Aplikovaná informatika a vědecké výpočty

Scientific Computing Section (SCS)
jaromir.kukal@fjfi.cvut.cz
Katedra softwarového inženýrství, FJFI ČVUT v Praze

Oblast informatiky je velmi široká a každý, kdo se naučí programovat, si klade otázku, na co mu to potom bude dobré. Můžeme to přirovnat k používání orientálního koření v kuchyni. Záleží zejména na tom, kolik, v jakém okamžiku a na co ho nasypete. Pokud cítíte, že má smysl kombinovat informatiku s jinými vědami, nenechte se odradit počáteční náročností teoretické přípravy, která vám nakonec umožní radost z tvorby unikátního software...

Analýza fraktálních množin

Podařilo se nám vyvinout nové nevychýlené odhady Renyiovy dimenze D_α, které jsou vhodným nástrojem analýzy fraktálních množin. Definovali jsme modifikovanou Reniovu entropii vztahem

$$\mathrm{H}^*(\alpha,\epsilon) = \ln M + \frac{\ln \mathrm{E}\,\mathrm{G}^{\alpha-1}(\mathbf{x},\epsilon)}{1-\alpha} = C_\alpha - D_\alpha \ln \epsilon,$$

který je založen na stupni degenerace daného bodu

$$\mathrm{G}(\mathbf{x},\epsilon) = \sum_{k=1}^{M} \mathrm{I}(||\,\mathbf{x}-\mathbf{x}_k\,||_2 \le \epsilon),$$

rychlém vyhledávání ve vyváženém k-D stromu, vzorkování metodou Monte Carlo a lineární regresi.

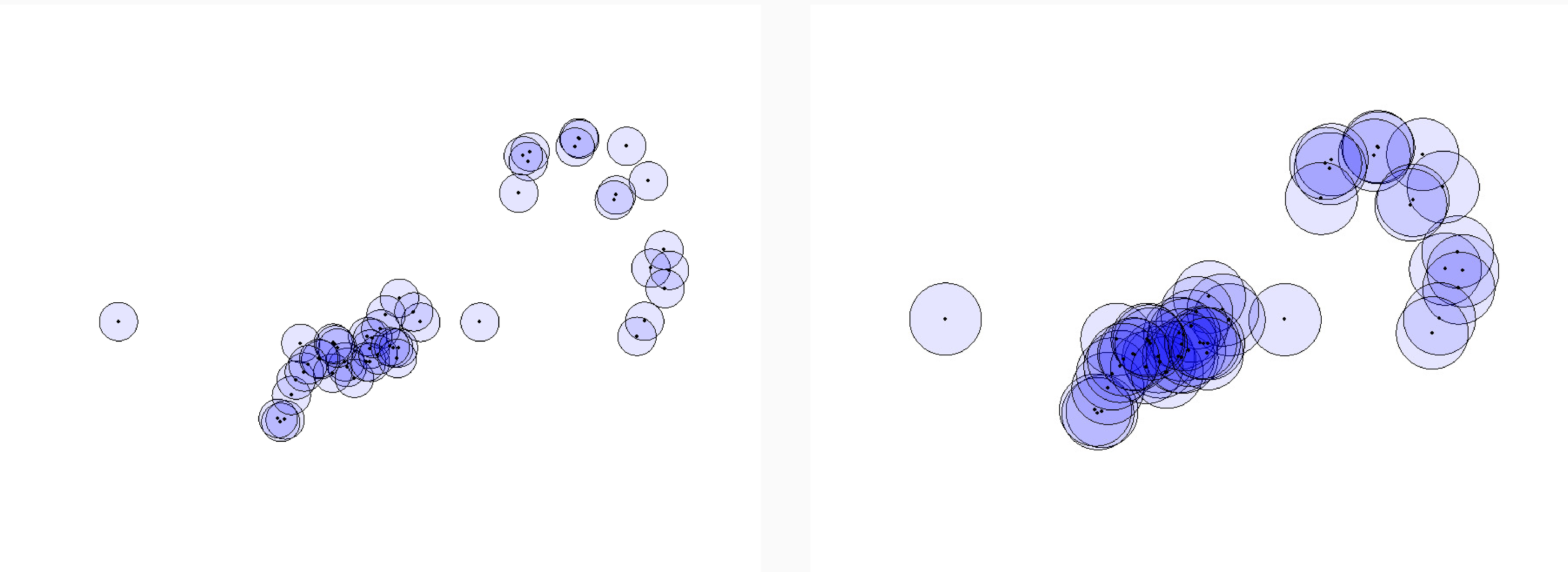

Figure: Stupeň degenerace bodu jako nástroj pro odhad Renyiovy dimenze pro ϵ_1 a $\epsilon_2 = 2\epsilon_1$.

Rovněž se zabýváme konstrukcí modelů fraktálů pomocí pravidelných mřížek, neorientovaných grafů a diskrétních bodových množin. Jde o to, jak uvedené modely efektivně implementovat v celočíselné aritmetice, jak realizovat difuzi pomocí náhodných skoků do sousedních bodů mřížky a jak analyzovat výsledky simulací. Přitom se využívá pojem důvěrně známý všem tulákům – pravděpodobnost návratu domů po k dnech, která je dána vztahem

$$p_k = \mathrm{prob}(\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_0 \mid \mathbf{x}_0) = A k^{-d_s/2},$$

kde spektrální dimenze d_s nese cenné informace o rozmístění restaurací a dalších významných bodů v okolí bydliště.

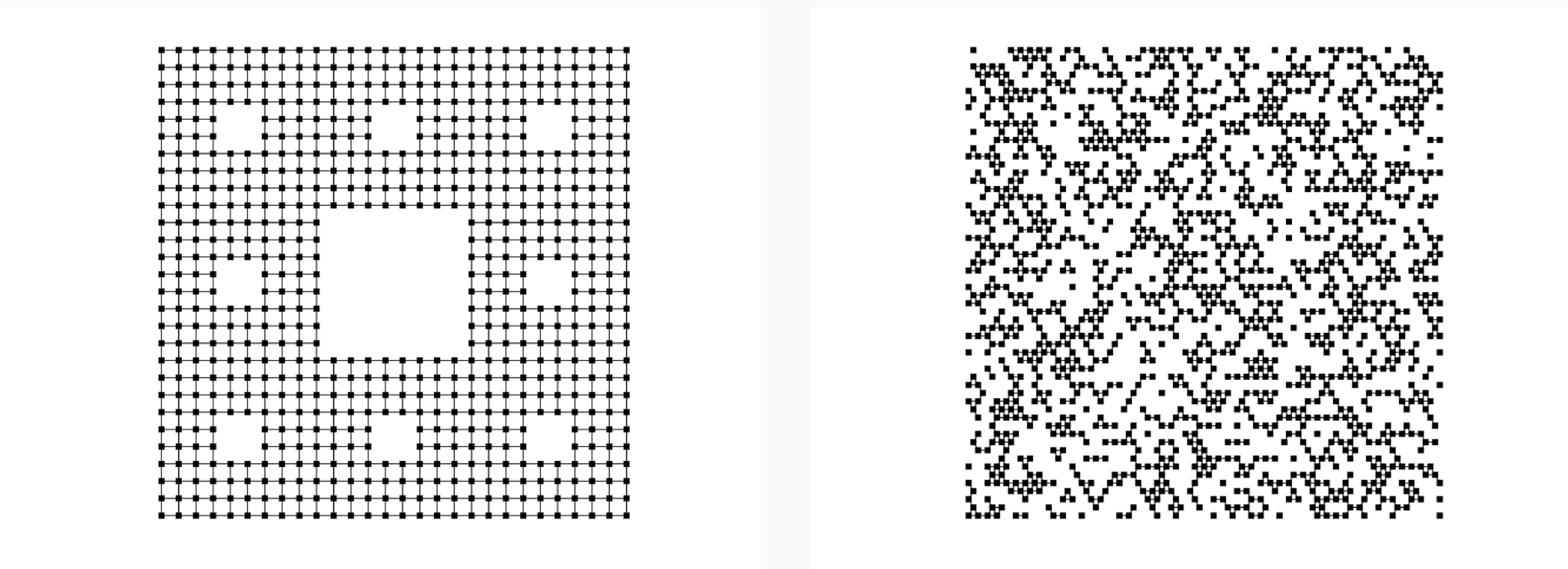

Figure: Aproximace fraktálních množin: Sierpinského koberec a prosakování.

Strojové učení v Hilbertově prostoru

V oblasti strojového učení dáváme přednost translačně a rotačně invariantním jádrům, která umožňují nelineární transformaci $\mathbf{\Phi}$ z prostoru $\mathbb{R}^n$ na povrch jednotkové hyperkoule $\mathcal{S} \subset \mathcal{H}$, kde $\mathcal{H}$ je Hilbertův prostor nekonečné dimenze. Příslušná jádrová funkce je dána skalárním součinem

$$\mathrm{K}(\mathbf{a},\mathbf{b}) = \mathbf{\Phi}(\mathbf{a}) \cdot \mathbf{\Phi}(\mathbf{b}).$$

Tradiční jádrová funkce RBF má tvar

$$\mathrm{K}(\mathbf{a},\mathbf{b}) = \exp\left(-\frac{||\,\mathbf{a}-\mathbf{b}\,||_2^2}{2\sigma^2}\right)$$

a vyskytuje se v mnoha aplikacích, ale je jenom jednou z mnoha. Otevírají se tak nové možnosti strojového učení v Hilbertově prostoru $\mathcal{H}$, kdy si snad vychutnáme lineární separabilitu, stochastické učení, lineární a kvadratické programování nebo optimalizační heuristiky. Naším dlouhodobým cílem je konstrukce nových typů klasifikátorů, které kombinují přesnost klasifikace se schopností zobecňovat zákonitosti v datech.

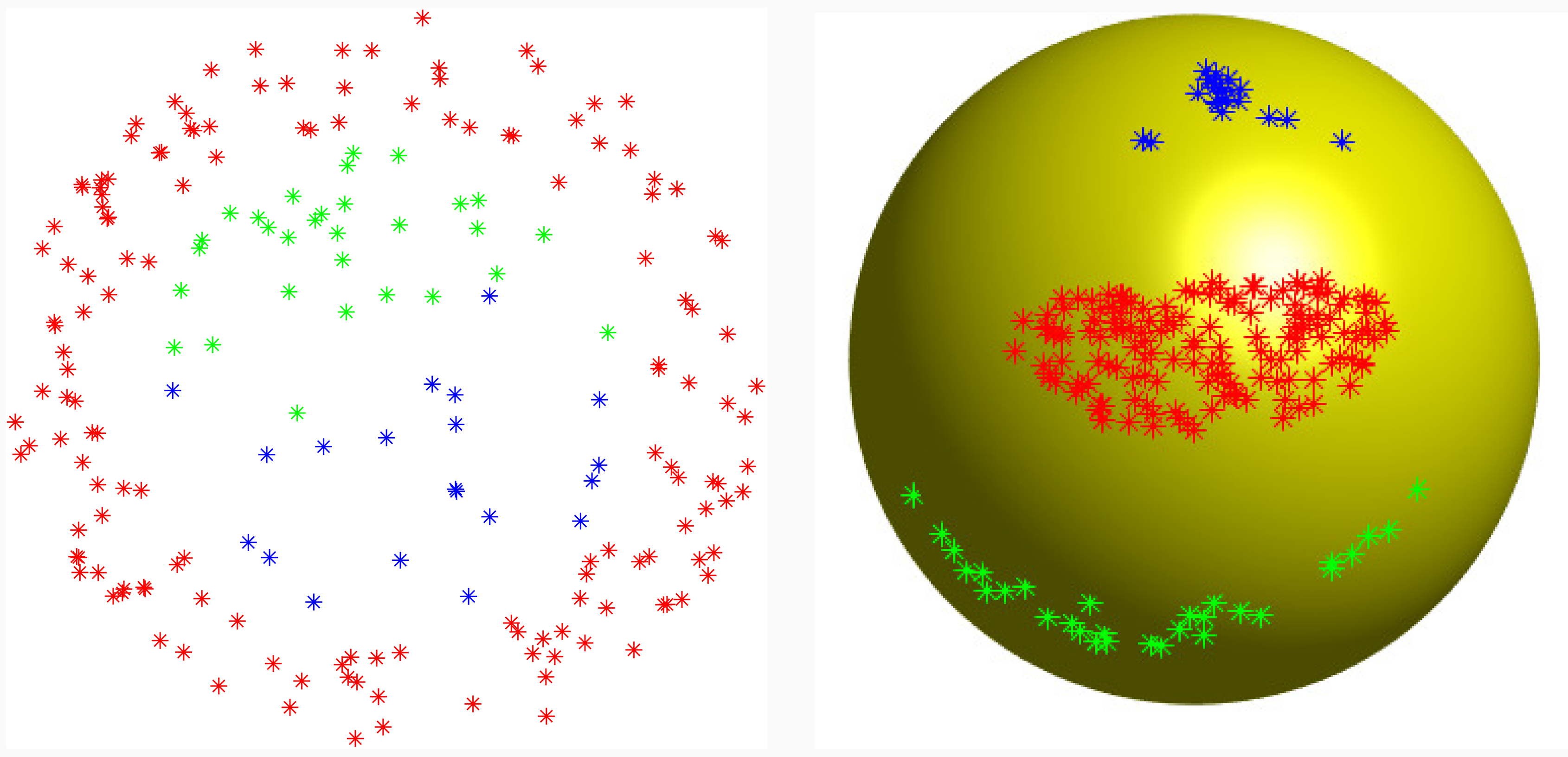

Figure: Množina vzorů ze tří tříd v $\mathbb{R}^2$ a její lineárně separabilní projekce do $\mathcal{H}$.

Modelování anomální difuze

Pokud si chcete vychutnat matematickou analýzu, numerickou matematiku, matematickou statistiku a programovací techniky, můžete u nás zkusit modelovat anomální difuzi popsanou zlomkovou parciální diferenciální rovnicí

$$\frac{\partial \mathbf{c}(\mathbf{x},t)}{\partial t} = D_\alpha \nabla^{(\alpha)} \mathbf{c}(\mathbf{x},t).$$

Jak anomální difuze, tak zlomkový Laplacián $\nabla^{(\alpha)}$ nejsou pouze hračkami pro teoretiky bez dalšího uplatnění. Anomální chování souvisí s turbulentním prouděním jako negaussovský rozptyl světla v atmosféře, který ovlivňuje astronomická pozorování, transport hmoty v chemických reaktorech nebo invazivní chování jedinců nejen v biologii.

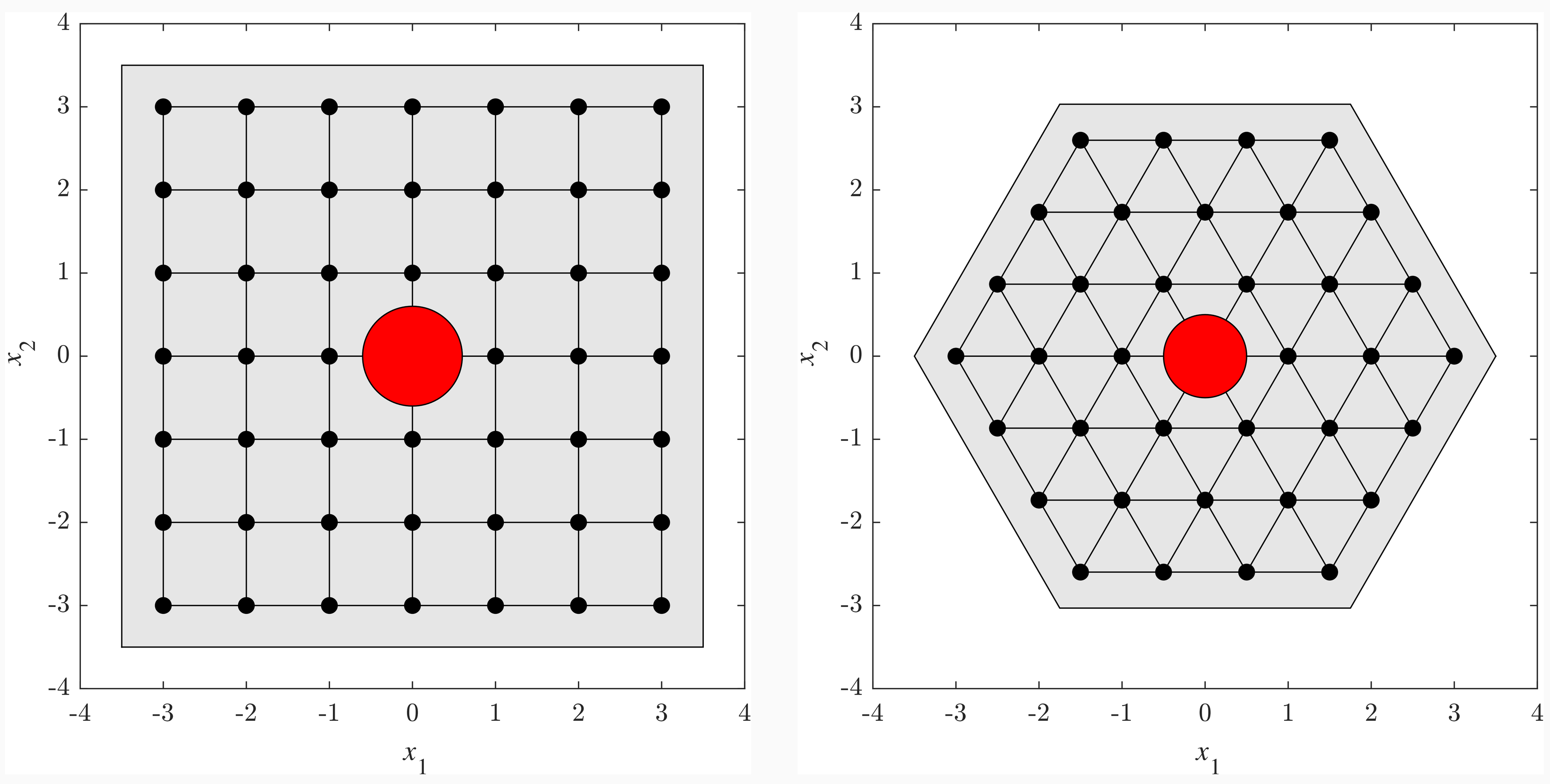

Figure: Singularita a mřížka pro aproximaci $\nabla^{(\alpha)}$ v tetragonální a hexagonální topologii.

Vybrané publikace našich doktorandů

- Dlask, M., & Kukal, J. (2017). Application of rotational spectrum for correlation dimension estimation. Chaos, Solitons & Fractals, 99, 256-262.
- Dlask, M., & Kukal, J. (2018). Translation and rotation invariant method of Renyi dimension estimation. Chaos, Solitons & Fractals, 114, 536-541.
- Gaspar, F., & Kukal, J. (2022). Stochastic modelling of fractal diffusion and dimension estimation. Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, 127624.
- Kukal, J., & Mojzes, M. (2018). Quantile and mean value measures of search process complexity. Journal of Combinatorial Optimization, 35(4), 1261-1285.
- Hrebik, R., Kukal, J., Jablonsky, J. (2019). Optimal unions of hidden classes. Central European Journal of Operations Research, 27(1), 161-177.
- Horaisová, K., & Kukal, J. (2016). Leaf classification from binary image via artificial intelligence. Biosystems Engineering, 142, 83-100.
- Horaisova, K., Dudasova, J., Kukal, J., Rusina, R., Matej, R., Buncova, M. (2018). Discrimination between AD and ALS via affine invariant spherical harmonics analysis of SPECT images. Neural Network World, 28(1), 17-39.