

等变网络摘要

NoteBook链接：

<https://nb.bohrium.dp.tech/detail/1342>

1. 一些概念：

在数学里，一般用群论这门学科来建模对称性。等变性其实就是欧氏空间里的对称性，因此往往也用群论进行建模。 $O(3)$ 、 $SO(3)$ 、 $E(3)$ 、 $SE(3)$ 都是群的名字。

其实说透了就十分简单：

1. 我们从旋转矩阵出发。如果你了解空间几何，你一定知道**旋转矩阵就是行列式为1的3维正交矩阵**。

2. $O(n)$ 指的是n维正交矩阵组成的群（ O =orthogonal），因此 $o(3)$ 表示所有3维正交矩阵。 $O(3)$ 中的正交矩阵的行列式有+1和-1这两种取值，其中+1的那些就是所有旋转矩阵，-1的那些则是**瑕旋转矩阵**（表示旋转+一次镜面对称）。

3. $SO(3)$ 是 $O(3)$ 的子群（ SO =special orthogonal），表示 $O(3)$ 中的所有行列式为+1的元素。因此， $SO(3)$ 就是全体旋转矩阵。

4. $E(3)$ 中的元素等于 $O(3)$ 里的元素加上任意平移变换（ E =Euclidean），因此 $e(3)$ 表示任意旋转、镜面对称、平移操作的复合。

5. $SE(3)$ 类似 $E(3)$ ，是任意旋转、平移操作的复合。

总而言之，这些名字代表了欧氏空间里变换操作的集合。因此一个东西具有 **$SE(3)$ 等变性**的意思就是它在 **$SE(3)$ 的元素所代表的变换下，是等变的**，即旋转平移等变性。

数学术语

$O(3)$ ：

指三维正交矩阵，但正交矩阵的行列式有 ± 1 之分，如果是+1，则是旋转矩阵，-1对应瑕旋转矩阵（旋转+一次镜像）

所以仅含 $O(3)$ 的矩阵代表，满足旋转+镜像两种等变性。

S ：

S =special，指行列式仅为+1，即取消了镜像等变性

E ：

E =Euclidean，指满足平移等变性。

群论术语

上述元素进行组合，得到常见的一些术语：

$SO(3)$ ：

仅满足旋转等变性

$E(3)$ ：

满足旋转、镜像、平移等变性（ O 省略没写）

$SE(3)$ ：

满足旋转，平移等变性（ O 省略没写）

对称性的需求

🔗 接下来，为了说明等变性是什么，请你跟着提示做（如果想象起来很困难，可以只考虑2-3个原子）：

1. 鼠标移到上面的可视化widget。
2. 滑动滚轮使得分子放大/缩小，也就是使它在垂直屏幕的方向做**平移**运动。思考：在这个**平移**的过程中，这个分子的能量和受力会发生变化吗？
3. 按住鼠标左键拖动，使得分子在空间中**旋转**。思考：在这个**旋转**的过程中，分子的能量和受力会发生变化吗？如果有，是怎么变化？提示：受力是原子相互作用的结果。
4. 先把原子从左往右大致编号。接着，重新按从右往左的顺序编号。那么，在这个重新**排列/置换**的过程中，分子的能量和受力会发生变化吗？
5. 想象你的屏幕是一个镜子，镜面内倒映出了分子的镜像。那么，在这个**镜面对称**变换导致的镜像分子里，能量和受力会发生变化吗？

下一个单元格是答案（为防剧透已折叠，请点击展开阅读）。

▼ 答案在此，点击展开

2. **平移**：势能 - 不变，受力 - 不变
3. **旋转**：势能 - 不变，受力 - 改变，和坐标一起旋转
4. **排列/置换**：势能 - 不变，受力 - 改变，和原子序号一起重新排列
5. **镜面对称**：势能 - 不变，受力 - 改变，和坐标一起镜面对称（注）

注：镜面对称可能涉及“宇称不对称性”的讨论，但宇称不对称性主要描述弱相互作用，而弱相互作用在分子层面可以忽略不计。

你应该已经看出来了，这里存在两种模式，即“不变”和“一起变”。其中，“一起变”的术语为“**协变**”（covariant）或者“**等变**”（equivariant）。

因此我们会说，势能和受力都具有“平移不变性”，势能有“旋转不变性”，受力有“旋转等变性”。

有时为了方便，也会将标量的“不变”称为“等变”，因此，我们会说分子的势能和受力都有“**旋转平移等变性**”（roto-translational equivariance），也叫**SE(3)等变性**（名字的由来在下文解释）。

在分子体系的这四种不变/等变性中：

- 置换不变/等变性在神经网络里的实现是自然的，只需要模型不依赖输入的顺序即可（技术上讲即不在 N 这个维度使用CNN、RNN等依赖顺序的结构）
- 镜面对称则主要体现在分子的手性上，而手性分子其实一般都不是严格的镜面对称，而是不能重合的，因此是否实现这种不变/等变性的影响不大，一般不强调这种不变/等变性
- 平移不变性的实现也是简单的，只要模型不依赖于原子的绝对坐标，而是依赖于原子间的相对坐标即可（例如只用距离）

因此，在本文剩下的内容中，我们主要关注**旋转等变性**。

平移不变性：将输入坐标转换成内坐标（距离，角度，二面角等）即可满足

排列、置换：输入层不依赖于顺序即可

镜面：这个属于较为挑剔的对称性要求，对于手性分子体系可能更加重要，满足这类要求的不能带S

旋转：上述几种矩阵均可满足

不变性和等变性

```
# 如果网络不变，那么以下式子应当成立：predict(coords) == predict(coords @ rot)
# 如果网络等变，那么以下式子应当成立：predict(coords) @ rot == predict(coords @ rot)
```

1. 为什么现在这么多研究强调等变性？

a. 因为力场函数的训练是需要受力拟合等变的。

2. 那以前的DeepMD, SchNet是如何实现力场等变性的？

a. 0阶不变----->1阶等变。DeepMD, SchNet 均是以原子为中心，最后求出的是原子均摊的体系势能，而所谓受力，是通过求导得到的

3. 等变性对标量性质的预测是否有帮助？

a. 理论上，标量性质的预测满足不变性即可，即，上图中的第一条。

b. 但是先进等变网络的设计会增加模型的表达能力，间接提高标量性质的预测能力。

c. 例如，PAINN的模型设计使得模型可以鉴别出顺式、反式的分子，而这一点并不是等变性设计的本意。

d. 类似的例子在LeftNet, SMP中均有提及。模型设计使其拥有更强的鉴别能力，并不代表模型具有等变性，但二者可以是同一件事情。

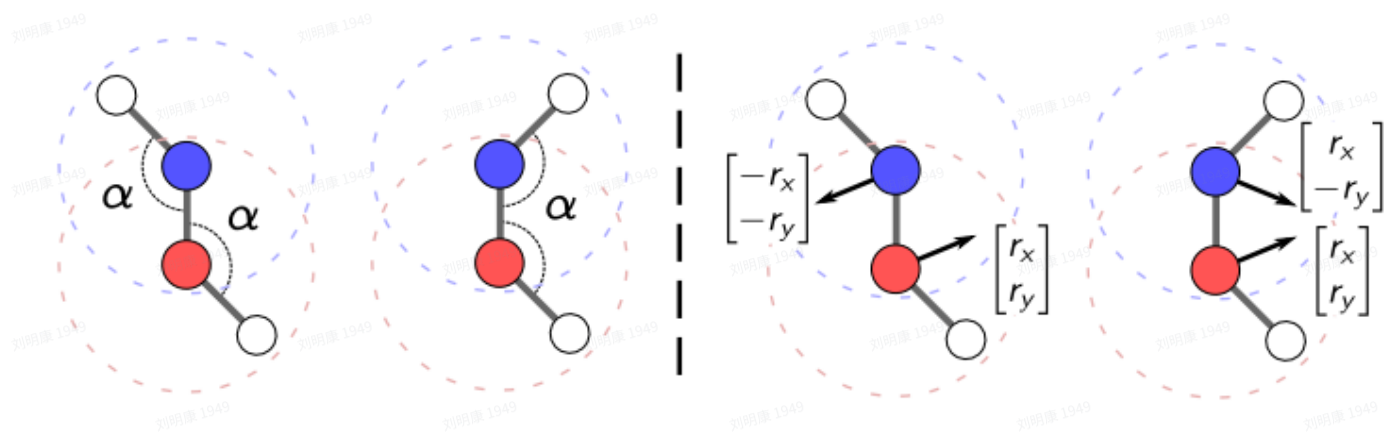


Figure 1. Illustration of message passing using angles and directions for two structures. All edges within the cutoff range (dashed lines) have equal length. The representations of the blue and red node are the same using angles (left), while directions allow to distinguish both structures (right).

PAINN 鉴别顺式、反式

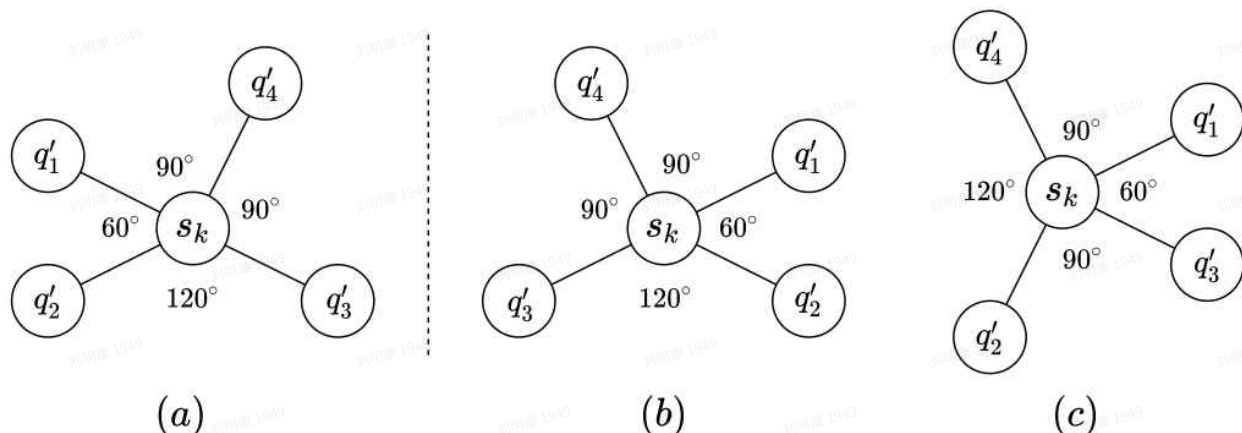


Figure 3: An illustration of cases that SMP can and cannot distinguish. All the neighboring nodes of s_k are projected to the plane perpendicular to the message of interest. We assume all the distances and angles are fixed (the molecules can be more easily distinguished otherwise). Hence, all the angle shown are torsion angles and they are formed in the anticlockwise direction. (a) and (b) are chiral and SMP can distinguish them. This is because in (a), $q'_1(90^\circ)$, $q'_2(60^\circ)$, $q'_3(120^\circ)$, $q'_4(90^\circ)$; in (b), $q'_1(60^\circ)$, $q'_2(120^\circ)$, $q'_3(90^\circ)$, $q'_4(90^\circ)$. SMP cannot distinguish (b) and (c) but this scenario may not exist in nature. $\angle q'_1 s_k q'_2$ in (b) and $\angle q'_1 s_k q'_3$ in (c) usually are different as q'_2 and q'_3 are different atoms and the corresponding distances and angles are the same.

SMP鉴别能力

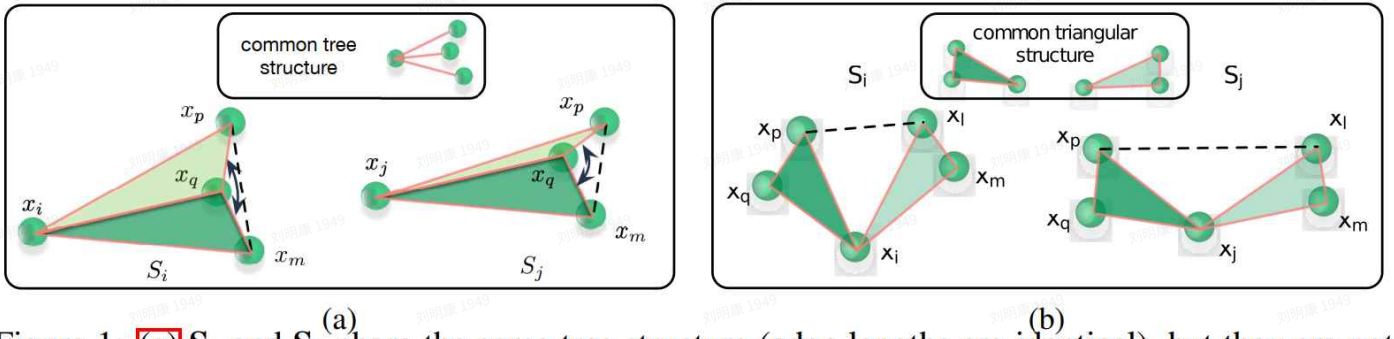


Figure 1: (a) S_i and S_j share the same tree structure (edge lengths are identical), but they are not triangular isomorphic (different dihedral angles); (b) S_i and S_j are triangular isomorphic but not subgraph isomorphic (the relative distance between the two triangles is different).

LeftNet鉴别能力

文献链接: https://ucoyxk075n.feishu.cn/drive/folder/Crunfr6IIJhTZdLI8bcJCWenZe?from=from_copylink