嵌入单纯复形的不变表示

Taejin Paik PAIKTJ@SNU.AC.KR
数学科学系，首尔国立大学，韩国首尔，邮编 *08826*

arXiv:2302.13565v1 [cs.LG] 27 Feb 2023

摘要

分析嵌入单纯复形（如三角网格和图）是许多领域中的一项重要问题。我们提出了一种新方法，仅利用拓扑和几何信息，以细分不变且等距不变的方式分析嵌入单纯复形。我们的方法基于创建和分析充分统计量，并使用图神经网络。我们使用合成网格数据集展示了该方法的有效性。

关键词： 单纯复形，等距不变，拓扑数据分析，图神经网络

1 引言

三角网格和图等几何对象广泛应用于计算机图形学、计算机视觉和机器学习等领域。我们使用单纯复形作为此类网格和图的数学模型，从而为分析拓扑空间提供了更一般的框架。分析这些对象往往颇具挑战，因为它们结构复杂，难以表示和处理。近年来，人们提出了多种分析此类几何对象的方法，例如基于多视图的方法、基于体素的方法和基于点云的方法。这些方法已被证明能够有效完成分类、分割和重建等多种任务。

然而，这些传统方法往往存在局限性。例如，某些方法对单纯复形的细分可能不够稳健，导致对象经过细分后结果有所不同；另一些方法则可能对网格数据集上的点采样不够稳健。此外，这些方法可能不具备等距变换不变性，导致对象旋转或变换后结果有所不同。这些局限促使人们开发能够更稳健、且在这类变换下保持不变的新方法。

本文提出了一种新方法，仅利用拓扑和几何数据分析单纯复形。我们的方法兼具等距不变性和细分不变性，确保即使物体发生旋转、平移或细分，分析结果仍大致保持一致。为此，我们使用图神经网络构建一个 O(3) 等变算子，并利用欧拉曲线变换，通过物体的拓扑信息对其进行分析。据我们所知，

©2023 Taejin Paik。许可协议：CC-BY 4.0，参见 https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/。

我们的方法是首个能够直接处理三角网格，并实现等距不变性和细分不变性的方法。

我们的方法与传统方法有显著不同。我们主要关注如何利用单纯复形的拓扑数据生成描述底层对象性质的充分统计量。这样，我们便能使用一种简单而稳健的表征来分析对象，且该表征对细分和等距变换均保持不变。

本文其余部分的结构如下。第2节介绍半代数集、单纯复形、欧拉曲线和等距变换的背景知识。第3节详细描述我们提出的方法，包括所用的充分统计量，以及通过图神经网络实现的 O(3) 等变算子。第4节展示实验结果，验证我们的方法在合成网格数据集[1]上的有效性。第5节讨论我们的方法，指出其局限性，并提出未来的研究方向。附录 A 给出了我们所用命题和定理的证明。

2 预备知识

本节旨在全面概述本文所需的基础概念，包括简要介绍半代数集、单纯复形、细分的定义、过滤、持久同调和等距变换，并建立相关记号。

我们的方法的有效性深深植根于欧拉示性数这一概念。为了确保欧拉示性数定义良好，我们首先在下一小节中考察半代数集。

2.1 半代数集

半代数集是代数几何和实代数几何中的一个基本概念。半代数集是欧几里得空间的一个子集，由有限个带实系数的多项式不等式定义。半代数集的概念是代数集概念的一种自然推广，代数集由多项式方程定义。与代数集不同，半代数集可以具有非空内部，因此在许多应用中是更灵活的工具。

形式上，**半代数集** 是 n 维欧几里得空间的一个子集，可以表示为以下两类集合的有限并或交：

1. 由形式为 $\{\bar{x} \in \mathbb{R}^n : f(\bar{x}) > 0\}$ an 的多项式不等式定义的集合 d

2. 由形式为 $\{\bar{x} \in \mathbb{R}^n : g(\bar{x}) = 0\}$, 的多项式方程定义的集合，

其中， f 和 g 是 $\bar{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ 中的多项式，且系数为实数。

我们注意到，半代数集这一类别是 o-极小结构的一个重要例子。o-极小结构的主要性质之一是，它们允许对欧拉示性数作出定义良好的定义；欧拉示性数是一种拓扑不变量，用来衡量

1. 为确保实验的可复现性，我们在 https: //github.com/TJPaik/InvariantRepresentation 发布了实验的源代码。

空间的“形状”或“结构”。也就是说，对于每个半代数集 $S \subseteq \mathbb{R}^n$，都存在一个有限的胞腔划分，而相对于划分 $\mathcal{C}$ 的**欧拉示性数** 定义为

$$\chi_{\mathcal{C}}(S) := k_0 - k_1 + \cdots + (-1)^d k_d + \cdots + (-1)^n k_n$$

其中， k_d 是 $\mathcal{C}$中 d维胞腔的数量。不出所料，正如 van den Dries（1998年）所述，欧拉示性数与划分无关:

命题 1 对于半代数集 $A \subseteq \mathbb{R}^n$，假设有两个有限划分$\mathcal{C}$ 和 $\mathcal{C}'$。那么，我们有

$$\chi_{\mathcal{C}}(S) = \chi_{\mathcal{C}'}(S).$$

因此，我们可以简化记号，将半代数集 $S \subseteq \mathbb{R}^n$ 的欧拉示性数简记为 $\chi(S)$。如需更全面地了解这一概念，请参阅 van den Dries（1998年）。

接下来，我们简要介绍欧拉微积分中的一些概念，这些概念将在后文用到。设 X 是 $\mathbb{R}^n$中的一个半代数集。若一个取整数值的函数$f:\ X \to \mathbb{Z}$ **可构造**，即对于每个 $i \in \mathbb{Z}$, $f^{-1}(i)$都是半代数子集，则称其为可构造函数。我们将 X 上的有界紧支撑可构造函数的集合记为 CF(X)。欧拉示性数的一个重要性质是可加性，这使得它的行为类似于测度（ Curry 等人，2012年）。也就是说，对于半代数集 A 和 B，我们有

$$\chi(A \cup B) = \chi(A) + \chi(b) - \chi(A \cap B).$$

这种可加性用于定义 CF(X) 上函数的**欧拉积分**；对于每个$f \in$CF(X)，我们定义

$$\int_X f \, d\chi := \sum_{i \in \mathbb{Z}} i \cdot \chi(f^{-1}(i)).$$

欧拉积分是欧拉微积分的基本组成部分。这种技术有助于解决计算几何和传感器网络中与计数和枚举相关的问题。关于欧拉积分和欧拉微积分的详细介绍，请参见 Baryshnikov 等人（2011）；Curry 等人（2012）；McCrory 和 Parusi´nski（1997）。

2.2 嵌入单纯复形

本节将介绍 Edelsbrunner 和 Harer（2022）所述的单纯复形基本概念。

定义 2 一个 k-单纯形 是环境空间 $\mathbb{R}^n$ 中 $k+1$ 个仿射无关点的凸包。单纯复形 K 定义为满足以下条件的有限个单纯形的集合:

1. 如果 τ 是 σ 和 $\sigma \in K$的一个人脸，则 $\tau \in K$。

2. 假设 σ_0 和 σ_1 是 K 的元素。那么，如果 $\sigma_0 \cap \sigma_1$ 非空，它就是 σ_0 和 σ_1 的一个人脸。

本文主要关注**嵌入单纯复形**，它定义为给定单纯复形 K 中若干单纯形的并集，并带有从环境欧几里得空间继承的子空间拓扑。实质上，嵌入单纯复形就是嵌入欧几里得空间中的单纯复形。为避免繁琐的记号，我们略微滥用记法，将嵌入单纯复形简称为 K。请注意，每个单纯形都是半代数集，因此嵌入单纯复形也是半代数集。由于 $\mathbb{R}^n$ 中的嵌入单纯复形 K 可理解为若干单纯形的并集，而这在 $\mathbb{R}^n$ 中是一个半代数胞腔，因此嵌入单纯复形的欧拉示性数为

$$\chi(K) = \sum_{m \geq 0} (-1)^m k_m$$

其中 k_m 是 m-单纯形的数量。

这里，我们引入一些记号，以便后续讨论。对于嵌入于 $\mathbb{R}^n$中的嵌入单纯复形 K，为便于后续记述，我们用 MK表示 $\{M^{-1}x \mid x \in K\}$，其中 $M \in \mathrm{GL}_n(\mathbb{R})$。此外，对于 $\mathbb{R}^n$中的向量 v，我们将集合 $\{x+v \mid x \in K\}$记作 $K+v$。这些记号有助于使讨论和方程更加简洁易懂。

设 K 是一个嵌入单纯复形。若嵌入单纯复形 K' 是 K 的**细分**，则

1. K' 的每个单纯形都包含于 K 的某个单纯形中，并且
2. K 的每个单纯形都是 K'的有限个单纯形的并集。

换言之， K 及其细分在 K的环境空间中作为集合是相同的，但它们的单纯复形结构可以不同。

2.3 过滤

过滤是研究拓扑空间的一种强大工具。其基本思想是对空间进行参数化，以便追踪参数变化时拓扑结构的变化。在本文中，过滤用于研究空间的持久同调和欧拉示性数信息，从而检测并量化拓扑特征。形式上，**过滤** 是一个由拓扑空间组成的带索引族 $(X_i)_{i \in I}$，其索引集合 I 是全序集，并且对每个 $i \leq j$ 都有 $X_i \subseteq X_j$。接下来，我们给出一个将在本文中发挥核心作用的过滤示例：设 K 是 $\mathbb{R}^n$ 中的一个嵌入单纯复形。对于单位球面 S^{n-1} 中的每个单位向量 v （其中 S^{n-1} 位于 $\mathbb{R}^n$ 中），以及每个实数 r，我们定义

$$K_{v,r} := \{x \in \mathbb{R}^n \mid x \cdot v \leq r\} \cap K.$$

由此可知，若 $r_1 \leq r_2$，则$K_{v,\ r_1} \subseteq K_{v,\ r_2}$，从而使得$(K_{v,\ r})_{r \in \mathbb{R}}$ 成为由单位向量 v诱导的一个过滤。此外，集合 $\{x \in \mathbb{R}^n \mid x \cdot v \leq r\}$ 是一个半代数集，而半代数集的类别在有限交下封闭。因此，$K_{v,\ r}$ 的欧拉示性数是良定义的。于是，对于每个单位向量v，我们得到一条曲线 $r \mapsto \chi(K_{v,\ r})$，并将这条曲线称为**欧拉曲线**。

现在我们简要介绍持久同调，它是一种从过滤中提取拓扑特征的强大工具。假设我们有一个过滤$(X_i)_{i\in\mathbb{R}}$，其中对于每个指标 i， X_i 都是一个拓扑空间。然后，我们可以对其应用带有限域系数 $\mathbb{Z}_p$ 的同调函子 H_*，从而得到每个指标 i对应的同调群 $H_*(X_i;\mathbb{Z}_p)$。如果这些同调群中的每一个都是有限维的，那么持久模$(H_*(X_i;\mathbb{Z}_p))_{i\in\mathbb{R}}$可以分解为区间模的直和（Oudot，2017年；Chazal 等，2016年）。

区间模由以下形式的区间表示：(b,d), $[b,d)$, $(b,d]$，或 $[b,d]$，其中 $b,d\in\mathbb{R}$，其中 $\mathbb{R}$ 是扩展实数轴 $[-\infty,\infty]$。**持久图**是对过滤过程中持续存在的拓扑特征的一种紧凑表征，它使我们能够以简洁直观的方式分析同调类的演化。为获得持久图，我们收集所有区间，并将它们表示为（扩展）坐标平面上的一个点的多重集。每个点的 x 坐标对应一个同调类的出生时间，而 y 坐标对应其死亡时间。如果某个区间长度无限，则称持久图中对应的条目具有无限持久性或无限生存期。

持久景观是持久图的另一种表征。Bubenik（2015）提出了这一概念，将持久图向量化。与持久图（即平面上的点集）不同，持久景观是在 $\mathbb{R}$ 上定义的一组函数：

定义 3 设$(X_i)_{i\in\mathbb{R}}$ 为一个过滤。持久景观 是一个函数序列 $\{\lambda_c\}_{c\in\mathbb{N}}$，满足

$$\begin{aligned}\lambda_c : \mathbb{R} &\longrightarrow \overline{\mathbb{R}} \\ t &\longmapsto \sup\left\{m\geq 0 \mid \beta^{t-m,t+m}\geq c\right\},\end{aligned}$$

其中 $\beta^{a,b} = \dim(\mathrm{Im}(X_a \to X_b))$。

持久景观已被证明是拓扑数据分析中各种应用的有效工具。该领域一个值得注意的结果是，有一条定理表明，在某些条件下，这种转换具有可逆性（Bubenik，2020年）。具体而言，如果我们只考虑具有有限多个条目的持久图，并且不存在具有无限持久性的条目，那么对于给定的持久图，我们可以得到唯一的持久景观。这一结果的重要性在于，从持久图转换为持久景观的过程中不会丢失任何信息。

从过滤中获取此类同调特征，或有时直接研究这些同调特征，通常称为**持久同调**。要计算持久同调，通常需要为系数选择一个有限域。在本文中，如果没有指定具体的域，则默认使用有限域 $\mathbb{Z}_p$，其中 p 为素数。

对于我们的情形，我们处理的是嵌入单纯复形 K 和单位向量 v 的过滤 $(K_{v,r})_{r\in\mathbb{R}}$。因此，每个单位向量都对应一个持久景观。我们将相应的持久景观记为 $\{\lambda^K_{v,c}\}_{c\in\mathbb{N}}$。

请注意，如果持久图中具有有限持久性的条目只有有限个，则相应的持久景观可以使用不同的公式形式化。具体而言，给定一个过滤，假设相应的持久图

是一个多重集 $\{(b_i,\ d_i)\}_{i\in I}$，其中 I 是一个有限集合，并且对于所有 $i \in I$，$|b_i|$ 和 $|d_i|$ 都是有限的。然后，持久景观可以通过以下公式定义

$$\lambda_c(t) = \operatorname{cmax}\left\{f_{(b_i,d_i)}(t)\right\}_{i\in I} \tag{1}$$

其中 $f_{(a,b)}(t)$ $=\max(0,\ \min(a+t,\ b-t)$，cmax 表示第 c 大的元素（Bubenik，2020年）。

2.3.1 Computing the Euler Characteristic

在本文中，计算嵌入单纯复形的欧拉示性数是一项重要任务。一种方法是统计每个维度的单纯形数量，这是一种直接的方法。此外，计算欧拉示性数的另一种方法是使用贝蒂数的交错和；贝蒂数是衡量复形中洞数量的拓扑不变量。有趣的是，无需显式确定所有贝蒂数，也可以利用持久同调得到欧拉示性数：

定理 4 如果 K 是嵌入单纯复形，且位于 $\mathbb{R}^n$ 中，那么其欧拉示性数与基环 G 无关。也就是说，

$$\chi(K) = \sum_{i=0}^{n}(-1)^i \operatorname{rk}_G H_i(K;G)$$

其中，秩$_G$ 是基环 G 上的秩。

对于嵌入单纯复形 K，大多数 TDA（拓扑数据分析）软件工具都使用素数 p 上的有限域系数 $\mathbb{Z}_p$ 来计算持久同调（Maria 等，2014年；Tauzin 等，2021年；Bauer，2021年；Bauer 等，2017年；Tausz 等，2012年）。假设我们已经获得了每个维度上的持久同调，就可以针对每个过滤值 r 计算 $H_*(K_{v,\ r};\mathbb{Z}_p)$ 的秩。然而，该秩不一定与贝蒂数相同。尽管如此，根据定理 4，我们可以利用持久同调获得每个过滤值对应的欧拉示性数。在此情境下使用持久同调的优势在于，它能够对复形的拓扑结构提供更全面、更稳健的分析。对于我们的情形，可以利用持久同调计算每个 v 的欧拉曲线$r \mapsto \chi(K_{v,\ r})$（$H_*(K_{v,\ r};\mathbb{Z}_p)$）$_{r\in\mathbb{R}}$。

备注 5 如果 X 是更一般的拓扑空间，欧拉示性数可能取决于基环。例如，考虑 $X = \mathbb{RP}^\infty$。它的整数同调以及系数为 $\mathbb{Z}_2$ 的同调为

$$H_*(\mathbb{RP}^\infty;\mathbb{Z}) = \begin{cases}\mathbb{Z} & *=0\\ \mathbb{Z}_2 & *>0\ odd\\ 0 & otherwise\end{cases},\quad and\quad H_*(\mathbb{RP}^\infty;\mathbb{Z}_2) = \begin{cases}\mathbb{Z}_2 & *\geq 0\\ 0 & otherwise,\end{cases}$$

分别。这意味着 χ（$\mathbb{RP}^\infty$；$\mathbb{Z}$）$=1$，但 χ（$\mathbb{RP}^\infty$；$\mathbb{Z}_2$）未定义。

2.4 等距变换

在进入下一节之前，我们先讨论一个重要且直观的概念——等距变换。这个概念对我们的研究意义重大且不可或缺，因此在继续之前有必要先介绍它。首先，我们给出等距变换的定义：

定义 6 如果函数 $f\colon\ \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 满足

$$\|f(x) - f(y)\| = \|x - y\|$$

对于每个 x、$y \in \mathbb{R}^n$，那么我们称 f 为等距变换 或刚体运动。

三维欧几里得空间中有一些典型的等距变换：平移、旋转和反射。旋转和反射可以表示为 O(3) 的元素，即正交矩阵的集合。还值得注意的是，一般而言，在维数为 n 的欧几里得空间中，平移以及由 O(n) 中的元素诱导的线性函数都是明显的等距变换示例。另一方面，任何等距变换都可以唯一地表示为这些函数的组合：

命题 7 如果函数 $f\colon\ \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ 是等距变换，那么存在唯一的 $A \in \mathrm{O}(n)$和 $b \in \mathbb{R}^n$，满足

$$f(x) = Ax + b$$

对于每个 $x \in \mathbb{R}^n$。

证明从略。根据命题 7，要证明算子在 $\mathbb{R}^n$ 上具有等距变换不变性，上述命题指出，只需证明该算子同时具有 O(n) 不变性和平移不变性。这大大简化了证明等距变换不变性的任务，因为问题归结为证明其仅对两种更简单的变换具有不变性。

3 理论结果与方法

本节介绍我们的方法及相应的理论研究。我们将介绍欧拉曲线变换、持久同调变换和 O(3)-等变图神经网络。随后，将这些变换结合起来，可为嵌入的单纯复形提供等距不变且细分不变的表示。在阐述这些变换背后的理论后，我们最后介绍如何在实践中实现这些新方法。

3.1 欧拉曲线变换

在本小节中，我们介绍欧拉曲线变换，以及刻画该变换的相关定理。欧拉曲线变换是一个记作 $\mathcal{R}$ 的算子，它将 CF($\mathbb{R}^n$) 映射到 CF($S^{n-1} \times \mathbb{R}$)。具体而言，欧拉曲线变换可以通过欧拉积分定义：

$$\mathcal{R}(f)(v, r) = \int_{\mathbb{R}^n} f(x) \cdot 1_{x \cdot v \leq r}(x)\, d\chi(x),$$

其中， f 是一个有界、紧支撑的可构造函数， 1_A 是集合 A 的示性函数。

现在，考虑一种情况： f 是嵌入单纯复形 K的特征函数，记作 1_K。由于 K 是半代数集，我们知道 1_K 是有界紧支撑可构造函数。在这种情况下，如果我们对 1_K应用欧拉曲线变换，则得到:

$$\mathcal{R}(1_K)(v,r) = \int_{\mathbb{R}^n} 1_{\{x\in K | x\cdot v \leq r\}}\, d\chi = \chi(K_{v,r}).$$

换言之，嵌入单纯复形 K 的特征函数的欧拉曲线变换，就是 K 与由垂直于方向 v的超平面所定义的半空间的交集的欧拉示性数。

欧拉曲线变换的一个相关性质是它具有单射性，正如 Ghrist 等人（2018）所述:

定理 8 欧拉曲线变换 $\mathcal{R}$ 是单射。

换言之，如果存在两个不同的嵌入单纯复形 K_1 和 K_2，那么得到的欧拉曲线变换 $\mathcal{R}(1_{K_1})$ 和 $\mathcal{R}(1_{K_2})$ 就不同。这一性质可用于对嵌入单纯复形进行分类。例如，我们可以将图像转换为嵌入单纯复形，并按照 Jiang 等（2020）所述应用欧拉曲线变换，以此对图像进行分类。

为简化记号，对于每个嵌入单纯复形 K，我们定义函数 $\mathcal{F}_K$:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_K : S^{n-1}\times\mathbb{R} &\longrightarrow \mathbb{R} \\ (v,r) &\longmapsto \chi(K_{v,r}). \end{aligned}$$

然后，根据单射性， $K_1 \neq K_2$ 推出 $\mathcal{F}_{K_1} \neq \mathcal{F}_{K_2}$。

下面的命题说明了欧拉曲线变换在 O(n)-变换和平移变换下的结果如何变化。

命题 9 设 K 是 $\mathbb{R}^n$中的一个嵌入单纯复形。则，对于 $R \in \mathrm{O}(n)$ 和$w \in \mathbb{R}^n$,

$$\mathcal{F}_{RK+w}(v,r) = \mathcal{F}_K(Rv, r - v\cdot w).$$

也就是说，该变换是 O(n)-等变的；如果嵌入单纯复形发生平移，则所得函数也会发生平移。

请注意，嵌入单纯复形的特征函数不依赖于该复形的细分：设 K 为一个单纯复形，K' 为 K的一个细分。由于特征函数 1_K 和 $1_{K'}$ 相同，欧拉曲线变换是细分不变的。

3.2 持久同调变换

类似地，对于嵌入在 $\mathbb{R}^n$ 中的嵌入单纯复形 K ，我们可以考虑持久同调变换 $\mathcal{G}_K$ ，其定义如下:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_K : S^{n-1} &\longrightarrow \mathcal{B} \\ v &\longmapsto B_K^v \end{aligned}$$

其中，B_K^v 是由 v 诱导的持久图，$\mathcal{B}$ 是持久图的集合。可以证明，该变换对于单位向量方向的变化是稳定的：

命题10 设 K 为一个嵌入单纯复形。关于瓶颈距离，函数 $\mathcal{G}_K$ 是利普希茨连续的。

这表明，位于 S^{n-1} 上方邻近区域的持久图包含相似的信息。换句话说，了解足够多方向上的持久同调信息，实际上就等同于了解所有点上的持久同调信息。

持久同调变换与欧拉曲线变换一样，具有一些对有效数据分析和解释至关重要的重要性质：

命题 11 设 K 为 $\mathbb{R}^n$ 中的一个嵌入单纯复形，且 v 为一个单位向量。那么，对于 $R \in \mathrm{O}(n)$，

$$\mathcal{G}_{RK}(v) = \mathcal{G}_K(Rv).$$

此外，如果 $\mathcal{G}_K(v) = \{(b_i, d_i)\}_{i\in I}$，则有

$$\mathcal{G}_{K+w}(v) = \{(b_i + v \cdot w, d_i + v \cdot w)\}_{i\in I}$$

对于 $w \in \mathbb{R}^n$。

与欧拉曲线变换的情形类似，算子 $\mathcal{G}_*$ 具有 O(n)-等变性；嵌入单纯复形平移时，持久图中的条目也会随之平移。

关于持久景观，也有类似的结果。

命题 12 设 K 是 $\mathbb{R}^n$ 中的一个嵌入单纯复形，v 是一个单位向量。那么，对于 $R \in \mathrm{O}(n)$，有

$$\lambda_{v,c}^{RK} = \lambda_{Rv,c}^{K}$$

对每个 $c \in \mathbb{N}$ 均成立。

此外，对于 $w \in \mathbb{R}^n$，有

$$\lambda_{v,c}^{K+w}(t) = \lambda_{v,c}^{K}(t - v \cdot w)$$

对每个 $c \in \mathbb{N}$ 均成立。

请注意，在某些情况下，持久图可能包含生存期无限的条目。当某个拓扑特征（例如连通分支或洞）在所考虑的整个参数范围内始终存在时，就会出现这种情况。在拓扑数据分析文献中常用的 Vietoris–Rips复形中，零阶同调中只有一个具有无限持久性的条目，对应于复形整体的连通性。然而，我们的方法并不处理 Vietoris–Rips复形，因此持久图中可能出现多个具有无限持久性的条目。从理论和计算角度来看，这些特征都会使分析复杂化，因此最好将其消除。为了移除具有无限持久性的条目并保留相关信息，我们只需使用一个从 $\mathbb{R}$ 到有限区间的双射函数。例如，

—

对于持久图 $\{(b_i,\ d_i)\}_{i\in I}$，我们可以生成一个新的持久图$\{(b_i',\ d_i')\}_{i\in I}$，使得 $b_i' = h(b_i)$ 和 $d_i' = h(d_i)$，其中

$$h(x) = \begin{cases} a_0 & \text{if } x = \infty, \\ -a_0 & \text{if } x = -\infty, \\ a_0 \tanh(a_1 x) & \text{otherwise} \end{cases}$$

对于缩放常数 $0 < a_0,\ a_1 < \infty$。由于该函数严格递增且函数的值域有限，因此我们有 $b_i' \le d_i'$，相应的持久景观也可通过方程（1）良好定义。为方便记号，我们将从 $\{(b_i,\ d_i)\}_{i\in I}$到 $\{(b_i',\ d_i')\}_{i\in I}$的变换记为 $\mathcal{H}$，即 $\mathcal{H}(\{(b_i,\ d_i)\}_{i\in I}) = \{(b_i',\ d_i')\}_{i\in I}$。

正如 Turner et al. (2014) 和 Ghrist et al. (2018) 所述，持久同调变换是一种充分统计量。由于我们可以从 $\mathcal{H}(\mathcal{G}_K(v))$ 中恢复原始持久图 $\mathcal{G}_K(v)$，因此对于嵌入单纯复形 K，对每个 $v \in S^{n-1}$，$\mathcal{H}\circ\mathcal{G}_*$ 也是一种充分统计量。注意，嵌入单纯复形 K 中只有有限个单纯形，因此对于任意 $v \in S^{n-1}$，$\mathcal{H}(\mathcal{G}_K(v))$ 中的条目数都是有限的。因此，如果我们将通过方程（1）与 $\mathcal{H}(\mathcal{G}_K(v))$ 对应的持久景观记为 $\{\lambda_{v,c}'^K\}_{c\in\mathbb{N}}$，则该函数

$$\begin{aligned} S^{n-1} &\longrightarrow \mathcal{S} \\ v &\longmapsto \{\lambda_{v,c}'^K\}_{c\in\mathbb{N}} \end{aligned}$$

也是一个充分统计量，其中 $\mathcal{S}$ 是持久景观的集合，因为从持久图到持久景观的转换是单射的。

尽管持久同调变换是一种理论上优雅的工具，可用于分析拓扑特征，但它并非本文的主要关注点。相反，我们主要使用欧拉曲线变换，以等距变换不变且细分不变的方式分析单纯复形的拓扑性质。虽然我们承认持久同调变换可能存在局限性，但我们将在本文第5节简要讨论其用途和潜在缺点。

3.3 O(3) 等变图神经网络

已有多种方法被提出，用于构造作用于球面 S^2上函数的旋转不变或旋转等变算子。其中一些方法，例如 Cohen et al. (2018)；Esteves et al. (2018) 中提出的方法，利用球面傅里叶变换，在 S^2 或旋转群 SO(3)上实现相关和卷积算子。其他方法，例如 Defferrard et al. (2020)；Haan et al. (2021)；Yang et al. (2020) 中提出的方法，则基于图神经网络。此外，Cohen et al. (2019) 提出使用各向同性滤波器来构建旋转等变卷积神经网络。本小节介绍我们的方法，即一种 O(3) 等变图神经网络。此外，我们还为该方法提供理论依据。在继续讨论之前，我们先引入一个将在全文中使用的符号。

设 f 是定义在单位球面 S^{n-1}上的函数，且 R 是 O(n) 中的正交矩阵。那么，将矩阵 R 作用于 f的输入后得到的函数，即

函数 $x \mapsto f(Rx)$，记作 Rf。这种记法将经常用于描述各种函数和算子的等变或不变性质。

现在，我们来介绍我们的图神经网络。假设给定一个函数f，它将二维球面 S^2 映射到一个由实数构成的 k 维向量空间。为了基于该函数构建图神经网络，我们首先在 S^2上均匀采样一组 n 个点 $\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$。接下来，如果两点之间的欧几里得距离小于预设阈值，就在它们之间连接一条边。这样便得到一个图，其中每个节点都关联着一个特征向量，该向量对应于函数 f 在球面上相应点处的取值。有了这个图，我们就可以使用图卷积网络处理数据，并从底层函数中提取有用信息。作为一种基础的图神经网络架构，我们可以按如下方式实现图卷积网络：

$$\mathcal{T}(f)(v) = f(v) \cdot W_0 + \sum_{u \in \mathcal{N}(v)} f(u) \cdot W_1 \tag{2}$$

其中，$\mathcal{T}(f)$ 是 GCN层的输出，W_0，W_1 是参数矩阵，而 $\mathcal{N}$表示 v的邻域。

更一般地，我们可以考虑消息传递神经网络（MPNN）。MPNN 是一种作用于图结构数据的图神经网络（Gilmer 等人，2017年）。MPNN 使用消息传递机制，根据相邻节点的表示和边特征来更新节点表示。在每次消息传递迭代中，节点表示与其邻居的表示相结合，从而生成能够捕获图中信息的新表示。MPNN 的形式如下：假设我们有一个无向图 G，其节点 x_i 上具有节点特征 $f(x_i)$，且 x_i 与 x_j 之间具有边特征 e_{ij}。那么，新特征 $\mathcal{T}(f)(x_i)$ 的计算方式为

$$\mathcal{T}(f)(x_i) = U\left(f(x_i), \sum_{x_j \in \mathcal{N}(x_i)} M(f(x_i), f(x_j), e_{ij})\right) \tag{3}$$

其中，U 是顶点更新函数，M 是消息函数。

对于我们的 O(3)等变架构，考虑由 $\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$ 构造的完全图，并将边特征 e_{ij} 设为节点 x_i 和 x_j 之间的距离。此外，我们定义函数 $M(x, y, z) := g_\theta(z) \cdot y$ 和 $U(x, y) := \frac{1}{n}(g_\theta(0) \cdot x + y)$，其中 g_θ 是一个可训练函数，将 $\mathbb{R}$ 映射到 $k \times \ell$ 矩阵空间。于是，公式 (3) 变为

$$\mathcal{T}(f)(x_i) = \frac{1}{n}\left(g_\theta(0) \cdot f(x_i) + \sum_{x_j \in \mathcal{N}(x_i)} g_\theta(e_{ij}) \cdot f(x_j)\right) = \frac{1}{n}\sum_j g_\theta(e_{ij}) f(x_j). \tag{4}$$

此外，如果我们定义一个 $n \times n$ 矩阵 $(G)_{ij} := \frac{1}{n} g_\theta(e_{ij})$，则方程（4）可表示为

$$\mathcal{T}(f) = Gf.$$

我们将方程（4）作为我们的 O(3) 等变算子，并如下给出其 O(3)-等价性的理论论证。

令 g 为一个从 S^2 到 $g(x) = g_\theta(\|x\|)$ 的函数。利用 g，我们可以将函数 $\mathcal{T}(f)$ 扩展到定义域 S^2:

$$\mathcal{T}(f)'(x) = \frac{1}{n}\sum_j g(x - x_j)f(x_j).$$

当然，对于每个 $i = 1, 2, \ldots\ldots, n$，都有 $\mathcal{T}(f)(x_i) = \mathcal{T}(f)'(x_i)$。下面的定理为我们的图神经网络提供了理论依据。

定理 13 设 f 和 g 是关于 $\|\cdot\|_\infty$定义在 S^2 上的有界函数。假设x_1、x_2、……、x_n 是定义在 S^2上的独立同分布随机变量。那么，对于$R \in \mathrm{O}(3)$ 和 $\epsilon > 0$,

$$\mathbb{P}\left[\|R\mathcal{T}(f)'(x) - \mathcal{T}(Rf)'(x)\|_\infty > \epsilon\right] \longrightarrow 0$$

当 n 趋于无穷大时，对每个 $x \in S^2$ 都成立。

因此，如果按照前文所述，通过在球面上均匀采样点来构建图神经网络，那么我们将近似一个 O(3) 等变算子。此外，随着采样点数量增加，“等变误差”会减小，从而得到对输入数据更好、更精确的表征。

还有其他使用图神经网络实现旋转等变性的方法。在 Defferrard et al. (2020) 和 Khasanova 与 Frossard（2017）中，使用了以下卷积：对于 $f : S^2 \to \mathbb{R}$,

$$\mathcal{T}(f) = \left(\sum_{k=0}^{P} \alpha_k L^k\right)(f)$$

其中， L 是加权拉普拉斯矩阵，边的权重是边长的函数。因此， L是矩阵 G 的一种固定特定形式。然而，正如 Defferrard et al. (2020) 所述，等变误差会随 G 而变化。

实际上，我们不需要构造完全图。由于公式（2）是公式（4）的一种特定形式，我们可以直接使用基本的图卷积网络：对于预先设定的阈值 $r > 0$，如果我们设定

$$g_\theta(x) = \begin{cases} nW_0 & \text{if } x = 0, \\ nW_1 & \text{if } 0 < x < r, \\ 0 & \text{otherwise,} \end{cases}$$

那么我们就可以从公式（4）推导出公式（2）。我们认为， g_θ的较小支撑集对应于二维卷积算子的较小卷积核大小。

在图神经网络之后添加一个全局最大池化层或平均池化层，即可获得底层图的表征。需要注意的是，这类池化层能够表示一个 O(3) 不变算子，因为最大值或平均值在 O(3) 变换下不会改变。根据定理 13，将图神经网络与池化层堆叠在一起后，该网络具有 O(3)-不变性。这意味着，使用我们提出的图神经网络和池化层，可以获得嵌入单纯复形的 O(3)-不变表征。

3.4 等距不变与细分不变算子

本节将介绍如何利用欧拉曲线变换和 O(3) 不变算子，构建等距不变和细分不变算子，并简要概述其实现方法。

首先，欧拉曲线变换可以被视为一个函数

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_K : S^{n-1} &\longrightarrow \mathrm{Map}(\mathbb{R} \to \mathbb{R}) \\ v &\longmapsto \quad (\mathcal{F}_K(v) : \quad \mathbb{R} \longrightarrow \mathbb{R}) \\ &\qquad\qquad\qquad\quad r \longmapsto \chi(K_{v,r})\end{aligned}$$

其中，Map($A \to B$) 表示从 A 到 B 的函数集合。为了构造一个平移不变算子，我们在集合 Map($\mathbb{R} \to \mathbb{R}$) 上使用平移不变泛函：

命题 14 假设集合 $\mathrm{Map}(\mathbb{R} \to \mathbb{R})$ 上存在平移不变泛函 $\{\mathcal{D}_i\}_{i=1}^m$，也就是说，如果存在 $t \in \mathbb{R}$ 使得 $f(x) = g(x+t)$ 对每个 x 都成立，那么$\mathcal{D}_i f = \mathcal{D}_i g \in \mathbb{R}$ 对每个 $1 \le i \le m$ 都成立。令 $\mathcal{DF}_K$ 为一个函数

$$\begin{aligned}\mathcal{DF}_K : S^{n-1} &\longrightarrow \mathbb{R}^m \\ v &\longmapsto \{\mathcal{D}_1 \circ \mathcal{F}_K(v), \ldots, \mathcal{D}_m \circ \mathcal{F}_K(v)\}.\end{aligned}$$

那么， $\mathcal{DF}_*$ 在嵌入单纯复形集合上是 $\mathrm{O}(n)$-等变的、细分不变的，并且平移不变。

对于持久景观，也有类似的结果：

命题 15 假设在集合 $\mathrm{Map}(\mathbb{R}\times\mathbb{N} \to \mathbb{R})$ 上存在泛函 $\{\mathcal{E}_i\}_{i=1}^m$，使得若存在 $t \in \mathbb{R}$ 满足 $f(\overline{x, c}) = g(x+t, c)$ 对每个 x 和 c 都成立，则对每个 $1 \le i \le m$， $\mathcal{E}_i f = \mathcal{E}_i g \in \mathbb{R}$。设 $\mathcal{E}\lambda_K$ 是一个函数

$$\begin{aligned}\mathcal{E}\lambda_K : S^{n-1} &\longrightarrow \mathbb{R}^m \\ v &\longmapsto \{\mathcal{E}_1 \circ \lambda_v^K, \ldots, \mathcal{E}_m \circ \lambda_v^K\}\end{aligned}$$

其中 $\lambda_v^K(x, c) := \lambda_{v,c}^K(x)$。那么， $\mathcal{E}\lambda_*$ 在嵌入单纯复形的集合上是 $\mathrm{O}(n)$-等变、细分不变且平移不变的。

作为命题 14 的直接结果，我们给出以下推论：

推论 16 设 $\mathcal{P}$ 是一个$\mathrm{O}(n)$-不变函数

$$\mathcal{P} : \mathrm{Map}(S^{n-1} \to \mathbb{R}^m) \longrightarrow \mathbb{R}^k,$$

也就是说， $\mathcal{P}(Rf) = \mathcal{P}(f) \in \mathbb{R}^k$ 对于 $R \in \mathrm{O}(n)$ 成立。那么， $\mathcal{P}(\mathcal{DF}_*)$ 在嵌入单纯复形的集合上是等距不变且细分不变的。

上述推论表示了我们在分析中旨在逼近的目标算子。为实现这一目标，我们采用多种深度学习架构，来逼近并实现构成该推论的各个组成部分。换言之，我们使用

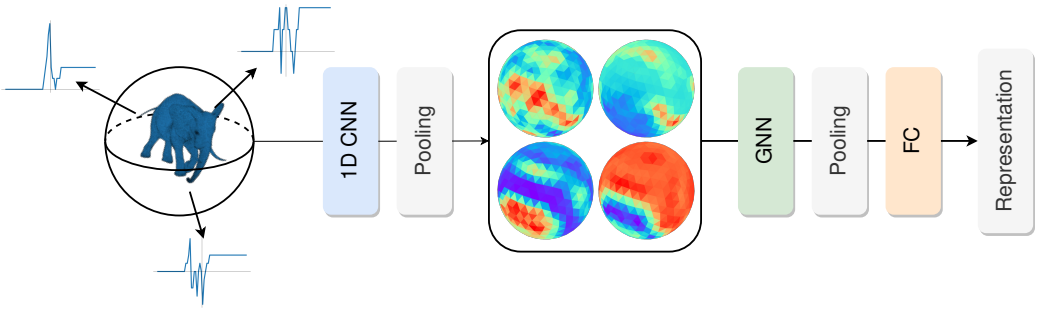


图1：所提出架构的简化结构示意图。首先，对嵌入单纯复形进行预处理，得到欧拉曲线。接着，使用一维卷积神经网络和池化层，为 S^2 上采样得到的点生成一个 k维向量。随后，我们在球面上的点所构成的图上使用图神经网络。最后，通过池化层获得嵌入单纯复形的表示向量。为作说明，本图使用了二十面体细分和 ANIM 数据集中的一个网格。

深度学习技术来创建一个模型，使其能够有效逼近等距变换不变且细分不变的算子。

为获得平移不变泛函 $\{\mathcal{D}_i\}$，我们提出使用一维卷积神经网络和全局池化。我们利用了一维卷积具有平移等变性的已知性质。在应用一系列卷积后，通过在网络末端添加全局池化层，我们可以为 S^2 上采样得到的点生成一个平移不变的向量。全局池化层可以采用全局最大池化层或全局平均池化层。该池化层会汇总整个输入范围内各卷积层的输出，从而得到一个对平移不变的单一输出。所得向量可用作每个采样点对应的欧拉曲线表征，并可输入图神经网络进行进一步处理。之后，我们应用图神经网络。论文第3.3节概述了如何将所提出的图神经网络与池化层（例如全局最大池化层或全局平均池化层）结合起来，从而有效地近似一个 O(3) 不变算子。下面我们将更详细地讨论其实现。

3.4.1 Implementation

现在，我们按顺序简要说明我们的方法。为便于讨论，我们在图1中展示了我们架构的简化结构。首先，我们需要尽可能均匀地在 S^2 上采样点。可以采用多种方法在 S^2上较为均匀地采样点，例如对二十面体进行细分、HEALPix采样（Gorski等人，2005年）、Sukhrev网格采样（Yershova和LaValle，2004年）或斐波那契网格采样（Swinbank和James Purser，2006年）。由此得到的集合

这些点记作 $\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$，用于构建图 G，以供我们方法的后续步骤使用。

接下来，我们根据采样点构建图 G 。正如我们在论文第3.3节中所讨论的，生成图有两种方式：创建完全图，或连接距离小于某个特定距离的点对。

创建图后，我们需要对所有嵌入单纯复形数据进行预处理。具体而言，我们为之前采样的点生成离散化欧拉曲线。离散化欧拉曲线在 $\mathbb{R}^t$ 中表示为一个向量，其中 t 是决定曲线分辨率的超参数。需要注意的是，无论如何对嵌入单纯复形进行划分，这一变换都会产生相同的曲线。

为采样点生成离散化欧拉曲线后，我们应用多个一维卷积神经网络，并在末端应用一个池化层。这会为每个点 x_i 生成一个平移不变向量。我们将这些向量作为下一步输入的节点特征。

利用图 G 上的节点特征，我们在其上堆叠多个所提出的图神经网络，为图中的每个节点生成新的特征。通过这种方式，我们可以更有效地表示嵌入单纯复形。接下来，我们使用全局最大池化层或全局平均池化层获得图表示。这些池化层聚合节点特征，并为整个图生成一个单一的向量表示。该图表示近似于嵌入单纯复形的等距不变且细分不变的表示。随后，这一表示向量可用于进一步的分析和应用。

在第4节中，我们将详细介绍实验，包括所采用的方法、数据集、结果和超参数。

3.5 SO(3)不变但非O(3)不变算子

本小节探讨一种 SO(3)不变但非 O(3)不变的算子，说明该算子具有区分反演的能力。尽管已有大量研究探讨 SO(3)不变算子，但只有少数研究讨论了能够区分反射的算子。这里，我们给出一个能够区分反射的特定 SO(3)不变算子的例子。

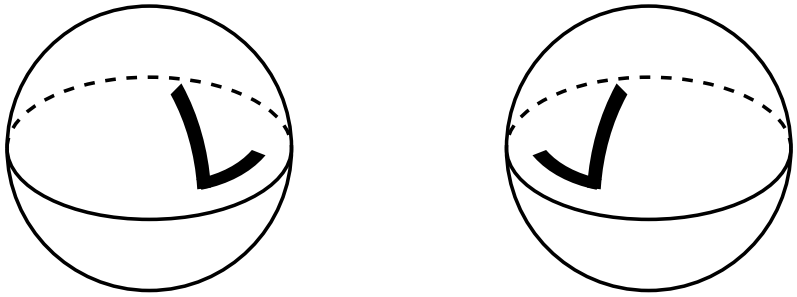
设 f 和 g 是从 S^2 到 $\mathbb{R}$ 的函数，其中 g 是一个可学习函数。根据 Cohen et al. (2018)，定义一个 O(3) 等变算子 $f \star g$:

$$\begin{aligned} f \star g : \mathrm{SO}(3) &\longrightarrow \mathbb{R} \\ x &\longmapsto \int_{S^2} g(x^{-1}y) f(y)\, dV(y). \end{aligned}$$

作为 SO(3)不变算子的一个简单示例，我们给出

$$f \bullet g := \max\{(f \star g)(x) \mid x \in \mathrm{SO}(3)\}$$

这样便能区分一个函数及其反射：设 A 是 S^2 上形状为“L”的开集， f 是 A 的特征函数。此外，假设 B 是 A 在 S^2 上的反射，而 g 是其特征函数。示意图见图2。于是，我们有



(a) 函数 $f : S^2 \to \mathbb{R}$ (b) 函数 $g : S^2 \to \mathbb{R}$

图2： S^2 到 $\mathbb{R}$的两个函数示例。函数 g 是函数 f的反射。

$$f \bullet f = \mathrm{Vol}(A) = \mathrm{Vol}(B) = g \bullet g$$

and

$$f \bullet g = \max\{\mathrm{Vol}(A \cap RB) \mid R \in \mathrm{SO}(3)\} \neq \mathrm{Vol}(A)$$

因为仅通过旋转， A 和 B 的形状无法完全重合。

因此，算子 $f \bullet g$ 是 O(3)不变的，并且能够区分反射，这对某些应用可能很有用。该算子可以通过球面傅里叶变换（Cohen 等人，2018）求出函数 $f \star g$ ，并选取在 SO(3) 中采样的点上的最大值来实现。在第3.3节提出的算子中，如果将最后的图池化层替换为池化步骤 $f \bullet g$，我们便可以构造一个既对 SE(3) 不变、又能够区分反射的算子，从而得到表达能力更强的模型。

4 实验

本节介绍我们的实验结果，展示了使用合成网格数据进行实验的结果。

4.1 数据集

首先，我们介绍在 ANimals in Motion（ANIM）数据集上进行的实验。ANIM 数据集由 Sumner 和 Popovi´c（2004年）提供的合成网格序列组成，包含八个不同的类别：大象、骆驼、马、火烈鸟、猫、人脸、头部和狮子。每个类别包含数量不等的网格序列。在实验中，我们旨在测试模型获取网格数据表征的性能。为了展示这些表征，我们训练模型，使每个类别中的网格数据聚集在 $S^1 \subset \mathbb{R}^2$ 中正八边形的顶点周围（见图4），并通过一系列变换测试模型的等距不变能力。

每个类别中的对象数量各不相同，包括大象、骆驼、马、火烈鸟、猫、人脸、头部和狮子。例如，有 60 头大象、59 头骆驼和 59 匹马。其他类别中的对象数量较少，只有 10 只猫，

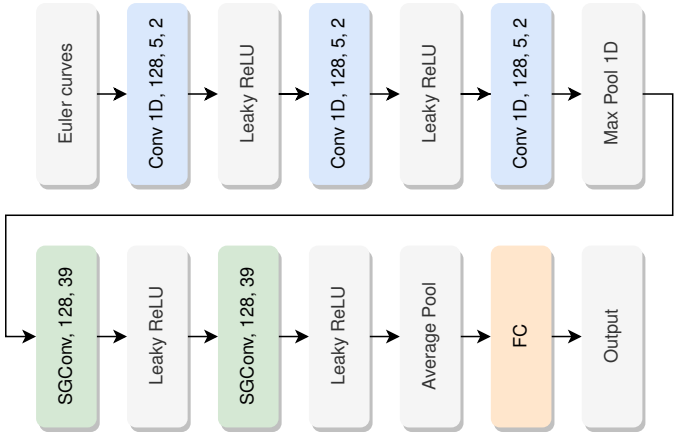


图3：该图展示了第4节中使用的架构。卷积层标记为一维卷积，后接通道数、卷积核大小以及步幅。对于 Leaky ReLU 层，我们将负斜率固定为 0。01。SGConv 层标记为 SGConv，后接通道数和 k（SGConv 的超参数）。

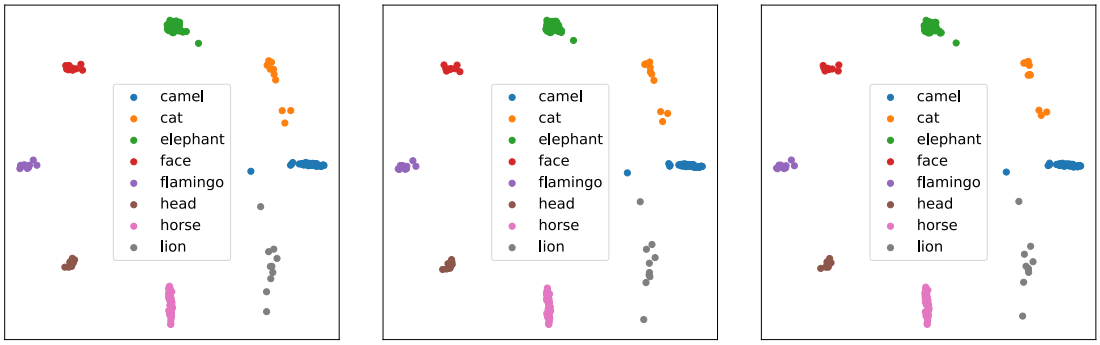
人脸、头部和狮子，以及 11 只火烈鸟。我们还将训练数据限制为每个类别随机选取的 5 个网格序列，因此在未进行任何数据增强的 229 个网格中，总共只有 40 个网格。如此小的训练集规模使我们能够评估模型从有限数据中学习并良好泛化到新示例的能力。

4.2 模型架构

在本小节中，我们介绍实验所采用的模型架构。首先，按照 Cohen et al. (2019)、Defferrard et al. (2020)、Haan et al. (2021) 和 Yang et al. (2020) 所述，对二十面体进行细分。我们用“层级”来表示细分的方式。例如，层级 $= 1$ 对应于具有 12 个顶点的二十面体，而层级 $= i$ 表示将二十面体三角形的边细分为 i 条边。我们还列出了各层级对应的顶点数，以避免歧义。此外，为了构建图，我们采用二十面体细分后的边。

我们使用三个一维卷积神经网络，并在它们之间加入两个带泄漏的 ReLU 层，最后应用一个最大池化层，从而为每个节点获得平移不变向量。第一个卷积层将通道数从 1 调整为 128；第二个和第三个卷积层则将通道数保持为 128。所有卷积层的卷积核大小均为 5，步幅均为 2。最后，我们添加最大池化层。

对于图神经网络，我们采用 SGConv-Leaky ReLU-SGConv-Leaky ReLU 架构，其中 SGConv 表示 Simplifying GCN（Wu 等人，2019年）：令 D 为一个对角矩阵，其中 $D_{v,v} = \text{Deg}(v) = |N(v)|$，并定义 $\widetilde{A} = D^{-1/2}AD^{-1/2}$，其中 A 是图的邻接矩阵。对于所有节点特征的矩阵形式 X 以及一个可学习的



(a) (b) (c)

图4：我们的模型在每个类别使用5个网格数据进行训练后的结果。每个子图均是在对数据集应用随机变换后生成的。

矩阵 W，Simplifying GCN 的变换可用公式 $\widetilde{A}^k X W$表示。在我们的实验中，我们使用 $k = 39$，以确保感受野足够大。需要注意的是，SGConv 可以理解为一系列不涉及非线性激活函数的图卷积。我们将通道数固定为 128。在最后一个 Leaky ReLU 层之后，我们添加平均池化层，从而得到图的表征。最后，通过全连接层将维度降至 2，以展示结果。

为使我们的模型更加清晰易懂，我们给出图3，以图示方式展示实验中使用的架构。

4.3 结果

为了测试模型的等距不变性，我们对所有数据集（包括训练集）进行了多次随机平移、反射和旋转，并测试模型识别不变性的能力。结果如图4所示，其中展示了模型在各种变换下的性能和不变性。

在实验中，我们观察到每个类别的网格数据倾向于聚集在 $\mathbb{R}^2$，形成定义明确的簇，这表明即使训练集的样本数量很少，模型也能够有效地学习表征。鉴于我们没有使用任何数据增强技术来扩大训练集规模并增强模型对 O(3) 变换的鲁棒性，这种聚类行为尤其显著。此外，我们观察到，对数据集进行三次相互独立的随机变换后得到的输出具有高度相似性。换言之，所得表征在不同 O(3) 变换下非常一致。

4.4 实验细节

在本小节中，我们将更详细地说明本研究所采用的方法。首先，我们下载所有 ANIM 数据，并从 337 份数据中选取 229 个网格，

欧拉曲线的分辨率	32	64	128	256	512	1024
标准差的均值	0.2362	0.1727	0.0206	0.0081	0.0076	0.0099

Tab表 1：欧拉曲线分辨率对应的标准差均值 e.

不包括 horse-collapse 和 camel-collapse 文件夹。我们排除这些文件夹，是因为“塌缩”后的网格数据在几何上已不再属于与马或骆驼相同的类别[2]。由于存在一些重复的顶点和面，我们将其删除。

为了在 S^2 上采样点，我们首先细分二十面体并取其顶点。对于每个采样点，我们为所有网格计算一条离散化欧拉曲线。要通过离散化计算欧拉曲线，我们首先需要确定欧拉曲线的取值范围和分辨率。对于正数 a，我们取从 $-a$ 到 a 的欧拉曲线。给定分辨率值 t，我们将区间（$-a$， a）划分为 t 个等分，以得到 $-a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{t-1} < x_t = a$。对于每个 $v \in S^2$，我们计算 χ（$K_{v,\ x_i}$），以获得 $i = 1$， 2，$\ldots t$ 的离散化欧拉曲线。在我们的实验中，使用的 a 值为 8。为确保所有网格都落在（$-a$， a）范围内，我们将每个网格的顶点坐标除以顶点坐标的标准差。

在前一项实验的图4中，欧拉曲线采用512的分辨率，并对二十面体进行第13级细分，得到1692个顶点。

在我们的实验中，我们应用随机化的 O(3)变换：首先将每个网格的顶点乘以一个随机正交矩阵，然后从三维标准正态分布中采样一个点，并将其加到网格的顶点上。我们使用 SciPy（Virtanen 等，2020年）库来获取随机正交矩阵。

将所有网格数据预处理为欧拉曲线后，我们便可以训练模型架构。我们使用 PyTorch（Paszke 等，2019年）库来创建并训练模型。我们从总计229条数据中，为每个类别随机选取5条数据，构建训练集，共计40条数据。在此过程中不使用数据增强。我们训练400个训练轮次，批量大小设为16。我们使用 SmoothL1损失作为损失函数，并将超参数 beta 设为0.1。初始学习率为0.001，并在训练200个训练轮次后将其降至0.0001。

4.5 等距不变性误差分析

在本节中，我们评估模型的等距不变性。为进行评估，我们首先使用每个类别仅5个数据点，训练一个与图4中前一项实验任务相同的模型。随后，我们对每个数据应用10种随机变换，并计算变换后数据的各个表征与平均表征之间距离的标准差。我们重复这一过程8次，并计算标准差的平均值，以确定“等距不变性误差”。等距不变性误差越小，表明模型对等距变换的鲁棒性越强。

2. 有关数据集的详细说明，请参阅 http://people.csail.mit.edu/sumner/research/ deftransfer/data.html。

细分层级（点数）	1(12)	4(162)	7(492)	10(1002)	13(1692)
标准差的平均值	0.1062	0.0160	0.0078	0.0076	0.0076

表 2：二十面体不同细分层级下标准差的平均值。

我们的第一组测量着重考察在细分层级固定为10时，将分辨率从32提高到1024所产生的影响。我们在表1中展示了这些实验的结果。需要注意的是，误差会随着分辨率提高而降低，但超过某个点后又开始上升，而不是继续降低。

在另一项实验中，我们通过改变细分层级，同时将分辨率固定为 512，研究等距不变性误差。我们考察了细分层级从 1 增至 13 时标准差的平均值。结果见表 2，误差随着细分层级的增加而持续减小。

5 讨论

本文探索了一种新颖的架构，利用欧拉曲线变换和 O(3)等变算子，获得嵌入单纯复形的等距不变且细分不变的表示。然而，我们的方法仍有一些局限性需要解决。首先，为每个方向计算欧拉曲线可能耗时较长，并且需要大量内存，尤其是在分辨率提高以及从 S^2 中抽取的点数增加时。尽管如此，这一过程在数据预处理阶段只需执行一次。

其次，本文假设嵌入单纯复形的任何细分都会保留原复形的形状，从而实现细分不变性。然而，在某些情况下，尤其是处理网格数据时，细分可能会改变复形的形状，导致网格变得平滑。在这些情况下，复形的特征函数会发生变化，因此无法保证细分不变性。

第三，网格数据的质量会显著影响拓扑信息（如欧拉示性数），而离群点可能会扭曲结果。也就是说，如果网格数据中含有小孔洞或异常，即使肉眼难以察觉，也可能对从数据中获得的拓扑信息产生重大影响。

作为未来的研究方向，纳入持久同调信息或许有助于解决离群点和小孔洞问题。由于欧拉曲线可以由持久同调计算得出，持久性条形码或持久景观提供的信息比欧拉曲线更多。此外，由于它具有瓶颈稳定性（Oudot，2017年），并且在单位向量方向上具有稳定性（命题10），因此它是处理小孔洞和离群点等问题的更全面工具。为了将持久同调信息向量化，

我们建议考虑使用持久景观（Bubenik，2015年）或持久图像（Adams 等人，2017年）。

然而，持久图中具有无限持久性的条目存在一个问题。这些具有无限持久性的条目，其对应的点位于 $\mathbb{R} \times \infty$。这给将这些图作为深度学习架构的输入带来了挑战，因为要纳入无穷远处的点，需要新的发现或发明。持久景观也面临类似问题，因为景观函数的值可能是无限的。因此，考虑到命题 15，我们必须开发能够利用 λ_v^K 中全部信息的泛函，而其中可能包含无限值。为了解决这个问题，我们在第 3.2 节提出了对图进行变换的方法，以便更容易处理持久图和持久景观。这似乎解决了无限值的问题，因为此时不存在无限持久性，但也带来了一个缺点：这种变换消除了平移不变性。在我们的方法中，我们通过一维卷积和池化层消除了对平移的依赖。然而，使用变换后的景观或图时，无法以相同方式消除对平移的依赖。这是因为变换后的图不再具有与原始图相同的底层结构。

在这方面，我们考虑将之字形持久同调作为未来研究的一个潜在方向。我们认为，采用这种方法有几个好处。其一，它可以消除具有无限持久性的条目，同时保留所有信息。这一点尤为重要，因为持久同调变换目前在处理具有无限持久性的条目时仍面临障碍。采用之字形持久同调的另一个主要好处是，由单位向量 v 诱导的过滤所获得的之字形持久同调数据，与由 $-v$ 诱导的过滤所获得的数据包含完全相同的信息（Carlsson 等人，2009）。这为研究和分析带来了新的机遇。之字形持久同调的应用前景尤为广阔，因为它提供了一种解决无限持久性问题的途径，同时又不牺牲其他重要性质。

总之，我们想强调所提出的方法纳入加权欧拉曲线变换的潜力，正如 Jiang 等（2020）的近期研究所示。这一扩展将使我们能够处理与每个单纯形相关联带有权重的对象，例如特征，从而增强我们方法的通用性。通过纳入这一扩展，我们预计能够更精确地表征数据背后的几何结构，并在分类和聚类等任务中取得更好的表现。

致谢与资助披露

Taejin Paik 获得了由韩国政府资助的韩国国家研究基金会（NRF）项目 2022R1A5A6000840 的支持，同时也获得了由韩国政府（未来创造科学部）资助的韩国国家科学基金会项目 [RS-2022-00165404] 的支持。本研究所用的图形处理器由韩国政府资助的韩国国家研究基金会（NRF）项目 2019R1A2C4070302 提供经费购置。

附录 A. 证明

A.1 定理 4 的证明

证明 我们分别用 $\mathcal{C}_i(K;G)$ 和 d_i^G 表示 i-链的集合及其边界映射，其中系数取自 G。展开定义并应用维数定理，可得

$$\begin{aligned}\sum_{i=0}^{n}(-1)^i \operatorname{rk}_G H_i(K;G) &= \sum_{i=0}^{n}(-1)^i(\operatorname{rk}_G \ker d_i^G - \operatorname{rk}_G d_{i+1}^G)\\ &= \sum_{i=0}^{n}(-1)^i(\operatorname{rk}_G \ker d_i^G + \operatorname{rk}_G d_i^G)\\ &= \sum_{i=0}^{n}(-1)^i \operatorname{rk}_G C_i(K;G) = \sum_{i=0}^{n}(-1)^i \operatorname{rk}_G(C_i(K;\mathbb{Z})\otimes G)\\ &= \sum_{i=0}^{n}(-1)^i \operatorname{rk}_{\mathbb{Z}} C_i(K;\mathbb{Z}) = \sum_{i=0}^{n}(-1)^i \operatorname{rk}_{\mathbb{Z}} H_i(K;\mathbb{Z})\\ &= \chi(K).\end{aligned}$$

■

A.2 命题 9 的证明

证明 由方程

$$\begin{aligned}(RK+w)_{v,r} &= \{x\in\mathbb{R}^n \mid x\in RK+w \text{ and } x\cdot v\le r\}\\ &= \{x\in\mathbb{R}^n \mid R(x-w)\in K \text{ and } R(x-w)\cdot Rv\le r-w\cdot v\}\\ &= \{R^{-1}x+w\in\mathbb{R}^n \mid x\in K \text{ and } x\cdot Rv\le r-w\cdot v\}\\ &= R(K_{Rv,r-w\cdot v})+w,\end{aligned}$$

我们有

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_{RK+w}(v,r) &= \chi((RK+w)_{v,r})\\ &= \chi(R(K_{Rv,r-w\cdot v})+w)\\ &= \chi(K_{Rv,r-w\cdot v})\\ &= \mathcal{F}_K(Rv, r-w\cdot v).\end{aligned}$$

■

A.3 命题10 的证明

证明 我们主要遵循 Turner et al. (2014) 中引理 2.1 的证明。来看定义在 h_{v_1} 上的两个高度函数： h_{v_2} 沿 v_1 方向，而 v_2 沿方向，分别定义为

K。换言之，对于 K中的任意 x ， $h_{v_i}(x)$等于 x 点乘 v_i ，其中 $i \in \{1,2\}$。若令$L := \sup\{\|x\|_2 \mid x \in K\}$，则有

$$|h_{v_1}(x) - h_{v_2}(x)| = |x \cdot v_1 - x \cdot v_2| \leq \|x\|_2 \|v_1 - v_2\|_2 \leq L \|v_1 - v_2\|_2 .$$

根据瓶颈稳定性定理（Oudot，2017年；Chazal 等，2016年），我们有

$$d_b(B_K^{v_1}, B_K^{v_2}) \leq \|h_{v_1} - h_{v_2}\|_\infty$$

其中， d_b 是两个持久图之间的瓶颈距离。结合这两个不等式，我们得到

$$d_b(B_K^{v_1}, B_K^{v_2}) \leq \|h_{v_1} - h_{v_2}\|_\infty \leq L\|v_1 - v_2\|_2.$$

■

A.4 命题 11 的证明

证明 首先，我们证明 $\mathcal{G}_{RK}(v) = \mathcal{G}_K(Rv)$。注意， $\mathcal{G}_{RK}(v)$ 是由过滤 $((RK)_{v,r})_{r\in\mathbb{R}} = (r \mapsto ((RK)_{v,r}))$ 导出的持久图。由于我们有

$$\begin{aligned}(RK)_{v,r} &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid x \in RK \text{ and } x \cdot v \leq r\} \\ &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid Rx \in K \text{ and } Rx \cdot Rv \leq r\} \\ &= \{R^{-1}x \in \mathbb{R}^n \mid x \in K \text{ and } x \cdot Rv \leq r\} = R(K_{Rv,r}),\end{aligned}$$

我们只需证明，由过滤 $(R(K_{Rv,r}))_{r\in\mathbb{R}}$ 导出的持久图与 $\mathcal{G}_K(Rv)$ 相同。注意，过滤 $(R(K_{Rv,r}))_{r\in\mathbb{R}}$ 和 $(K_{Rv,r})_{r\in\mathbb{R}}$ 导出相同的持久图。由于 $\mathcal{G}_K(Rv)$ 是由过滤 $(K_{Rv,r})_{r\in\mathbb{R}}$ 导出的持久图，因此结论成立。

类似地， $\mathcal{G}_{K+w}(v)$ 是由过滤 $((K+w)_{v,r})_{r\in\mathbb{R}}$ 导出的持久图。由于我们有

$$\begin{aligned}(K+w)_{v,r} &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid x \in K + w \text{ and } x \cdot v \leq r\} \\ &= \{x \in \mathbb{R}^n \mid x - w \in K \text{ and } (x-w) \cdot v \leq r - v \cdot w\} \\ &= \{x + w \in \mathbb{R}^n \mid x \in K \text{ and } x \cdot v \leq r - v \cdot w\} = w + K_{v,r-v\cdot w},\end{aligned}$$

并且过滤 $(w + K_{v,\ r-v\cdot w})_{r\in\mathbb{R}}$ 和 $(K_{v,\ r-v\cdot w})_{r\in\mathbb{R}}$ 诱导出相同的持久图， $\mathcal{G}_{K+w}(v)$ 与 $\mathcal{G}_K(V)$ 之间唯一的差异是平移差异 $v \cdot w$。 ■

A.5 命题 12 的证明

证明 我们首先证明 $\mathrm{O}(n)$-等变性。与命题 11 的证明一样，我们有 $(RK)_{v,r} = R(K_{Rv,r})$，并且过滤 $(R(K_{Rv,r}))_{r\in\mathbb{R}}$ 和 $(K_{Rv,r})_{r\in\mathbb{R}}$ 诱导出相同的持久景观。由于 $\lambda_{v\,c}^{RK}$,是由 $((RK)_{v,r})_{r\in\mathbb{R}}$ 诱导的持久景观，而 $\lambda_{Rv,c}^{K}$ 是由 $(K_{Rv,r})_{r\in\mathbb{R}}$诱导的持久景观，因此结论成立。

对于第二个结论，我们注意到，根据命题 11 的证明，我们有

$$(K+w)_{v,r} = w + K_{v,r-v\cdot w}.$$

由这些方程

$$\begin{aligned}\beta^{t-m,t+m}_{K+w,v} &:= \dim(\mathrm{Im}((K+w)_{v,t-m} \to (K+w)_{v,t+m})) \\ &= \dim(\mathrm{Im}(w + K_{v,t-m-v\cdot w} \to w + K_{v,t+m-v\cdot w})) \\ &= \dim(\mathrm{Im}(K_{v,t-m-v\cdot w} \to K_{v,t+m-v\cdot w})) \\ &= \beta^{(t-v\cdot w)-m,(t-v\cdot w)+m}_{K,v},\end{aligned}$$

可得

$$\begin{aligned}\lambda^{K+w}_{v,c}(t) &= \sup\{m \geq 0 \mid \beta^{t-m,t+m}_{K+w,v} \geq c\} \\ &= \sup\{m \geq 0 \mid \beta^{(t-v\cdot w)-m,(t-v\cdot w)+m}_{K,v} \geq c\} = \lambda^{K}_{v,c}(t - v\cdot w).\end{aligned}$$

■

A.6 定理 13 的证明

我们定义一个算子 $f \diamond g : S^2 \to \mathbb{R}^\ell$:

$$(f \diamond g)(x) = \int_{S^2} g(x-y) f(y)\, dV(y)$$

其中， dV 是满足 $\int_{S^2} dV = 1$的 S^2 的体积形式。于是，算子 $\diamond$ 是 O(3)-等变的:

引理 17 $(Rf) \diamond g = R(f \diamond g)$ 对每个 $R \in \mathrm{O}(3)$都成立。

证明 如果 R 是 O(3) 的一个元素，那么

$$\begin{aligned}((Rf)\diamond g)(x) &= \int_{S^2} g(x-y)(Rf)(y)\, dV(y) = \int_{S^2} g(x-y) f(Ry)\, dV(y) \\ &= \int_{S^2} g(x-R^{-1}y) f(y)\, dV(y) = \int_{S^2} g(Rx-y) f(y)\, dV(y) \\ &= (f\diamond g)(Rx) = (R(f\diamond g))(x)\end{aligned}$$

因为 $|\det(R)| = 1$ 且 $\|x - R^{-1}y\| = \|Rx - y\|$ 对每个 $x,\ y \in S^2$。 ■

现在，我们给出定理 13 的证明如下:

证明 首先注意到 $\mathbb{P}\left[\|R\mathcal{T}(f)'(x) - \mathcal{T}(Rf)'(x)\|_\infty > \epsilon\right]$ 小于或等于

$$\mathbb{P}\left[\|R\mathcal{T}(f)'(x) - (R(f\diamond g))(x)\|_\infty > \epsilon/2\right] + \mathbb{P}\left[\|((Rf)\diamond g)(x) - \mathcal{T}(Rf)'(x)\|_\infty > \epsilon/2\right]$$

根据引理 17 和三角不等式。因此，只需证明

$$\mathbb{P}\left[\|(f\diamond g)(x) - \mathcal{T}(f)'(x)\|_\infty > \epsilon/2\right] \longrightarrow 0$$

因为 $\mathbb{P}\left[\|R\mathcal{T}(f)'(x) - (R(f \diamond g))(x)\|_\infty > \epsilon/2\right] = \mathbb{P}\left[\|\mathcal{T}(f)'(Rx) - (f \diamond g)(Rx)\|_\infty > \epsilon/2\right]$ and$\mathbb{P}\left[\|((Rf) \diamond g)(x) - \mathcal{T}(Rf)'(x)\|_\infty > \epsilon/2\right]$ 以相同的方式趋于 0。此外，不失一般性，我们可以假设 $\ell = 1$，因此只需证明

$$\mathbb{P}\left[|(f \diamond g)(x) - \mathcal{T}(f)'(x)| > \epsilon\right] \longrightarrow 0.$$

由于 $\mathbb{E}_y\left[g(x-y)f(y)\right] = \int_{S^2} g(x-y)f(y)\ dV(y) = (f \diamond g)(x)$，根据 Hoeffding 不等式（Boucheron 等人，2013），结论成立。

■

A.7 命题 14 的证明

证明 由于我们将嵌入单纯复形转换为欧拉曲线，因此对嵌入单纯复形进行细分不会影响结果。假设 $R \in \mathrm{O}(n)$ and$w \in \mathbb{R}^n$。那么，我们有

$$\begin{aligned}\mathcal{DF}_{RK+w}(v) &= \{\mathcal{D}_1 \circ \mathcal{F}_{RK+w}(v), \ldots, \mathcal{D}_m \circ \mathcal{F}_{RK+w}(v)\} \\ &= \{\mathcal{D}_1 \circ \mathcal{F}_{RK}(v), \ldots, \mathcal{D}_m \circ \mathcal{F}_{RK}(v)\}\end{aligned}$$

根据命题 9，对于每个 $x \in \mathbb{R}$，都有 $\mathcal{F}_{RK+w}(v)(x) = \mathcal{F}_{RK}(v)(x - v \cdot w)$。此外，由同一命题可知，由于我们有 $\mathcal{F}_{RK}(v) = \mathcal{F}_K(Rv)$,

$$\begin{aligned}\mathcal{DF}_{RK+w}(v) &= \{\mathcal{D}_1 \circ \mathcal{F}_K(Rv), \ldots, \mathcal{D}_m \circ \mathcal{F}_K(Rv)\} \\ &= \mathcal{DF}_K(Rv).\end{aligned}$$

■

A.8 命题 15 的证明

证明 基本上，证明与命题 14 的证明相同。出于与命题 14 证明中相同的原因， $\mathcal{E}\lambda_*$ 是细分不变的。

根据命题 12,

$$\begin{aligned}\mathcal{E}\lambda_{RK}(v) &= \left\{\mathcal{E}_1 \circ \lambda_v^{RK}, \ldots, \mathcal{E}_m \circ \lambda_v^{RK}\right\} = \left\{\mathcal{E}_1 \circ \lambda_{Rv}^{K}, \ldots, \mathcal{E}_m \circ \lambda_{Rv}^{K}\right\} \\ &= \mathcal{E}\lambda_K(Rv) = (R(\mathcal{E}\lambda_K))(v),\end{aligned}$$

and

$$\mathcal{E}\lambda_{K+w}(v) = \left\{\mathcal{E}_1 \circ \lambda_v^{K+w}, \ldots, \mathcal{E}_m \circ \lambda_v^{K+w}\right\} = \left\{\mathcal{E}_1 \circ \lambda_v^{K}, \ldots, \mathcal{E}_m \circ \lambda_v^{K}\right\} = \mathcal{E}\lambda_K(v)$$

对于 $R \in \mathrm{O}(n)$ 和 $w \in \mathbb{R}^n$ 因为

$$\lambda_v^{K+w}(x, c) = \lambda_{v,c}^{K+w}(x) = \lambda_{v,c}^{K}(t - v \cdot w).$$

■

参考文献

Henry Adams、Tegan Emerson、Michael Kirby、Rachel Neville、Chris Peterson、Patrick Ship- man、Sofya Chepushtanova、Eric Hanson、Francis Motta 和 Lori Ziegelmeier。持久同调图像：持久同调的一种稳定向量表征。《机器学习研究杂志》，18，2017年。Yuliy Baryshnikov、Robert Ghrist 和 David Lipsky。欧拉积分变换的求逆及其在传感器数据中的应用。逆问题，27(12):124001，2011年。Ulrich Bauer。Ripser：高效计算 Vietoris–Rips 持久条形码。应用与计算拓扑学期刊，5(3):391–423，2021年。Ulrich Bauer、Michael Kerber、Jan Reininghaus 和 Hubert Wagner。PHAT——持久同调算法工具箱。符号计算期刊，78:76–90，2017年。St´ephane Boucheron、G´abor Lugosi 和 Pascal Massart。集中不等式：独立性的非渐近理论。牛津大学出版社，2013年。ISBN 9780199535255。Peter Bubenik。利用持久景观进行统计拓扑数据分析。《机器学习研究杂志》，16:77–102，2015年。Peter Bubenik。持久景观及其若干性质。载于拓扑数据分析：阿贝尔研讨会 *2018*，第 97–117 页。施普林格，2020年。Gunnar Carlsson、Vin De Silva 和 Dmitriy Morozov。之字形持久同调与实值函数。载于第二十五届计算几何年度研讨会论文集，第 247–256 页，2009年。Fr´ed´eric Chazal、Vin De Silva、Marc Glisse 和 Steve Oudot。持久模的结构与稳定性。数学 SpringerBriefs。施普林格国际出版，2016年。ISBN 9783319425450。Taco Cohen、Mario Geiger、Jonas K¨ohler 和 Max Welling。球面卷积神经网络。载于国际学习表征会议，2018年。Taco Cohen、Maurice Weiler、Berkay Kicanaoglu 和 Max Welling。规范等变卷积网络与二十面体卷积神经网络。载于国际机器学习会议，第 1321–1330 页。PMLR，2019年。Justin Curry、Robert Ghrist 和 Michael Robinson。欧拉微积分及其在信号与传感中的应用。载于应用数学研讨会论文集，第 70 卷，第 75–146 页，2012年。Micha¨el Defferrard、Martino Milani、Fr´ed´erick Gusset 和 Nathana¨el Perraudin。Deep-sphere：一种基于图的球面卷积神经网络。载于国际学习表征会议，2020年。Herbert Edelsbrunner 和 John L Harer。计算拓扑学：导论。美国数学学会，2022年。ISBN 9781470467692。

Carlos Esteves、Christine Allen-Blanchette、Ameesh Makadia 和 Kostas Daniilidis。学习 SO(3)等变表示与球面卷积神经网络。载于欧洲计算机视觉会议（*ECCV*）论文集，第52–68页，2018年。Robert Ghrist、Rachel Levanger 和 Huy Mai。持久同调与欧拉积分变换。应用与计算拓扑学期刊，2(1)：55–60，2018年。Justin Gilmer、Samuel S Schoenholz、Patrick F Riley、Oriol Vinyals 和 George E Dahl。用于量子化学的神经消息传递。载于国际机器学习会议，第1263–1272页。PMLR，2017年。Krzysztof M Gorski、Eric Hivon、Anthony J Banday、Benjamin D Wandelt、Frode K Hansen、Mstvos Reinecke 和 Matthia Bartelmann。HEALPix：一种用于高分辨率离散化以及快速分析球面分布数据的框架。《天体物理学杂志》，622(2)：759，2005年。Pim De Haan、Maurice Weiler、Taco Cohen 和 Max Welling。规范等变网格卷积神经网络：几何图上的各向异性卷积。载于国际学习表征会议，2021年。Qitong Jiang、Sebastian Kurtek 和 Tom Needham。用于形状与图像分析的加权欧拉曲线变换。载于*IEEE/CVF*计算机视觉与模式识别会议研讨会论文集，第844–845页，2020年。Renata Khasanova 和 Pascal Frossard。全向图像的基于图的分类。载于*IEEE*国际计算机视觉会议研讨会论文集，第869–878页，2017年。Cl´ement Maria、Jean-Daniel Boissonnat、Marc Glisse 和 Mariette Yvinec。GUDHI库：单纯复形与持久同调。载于数学软件国际会议（*ICMS 2014*）：第四届国际大会，首尔，韩国，*2014*年*8*月*5*日至*9*日。论文集*4*，第167–174页。施普林格，2014年。Clint McCrory 和 Adam Parusi´nski。代数可构造函数。载于年鉴´高等师范学校科学´系列，第30卷，第527–552页，1997年。Steve Oudot。持久性理论：从箭图表示到数据分析，第209卷。美国数学会，2017年。ISBN 9781470434434。Adam Paszke、Sam Gross、Francisco Massa、Adam Lerer、James Bradbury、Gregory Chanan、Trevor Killeen、Zeming Lin、Natalia Gimelshein、Luca Antiga 等。PyTorch：一种命令式风格的高性能深度学习库。神经信息处理系统进展，32，2019年。Robert W Sumner 和 Jovan Popovi´c。三角网格的形变迁移。《*ACM*图形学汇刊》（*TOG*），23(3)：399–405，2004年。Richard Swinbank 和 R James Purser。斐波那契网格：一种全球建模的新方法。《英国皇家气象学会季刊》：大气科学、应用气象学和物理海洋学期刊，132(619)：1769–1793，2006年。

Andrew Tausz、Mikael Vejdemo-Johansson 和 Henry Adams。javaplex：持久同调研究平台。《公开可用几何／拓扑软件摘要集》专题讨论会，7：1–41，2012年。

Guillaume Tauzin、Umberto Lupo、Lewis Tunstall、Julian Burella P´erez、Matteo Caorsi、Anibal M Medina-Mardones、Alberto Dassatti 和 Kathryn Hess。giotto-tda：一种用于机器学习和数据探索的拓扑数据分析工具包。《机器学习研究杂志》，22(1):1834–1839，2021年。

Katharine Turner、Sayan Mukherjee 和 Doug M Boyer。用于形状和曲面建模的持久同调变换。《信息与推断：*IMA*期刊》，3 (4):310–344，2014年。

Laurentius Petrus Dignus van den Dries。《温和拓扑与*O*-极小结构》，第248卷。剑桥大学出版社，1998年。ISBN 9780521598385。

Pauli Virtanen、Ralf Gommers、Travis E. Oliphant、Matt Haberland、Tyler Reddy、David Cournapeau、Evgeni Burovski、Pearu Peterson、Warren Weckesser、Jonathan Bright、St´efan J. van der Walt、Matthew Brett、Joshua Wilson、K. Jarrod Millman、Nikolay May-̇orov、Andrew R. J. Nelson、Eric Jones、Robert Kern、Eric Larson、C J Carey、Ilhan Polat、Yu Feng、Eric W. Moore、Jake VanderPlas、Denis Laxalde、Josef Perktold、Robert Cimr-man、Ian Henriksen、E. A. Quintero、Charles R. Harris、Anne M. Archibald、Antˆonio H. Ribeiro、Fabian Pedregosa、Paul van Mulbregt 和 SciPy 1.0贡献者。SciPy 1.0：Python科学计算的基础算法。《自然·方法》，17:261–272，2020年。doi: 10.1038/s41592-019-0686-2。

Felix Wu、Amauri Souza、Tianyi Zhang、Christopher Fifty、Tao Yu 和 Kilian Weinberger。《简化图卷积网络》。载于国际机器学习会议，第 6861–6871 页。PMLR，2019年。

Qin Yang、Chenglin Li、Wenrui Dai、Junni Zou、Guo-Jun Qi 和 Hongkai Xiong。《用于球面图像分类的旋转等变图卷积网络》。载于*IEEE/CVF*计算机视觉与模式识别会议（*CVPR*）论文集，2020年6月。

Anna Yershova 和 Steven M LaValle。《球面和 SO(3) 的确定性采样方法》。载于*IEEE*国际机器人与自动化会议，*2004*年。论文集。*ICRA'04*。*2004*年，第 4 卷，第 3974–3980 页。IEEE，2004年。