Symbolic Regression to Analyse Toeplitz matrices

Unearthing Spectral Truths with Symbolic Regression

Vincent Dahlberg, Albin Roos Isaksson

IT Department, Uppsala University

vincent.dahlberg@gmail.com
a3iskasson@outlook.com

June 3, 2025
Presentation

UPPSALA
UNIVERSITET

Agenda

1. Introduktion
2. Metod
3. Resultat och diskussion
4. Slutsats

Toeplitz matriser

En Toeplitz matris är en matris med konstanta diagonala element. Exempel: Diskreta Laplace operatorn med andra ordningens finita differenser.

$$-\Delta = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & 0 \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & & -1 & 2 \end{bmatrix} \tag{1}$$

Toeplitz matriser och genererande symboler

Man kan relatera en Toeplitz matris T_n med en s.k. *generating symbol* f, där f är en Fourierserie där koefficienterna är matrisens element.

$$T_n(f) = \begin{bmatrix} \hat{f}_0 & \hat{f}_{-1} & \cdots & \hat{f}_{-(n-1)} \\ \hat{f}_1 & \hat{f}_0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \hat{f}_{-1} \\ \hat{f}_{n-1} & \cdots & \hat{f}_1 & \hat{f}_0 \end{bmatrix}, \qquad f(\theta) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \hat{f}_k e^{\mathbf{i}k\theta} \tag{2}$$

Formellt säger man att f genererar $T_n(f)$.

Exempel: Symboler

Vi återgår till exemplet där T är 10×10 Laplace-operatorn med andar ordningens finita differenser.

$$-\Delta = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & 0 \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -1 \\ 0 & & -1 & 2 \end{bmatrix}_{[10\times 10]} . \tag{3}$$

Då kan man räkna ut vad symbolen ska bli

$$f(\theta) = -1 \cdot e^{\mathbf{i}\theta} + 2 \cdot e^{0} - 1 \cdot e^{-\mathbf{i}\theta} = 2 - 2\cos(\theta) \tag{4}$$

Exempel: Toeplitz symboler

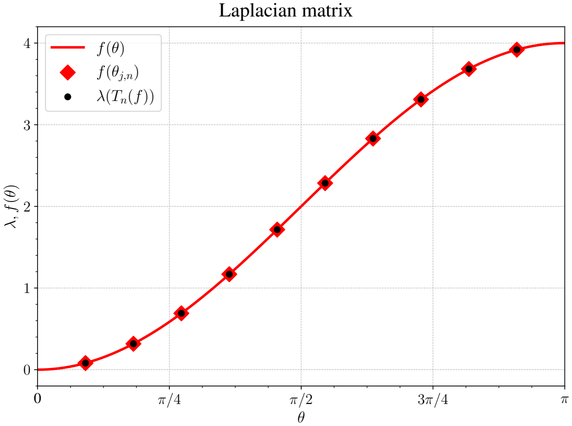


Figure 1: Symbolen $f(\theta) = 2 - 2\cos(\theta)$, tillsammans med egenvärdena $\lambda(T_n(f))$. $\theta_{j,n}$ är ett s.k *rutnät* definierad av $\theta_{j,n} = j\pi/(n+1)$, $n = 10$.

Symbolic Regression

- En metod för att passa data till en funktion.
- Inom vanlig regression är funktionens struktur känd, man anpassar bara parametrar
- Inom SR görs inga antaganden för hur funktionen är uppbyggd

1. Introduktion
2. Metod
3. Resultat och diskussion
4. Slutsats

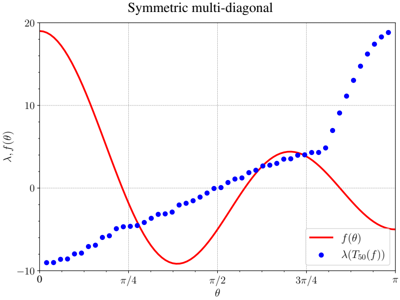
Använda SR i Julia

```
using SymbolicRegression
using MLJ

X = LinRange(0,pi,N)
@. y = sin(X)+cos(X)

model = SRRegressor(
    binary_operators = [+,-,*,/],
    unary_operators = [cos,sin],
    niterations = 100,
    nested_constraints = Dict(
        cos => Dict(cos => 0),
        sin => Dict(sin => 0)
    ),
    maxdepth = 4
)

mach = machine(model,X,y)

fit!(mach)
```

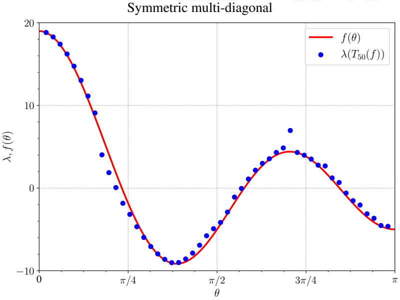
Listing 1: Example of code

Preprocessing

Alla symboler är inte monotona



(a) Icke-sorterade egenvärden



(b) Sorterade egenvärden

Figure 2: Spektrum av egenvärden förre och efter preprocessning för matris med $f(\theta) = 1 + 4\cos(\theta) + 6\cos(2\theta) + 8\cos(3\theta)$

Preconditioned Toeplitz

Preconditioning är vanligt inom beräkningsvetenskap när man vill sänka "condition number" för att göra en numerisk metod mer stabil

$$T_n(g) = \begin{bmatrix} 3 & 1 & & \\ 1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ & & 1 & 3 \end{bmatrix}, \quad \text{"Preconditioner"}, \tag{5}$$

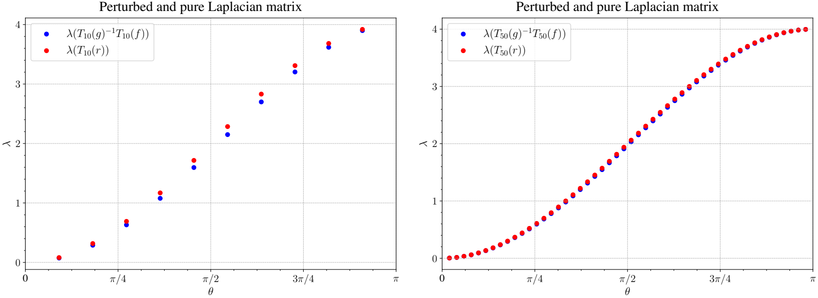
$$T_n(f) = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & & \\ -1 & 4 & \ddots & \ddots & \\ -1 & \ddots & \ddots & \ddots & -1 \\ & \ddots & \ddots & 4 & -1 \\ & & -1 & -1 & 4 \end{bmatrix}. \tag{6}$$

Preconditioned Toeplitz

$$T_6(g)^{-1}T_6(f) = \begin{bmatrix} 1.6180 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0.0027 \\ -0.8541 & 2 & -1 & 0 & 0 & -0.0080 \\ -0.0557 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0.0212 \\ 0.0212 & 0 & -1 & 2 & -1 & -0.0557 \\ -0.0080 & 0 & 0 & -1 & 2 & -0.8541 \\ 0.0027 & 0 & 0 & 0 & -1 & 1.6180 \end{bmatrix}, \tag{7}$$

Denna matris är väldigt lik Laplacianen, fast med perturberad ytterkolonner.

Preconditioned



(a) Eigenvalues of 10×10 Laplacian and perturbed Laplacian (7).

(b) Eigenvalues of 50×50 Laplacian and perturbed Laplacian (7).

Figure 3: Spectrum of Laplacian and perturbed Laplacian for sizes $n = 10, 50$.

Block Toeplitz

En block matris är en matris, där varje element också är en matris, man kan använda samma teori för Toeplitz matriser och symboler och skapa en s.k "Block Toeplitz"

$$T_n(\mathbf{F}) = \begin{bmatrix} \hat{\mathbf{F}}_0 & \hat{\mathbf{F}}_1^T & \cdots & \hat{\mathbf{F}}_m^T & & \\ \hat{\mathbf{F}}_1 & \ddots & \ddots & & \ddots & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & & \hat{\mathbf{F}}_m^T \\ \hat{\mathbf{F}}_m & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ & \ddots & & \ddots & \ddots & \hat{\mathbf{F}}_1^T \\ & & \hat{\mathbf{F}}_m & \cdots & \hat{\mathbf{F}}_1 & \hat{\mathbf{F}}_0 \end{bmatrix}, \tag{8}$$

Block Toeplitz

$$\hat{\mathbf{F}}_0 = \begin{bmatrix} 50 & 2 & 0 \\ 2 & -55 & 2 \\ 0 & 2 & 10 \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{F}}_1 = \begin{bmatrix} 11 & -1 & 0 \\ -1 & -6 & -1 \\ 0 & -1 & 9 \end{bmatrix}, \quad \hat{\mathbf{F}}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{bmatrix} \tag{9}$$

Block Toeplitz

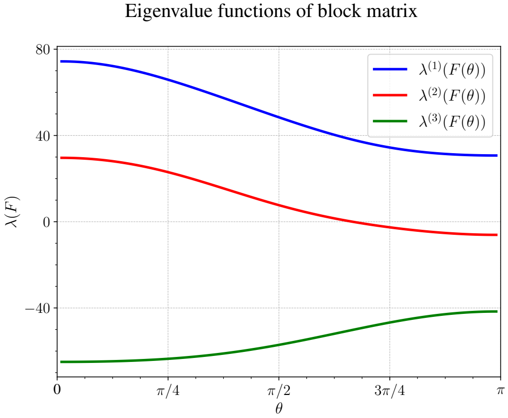


Figure 4: Eigenvalue functions of Block Toeplitz.

Okända matriser

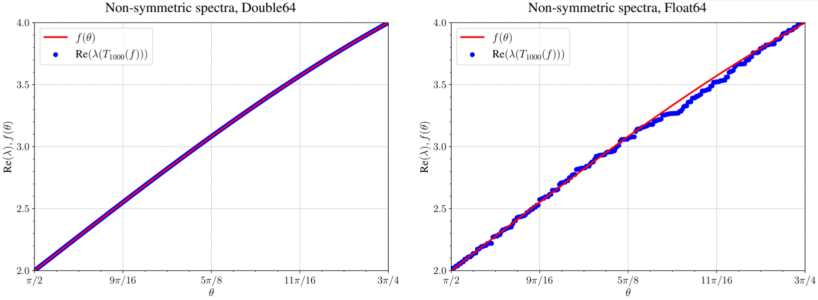
$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

(a) Grcar matrisen

$$\begin{bmatrix} 0 & 3 & 1 & 1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ & & & \ddots & \ddots & 3 \\ & & & & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

(b) Modifierad Grcar

Precision

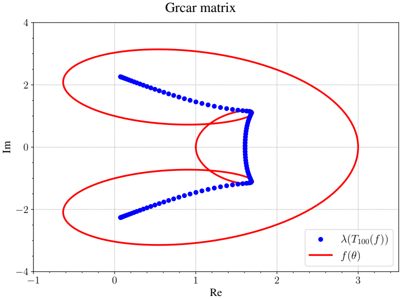


(a) `Double64` (b) `Float64`

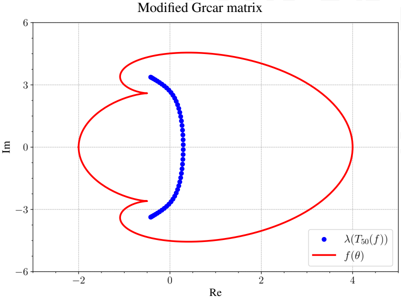
Figure 6: Spektrat för en 1000×1000 matris beräknat med olika noggrannhet.

Grcar

Plottar man egenvärden för dessa matriser så ställer man sig snabbt frågan "hur ska egenvärdena vara ordnade?"



(a) Grcar spektrum.



(b) Modifierad Grcar spektrum.

Figure 7: Egenvärdena för Grcar-matriserna i komplexa talplanet

Grcar

Man kan sortera på en rad olika sätt

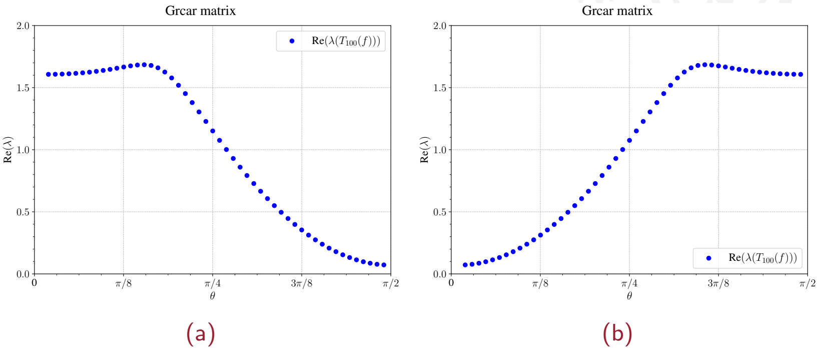
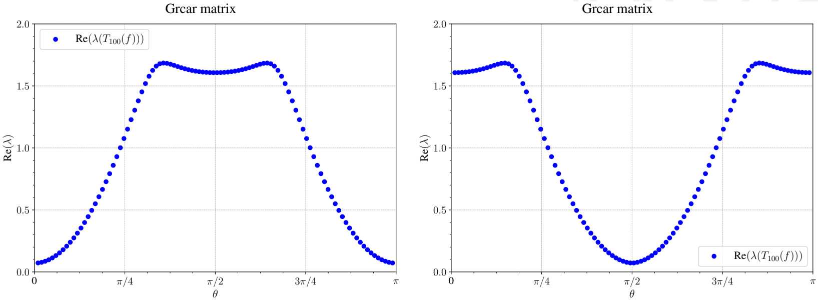


Figure 8: Sorteringsalternativ 1

Grcar



(a) (b)

Figure 9: Sorteringsalternativ 2

Kända symmetriska matriser

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 2 & -1 \\ & & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

(a) Laplacian

$$\begin{bmatrix} 6 & -4 & 1 & & \\ -4 & 6 & \ddots & \ddots & \\ 1 & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ & \ddots & \ddots & 6 & -4 \\ & & 1 & -4 & 6 \end{bmatrix}$$

(b) Bi-Laplacian

$$\begin{bmatrix} 6 & -4 & 2 & & \\ -4 & 6 & \ddots & \ddots & \\ 2 & \ddots & \ddots & \ddots & 2 \\ & \ddots & \ddots & 6 & -4 \\ & & 2 & -4 & 6 \end{bmatrix}$$

(c) Störda bi-Laplacian

Figure 10: Symmetriska matriser.

Kända Symmetriska matriser

Matris:	**Symbol:**	**SR:**
Laplacian	$f(\theta) = 2 - 2\cos(\theta)$	$f(\theta) \approx 2 - 1.9998\cos(\theta)$
Bi-Laplacian	$g(\theta) = 6 - 8\cos(\theta) + 2\cos(2\theta)$	$g(\theta) \approx 4(1 - cos(\theta))(1 - cos(\theta))$
Störd bi-Laplacian	$h(\theta) = 6 - 8\cos(\theta) + 4\cos(2\theta)$	$h(\theta) \approx 2 - 8\cos(\theta)(1 - \cos(\theta))$

$$\cos^2(\theta) = \frac{1}{2}(1 + \cos(2\theta))$$

Kända icke symmetriska matriser

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & 1 \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 2 & i & & \\ -i & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & i \\ & & -i & 2 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} 2 & -2 & & \\ -1 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -2 \\ & & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

(a) (b) (c)

Figure 11: Namnlösa icke-symmetriska matrises.

Kända icke symmetriska matriser

Matris:	Symbol:	SR:
(a)	$f(\theta) = 2 - 2i\sin(\theta)$	$f(\theta) \approx 2 - 2i\sin(1.001\theta)$
(b)	$g(\theta) = 2 - 2\sin(\theta)$	$g(\theta) \approx 2 - 1.997\sin(\theta)$
(c)	$h(\theta) = 2 - 2\sqrt{2}\cos(\theta)$	$h(\theta) \approx 2 - 2.828\cos(\theta)$ $2\sqrt{2} \approx 2.828$

Resultat: Förskjuten bi-Laplacian

$$\begin{bmatrix} -4 & 6 & -4 & 1 & & \\ 1 & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 1 \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & -4 \\ & & & \ddots & \ddots & 6 \\ & & & & 1 & -4 \end{bmatrix}$$

Sanna symbol:

$$f(\theta) = -\frac{\sin^4(\theta)}{\sin(\theta/4)\sin^3(3\theta/4)}$$

Resultat med tips:

$$f_1(\theta) = \frac{\sin^4(1.596)\sin^4(\theta)}{\sin(0.249\theta)\sin^3(-0.749\theta)}$$

$$f_2(\theta) = \frac{\sin^3(\theta \cdot \sin^4(1.558))\sin(\theta)}{\sin(-0.249\theta)\sin^3(\theta \cdot \sin^4(1.196))}$$

Resultat utan tips:

$$f_3(\theta) = \frac{\frac{\sin^4(-0.998\theta)(-0.581 \cdot 1.697)}{\sin(0.247\theta)}}{\sin^3(0.7478\theta)}$$

Resultat :Förskjuten bi-Laplacian

Om man förenklar uttrycken

Sanna symbolen:

$$f(\theta) = -\frac{\sin^4(\theta)}{\sin(\theta/4)\sin^3(3\theta/4)} \leftrightarrow$$

$$f(\theta) = -\csc\left(\frac{\theta}{4}\right)\csc^3\left(\frac{3\theta}{4}\right)\sin^4(\theta)$$

Resultat med tips:

$$f_1(\theta) = -0.999\csc(0.249\theta)\csc^3(0.749\theta)\sin^4(\theta)$$

$$f_2(\theta) = -\csc(0.249\theta)\csc^3(0.7499\theta)\sin^3(0.9997\theta)\sin(\theta)$$

Resultat utan tips:

$$f_3(\theta) = -1.445\csc^3(0.5470046\theta)\sin(\theta)\sin^2(1.036\theta)$$

Resultat: Preconditioned Toeplitz

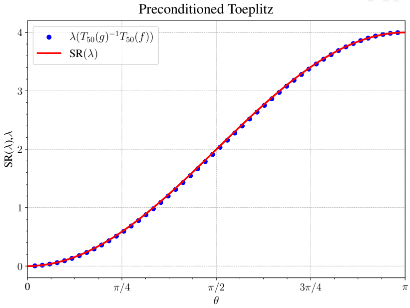


Figure 12: Egenvärdena för preconditioned Toeplitx tillsammans med SR(λ) (12).

$$
\begin{aligned}
f(\theta) &= (\cos(\theta \cdot 1.933) \cdot (\theta \cdot 0.001)) + ((1.981 + (0.011 \cdot \theta)) && (10)\\
&\quad - (\cos(\theta) \cdot 1.981)) && (11)\\
&\approx 2 - 2\cos(\theta) && (12)
\end{aligned}
$$

Resultat: Block Toeplitz

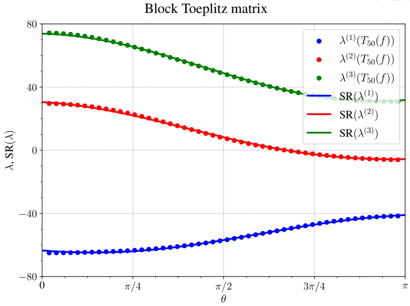


Figure 13: Results of SR Block Toeplitz.

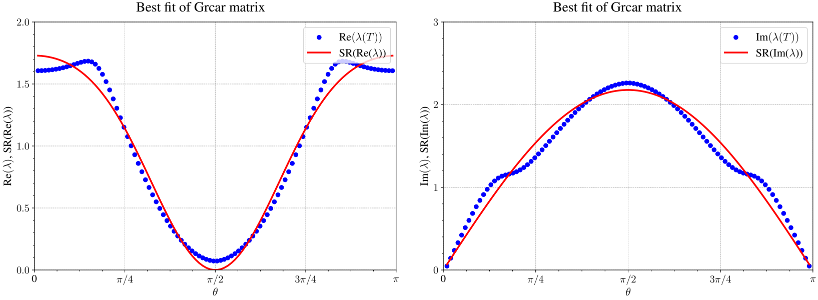
Resultat: Block Toeplitz

$$\mathrm{SR}(\lambda^{(1)}) = (-4.6612 - \cos(\theta)) \cdot (\sin(\theta) + 11.2128), \tag{13}$$

$$\mathrm{SR}(\lambda^{(2)}) = (0.5152 + \cos(\theta)) \cdot ((\theta \cdot (-2.7095)) + 20.1346), \tag{14}$$

$$\mathrm{SR}(\lambda^{(3)}) = ((47.8922 - \theta) + (\theta^2)) - (\cos(\theta) \cdot (-25.9552 + \theta)). \tag{15}$$

Resultat: Grcar



(a) Den reella delen av $\mathrm{SR}(\lambda(T))$ tillsammans med $\lambda(T)$.

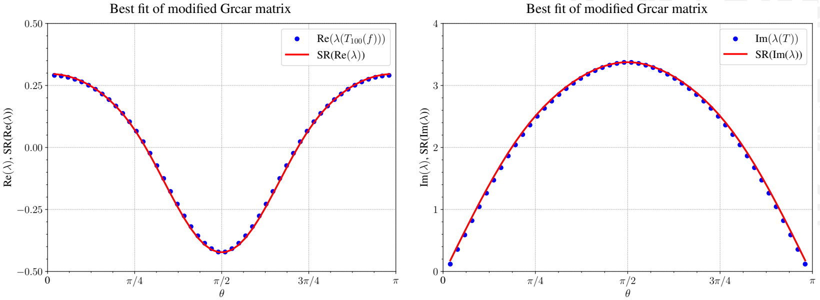
(b) Den imaginära delen av $\mathrm{SR}(\lambda(T))$ tillsammans med $\lambda(T)$.

Figure 14: Reusltatet av SR för icke-modiferade Grcar matrisen, uppdelat på reella (vänster) och imaginära (höger) delen.

Resultat: Modifierad Grcar

$$\begin{cases} \mathrm{Re}(f(\theta)) = 1.7394\cos(\theta)\sin(1.679\cos(\theta)) \\ \mathrm{Im}(f(\theta)) = 2.178\sin(\theta) \end{cases} \tag{16}$$

Resultat: Modifierad Grcar



(a) Den reella delen av SR$(\lambda(T))$ tillsammans med $\lambda(T)$.

(b) Den imaginära delen av SR$(\lambda(T))$ tillsammans med $\lambda(T)$.

Figure 15: Reusltatet av SR för modiferade Grcar matrisen, uppdelat på reella (vänster) och imaginära (höger) delen.

Resultat Modifierad Grcar

$$\begin{cases} \mathrm{Re}(f(\theta)) & = 0.38187 \cdot \sin\left(-\frac{0.59855+\cos(\theta)}{0.38105}\right) - 0.03827 \\ & + \cos\left(-\frac{\theta}{0.16675} - \cos\left(\theta - 2.11404 \cdot \cos(\theta)\right)\right) \cdot 0.00334 \\ \mathrm{Im}(f(\theta)) & = 0.15205 - \frac{2.89655 \cdot (\sin(\theta) - 0.05484)}{0.15047 - \sin(2.08197 - \cos(\cos(1.29655 \cdot \cos(\theta))))} \end{cases} \tag{17}$$

Slutsats

Matrix	Successful	Unsuccessful	Comment	Equation
Laplacian	✓			
Bi-Laplacian	✓			
Perturbed bi-Laplacian	✓			
Preconditioned	✓			
Shifted bi-Laplacian	✓		1	
Non-symmetric (a)	✓			(a)
Non-symmetric (b)	✓			(b)
Non-symmetric (c)	✓			(c)
Block Toeplitz		✓	2	
Grcar		✓	3	
Modified Grcar		✓	2	

[1] The SR machine was provided significant hints.
[2] The equations match the data, but they cannot be deemed as ”correct” symbols. Might be due to nested trig-functions or polynomial terms.
[3] The equations doesn’t match the data.

Figure 16