

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРИЗНАКОВ НА ОСНОВЕ ФОРМИРОВАНИЯ ПЕРСИСТЕНТНЫХ СПЕКТРОВ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ МАТРИЦ ЛАПЛАСА

С.В. Лейхтер¹

старший преподаватель, e-mail: leykhter@mail.ru

С.Н. Чуканов²

профессор, д.т.н., ведущий научный сотрудник, e-mail: ch_sn@mail.ru

¹ФГБОУ ВО Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского

²ФГБУН Институт математики им. С.Л. Соболева СО РАН

Аннотация. В работе разработан алгоритм определения спектра собственных значений матрицы Лапласа для симплициальных комплексов. Спектр собственных значений матрицы Лапласа используется в качестве признаков в структуре данных при анализе изображения. Аналогично методу персистентных гомологий формируется фильтрация вложенных симплициальных комплексов, аппроксимирующих изображение объекта, но топологическими признаками на каждом этапе фильтрации является спектр собственных значений матрицы Лапласа симплициальных комплексов. Спектр собственных значений матрицы Лапласа позволяет определить числа Бетти и характеристики Эйлера изображения. На основе метода нахождения спектра собственных значений матрицы Лапласа сформирован алгоритм, позволяющий получать топологические признаки изображений объектов и количественные оценки результатов сравнения изображений. Разработано программное обеспечение, реализующее этот алгоритм на аппаратных средствах вычислительной техники. Метод определения спектра собственных значений матрицы Лапласа обладает следующими преимуществами: метод не требует биективного соответствия между элементами структур объектов; метод инвариантен по отношению к евклидовым преобразованиям форм объектов. Определение спектра собственных значений матрицы Лапласа для симплициальных комплексов позволяет расширить количество признаков для машинного обучения, что позволяет повысить разнообразие информации, полученной методами вычислительной топологии, при сохранении топологических инвариантов. Для сравнения форм объектов построено модифицированное расстояние Вассерштейна, основанное на собственных значениях матрицы Лапласа сравниваемых форм. Применение определения спектра собственных значений матрицы Лапласа для сравнения форм объектов позволяет повысить точность определения расстояния между изображениями.

Ключевые слова: вычислительная топология, расстояние Вассерштейна, собственные значения, матрица Лапласа.

Введение

Машинное обучение без учителя позволяет обнаруживать закономерности в структуре данных и формировать признаки групп данных. Геометрические методы анализа данных могут характеризовать информацию о локальной структуре, но приводят к избыточности информации и повышению объёма вычислительных операций при анализе данных. Признаки, созданные на основе топологических моделей, сохраняют информацию о глобальной внутренней структуре, но они существенно сокращают информацию о локальной структуре, и этой информации недостаточно для анализа данных [1]. Основная концепция персистентной гомологии и вычислительной топологии — использовать процедуру фильтрации; в процессе фильтрации создаётся ряд вложенных симплициальных комплексов, закодированных топологической информацией разных масштабов. Продолжительность жизни топологических инвариантов в процессе изменения параметра фильтрации связана с геометрическими свойствами.

Для измерения несоответствия симплициальных комплексов, применяемых в вычислительной топологии, используется расстояние Л. Вассерштейна. Специальные топологические свойства, такие как общее число Бетти при определённом значении фильтрации, могут рассматриваться как признаки. Для учёта негеометрической информации несоответствия между исходным и конечным изображениями модифицируется метод Вассерштейна. В работе [2] используются алгоритмы формирования персистентных баркодов [3, 4] для сравнения диффеоморфных изображений. Использование персистентных гомологий по отношению к методам традиционной алгебраической топологии [5] позволяет получить дополнительную информацию о форме объекта.

Целью настоящей работы является разработка алгоритма нахождения спектра собственных значений матрицы Лапласа для симплициальных комплексов для каждого этапа фильтрации, которые используются для нахождения расстояния между изображениями в процессе изменения параметра фильтрации.

Аналогично методу персистентных (ко)гомологий, используемому в вычислительной топологии, формируется фильтрация вложенных симплициальных комплексов, аппроксимирующих изображение объекта. Но в отличие от метода персистентных гомологий топологическими признаками на каждом этапе фильтрации являются не числа Бетти и характеристики Эйлера, а спектр собственных значений матрицы Лапласа симплициальных комплексов. Спектр собственных значений матрицы Лапласа позволяет определить числа Бетти и характеристики Эйлера, то есть нахождение спектра собственных значений расширяет возможности метода персистентных (ко)гомологий.

На основе предложенного метода нахождения спектра собственных значений матрицы Лапласа сформирован алгоритм, позволяющий получать топологические признаки изображений объектов и количественные оценки результатов сравнения изображений. Разработано программное обеспечение, реализующее этот алгоритм на аппаратных средствах вычислительной техники. По отношению к геометрическим методам анализа данных (например, LDDMM — Large deformation diffeomorphic metric mapping) метод определения спектра собствен-

ных значений матрицы Лапласа обладает следующими преимуществами: метод не требует биективного соответствия между элементами структур объектов; метод инвариантен по отношению к евклидовым преобразованиям форм объектов.

Определение спектра собственных значений матрицы Лапласа [6] для симплициальных комплексов позволяет расширить количество признаков для машинного обучения, что позволяет повысить разнообразие информации, полученной методами вычислительной топологии, при сохранении топологических инвариантов (по отношению к переносу, вращению и масштабированию). При сравнении форм объектов можно построить модифицированное расстояние Васерштейна, основанное на собственных значениях матрицы Лапласа сравнимых форм. Применение определения спектра собственных значений матрицы Лапласа для сравнения форм объектов позволяет повысить точность определения расстояния между изображениями.

1. Спектр собственных значений матрицы Лапласа

Одним из представлений, используемых в спектральной теории графов, является сопоставление графов с матрицей Лапласа $\mathcal{L}(G)$, которая связана с диагональной матрицей $\mathcal{D}(G)$ и матрицей смежности $\mathcal{A}(G)$ графа G [7]:

$$\mathcal{L}(G) = \mathcal{D}(G) - \mathcal{A}(G). \quad (1)$$

Пусть $\{v_0, v_1, \dots, v_q\}$ — множество точек в \mathbb{R}^n . Точка $v = \sum_{i=0}^q \lambda_i v_i$, $\lambda_i \in \mathbb{R}$ — это аффинная выпуклая комбинация v_i при $\sum_{i=0}^q \lambda_i = 1$; $\lambda_i \geq 0, \forall i$. $q + 1$ точек v_0, v_1, \dots, v_q аффиннонезависимы, если $v_1 - v_0, v_2 - v_0, \dots, v_q - v_0$ линейно независимы. q -комплекс, обозначаемый как σ_q , — это выпуклая оболочка $q + 1$ аффиннонезависимых точек в \mathbb{R}^n ($n \geq q$) с размерностью $\dim(\sigma_q) = q$. 0-симплекс — это вершина, 1-симплекс — ребро, 2-симплекс — треугольник, 3-симплекс — тетраэдр. Симплициальный комплекс K — это набор симплексов в \mathbb{R}^n , удовлетворяющий следующим условиям: (1) если $\sigma_q \in K$ и σ_p являются гранями σ_q , то $\sigma_p \in K$; (2) непустое пересечение двух симплексов $\sigma_q, \sigma_p \in K$ является гранью как σ_q , так и σ_p .

Чтобы различать топологические пространства, основанные на связности симплициальных комплексов, используются числа Бетти. k -ое число Бетти, β_k , подсчитывает количество k -мерных дырок на топологической поверхности. В пространстве \mathbb{R}^3 число β_0 представляет количество связанных компонентов, β_1 подсчитывает количество одномерных циклов, β_2 описывает количество двумерных пустот или отверстий.

Два q -симплекса σ_q^i и σ_q^j симплициального комплекса K примыкают снизу, если они имеют общую $(q - 1)$ -границу. Нижняя степень q -симплекса ($\deg_L(\sigma_q)$) — это число непустых $(q - 1)$ -симплексов в K , являющихся гранями σ_q , которое всегда равно $q + 1$. Два q -симплекса σ_q^i и σ_q^j симплициального комплекса примыкают сверху, если они имеют общую $(q + 1)$ -грань. Верхняя

степень q -симплекса ($\text{deg}_U(\sigma_q)$) — это число $q + 1$ -симплексов в K , в которых σ_q является гранью. Тогда степень q -симплекса ($q > 0$) определяется как:

$$\text{deg}(\sigma_q) = \text{deg}_L(\sigma_q) + \text{deg}_U(\sigma_q) = \text{deg}_U(\sigma_q) + q + 1.$$

q -цепь — это формальная сумма q -симплексов в K с полем \mathbb{Z}_2 коэффициентов для суммы. q -цепь называется q -циклом, если её граница равна нулю. При операции сложения множество всех q -цепей называется цепной группой и обозначается как $C_q(K)$. Введём граничный оператор $\partial_q : C_q(K) \rightarrow C_{q-1}(K)$. Обозначая $\sigma_q = [v_0, v_1, \dots, v_q]$ как q -симплекс, охватываемый его вершинами, его граничный оператор может быть определён как:

$$\partial_q \sigma_q = \sum_{i=0}^q (-1)^i \sigma_{q-1}^i, \quad (2)$$

с $\sigma_q = [v_0, \dots, v_q]$ — q -симплексом. Здесь $\sigma_{q-1}^i = [v_0, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_q]$ — $(q-1)$ -симплекс с пропущенным v_i . Цепной комплекс — это последовательность групп цепей, связанных граничными операторами:

$$\overset{\partial_{q+2}}{\rightrightarrows} C_{q+1}(K) \overset{\partial_{q+1}}{\rightrightarrows} C_q(K) \overset{\partial_q}{\rightrightarrows} C_{q-1}(K) \overset{\partial_{q-1}}{\rightrightarrows} \dots \quad (3)$$

Ориентированный симплициальный комплекс — это комплекс, в котором все симплексы в симплициальном комплексе, за исключением вершин, ориентированы. Пусть σ_q — q -симплекс; мы можем определить порядок множества его вершин. Если два порядка, определённые на σ_q , отличаются друг от друга чётной перестановкой, мы говорим, что они эквивалентны и каждый из них называется *ориентацией* σ_q . Пусть $\sigma_q^i, \sigma_q^j \in K$ с ориентированным симплициальным комплексом K . Если σ_q^i, σ_q^j сверху примыкают с общим верхним $(q+1)$ -симплексом τ_{q+1} , мы говорим, что они ориентированы одинаково, если оба имеют одинаковый знак в $\partial_{q+1}(\tau_{q+1})$, и противоположно ориентированы, если знаки противоположны. Если σ_q^i, σ_q^j снизу примыкают с общим нижним $(q-1)$ -симплексом η_{q-1} , мы говорим, что они одинаково ориентированы, если η_{q-1} имеет одинаковый знак в $\partial_q(\sigma_q^i)$ и $\partial_q(\sigma_q^j)$, и противоположно ориентированы, если знаки противоположны.

Пусть ∂_q — матричное представление q -граничного оператора $\partial_q : C_q(K) \rightarrow C_{q-1}(K)$, относительно стандартного базиса для C_q и C_{q-1} с некоторыми назначенными ориентациями. Ассоциированный с q -граничным оператором является сопряжённый оператор: $\partial_q^* : C_{q-1}(K) \rightarrow C_q(K)$, представленный матрицей ∂_q^* . Пусть K — ориентированный симплициальный комплекс, для целого $q \geq 0$, q -комбинаторный лапласиан является линейным оператором: $\Delta_q : C_q(K) \rightarrow C_q(K)$ с матричным представлением [8]:

$$\mathcal{L}_q = \partial_{q+1} \partial_{q+1}^* + \partial_q^* \partial_q, \quad (4)$$

при этом $\partial_q \partial_{q+1} = 0$.

Для заданного конечного ориентированного симплициального комплекса K число Бетти β_q удовлетворяет соотношению: $\beta_q = \dim(\mathcal{L}_q(K)) - \text{rank}(\mathcal{L}_q(K))$, то есть равно числу нулевых собственных значений матрицы Лапласа $\mathcal{L}_q(K)$.

2. Фильтрация спектров собственных значений матрицы Лапласа

Для формирования признаков множества точечных ориентиров построим комплекс Вьеториса–Рипса из облаков точек относительно этих ориентиров. Для заданного множества точечных ориентиров $S = \{x_1, \dots, x_k\}; x_i \in \mathbb{R}^n$ комплекс Вьеториса–Рипса $R(r)$ — это симплициальный комплекс, построенный на множестве точек S ; комплекс формируется тогда, когда все пары точек находятся на расстоянии, не превышающем $2r$:

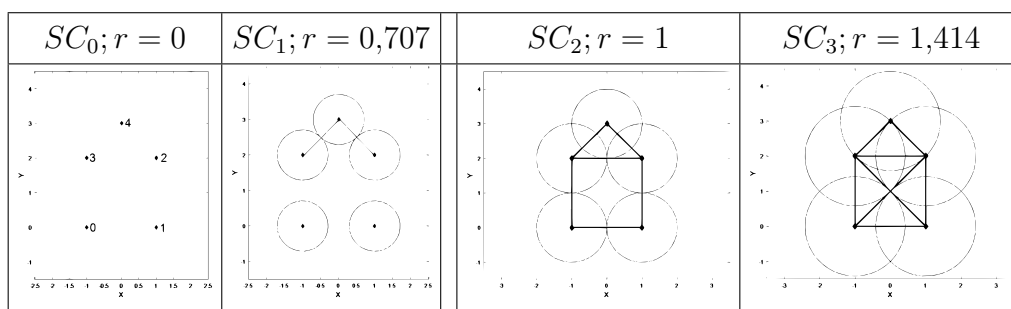
$$R(r) = \{ \sigma \in S \mid \|x_i - x_j\| \leq 2r, \forall i, j \in 1 \dots k \}. \tag{5}$$

При изменении расстояния $r \in \mathbb{R}^+$ топологические характеристики комплекса Вьеториса–Рипса изменяются в соответствии с диффеоморфными преобразованиями. Существуют точки появления r_b и точки исчезновения r_d топологических характеристик. По значениям этих точек строятся баркоды $\{[b_i \dots d_i] \mid d_i \geq b_i \geq 0\}$ (i — номер баркода). Методами вычислительной топологии (см. Приложение) определяются значения b_i и d_i классов топологии (гомологии / когомологии) при фильтрации симплициального комплекса по значениям r_i , обусловленной упорядочиванием баркодов, сортировкой баркодов для каждого класса. В каждом значении фильтрации r_i определяются числа Бетти и характеристики Эйлера для каждого класса гомологии / когомологии. Для увеличения количества информации при фильтрации симплициального комплекса определяются также спектр собственных значений матриц Лапласа для каждого класса топологии.

Пример 1. Сформируем изображение «House» [9], состоящее из пяти точек с координатами $[-1,1; -1,0; 1,2; -1,2; 0,3]$. С помощью пакета Java-Plex определим баркоды в размерности 0: $2 [0 \ 1,414)$, $2 [0 \ 2)$, $[0 \ \infty)$; в размерности 1: $[0 \ 2,828)$.

Рассмотрим симплициальные комплексы SC_0, SC_1, SC_2, SC_3 , построенные по точечным облакам при изменении радиуса от значения радиуса точечных облаков от $r = 0$ до $r = 1,414$ (см. рисунки в таблице 1).

Таблица 1. Симплициальные комплексы SC_0, SC_1, SC_2, SC_3



Найдём граничные и кограничные операторы в матричной форме и матрицы Лапласа.

Случай $SC_1; r = 0,707$.

Таблица 2. Случай SC_1

q	$q = 0$
∂_{q+1}^1	$\begin{matrix} 0 & 24 & 34 \\ 1 & \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ 2 & \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ 3 & \\ 4 & \begin{pmatrix} 1 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$
∂_q^1	$\begin{matrix} 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ (0 & 0 & 0 & 0 & 0) \end{matrix}$
\mathcal{L}_q^1	$c_{0=\partial_1^1}^2 = (\partial_1^1)^T = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$

Для случая $q = 1$: $\mathcal{L}_1^1 = (\partial_1^1)^T \partial_1^1 = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}$; $\partial_1^1 = \partial_{0+1}^1$. Размерности лапласианов: $\dim(\mathcal{L}_0^1) = 5$; $\dim(\mathcal{L}_1^1) = 2$. Ранги лапласианов: $\text{rank}(\mathcal{L}_0^1) = 2$; $\text{rank}(\mathcal{L}_1^1) = 2$. Числа Бетти: $\beta_0^1 = 3$; $\beta_1^1 = 0$. Спектры собственных значений лапласианов: $\mathcal{L}_0^1: \{0, 0, 1, 0, 3\}$; $\mathcal{L}_1^1: \{1, 3\}$.

Случай $SC_2; r = 1$.

Для случая $q = 2$: $\mathcal{L}_3^2 = (\partial_2^2)^T \partial_2^2 = 3$. Размерности лапласианов: $\dim(\mathcal{L}_0^2) = 5$; $\dim(\mathcal{L}_1^2) = 6$; $\dim(\mathcal{L}_2^2) = 1$. Ранги лапласианов: $\text{rank}(\mathcal{L}_0^2) = 4$; $\text{rank}(\mathcal{L}_1^2) = 5$; $\text{rank}(\mathcal{L}_2^2) = 1$. Числа Бетти (числа нулей): $\beta_0^2 = 1$; $\beta_1^2 = 1$; $\beta_2^2 = 0$. Спектры собственных значений лапласианов: $\mathcal{L}_0^2: \{2,38 \ 4,62 \ 1,38 \ 3,62 \ 0\}$; $\mathcal{L}_1^2: \{2,38 \ 3 \ 3,62 \ 1,38 \ 4,62 \ 0\}$; $\mathcal{L}_2^2: \{3\}$. Так как $\beta_1^2 = 1$, то собственный вектор, соответствующий нулевому собственному значению лапласиана \mathcal{L}_1^2 : $v = (0,522 \ 0,522 \ 0,348 \ -0,522 \ 0,174 \ -0,174)^T$, и цикл $c_1 \in C_1(SC_2)$ можно представить в виде $c_1 = 0,522[01] + 0,522[12] + 0,348[23] - 0,522[03] + 0,174[24] - 0,174[34]$. Тогда $\partial_2^2 c_1 = 0,348 - 0,174 - 0,174 = 0$. Симплекс c_1 , или v_1 , представляет класс гомологии симплициального комплекса $H_1(SC_2)$. Симплекс c_1 имеет «дыру», которая ограничена ребрами $[23]$, $[24]$, $[34]$.

Случай $SC_3; r = 1,414$.

Размерности лапласианов: $\dim(\mathcal{L}_0^3) = 5$; $\dim(\mathcal{L}_1^3) = 8$; $\dim(\mathcal{L}_2^3) = 5$. Ранги лапласианов: $\text{rank}(\mathcal{L}_0^3) = 4$; $\text{rank}(\mathcal{L}_1^3) = 8$; $\text{rank}(\mathcal{L}_2^3) = 5$. Числа Бетти (числа нулей): $\beta_0^3 = 1$; $\beta_1^3 = 0$; $\beta_2^3 = 0$. Спектры собственных значений лапласианов:

Таблица 3. Случай SC_2

q	$q = 0$	$q = 1$
∂_{q+1}^2	$\begin{matrix} & 01 & 12 & 23 & 03 & 24 & 34 \\ \begin{matrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{matrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$	$\begin{matrix} & 234 \\ \begin{matrix} 01 \\ 12 \\ 23 \\ 03 \\ 24 \\ 34 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$
∂_q^2	$\begin{matrix} & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}$	$\partial_2^2 = \partial_{1+1}^2$
\mathcal{L}_q^2	$\mathcal{L}_0^2 = \partial_1^2 (\partial_1^2)^T = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$	$\mathcal{L}_1^2 = \partial_2^2 (\partial_2^2)^T + (\partial_1^2)^T \partial_1^2 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 3 \end{pmatrix}$

Таблица 4. Случай SC_3

q	$q = 0$	$q = 1$	$q = 2$
∂_{q+1}^3	$\begin{matrix} & 01 & 12 & 23 & 03 & 24 & 34 \\ \begin{matrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{matrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$	$\begin{matrix} & 012 & 023 & 013 & 123 & 234 \\ \begin{matrix} 01 \\ 12 \\ 23 \\ 03 \\ 24 \\ 02 \\ 13 \\ 34 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$	$\begin{matrix} & 0123 \\ \begin{matrix} 012 \\ 023 \\ 013 \\ 123 \\ 234 \end{matrix} & \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \end{matrix}$
∂_q^3	$\begin{matrix} & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}$	$\partial_1^3 = \partial_{0+1}^3$	$\partial_2^3 = \partial_{1+1}^3$
\mathcal{L}_q^3	$\mathcal{L}_0^3 = \partial_1^2 (\partial_1^2)^T = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & -1 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 4 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$	$\mathcal{L}_1^3 = \partial_2^3 (\partial_2^3)^T + (\partial_1^3)^T \partial_1^3 = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 3 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & -1 & 3 \end{pmatrix}$	$\mathcal{L}_2^3 = \partial_3^3 (\partial_3^3)^T + (\partial_2^3)^T \partial_2^3 = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}$

$\mathcal{L}_0^3: \{4\ 5\ 5\ 2\ 0\}$; $\mathcal{L}_1^3: \{4\ 5\ 5\ 5\ 4\ 4\ 2\ 2\}$; $\mathcal{L}_2^3: \{4\ 4\ 4\ 5\ 2\}$. Полученные признаки — спектры лапласианов — приведены в таблице 5.

Таблица 5. Спектры лапласианов симплициальных комплексов

	$q = 0$	$q = 1$	$q = 2$
Спектр $\mathcal{L}_q^0(r = 0)$	$\{0\ 0\ 0\ 0\ 0\}$	–	–
Спектр $\mathcal{L}_q^1(r = 0,707)$	$\{0\ 0\ 1\ 0\ 3\}$	$\{1\ 3\}$	–
Спектр $\mathcal{L}_q^2(r = 1)$	$\{2,38\ 4,62\ 1,38\ 3,62\ 0\}$	$\{2,38\ 3\ 3,62\ 1,38\ 4,62\ 0\}$	$\{3\}$
Спектр $\mathcal{L}_q^3(r = 1,414)$	$\{4\ 5\ 5\ 2\ 0\}$	$\{4\ 5\ 5\ 5\ 4\ 4\ 2\ 2\}$	$\{4\ 4\ 4\ 5\ 2\}$

Соответствующие числа Бетти приведены в таблице 6.

Радиусы «birth» и «death» и собственные значения лапласианов не изменяются при переносах и вращениях симплициального комплекса. При масштабировании симплициального комплекса собственные значения лапласианов не изменяются, а радиусы «birth» и «death» изменяются пропорционально коэффициенту масштабирования. Собственные значения лапласианов устойчивы к локальным аффинным преобразованиям. При сдвиге (трансвекции), параллельном оси $x: x' = x + \lambda y; y' = y; \lambda = 0,2$, относительное изменение радиусов «birth» и «death» не превышает 0,003 % □.

3. Персистентная спектральная теория

Рассмотрим персистентную спектральную теорию для создания последовательности симплициальных комплексов, индуцированных изменением параметра фильтрации, которая индуцирована персистентной гомологией. Фильтрация ориентированного симплициального комплекса представляет собой последовательность подкомплексов $(K_t)_{t=0}^m$ комплекса $K: \emptyset = K_0 \subseteq K_1 \subseteq K_2 \subseteq \dots \subseteq K_m = K$. Фильтрация индуцирует последовательность цепных комплексов.

Таблица 6. Числа Бетти симплициальных комплексов

	$q = 0$	$q = 1$	$q = 2$
$\beta_q(r = 0)$	5	0	0
$\beta_q(r = 0,707)$	3	0	0
$\beta_q(r = 1)$	1	1	0
$\beta_q(r = 1,414)$	1	1	0

$$\begin{array}{ccccccccccc}
\cdots & C_{q+1}^1 & \partial_{q+1}^{[1*]} \partial_{q+1}^1 \Leftrightarrow & C_q^1 & \partial_q^{[1*]} \partial_q^1 \Leftrightarrow & \cdots & \partial_2^{[1*]} \partial_2^1 \Leftrightarrow & C_1^1 & \partial_1^{[1*]} \partial_1^1 \Leftrightarrow & C_0^1 & \partial_0^{[1*]} \partial_0^1 \Leftrightarrow & C_{-1}^1 \\
& \downarrow & & \downarrow & & & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
\cdots & C_{q+1}^2 & \partial_{q+1}^{[2*]} \partial_{q+1}^2 \Leftrightarrow & C_q^2 & \partial_q^{[2*]} \partial_q^2 \Leftrightarrow & \cdots & \partial_2^{[2*]} \partial_2^2 \Leftrightarrow & C_1^2 & \partial_1^{[2*]} \partial_1^2 \Leftrightarrow & C_0^2 & \partial_0^{[2*]} \partial_0^2 \Leftrightarrow & C_{-1}^2 \\
& \vdots & & \vdots & & & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\
& \downarrow & & \downarrow & & & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
\cdots & C_{q+1}^m & \partial_{q+1}^{[m*]} \partial_{q+1}^m \Leftrightarrow & C_q^m & \partial_q^{[m*]} \partial_q^m \Leftrightarrow & \cdots & \partial_2^{[m*]} \partial_2^m \Leftrightarrow & C_1^m & \partial_1^{[m*]} \partial_1^m \Leftrightarrow & C_0^m & \partial_0^{[m*]} \partial_0^m \Leftrightarrow & C_{-1}^m,
\end{array} \tag{6}$$

где: \downarrow обозначает включение; $C_q^t := C_q(K_t)$ и $\partial_q^t : C_q(K_t) \rightarrow C_{q-1}(K_t)$.

Каждый K_t является ориентированным симплициальным комплексом с размерностью $\dim(K_t)$. Если $q < 0$, то $C_q(K_t) = \{\emptyset\}$ и ∂_q^t фактически является нулевым отображением. Для общего случая $0 < q \leq \dim(K_t)$, если σ_q является ориентированным q -симплексом K_t , то $\partial_q^t(\sigma_q) = \sum_i^q (-1)^i \sigma_{q-1}^i$, $\sigma_q \in K_t$, с $\sigma_q = [v_0, \dots, v_q]$ q -ориентированным симплексом и $\sigma_{q-1}^i = [v_0, \dots, \hat{v}_i, \dots, v_q]$ ориентированным $(q-1)$ -симплексом, в котором вершина v_i удалена.

Пусть C_q^{t+p} — подмножество C_q^{t+p} , граница которого находится в C_{q-1}^t : $C_q^{t+p} := \{\alpha \in C_q^{t+p} \mid \partial_q^{t+p}(\alpha) \in C_{q-1}^t\}$. Определим $\partial_q^{t+p} : C_q^{t+p} \rightarrow C_{q-1}^t$. На основе q -комбинаторного оператора Лапласа p -персистентный q -комбинаторный оператор Лапласа, определённый вдоль фильтрации, который можно выразить в форме матрицы Лапласа:

$$\mathcal{L}_q^{t+p} = \partial_{q+1}^{t+p} (\partial_{q+1}^{t+p})^* + \partial_q^{t*} \partial_q^t. \tag{7}$$

Предположим, что существует ориентированный симплициальный комплекс K_t и ориентированный симплициальный комплекс K_{t+p} , построенный путём добавления симплексов разных размеров к K_t с $\dim(K_{t+p}) = q+1$. Так как $K_t \subset K_{t+p}$, то

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_q^{t+0} &= \mathcal{L}_q^t = \partial_{q+1}^t (\partial_{q+1}^t)^* + \partial_q^{t*} \partial_q^t; \\
\mathcal{L}_q^{t+p} &= \partial_{q+1}^{t+p} (\partial_{q+1}^{t+p})^* + \partial_q^{t*} \partial_q^t.
\end{aligned}$$

Если спектры \mathcal{L}_q^{t+0} и \mathcal{L}_q^{t+p} совпадают, то топологическая структура K_t не меняется в процессе фильтрации. Если спектры \mathcal{L}_q^{t+0} и \mathcal{L}_q^{t+p} не совпадают, то топологическая структура K_t строит связь с «внешними» топологическими структурами; вычисляя спектры \mathcal{L}_q^{t+p} , можно обнаружить информацию об исчезнувшей и сохранившейся структуре процесса фильтрации. Числа нулевых собственных значений p -персистентной q -комбинаторной матрицы Лапласа \mathcal{L}_q^{t+p} определяют p -персистентные q -ые числа Бетти: β_q^{t+p} .

Пример 2. Случай $SC_1 \rightarrow SC_2; (r = 0,7071) \rightarrow (r = 1)$. Результаты вычислений приведены в таблице 7.

Размерности лапласианов: $\dim(\mathcal{L}_0^{1+1}) = 5$; $\dim(\mathcal{L}_1^{1+1}) = 6$. Ранги лапласианов: $\text{rank}(\mathcal{L}_0^{1+1}) = 4$; $\text{rank}(\mathcal{L}_1^{1+1}) = 5$. Числа Бетти: $\beta_0^{1+1} = 1$; $\beta_1^{1+1} = 1$. Спектры собственных значений лапласианов: $\mathcal{L}_0^{1+1} : \{2,38 \ 4,62 \ 1,38 \ 3,62 \ 0\}$;

$\mathcal{L}_1^{1+1} : \{2,38 \ 3 \ 3,62 \ 1,38 \ 4,62 \ 0\}$. Так как $\beta_1^2 = 1$, то собственный вектор, соответствующий нулевому собственному значению лапласиана \mathcal{L}_1^2 : $v = (0,522 \ 0,522 \ 0,348 \ -0,522 \ 0,174 \ -0,174)^T$, то есть совпадает с собственным вектором, соответствующим нулевому собственному значению лапласиана \mathcal{L}_1^2 для случая $SC_2 \rightarrow SC_2$. \square

Таблица 7. Случай $SC_1 \rightarrow SC_2$

q	$q = 0$	$q = 1$
∂_{q+1}^{1+1}	$\begin{matrix} & 01 & 12 & 23 & 03 & 24 & 34 \\ \begin{matrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{matrix} & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$	$\begin{matrix} & 234 \\ \begin{matrix} 01 \\ 12 \\ 23 \\ 03 \\ 24 \\ 34 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$
∂_q^1	$\begin{matrix} & 0 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ \begin{matrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \end{matrix}$	$\begin{matrix} & 01 & 12 & 23 & 03 & 24 & 34 \\ \begin{matrix} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \end{matrix}$
\mathcal{L}_q^{1+1}	$\mathcal{L}_0^2 = \partial_1^2 (\partial_1^2)^T = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & 2 \end{pmatrix}$	$\mathcal{L}_1^2 = \partial_2^{1+1} (\partial_2^{1+1})^T + (\partial_1^1)^T \partial_1^1 = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 3 \end{pmatrix}$

4. Определение расстояния Вассерштейна

Рассмотрим расширенный баркод, который состоит из следующих элементов: радиус появления баркода b (birth), радиус исчезновения баркода d (death), значение функции на заданной цепи симплекса f . Для расширенных баркодов одинаковой размерности [3]: $B = \{\{b_i, d_i, f_i\}\}_{i \in I}$; $B' = \{\{b'_j, d'_j, f'_j\}\}_{j \in J}$, где $j \in J$ — номер симплекса, полученный отображением симплекса с номером $i \in I$: $j = \varphi(i)$, можно вычислить расстояние между B и B' : $\Delta_b([b, d], [b', d']) = \max\{|b - b'|, |d - d'|\}$ и расстояние между функциями f_j и f'_j : $\Delta_f(f, f') = \left| (d - b)^{-1} \int_b^d f(x) dx - (d' - b')^{-1} \int_{b'}^{d'} f'(x) dx \right|$. При $f(x) = \text{const}$; $f'(x) = \text{const}$: $\Delta_f(f_i, f'_j) = |f_i - f'_j|$.

Расстояние Вассерштейна между изображениями, обусловленное неравенствами границ баркодов исходного и терминального изображений $d_{W,2}^2(B, B') = \sum_{i \in I} \left(\Delta_b \left([b_i, d_i], [b'_{\varphi(i)}, d'_{\varphi(i)}] \right) \right)^2$. Расстояние между изображениями, обусловленное неравенствами функций исходного и терминального изображений соответствующих симплексов: $d_f^2(B, B') = \sum_{i \in I} \left(\Delta_f \left(f_i, f'_{\varphi(i)} \right) \right)^2$.

Суммарное расстояние Вассерштейна можно определить из соотношения:

$$d_{MW}^2(\mu_b, \mu_f, B, B') = \mu_b \cdot d_{W,2}^2(B, B')^2 + \mu_f \cdot d_f^2(B, B')^2, \quad (8)$$

где μ_b — весовой параметр для $d_{W,2}(B, B')$ и μ_f — весовой параметр для $d_f(B, B')$.

Для определения модифицированного расстояния Вассерштейна при учёте спектра собственных значений лапласиана предлагается к выражению для $d_{MW}^2(\mu_b, \mu_f, B, B')$ прибавить расстояние $d_{\mathcal{L}}^2(B, B')$:

$$d_{\mathcal{L}}^2(B, B') = \sum_{i \in I} \left(\Delta_{\mathcal{L}}(\lambda_i, \lambda'_{\varphi(i)}) \right)^2 \quad (9)$$

с весовым параметром $\mu_{\mathcal{L}}$, где

$$\Delta_{\mathcal{L}}(\lambda_i, \lambda'_{\varphi(i)}) = 1 - \exp \left(- \frac{(\lambda_i - \lambda'_{\varphi(i)})^2}{c^2} \right);$$

при $|\lambda_i - \lambda'_{\varphi(i)}| = c$, значение $\Delta_{\mathcal{L}}(\lambda_i, \lambda'_{\varphi(i)}) = 1 - e^{-1} \approx 0,6321$. При одинаковых спектрах собственных значений лапласиана $d_{\mathcal{L}}^2(B, B') = 0$.

Заключение

Представлен метод построения персистентных спектров собственных значений комбинаторных матриц Лапласа для оценивания симплициальных комплексов, аппроксимирующих формы объектов. Метод позволяет объединить топологическую устойчивость и геометрический анализ многомерных наборов данных. Ряд персистентных комбинаторных матриц Лапласа индуцируется фильтрацией на основе определения радиусов появления и исчезновения собственных значений лапласианов. Числа нулевых собственных значений персистентных матриц Лапласа представляют собой персистентные числа Бетти для данного этапа фильтрации. Предлагаемый персистентный спектральный анализ может сочетаться с алгоритмами машинного обучения.

Для учёта негеометрической информации несоответствия между исходным и конечным изображениями используется модифицированный метод Л. Вассерштейна. Использование персистентных гомологий по отношению к методам традиционной алгебраической топологии позволяет получить дополнительную информацию о форме объекта.

Методы вычислительной топологии нашли применение в биоинформатике, биометрии, астрономии, авиации, обработке геоинформации, здравоохранении, при навигации и ориентации ЛА, в системах управления движением. В перспективных исследованиях предполагается использовать методы вычислительной топологии при обработке сигналов различной физической природы: видео- и голографической информации, аудио- и акустической информации, оптических, электрических и электромагнитных сигналов; для оценивания этих сигналов, идентификации штатного/нештатного функционирования систем и т. д.

Определение спектра собственных значений матрицы Лапласа для симплициальных комплексов расширяет количество признаков для машинного обучения, что позволяет повысить разнообразие информации, полученной методами вычислительной топологии при сохранении топологических инвариантов.

Приложение

Группы гомологий

Для топологического пространства X последовательности комплексов $C_0(X), C_1(X), \dots$ описывают различную размерную информацию о пространстве X , которая связана такими граничными операторами $\partial_k : C_k \rightarrow C_{k-1}$, что $\text{im} \partial_k \subseteq \ker \partial_{k-1}$, т. е. $\partial_{k-1} \partial_k = 0$. С q -симплексом $\sigma_k = [v_0, \dots, v_k]$, где $v_i; i = 0, \dots, k$ — все вершины σ_k , $\partial_k \sigma_k$ могут быть заданы формальной суммой с коэффициентами в поле \mathbb{Z}_2 : $\partial_k \sigma_k = \sum_{i=0}^k \sigma_{k-1}^i$, где σ_i^{k-1} — симплекс с отсутствующей i -й вершиной. Алгебраическая конструкция для объединения последовательности комплексов с помощью граничных отображений называется цепным комплексом:

$$\dots \xrightarrow{\partial_{i+1}} C_i(X) \xrightarrow{\partial_i} C_{i-1}(X) \xrightarrow{\partial_{i-1}} \dots \xrightarrow{\partial_2} C_1(X) \xrightarrow{\partial_1} C_0(X) \xrightarrow{\partial_0} 0,$$

а k -я группа гомологий является фактор-группой: $H_k = \frac{\ker \partial_k}{\text{im} \partial_{k+1}}$. Гомологические характеристики пространства K — числа Бетти определяются рангами k -ой группы гомологий H_k в частности: $\text{rank}(H_0)$ — количество соединённых компонентов, $\text{rank}(H_1)$ — количество петель, $\text{rank}(H_2)$ — количество полостей.

Коцепи и когомологии [10]

Если существует функционал $Y(X)$, который принимает значения на цепи $X: Y(X) = \langle Y, X \rangle$, то кограничный оператор $\delta_n : C^n \rightarrow C^{n+1}$ можно определить на основе соотношения:

$$\langle \delta_n Y, X \rangle = \langle Y, \partial_n X \rangle, X \in C_n, Y \in C^{n-1}.$$

Если векторные пространства $C_i(X)$ определены на \mathbb{R} , то каждому $C_i(X; \mathbb{R})$ можно задать структуру внутренних произведений. Это позволяет определить

дуальное пространство $C^i(X; \mathbb{R})$. Член этого дуального пространства является вещественным отображением цепей $c_i(X)$ в \mathbb{R} . Эти отображения являются коцепями, и дуальное пространство $\text{Hom}_{\mathbb{R}}(C_i(X; \mathbb{R}), \mathbb{R})$ для размерности i обозначается как $C^i(X; \mathbb{R})$. Поскольку цепи представляют собой линейные комбинации симплексов, каждое отображение описывается указанием его значения на каждом симплексе. Использование дуальности можно идентифицировать коцепь $C^i(X; \mathbb{R})$ с цепью $C_i(X; \mathbb{R})$ с помощью внутреннего произведения. Поэтому можно определить дуальный оператор, который называется отображением кограницы: $\delta_i : C^i(X; \mathbb{R}) \rightarrow C^{i+1}(X; \mathbb{R})$. δ_i — это сопряжённый оператор ∂_{i+1}^* по отношению к граничному оператору ∂_{i+1} .

Если $\phi \in C^i(X)$, то для симплекса $\sigma = [v_0, \dots, v_{i+1}] \in C_{i+1}(X)$:

$$\delta_i \phi(\sigma) = \sum_{j=0}^{i+1} (-1)^j \phi([v_0, \dots, v_{j-1}, v_{j+1}, \dots, v_{i+1}]),$$

то есть отображение $\delta_i \phi$ при оценке σ на симплексе равно сумме оценок ϕ на всех гранях σ . Так как $\delta_i = \partial_{i+1}^*$, то матричное представление кограничного оператора для конечных симплициальных комплексов представляет собой транспонирование матрицы соответствующего граничного оператора.

Так как для кограничных отображений выполняется $\delta_i \delta_{i+1} = 0$, то кограничные операторы образуют цепной комплекс:

$$0 \leftarrow C^n(X; \mathbb{R}) \leftarrow \dots \xleftarrow{\delta_k} C^k(X; \mathbb{R}) \xleftarrow{\delta_{k-1}} C^{k-1}(X; \mathbb{R}) \dots \xleftarrow{\delta_1} C^1(X; \mathbb{R}) \xleftarrow{\delta_0} C^0(X; \mathbb{R}) \leftarrow 0,$$

который порождает группы когомологий $H^k(X) = \frac{\ker \delta_k}{\text{im} \delta_{k+1}}$. Когда коэффициенты в гомологиях и когомологиях выбираются в \mathbb{R} , группы когомологий являются точно дуальными по отношению к группам гомологий: $H^k(X; \mathbb{R}) \cong \text{Hom}_{\mathbb{R}}(H_k(X; \mathbb{R}), \mathbb{R})$.

Предположим, что $\omega \in C^k(X; \mathbb{R})$, $\delta_1 \omega \in C^{k+1}(X; \mathbb{R})$ — отображение из k -симплексов, принадлежащих X , в \mathbb{R} . Пусть $s = \sum_j \alpha_j \sigma_j \in C_{k+1}(X; \mathbb{R})$, где $\alpha_j \in \mathbb{R}$ и σ_j — это k -симплексы. Выполним вычисление $\delta_k \omega(s) = \sum_j \alpha_j \delta_k \omega(\sigma_j)$. Из дуальности $\delta_k = \partial_{k+1}^*$ следует, что $\delta_k \omega = \omega \partial_{k+1}$. Следовательно,

$$\sum_j \alpha_j \delta_k \omega(\sigma_j) = \sum_j \alpha_j \omega(\partial_{k+1} \sigma_j) = \omega \left(\partial_{k+1} \sum_j \alpha_j \sigma_j \right) = \omega \partial_{k+1} s.$$

Это вычисление можно рассматривать как дискретизацию теоремы Стокса для интегрирования по области \mathcal{D} , $\int_{\mathcal{D}} \omega = \int_{\partial \mathcal{D}} d\omega$, где $\partial \mathcal{D}$ — граница области и $d\omega$ дифференциал ω . Это говорит о том, что $C^i(X; \mathbb{R})$ также можно интерпретировать как множество дискретных дифференциальных форм на комбинаторном многообразии X .

Благодарности

Работа выполнена при поддержке комплексной программы фундаментальных научных исследований СО РАН I.5.1.7, проект 0314-2016-0020, и при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 18-07-00526 и № 18-08-01284)

ЛИТЕРАТУРА

1. Hofer C., Kwitt R., Niethammer M., Uhl A. Deep learning with topological signatures // In Advances in Neural Information Processing Systems. 2017. P. 1634–1644.
2. Чуканов С.Н. Сравнение диффеоморфных изображений на основе формирования персистентных гомологий // Моделирование и анализ информационных систем. 2016. Т. 26, № 3. С. 450–468.
3. Edelsbrunner H., Harer J. Computational topology: an introduction. American Mathematical Soc., 2010. 241 p.
4. Zomorodian A., Carlsson G. Computing persistent homology // Discrete and Computational Geometry. 2005. V. 33, No. 2. P. 247–274.
5. Hatcher A. Algebraic Topology. Cambridge UP, 2002. 544 p.
6. Horak D., Jost J. Spectra of combinatorial Laplace operators on simplicial complexes // Advances in Mathematics. 2013. V. 244. P. 303–336.
7. Chung F.R.K. Spectral Graph Theory. AMS, 1997. 207 p.
8. Goldberg T.E. Combinatorial laplacians of simplicial complexes. Senior Thesis. Bard College, 2002. 74 p.
9. Adams H., Tausz A. JavaPlex Tutorial. 2009. 41 p.
10. Ghrist R., Muhammad A. Coverage and Hole-Detection in Sensor Networks via Homology // The Fourth International Conference on Information Processing in Sensor Networks (ipsn'05). UCLA, Los Angeles, CA, April 25–27, 2005.

DETERMINATION OF FEATURES BASED ON THE FORMATION OF PERSISTENT SPECTRA OF EIGENVALUES OF LAPLACE MATRICES

S.V. Lejhter¹

Senior Lecturer, e-mail: leykhter@mail.ru

S.N. Chukanov²

Dr.Sc.(Eng.), Professor, Leading scientific employee, e-mail: ch_sn@mail.ru

¹Dostoevsky Omsk State University (OmSU)

²Sobolev Institute of Mathematics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences

Abstract. An algorithm for determining the spectrum of eigenvalues of the Laplace matrix for simplicial complexes has been developed in the paper. The spectrum of eigenvalues of the Laplace matrix is used as features in the data structure for image analysis. Similarly to the method of persistent homology, the filtering of embedded simplicial complexes is formed, approximating the image of the object, but the

topological features at each stage of filtration is the spectrum of eigenvalues of the Laplace matrix of simplicial complexes. The spectrum of eigenvalues of the Laplace matrix allows to determine the Betti numbers and Euler characteristics of the image. Based on the method of finding the spectrum of eigenvalues of the Laplace matrix, an algorithm is formed that allows you to obtain topological features of images of objects and quantitative estimates of the results of image comparison. Software has been developed that implements this algorithm on computer hardware. The method of determining the spectrum of eigenvalues of the Laplace matrix has the following advantages: the method does not require a bijective correspondence between the elements of the structures of objects; the method is invariant with respect to the Euclidean transformations of the forms of objects. Determining the spectrum of eigenvalues of the Laplace matrix for simplicial complexes allows you to expand the number of features for machine learning, which allows you to increase the diversity of information obtained by the methods of computational topology, while maintaining topological invariants. When comparing the shapes of objects, a modified Wasserstein distance can be constructed based on the eigenvalues of the Laplace matrix of the compared shapes. Using the definition of the spectrum of eigenvalues of the Laplace matrix to compare the shapes of objects can improve the accuracy of determining the distance between images.

Keywords: computational topology, Wasserstein distance, eigenvalues, Laplace matrix.

REFERENCES

1. Hofer C., Kwitt R., Niethammer M., and Uhl A. Deep learning with topological signatures. In *Advances in Neural Information Processing Systems*, 2017, pp. 1634–1644.
2. Chukanov S.N. Sravnenie diffeomorfnikh izobrazhenii na osnove formirovaniya persistentnykh gomologii. *Modelirovanie i analiz informatsionnykh sistem*, 2016, vol. 26, no. 3, pp. 450–468. (in Russian)
3. Edelsbrunner H. and Harer J. *Computational topology: an introduction*. American Mathematical Soc., 2010, 241 p.
4. Zomorodian A. and Carlsson G. Computing persistent homology. *Discrete and Computational Geometry*, 2005, vol. 33, no. 2, pp. 247–274.
5. Hatcher A. *Algebraic Topology*. Cambridge UP, 2002, 544 p.
6. Horak D. and Jost J. Spectra of combinatorial Laplace operators on simplicial complexes. *Advances in Mathematics*, 2013, vol. 244, pp. 303–336.
7. Chung F.R.K. *Spectral Graph Theory*. AMS, 1997, 207 p.
8. Goldberg T.E. Combinatorial laplacians of simplicial complexes. Senior Thesis, Bard College, 2002, 74 p.
9. Adams H. and Tausz A. *JavaPlex Tutorial*. 2009, 41 p.
10. Ghrist R. and Muhammad A. Coverage and Hole-Detection in Sensor Networks via Homology. *The Fourth International Conference on Information Processing in Sensor Networks (ipsn'05)*, UCLA, Los Angeles, CA, April 25–27, 2005.

Дата поступления в редакцию: 09.04.2020