Akademia Górniczo-Hutnicza
im. Stanisława Staszica w Krakowie
AGH University of Science
and Technology

Reprezentacja i przetwarzanie danych w przestrzeni funkcji sferycznych, zastosowanie w algorytmach uczenia maszynowego

Kamil Bartocha[1]

[1]Wydział Matematyki Stosowanej AGH
al. Mickiewicza 30
30-059 Kraków

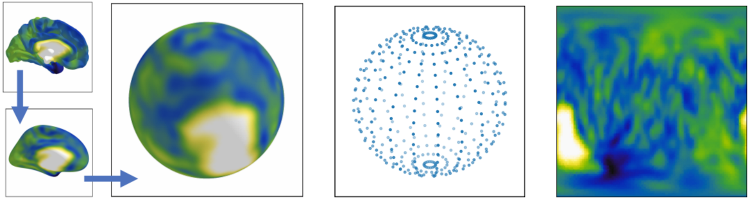
Agenda

1. Wstęp

Algorytm sferycznej konwolucyjnej sieci neuronowej SCNN (ang. spherical convoluneural network) pozwala przetwarzać obrazy za pomocą technik uczenia głębokiego.

Znajduje on zastosowanie w dziedzinie badań opartych na danych $3D$ tj.

- badanie metodą rezonansu magnetycznego (MRI),
- modelowanie molekularne.



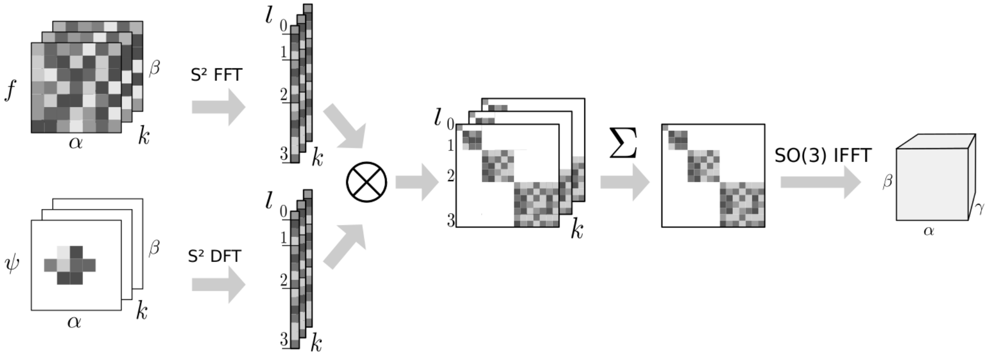
Rysunek: Modelowanie korowe z użyciem SCNN.

Problem:

Jakiej klasy funkcje mogą zostać użyte w algorytmie [1] SCNN wykorzystującym uogólnioną szybką transformatę Fouriera?

$$f(R) \approx \sum_{l=0}^{b} (2l+1) \sum_{m=-l}^{l} \sum_{n=-l}^{l} \widehat{f}_{mn}^{l} D_{mn}^{l}(R).$$

[1] Taco S. Cohen, Mario Geiger, Jonas Köhler, Max Welling. Spherical CNNs. 2018



Rysunek: Algorytm konwolucyjnej sferycznej sieci neuronowej

4. Odwrócona transformata Fouriera dla $SO(3)$

Dzięki własnościom:

- Przestrzeń funkcji D-Wignera jest zupełna oraz stanowi bazę.
- Funkcje D-Wignera $D^l_{mn} D^{l'}_{m'n'} \in SO(3)$ są ortogonalne.

Funkcja $f : SO(3) \to \mathbb{C}$ może być przedstawiona jako kombinacja liniowa funkcji D-Wignera.

Możemy zdefiniować uogólnioną transformację Fouriera $\mathcal{F}$ w grupie $SO(3)$

$$f(R) = [\mathcal{F}^{-1}\widehat{f}](R) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1) \sum_{m=-l}^{l} \sum_{n=-l}^{l} \widehat{f}^l_{mn} D^l_{mn}(R), \qquad (1)$$

$$f(R) \approx \sum_{i=0}^{b}(2l+1) \sum_{m=-l}^{l} \sum_{n=-l}^{l} \widehat{f}^l_{mn} D^l_{mn}(R), \qquad (2)$$

Zaproponowane twierdzenie (zbieżność błędu).

Twierdzenie

Dla dowolnej funkcji $f : SO(3) \to \mathbb{R}$ spełniającej warunek

$$\sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1)^{\frac{5}{2}} \sup_{|m|,|n| \leqslant l} |\widehat{f}^{l}_{mn}| < +\infty, \tag{3}$$

dla $b \to +\infty$ zachodzi

$$\pi_b f \xrightarrow{L^2(SO(3))} f. \tag{4}$$

AGH

Dowód

$$
\begin{aligned}
\|\pi_b f - f\|_{L^2(SO(3))} &= \left\| \sum_{l=b+1}^{\infty} (2l+1) \sum_{m=-l}^{l} \sum_{n=-l}^{l} \widehat{f}^l_{mn} D^l_{mn} \right\|_{L^2(SO(3))} \\
&\leqslant \sum_{l=b+1}^{\infty} (2l+1) \sum_{m=-l}^{l} \sum_{n=-l}^{l} \left\| \widehat{f}^l_{mn} D^l_{mn} \right\|_{L^2(SO(3))} \\
&\leqslant \sum_{l=b+1}^{\infty} (2l+1)^{\frac{5}{2}} \sup_{|m|,|n|\leqslant l} \left| \widehat{f}^l_{mn} \right|
\end{aligned}
\tag{5}
$$

Zauważmy, że dla b zbiegającego do nieskończoności wyrażenie otrzymane w (5) $\sum_{l=b+1}^{\infty}(2l+1)^{\frac{5}{2}} \sup_{|m|,|n|\leqslant l} |\widehat{f}^l_{mn}|$ dąży do 0, ponieważ jest to suma ogonowa szeregu zbieżnego co dowodzi tezę.

Zaproponowane twierdzenie (oszacowanie błędu).

Twierdzenie

Dla funkcji $f : SO(3) \to \mathbb{R}$ oraz dla $b \in \mathbb{N}$ błąd aproksymacji jest ograniczony oraz zachodzi szacowanie

$$\|\pi_b f - f\|_{L^2(SO(3))} \leqslant \sum_{l=b+1}^{\infty} (2l+1)^{\frac{5}{2}} \sup_{|m|,|n| \leqslant l} |\widehat{f}^l_{mn}|. \tag{6}$$

Dzięki powyższemu rezultatowi, wiemy że algorytm obliczający korelację sferyczną działa poprawnie dla odpowiednio dużego współczynnika b pod warunkiem, że funkcja jest odpowiedniej klasy, czyli spełnia warunek (6).

Rozważmy funkcję

$$f(R) = \sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)\sum_{m=-l}^{l}\sum_{n=-l}^{l} c_{mn}^{l} D_{mn}^{l}(R), \tag{7}$$

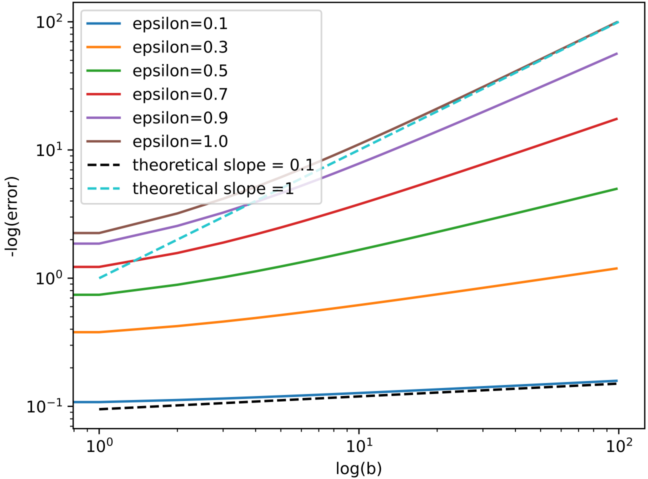
Przeprowadźmy szacowanie

$$\begin{aligned} \|\pi_b f - f\|_{L^2(SO(3))} &\leqslant \sum_{l=b+1}^{+\infty}(2l+1)^{\frac{1}{2}}\sum_{m=-l}^{l}\sum_{n=-l}^{l}|c_{mn}^{l}|(2l+1)^{\frac{1}{2}} \\ &\leqslant \sum_{l=b+1}^{+\infty}(2l+1)^{\frac{5}{2}}|c^{l}|. \end{aligned} \tag{8}$$

przyjmijmy następnie $c^l = (2l+1)^{-\frac{5}{2}}\frac{1}{l^{1+\epsilon}}$. Szacując błąd dla $\epsilon > 0$ otrzymujemy

$$\|\pi_b f - f\|_{L^2(SO(3))} \leqslant \sum_{l=b+1}^{+\infty}(2l+1)^{-\frac{5}{2}}(2l+1)^{\frac{5}{2}}\frac{1}{l^{1+\epsilon}} = \sum_{l=b+1}^{+\infty}\frac{1}{l^{1+\epsilon}}.$$

Wykres tempa zbieżności dla przykładu 2.



7. Podsumowanie

Reasumując powyższe rozważania można stwierdzić, że uogólniona szybka transformacja Fouriera wykorzystywana w algorytmie sferycznej konwolucyjnej sieci neuronowej pozwala efektywnie aproksymować sygnały.

Pokazaliśmy, że algorytm obliczający korelację sferyczną działa poprawnie dla odpowiednio dużego współczynnika b pod warunkiem, że funkcja $f : SO(3) \to \mathbb{R}$ jest odpowiedniej klasy, czyli spełnia warunek

$$\sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1)^{\frac{5}{2}} \sup_{|m|,|n| \leqslant l} |\widehat{f}^{l}_{mn}| < +\infty,$$

zaś błąd aproksymacji jest ograniczony i zachodzi oszczacowanie

$$\|\pi_b f - f\|_{L^2(SO(3))} \leqslant \sum_{l=b+1}^{\infty} \sup_{|m|,|n| \leqslant l} (2l+1)^{\frac{5}{2}} |\widehat{f}^{l}_{mn}|.$$