ПРАВИТЕЛЬСТВО РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ ФГАОУ ВО НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ «ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ»

Факультет компьютерных наук Образовательная программа «Прикладная математика и информатика»

Отчет о программном проекте на тему: ПО для топологического анализа данных (промежуточный, этап 1) Выполнил: С.А.Корняков Студент группы БПМИ225 И.О.Фамилия 29.01.2025 Дата Принял: Качан Олег Николаевич Руководитель проекта Имя, Отчество, Фамилия Должность, ученое звание Лаборатория ИИ Сбербанка Место работы (Компания или подразделение НИУ ВШЭ) 2025 Дата проверки Оценка (по 10-ти бальной шкале) Подпись

Содержание

1	Вве	дение		3
2	Тре	бовані	ия к проекту	4
	$2.\overline{1}$	Функт	циональные требования	4
		2.1.1	Генерация комплекса Вьеториса-Рипса по облаку точек	4
		2.1.2	Симплекс	4
		2.1.3	Симплициальный комплекс	5
		2.1.4	Фильтрация симплициального комплекса	5
		2.1.5	Столбцы и матрицы индексов	5
		2.1.6	Столбцы для быстрого сложения	5
		2.1.7	Диаграмма устойчивости	6
		2.1.8	Матрица Ходжа-Лапласа	6
		2.1.9	Алгоритмы редуцирования	6
		2.1.10	Алгоритм поиска persistent HH	6
	2.2	Нефун	нкциональные требования	6
		2.2.1	Описание программы и используемых библиотек	6
		2.2.2	Используемые библиотеки	6
		2.2.3	Политика обработки ошибок	7
3	Теория и описание алгоритмов			7
	3.1	Дизай	н решения	7
	3.2	Взаим	ю <mark>действие</mark>	7
	3.3	Тестир	рование	7
A	А Глоссарий			8
\mathbf{C}	Список литературы			9

Аннотация

Цель работы заключается реализации библиотеки построения симплициальных комплексов из облаков точек (например, комплекса Вьеториса — Рипса), их фильтраций, вычисления диаграмм устойчивости с помощью новейших алгоритмов редуцирования матриц инцидентности (например, алгоритм DoubleTwist), а также вычисления собственных векторов матрицы Ходжа-Лапласа, чтобы идентифицировать устойчивые гомологические классы в пространстве. Библиотека будет поддерживать два режима: самый быстрый и модульный для экспериментов.

1 Введение

Для ознакомления с основными понятиями см. А

Современный объём информации, которая нуждается в анализе, обработке и сравнении друг с другом, ставит новые вызовы для учёных и исследователей в области топологического анализа. Уже давно изучен базовый математический аппарат и имплементированы библиотеки, которые могут строить симплициальные комплексы и вычислять их диаграммы устойчивости, но они постепенно устаревают. На замену им приходят новые теории и алгоритмы, которые могут на порядок превосходить прежние алгоритмы по скорости.

Задача проекта заключается в создании библиотеки, которая реализует и комбинирует алгоритмы, собранные с множества новейших статей, для ускоренного и параллельного вычисления симплициальных комплексов, диаграмм устойчивости и собственных векторов матрицы Ходжа-Лапласа. Библиотека будет иметь два направления:

- 1. Оптимизированная под конкретные алгоритмы для наибыстрейшего вычисления. Это позволит сравнить данную имплементацию с другими библиотеками на скорость
- 2. Модульная, с максимальным количеством шаблонов и абстракций. Данная версия необходима в научных и исследовательских целях для экспериментов над гипотезами. Она позволит быстро и удобно реализовывать нужные для исследований алгоритмы и объекты почти наравне с языком программирования Python

В поставленные задачи входит:

Изучение теории

Изучить теорию, стоящую за симплициальными комплексами, гомологическими группами, диаграммами устойчивости и гармоническими пространствами. Исследовать алгоритмы построения комплексов, оптимальные для их хранения структуры данных, фильтрацию, построение матрицы инцидентности, её редуцирование с целью получения диаграмм устойчивости, построения матрицы Ходжа-Лапласа и вычисления собственных векторов.

Реализация необходимых объектов

Имплементировать на языке программирования C++ различные объекты для постройки нужного окружения для вычисления топологических объектов:

- Симплекс
- Симплициальный комплекс, который хранится в виде дерева симплексов [3]
- Фильтрация симплициального комплекса
- Столбец и матрица индексов симппексов в отфильтрованном симплициальном комплексе
- Стоблец индексов для быстрого сложения
 - 1. В виде обычного вектора индексов
 - 2. В виде дерева битов [2]
- Диаграмма устойчивости
- Матрица Ходжа-Лапласа [6]

Имплементация алгоритмов

Написать алгоритмы на полученных объектах:

- Быстрое построение комплекса Вьеториса-Рипса над облаком точек [8]
- Редуцирование матрицы инцидентности фильтрованного симплициального комплекса:
 - 1. Наивная реализация
 - 2. Параллельное редуцирование [9]
 - 3. Twist [4]
 - 4. DoubleTwist [7]
- Вычисление матрицы Ходжа-Лапласа
- Вычисление собственных векторов с собственным значением 0

Разделение написанного кода

Разделить репозиторий на две ветки

- 1. В одной максимально абстрагировать полученные классы с целью получения лучшей среды для экспериментов
- 2. В другой рассмотреть разные комбинации алгоритмов и структур данных с целью выявить лучшую по скорости комбинацию и оптимизировать код под неё

Тестирование библиотеки

Провести стресс-тесты и тесты на корректность реализации алгоритмов. Измерить время работы для всех комбинаций алгоритмов и структур данных. Сделать выводы о лучшей компоновке. Для тестирования использовать готовое решение по тестированию проектов [5]

Изложение результатов

В отчёте изложить теорию, необходимую для понимания рассматриваемых алгоритмов и структур данных, а также описать архитектуру и дизайн библиотеки. Написать сопроводительную документацию для пользователей библиотеки.

2 Требования к проекту

2.1 Функциональные требования

Написанная библиотека на языке C++ должна предоставлять доступ к объектам, нужным для вычисления диаграмм устойчивости из облаков точек. Она должна обладать следующими объектами и методами:

2.1.1 Генерация комплекса Вьеториса-Рипса по облаку точек

Шаблонная функция, которая генерирует по массиву вершин и метрике комплекс Вьеториса-Рипса с заданными ограничениями по максимальному размеру симплексов и максимальной дистанции между вершинами в симплексе.

2.1.2 Симплекс

Шаблонный по типу вершины класс, содержащий вершины, которые принадлежат этому симплексу. Вершины должны быть упорядочены, то есть поддерживать std::partial_ordering operator<=>. Хранить их можно в векторе, сете или более хитрой структуре данных, например, в боре, где рёбра - номера вершин.

Класс симплексов должен предоставлять следующие публичные методы:

• Построение от итераторов на структуру, содержащую вершины

- Получение размерности симплекса = "количество вершин 1". Симплексы без вершин создавать нет смысла, поэтому определение корректно
- Получение подсимплексов симплексов размерности на 1 меньше, которые содержатся в нём
- Получение набора вершин симплекса, чтобы функциям фильтрации было с чем работать
- Строковое представление симплекса при выводе через std::ostream& operator<<, чтобы можно было выводить результат. Естественно, будет поддерживать только если и сами вершины можно вывести тем же способом

2.1.3 Симплициальный комплекс

Шаблонный по типу вершины класс, который должен содержать в себе симплексы на заданных вершинах. Наиболее оптимальная и корректная по определению структура для их хранения - это дерево симплексов. Класс комплексов должен предоставлять следующие публичные методы:

- Построение от итераторов на структуру, содержащую симплексы
- Добавление произвольного числа симплексов
- Получение размера комплекса количество содержащихся в нём симплексов
- Получение максимальной размерности симплексов в нём
- Получение набора симплексов в нём
- Строковое представление комплекса при выводе через std::ostream& operator<<, чтобы можно было выводить результат. Естественно, будет поддерживать только если и сами вершины можно вывести тем же способом

2.1.4 Фильтрация симплициального комплекса

Шаблонный по многим типам класс, который содержит в себе упорядоченное множество симплексов в комплексе, которые отсортированы по своим весам, которые определяются с помощью функции фильтрации, переданной в конструктор класса вместе с комплексом.

Класс фильтрации должен предоставлять следующие публичные методы:

- Построение от комплекса и функции фильтрации
- Получение упорядоченного набора симплексов
- Получение индексера, который по симплексу выдаёт его номер в этом упорядоченном наборе
- Получение максимальной размерности симплексов в нём

2.1.5 Столбцы и матрицы индексов

Основные классы хранения индексов симплексов, где индексы - номер симплекса в фильтрации. Наивная реализация - вектор и векторов из индексов.

2.1.6 Столбцы для быстрого сложения

Классы, содержащие в своей структуре данных индексы. Наивная реализация - обёртка над вектором индексов.

Они должны поддерживать:

- Быстрое сложение с индексом и обычным столбцом из индексов, которые передаются в метод void add с помощью итераторов
- Нахождение максимального индекса, который содержится в нём
- Конвертация в обычный столбец индексов. То есть чтобы можно было быстро очистить столбец от содержащихся индексов и загрузить следующий

2.1.7 Диаграмма устойчивости

Шаблонный по типу вершины класс, который содержит в себе существенные и несущественные пары устойчивости.

Класс должен поддерживать:

- Добавление новой пары устойчивости по двум симплексам или одному, если это существенная пара
- Получение всех содержащихся пар
- Показ получившейся диаграммы с помощью вывода в stdout всех пар

2.1.8 Матрица Ходжа-Лапласа

Класс, который содержит матрицу Ходжа-Лапласа для некоторого момента времени редуцирования комплекса.

Он должен поддерживать:

- Создание из матрицы индексов и фильтрации симплициального комплекса
- Вычисление собственных векторов с собственным значением 0. Вектора имеют размерность количества вершин в комплексе.

2.1.9 Алгоритмы редуцирования

Шаблонные классы, которые строят матрицы инцидентности по фильтрации симплициального комлпекса и редуцируют её для получения диаграммы устойчивости. Планируется реализовать несколько вариантов, которые объявлены выше.

2.1.10 Алгоритм поиска persistent HH

Класс, который хранит в себе набор собственных векторов на текущий момент редуцирования, которые получает из матриц Ходжа-Лапласа, и сравнивает их со следующим набором для поиска подходящего вектора, ответственного за создание некоторой дырки в комплексе.

По величинам значений элементов в этом векторе локализуются устойчивые гомологические классы. [6]

2.2 Нефункциональные требования

2.2.1 Описание программы и используемых библиотек

- 1. Программа написана на языке C++, используется версия языка C++20
- 2. Для сборки и тестирования кода используется кросс-платформенная система сборки СМаке
- 3. Программа поддерживает множество компиляторов, но основной GCC
- 4. Проект использует систему поддержки версий git вместе с github
- 5. Требуется не менее 32GB RAM для корректной работы с большим объёмом данных
- 6. Для форматирования используется clang format
- 7. Используется clang-tidy для унификации именований и статической диагностики программы

2.2.2 Используемые библиотеки

- 1. Библиотека Boost. Asio для асинхронной и параллельной обработки матриц индексов [1]
- 2. Фреймворк GTest для тестирования программы [5]

2.2.3 Политика обработки ошибок

- 1. Обработка std::exception отключена в угоду оптимизации выполнения программы
- 2. Вставлены assertы в DEBUG версии программы для выявления ошибок имплементации методов и алгоритмов
- 3. Используется std::optional для обработки несуществования выходных данных алгоритмов и методов

Подытоживая, программа предполагает, что использующий её пользователь вводит верные данные и следует ограничениям используемых алгоритмов.

3 Теория и описание алгоритмов

В разработке

3.1 Дизайн решения

В разработке

3.2 Взаимодействие

В разработке

3.3 Тестирование

В разработке

А Глоссарий

Термины и обозначения:

- Вершины (V) элементы линейно упорядоченного множества. В большинстве случаев это пронумерованные точки в пространстве \mathbb{R}^3
- \bullet Симплекс (σ) фигура, объединяющая n>0 вершин
- ullet Размерность симплекса $(|\sigma|)$ количество вершин минус один
- k-симплекс (σ_k) симплекс размерности k
- Подсимплекс (au) симплекса (σ) фигура, состоящая из n-1 вершины симплекса. Обозначение: $au \in \sigma$
- ullet Комплекс (K) набор симплексов, который содержит все подсимплексы своих симплексов:

$$K \subset 2^V : \varnothing \in K; \ \forall \sigma \in K \ \forall \tau \in \sigma \implies \tau \in K$$

Список литературы

- [1] Boost asio library. https://github.com/boostorg/asio, 1 2025.
- [2] U. Bauer, M. Kerber, J. Reininghaus, and H. Wagner. Phat-persistent homology algorithms toolbox. *Journal of symbolic computation*, 78:83–84, 2017.
- [3] J.-D. Boissonnat and C. Maria. The simplex tree: An efficient data structure for general simplicial complexes. *Algorithmica*, 70:406–427, 2014.
- [4] C. Chen and M. Kerber. Persistent homology computation with a twist. In *Proceedings 27th European workshop on computational geometry*, volume 11, pages 197–200, 2011.
- [5] Google. Googletest. https://google.github.io/googletest/, 1 2025.
- [6] H. Lee, M. K. Chung, H. Choi, H. Kang, S. Ha, Y. K. Kim, and D. S. Lee. Harmonic holes as the submodules of brain network and network dissimilarity. In *Computational Topology in Image Context: 7th International Workshop, CTIC 2019, Málaga, Spain, January 24-25, 2019, Proceedings 7*, pages 110–122. Springer, 2019.
- [7] T. Pham and H. Wagner. Computing representatives of persistent homology generators with a double twist. arXiv preprint arXiv:2403.04100, 2024.
- [8] A. Rieser. A note on the simplex-tree construction of the vietoris-rips complex. arXiv preprint arXiv:2301.07191, 2023.
- [9] E. von Brömssen. Computing persistent homology in parallel with a functional language. 2021.