

Metode strojnog učenja u predviđanju najniže svojstvene vrijednosti Laplaceovog operatora

Diplomski rad

Davor Penzar

Voditelj rada: prof. dr. sc. Luka Grubišić

Matematički odsjek
Prirodoslovno-matematički fakultet
Sveučilište u Zagrebu

Zagreb, 28. veljače 2020.

- ① Svojstvene vrijednosti i svojstvene funkcije Laplaceovog operatora
- ② Poligoni
- ③ Skup podataka
- ④ Razvijeni modeli
- ⑤ Rezultati
- ⑥ Svršetak

Odjeljak 1

Svojstvene vrijednosti i svojstvene funkcije
Laplaceovog operatora

Svojstvene vrijednosti i svojstvene funkcije Laplaceovog operatora

Definicija

u je svojstvena funkcija, a λ svojstvena vrijednost Laplaceovog operatora na nepraznom, otvorenom i ograničenom skupu Ω t. d. je $\partial\Omega$ po djelovima gladak ako je

- $u: \overline{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$ neprekidna na $\overline{\Omega}$, dvaput diferencijabilna na Ω
- $\lambda \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$

i vrijedi

$$\begin{cases} -\Delta u = \lambda u, & \text{na } \Omega, \\ u = 0, & \text{na } \partial\Omega \end{cases} \quad (1.1)$$

Spektar skupa Ω je

$$\sigma(\Omega) := (\lambda_i)_{i \in \mathbb{N}_+}, \quad 0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_k \leq \dots \uparrow +\infty$$

Normalizacija skupa

Teorem

Neka su $\Omega_1, \Omega_2 \subseteq \mathbb{R}^n$ proizvoljni t. d. zadovoljavaju uvjete iz definicije svojstvenih vrijednosti i svojstvenih funkcija Laplaceovog operatora.

Tada vrijedi

$$\Omega_1 \sim \Omega_2 \implies d^2(\Omega_1) \sigma(\Omega_1) = d^2(\Omega_2) \sigma(\Omega_2).$$

Monotonost svojstvenih vrijednosti Laplaceovog operatora

Propozicija

Neka su $\Omega_1, \Omega_2 \subseteq \mathbb{R}^n$ proizvoljni t. d. zadovoljavaju uvjete iz definicije svojstvenih vrijednosti i svojstvenih funkcija Laplaceovog operatora.
Tada vrijedi

$$\Omega_1 \subseteq \Omega_2 \implies \forall k \in \mathbb{N}_+ (\lambda_k(\Omega_1) \geq \lambda_k(\Omega_2)).$$

To jest, za svaki $k \in \mathbb{N}_+$ parcijalno preslikavanje
 $\lambda_k: \mathcal{P}(\mathbb{R}^n) \rightharpoonup (0, +\infty)$ je padajuće s obzirom na inkluziju.

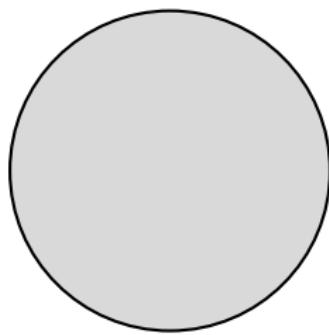
Neprekidnost svojstvenih vrijednosti Laplaceovog operatora

Teorem

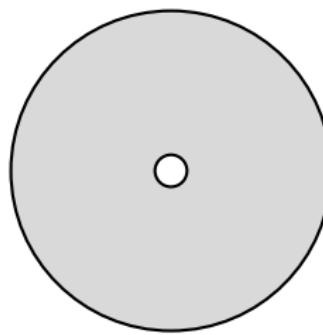
Za svaki $k \in \mathbb{N}_+$ parcijalno preslikavanje $\lambda_k : \mathcal{P}(\mathbb{R}^n) \rightharpoonup (0, +\infty)$ je neprekidno. [2, str. 418–424]

Neprekidnost svojstvenih vrijednosti Laplaceovog operatora

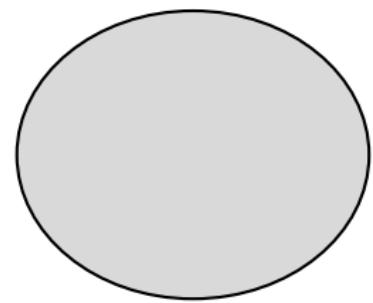
Značenje male razlike domena u kontekstu zadaće (1.1)



Krug



Kružni vijenac



Prava elipsa

Odjeljak 2

Poligoni

Poligoni

Definicija

$P \subseteq \mathbb{R}^2$ je *poligon* ako

- $\text{Int } P \neq \emptyset$
- P je ograničen
- ∂P je jednostavna zatvorena krivulja
- postoje $k \in \mathbb{N}$ i točke $V_1, V_2, \dots, V_k \in \mathbb{R}^2$ t. d.

$$\partial P = \overline{V_1 V_2} \cup \overline{V_2 V_3} \cup \cdots \cup \overline{V_{k-1} V_k} \cup \overline{V_k V_1},$$

pri čemu dužine u gornjoj uniji u parovima nemaju zajedničkih točaka osim eventualno krajnjih— P je *k-gon*

P je *pravi k-gon* ako je $k \in \mathbb{N}$ najmanji koji zadovoljava prethodne uvjete

Karakterizacija poligona pravim vrhovima

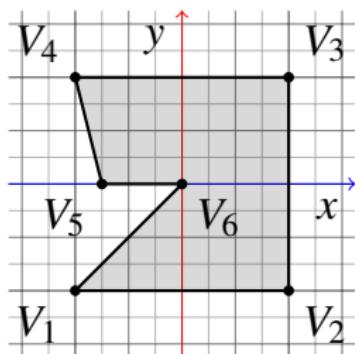
Teorem

Za svaki poligon $P \subseteq \mathbb{R}^2$

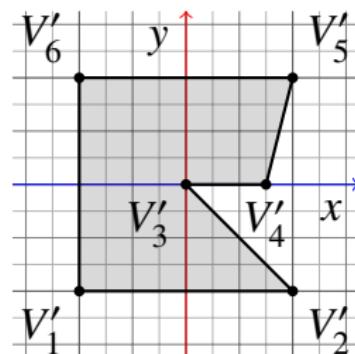
- ① postoje jedinstveni $k \in \mathbb{N}$, $k \geq 3$, i u parovima različite točke $V_1, V_2, \dots, V_k \in \mathbb{R}^2$ t. d. je P pravi k -gon s vrhovima V_1, V_2, \dots, V_k ,
- ② uređena k -torka $(V_{i_1}, V_{i_2}, \dots, V_{i_k} \in \mathbb{R}^2) \in \mathbb{R}^{2 \times k}$ vrhova iz prethodne točke tako da se svaki pojavljuje točno jednom i da su oni poredani u pozitivnom smjeru jedinstvena je do na izbor vrha V_{i_1} .

Karakterizacija poligona pravim vrhovima

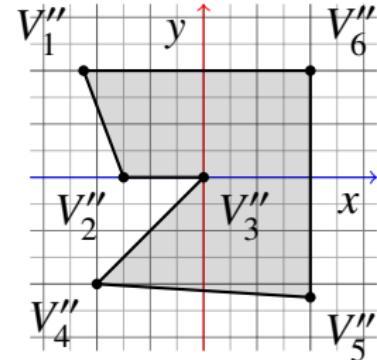
Problemi



Originalni poligon



Refleksija oko ordinate



Mali pomak vrhova

Singularne vrijednosti duljina stranica i vanjskih kutova poligona

Definicija

- $P \subseteq \mathbb{R}^2$ poligon
- $V_1, V_2, \dots, V_k \in \mathbb{R}^2$ u parovima različiti vrhovi enumerirani u pozitivnom smjeru, označimo $V_0 := V_k$ i $V_{k+1} := V_1$
- za svaki $i \in \{1, 2, \dots, k\}$ označimo

$$l_i := d(V_i, V_{i+1})$$

φ_i := vanjski kut u vrhu V_i

Singularne vrijednosti duljina stranica i vanjskih kutova poligona

Definicija

Singularne vrijednosti duljina stranica poligona P singularne su vrijednosti matrice

$$L = \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & \cdots & l_k \\ l_k & l_{k-1} & \cdots & l_1 \\ l_2 & l_3 & \cdots & l_1 \\ l_1 & l_k & \cdots & l_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ l_k & l_1 & \cdots & l_{k-1} \\ l_{k-1} & l_{k-2} & \cdots & l_k \end{pmatrix}$$

Singularne vrijednosti duljina stranica i vanjskih kutova poligona

Definicija

Singularne vrijednosti vanjskih kutova poligona P singularne su vrijednosti matrice

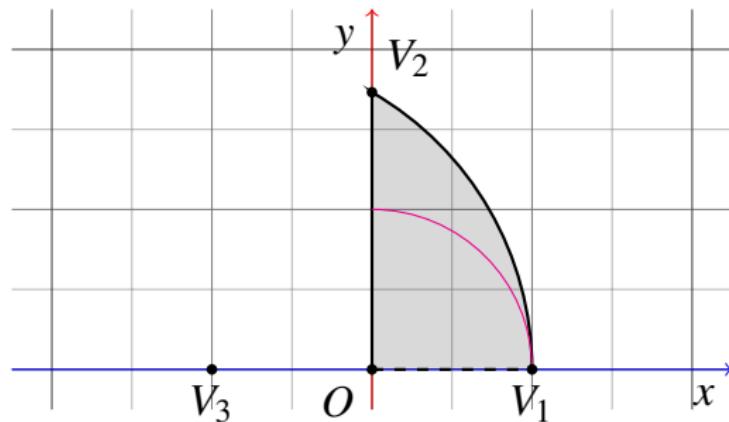
$$\Phi = \begin{pmatrix} \varphi_1 & \varphi_2 & \cdots & \varphi_k \\ \varphi_k & \varphi_{k-1} & \cdots & \varphi_1 \\ \varphi_2 & \varphi_3 & \cdots & \varphi_1 \\ \varphi_1 & \varphi_k & \cdots & \varphi_2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_k & \varphi_1 & \cdots & \varphi_{k-1} \\ \varphi_{k-1} & \varphi_{k-2} & \cdots & \varphi_k \end{pmatrix}$$

Singularne vrijednosti duljina stranica i vanjskih kutova poligona

Obilježja

- invarijantne na izometrije
- pri skaliranju:
 - singularne vrijednosti duljina stranica proporcionalne dijametru
 - singularne vrijednosti vanjskih kutova konstantne
- neprekidne s obzirom na koordinate vrhova

Karakterizacija trokuta

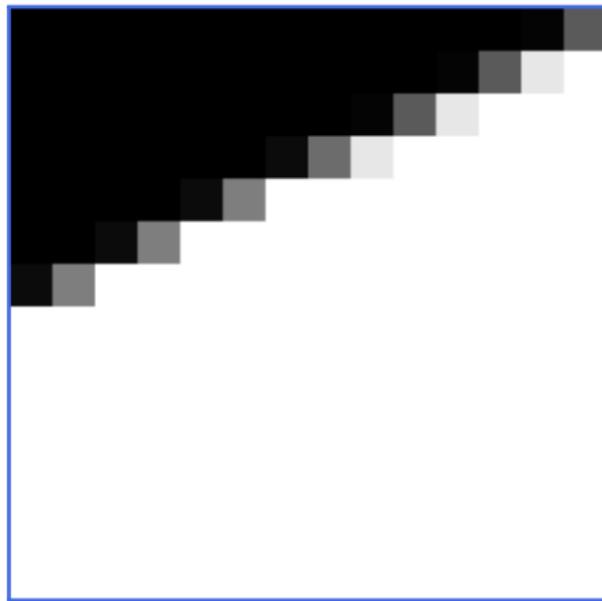


$$D_{\Delta} := \left\{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 : 0 \leq x < \frac{1}{2} \wedge 0 < y \leq \sqrt{\frac{3}{4} - x - x^2} \right\} \subseteq \mathbb{R}^2$$

Vizualizacija poligona



Cijeli trokut



Dio uz rub trokuta

Vizualizacija poligona

Dubina skupa

Definicija

Dubina skupa $S \subseteq \mathbb{R}^n$ funkcija je $D_S: \mathbb{R}^n \rightarrow [0, +\infty]$ t. d.

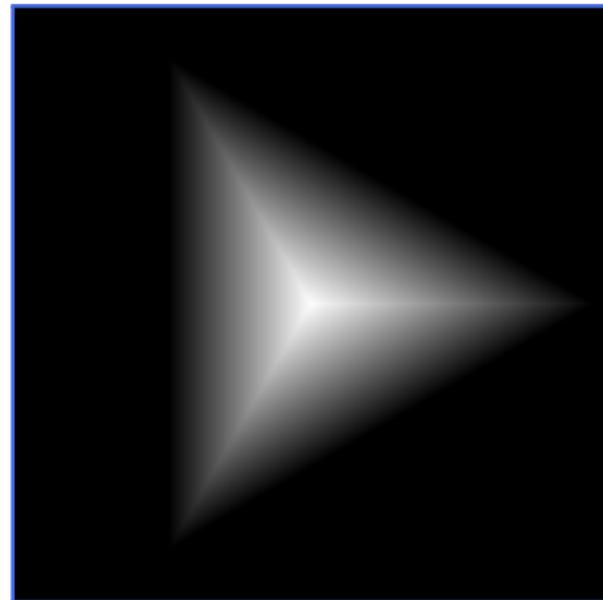
$$D_S(x) = \begin{cases} d(x, \partial S) & x \in \text{Int } S \\ 0 & \text{inače} \end{cases}, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n,$$

gdje je

$$d(x, \partial S) = \begin{cases} \inf(\{d(x, y) : y \in \partial S\}) & \partial S \neq \emptyset \\ +\infty & \text{inače} \end{cases}, \quad \forall x \in \mathbb{R}^n$$

Vizualizacija poligona

Dubina skupa



Vizualizacija dubine trokuta

Odjeljak 3

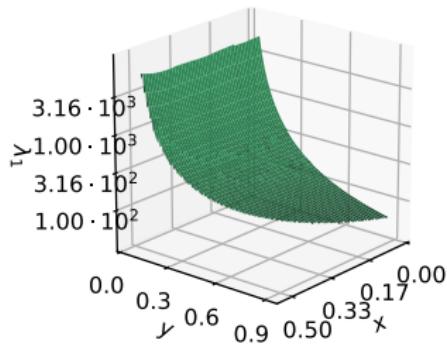
Skup podataka

Izrada skupa podataka

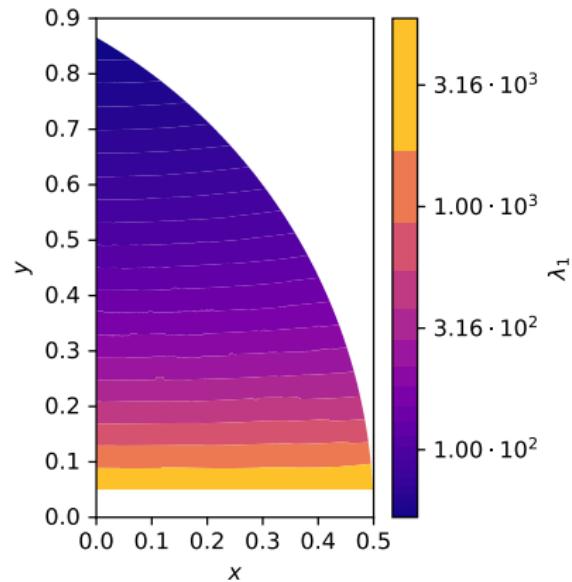
Proučavavani su samo trokuti

- ① diskretizacija $[0, \frac{1}{2}] \times [0, \frac{\sqrt{3}}{2}] \supseteq D_{\Delta}$ na 1001×1733 točaka
- ② samo točke iz D_{Δ} — ukupno 1 129 741 točaka
 - za vizualni ulaz:
 - ① refleksija
 - ② 10 pseudoslučajnih rotacija \Rightarrow ukupno 20 puta više trokuta
- ③ uravnovešenje skupa podataka — oko 100 000 točaka
- ④ trening : validacija : test $\approx 70\% : 15\% : 15\%$
 - za linearnu regresiju: $\text{test} \leftarrow \text{validacija} \cup \text{test}$

Svojstvena vrijednost Laplaceovog operatora na trokutima

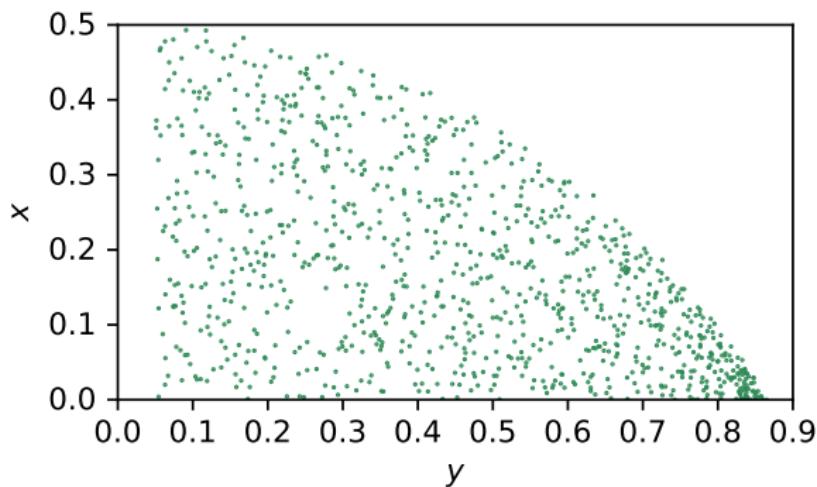


Prostorni pogled



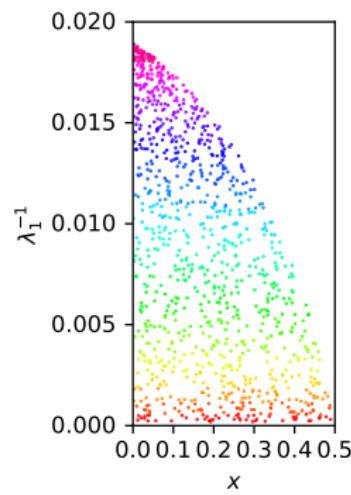
Tlocrtni pogled

Uravnoteženje skupa podataka

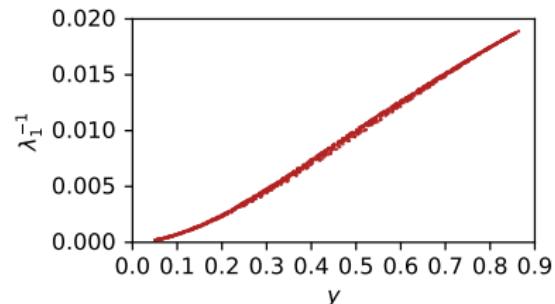


Eksploratorna analiza skupa podataka

Ovisnost o koordinatama karakteristične točke



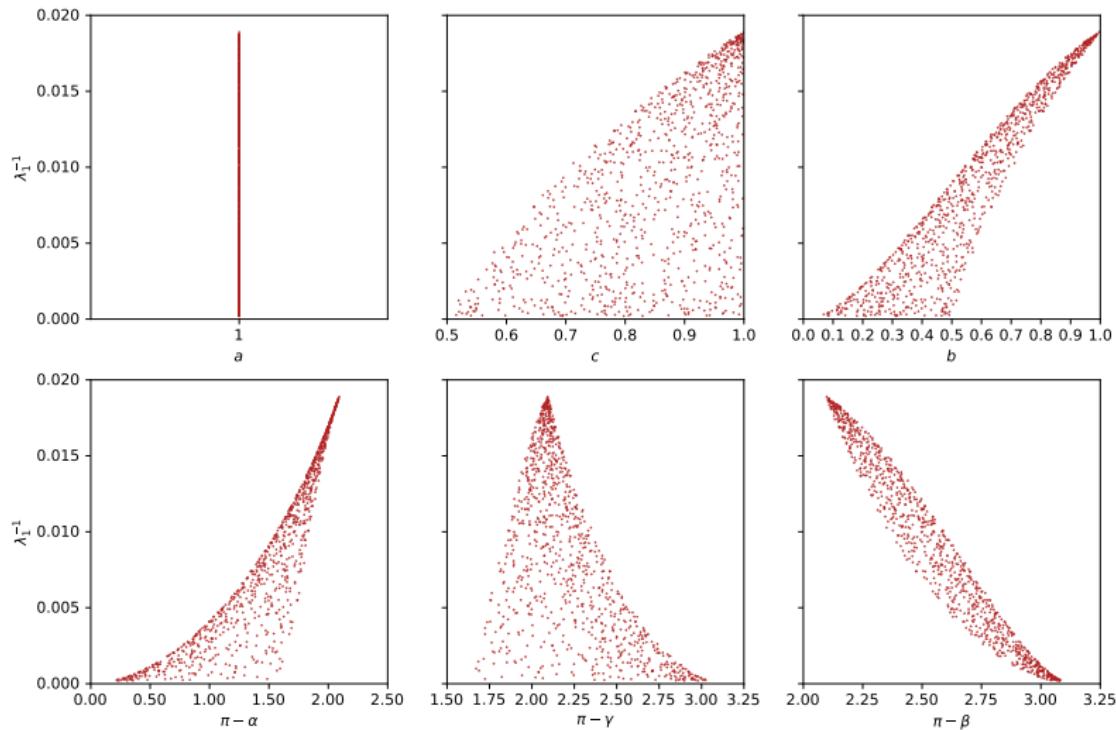
Apscisa



Ordinata

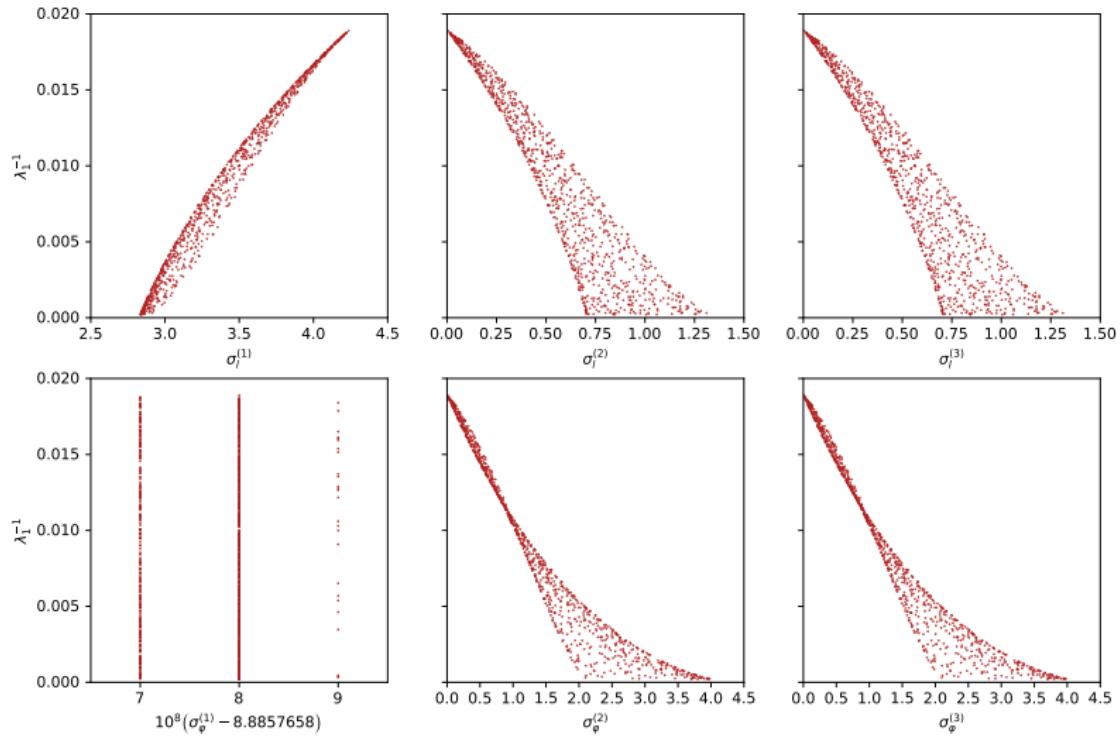
Eksploratorna analiza skupa podataka

Ovisnost o duljinama stranica i o vanjskim kutovima



Eksploratorna analiza skupa podataka

Ovisnost o singularnim vrijednostima duljina stranica i vanjskih kutova



Odjeljak 4

Razvijeni modeli

Polinomi – linearna regresija

(uz konvenciju $0^0 := 1$)

$$P_n(x, y) = \sum_{k=0}^n \sum_{i=0}^k a_{i,k-i}^{(n)} x^i y^{k-i}$$

- ① $\Delta ABC \mapsto (x, y) \in D_\Delta$
- ② $n \in \mathbb{N}$ —izbor metodom pokušaja i pogrešaka
- ③ $a_{ij}^{(n)} \in \mathbb{R}$ —izbor linearnom regresijom
- ④ $\lambda_1^{-1}(\Delta ABC) \approx P_n(x, y)$ —izbor \cdot^{-1} metodom pokušaja i pogrešaka

Najbolji $n \in \{4, 5\}$

Neuronska mreža

Ulazni podatci

- ① duljine stranica u silaznom poretku—zapravo samo b, c
- ② vanjski kutovi u uzlaznom poretku
- ③ singularne vrijednosti duljina stranica u silaznom poretku—zapravo samo $\sigma_l^{(1)}, \sigma_l^{(2)}$
- ④ singularne vrijednosti vanjskih kutova u silaznom poretku—zapravo samo $\sigma_\varphi^{(2)}$

Neuronska mreža

Arhitektura

ulaz: 8 čvorova

- ① 16 čvorova— $ReLU$
- ② 32 čvora— $ReLU$
- ③ 64 čvora— $ReLU$
- ④ 4 čvora— $ReLU \circ x \mapsto x^{-1}$
- ⑤ 256 čvorova— $ReLU$

izlaz: 1 čvor

Neuronska mreža

Treniranje

- *adadelta*, inicijalna brzina 1
- *MSE*
- 2000 epoha

Konvolucijska neuronska mreža

Inspirirano modelom Millsa, Spannera i Tamblyna iz [9] za drugačiji problem diferencijalne jednadžbe

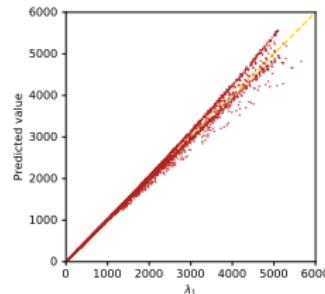
- ulazni podatci: vizualizacija dubine trokuta rezolucije 128×128 —u [9] je rezolucija 256×256
- arhitektura:
 - 6 redukcijskih slojeva, između po 2 neredukcijska sloja—u [9] je 7 redukcijskih slojeva
 - zadnji skriveni sloj s 1024 čvora
 - ostali hiperparametri isti kao u [9]
- treniranje:
 - *adadelta*, inicijalna brzina 10^{-3}
 - *MSE*
 - 50 epoha—u [9] je 1000 epoha

Odjeljak 5

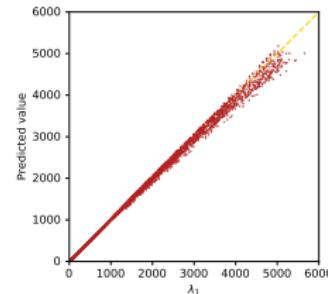
Rezultati

Uspješnost modela

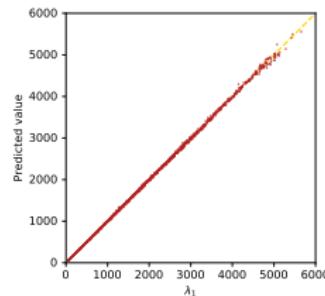
Na cijelom testnom skupu podataka



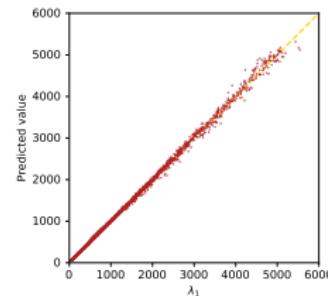
P_4



P_5



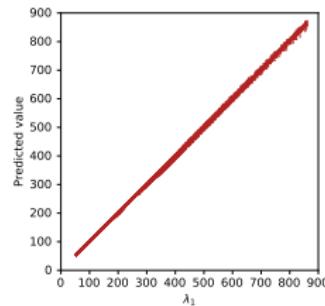
NN



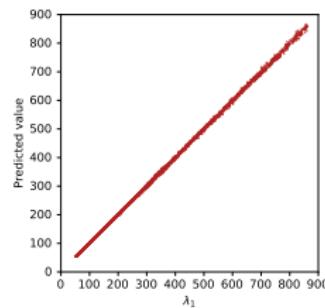
CNN

Uspješnost modela

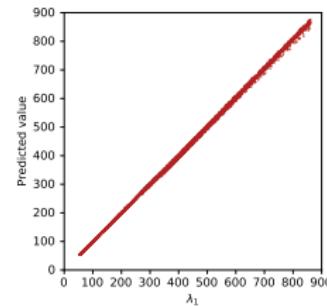
Na donjih 90 % vrijednosti



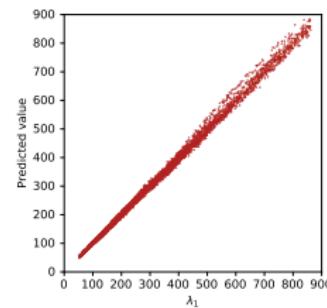
P_4



NN



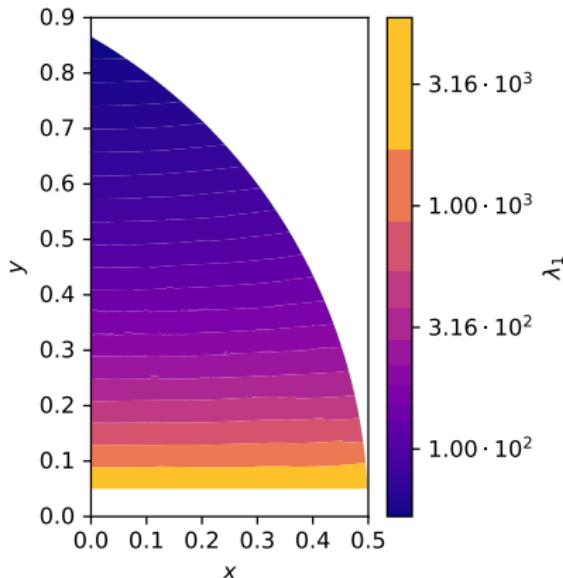
P_5



CNN

Uspješnost modela

Zastupljenost donjih 90 % vrijednosti



Granica po ordinati za donjih
95 % $y \in [0,0885, 0,0965]$
90 % $y \in [0,1295, 0,1365]$

Brzina modela

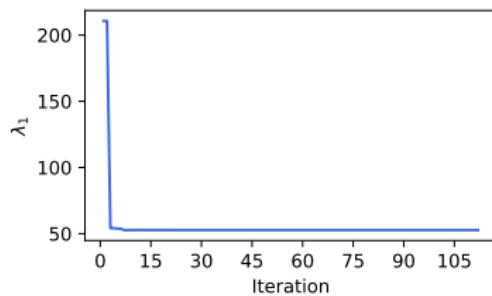
| Područje | Opis | Relativno vrijeme |
|-----------------|-------------------|-------------------|
| Numerički račun | <i>FEM</i> | 1,000 000 |
| Preprocesiranje | Deskripcija | 0,000 190 |
| | Uređenje | 0,000 085 |
| | Karakterizacija | 0,000 057 |
| | <i>SVD</i> | 0,005 082 |
| Predviđanje | Polinom stupnja 4 | 0,000 456 |
| | Polinom stupnja 5 | 0,000 728 |
| | Neuronska mreža | 0,001 069 |

Minimizacija najmanje svojstvene vrijednosti Laplaceovog operatora

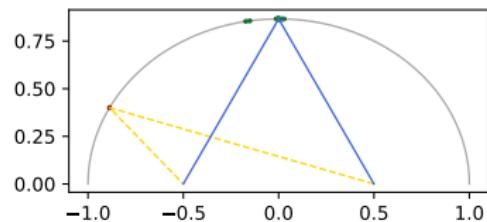
- ① varijabla $\varphi \in (0, \pi)$
- ② vrhovi $A = \left(\frac{1}{2}, 0\right)$, $B = \left(\cos \varphi, \frac{\sqrt{3}}{2} \sin \varphi\right)$, $C = \left(-\frac{1}{2}, 0\right)$
 - opseg: 3
 - poznata stranica: $|\overline{CA}| = 1$
- ③ minimizacija $\lambda_1 (\triangle ABC)$ po φ
- ④ cilj $\varphi^* = \frac{\pi}{2}$
 - stranice: $|\overline{AB^*}| = |\overline{B^*C}| = |\overline{CA}| = 1$
 - $\lambda_1^* \approx 52,7248$

Minimizacija najmanje svojstvene vrijednosti Laplaceovog operatora

Polinom stupnja 4



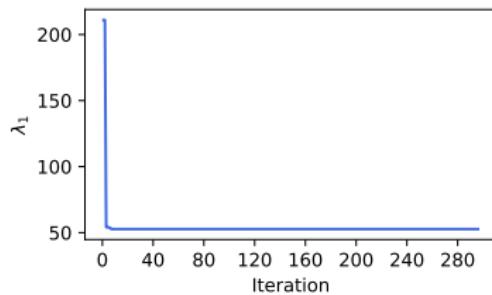
Konvergencija predviđene vrijednosti



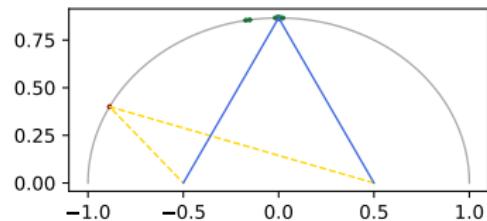
Konvergencija vrha

Minimizacija najmanje svojstvene vrijednosti Laplaceovog operatora

Polinom stupnja 5



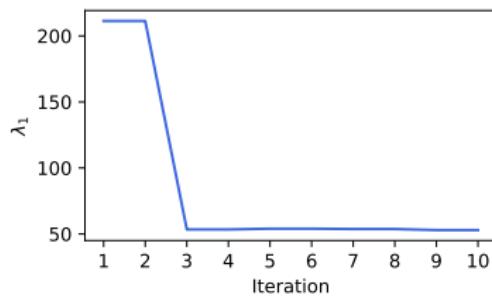
Konvergencija predviđene vrijednosti



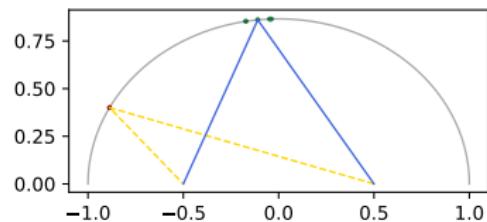
Konvergencija vrha

Minimizacija najmanje svojstvene vrijednosti Laplaceovog operatora

Neuronska mreža



Konvergencija predviđene vrijednosti

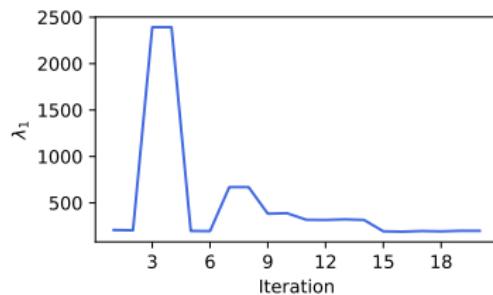


Konvergencija vrha

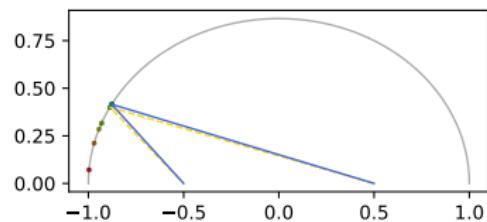
Minimizacija najmanje svojstvene vrijednosti

Laplaceovog operatora

Konvolucijska neuronska mreža



Konvergencija predviđene
vrijednosti



Konvergencija vrha

Odjeljak 6

Svršetak

Bibliografija I

-  C. Blatter, Rigorous Definition of Positive Orientation of Curve in \mathbb{R}^n , 2012, dostupno na <https://math.stackexchange.com/questions/218849/rigorous-definition-of-positive-orientation-of-curve-in-mathbb{R}n> (prosinac 2019.).
-  R. Courant, D. Hilbert, *Methods of Mathematical Physics*, sv. 1, Interscience Publishers, Inc., New York, 1953.
-  R. Donoso Benguria, Dirichlet Eigenvalue, Encyclopedia of Mathematics, dostupno na https://www.encyclopediaofmath.org/index.php/Dirichlet_eigenvalue (rujan 2019.).
-  K. Eidolon, G. Oman, *A Short Proof of the Bolzano-Weierstrass Theorem*, The College Mathematics Journal 48.4 (2017), 288–289.

Bibliografija II



Z. Fattah, M. Berrada, *Eigenvalues of Dirichlet Laplacian within the Class of Open Sets with Constant Diameter*, 2018, arXiv: 1801.04133 [math.SP], (listopad 2019.).



FreeFEM Documentation. Release 4.2.1, 4. izdanje, 2019, dostupno na

<https://doc.freefem.org/introduction/index.html> (prosinac 2019.).



G. Harris, C. Martin, *The Roots of a Polynomial Vary Continuously as a Function of the Coefficients*, Proceedings of the American Mathematical Society 100.2 (1987), 390–392.



R. S. Laugesen, B. Siudeja, *Dirichlet Eigenvalue Sums on Triangles Are Minimal for Equilaterals*, Communications in Analysis and Geometry 19.5 (2011), 855–885.

Bibliografija III



K. Mills, M. Spanner, I. Tamblyn, *Deep Learning and the Schrödinger Equation*, 2017, arXiv: 1702.01361 [cond-mat.mtrl-sci], (listopad 2019.).



Multiphysics Cyclopedia, Eigenfrequency Analysis, COMSOL Multiphysics, 2018, dostupno na <https://www.comsol.com/multiphysics/eigenfrequency-analysis> (listopad 2019.).



B. Nica, *The Mazur-Ulam Theorem*, *Expositiones Mathematicae* 30.4 (2013), 397–398.



M. Reuter, F.-E. Wolter, M. Shenton, M. Niethammer, *Laplace-Beltrami Eigenvalues and Topological Features of Eigenfunctions for Statistical Shape Analysis*, *Computer-Aided Design* 41.10 (2009), 739–755.

Bibliografija IV

-  **B. Siudeja**, *Isoperimetric Inequalities for Eigenvalues of Triangles*, Indiana University Mathematics Journal 59.3 (2010), 1097–1120.
-  **H. Tverberg**, *A Proof of the Jordan Curve Theorem*, Bulletin of the London Mathematical Society 12.1 (1980), 34–38.
-  **E. W. Weisstein**, Curve orientation, Wolfram MathWorld, dostupno na <http://mathworld.wolfram.com/CurveOrientation.html> (prosinac 2019.).
-  **E. W. Weisstein**, Polygon, Wolfram MathWorld, dostupno na <http://mathworld.wolfram.com/Polygon.html> (listopad 2019.).
-  **M. Žepić**, *Latinsko-hrvatski rječnik*, (Lj. Tomljenović-Biškupić, ur.), 11. izdanje, Školska knjiga, Zagreb, 1991.