.
- [4] A. Firoozabadi: Thermodynamics of Hydrocarbon Reservoirs, McGraw Hill, 1999.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Logika v informatice
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	Carles Noguera, Ph.D.

---

### Prerekvizity

Základní znalosti matematické logiky.

### Stručná anotace předmětu

Matematická logika poskytuje flexibilní formální jazyky, různé pojmy důsledku, a řadu matematických výsledků, které se ukazují jako velmi užitečné pro modelování a řešení řady různých problémů v oblasti informatiky. Cílem kurzu je představit základní pojmy z klasických a neklasických logik a ukázat jejich aplikace v informatice. Kurz bude složen z bloků přednášených různými vyučujícími (částečně v angličtině), kteří se aktivně věnují výzkumu v daných oblastech.

### Osnova

1. Klasická výroková a predikátová logika. Tableaux, rezoluce a unifikace.
2. Logické programování. Prolog.
3. Modální logiky a jejich aplikace v informatice.
4. Dynamické logiky a formální verifikace programů.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] M. Ben-Ari. *Mathematical Logic for Computer Science*. Springer, 2012.
- [2] J. van Benthem, P. Blackburn (eds.). *Handbook of Modal Logic*. Elsevier, 2006.
- [3] D. Harel, D. Kozen, J. Tiuryn. *Dynamic logic*. MIT Press, 2000.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Otevřené kvantové systémy
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	Ing. Jaroslav Novotný, Ph.D.

---

### Osnova

1. Popis složených kvantových systémů.
2. Entropie a kvantové korelace.
3. Zobecněná kvantová měření.
4. Kvantové operace a jejich reprezentace.
5. Kvantové dynamické semigrupy.
6. Kvantová řídicí rovnice.
7. Dekohherence, termalizace.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] H.-P. Breuer and F. Petruccione: The theory of open quantum systems, Oxford Univ. Press, 2002.
- [2] M. A. Nielsen, I. L. Chuang: Quantum computation and quantum information, Cambridge Univ. Press, 2002.
- [3] Bengtsson, K. Życzkowski: Geometry of Quantum States, Cambridge Univ. Press, 2006.
- [4] R. Alicki, K. Lendi: Quantum Dynamical Semigroups and Applications, Springer-Verlag, Berlin, 1987.



## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Dynamika křivek a ploch
Rozsah studijního předmětu	13p + 13s
Garant předmětu	Ing. Tomáš Oberhuber, Ph.D.

---

### Stručná anotace předmětu

Předmět se zabývá odvozením základních zákonů pro vývoj křivek, ploch a rozhraní a to v rámci různých formulací pro jejich popis. Jsou popsány i anizotropní modely a dále jsou odvozena vhodná numerická schémata pro diskrétní aproximaci. Jsou také zmíněny některé aplikace.

### Osnova

1. Metody pro simulace dynamiky křivek a ploch – parametrický popis, vrstevnicový popis a metoda fázového pole.
2. Vývoj křivek a ploch podle střední křivosti.
3. Úloha povrchové difúze.
4. Willmorův tok a elastické křivky.
5. Anizotropní modely.
6. Numerická aproximace odvozených úloh.
7. Vyšetřování numerické stability.
8. Aplikace ve zpracování obrazu, materiálových vědách a vícefázovém proudění.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] S. Osher, R. Fedkiw: Level Set Methods and Dynamic Implicit Surfaces, Springer, 2003.
- [2] S. Osher, N. Paragios: Geometric Level Set Methods in Imaging, Visions, and Graphics, Springer, 2003.
- [3] J. Fiala, I. Kraus: Povrchy a rozhraní, ČVUT v Praze, 2009.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Pokročilé partie paralelních algoritmů a architektur
Rozsah studijního předmětu	13p + 13s
Garant předmětu	Ing. Tomáš Oberhuber, Ph.D.

---

### Stručná anotace předmětu

Obsahem přednášky jsou pokročilé techniky vývoje paralelních algoritmů na moderních architekturách. Jsou zmíněny nové vlastnosti jazyka C++ pro rychlý vývoj efektivního kódu. Softwarové nástroje jako CUDA, OpenMP a MPI jsou popsány do větších podrobností a jsou zmíněny nové trendy ve vývoji těchto nástrojů. Pozornost je dále věnována škálovatelnosti na velkých paralelních systémech a návrhu některých paralelních numerických metod.

### Osnova

1. Využití moderních prvků jazyka C++ pro vývoj vysoce výkonného kódu.
2. Novinky v rozhraních CUDA, MPI a OpenMP.
3. Vývoj hybridních paralelních algoritmů kombinujících CUDA/MPI/OpenMP.
4. Škálovatelnost algoritmů na velkých distribuovaných klastrech.
5. Paralelní datové struktury pro GPU (řídke matice, grafy, nestrukturované numerické sítě).
6. Efektivní paralelizace numerických metod (konečné prvky, konečné objemy, lattice Boltzmannova metoda, multigradní metody).
7. Metoda rozkladu oblasti (domain decomposition) pro paralelní řešení parciálních diferenciálních rovnic.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] A. Grama, A. Gupta, G. Karypis, V. Kumar: Introduction to Parallel Computing, Pearson/Addison Wesley, 2003.
- [2] J. Cheng, M. Grossman, T. McKercher: Professional CUDA C programming, John Wiley & Sons, 2014.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Aperiodické struktury
Rozsah studijního předmětu	13p + 13s
Garant předmětu	prof. Ing. Edita Pelantová, CSc.

---

### Osnova

1. Bodové množiny, Delonovy množiny, konečně generované  $Z$ -moduly.
2. Voronoiovy a Delonovy buňky, pokrývací poloměr.
3. Mřížky a krystaly, krystalografická restrikce, kořenové mřížky.
4. Symbolické substituce a inflace, Perronova-Frobeniova věta.
5. Konfigurace a dláždění – repetitivita a konečná lokální složitost.
6. Inflační dláždění – Ammannovo-Benkerovo, Penroseovo, pisotovská a nepisotovská dláždění.
7. Metoda projekce a modelové množiny – cut-and-project schéma, cyklotomické modelové množiny, alternativní konstrukce.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] M. Baake, U. Grimm: Aperiodic Order I : A Mathematical Invitation, Cambridge, 2015.
- [2] The mathematics of Long-Range Aperiodic Order, R. V. Moody Ed., NATO ASI Series, Kluwer, 1997.
- [3] M. Fiedler: Speciální matice a jejich použití v numerické matematice, SNTL, Praha, 1981.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Číselné systémy
Rozsah studijního předmětu	13p + 13s
Garant předmětu	prof. Ing. Edita Pelantová, CSc.

---

### Osnova

1. Re prezentace reálných a komplexních čísel v obecné bázi a obecné abecedě, reprezentovatelnost, jednoznačnost reprezentace, reprezentace 0 a její rozpoznatelnost konečným automatem.
2. Erdösova spektra reálných a komplexních čísel, jejich stejnoměrná diskrétnost a relativní hustota, Fengova věta.
3. Rényiovy rozvoje, Parryho podmínka, rozvoj jedničky – Parryho čísla.
4. Aritmetika v Rényiových rozvojích – čísla s konečným a periodickým rozvojem, vlastnost (F), Schmidtova věta.
5. Rozvoje v záporné bázi – Ito-Sadahirovy soustavy, aritmetika v nich.
6. Kanonické numerační systémy v komplexním oboru a na mřížkách.
7. Algoritmy v číselných soustavách – paralelizace sčítání, on-line násobení, dělení a odmocňování.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] K. Dajani, C. Kraaikamp: Ergodic Theory of Numbers, MAA USA, 2002.
- [2] P. Kůrka: Dynamic of Number Systems, Computation with Arbitrary Precision, Studies in Systems, Decision and Control, volume 59, Springer 2016.
- [3] M. Rigo: Formal Languages, Automata and Numeration Systems 1, 2. Wiley, 2014.
- [4] Ch. Frougny and J. Sakarovitch: Number representation and finite automata, Chapter 2 in Combinatorics, Automata and Number Theory, V. Berthé, M. Rigo (Eds), Encyclopedia of Mathematics and its Applications 135, Cambridge University Press, 2010.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Bayesovské strojové učení
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Ing. Václav Šmídl, PhD.

---

### Stručná anotace předmětu

Předmět se zabývá použitím Bayesovských technik pro určení parametrů metod strojového učení, například klasifikátorů, prediktivních a generativních modelů dat. Jednoduché metody strojového učení trpí problémem přetrénování, kdy model dobře reprezentuje trénovací sadu dat, ale selhává při popisu testovacích dat. Bayesovské nabízejí alternativu ke křížové validaci a umožňují odhad ladících parametrů (hyper-parametrů) modelu. V rámci předmětu budou představeny používané modely dat a techniky pro odhad jejich parametrů.

### Osnova

1. Základní použití Bayesovské statistiky.
2. Lineární modely pro predikci, regularizace, hierarchická apriorná.
3. Nelineární modely pro predikci, neuronové sítě, odhad, regularizace.
4. Gausovské procesy pro predikci, odhadování hyper-parametrů, hierarchické Gausovské procesy.
5. Nelineární generativní modely, neuronová síť typu autoencoder, regularizace metodou variační Bayes.
6. Dynamické modely časových řad, identifikace parametrů, metody rekurzivní identifikace.
7. Klasifikace dat do několika tříd, metody s učitelem a s částečným učitelem (semi-supervised).
8. Bayesovská optimalizace, volba stochastického procesu, odhadování hyperparametrů, akviziční funkce.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] Ch. Bishop: Pattern Recognition and Machine Learning, Springer, 2006.
- [2] C. E. Rasmussen: Gaussian processes in machine learning, pages 63-71, Springer, Berlin, Heidelberg, 2004.
- [3] D. P. Kingma, M. Welling: Auto-encoding variational Bayes, arXiv preprint:1312.6114, 2013.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Klasifikace a identifikace Lieových algeber
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Ing. Libor Šnobl, Ph.D.

---

### Stručná anotace předmětu

Účelem kurzu je seznámení studentů s moderními metodami studia a identifikace Lieových algeber a rozvoj k nim potřebných početních dovedností.

### Osnova

1. Shrnutí základních pojmů z teorie Lieových algeber, struktura poloprostých komplexních Lieových algeber.
2. Invarianty koadjungované reprezentace (Casimirovy invarianty) a způsoby jejich výpočtu.
3. Invariantní charakteristiky Lieových algeber a jejich využití při identifikaci.
4. Explicitní rozklad dané algebry do direktního součtu algeber.
5. Konstrukce Leviho rozkladu.
6. Určení nilradikálu.
7. Struktura nilpotentních Lieových algeber.
8. Řešitelné Lieovy algebry s daným nilradikálem.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] L. Šnobl, P. Winternitz: Classification and Identification of Lie Algebras, AMS, 2014.
- [2] K. Erdmann, M. J. Wildon: Introduction to Lie Algebras, Springer, 2006.
- [3] S. Helgasson: Differential Geometry, Lie Groups, and Symmetric Spaces, AMS, 2001.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Symetrie diferenciálních rovnic
Rozsah studijního předmětu	26p + 13s
Garant předmětu	doc. Ing. Libor Šnobl, Ph.D.

---

### Osnova

1. Akce grupy na varietě, prolongace vektorových polí, prostor jetů.
2. Bodové symetrie diferenciálních rovnic.
3. Využití bodových symetrií při řešení obyčejných diferenciálních rovnic, tj. snížení řádu.
4. Klasifikace tříd ekvivalentních rovnic vzhledem k bodovým symetriím.
5. Využití bodových symetrií při řešení parciálních diferenciálních rovnic, tj. invariantní (neboli samopodobná) řešení.
6. Klasifikace podgrup grupy symetrií, neekvivalentní redukce, význam pojmu řešitelná grupa.
7. Rovnice s nekonečně rozměrnými grupami bodových symetrií.
8. Obecnější grupy symetrií: kontaktní symetrie, podmíněné symetrie.
9. Implementace výpočtů v systému počítačové algebry Maple, její výhody a rizika.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] P. J. Olver: Applications of Lie Groups to Differential Equations, Springer, 2000.
- [2] P. E. Hydon: Symmetry Methods for Differential Equations: A Beginner's, CUP, 2000.
- [3] P. Winternitz: Lie groups and solutions of nonlinear partial differential equations, in: Integrable Systems, Quantum Groups and Quantum Field Theories, Kluwer, Dordrecht, 1993.
- [4] N. Kh. Ibragimov: Group analysis of ordinary differential equations and the invariance principle in mathematical physics, Uspekhi Mat Nauk 47:4, 83–144, 1992; Russian Math. Surveys 47:4, 89–156, 1992.
- [5] B. Hall: Lie Groups, Lie Algebras, and Representations: An Elementary Introduction (Graduate Texts in Mathematics), Springer, 2nd ed. 2015

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Variační metody ve zpracování obrazu
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Ing. Filip Šroubek, Ph.D., DSc.

---

### Prerekvizity

Znalosti základů zpracování obrazu v rozsahu předmětů ROZ1, ROZ2.

### Stručná anotace předmětu

Předmět volně navazuje na základní kurzy ROZ1 a ROZ2. Valnou většinu problémů ze zpracování obrazu lze formulovat jako variační úlohu. Posluchači se nejprve seznámí se základy variačního počtu a numerickými metodami řešící optimalizační problémy. V další části se pozornost soustředí na problémy ze zpracování obrazu, které formulujeme jako optimalizační úlohy a ukážeme si jejich možná řešení na řadě praktických aplikací.

### Osnova

1. Variační počet (historie, Euler-Lagrangeovy rovnice, brachistochrona, Lagrangeova funce, funkce s omezenou variací).
2. Variační Bayesův teorém (maximalizace věrohodnosti nebo aposteriorní pravděpodobnost).
3. Numerické metody řešení (parciální diferenciální rovnice, metoda konečných prvků, metoda konečných diferencí, metoda největšího spádu, konjugovaných gradientů, kvadratické programování).
4. Aproximace funkcí.
5. Registrace obrazu (TPS – thin plate spline).
6. Rekonstrukce obrazu (odstraňování šumu, dekonvoluce, regularizace pomocí totální variace, rekonstrukce medicínských dat).
7. Segmentace obrazu (Mumford-Shah funkcionál, active contours, metoda level-sets, klasifikace).
8. Detekce pohybu (optical flow).

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] G. Aubert, P. Kornprobst: *Mathematical problems in image processing*, Springer, 2002.
- [2] G. H. Golub, C. F. Van Loan: *Matrix Computations*, Johns Hopkins University Press.
- [3] C. M. Bishop: *Pattern Recognition and Machine Learning*, Springer, 2006.
- [4] A. Antoniou, W.-S. Lu: *Practical Optimization: Algorithms and Engineering Applications*, Springer, 2007.
- [5] *Blind Blind Image Deconvolution*, Ed. P. Campisi, K. Egiazarian, CRC Press, 2008.



## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Symbolické dynamické systémy
Rozsah studijního předmětu	13p + 13s
Garant předmětu	doc. Ing. Štěpán Starosta, Ph.D.

---

### Osnova

1. Symbolické dynamické systémy: dynamický pohled.
2. Symbolické dynamické systémy: kombinatorický pohled; posun konečného typu.
3. Substitutivní systémy a jejich vlastnosti.
4. Silná orbitová ekvivalence.
5. Ergodická teorie.
6. Geometrické realizace symbolických dynamických systémů.
7. S-adické systémy; S-adická domněnka.
8. Ropoznatelnost S-adických systémů.
9. S-adické systémy a vícerozměrné řetězové zlomky.
10. Automatické posloupnosti, Cobhamův teorém.
11. L-systémy, jejich vlastnosti a aplikace.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] Combinatorics, Automata and Number Theory, Eds: V. Berthé, M. Rigo, Cambridge, 2010.
- [2] Mathematics of Aperiodic Order, Eds: J. Kellendonk, D. Lenz, J. Savinien, Birkhäuser, 2015.
- [3] K. Dajani, S. Dirksin: A Simple Introduction to Ergodic Theory, Utrecht University Lecture notes, 2008.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Kvantová informace a komunikace 2
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Ing. Martin Štefaňák, Ph.D.

---

### Stručná anotace předmětu

Předmět navazuje na přednášku Kvantová informace a komunikace 1. Prohlubuje získané poznatky o kvantovém provázání a jeho využití v kvantové informaci, rozšiřuje koncept kvantového počítání na systémy spojitých proměnných, a uvádí do moderních partií kvantové teorie informace, jako jsou jednosměrné kvantové počítání a kvantové procházky.

### Osnova

1. Kvantové provázání – základní koncepty.
2. Kvantové provázání – míry provázání.
3. Kvantová teleportace.
4. Kvantové kanály.
5. Purifikační protokoly.
6. Kvantové klonování.
7. Kvantové procházky.
8. Využití kvantových procházek v kvantové informaci.
9. Jednosměrné kvantové počítání.
10. Kvantové počítání se spojitými proměnnými – základní koncepty.
11. Kvantové počítání se spojitými proměnnými – provázání, přenos klíče.
12. Kvantové počítání v lineárních optických sítích.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] M. A. Nielsen, I. L. Chuang: Quantum computation and quantum information, Cambridge Univ. Press, 2002.
- [2] D. Bruss, G. Leuchs: Lectures on Quantum Information, Wiley-VCH, Weinheim, 2007.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Kvantová teorie rozptylu
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	prof. Ing. Pavel Šťovíček, DrSc.

---

### Stručná anotace předmětu

Předmět se zabývá matematicky rigorózním zavedením pojmů, které se používají v kvantové teorii při řešení rozptylové úlohy, a odvozením základních vlastností.

### Osnova

1. Vlnové operátory, pravidlo skládání, úplnost a asymptotická úplnost, Cookova metoda, Pearsonova věta, Kato-Birmanova teorie a přidružené výsledky, operátory mající stopu (trace class).
2. Stacionární fázová metoda.
3. S-matice, definice a základní vlastnosti.
4. Rozvoj podle zobecněných vlastních funkcí, Lippmannova-Schwingerova rovnice, Bornova řada, amplituda rozptylu.
5. Rozklad podle parciálních vln, Jostovy funkce.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] M. Reed, B. Simon: Modern Mathematical Physics III: Scattering Theory, Academic Press, New York, 1979 (kapitola XI).
- [2] F. A. Berezin, M.A. Shubin: The Schrödinger Equation, Kluwer Academic Publisher, Dordrecht, 1991 (kapitola 4).
- [3] M. Schechter: Operator Methods in Quantum Mechanics, Dover Publications Inc., 2003.
- [4] J. Weidmann: Linear Operators in Hilbert Spaces, Springer-Verlag, New York, 2013.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Poruchová teorie operátorů
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	prof. Ing. Pavel Šťovíček, DrSc.

---

### Stručná anotace předmětu

Předmět se zabývá regulární a asymptotickou poruchovou teorií lineárních operátorů.

### Osnova

1. Poruchová teorie v konečnorozměrných prostorech, kořeny polynomů závislých analyticky na parametru a Puiseuxova řada, Rayleigh-Schrödingerova řada, Rellichova věta.
2. Regulární poruchová teorie, analytická operátorová funkce ve smyslu Kato, Kato-Rellichova věta, analytická operátorová funkce typu (A) a typu (B).
3. Asymptotická poruchová teorie, asymptotická řada, příklad anharmonického oscilátoru.
4. Rezonance a Fermiho zlaté pravidlo.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] M. Reed, B. Simon: Modern Mathematical Physics IV: Analysis of Operators, Academic Press, New York, 1978 (kapitola XII).
- [2] T. Kato: Perturbation Theory for Linear Operators, Springer-Verlag, New York, 2013 (kapitola II).
- [3] E. Brian Davies: Linear Operators and their Spectra, Cambridge University Press, Cambridge, 2007.
- [4] J. Weidmann: Linear Operators in Hilbert Spaces, Springer-Verlag, New York, 2013.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Dynamika kontinua
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	Ing. Pavel Strachota, Ph.D.

---

### Prerekvizity

Znalosti základů funkcionální analýzy, teoretické fyziky, diferenciálních rovnic a numerických metod pro jejich řešení.

### Stručná anotace předmětu

Předmět se zabývá matematickým popisem dynamiky kontinua s důrazem na modelování proudění tekutin. V rámci předmětu jsou definovány pojmy z mechaniky kontinua jako tenzor deformace či materiálová derivace, pomocí nichž je možné odvodit zákony zachování hmoty, hybnosti, momentu hybnosti, energie a entropie v integrálním a diferenciálním tvaru pro případ vazké a nevazké tekutiny a lineárního a nelineárního elastického tělesa. Dále jsou diskutovány matematické vlastnosti rovnic proudění a jejich rozšíření o modely turbulence. Nakonec jsou probrány vybrané typové úlohy s analytickým řešením.

### Osnova

1. Základní pojmy mechaniky kontinua: pohyb a deformace kontinua, deformační tenzor a tenzor malých deformací, rozklad deformace, materiálové derivace.
2. Základní zákony zachování (hmoty, hybnosti, energie) a jejich matematická formulace (rovnice kontinuity, Eulerovy a Navierovy-Stokesovy rovnice, rovnice energie).
3. Vlastnosti Navierových-Stokesových rovnic: silná a slabá řešení, otázky existence a jednoznačnosti ve stacionárním a nestacionárním případě.
4. Konstitutivní vztahy. Newtonovská a neneutronovská tekutina.
5. Modely turbulentního proudění.
6. Vybrané úlohy proudění s analytickým řešením.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] Pozrikidis, Constantine. Fluid Dynamics - Theory, Computation, and Numerical Simulation, 3rd ed. Springer, 2017.
- [2] Anderson, John D. Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications. McGraw-Hill, 1995.
- [3] Wilcox David, Turbulence modeling for CFD, D C W Industries, 1993.
- [4] Gurtin, Morton E. An introduction to continuum mechanics. Vol. 158. Academic Pr, 1981.
- [5] Chorin, Alexandre Joel, and Jerrold E. Marsden. A mathematical introduction to fluid mechanics. New York, Springer, 1990.
- [6] Maršík, František. Termodynamika kontinua. Academia, 1999.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Metoda konečných objemů v termodynamice tekutin
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	Ing. Pavel Strachota, Ph.D.

---

### Prerekvizity

Znalosti teorie obyčejných a parciálních diferenciálních rovnic a základních numerických metod pro jejich řešení (metoda konečných diferencí).

### Stručná anotace předmětu

Předmět se zabývá schémata metody konečných objemů v kontextu komplexních úloh vícefázového stlačitelného proudění s dalšími procesy (přestup tepla, fázové přechody, chemické reakce). Nejprve jsou vyložena základní diskrétní a semidiskrétní schémata pro Navierovy-Stokesovy rovnice. Poté jsou diskutována schémata s vyšším řádem přesnosti, schémata vhodná pro diskretizaci zákonů zachování, typy okrajových podmínek a způsoby jejich diskretizace. V další části předmětu je probírána diskretizace systémů rovnic popisujících komplexní procesy, v nichž zásadním jevem je proudění tekutin. Předmět je uzavřen výkladem implementace schémat s využitím paralelizace a přehledem dostupného numerického softwaru založeného na metodě konečných objemů.

### Osnova

1. Formulace systému Navierových-Stokesových rovnic pro stlačitelné proudění ve vektorovém tvaru ve 2D a 3D.
2. Základní schémata metody konečných objemů na strukturovaných a nestrukturovaných sítích, semidiskrétní schéma.
3. Aproximace gradientu na obecných nestrukturovaných sítích.
4. Schémata typu upwind, síť typu staggered-grid.
5. Pokročilá schémata (TVD, ENO/WENO, MUSCL, MPFA), flux limitery.
6. Diskretizace okrajových podmínek metodou konečných objemů.
7. Formulace a diskretizace komplexních systémů rovnic proudění (vícefázové proudění, chemické reakce atd.).
8. Implementace metody, numerický software založený na metodě konečných objemů, paralelizace.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] F. Moukalled, L. Mangani, M. Darwich: The Finite Volume Method in Computational Fluid Dynamics, An Advanced Introduction with OpenFOAM and MATLAB, Springer, 2016.
- [2] T. Barth, M. Ohlberger: Finite volume methods: foundation and analysis. In Encyclopedia of Computational Mechanics, Wiley, 2004.

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Harmonická analýza
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. Jan Vybíral, PhD.

---

### Prerekvizity

Znalosti základů funkcionální analýzy a rovnic matematické fyziky.

### Stručná anotace předmětu

Předmět představí základy harmonické analýzy na Eukleidovských prostorech. Probíraná témata zahrnují maximální operátor, základní interpolační věty, Hilbertovu transformaci, váhové nerovnosti, prostory  $H^1$  a  $BMO$ , singulární integrální operátory a Littlewood-Paleyho teorii. Dále bude kladen důraz na souvislosti s komplexní analýzou a analýzou parciálních diferenciálních rovnic.

### Osnova

1. Maximální operátor.
2. Základní interpolační věty.
3. Hilbertova transformace.
4. Váhové nerovnosti.
5. Prostory  $H^1$  a  $BMO$ .
6. Singulární integrální operátory.
7. Littlewood-Paleyho teorie.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] E. M. Stein: Singular integrals and differentiability properties of functions, Princeton Mathematical Series, No. 30, Princeton University Press, Princeton, N. J., 1970.
- [2] E. M. Stein and G. Weiss: Introduction to Fourier analysis on Euclidean spaces, Princeton Mathematical Series, No. 32, Princeton University Press, Princeton, N. J., 1971.
- [3] J. Duoandikoetxea: Fourier Analysis, Crm Proceedings & Lecture Notes, American Mathematical Society, 2001.
- [4] L. Grafakos, Classical Fourier Analysis, 3rd edition, Springer, 2014

## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Stochastické systémy
Rozsah studijního předmětu	26p
Garant předmětu	doc. RNDr. Jan Vybíral, Ph.D.

---

### Prerekvizity

Znalosti základů funkcionální analýzy, rovnic matematické fyziky a variačních metod.

### Stručná anotace předmětu

Cílem předmětu je představit pokročilé metody modelování stochastických systémů. Úvod kurzu obstará teorie markovských náhodných procesů jako matematických modelů pro stochastické systémy, tj. dynamické systémy ovlivněné náhodou. Cílem je zejména sledovat limitní chování v čase pro různé procesy ať již s diskrétním, nebo spojitým časem.

### Osnova

1. Úvod do stochastických systémů, homogenita, stacionarita, analýza náhodné procházky a simulace ruinování hráče.
2. Diskrétní Markovské řetězce, pravděpodobnosti přechodu, Chapman-Kolmogorov theorem, klasifikace stavů, trvalé a přechodné stavy, Ergodic theorem, stacionární rozdělení, pravděpodobnosti pohlcení, procesy větvení, Ehrenfestův a Bernoulliho proces.
3. Markovské procesy se spojitým časem, intenzity přechodu, Kolmogorovy rovnice, limitní pravděpodobnosti a stacionární rozdělení.
4. Procesy vzniku a zániku, Procesy obnovy.
5. Poissonův proces, Coxův Dvojtě-stochastický proces, Nehomogení a filtrovaný Poissonův proces.
6. Procesy hromadné obsluhy, teorie front.
7. Metoda Markov Chain Monte Carlo.
8. Wienerův proces, vlastnosti trajektorií.
9. Základy stochastické analýzy, limita, derivace, integrál náhodného procesu.
10. Karhunen-Loeve rozklad pro obecný náhodný proces a pro Wienerův proces.
11. Difúzní procesy, zpětná Kolmogorova rovnice, Fokker-Planckova rovnice.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

- [1] G. Grimmett, D. Stirzaker: Probability and Random Processes, Oxford Uni. press, 2001.
- [2] N. Privault: Understanding Markov Chains: Examples and Applications, Springer, 2013.
- [3] M. Lefebvre: Applied Stochastic Processes, Springer, 2000.
- [4] G. A. Pavliotis: Stochastic Processes and Applications, Springer, 2014.



## Charakteristika studijního předmětu

---

Název studijního předmětu	Speciální seminář ze zpracování obrazu
Rozsah studijního předmětu	26s
Garant předmětu	doc. RNDr. Barbara Zitová, Ph.D.

---

### Prerekvizity

Znalosti základů zpracování obrazu v rozsahu předmětů ROZ1, ROZ2.

### Stručná anotace předmětu

Referativní seminář z digitálního zpracování obrazu na základě zadané nebo konzultované literatury, většinou článků z mezinárodních časopisů z oboru. Studenti se účastní přednesením seminární přednášky na zadané téma z oblasti digitálního zpracování obrazu během kurzu. Témata přednášek pokrývají současné pokročilé přístupy. Přednášky mezinárodních hostů.

### Studijní literatura a studijní pomůcky

Časopisy:

- Pattern Recognition,
- Pattern Recognition Letters,
- IEEE Transactions on Image Processing,
- International Journal of Computer Vision,
- IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence.

