

Detecção de órbitas de representações de grupos de Lie compactos a partir de nuvens de pontos

Henrique Ennes – DataShape/COATI (Sophia Antipolis)

Raphaël Tinarrage – EMAp/FGV (Rio de Janeiro)



Bernhard Riemann
1826 - 1866

Sophus Lie
1842 – 1899

Wilhelm Killing
1847 - 1923

Felix Klein
1849 – 1925

Élie Cartan
1869 - 1951

Hermann Weyl
1885 – 1955

1872, F. Klein, **Vergleichende Betrachtungen über neuere geometrische Forschungen:**

As geometrias não euclidianas devem ser estudadas por meio de suas simetrias (*Erlangen program*).

Inverno 1873, S. Lie:

Um *grupo de Lie* é uma variedade equipada com uma estrutura de grupo. Ele possui uma *álgebra de Lie*, que permite trabalhar infinitesimalmente (correspondência grupo de Lie \sim álgebra de Lie).

1913, E. Cartan, **Teorema do peso máximo:**

As representações irreduutíveis dos grupos de Lie são classificadas por seus pesos máximos.

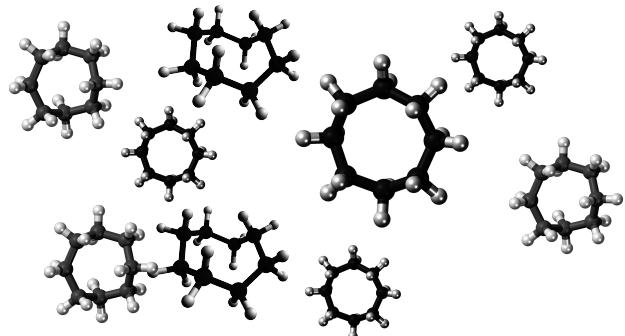
1935, V. Fock, **Zur theorie des wasserstoffatoms:**

Descrição do átomo de hidrogênio por meio da simetria $SO(4)$ na equação de Schrödinger.

1939, Teorema de Myers–Steenrod:

O grupo de isometria de uma variedade riemanniana é um grupo de Lie.

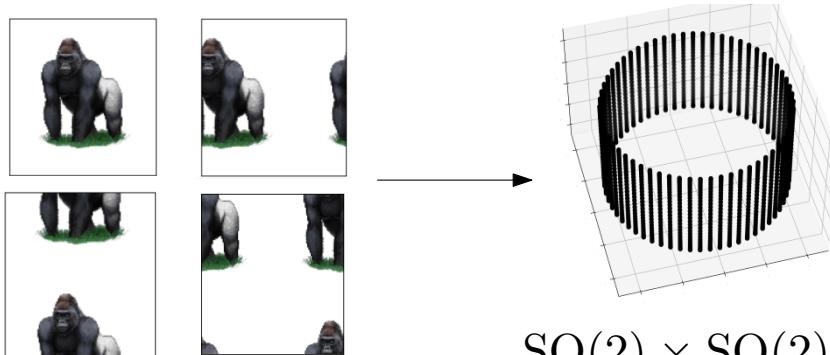
(1) Certos conjuntos reais exibem objetos simétricos.



O espaço de conformação da molécula C_8H_{16} é a união de **uma garrafa de Klein e uma esfera**.

[Martin, Thompson, Coutsias & Watson,
[Topology of cyclo-octane energy landscape, 2010](#)]

(2) As transformações euclidianas são regidas por representações de grupos de Lie.



Após aplicar permutação de pixels, as imagens (imergidas no $\mathbb{R}^{n \times n}$) se encontram numa órbita de representação de grupo de Lie.

(3) Simetrias nos sistemas hamiltonianos resultam em leis de conservação.

Teorema de Noether (1915): Se o hamiltoniano for invariante sob a ação de um grupo de Lie, então existe uma constante do movimento.

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}$$

$$\frac{d\mathbf{q}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}$$



Emmy Noether
 1882 - 1935

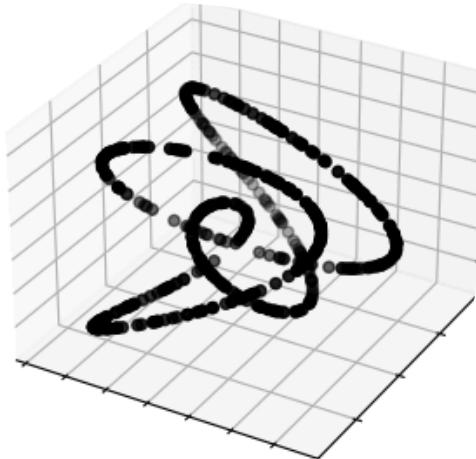
Formulação do nosso problema

4/28

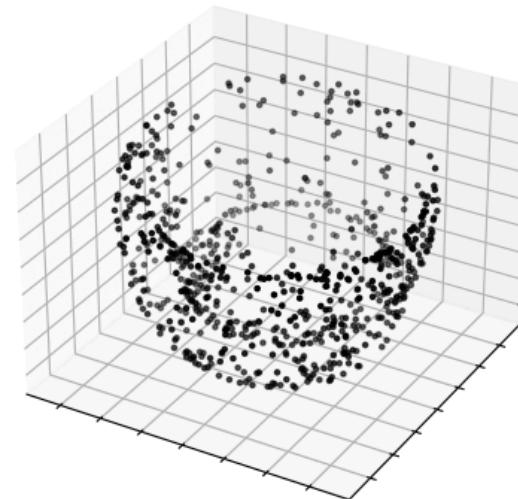
Input: Uma nuvem de pontos $X = \{x_1 \dots, x_N\} \subset \mathbb{R}^n$.

Output: Um grupo de Lie compacto G , uma representação ϕ no \mathbb{R}^n , uma órbita \mathcal{O} próxima a X .

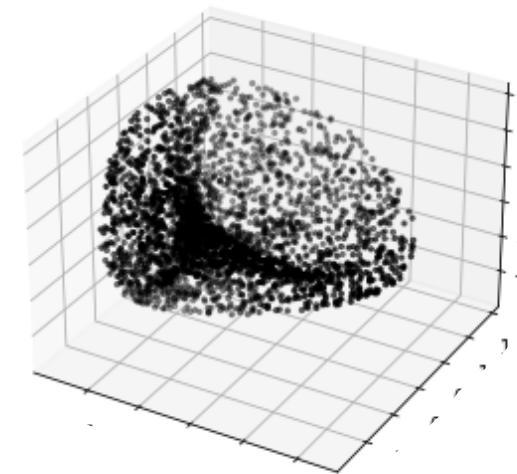
Órbita de $\text{SO}(2)$ no \mathbb{R}^6



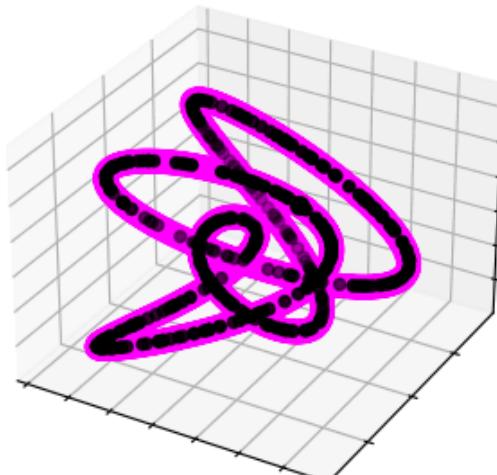
Órbita de T^2 no \mathbb{R}^6



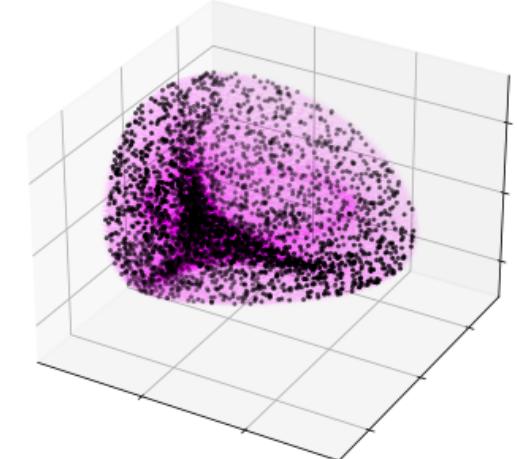
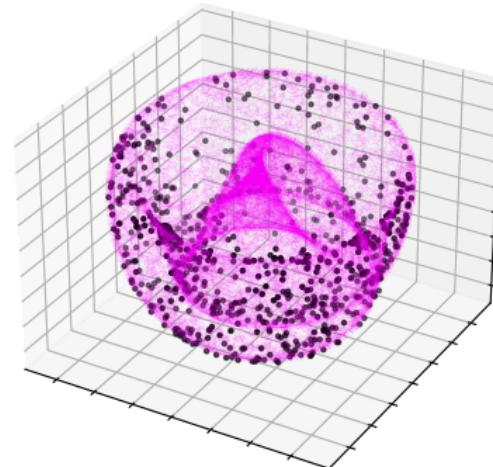
Órbita de $\text{SO}(3)$ no \mathbb{R}^9



Input:



Output:



1. Representações e órbitas
2. Aplicação: Problema de três corpos
3. Correspondência grupo de Lie - álgebra de Lie
4. Aplicação: Rotação de corpos rígidos
5. Descrição do algoritmo
6. Aplicação: Espaço de conformação do ciclooctano
7. Garantias teóricas

Definição: Um **grupo de Lie** G é um grupo que também é uma variedade suave, e tal que o mapa de multiplicação $(g, h) \mapsto gh$ e o mapa inverso $g \mapsto g^{-1}$ são suaves.

Exemplo: Dado $n \in \mathbb{N}$ positivo, temos os **grupos de matrizes**:

- $O(n)$ grupo ortogonal: o conjunto de matrizes ortogonais $n \times n$ ($A^\top = A^{-1}$)
- $SO(n)$ grupo especial ortogonal: matrizes ortogonais $n \times n$ de determinante +1
- $Sp(2n, \mathbb{C})$ grupo simplético: matrizes complexas simpléticas $n \times n$
- $U(n)$ grupo unitário: matrizes complexas unitárias $n \times n$ ($A^* = A^{-1}$)
- $SU(n)$ grupo especial unitário: matrizes unitárias complexas $n \times n$ de determinante +1

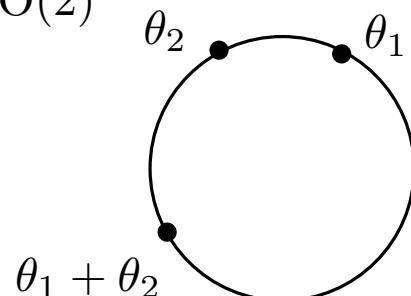
Produtos de grupos de Lie são grupos de Lie:

- T^n n -toro: o produto $SO(2) \times \cdots \times SO(2)$

$$\begin{pmatrix} x_1 + x_2 \\ y_1 + y_2 \end{pmatrix}$$

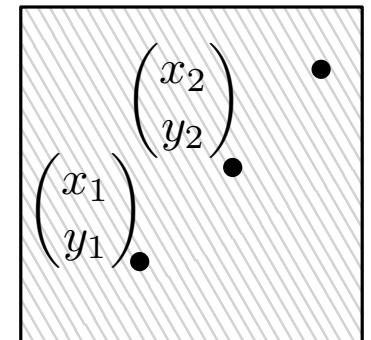
Estrutura de grupo em $SO(2)$
(o círculo)

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$



Estrutura de grupo em T^2
(o mundo do Pac-Man)

$$\begin{pmatrix} \cos x & -\sin x & 0 & 0 \\ \sin x & \cos x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos y & -\sin y \\ 0 & 0 & \sin y & \cos y \end{pmatrix}$$



Definição: Uma **representação** de um grupo de Lie G em \mathbb{R}^n é um morfismo de grupo suave $\phi: G \rightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$ (as matrizes invertíveis $n \times n$). Isto é, vale $\phi(ab) = \phi(a)\phi(b)$.

Exemplo: Obviamente, os grupos de Lie de matrizes vêm com uma **representação canônica**, pois já estão incluídos num espaço matricial.

$$\mathrm{O}(n) \hookrightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$$

$$\mathrm{SO}(n) \hookrightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$$

$$\mathrm{Sp}(2n, \mathbb{C}) \hookrightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{C}) \hookrightarrow \mathrm{GL}_{2n}(\mathbb{R})$$

$$\mathrm{U}(n) \hookrightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{C}) \hookrightarrow \mathrm{GL}_{2n}(\mathbb{R})$$

$$\mathrm{SU}(n) \hookrightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{C}) \hookrightarrow \mathrm{GL}_{2n}(\mathbb{R})$$

Entretanto, existem representações mais sofisticadas.

$$\begin{array}{ccc}
 & \mathrm{SO}(2) & \\
 \mathrm{GL}_2(\mathbb{R}) & \xleftarrow{\quad} & \mathrm{GL}_2(\mathbb{R}) \\
 & \theta \mapsto \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} \cos 3\theta & -\sin 3\theta \\ \sin 3\theta & \cos 3\theta \end{pmatrix}
 \end{array}$$

Definição: Uma **representação** de um grupo de Lie G em \mathbb{R}^n é um morfismo de grupo suave $\phi: G \rightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$ (as matrizes invertíveis $n \times n$). Isto é, vale $\phi(ab) = \phi(a)\phi(b)$.

Exemplo: Obviamente, os grupos de Lie de matrizes vêm com uma **representação canônica**, pois já estão incluídos num espaço matricial.

$$\mathrm{O}(n) \hookrightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$$

$$\mathrm{SO}(n) \hookrightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$$

$$\mathrm{Sp}(2n, \mathbb{C}) \hookrightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{C}) \hookrightarrow \mathrm{GL}_{2n}(\mathbb{R})$$

$$\mathrm{U}(n) \hookrightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{C}) \hookrightarrow \mathrm{GL}_{2n}(\mathbb{R})$$

$$\mathrm{SU}(n) \hookrightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{C}) \hookrightarrow \mathrm{GL}_{2n}(\mathbb{R})$$

Entretanto, existem representações mais sofisticadas.

$$\begin{array}{ccc}
 & \mathrm{SO}(2) & \\
 \nearrow & & \searrow \\
 \mathrm{GL}_4(\mathbb{R}) & & \mathrm{GL}_4(\mathbb{R}) \\
 \theta \mapsto \left(\begin{array}{cccc} \cos \theta & -\sin \theta & 0 & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right) & \downarrow & \left(\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{array} \right) \\
 & & \mathrm{GL}_4(\mathbb{R}) & \\
 & & \left(\begin{array}{cccc} \cos 2\theta & -\sin 2\theta & 0 & 0 \\ \sin 2\theta & \cos 2\theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos 5\theta & -\sin 5\theta \\ 0 & 0 & \sin 5\theta & \cos 5\theta \end{array} \right) &
 \end{array}$$

Definição: Uma **representação** de um grupo de Lie G em \mathbb{R}^n é um morfismo de grupo suave $\phi: G \rightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$ (as matrizes invertíveis $n \times n$). Isto é, vale $\phi(ab) = \phi(a)\phi(b)$.

Definição: Duas representações $\phi_1, \phi_2: G \rightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$ são **equivalentes** se existir $A \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$ tal que $\phi_2 = A\phi_1A^{-1}$.

Elas são “iguais a menos de mudança de coordenadas”.

Proposição: As representações de $\mathrm{SO}(2)$ em \mathbb{R}^{2n} são classificadas por $\mathbb{Z}^n/\mathfrak{S}_n$ (n -uplas a menos de permutação). Mais precisamente, a $(\omega_1, \dots, \omega_n) \in \mathbb{Z}^n$ é associada $\phi_{(\omega_1, \dots, \omega_n)}: \mathrm{SO}(2) \rightarrow \mathrm{GL}_{2n}(\mathbb{R})$.

$$\phi_{(\omega_1, \dots, \omega_n)}(\theta) = \begin{pmatrix} R(\omega_1\theta) & & & \\ & R(\omega_2\theta) & & \\ & & \ddots & \\ & & & R(\omega_n\theta) \end{pmatrix} \quad \text{where} \quad R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

Definição: Uma **representação** de um grupo de Lie G em \mathbb{R}^n é um morfismo de grupo suave $\phi: G \rightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$ (as matrizes invertíveis $n \times n$). Isto é, vale $\phi(ab) = \phi(a)\phi(b)$.

Definição: Duas representações $\phi_1, \phi_2: G \rightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$ são **equivalentes** se existir $A \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$ tal que $\phi_2 = A\phi_1A^{-1}$.

Elas são “iguais a menos de mudança de coordenadas”.

Proposição: As representações de $\mathrm{SO}(2)$ em \mathbb{R}^{2n} são classificadas por $\mathbb{Z}^n/\mathfrak{S}_n$ (n -uplas a menos de permutação). Mais precisamente, a $(\omega_1, \dots, \omega_n) \in \mathbb{Z}^n$ é associada $\phi_{(\omega_1, \dots, \omega_n)}: \mathrm{SO}(2) \rightarrow \mathrm{GL}_{2n}(\mathbb{R})$.

$$\phi_{(\omega_1, \dots, \omega_n)}(\theta) = \begin{pmatrix} R(\omega_1\theta) & & & \\ & R(\omega_2\theta) & & \\ & & \ddots & \\ & & & R(\omega_n\theta) \end{pmatrix} \quad \text{where} \quad R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

Proposição: As representações de T^2 em \mathbb{R}^{2n} são classificadas por $(\mathbb{Z}^n)^2/\mathfrak{S}_n$ (matrizes $2 \times n$ a menos de permutação das colunas).

As representações são estudadas por meio de **representações irreduutíveis**.

Definição: Seja $G \rightarrow \text{GL}_n(\mathbb{R})$ uma representação de G e $x_0 \in \mathbb{R}^n$ um ponto. A **órbita** de x_0 sob a ação de G é $\mathcal{O} = \{\phi(g)x_0 \mid g \in G\}$.

Exemplo: As órbitas de $\text{SO}(2)$ são “círculos”.

- $\text{SO}(2) \longrightarrow \text{GL}_2(\mathbb{R})$

$$\theta \mapsto \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}$$

- $\text{SO}(2) \longrightarrow \text{GL}_4(\mathbb{R})$

$$\theta \mapsto \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

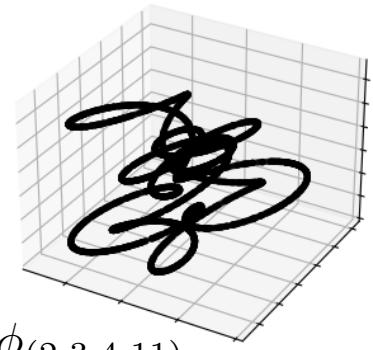
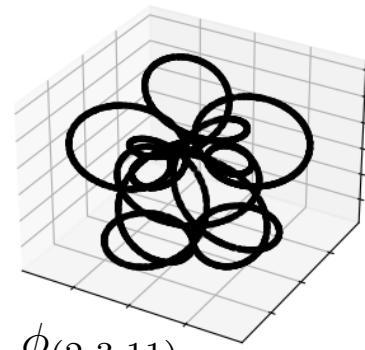
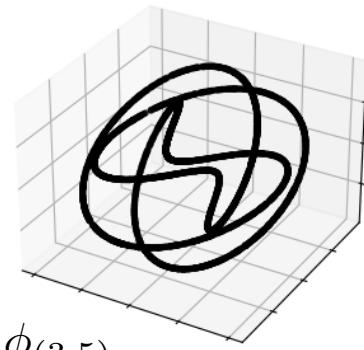
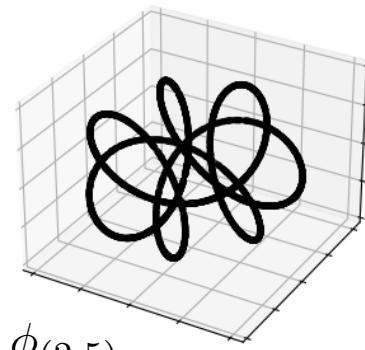
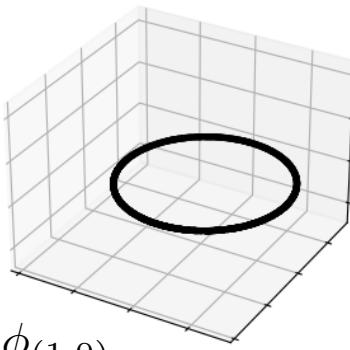
- $\text{SO}(2) \longrightarrow \text{GL}_4(\mathbb{R})$

$$\theta \mapsto \begin{pmatrix} \cos 2\theta & -\sin 2\theta & 0 & 0 \\ \sin 2\theta & \cos 2\theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos 5\theta & -\sin 5\theta \\ 0 & 0 & \sin 5\theta & \cos 5\theta \end{pmatrix}$$

A órbita de $(1, 0)$ é $\mathcal{O} = \left\{ \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \end{pmatrix} \mid \theta \in \mathbb{R} \right\}$

A órbita de $(1, 0, 1, 0)$ é $\mathcal{O} = \left\{ \begin{pmatrix} \cos \theta \\ \sin \theta \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \mid \theta \in \mathbb{R} \right\}$

A órbita de $(1, 0, 1, 0)$ é $\mathcal{O} = \left\{ \begin{pmatrix} \cos 2\theta \\ \sin 2\theta \\ \cos 5\theta \\ \sin 5\theta \end{pmatrix} \mid \theta \in \mathbb{R} \right\}$



Definição: Seja $G \rightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$ uma representação de G e $x_0 \in \mathbb{R}^n$ um ponto. A **órbita** de x_0 sob a ação de G é $\mathcal{O} = \{\phi(g)x_0 \mid g \in G\}$.

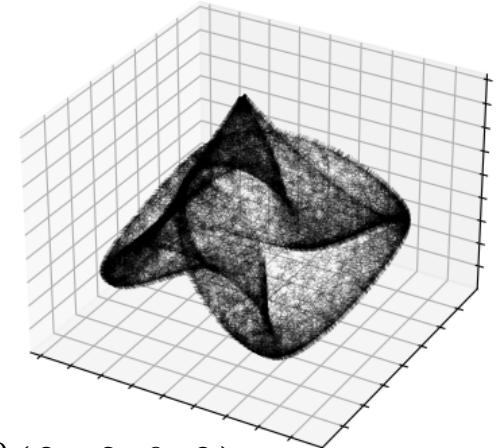
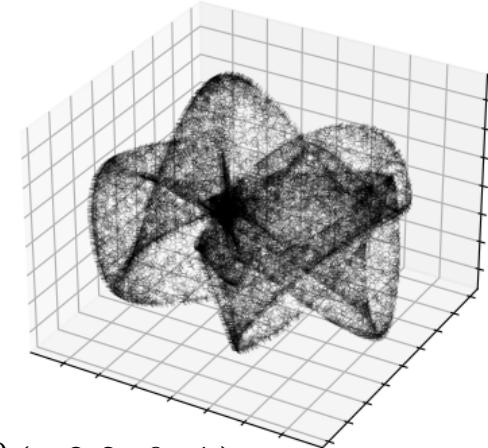
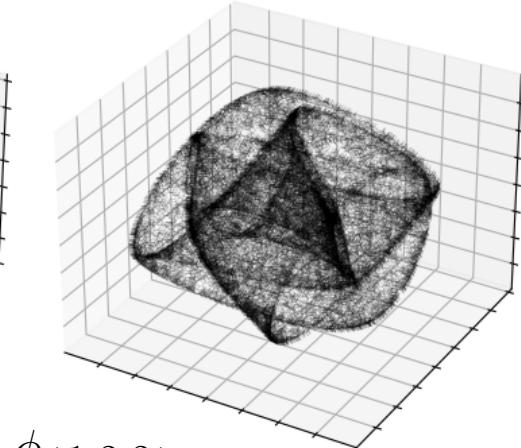
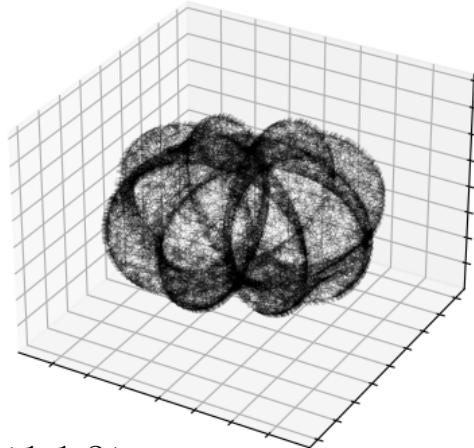
Exemplo: As órbitas de $\mathrm{SO}(2)$ são “círculos”.

Exemplo: As órbitas de T^2 são “toros”.

- $T^2 \longrightarrow \mathrm{GL}_6(\mathbb{R})$

$$\theta \longmapsto \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \theta & -\sin \theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sin \theta & \cos \theta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cos 3\theta & -\sin 3\theta \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sin 3\theta & \cos 3\theta \end{pmatrix}$$

$$\mu \longmapsto \begin{pmatrix} \cos \mu & -\sin \mu & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sin \mu & \cos \mu & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos 2\mu & -\sin 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sin 2\mu & \cos 2\mu & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cos \mu & -\sin \mu \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sin \mu & \cos \mu \end{pmatrix}$$



A órbita de $(1, 0, 1, 0, 1, 0)$ é

$$\mathcal{O} = \left\{ \begin{pmatrix} \cos \theta + \cos \mu \\ \sin \theta + \sin \mu \\ \cos \theta + \cos 2\mu \\ \sin \theta + \sin 2\mu \\ \cos 3\theta + \cos \mu \\ \sin 3\theta + \sin \mu \end{pmatrix} \mid (\theta, \mu) \in \mathbb{R}^2 \right\}$$

$$\phi_{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 3 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}}$$

$$\phi_{\begin{pmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix}}$$

$$\phi_{\begin{pmatrix} -2 & 2 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & -2 & 1 \end{pmatrix}}$$

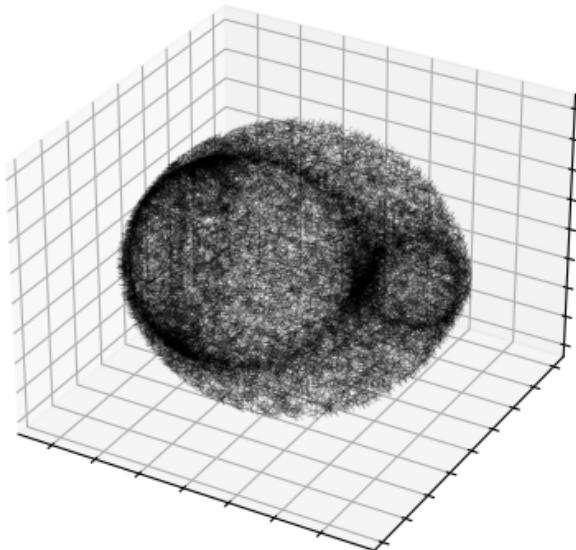
$$\phi_{\begin{pmatrix} 2 & -2 & 0 & 2 \\ 1 & 1 & -1 & 2 \end{pmatrix}}$$

Definição: Seja $G \rightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$ uma representação de G e $x_0 \in \mathbb{R}^n$ um ponto. A **órbita** de x_0 sob a ação de G é $\mathcal{O} = \{\phi(g)x_0 \mid g \in G\}$.

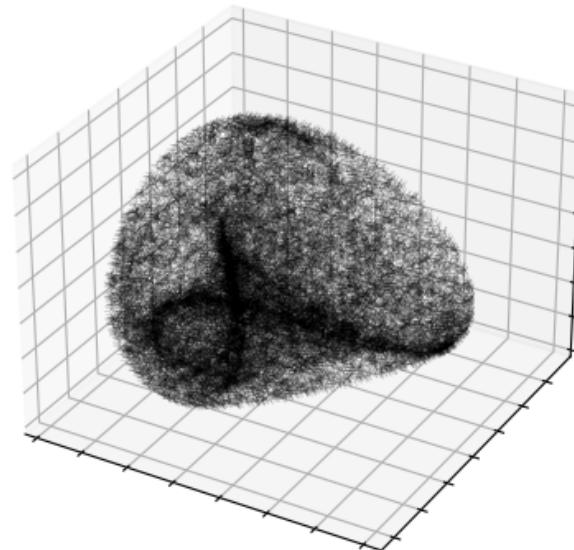
Exemplo: As órbitas de $\mathrm{SO}(2)$ são “círculos”.

Exemplo: As órbitas de T^2 são “toros”.

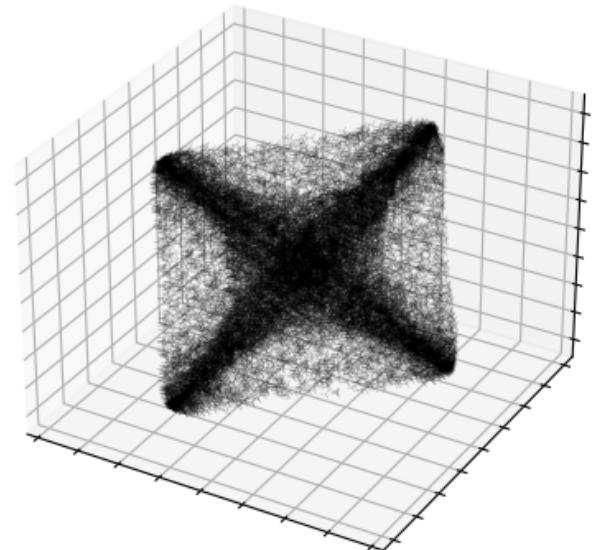
Exemplo: As órbitas de $\mathrm{SO}(3)$ e $\mathrm{SU}(2)$ são “esferas”.



$\psi_{(5)}$ in \mathbb{R}^5



$\psi_{(3,4)}$ in \mathbb{R}^7



$\psi_{(8)}$ in \mathbb{R}^8

1. Representações e órbitas
2. Aplicação: Problema de três corpos
3. Correspondência grupo de Lie - álgebra de Lie
4. Aplicação: Rotação de corpos rígidos
5. Descrição do algoritmo
6. Aplicação: Espaço de conformação do ciclooctano
7. Garantias teóricas

Descrição das trajetórias de três objetos, sujeitos apenas à influência da força gravitacional mútua.

Sistema arbitrário:

https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/1/1c/Three-body_Problem_Animation_with_COM.gif

Sistema periódico:

https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/5/5a/5_4_800_36_downscaled.gif

(descobertas por Roger Broucke em 1975)

Soluções periódicas em forma fechada foram descobertas por Euler em 1740 e Lagrange em 1772.

De acordo com um teorema de Poincaré (1889), não existe uma solução geral em forma fechada.

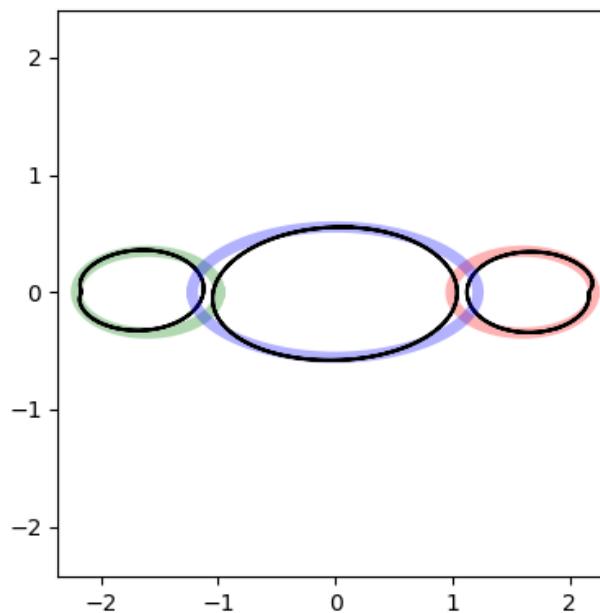
Nossa tentativa: dadas as trajetórias $x_1, x_2, x_3: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^2$ dos três corpos, forma a trajetórias total $(x_1, x_2, x_3): \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^6$

e vê se é uma órbita de uma representação de $\text{SO}(2)$.

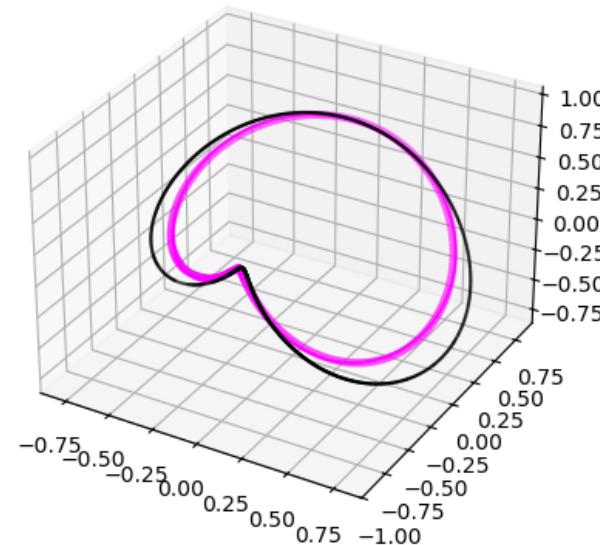
Problema de três corpos

10/28 (2/4)

Trajetórias dos corpos em \mathbb{R}^2



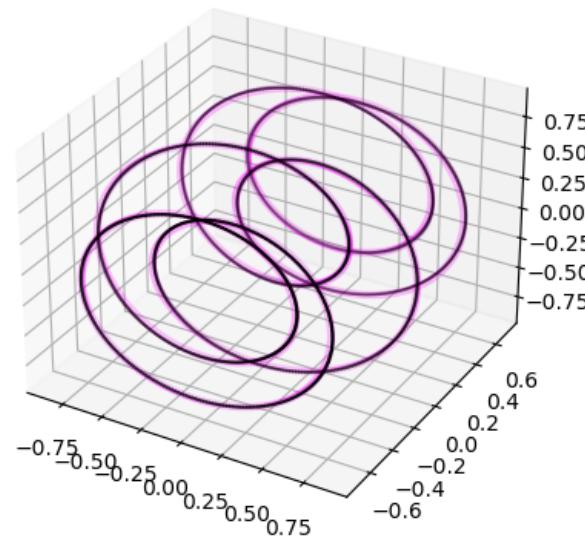
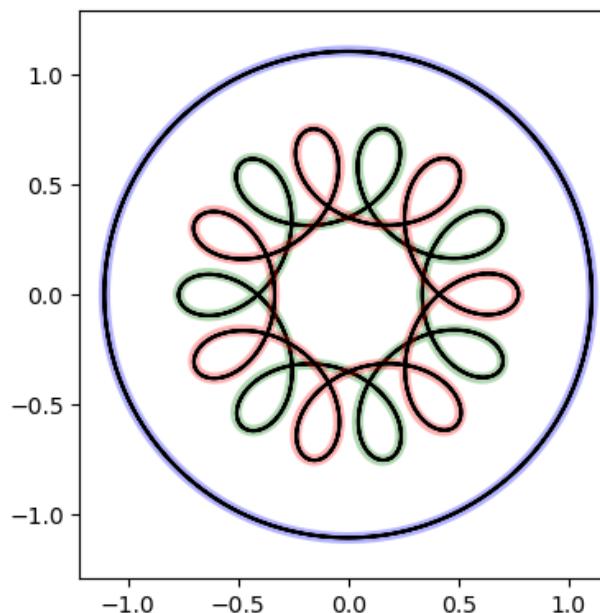
Trajetória total em \mathbb{R}^6



Frequências da representação
e distância de Hausdorff

(0, 1, 2)

0.22507



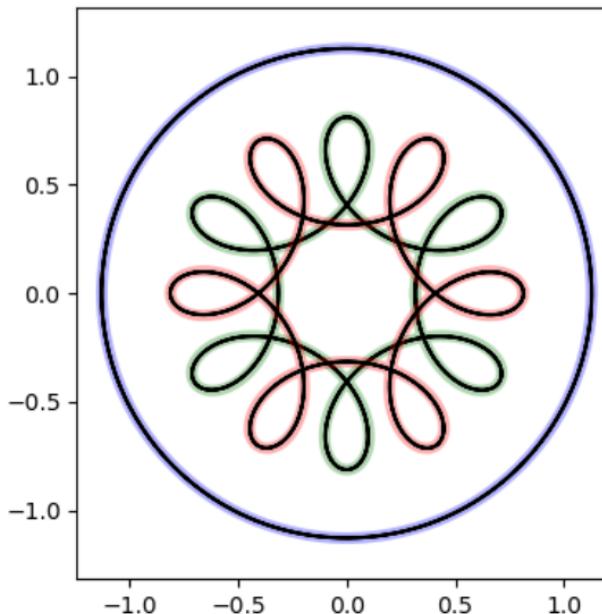
(0, 1, 6)

0.01176

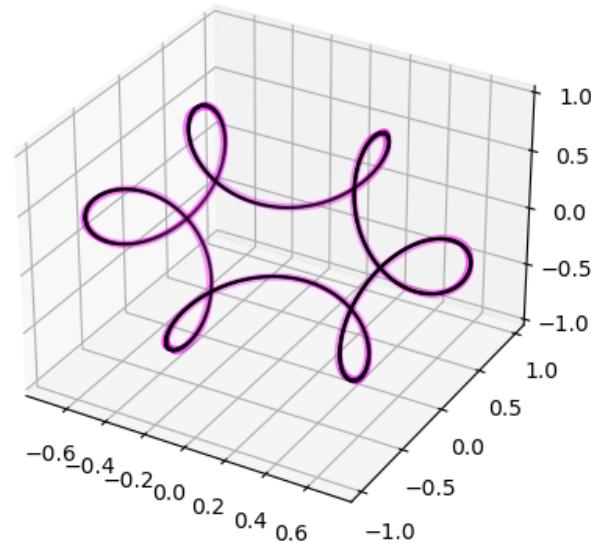
Problema de três corpos

10/28 (3/4)

Trajetórias dos corpos em \mathbb{R}^2



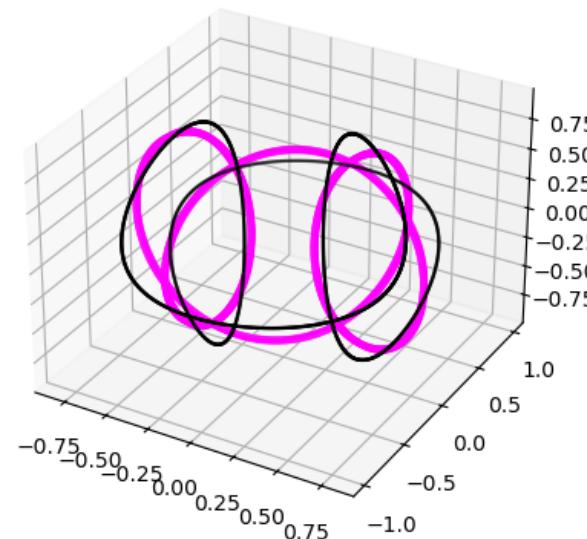
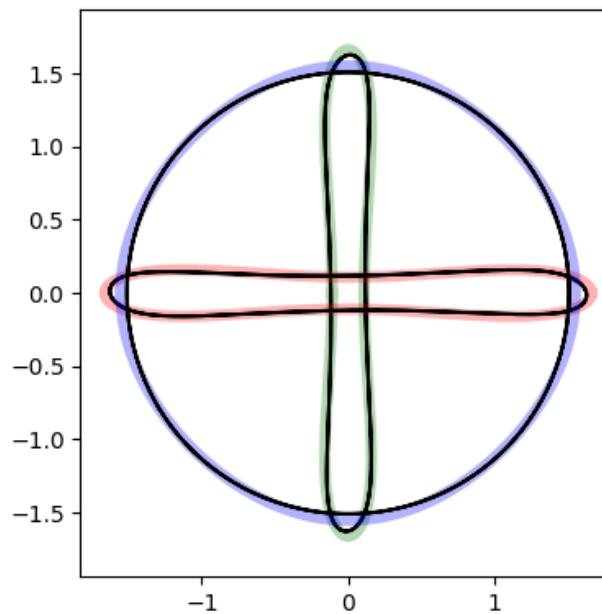
Trajetória total em \mathbb{R}^6



Frequências da representação
e distância de Hausdorff

(0, 1, 5)

0.01323



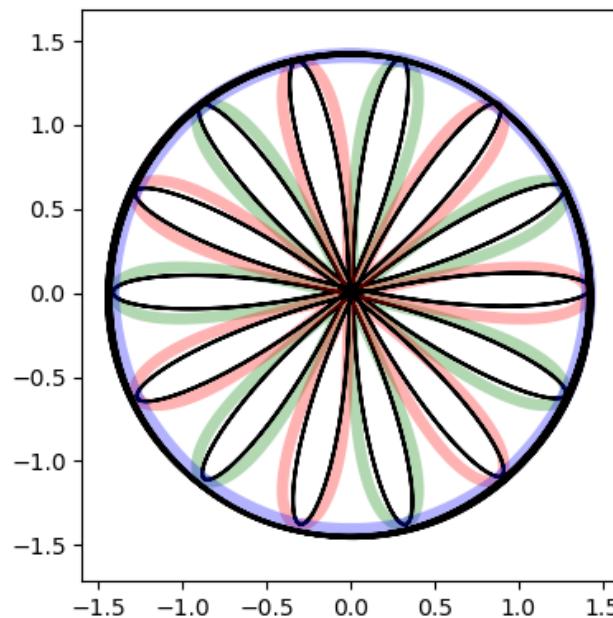
(0, 1, 3)

0.1767

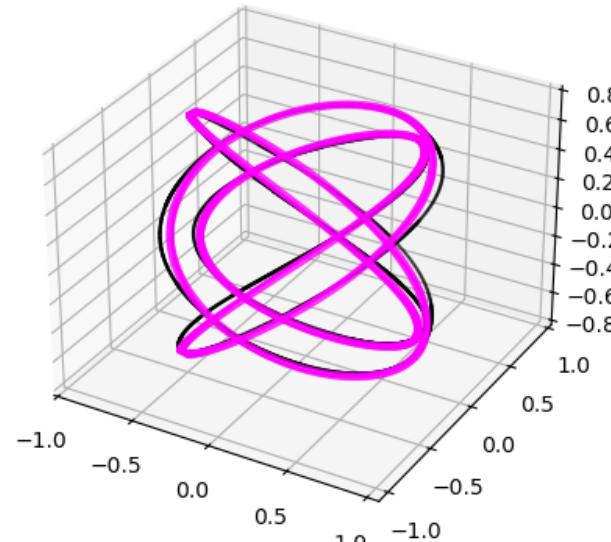
Problema de três corpos

10/28 (4/4)

Trajetórias dos corpos em \mathbb{R}^2



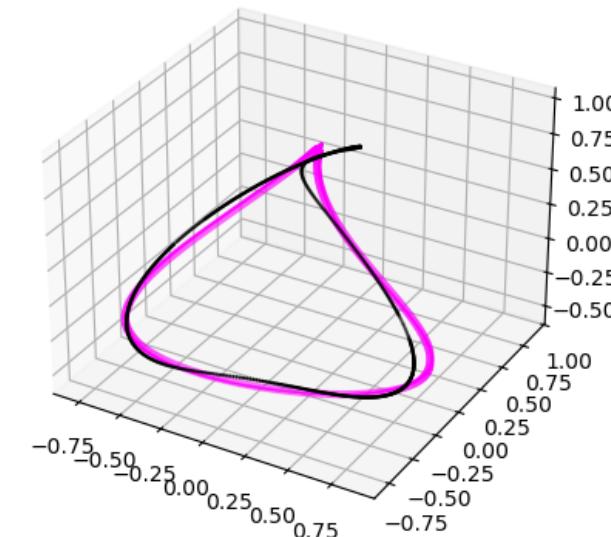
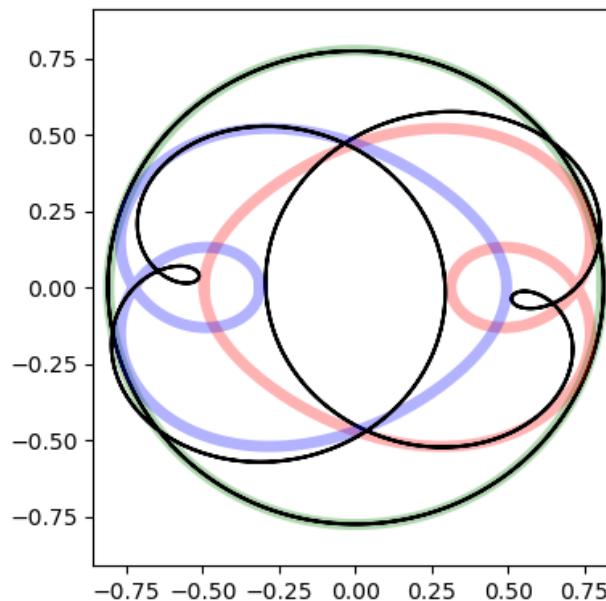
Trajetória total em \mathbb{R}^6



Frequências da representação
e distância de Hausdorff

(0, 3, 4)

0.06893



(0, 1, 2)

0.4521

- 1. Representações e órbitas**
- 2. Aplicação: Problema de três corpos**
- 3. Correspondência grupo de Lie - álgebra de Lie**
- 4. Aplicação: Rotação de corpos rígidos**
- 5. Descrição do algoritmo**
- 6. Aplicação: Espaço de conformação do ciclooctano**
- 7. Garantias teóricas**

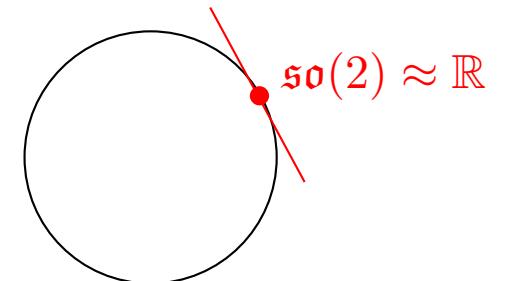
Seja G um grupo de Lie, $0 \in G$ o elemento identidade e $\mathfrak{g} = T_0 G$ o **espaço tangente**.

Existe uma **aplicação exponencial**, denotada $\exp: \mathfrak{g} \rightarrow G$. Ela é suave. Quando G é conexo e compacto, ela é sobrejetora.

Exemplo: Para grupos de matrizes, o mapa exponencial é simplesmente a exponencial de matrizes.

$$\bullet \text{SO}(2) = \left\{ \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{pmatrix} \mid t \in \mathbb{R} \right\} \quad \xleftarrow{\exp} \quad \mathfrak{so}(2) = \left\{ \begin{pmatrix} 0 & -t \\ t & 0 \end{pmatrix} \mid t \in \mathbb{R} \right\}$$

Temos $\exp \begin{pmatrix} 0 & -t \\ t & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{pmatrix}$



$$\bullet \text{SO}(3) = \left\{ A \in \text{GL}_3(\mathbb{R}) \mid A^\top = A^{-1}, \det A = 1 \right\} \quad \xleftarrow{\exp} \quad \mathfrak{so}(3) = \langle X_1, X_2, X_3 \rangle, \text{ onde}$$

$$X_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$X_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$X_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Observação: Qualquer grupo de Lie compacto admite uma métrica Riemanniana (bi-invariante) para a qual a exponencial de Lie e a exponencial de Riemann coincidem.

Definição: Uma **álgebra de Lie** é um espaço vetorial \mathfrak{g} munido de um mapa bilinear $\mathfrak{g} \times \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{g}$ que satisfaz a identidade de Jacobi.

É denotado por $[A, B]$, onde $A, B \in \mathfrak{g}$, e chamado de **colchete de Lie**.

Proposição: O espaço tangente $\mathfrak{g} = T_0 G$ de um grupo de Lie é uma álgebra de Lie.

Exemplo: No caso de grupos de matrizes, o colchete de Lie é simplesmente o comutador

$$[A, B] = AB - BA.$$

Por exemplo, em $SO(3)$, temos $[X_1, X_2] = X_3$, $[X_2, X_3] = X_1$ e $[X_1, X_3] = -X_2$, onde

$$X_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad X_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad X_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

A álgebra de Lie contém muitas informações sobre o grupo de Lie.

Proposição: Para grupos de Lie simplesmente conexos G_1 e G_2 , tem-se $\mathfrak{g}_1 \simeq \mathfrak{g}_2 \implies G_1 \simeq G_2$.

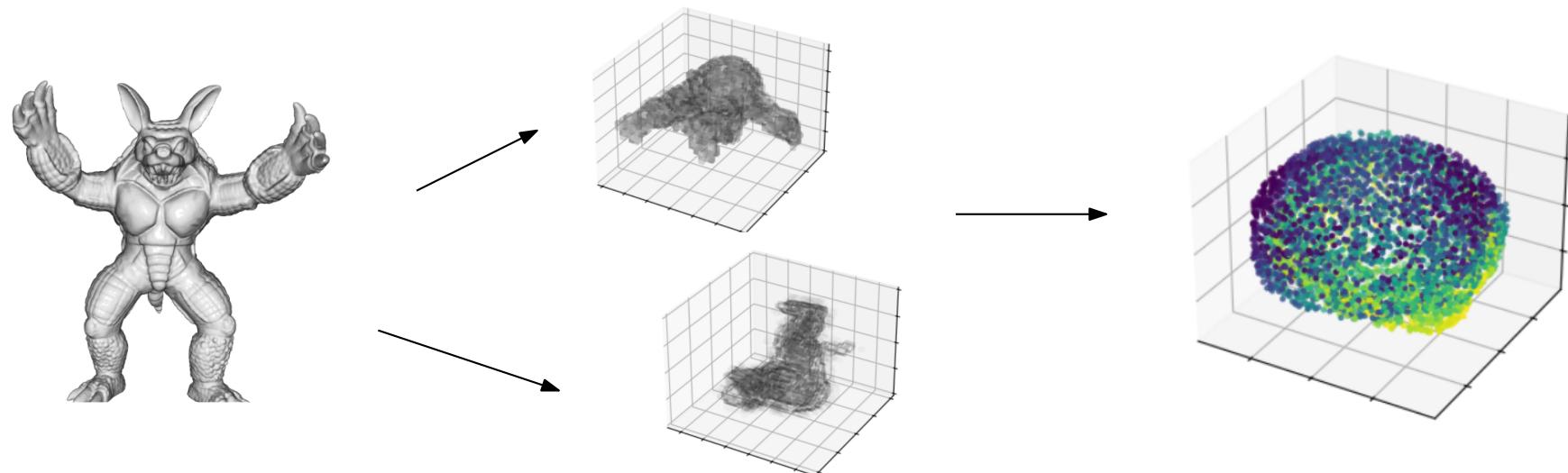
As álgebras de Lie permitem estudar representações de um ponto de vista infinitesimal.

Proposição: Dada uma representação $\phi: G \rightarrow \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$, existe um morfismo $d\phi: \mathfrak{g} \rightarrow \mathfrak{gl}_n(\mathbb{R})$ de álgebras de Lie, chamado **representação derivada**, de modo que o seguinte diagrama comuta:

$$\begin{array}{ccc}
 G & \xrightarrow{\phi} & \mathrm{GL}_n(\mathbb{R}) \\
 \uparrow \exp & & \uparrow \exp \\
 \mathfrak{g} & \xrightarrow{d\phi} & \mathfrak{gl}_n(\mathbb{R}) \quad = \text{matrizes } n \times n
 \end{array}$$

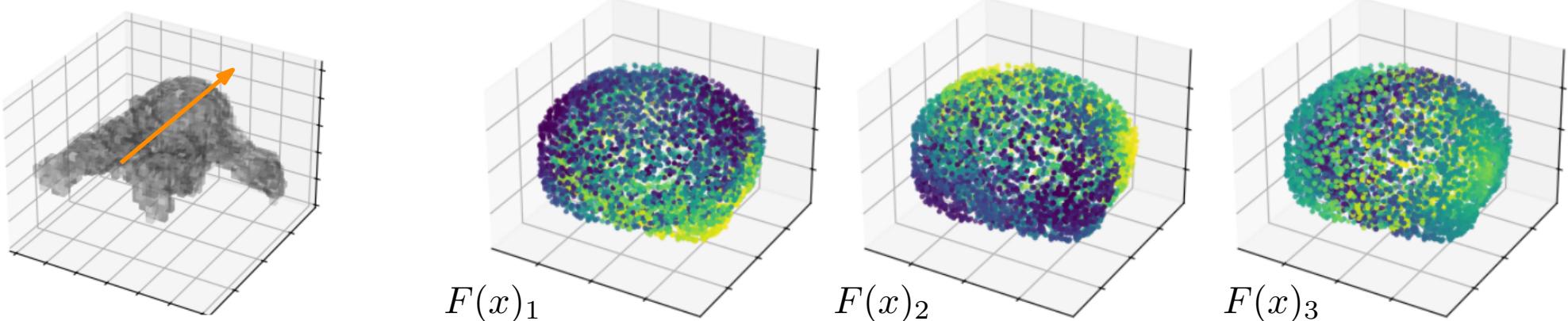
Definição: A imagem $d\phi(\mathfrak{g}) \subset \mathfrak{gl}_n(\mathbb{R})$ é chamada de **álgebra de Lie imagem**. Ela desempenhará um papel fundamental em nosso problema.

- 1. Representações e órbitas**
- 2. Aplicação: Problema de três corpos**
- 3. Correspondência grupo de Lie - álgebra de Lie**
- 4. Aplicação: Rotação de corpos rígidos**
- 5. Descrição do algoritmo**
- 6. Aplicação: Espaço de conformação do ciclooctano**
- 7. Garantias teóricas**



- (1) Escolha uma imagem no \mathbb{R}^3 , i.e., $A \subset \mathbb{R}^{n \times n \times n}$.
- (2) Gere várias rotações dela, a fim de construir uma nuvem de pontos $X \subset \mathbb{R}^{n \times n \times n}$.
- (3) Projete X no \mathbb{R}^n por meio de PCA.

Um problema de Machine Learning: dado um $x \in X$, estima o vetor unitário $F(x) \in \mathbb{R}^3$ que aponta para a cabeça do tatu.

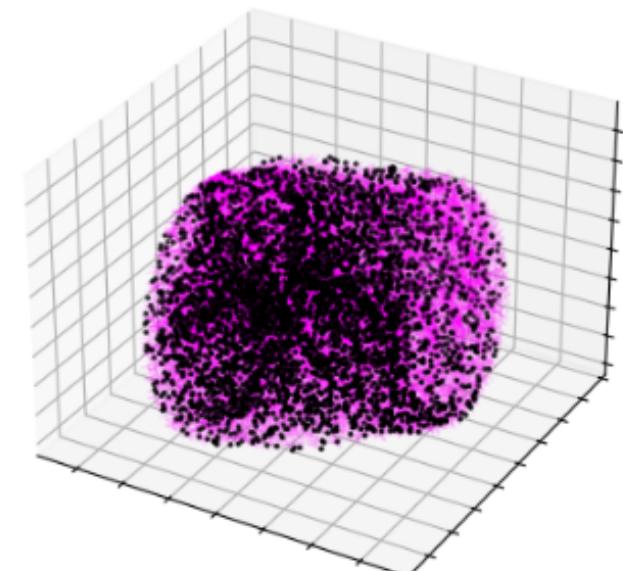


Solução clássica: reduz a dimensão de X por meio de PCA e treina um SVM.

Model	MSE on test data
SVM in dimension 3	0.4003
SVM in dimension 4	0.2496
SVM in dimension 5	0.1295
SVM in dimension 6	0.0380
SVM in dimension 7	0.0148
SVM in dimension 8	0.0119
SVM in dimension 9	0.0114
SVM in dimension 10	0.0122
SVM on orthogonal coordinates	0.0066

Solução usando grupos de Lie: Nosso algoritmo detecta uma órbita de representação de $\text{SO}(3)$ em \mathbb{R}^8 que está próxima a X .

Distância de Hausdorff: $d_H(X, \mathcal{O}) \simeq 0.1909$.

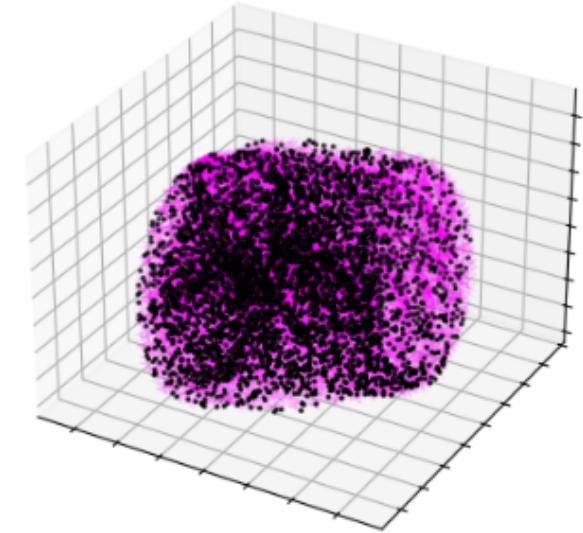


Coordenadas ortogonais: Vimos que, no \mathbb{R}^8 , X é bem aproximado por uma órbita \mathcal{O} de uma representação ϕ de $\mathrm{SO}(3)$. A órbita pode ser escrita como

$$\mathcal{O} = \{\phi(g) \cdot x_0 \mid g \in G\}.$$

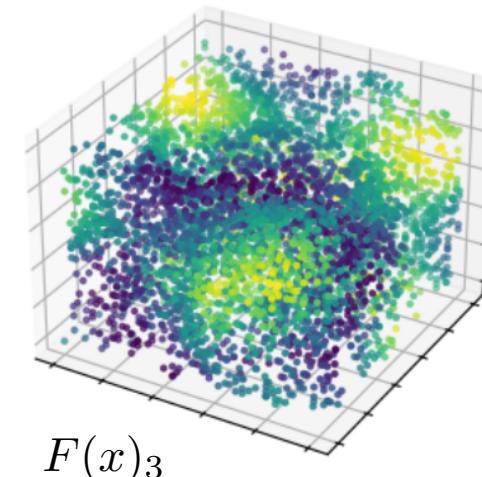
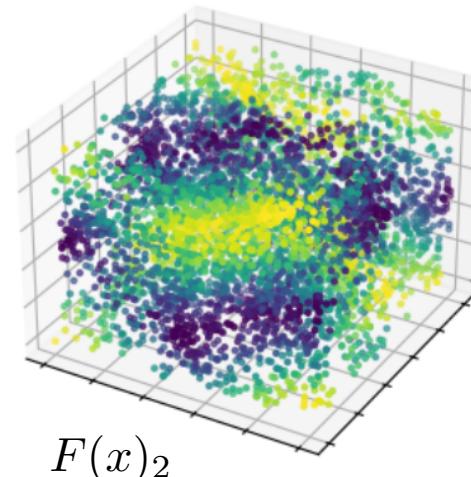
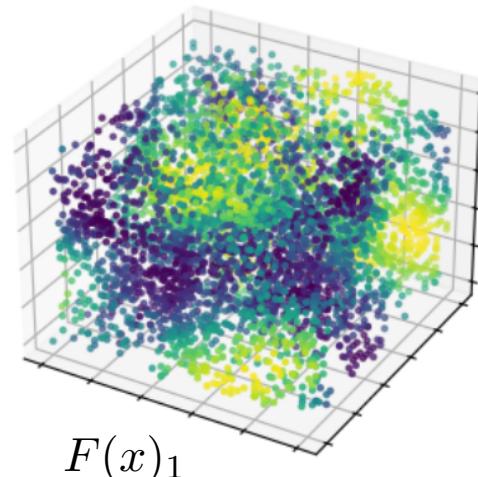
Aém disso, lembre-se do mapa exponencial:

$$\begin{array}{ccc} G & \xrightarrow{\phi} & \mathrm{GL}_n(\mathbb{R}) \\ \exp \uparrow & & \uparrow \exp \\ \mathfrak{g} & \xrightarrow{d\phi} & \mathfrak{gl}_n(\mathbb{R}) \end{array}$$



Cada imagem de $x \in \mathbb{R}^8$ pode ser associada a um elemento de $c \in \mathfrak{g}$, por meio de

$$\min_{c \in \mathfrak{so}(3)} \|x - \phi(\exp(c)) \cdot x_0\|.$$



- 1. Representações e órbitas**
- 2. Aplicação: Problema de três corpos**
- 3. Correspondência grupo de Lie - álgebra de Lie**
- 4. Aplicação: Rotação de corpos rígidos**
- 5. Descrição do algoritmo**
- 6. Aplicação: Espaço de conformação do ciclooctano**
- 7. Garantias teóricas**

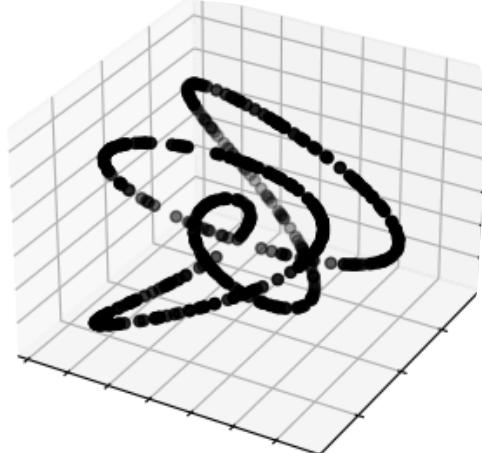
Formulação do problema: ponto de vista infinitesimal

18/28 (1/3)

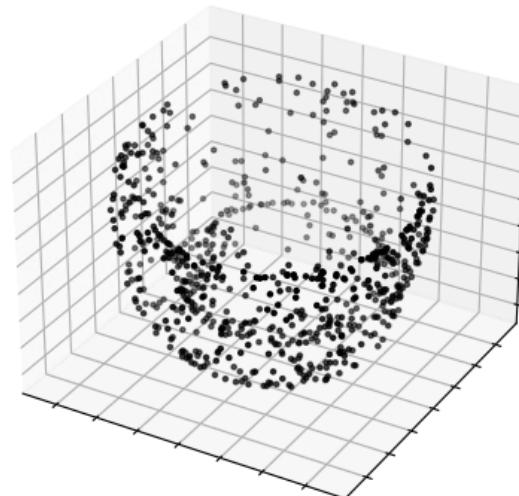
Input: Uma nuvem de pontos $X = \{x_1, \dots, x_N\} \subset \mathbb{R}^n$.

Output: Uma representação ϕ de grupo de Lie compacto G em \mathbb{R}^n e uma órbita \mathcal{O} próxima a X .

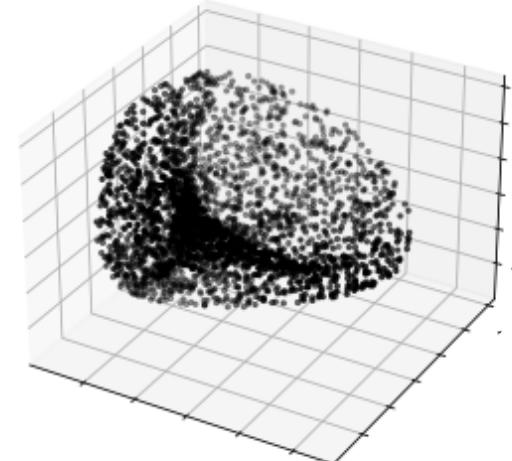
Órbita de $\text{SO}(2)$ no \mathbb{R}^6



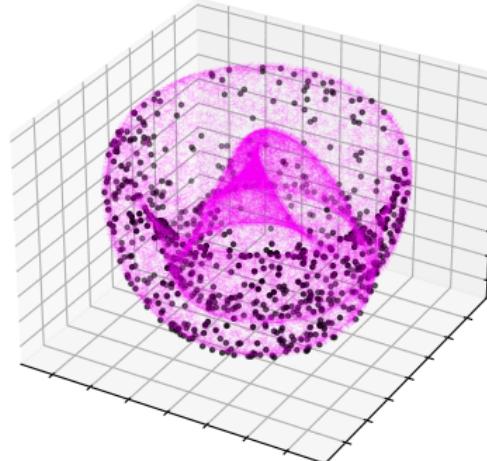
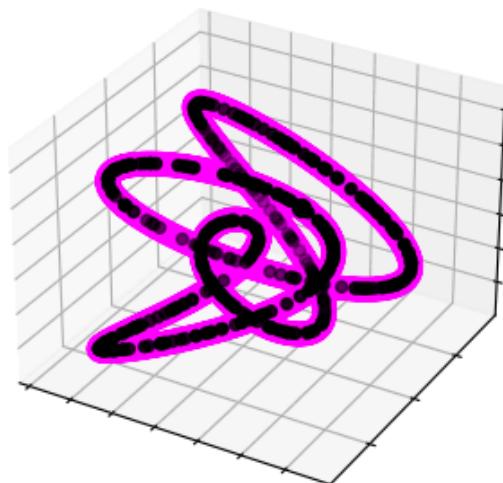
Órbita de T^2 no \mathbb{R}^6



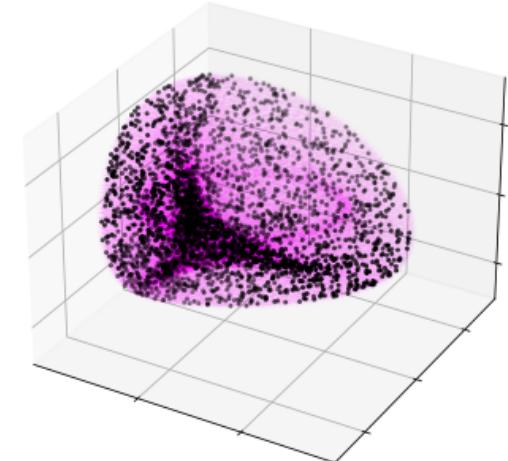
Órbita de $\text{SO}(3)$ no \mathbb{R}^9



Input:



Output:



Formulação do problema: ponto de vista infinitesimal 18/28 (2/3)

Input: Uma nuvem de pontos $X = \{x_1, \dots, x_N\} \subset \mathbb{R}^n$.

Output: Uma representação ϕ de grupo de Lie compacto G em \mathbb{R}^n e uma órbita \mathcal{O} próxima a X .

Idea: Obter a melhor órbita \mathcal{O} minimizando o erro quadrático médio.

Problema: Não está claro como calcular a projeção de X em \mathcal{O} .

Formulação do problema: ponto de vista infinitesimal 18/28 (3/3)

Outra ideia: Lembre-se da representação derivada

$$\begin{array}{ccccccc}
 G & \xrightarrow{\phi} & \phi(G) & \subset & \text{Sym}(\mathcal{O}) & \subset & \text{GL}_n(\mathbb{R}) \\
 \uparrow \exp & & \uparrow \exp & & \uparrow \exp & & \uparrow \exp \\
 \mathfrak{g} & \xrightarrow{d\phi} & \mathfrak{h} & \subset & \mathfrak{sym}(\mathcal{O}) & \subset & \mathfrak{gl}_n(\mathbb{R})
 \end{array}$$

Em vez de estimar ϕ , busque a álgebra imagem $\mathfrak{h} = d\phi(\mathfrak{g})$. \mathcal{O} é obtido exponenciando-a:

$$\mathcal{O} = \phi(G) \cdot x = \exp(\mathfrak{h}) \cdot x = \{ \exp(A)x \mid A \in \mathfrak{h} \} \quad \text{onde } x \in \mathcal{O} \text{ é arbitrário.}$$

Grupo de simetria:

$$\text{Sym}(\mathcal{O}) = \{ P \in \text{GL}_n(\mathbb{R}) \mid P\mathcal{O} = \mathcal{O} \}$$

Álgebra de simetria:

$$\mathfrak{sym}(\mathcal{O}) = \{ P \in \mathfrak{gl}_n(\mathbb{R}) \mid \exp(P) \in \text{Sym}(\mathcal{O}) \}$$

Hipótese: Supomos que $\mathfrak{h} = \mathfrak{sym}(\mathcal{O})$.

Lie-PCA é um algoritmo desenvolvido recentemente, que permite estimar \mathfrak{h} a partir de X . O resultado, denotado $\widehat{\mathfrak{h}} = \text{span}\{\widehat{\mathfrak{h}}_1, \dots, \widehat{\mathfrak{h}}_d\}$, é um subespaço linear de $\mathfrak{gl}_n(\mathbb{R})$ de dimensão d .

[Cahill, Mixon & Parshall, Lie PCA: Density estimation for symmetric manifolds, 2023]

Operador Lie-PCA: $\Lambda: M_n(\mathbb{R}) \rightarrow M_n(\mathbb{R})$ é definido como

$$\Lambda(A) = \frac{1}{N} \sum_{1 \leq i \leq N} \widehat{\Pi}[N_{x_i} X] \cdot A \cdot \Pi[\langle x_i \rangle]$$

onde

- $\widehat{\Pi}[N_{x_i} X]$ são estimativas de matrizes de projeção sobre os espaços normais $N_{x_i} \mathcal{O}$,
- $\Pi[\langle x_i \rangle]$ são as matrizes de projeção nas linhas $\langle x_i \rangle$.

Definimos $\widehat{\mathfrak{h}}$ como o subespaço gerado pelos primeiros autovetores $\widehat{\mathfrak{h}}_1, \dots, \widehat{\mathfrak{h}}_d$ de Λ .

Operador Lie-PCA: $\Lambda: M_n(\mathbb{R}) \rightarrow M_n(\mathbb{R})$ é definido como

$$\Lambda(A) = \frac{1}{N} \sum_{1 \leq i \leq N} \widehat{\Pi}[N_{x_i} X] \cdot A \cdot \Pi[\langle x_i \rangle]$$

onde

- $\widehat{\Pi}[N_{x_i} X]$ são estimativas de matrizes de projeção sobre os espaços normais $N_{x_i} \mathcal{O}$,
- $\Pi[\langle x_i \rangle]$ são as matrizes de projeção nas linhas $\langle x_i \rangle$.

Definimos $\widehat{\mathfrak{h}}$ como o subespaço gerado pelos primeiros autovetores $\widehat{\mathfrak{h}}_1, \dots, \widehat{\mathfrak{h}}_d$ de Λ .

Derivação de Lie-PCA: Baseia-se no fato de que $\mathfrak{sym}(\mathcal{O}) = \{A \in M_n(\mathbb{R}) \mid \forall x \in \mathcal{O}, Ax \in T_x \mathcal{O}\}$, onde $T_x \mathcal{O}$ denota o espaço tangente de \mathcal{O} em x . Em outras palavras,

$$\mathfrak{sym}(\mathcal{O}) = \bigcap_{x \in \mathcal{O}} S_x \mathcal{O} \quad \text{onde} \quad S_x \mathcal{O} = \{A \in M_n(\mathbb{R}) \mid Ax \in T_x \mathcal{O}\},$$

Usando apenas a nuvem de pontos $X = \{x_1, \dots, x_N\}$, consideramos

$$\bigcap_{i=1}^N S_{x_i} \mathcal{O} = \ker \left(\sum_{i=1}^N \Pi[(S_{x_i} \mathcal{O})^\perp] \right),$$

Além disso, os autores mostram que $\Pi[(S_{x_i} \mathcal{O})^\perp](A) = \Pi[N_{x_i} \mathcal{O}] \cdot A \cdot \Pi[\langle x_i \rangle]$. Pomos então

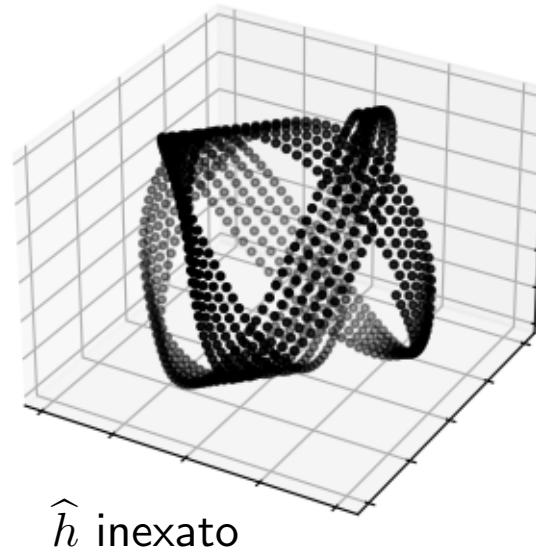
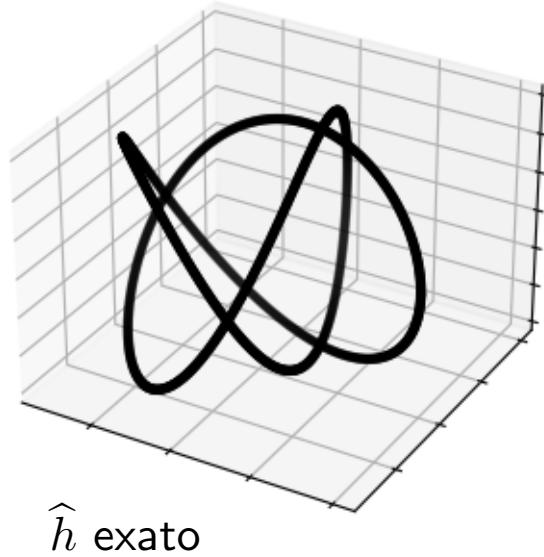
$$\Lambda(A) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \widehat{\Pi}[N_{x_i} X] \cdot A \cdot \Pi[\langle x_i \rangle]$$

onde $\widehat{\Pi}[N_{x_i} X]$ é uma estimativa de $\Pi[N_{x_i} \mathcal{O}]$ calculada a partir da observação X .

Via Lie-PCA, obtemos $\widehat{\mathfrak{h}}$, um subespaço linear de $M_n(\mathbb{R})$ de dimensão d . É uma estimativa de \mathfrak{h} .

Problema: O subespaço $\widehat{\mathfrak{h}}$ é estimado como se fosse um subespaço linear. Ele pode não ser uma álgebra de Lie (para $A, B \in \widehat{\mathfrak{h}}$, devemos ter $AB - BA \in \widehat{\mathfrak{h}}$).

Exponenciar uma álgebra que não é de Lie, ou uma álgebra de Lie que não vem de um grupo compacto, pode gerar grandes erros.



As a consequence of the Poincaré separation theorem, the orthogonal projection onto the span of any ℓ of the bottom eigenvectors of Σ gives an optimizer of this program. In particular, the span of any such eigenvectors gives a worthy estimate for $\mathfrak{sym}(M)$. One may be inclined to round this estimate to the nearest member of $L(\ell, d)$, but we do not attempt this here.

Desejamos projetar $\widehat{\mathfrak{h}}$ na álgebra de Lie mais próxima. Trabalhamos em $\mathfrak{so}(n)$, as matrizes antisimétricas $n \times n$. Ele tem dimensão $n(n+1)/2$. Ele é dotado do produto interno e norma

$$\langle A, B \rangle = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{i,j} b_{i,j} \quad \text{and} \quad \|A\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{i,j}}.$$

Variedade de Stiefel de álgebras de Lie

Veja os subespaços d -dimensionais de $\mathfrak{so}(n)$ como matrizes $n(n-1)/2 \times d$.

$\mathcal{V}^{\text{Lie}}(d, \mathfrak{so}(n))$ é definido como o **conjunto de d -uplas** de vetores (A_1, \dots, A_d) de $\mathfrak{so}(n)$ normalizados e ortogonais, com a condição de álgebra de Lie: $\forall i, j \in [1, \dots, n], A_i A_j - A_j A_i \in \langle A_1, \dots, A_d \rangle$.

O problema é

$$\min \left\{ \sum_{i=1}^d \|\widehat{\mathfrak{h}}_i - A_i\|^2 \mid (A_1, \dots, A_d) \in \mathcal{V}^{\text{Lie}}(d, \mathfrak{so}(n)) \right\}$$

Variedade de Grassmann de álgebras de Lie

Veja os subespaços d -dimensionais de $\mathfrak{so}(n)$ como matrizes $n(n-1)/2 \times n(n-1)/2$.

$\mathcal{G}^{\text{Lie}}(d, \mathfrak{so}(n))$ é definido como o **conjunto de matrizes de projeção ortogonal** de posto d em $\mathfrak{so}(n)$ com a condição de álgebra de Lie: $\forall i, j \in [1, \dots, n], P(Pe_i \cdot Pe_j - Pe_j \cdot Pe_i) = Pe_i \cdot Pe_j - Pe_j \cdot Pe_i$ em que $(e_1, \dots, e_{n(n+1)/2})$ é uma base ortonormal de $\mathfrak{so}(n)$.

O problema é

$$\min \left\{ \|\text{proj}[\widehat{\mathfrak{h}}] - P\| \mid P \in \mathcal{G}^{\text{Lie}}(d, \mathfrak{so}(n)) \right\}$$

Escrito explicitamente em forma matricial,

Variedade de Stiefel de álgebras de Lie

$$\min \sum_{i=1}^d \|\hat{\mathfrak{h}}_i - A_i\|^2 \text{ tal que } \begin{cases} \forall i \in [1 \dots, d], \quad A_i \text{ é uma matriz } (n \times n), \\ \forall i \in [1 \dots, d], \quad A^\top = -A, \\ \forall i, j \in [1 \dots, d], \quad \sum_{k=1}^d \langle A_k, A_i A_j - A_j A_i \rangle^2 = \|A_i A_j - A_j A_i\|^2. \end{cases}$$

Variedade de Grassmann de álgebras de Lie

$$\min \|\text{proj}[\hat{\mathfrak{h}}] - P\| \text{ tal que } \begin{cases} P \text{ é uma matriz } (n(n+1)/2 \times n(n+1)/2), \\ P^2 = P, \\ P^\top = P, \\ \text{rank}(P) = d, \\ \forall i, j \in [1 \dots, d], \quad P(Pe_i \cdot Pe_j - Pe_j \cdot Pe_i) = Pe_i \cdot Pe_j - Pe_j \cdot Pe_i. \end{cases}$$

Problema: (1) Esses programas parecem intratáveis (contêm a classificação das álgebras de Lie),
(2) Uma álgebra de Lie em $\mathfrak{so}(n)$ pode nem mesmo vir de um grupo de Lie compacto.

Idea: Fixe um grupo de Lie compacto G e restrinja a variedade de Stiefel $\mathcal{V}^{\text{Lie}}(d, \mathfrak{so}(n))$ e de Grassmannian $\mathcal{G}^{\text{Lie}}(d, \mathfrak{so}(n))$ às álgebras de Lie que são imagens de G .

Doravante, G é um grupo de Lie compacto fixo de dimensão d .

Variedade de Stiefel de álgebras imagem de G

$\mathcal{V}(G, \mathfrak{so}(n))$ é definido como o conjunto de $(A_1, \dots, A_d) \in \mathcal{V}^{\text{Lie}}(d, \mathfrak{so}(n))$ para os quais existe uma representação ortogonal $\phi: G \rightarrow \text{SO}(n)$ de modo que $d\phi(\mathfrak{g})$ seja gerado por (A_1, \dots, A_d) .

Lemma: As componentes conexas de $\mathcal{V}(G, \mathfrak{so}(n))$ são em correspondência com as **classes de equivalência de órbita** de representações de G no \mathbb{R}^n .

Definição: Dizemos que duas representações $\phi, \phi': G \rightarrow \text{GL}_n(\mathbb{R})$ são **órbita-equivalentes** se existir uma matriz $M \in \text{M}_n(\mathbb{R})$ tal que $d\phi(\mathfrak{g}) = M d\phi'(\mathfrak{g}) M^{-1}$. Isto é, suas órbitas são conjugadas. Denotaremos por $\text{orb}(G, n)$ um conjunto de representantes das classes de equivalência de órbita.

Variedade de Grassmann de álgebras imagem de G

$\mathcal{G}(G, \mathfrak{so}(n))$ é definido como o conjunto de elementos $P \in \mathcal{G}^{\text{Lie}}(d, \mathfrak{so}(n))$ para os quais existe uma representação ortogonal $\phi: G \rightarrow \text{SO}(n)$ de modo que P é a matriz de projeção em $d\phi(\mathfrak{g})$.

Lemma: As componentes conexas de $\mathcal{G}(G, \mathfrak{so}(n))$ também são em correspondência com as classes de equivalência de órbita de representações de G em \mathbb{R}^n .

Doravante, G é um grupo de Lie compacto fixo de dimensão d .

Variedade de Stiefel de álgebras imagem de G

$\mathcal{V}(G, \mathfrak{so}(n))$ é definido como o conjunto de $(A_1, \dots, A_d) \in \mathcal{V}^{\text{Lie}}(d, \mathfrak{so}(n))$ para os quais existe uma representação ortogonal $\phi: G \rightarrow \text{SO}(n)$ de modo que $d\phi(\mathfrak{g})$ seja gerado por (A_1, \dots, A_d) .

Lemma: As componentes conexas de $\mathcal{V}(G, \mathfrak{so}(n))$ são em correspondência com as **classes de equivalência de órbita** de representações de G no \mathbb{R}^n .

Definição: Dizemos que duas representações $\phi, \phi': G \rightarrow \text{GL}_n(\mathbb{R})$ são **órbita-equivalentes** se existir uma matriz $M \in \text{M}_n(\mathbb{R})$ tal que $d\phi(\mathfrak{g}) = M d\phi'(\mathfrak{g}) M^{-1}$. Isto é, suas órbitas são conjugadas. Denotaremos por $\text{orb}(G, n)$ um conjunto de representantes das classes de equivalência de órbita.

Lemma: Para qualquer $(A_1, \dots, A_d) \in \mathcal{V}(G, \mathfrak{so}(n))$, existe $p \geq 1$, uma p -upla $(B^1, \dots, B^p) \in \text{orb}(G, n)$ e duas matrizes $O \in \text{O}(n)$ e $P \in \text{O}(d)$ tais que, para todos os $i \in [1 \dots d]$,

$$A_i = \sum_{j=1}^d P_{j,i} O \text{diag}(B_j^k)_{k=1}^p O^\top.$$

Em particular, o subespaço $\langle A_1, \dots, A_d \rangle \subset \mathfrak{so}(n)$ é gerado pelas matrizes

$$O \text{diag}(B_1^k)_{k=1}^p O^\top, \quad O \text{diag}(B_2^k)_{k=1}^p O^\top, \quad \dots, \quad O \text{diag}(B_p^k)_{k=1}^p O^\top.$$

Corolário: O problema $\min \left\{ \|\text{proj}[\widehat{\mathfrak{h}}] - P\| \mid P \in \mathcal{G}(G, \mathfrak{so}(n)) \right\}$ é equivalente a

$$\min \left\| \text{proj}[\widehat{\mathfrak{h}}] - \text{proj}[\langle O \text{diag}(B_i^k)_{k=1}^p O^\top \rangle_{i=1}^d] \right\| \quad \text{tal que} \quad \begin{cases} (B^1, \dots, B^p) \in \mathfrak{orb}(G, n), \\ O \in O(n). \end{cases}$$

Observação: Esse é um problema discreto-contínuo.

Se decompõe em N problemas de minimização sobre $O(n)$, onde N é o cardinal de $\mathfrak{orb}(G, n)$.

Na prática, efetuamos uma descida de gradiente em $O(n)$ (line-search com retração QR).

Observação: Para aplicar esse resultado na prática, é preciso ter acesso a uma descrição explícita de $\mathfrak{orb}(G, n)$. Resolvemos os casos de $SO(2)$, T^d , $SO(3)$ e $SU(2)$.

Input: Uma nuvem de pontos $X = \{x_1, \dots, x_N\} \subset \mathbb{R}^n$.

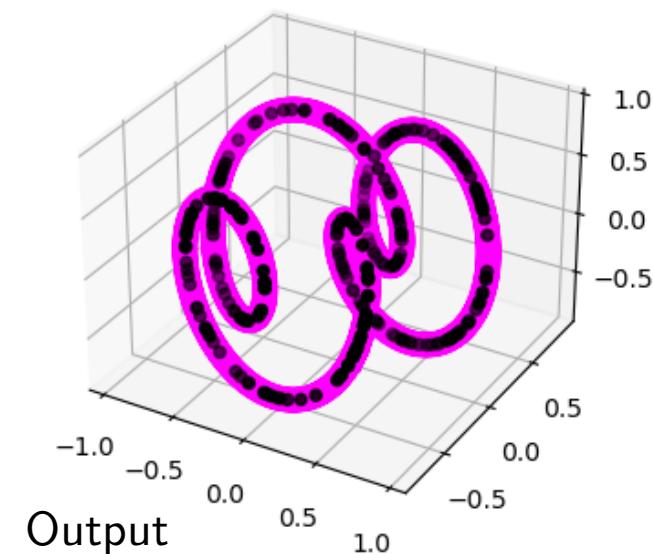
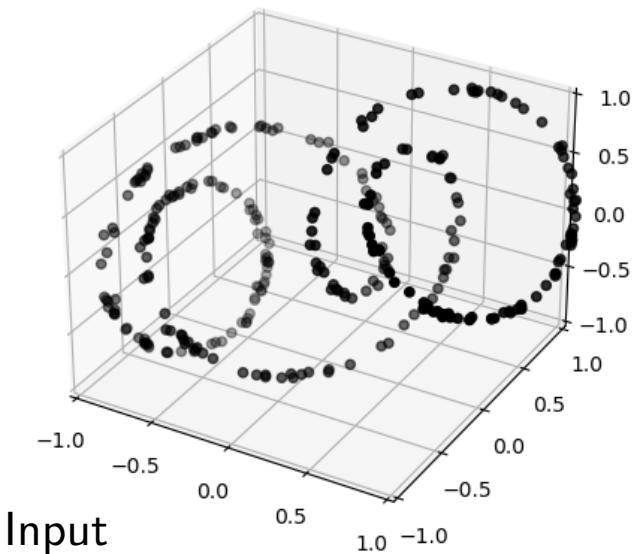
Output: Uma representação ortogonal $\hat{\phi}$ de um grupo de Lie compacto G em \mathbb{R}^n e uma órbita \hat{O} próxima a X .

Etapa 1: Ortonormalização Aplique redução de dimensão e ortonormalização.

Etapa 2: Lie-PCA Diagonalize o operador Lie-PCA $\Lambda: M_n(\mathbb{R}) \rightarrow M_n(\mathbb{R})$.

Etapa 3: Álgebra de Lie mais próxima Estime \hat{h} por meio de uma otimização sobre $O(n)$.

Etapa 4: Geração da órbita Construa $\hat{O}_x = \exp(\hat{h}) \cdot x$ e verifique que ela esteja próxima a X .



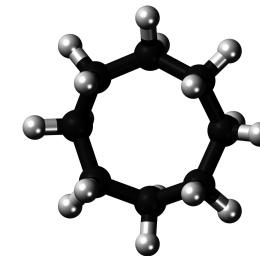
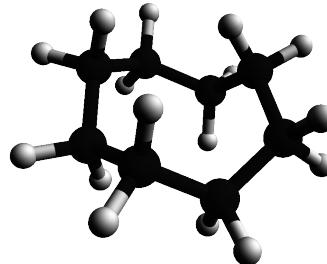
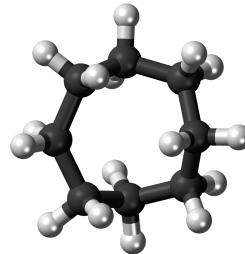
- 1. Representações e órbitas**
- 2. Aplicação: Problema de três corpos**
- 3. Correspondência grupo de Lie - álgebra de Lie**
- 4. Aplicação: Rotação de corpos rígidos**
- 5. Descrição do algoritmo**
- 6. Aplicação: Espaço de conformação do ciclooctano**
- 7. Garantias teóricas**

Confômeros do ciclooctano C₈H₁₆

24/28 (1/3)

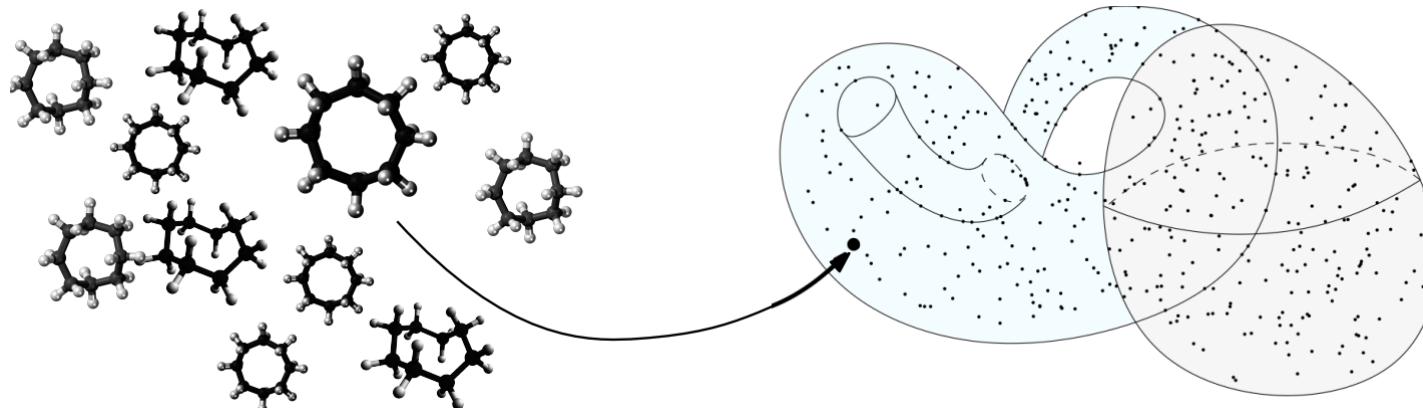
Toda molécula admite muitas conformações possíveis, chamadas de **confômeros**.

A molécula de ciclooctano C₈H₁₆ contém 24 átomos. Cada átomo tem 3 coordenadas espaciais. Portanto, um confômero pode ser resumido por um ponto em \mathbb{R}^{72} ($3 \times 24 = 72$).



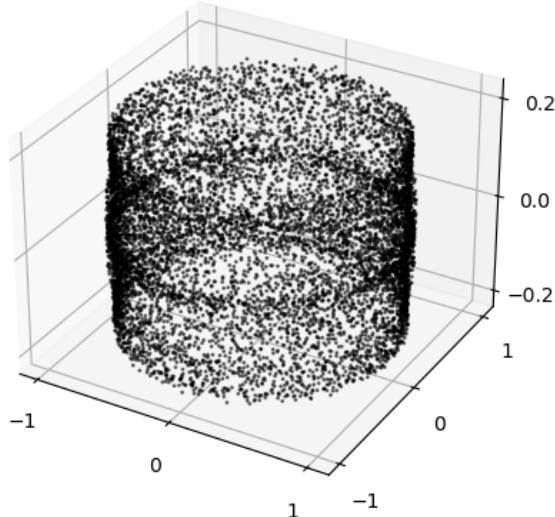
Ao considerar muitos confômeros, obtém-se uma nuvem de pontos, denotada $X \subset \mathbb{R}^{72}$. Ela está próxima à *união entre uma garrafa de Klein e uma esfera*.

[Martin, Thompson, Coutsias & Watson, *Topology of cyclo-octane energy landscape*, 2010]



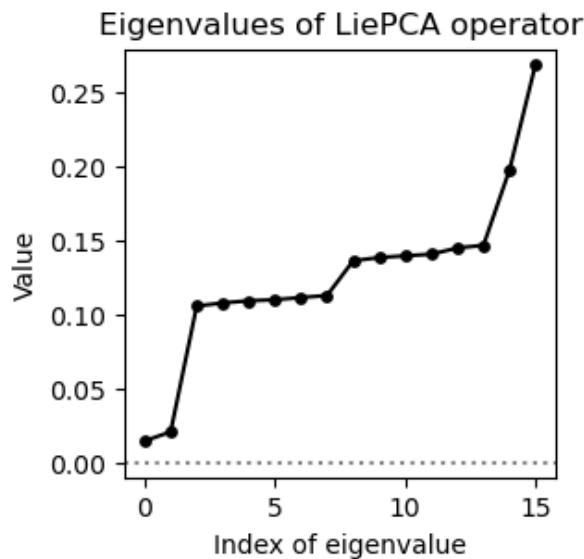
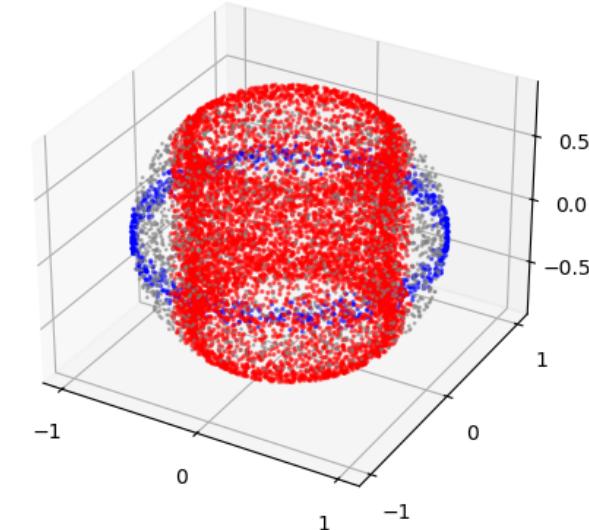
Nossa tentativa: verifique se X não é, na verdade, uma órbita de um grupo de Lie.

Confômeros não alinhados: Em nosso primeiro experimento, geramos 10.000 confômeros de ciclooctano, sem alinhá-los.



Projetado na dimensão 3, vemos um cilindro cercado por um círculo.

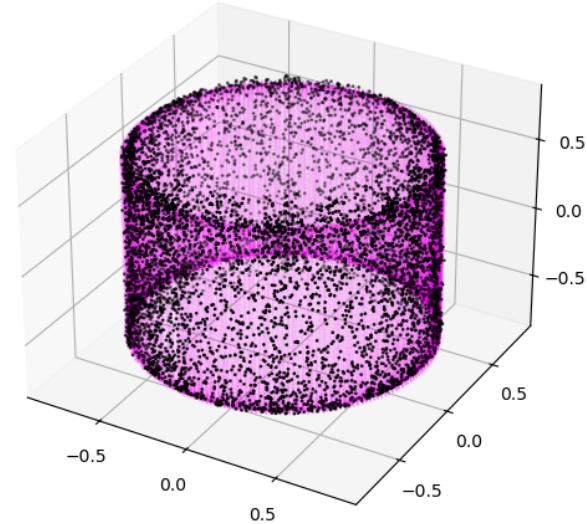
X é projetado no \mathbb{R}^4 e ortonormalizado. Após descartar 15% dos outliers (cinza), dois clusters aparecem. Ficamos com o vermelho.



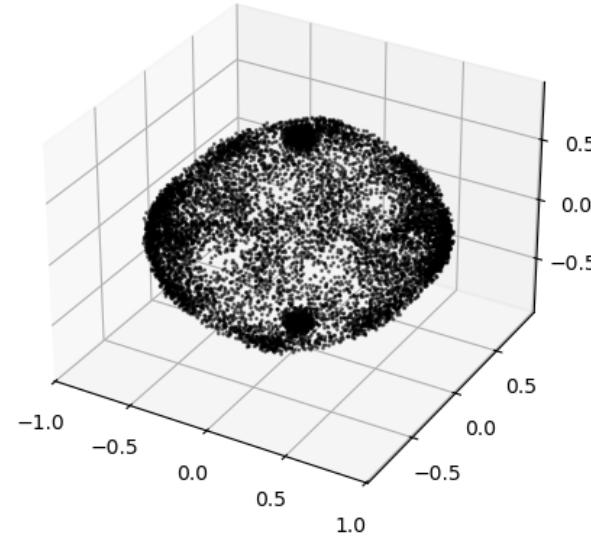
Lie-PCA apresenta dois autovalores pequenos, sugerindo um grupo de simetria de dimensão 2.

LieDetect encontra uma órbita de uma representação de T^2 no \mathbb{R}^4 que coincide com os dados.

Distância de Hausdorff $d_H(X, \mathcal{O}) \simeq 0.2$.

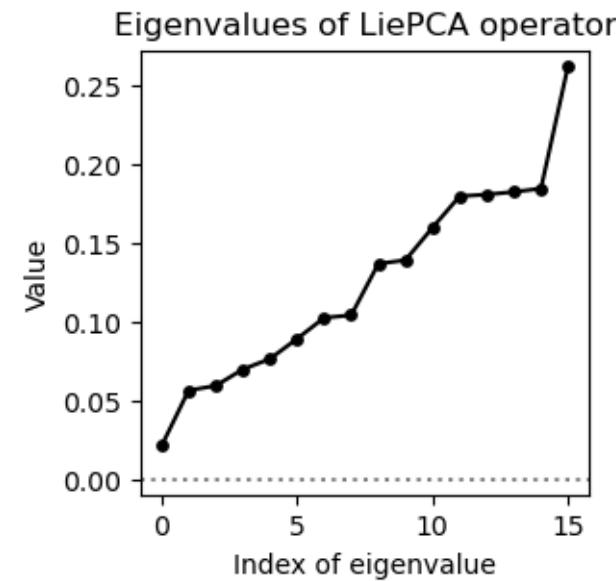
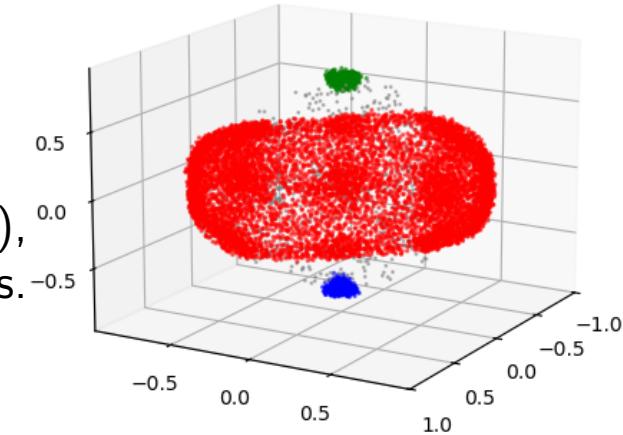


Confômeros alinhados: Agora, geramos 10.000 confômeros alinhados.



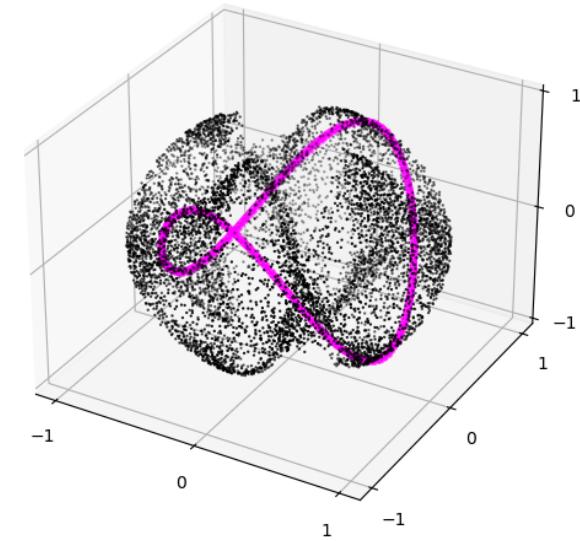
Projetado na dimensão 3, vemos três componentes: uma superfície e dois clusters.

Após descartar 10% dos outliers (cinza), os pontos são agrupados em três classes. Ficamos com o vermelho.



Lie-PCA apresenta um autovalor pequeno, sugerindo um grupo de simetria de dimensão 1.

LieDetect encontra uma ação de SO(2) que estabiliza a nuvem de pontos.
Distância média: $d_H(X, \mathcal{O}_x) \simeq 0.1$.



- 1. Representações e órbitas**
- 2. Aplicação: Problema de três corpos**
- 3. Correspondência grupo de Lie - álgebra de Lie**
- 4. Aplicação: Rotação de corpos rígidos**
- 5. Descrição do algoritmo**
- 6. Aplicação: Espaço de conformação do ciclooctano**
- 7. Garantias teóricas**

Input: $X = \{x_1, \dots, x_N\} \subset \mathbb{R}^n$ e G grupo de Lie compacto

Modelo: X amostrado próximo a uma órbita \mathcal{O} de uma representação $\phi: G \rightarrow \mathbb{R}^n$

Etapa 1: Ortonormalização via $X \leftarrow \sqrt{\Sigma[X]^+} \cdot \Pi_{\Sigma[X]}^{>\epsilon} \cdot X$.

com $\Sigma[X]$ matriz de covariância e $\Pi_{\Sigma[X]}^{>\epsilon}$ matriz de projeção nos eigenvetores $> \epsilon$.

Etapa 2: Diagonalize o operador $\Lambda: A \mapsto \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \widehat{\Pi}[\mathbf{N}_{x_i} X] \cdot A \cdot \Pi[\langle x_i \rangle]$

com $A \in M_n(\mathbb{R})$ e $\widehat{\Pi}[\mathbf{N}_{x_i} X]$ estimativa da projeção no espaço normal de X .

Etapa 3: Resolve $\arg \min_{\widehat{h}} \|\Pi[\langle A_i \rangle_{i=1}^d] - \Pi[\widehat{h}]\|$ com $(A_i)_{i=1}^d$ primeiros autovetores de Λ

com $\widehat{h} \in \mathcal{G}(\mathfrak{g}, \mathfrak{so}(n))$ variedade de Grassmann das subálgebras de Lie imagem de G .

Etapa 4: Construa $\widehat{\mathcal{O}}_x = \{\exp(A)x \mid A \in \widehat{h}\}$

onde $x \in X$ é um ponto arbitrário.

Objetivo: Mostre que $\widehat{\mathcal{O}}_x$ está próximo de \mathcal{O}

Input: $X = \{x_1, \dots, x_N\} \subset \mathbb{R}^n$ e G grupo de Lie compacto

μ medida no \mathbb{R}^n . E.g., μ_X medida empírica sobre X

Modelo: X amostrado próximo a uma órbita \mathcal{O} de uma representação $\phi: G \rightarrow \mathbb{R}^n$

$\mu_{\mathcal{O}}$ medida uniforme sobre \mathcal{O}

Etapa 1: Ortonormalização via $X \leftarrow \sqrt{\Sigma[X]^+} \cdot \Pi_{\Sigma[X]}^{>\epsilon} \cdot X$.

$$\mu \leftarrow \sqrt{\Sigma[\mu]^+} \cdot \Pi_{\Sigma[\mu]}^{>\epsilon} \cdot \mu.$$

Etapa 2: Diagonalize o operador $\Lambda: A \mapsto \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \widehat{\Pi}[\mathbf{N}_{x_i} X] \cdot A \cdot \Pi[\langle x_i \rangle]$

$$\Lambda[\mu]: A \mapsto \int_{i=1}^N \widehat{\Pi}[\mathbf{N}_{x_i} X] \cdot A \cdot \Pi[\langle x_i \rangle] d\mu$$

Etapa 3: Resolve $\arg \min_{\widehat{h}} \|\Pi[\langle A_i \rangle_{i=1}^d] - \Pi[\widehat{\mathfrak{h}}]\|$ com $(A_i)_{i=1}^d$ primeiros autovetores de Λ

$$\arg \min_{\widehat{h}} \|\Pi[\langle A_i \rangle_{i=1}^d] - \Pi[\widehat{\mathfrak{h}}]\| \text{ com } (A_i)_{i=1}^d \text{ primeiro autovetores de } \Lambda[\mu]$$

Etapa 4: Construa $\widehat{\mathcal{O}}_x = \{ \exp(A)x \mid A \in \widehat{h} \}$

$$\mu_{\widehat{\mathcal{O}}_x} = \exp(\widehat{\mathfrak{h}}) \cdot \mu$$

Objetivo: Mostre que $\widehat{\mathcal{O}}_x$ está próximo de \mathcal{O}

Mostre que $W_2(\mu_{\widehat{\mathcal{O}}_x}, \mu_{\mathcal{O}})$ “ \leq ” $W_2(\mu, \mu_{\mathcal{O}})$

Por que trabalhar com Wasserstein e não com Hausdorff?

- Formalismo natural para grupos de Lie (média com a medida de Haar)
- Possibilita ruído e pontos anômalos
- PCA local não é estável em Hausdorff

Observação: Nosso objetivo é obter uma desigualdade explícita $W_2(\mu_{\hat{\mathcal{O}}_x}, \mu_{\mathcal{O}}) \leq W_2(\mu, \mu_{\mathcal{O}})$. Isso é diferente de outros formalismos estatísticos. Em particular, não há lei dos grandes números/concentração.

Teorema: Seja G um grupo de Lie compacto de dimensão d , \mathcal{O} uma órbita de uma representação quase fiel $\phi: G \rightarrow \mathbb{R}^n$, potencialmente não ortogonal, e l sua dimensão. Seja $\mu_{\mathcal{O}}$ a medida uniforme sobre \mathcal{O} e $\mu_{\tilde{\mathcal{O}}}$ a medida sobre a órbita ortonormalizada.

Além disso, seja $X \subset \mathbb{R}^n$ uma nuvem de pontos finita e μ_X a medida empírica. Sejam $\hat{\phi}$, $\hat{\mathfrak{h}}$ e $\mu_{\hat{\mathcal{O}}}$ o resultado do algoritmo. Sob hipóteses técnicas, vale que $\hat{\phi}$ é equivalente a ϕ e

$$\|\Pi[\hat{h}] - \Pi[\mathfrak{shm}(\mathcal{O})]\|_F \leq 9d \frac{\rho}{\lambda} \left(r + 4 \left(\frac{\tilde{\omega}}{r^{l+1}} \right)^{1/2} \right)$$

$$W_2(\mu_{\hat{\mathcal{O}}}, \mu_{\mathcal{O}}) \leq \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{W_2(\mu_X, \mu_{\mathcal{O}})}{\sigma_{\min}} + 3\sqrt{dn} \left(\frac{\rho}{\lambda} \right)^{1/2} \left(r + 4 \left(\frac{\tilde{\omega}}{r^{l+1}} \right)^{1/2} \right)^{1/2}$$

onde

- $\rho = \left(16l(l+2)6^l \right) \frac{\max(\text{vol}(\tilde{\mathcal{O}}), \text{vol}(\tilde{\mathcal{O}})^{-1})}{\min(1, \text{reach}(\tilde{\mathcal{O}}))}$
- $\sigma_{\max}^2, \sigma_{\min}^2$ o primeiro e último autovalor da matriz de covariância $\Sigma[\mu_{\mathcal{O}}]$
- $\tilde{\omega} = 4(n+1)^{3/2} \left(\frac{\sigma_{\max}^3}{\sigma_{\min}^3} \right) \left(\omega(v+\omega) \right)^{1/2}$ onde $\omega = \frac{W_2(\mu_{\mathcal{O}}, \mu_X)}{\sigma_{\min}}$ e $v = \left(\frac{\mathbb{V}[\|\mu_{\mathcal{O}}\|]}{\sigma_{\min}^2} \right)^{1/2}$
- r é o raio da PCA local (estimação de espaços tangentes)
- λ o primeiro autovalor diferente de zero do operador Lie-PCA ideal $\Lambda_{\mathcal{O}}$

Teorema: Seja G um grupo de Lie compacto de dimensão d , \mathcal{O} uma órbita de uma representação quase fiel $\phi: G \rightarrow \mathbb{R}^n$, potencialmente não ortogonal, e l sua dimensão. Seja $\mu_{\mathcal{O}}$ a medida uniforme sobre \mathcal{O} e $\mu_{\tilde{\mathcal{O}}}$ a medida sobre a órbita ortonormalizada.

Além disso, seja $X \subset \mathbb{R}^n$ uma nuvem de pontos finita e μ_X a medida empírica. Sejam $\hat{\phi}$, $\hat{\mathfrak{h}}$ e $\mu_{\hat{\mathcal{O}}}$ o resultado do algoritmo. Sob hipóteses técnicas, vale que $\hat{\phi}$ é equivalente a ϕ e

$$\|\Pi[\hat{h}] - \Pi[\mathfrak{shm}(\mathcal{O})]\|_F \leq 9d \frac{\rho}{\lambda} \left(r + 4 \left(\frac{\tilde{\omega}}{r^{l+1}} \right)^{1/2} \right)$$

trade-off viés e variância ao estimar espaços tangentes

$$W_2(\mu_{\hat{\mathcal{O}}}, \mu_{\mathcal{O}}) \leq \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{W_2(\mu_X, \mu_{\mathcal{O}})}{\sigma_{\min}} + 3\sqrt{dn} \left(\frac{\rho}{\lambda} \right)^{1/2} \boxed{\left(r + 4 \left(\frac{\tilde{\omega}}{r^{l+1}} \right)^{1/2} \right)^{1/2}}$$

onde

$$\lesssim W_2(\mu, \mu_{\mathcal{O}})^{1/4(l+3)}$$

- $\rho = \left(16l(l+2)6^l \right) \frac{\max(\text{vol}(\tilde{\mathcal{O}}), \text{vol}(\tilde{\mathcal{O}})^{-1})}{\min(1, \text{reach}(\tilde{\mathcal{O}}))}$
- $\sigma_{\max}^2, \sigma_{\min}^2$ o primeiro e último autovalor da matriz de covariância $\Sigma[\mu_{\mathcal{O}}]$
- $\tilde{\omega} = 4(n+1)^{3/2} \left(\frac{\sigma_{\max}^3}{\sigma_{\min}^3} \right) \left(\omega(v+\omega) \right)^{1/2}$ onde $\omega = \frac{W_2(\mu_{\mathcal{O}}, \mu_X)}{\sigma_{\min}}$ e $v = \left(\frac{\mathbb{V}[\|\mu_{\mathcal{O}}\|]}{\sigma_{\min}^2} \right)^{1/2}$
- r é o raio da PCA local (estimação de espaços tangentes)
- λ o primeiro autovalor diferente de zero do operador Lie-PCA ideal $\Lambda_{\mathcal{O}}$

Hipóteses técnicas: Defina as quantidades

$$\omega = \frac{W_2(\mu_{\mathcal{O}}, \mu_X)}{\sigma_{\min}}, \quad v = \left(\frac{\mathbb{V}[\|\mu_{\mathcal{O}}\|]}{\sigma_{\min}^2} \right)^{1/2},$$

$$\tilde{\omega} = 4(n+1)^{3/2} \left(\frac{\sigma_{\max}^3}{\sigma_{\min}^3} \right) \left(\omega(v + \omega) \right)^{1/2}, \quad \rho = \left(16l(l+2)6^l \right) \frac{\max(\text{vol}(\tilde{\mathcal{O}}), \text{vol}(\tilde{\mathcal{O}})^{-1})}{\min(1, \text{reach}(\tilde{\mathcal{O}}))},$$

$$\gamma = (4(2d+1)\sqrt{2})^{-1} \cdot \lambda \cdot \Gamma(G, n, \omega_{\max}) \quad (\text{constante de rigidez das subálgebras de Lie})$$

Suponha que ω seja suficientemente pequeno, de modo a satisfazer

$$\omega < \left(\left(v^2 + \frac{1}{2} \right)^{1/2} - v \right) / \left(3(n+1) \frac{\sigma_{\max}^2}{\sigma_{\min}^2} \right), \quad \tilde{\omega} \leq \min \left\{ \left(\frac{1}{6\rho} \right)^{3(l+1)}, \frac{\gamma^{l+3}}{16}, \left(\frac{\gamma}{(6\rho)^2} \right)^{l+1} \right\}.$$

Escolha dois parâmetros ϵ e r nos seguintes conjuntos não vazios:

$$\epsilon \in \left((2v + \omega)\omega\sigma_{\min}^2, \frac{1}{2}\sigma_{\min}^2 \right], \quad r \in \left[(6\rho)^2 \cdot \tilde{\omega}^{1/(l+1)}, (6\rho)^{-1} \right] \cap \left[(4/\gamma)^{2/(l+1)} \cdot \tilde{\omega}^{1/(l+1)}, \gamma \right].$$

Além disso, suponha que

- os problemas de minimização são calculados com exatidão,
- $\text{sym}(\mathcal{O})$ é gerado por matrizes cujos espectros vêm de vetores integrais primitivos de coordenadas de no máximo ω_{\max} ,
- $G = \text{Sym}(\mathcal{O})$.

Conclusão

- Primeiro algoritmo para encontrar o **tipo de representação** (não apenas como subespaço linear)
- Implementação para $G = \text{SO}(2)$, T^d , $\text{SO}(3)$ e $\text{SU}(2)$
- Pode ser adaptado a outro grupo de Lie compacto desde que seja fornecida uma descrição explícita de suas representações
- Experimentos em análise de imagens, análise harmônica, sistemas físicos, aprendizado de máquina e redes neurais equivariantes no <https://github.com/HLovisiEnnes/LieDetect>

Limitações:

- As otimizações sobre $O(n)$ são computacionalmente caras e instáveis
- O algoritmo não lida com órbitas entrelaçadas
- Restrito a **representações** de grupos de Lie

Conclusão

Próximo objetivo: Detecção de **ações** através da representação induzida no espaço dos campos vetoriais.

$$\begin{array}{ccc} G & \xrightarrow{\phi} & \text{Diff}(\mathcal{M}) \\ \exp \uparrow & & \uparrow \exp \\ \mathfrak{g} & \xrightarrow{d\phi} & \mathcal{X}(\mathcal{M}) \end{array}$$

Modelo: uma amostra X de uma subvariedade $\mathcal{M} \subset \mathbb{R}^n$ e um grupo de Lie G .

Problema: estimar ações de G sobre \mathcal{M} . (transitivas? fiéis?)

- (1) Construir uma triangulação K de \mathcal{M} a partir de X (Rips ou Cech, por exemplo).
- (2) Considerar uma base de campos vetoriais periódicos sobre K .
- (3) Encontrar uma subálgebra de $\mathcal{X}(K)$ isomorfa a \mathfrak{g} .