arXiv:2303.15385v1 [cs.CV] 27 Mar 2023

通过无假阴性和无假阳性的完备连续等距不变量识别无标签点云的刚性模式

Daniel Widdowson，利物浦大学计算机科学系，英国

d.e.widdowson@liverpool.ac.uk

Vitaliy Kurlin 计算机科学系 利物浦大学，英国

vitaliy.kurlin@gmail.com

摘要

汽车或其他实体物体等刚性结构，通常表示为有限无标记点云。这些点云之间最自然的等价关系是刚体运动或等距变换，即保持所有点间距离不变的变换。

只有借助完备等距不变量，才能可靠地比较点云的刚性模式；这类不变量也可称为等变描述符，且不会产生假阴性（等距点云却具有不同描述），也不会产生假阳性（非等距点云却具有相同描述）。

数据中的噪声和运动促使人们寻找在适当度量下对点的扰动保持连续的不变量。我们提出了首个适用于任意欧几里得空间中无标记点云的连续完备不变量。对于固定维数，这种新不变量所采用的度量可在关于点数的多项式时间内计算。

1. 完备不变量的强大动机

在计算机视觉中，汽车和实体障碍物等真实物体被视为刚体，通常表示为由有限个 $C \subset \mathbb{R}^n$ （称为点云） m 无标签（或无序）点构成的集合，通常处于低维空间 $n = 2$，3、4。

许多真实物体的刚性促使我们考虑最基本的等价关系：刚体运动 [68], 即由平移和旋转构成的复合变换，作用于 $\mathbb{R}^n$。在一般的度量空间 M中，最相关的等价关系是等距变换：任意保持 $M \to M$ 中所有点间距离不变的映射 M。

$\mathbb{R}^n$ 中的任意等距变换都是镜像反射与某种刚体运动的复合变换。任意保向等距变换都可以通过连续的刚体运动实现。

区分通过等距变换相关联或形状相同的刚体毫无意义。形式上，点云 C 的形状 是其等距类 [49] ，定义为与 C等距的所有无穷多个点云构成的集合。

区分点云的等距类的唯一可靠工具是不变量，即在任何等距变换下保持不变的函数或性质。由于任何等距变换都是双射，点的数量是一个等距不变量，但点的坐标甚至在平移下也不是不变量。这个简单的不变量不完备（非单射），因为非等距点云的点数可能不同。

任意不变量 I 都会将所有等距点云映射为相同的值。不存在满足 I（C）$\neq I$（C'）的等距点云 $C \cong C'$，这意味着 I 没有假阴性。等距变换不变量也称为等变描述符 [56]。

若完全不变量 I 能够区分所有非等距点云，那么如果 $C \ncong C'$，则 $I(C) \neq I(C')$。等价地，如果 $I(C) = I(C')$，那么 $C \cong C'$，因此 I 具有无假阳性。于是，I 可以视为一种 DNA 风格编码或基因组，可在等距变换意义下唯一标识任意点云。

由于真实数据总是带有噪声，而且追踪刚体的运动十分重要，因此有用的完全不变量还必须在点移动时保持连续。

对于 $m = 3$ 个点，完全且连续的不变量由三个两两距离（三角形的边长）组成，在学校里称为 SSS 定理 [69]。但是，所有两两距离对于 $m \geq 4$ [9]而言并不完备，见图 1。

问题 1.1 （具有可计算连续度量的完备等距不变量）。对于 $\mathbb{R}^n$中的任意由 m 个无标记点构成的点云，寻找一个满足以下性质的不变量 I

(a) 完备性： C、C' 是等距的 $\Leftrightarrow I(C) = I(C')$;

(b) 利普希茨连续性：如果 C 中的任意点在其 ε邻域内发生扰动，那么 $I(C)$ 的变化至多为 $\lambda\varepsilon$，其中常数为 λ，度量为 d，并满足以下公理：

1) $d(I(C)\ I(C')) = 0$ 当且仅当$C \cong C'$ 是等距的，

2) 对称性： $d(I(C)\ I(C')) = d(I(C')\ I(C))$,

3) $d(I(C)\ I(C')) + d(I(C')\ I(C'')) \geq d(I(C)\ I(C''))$;

(c) 可计算性： I 和 d 在维数 n固定时，可在关于点数 m 的多项式时间内计算。

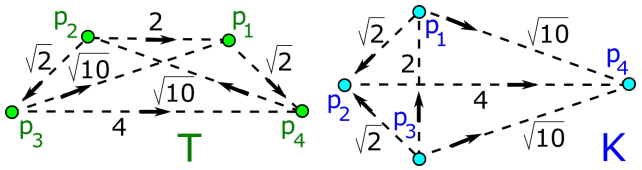

图 1. **左**：点云 $T = \{(1,\ 1),\ (-1,\ 1),\ (-2,\ 0),\ (2,\ 0)\}$。**右**：风筝形 $K = \{(0,\ 1),\ (-1,\ 0),\ (0,\ -1),\ (3,\ 0)\}$。 T和 K有相同的 6 个两两距离 $\sqrt{2},\ \sqrt{2},\ 2,\ \sqrt{10},\ \sqrt{10},\ 4$。

条件（1.1b）要求连续度量，比（1.1a）中的完备性要求更强。检测等距变换 $C \cong C'$ 会得到一个不连续的度量，例如 $d = 1$对于所有非等距点云 $C \ncong C'$即使 C, C' 也几乎完全相同。任何 d 满足（1.1b）中第一条公理的度量， $C \cong C'$ 都可以通过检查 $d = 0$来检测等距变换。

定理4.7将为任意 m 在 $\mathbb{R}^n$中解决问题1.1。定理 3.10 中的连续不变量被推测在任意度量空间中都是完备的（目前尚无已知反例）。第一作者实现了所有算法，第二作者撰写了中的全部理论、证明和示例。

2. 点集识别/分类的既有研究

带标号点集 $C \subset \mathbb{R}^n$ 的等距分类很容易，因为带索引点 p_i， p_j 之间的距离矩阵 d_{ij} 使我们能够利用到先前构造出的点 [29，的已知距离来重建 C 定理 9]。对于任意具有相同数量 m 个带标记点的点集， $m \times m$ 距离矩阵（或 $p_i \cdot p_j$ 的格拉姆矩阵）之差都可以通过取矩阵范数转化为连续度量。如果给定的点没有标号，比较 $m \times m$ 个矩阵就需要 $m!$ 种排列，使得这种方法不切实际。

多维尺度分析 (MDS)。对于给定的任意 m点点云 A的 $m \times m$ 距离矩阵，MDS [58] 会寻找一个嵌入 $A \subset \mathbb{R}^k$（如果存在），使其在维度为 $k \leq m$时保留M 的所有距离。最终嵌入 $A \subset \mathbb{R}^k$使用特征向量；由于符号存在歧义，比较所需时间呈指数级，可能接近 $O(2^m)$。

等距检测是问题1.1 的一个较简单版本，旨在通过算法检测给定点云之间是否存在潜在的等距变换，其中点云由 m 个点组成，位于 $\mathbb{R}^n$中。Brass 和 Knauer 提出的最佳算法 [10] 需要 $O(m^{\lceil n/3 \rceil} \log m)$时间，因此 $O(m \log m)$在 $\mathbb{R}^3$ [11] 中的算法会给出二元答案（是 / 否），却无法用连续度量量化非等距点云之间的相似性。

豪斯多夫距离 [31]可为环境度量空间中的任意子集 A, B 定义为 $d_H(A,B) = \max\{\vec{d}_H(A,B)\ \vec{d}_H(B,A)\}$，其中有向豪斯多夫距离为 $\vec{d}_H(A,B) = \sup_{p \in A} \inf_{q \in B} |p-q|$。为考虑等距变换，可以对所有等距变换取豪斯多夫距离的最小值。对于 $n = 2$，对至多包含m 个点的集合，在等距变换中取最小值的豪斯多夫距离需要 $O(m^5 \log m)$ 时间 [17]。给定 $\varepsilon > 0$ 和 $n > 2$，判定 $d_H \leq \varepsilon$ 是否可通过平移实现的相关问题，其时间复杂度为 $O(m^{\lceil (n+1)/2 \rceil})$ [70,第 4 章，推论 6]。对于一般的等距变换，起初只有近似算法处理了对无穷多个旋转进行最小化的问题，见 $\mathbb{R}^3$ [27] 和 $\mathbb{R}^n$ [4, 引理 5.5]。

格罗莫夫–瓦瑟斯坦距离可定义于度量测度空间，这些空间不必嵌入同一个环境空间。最简单的格罗莫夫–豪斯多夫（GH）距离，在多项式时间内无法以小于 3 的近似因子进行近似，除非 P =NP [57, 推论 3.8]。针对超度量空间，已有多项式时间的 GH 算法 [46]。然而，即便对于 $\mathbb{R}$ 中的点云集合，GH 空间也颇具挑战性，参见 [42] 和 [74]。

热核签名 (HKS) 是流形 M 的一个完全等距不变量，其拉普拉斯–贝尔特拉米算子具有不同的特征值；这一点由 [65, 定理 1]证明。如果 M由点采样得到，HKS 可以离散化并保持连续性 [65,章节 4]，但其完备性尚不明确。

等变描述符 可以在划分为预定义簇的大型点云数据集上通过实验进行优化[48, 60] 。增加隐藏参数可以提高在任何有限数据集上的准确率，但代价更高，而且处理任何新数据都需要更多工作。点云配准会过滤离群值 [59], , 为尺度不变特征变换采样旋转，或使用基 [53,64,66,76], , 但基在点云受到扰动时可能不稳定。无标签点云的基于 PCA 的完全不变量 [36] ，在基退化为低维子空间时可能发生不连续变化；这一方法启发了完备神经网络 [32] ，但不具备利普希茨连续性。

几何深度学习会按设计生成等变描述符 [14]，并超越欧几里得空间$\mathbb{R}^n$ [15]，因此旨在通过实验解决问题1.1。受 [1, 19, 20, 30, 41], 问题1.1中的障碍启发，我们需要一种不依赖有限数据且有充分依据的解决方案。

几何数据科学解决了问题1.1的类似问题：对于任何现实数据对象，均将其视为在实际等价关系下等价，而非点云在刚体运动下等价： [24, 25, 62]1—周期离散序列 [5,6,36], 2维格子 [13,38], 3维格 [12,35,37,47], 中的周期点集 $\mathbb{R}^3$ [21,63] 以及更高维中的周期点集 [2–4]。其在晶体材料中的应用 [7, 54, 67, 75] 促成了晶体等距原理 [71–73]将门捷列夫的元素周期表扩展至晶体等距空间，其中包含所有以完全不变量为参数的周期晶体，如同描绘行星的地理地图。

局部距离分布是 M´emoli 在其关于度量测度空间的开创性著作 [44, 45] 中提出的，形状分布[8,28,43,50], 则是下文新 SDD 的一阶版本。

3. 单纯形距离分布（SDD）

我们将对任意度量空间中的排序距离向量进行改进，以得到一个完全不变量，具体如图 $\mathbb{R}^n$ 所示。2。第3 节和第4 节的所有证明分别见 [39,40]，。

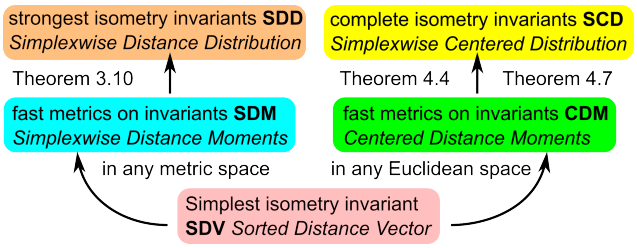

图 2. 建立在经典 SDV 之上的新不变量层级。

向量 $u < v$（u_1，…，u_h）和 $v =$（v_1，…，v_h）上的字典序 $u =$表示：如果 u，v 的前 i（可能为 $i = 0$）个坐标相同，则 $u_{i+1} < v_{i+1}$。令 S_h 表示指标 1，…，h上的置换群。

定义 *3.1*（*RDD(C; A)*）。设 C 是一个由 m 个未标记点组成的点云，位于度量为 d的空间中。设 A =(p_1, . . . , p_h) $\subset C$是一个点的有序子集 $1 \le h < m$。设 *D(A)* 为三角距离矩阵，其条目 $D(A)_{i,j-1}$ 为 $d(p_i, p_j)$，其中 $1 \le i < j \le h$；其余条目填为零。任意置换 $\xi \in S_h$ 通过将 $D(A)_{ij}$ 映射为 $D(A)_{kl}$，作用于*D(A)*；其中 $k \le l$ 是指标对 $\xi(i)$ $\xi(j) - 1$ 按递增顺序排列后的结果。

对于任意其他点 $q \in C - A$，将从q到 p_1、……、p_h 的距离写成一列。 $h \times (m - h)$-矩阵*R(C; A)*由这些按字典序排列的距离列构成。 ξ 在 *R(C; A)*上的作用是将任意第 i 行映射到第 $\xi(i)$ 行，之后可再次按字典序排列所有列。相对距离分布 *RDD(C; A)*是矩阵对[*D(A) R(C; A)*] 在置换 $\xi \in S_h$下的等价类。

对于带有 $h = 1$ 的单点子集 $A = \{p_1\}$，矩阵*D(A)*为空，而 $R(C; A)$ 是一行距离值（按递增顺序排列），表示从 p_1 到其他所有点 $q \in C$的距离。对于带有 $h = 2$ 的两点子集 $A =$(p_1, p_2)，矩阵 $D(A)$ 是单个数值 $d(p_1, p_2)$，而 $R(C; A)$ 由两行距离值构成，表示从 p_1，p_2 到其他所有点 $q \in C$的距离。

示例 3.2（RDD 对于一个包含 3 个点的点云 C）。设 $C \subset \mathbb{R}^2$由 p_1、p_2、p_3 组成，其点间距离 $a \le b \le c$按逆时针方向排列，如图 *3*（左）所示。则

$$\mathrm{RDD}(C; p_1) = [\emptyset; (b, c)], \mathrm{RDD}(C; \begin{pmatrix} p_2 \\ p_3 \end{pmatrix}) = [a; \begin{pmatrix} c \\ b \end{pmatrix}],$$

$$\mathrm{RDD}(C; p_2) = [\emptyset; (a, c)], \mathrm{RDD}(C; \begin{pmatrix} p_3 \\ p_1 \end{pmatrix}) = [b; \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix}],$$

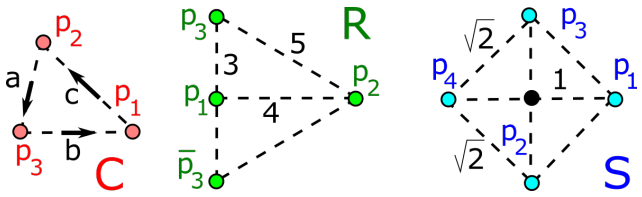

图 3 $C = \{p_1, p_2, p_3\}$ $a \le b \le c$。左：一个距离为 $R = \{0, 0, 4, 0, 0, 3\}$ 的点云。中：三角形点云 ( ) ( ) ( )。右：正方形点云 $S =$ {(1, 0)，(−1, 0)，(0, 1)，(−1, 0)}。

$$\mathrm{RDD}(C; p_3) = [\emptyset; (a, b)], \mathrm{RDD}(C; \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \end{pmatrix}) = [c; \begin{pmatrix} b \\ a \end{pmatrix}].$$

对于指定的点顺序 $A =$（p_i、p_j），我们始终将 RDD 表示为由这些点构成的列向量。交换点 $p_1 \leftrightarrow p_2$ 后，上面的最后一个RDD 等价于另一种形式：RDD（C; $\begin{pmatrix} p_2 \\ p_1 \end{pmatrix}$） $= [c; \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}]$。

尽管 RDD(C; A) 的定义在 $A \subset C$ 中的h 个点的置换 ξ 意义下成立，我们随后只使用 $h = n$，这使得在维数 $n = 2$, 3 中比较 RDD 成为可行。 C 的等距类上的度量将独立于 ξ。

定义 3.3 (单纯形距离分布SDD$(C; h)$)。设 C 是度量空间中由 m 个无标记点构成的点云。对于整数 $1 \le h < m$，单纯形距离分布 SDD$(C; h)$ 是所有无序 h 点子集 $A \subset C$ 的 RDD$(C; A)$ 所构成的无序集合。

对于 $h = 1$以及任意 m点云 C，分布SDD$(C;1)$ 可视为一个矩阵，其中包含 m 行按序排列的距离，每行对应一个点 $p \in C$ 到所有其他 $m - 1$点的距离。若按字典序排列这些 m 行，并将任何 $l > 1$ 相同的行合并为一行，权重为 l/m，则得到定义 3 中引入的逐点距离分布 PDD$(C; m - 1)$。 [72, 定义 31]。

PDD 被简化为更易于比较的平均最小距离向量 [73]: $\mathrm{AMD}_k(C) = \frac{1}{m}\sum_{i=1}^{m} d_{ik}$，其中 d_{ik} 表示点 $p_i \in C$到其 k 在 C中的第 m [23] 近邻的距离。这些基于近邻的不变量可在 m [23] 内近乎线性时间计算，并对全球最大真实材料数据库中的全部 66 万种+周期晶体进行两两比较 [72]。定义3.4 同样将SDD映射为一个更小的不变量。

回顾一下，一组数的 一阶矩 $a_1, \ldots, a_k$是 平均值 $\mu = \frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k} a_i$。 二阶矩是 标准差 $\sigma = \sqrt{\frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}(a_i - \mu)^2}$。

对于 $l \ge 3$，其 l阶标准化矩 [34, 第 2 节。7] 为 $\frac{1}{k}\sum_{i=1}^{k}\left(\frac{a_i - \mu}{\sigma}\right)^l$。

定义 *3.4*（单纯形距离矩 *SDM*）。对于度量空间中的任意 m点点云 C，设 $A \subset C$ 为 h 个无序点的子集。排序距离向量 *SDV(A)* 是 A 中各点之间所有 $^{h}(_{h-1})$ *2* 个两两距离按递增顺序排列所得的列表。而量 $\vec{R}(C; A) \in \mathbb{R}^{m-h}$ 由定义 *3.1* 中的 $h \times (m-h)$ 矩阵*R(C; A)* 得到：将列平均值向量按递增顺序排列即可。

这对 $[SDV(A); \vec{R}(C; A)]$ 是平均距离分布 *ADD(C; A)*，将其视为长度为$h(_{h-3})_{2} + m$的向量。所有 $\binom{m}{h}$ 无序子集 $A \subset C$ 对应的 *ADD(C; A)* 所构成的无序集合，称为平均单纯形分布 *ASD(C; h)*。单纯形距离矩 *SDM(C; h, l)* 是 *ASD(C; h)* 的第 l 阶矩（针对 $l \geq 3$ 标准化），其中将其视为由 $\binom{m}{h}$ 向量构成的概率分布，并分别计算每个坐标的矩。

例 *3.5*（T, K 的 *SDD* 和 *SDM*）。图 *1* 展示了具有相同排序距离向量 $SDV = \{\sqrt{2}, \sqrt{2}, 2, \sqrt{10}, \sqrt{10}, 4\}$ 的非等距 *4*点云 T, K，参见 *[9]* 中的无穷多个例子。T, K 各边上的箭头表示计算 *RDD* 时每对顶点中各点的顺序。随后，表 *1* 中的 $SDD(T; 2) \neq SDD(K; 2)$ 可将 T, K 区分开来，直至等距变换。$SDM(C; 2, 1) \in \mathbb{R}^3$ 的第 *1* 个坐标是 $SDV(T) = SDV(K)$ 中 *6* 个距离的平均值，但另外两个坐标（*R(C; A)* 矩阵的列平均值）则不同。

部分 $\binom{m}{h}$ RDD中的一些SDD$(C; h)$ 可能与示例3.5中一样完全相同。如果将任何 $l > 1$相同的RDD合并为一个RDD，并赋予其权重 $l/\binom{m}{h}$，SDD 就可以视为RDD的加权概率分布。

定义 $m-h$ 矩阵 $R(C; A)$中可置换的列在定义3.1 中的 RDD 可以解释为 $m-h$中的无标记点 $\mathbb{R}^h$。由于任何等距变换都是双射，保持双射的最简单度量是瓶颈距离，它也称为 Wasserstein 距离 W_∞。

定义 *3.6*（瓶颈距离 W_∞）。对于任意向量$v = (v_1, \ldots, v_n) \in \mathbb{R}^n$，闵可夫斯基范数为 $||v||_\infty = max_{i=1,\ldots,n} |v_i|$。对于任意大小相同的向量或矩阵 N, N'，闵可夫斯基距离为 $L_\infty(N, N') = max_{i,j} |N_{ij} - N'_{ij}|$。对于由 m 个无标记点构成的点云 $C, C' \subset \mathbb{R}^n$，瓶颈距离 $W_\infty(C, C') = inf_{g: C \to C'} sup_{p \in C} ||p - g(p)||_\infty$ 在所有双射 g 中取最小值：$C \to C'$。

引理 *3.7*（*RDD* 上的最大度量 M_∞）。对于任意 m 个点云以及有序的 h 个点子集 $A \subset C$ 和 $A' \subset C'$，令 $d(\xi) = max\{L_\infty(\xi(D(A)) D(A')) W_\infty(\xi(R(C; A)) R(C'; A'))\}$，其中置换 $\xi \in S_h$ 作用于 h 个点上。那么最大度量$M_\infty(RDD(C; A), RDD(C'; A')) = min_{\xi \in S_h} d(\xi)$ 满足所有

SDD(T; 2) 中的 RDD(T; A)	SDD(K; 2) 中的 RDD(K; A)
$[\sqrt{2}, \begin{pmatrix} 2 & \sqrt{10} \\ \sqrt{10} & 4 \end{pmatrix}] \times 2$	$[\sqrt{2}, \begin{pmatrix} 2 & \sqrt{10} \\ \sqrt{2} & 4 \end{pmatrix}] \times 2$
$[2, \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{10} \\ \sqrt{10} & \sqrt{2} \end{pmatrix}]$	$[2, \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{10} \\ \sqrt{2} & \sqrt{10} \end{pmatrix}]$
$[\sqrt{10}, \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 4 \\ 2 & \sqrt{2} \end{pmatrix}] \times 2$	$[\sqrt{10}, \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 2 \\ 4 & \sqrt{10} \end{pmatrix}] \times 2$
$[4, \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{10} \\ \sqrt{10} & \sqrt{2} \end{pmatrix}]$	$[4, \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ \sqrt{10} & \sqrt{10} \end{pmatrix}]$
ASD(T; 2) 中的 ADD(T; A)	ASD(K; 2) 中的 ADD(K; A)
$[\sqrt{2}, (\frac{2+\sqrt{10}}{2} \quad \frac{4+\sqrt{10}}{2})] \times 2$	$[\sqrt{2}, (\frac{2+\sqrt{2}}{2} \quad \frac{4+\sqrt{10}}{2})] \times 2$
$[2, (\frac{\sqrt{2}+\sqrt{10}}{2}, \frac{\sqrt{2}+\sqrt{10}}{2})]$	$[2, (\quad - \quad \quad -)]$
$[\sqrt{10}, (\frac{2+\sqrt{2}}{2} \quad \frac{4+\sqrt{2}}{2})] \times 2$	$[\sqrt{10}, (\frac{2+\sqrt{10}}{2} \quad \frac{4+\sqrt{2}}{2})] \times 2$
$[4, (\frac{\sqrt{2}+\sqrt{10}}{2}, \frac{\sqrt{2}+\sqrt{10}}{2})]$	$[4, (\frac{\sqrt{2}+\sqrt{10}}{2}, \frac{\sqrt{2}+\sqrt{10}}{2})]$
$SDM_1 = \frac{3+\sqrt{2}+\sqrt{10}}{3}$	$SDM_1 = \frac{3+\sqrt{2}+\sqrt{10}}{3}$
$SDM_2 = \frac{6+2\sqrt{2}+4\sqrt{10}}{12}$	$SDM_2 = \frac{8+5\sqrt{2}+3\sqrt{10}}{12}$
$SDM_3 = \frac{16+4\sqrt{2}+4\sqrt{10}}{12}$	$SDM_3 = \frac{16+3\sqrt{2}+5\sqrt{10}}{12}$

表 1. 定义 3.3 中 4点云的单纯形距离分布 T，$K \subset \mathbb{R}^2$ 见图 1。符号 $\times 2$ 表示重复的 RDD。底部三行显示了 SDM(C; 2、1) $\in \mathbb{R}^3$ 定义 3.4 中 $h = 2$、$l = 1$ $C = T$ K 以及两者，的坐标。不同元素已突出显示。

度量公理RDDs 满足定义 *3.1*，并且可在 $O(h!(h^2 + m^{1.5} \log^h m))$ 的时间内计算。

我们将仅使用 $h = n$ 作为欧几里得空间 $\mathbb{R}^n$，因此引理 $h!$ 中的因子 3.7 对于 $n = 2$而言实际上很小，3。

对于 $h = 1$ 和一个单点子集 $A \subset C$，矩阵 $D(A)$ 为空，因此 $d(\xi) = W_\infty(\xi(R(C; A)) R(C'; A'))$. RDD 上的度量 M_∞ 将用于中间成本，通过使用下面的标准定义 3.8 和 3.9，获得两个 RDD 无序集合之间的度量。

定义 *3.8*（线性指派代价 *LAC* [26]）。对于任意成本矩阵 $c(i, j) \geq 0$, $i, j \in \{1, \ldots, k\}$,$k$，线性指派代价 $LAC = \frac{1}{k} min_g \sum_{i=1} c(i, g(i))$ 在所有关于索引 $1, \ldots, k$ 的双射 g 中取最小值。

LAC 中的归一化因子 $\frac{1}{k}$ 使该度量与权重总和为 1 的 EMD 更具可比性。

定义 *3.9*（分布上的地球移动距离）。设 $B=\{B_1,\ldots,B_k\}$ 是一个对象的有限无序集合，其权重为 $w(B_i)$、$i=1$、……、k。另设一个集合 $D=\{D_1,\ldots,D_l\}$，其权重为 $w(D_j)$、$j=1$、……、l。假设 B_i与 D_j 之间的距离由度量 $d(B_i,D_j)$ 测量。从 B 到 D 的流是一个 $k\times l$ 矩阵，其元素 $f_{ij}\in[0,1]$ 表示从对象 B_i 到 D_j 的部分流。地球移动距离 *[55]* 是在满足 $\sum f_{ij}\le w(B_i)$（对于 $i=1$、……、k）和 $\sum f_{ij}\le w(D_j)$ $_{j=1}$ $_{i=1}$ $_k$ $_l$（对于 $j=1$、……、l）以及 $\sum\sum f_{ij}=1$ $_{i=1}$ $_{j=1}$ 的条件下，关于 $f_{ij}\in[0,1]$ *sub-* $_{i=1}$ $_{j=1}$ $_l$ $_k$ 取最小值的 $_k$ $_l$ $EMD(B,D)=\sum\sum f_{ij}d(B_i,D_j)$。

$_l$第一个条件 $\sum f_{ij}\le w(B_i)$ 表示，通过流 f_{ij}，$j=1,\ldots,l$，流入所有D_j的对象 B_i 的权重 $w(B_i)$ 不会超过$_{j=1}$。第二个条件$_k$ $\sum f_{ij}\le w(D_j)$ 表示，所有从 B_i 流出的流 f_{ij}，针对$_{i=1}$ $i=1,\ldots,k$，都会流向 D_j，且流量不超过其权重 $w(D_j)$。最后一个$_k$ $_l$条件 $\sum\sum f_{ij}=1$要求所有 B_i 共同流入所有 D_j。LAC [26] 和 EMD [55] 可以在近立方时间内，根据给定对象集合的大小计算得出。

定理 3.10(c) 和 4.7 将把 $O(m^{1.5}\log^n m)$用于固定点云中 m 无标记点的 [22,定理 6。5] 算法扩展到更难的等距类情形，同时在 m 固定维度 n下保持多项式时间。所有复杂度均针对随机存取机（RAM）模型。

定理 3.10（SDD的不变性与连续性）。（***a***）对于 $h\ge 1$ 以及度量空间中由 m 个无标记点组成的任意点云 C，$\mathrm{SDD}(C;\ h)$ 是一个等距不变量，其计算时间为 $O(m^{h+1}/(h-1)!)$。对于任意 $l\ge 1$，不变量 $\mathrm{SDM}(C;h,l)\in\mathbb{R}^{m+\frac{h(h-3)}{2}}$ 的计算时间相同。

对于任意 m 点云 C,C'（它们各自位于自己的度量空间中）以及 $h\ge 1$，令单纯形距离分布$\mathrm{SDD}(C;h)$ 和 $\mathrm{SDD}(C';h)$ 由权重相等的 $k=\binom{m}{h}$ 个RDD组成，且不合并相同的RDD。

（***b***）使用由度量 $k\times k$ 计算得到的成本矩阵M_∞，该度量用于计算RDD（来自$\mathrm{SDD}(C;\ h)$ 和$\mathrm{SDD}(C';h)$中的RDD之间的线性指派代价定义 *3.8* 中的*3.8* 线性指派代价LAC满足$O(h!(h^2+m^{1.5}\log^h m)k^2+k^3\log k)$上的所有度量公理，且可在

(c) 设 $\mathrm{SDD}(C;h)$ 和 $\mathrm{SDD}(C';h)$ 在合并相同的 RDD 后，最大规模为$l\le k$。那么，定义 *3.9* 中的 EMD 满足 SDD 上的所有度量公理，且其计算时间为 $O(h!(h^2+m^{1.5}\log^h m)l^2+l^3\log l)$。

(d) 设 C' 由 C 经过扰动得到，其中每个点的扰动均在其 ε邻域内。对于任意 $h\ge 1$，$\mathrm{SDD}(C;h)$ 其在LAC 和EMD 度量中的变化至多为 2ε。下界成立：$\mathrm{EMD}\big(\mathrm{SDD}(C;h),\mathrm{SDD}(C';h)\big)\ \ge|\mathrm{SDM}(C;\ h,1)-\mathrm{SDM}(C';\ h,1)|_\infty$。

定理3.10(d) 对以下事实作了实质性推广：扰动两个点各自的 ε-邻域内的点，至多会使这两个点之间的欧几里得距离改变 2ε。

我们推测，对于某个 $C;h)$，SDD(是点云 $C\subset\mathbb{R}^n$ 的完备等距不变量。第 $h\ge n-1$ 节 [39,表明，4] $\mathrm{SDD}(C;2)$ 区分了所有已知的无穷多对 [51,图 S4] 中的非等距 m点云，C，$C'\subset\mathbb{R}^3$ 它们的 $\mathrm{PDD}(C)=\mathrm{SDD}(C;1)$相同。

4. 单纯形中心化分布 (SCD)

虽然第 3 节的所有构造都适用于任意度量空间，但本节将为 $\mathbb{R}^n$中的无标记点云构建完备等距不变量，提出更快速的连续度量。

$\mathbb{R}^n$ 的欧几里得结构使我们能够将给定点云 $\frac{1}{m}\sum_{p\in C}p$ 的 m点点云 $C\subset\mathbb{R}^n$的质心平移到原点 $0\in\mathbb{R}^n$。于是，问题1.1 就简化为仅考虑正交群O(0 中的旋转$\mathrm{O}(\mathbb{R}^n)$。

尽管任意无标记点云 $C\subset\mathbb{R}^n$ 的质心都是唯一确定的，但在实际应用中，可能会提供 C 中一个或多个带标记点，从而显著加快不变量度量的计算。例如，固体材料中的原子邻域是围绕中心原子的原子点云 $C\subset\mathbb{R}^3$；它的中心原子可能不是 C 的质心，但适用于下文介绍的所有方法。

本节研究围绕原点 $0\in\mathbb{R}^n$ 旋转时，$C\subset\mathbb{R}^n$ 的完全不变量上的度量；原点可能属于 C，也可能不属于 C，且可能是其质心，也可能不是。

对于任意子集 $A=\{p_1,\ldots,p_{n-1}\}\subset C$，定义 $D(A\cup\{0\})$ 中的距离矩阵3.1 的大小为$(n-1)\times(n-1)$，其最后一列可以取为包含以下距离：$n-1$ 中各点 A 到 $0\in\mathbb{R}^n$处原点的距离。

任意 n 向量 $v_1,\ldots,v_n\in\mathbb{R}^n$ 都可以作为列写入 $n\times n$ 矩阵，其行列式的值为一个 符号 ±1；如果 $v_1,\ldots,v_n$ 线性相关，则该值为 0。指标 $1,\ldots,n$ 上的任意置换 $\xi\in S_n$ 都是若干个 t对换 $i\leftrightarrow j$ 的复合，并且符号$(\xi)=(-1)^t$。

定义 *4.1*（单纯形中心化分布 *SCD*）。设 $C\subset\mathbb{R}^n$ 是由 m 个无标记点组成的任意点云。对于点 A 中的任意有序子集 p_1，……，$p_{n-1}\in C$，定义 *3.1* 中的矩阵 $R(C;A)$ 的一列包含欧几里得距离 $|q-p_1|$，……，$|q-p_{n-1}|$。在该列底部添加距离 $|q-0|$（即到原点的距离），以及由向量 $q-p_1$，……，$q-p_{n-1}$，q 组成的 $n\times n$ 矩阵的行列式的符号。所得的 $(n+1)\times(m-n+1)$-矩阵在底部的 $(n+1)$-*st* 行中带有符号，称为定向相对距离矩阵 $M(C;\ A\cup\{0\})$。

点 $n-1$ 的任意置换 $\xi \in S_{n-1}$ 作用于 $D(A)$，置换 $M(C;\ A\cup\{0\})$ 的前 $n-1$ 行，并将 $(n+1)$-*st* 行中的每个符号乘以 $\mathrm{sign}(\xi)$。

定向中心分布 $\mathrm{OCD}(C;\ A)$ 是点集 A 的点经过置换 $\xi \in S_{n-1}$ 后所考虑的成对对象 $[D(A\cup\{0\})\ M(C;\ A\cup\{0\})]$的等价类。

单纯形中心化分布$\mathrm{SCD}(C)$ 是由所有 $\binom{m}{n-1}$ 个无序$(n-1)$点子集 $A\subset C$对应的分布 $\mathrm{OCD}(C;\ A)$ 构成的无序集合。镜像$\mathrm{SCD}(C)$ 可通过反转符号从$\mathrm{SCD}(C)$ 得到。

定义 4.1 不需要对任意 $C\subset\mathbb{R}^2$ 作为$n-1=1$进行置换。列 $M(C;\ A\cup\{0\})$可以按字典序排列，而不会影响引理 4.6中的度量。某些 $\binom{m}{n-1}$ OCD在 $\mathrm{SCD}(C)$ 中可能相同，如例 4.2(b) 所示。若将任意 个相同的 OCD合并为一个带有权重OCD，权重为 $l/\binom{m}{h}$，则SCD 可视为OCD的加权概率分布。

例 *4.2*（图*3*中点云的 *SCD*）。 *(a)* 设 $R\subset\mathbb{R}^2$ 由图*3*（中）中直角三角形的顶点 $p_1=(0,0)$、$p_2=(4,0)$、$p_3=(0,3)$ 组成。尽管 $p_1=(0,0)$ 包含在 R 中且不是其质心，*SCD(R)* 仍然有意义。在 *OCD(R;* p_1*)* $=[0,\begin{pmatrix}4&3\\0&0\end{pmatrix}]$ 中，矩阵 $D(\{p_1,0\})$ 为 $|p_1-0|=0$，第一行具有 $|p_2-p_1|=4$、$|p_3-p_1|=3$。在 *OCD(R;* p_2*)* $=[4,\begin{pmatrix}4&3\\0&3\\0&-\end{pmatrix}]$ 中，第一行具有 $|p_1-p_2|=4$、$|p_3-p_2|=5$，第二行具有 $|p_1-0|=0$、$|p_3-0|=3$，$\det\begin{pmatrix}-4&0\\3&3\end{pmatrix}<0$。在 *OCD(R;* p_3*)* $=[3,\begin{pmatrix}3&3\\0&4\\0&+\end{pmatrix}]$ 中，第一行具有$|p_1-p_3|=3$、$|p_2-p_3|=5$，第二行具有 $|p_1-0|=0$、$|p_2-0|=4$，$\det\begin{pmatrix}4&4\\-3&0\end{pmatrix}>0$。因此，*SCD(R)* 由上述三个定向中心分布 *OCD* 组成。

If we reflect R with respect to the x-axis, the new cloud $\bar{R}$ of the points $p_1,p_2,\bar{p}_3=(0,-3)$ has $\mathrm{SCD}(\bar{R})=\overline{\mathrm{SCD}}(R)$ *with* $\mathrm{OCD}(\bar{R};p_1)=\mathrm{OCD}(R)$, $\mathrm{OCD}(\bar{R};p_2)=[4,\begin{pmatrix}4&5\\0&3\\0&+\end{pmatrix}]$, $\mathrm{OCD}(R;\bar{p}_3)=[3,\begin{pmatrix}3&5\\0&4\\0&-\end{pmatrix}]$ *whose signs changed under reflection, so* $\mathrm{SCD}(R)\neq\mathrm{SCD}(\bar{R})$.

(b) 设 $S\subset\mathbb{R}^2$ 由 $m=4$ 个点 $(\pm1,0)$、$(0,\pm1)$组成，它们是图 *3*（右）中正方形的顶点。质心为 $0\in\mathbb{R}^2$，且到 S中的每个点的距离均为 1。

对于每个单点子集 $A=\{p\}\subset S$，两点之间的距离矩阵 D（$A\cup\{0\}$）是单个数字 1。矩阵 M（S；$A\cup\{0\}$）有 $m-n+1=3$ 列。对于 $p_1=(1,0)$，

我们有 $M(S;\begin{pmatrix}p_1\\0\end{pmatrix})=\begin{pmatrix}\sqrt{2}&\sqrt{2}&2\\1&-1&1\\-&+&0\end{pmatrix}$，

其中各列按照图*3*（右）中的 $p_2=(0,-1)$、$p_3=(0,1)$、$p_4=(-1,0)$ 排列。右下角的符号为 *0*，因为点 p_1、*0*、p_4 在一条直线上。由于旋转对称性，$M(S;\ \{p_i,0\})$ 与 $i=1$、*2*、*3*、*4* 无关。因此，*SCD(S)* 可以视为一个权重为 *1* 的 *OCD* $=[1,M(S;\begin{pmatrix}p_1\\0\end{pmatrix})]$。

例4.2（b）说明了关键的不连续性问题：如果 $p_4=(-1,0)$ 发生扰动，相应的符号可能不连续地变为 $+1$ 或 -1。为了在 OCD中获得连续的度量，我们将每个符号乘以一个连续的 强度 函数，该函数在符号为零时取零。

定义 4.3 (单纯形 $\sigma(A)$ 的强度。 对于 A个 $n+1$ 点 $q_{n+1}=p_0$、p_1、……、p_n，它们位于 $\mathbb{R}^n$ 中，令 $p(A)=\frac{1}{2}\sum|p_i-p_j|$ 为所有两两距离之和的一半。令 $V(A)$ 表示以集合 A为顶点的 n 维单纯形的体积。定义强度 $\sigma(A)=V^2(A)/p^{2n-1}(A)$。

对于 $n=2$和一个边长为 a、b、c的三角形 A，海伦公式给出 $\sigma(A)=(p-a)(p-b)(p-c)/p^2$，其中 $p=\frac{a+b+c}{2}=p(A)$ 是 A的半周长。

对于 $n=1$ 和一个集合 $A=p_0,\ p_1\subset\mathbb{R}$，体积为$V(A)=|p_0-p_1|=2p(A)$，因此 $\sigma(A)=2|p_0-p_1|$。

强度 σ（A）只取决于距离矩阵D（A），其定义见 3.1，因此记号σ（A）仅为简洁起见而使用。对于任意 $\mathbb{R}^n$，平方体积 V^2（A）由凯莱–门格尔行列式 [61] 表示，该行列式取决于 A中各点之间的两两距离。重要的是，强度σ（A）在由集合 A 确定的单纯形退化时为零。

定理 4.7 需要 $s\sigma(A)$的连续性：当符号 $s\in\{\pm1\}$ 来自 ORD 的底行，并在经过退化集合 A时不连续地发生变化。定理 $\sigma(A)$ 中 4.4关于连续性的证明给出了 c_n 的 Lipschitz 常数的显式上界。

定理 4.4（强度 σ的 Lipschitz 连续性）。 设点云 A'由另一个 $(n+1)$点点云 $A\subset\mathbb{R}^n$ 得到，方法是将每个点扰动到其 ε邻域内。定义 $\sigma(A)$ 中的强度 $\sigma(A)$ 是 *Lipschitz* 连续的，因此 $|\sigma(A')-\sigma(A)|\le 2\varepsilon c_n$ 对于某个常数 c_n成立。

例 4.5（强度 σ（A）及其上界）。 *[40,*定理 *4.2]* 证明了强度的 *Lipschitz* 常数上界：$c_2=2\sqrt{3}$，$c_3\approx0.43$，$c_4\approx0.01$。由于“维数灾难”，这些上界会迅速趋近于 *0*。图 *4* 展示了强度 σ（）随顶点的 x 坐标平滑变化，其导数$|\frac{\partial\sigma}{\partial x}|$远小于上文证明的上界 c_n。

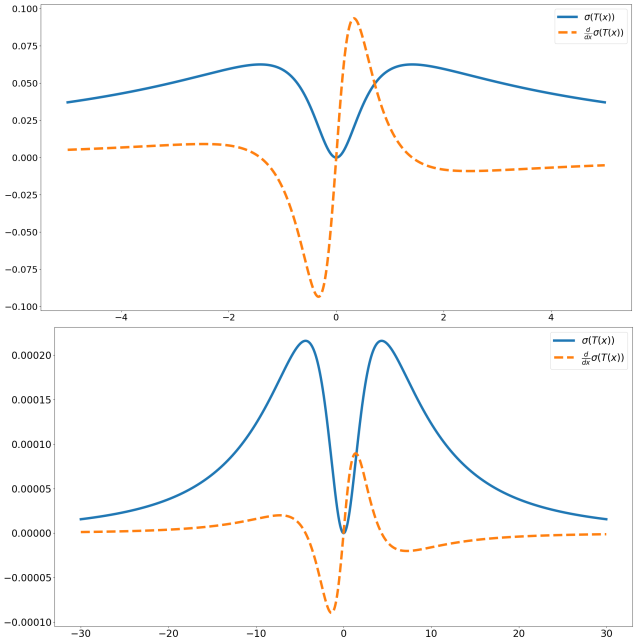

图 4. 对来自 A 的一个点的 x 坐标，σ （实线）强度及其导数 $\frac{\partial\sigma}{\partial x}$（虚线）分别在 3000 个随机三角形（上）和四面体（下）上取平均。

定义 $\sigma(A)$ 中的强度 4.3 可以处理定向秩分布中的额外符号，并使我们能够证明引理 3.7 的类似结论，且时间复杂度相近 $h = n$。

引理 *4.6*（*OCD* 上的度量）。利用定义 *4.3* 中的强度 σ，我们考虑集合 $M(C;\ A\cup\{0\})$ 中可置换的 $m-n+1$ 列上的瓶颈距离 W_∞，以及集合 $m-n+1$ 无标记点 $\left(v、\ {}^{s}_{c_n}\sigma(A\cup\{\underline{0},q\})\right)\in\mathbb{R}^{n+1}$ 上的瓶颈距离。对于另一个 $OCD'=[D(A'\cup\{0\});\ M(C';\ A'\cup\{0\})]$，以及作用于 $D(A\cup\{0\})$ 和 $M(C;\ A\cup\{0\})$ 的前 $n-1$ 行的指标 $1,\ldots,n-1$ 的任意置换 $\xi\in S_{n-1}$，令 $d_o(\xi)=\max\{L,W\}$，

$$where\ L=L_\infty\Big(\xi(D(A\cup\{0\})),D(A'\cup\{0\})\Big),$$

$$W=W_\infty\Big(\xi(M(C;A\cup\{0\})),M(C';A'\cup\{0\})\Big).$$

那么，$M_\infty(\mathrm{OCD},\mathrm{OCD}')=\min_{\xi\in S_{n-1}} d_o(\xi)$ 满足定向中心分布（OCDs）上的所有度量公理，计算时间为 $O((n-1)!(n^2+m^{1.5}\log^n m))$。

系数 ${}^{1}_{c_n}$ 将 Lipschitz 常数 c_n 的 σ 归一化为1，从而使距离的变化至多为 2ε，当点在其 ε-邻域内扰动时亦然。等式 $\mathrm{SCD}(C)=\mathrm{SCD}(C')$ 可解释为无序集合之间的双射 $\mathrm{SCD}(C)\to\mathrm{SCD}(C')$ 匹配所有 OCD，检测这一点的最佳方法是检查定理 4.7 中这两个SCD之间的度量是否为0。

定理 4.7 (SCD的完备性和连续性)。***(a)***单纯形中心化分布 $\mathrm{SCD}(C)$ 在定义 *4.1* 中是点云 $C\subset\mathbb{R}^n$ 的 m 无标记点的完备等距不变量，且这些点的质心位于原点$0\in\mathbb{R}^n$，其计算时间为 $O(m^n/(n-4)!)$。

因此，任意点云 $C,C'\subset\mathbb{R}^n$ 通过刚体运动（分别为等距变换）相关，当且仅当当且仅当$\mathrm{SCD}(C)=\mathrm{SCD}(C')$（$\mathrm{SCD}(C)$等于$\mathrm{SCD}(C')$ 或其镜像$\mathrm{SCD}(C')$，分别如此）。对于任意 m 点云 $C,C'\subset\mathbb{R}^n$，令$\mathrm{SCD}(C)$ 和 $\mathrm{SCD}(C')$ 由 $k=\binom{m}{n-1}$ OCDs组成。

(b) 对于 $k\times k$ 由度量计算得到的成本矩阵 M_∞在OCDs 中的 $\mathrm{SCD}(C)$ 和$\mathrm{SCD}(C')$之间，LAC 根据定义*3.8* 满足 SCDs 上的所有度量公理，所需时间为 $O((n-1)!(n^2+m^{1.5}\log^n m)k^2+k^3\log k)$。

(c) 设 SCD的数量达到最大值 $l\le k$，合并相同的 OCD后。根据定义 3.9，EMD 在 *SCD*上满足所有度量公理，且可在时间内计算$O((n-1)!(n^2+m^{1.5}\log^n m)l^2+l^3\log l)$。

(d) 设 C' 由一个点云 $C\subset\mathbb{R}^n$ 经过扰动得到，其中每个点的扰动幅度不超过其 ε-邻域。则$\mathrm{SCD}(C)$在LAC 和EMD 度量下的变化至多为 2ε。

若我们将 $l\le k=\binom{m}{n-1}=m(m-1)\ldots(m-n+2)/n!$ 估算为 $O(m^{n-1}/n!)$，定理 4.7(b,c) 给出的 SCD 上度量计算时间为$O(n(m^{n-1}/n!)^3\log m)$，对于 $n=2$，该时间为$O(m^3\log m)$；对于 $n=3$，则为 $O(m^6\log m)$。

尽管上述时间估计只是非常粗略的上界，但 $O(m^3\log m)$ 在 $\mathbb{R}^2$ 上的运行时间快于以往唯一的运行时间 $O(m^5\log m)$，后者通过在等距变换中取最小值的豪斯多夫距离比较 m点点云 [17]。

定义 *4.8*（中心化距离矩 *CDM*）。对于任意 m 点云 $C\subset\mathbb{R}^n$，设 $A\subset C$ 是$n-1$ 无序点的一个子集。中心化点间距离列表 *CID(A)* 是由 A 中各点之间所有 $(n-1)$ $(n-2)$ 个两两距离按递增顺序排列后，再接上从 A 到原点 *0* 的 $n-1$ 个递增距离所构成的列表。对于定义 *4.1* 中矩阵 $M(C;\ A\cup\{0\})$ 的 $(n+1)\times(m-n+1)$ 每一列，计算前 $n-1$ 个距离的平均值。将这些平均值按递增顺序排列，接上从 $M(C;\ A\cup\{0\})$ 的第 n 行得到的递增距离列表 $|q-0|$，并再接上向量 ${}^{s}_{c_n}\sigma(A\cup\{0\})$ 中取自 $M(C;\ A\cup\{0\})$ 第 $(n+1)$ 行的符号 s 所对应的递增值。令 $\vec{M}(C;\ A)\in\mathbb{R}^{3(m-n+1)}$ 为最终向量。

这一对 $[CID(A);\ \vec{M}(C;\ A)]$ 是平均中心化向量 $ACV(C;A)$，视为长度为$n(n-1)_2+3(m-n+1)$的向量。所有$\binom{m}{n-1}$ 无序子集 $A\subset C$ 对应的 $ACV(C;A)$ 构成无序集合，即平均中心化分布 $ACD(C)$。中心化距离矩 $CDM(C;l)$ 是 $ACD(C)$ 的第 l 阶矩（针对 $l\ge 3$ 标准化），其中 ACD 被视为由 $\binom{m}{n-1}$ 个向量构成的概率分布，并对每个坐标分别计算。

例4.9（图3中点云的 CDM）。（a）对于 $n=2$，以及由直角三角形顶点 $p_1=(0,0)$、$p_2=(4,0)$、$p_3=(0,3)$ 构成的点云 $R\subset\mathbb{R}^2$ $m=3$，如图3（中），我们继续例4.2(a)，并将 $OCD(R;p_1)=[0,\begin{pmatrix}4&3\\4&3\\0&0\end{pmatrix}]$ 展平为向量

$ACV(R;p_1)=[0;3,4;3,4;0,0]$，其长度为 $\binom{n}{2}+3(m-n+1)=7$，四个部分（$1+2+2+2=7$）按递增顺序排列；对 p_2,p_3 也同样处理。平均中心化分布可以写成行无序的 3×7 矩阵：$ACD(R)=\begin{pmatrix}0&3&4&3&4&0&0\\4&4&5&0&3&0&-6/c_2\\3&3&5&0&4&0&6/c_2\end{pmatrix}$。

R 上三角形的面积为 6，可通过 $c_2=2\sqrt{3}$ 归一化，得到 $6/c_2=\sqrt{3}$，见 [40, 第 4] 节。一阶矩为 $CDM(R;1)=\frac{1}{3}(7;10,14;3,11;0)$。

（b）对于 $n=2$ 以及图3（右）中正方形的 $m=4$ 个 $S\subset\mathbb{R}^2$ 顶点组成的点云，例4.2(a)将 $SCD(R)$ 计算为一个 $OCD=[1,\begin{pmatrix}\sqrt{2}&\sqrt{2}&2\\1&1&1\\-&+&0\end{pmatrix}]$，其展平为 $ACV=(1;\sqrt{2},\sqrt{2},2;1,1,1;-\frac{1}{2},1\,2,0)\in\mathbb{R}^{10}$，其中 $1\,2$ 是由顶点 (0, 0)、(1, 0)、(0, 1) 构成的三角形的面积。

推论4.10（CDM 上连续度量的计算时间）。对于任意由 m 个无标记点组成的点云 $C\subset\mathbb{R}^n$，定义 4.8 中的中心化距离矩 $CDM(C;l)$ 可在 $O(m^n/(n-4)!)$ 时间内计算。CDM 上的度量 L_∞ 需要 $O(n^2+m)$ 时间，并且 $EMD(SCD(C),SCD(C'))\geq|CDM(C;1)-CDM(C';1)|_\infty$ 成立。

5. 实验与未来工作的讨论

本文倡导对任何数据采取科学的方法，这一点可由问题 1.1 作为例证：在点云上施加刚体运动，可以替换为针对其他数据的另一种等价关系。公理等科学原则应始终得到遵守。只有（1.1b）中的第一个重合公理保证数据没有重复。如果三角不等式存在任何加性误差而不成立，聚类结果就可能被预先决定 [52]。

臭名昭著的 $m!$ 挑战—— m 问题 1.1 中无标记点的问题已由定理 $\mathbb{R}^n$ 4.7解决；此外，借助单纯形的全新强度来平滑由难以处理的定理4.4所导致的行列式符号，也能在刚体运动意义下解决该问题。

上述结果充分说明，未来的研究重点应从针对问题的实验性尝试转向更高层次的任务，例如利用具有1.1 中所述完全不变量预测刚体（如晶体材料）的性质；对于所有可能的数据，该不变量均能保证无假阴性且无假阳性，因为任何实验都无法胜过已证明的 100% 保证。

为解决仅能比较具有固定数量 m 个点的点云这一局限，地球移动距离（EMD）可以连续比较任意规模的分布（SDD或SCD）。在定义EMD 而非瓶颈距离 W_∞ 用于 $m-h$（或 $m-n+1$）矩阵的列时（定义3.3和4.1），时间复杂度会从$O(m^{1.5}\log m)$ 增加到 $O(m^3\log m)$，但由于最后一步的时间复杂度接近立方级，总耗时仍然不变。

实际应用中的运行时间会因若干原因而更短。首先，$\mathbb{R}^3$ 中任意刚体的形状（等距类）仅由 $m=4$ 个处于一般位置的带标记点决定。即使点没有标记，几十个角点或特征点也足以充分表示刚体的形状。其次，定理 l 4.7 中的关键规模（不同定向中心分布的数量）通常小于 m，对于对称物体尤其如此，见$l=1<m=4$ 例4.2。由于具备完备性和连续性，SCD 不变量优于其他不变量。

以往的研究 [72, 73] 使用较简单的逐点距离分布（PDD），完成了对全球最大真实材料数据库中所有 660K+ 种周期晶体的 200B+次成对比较。该实验仅用一台普通台式电脑，耗时不过几天，并确立了晶体等距原理：任何真实周期晶体都可以由其原子中心的几何结构唯一确定，而无需知道化学元素。因此，任何原子的类型都可以通过其与原子邻居之间的距离可靠地重建。

新的不变量使我们能够更深入地比较更高层次周期晶体中的原子云。图5 使用+ 不变量，展示了从剑桥结构数据库（CSD）中全部 10K+种晶体药物提取的所有 300KSDV，其中包括中心原子在内的 $5+1$ 个原子。未来的映射将采用更强的不变量。

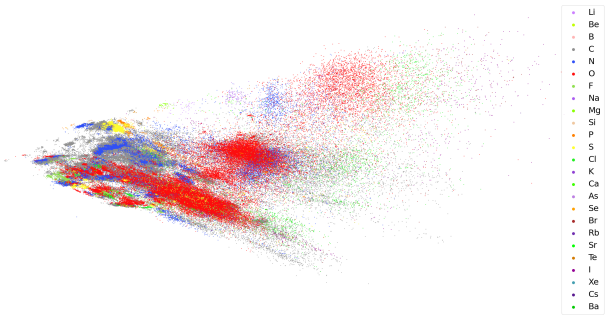

图 5. CSD 中全部 10K+ 种药物的所有 300K+ 个原子云的 SDV 两个主方向，按 25 种元素着色。

本研究获得皇家工程院奖学金 IF2122/186 以及 EPSRC 项目资助 EP/R018472/1、EP/X018474/1。我们感谢利物浦（英国）数据科学理论与应用组的全体成员和所有审稿人提出的宝贵建议。

参考文献

[1] Naveed Akhtar 和 Ajmal Mian。《计算机视觉中深度学习遭受对抗性攻击的威胁：综述》。IEEE Access，6:14410–14430，2018年。2[2] Olga Anosova 和 Vitaliy Kurlin。《周期几何与拓扑导论》。arXiv:2103.02749。2[3] Olga Anosova 和 Vitaliy Kurlin。《周期点集的等距分类》。载于《离散几何与数学形态学》论文集，2021年。2[4] Olga Anosova 和 Vitaliy Kurlin。《周期晶体连续度量的算法》。arxiv:2205.15298，2022年。2[5] Olga Anosova 和 Vitaliy Kurlin。《周期序列的密度函数》。《计算机科学讲义》（DGMM论文集），2022年。2[6] O Anosova 和 V Kurlin。《连续事件周期序列的密度函数》。arXiv:2301.05137，2023年。2[7] Jonathan Balasingham、Viktor Zamaraev 和 Vitaliy Kurlin。《使用逐点距离分布对晶体进行紧凑图表示》。arXiv:2212.11246，2022年。2[8] Serge Belongie、Jitendra Malik 和 Jan Puzicha。《利用形状上下文进行形状匹配与目标识别》。Transactions PAMI，24(4):509–522，2002年。2[9] Mireille Boutin 和 Gregor Kemper。《根据距离或面积分布重建 n 点配置》。Adv. Appl. Math.，32(4):709–735，2004年。1，4[10] Peter Brass 和 Christian Knauer。《检验 d 维点集的全等性》。载于 SoCG，第310–314页，2000年。2[11] Peter Brass 和 Christian Knauer。《检验一般三维物体的全等性与对称性》。计算几何，27(1):3–11，2004年。2[12] Matthew J Bright、Andrew I Cooper 和 Vitaliy A Kurlin。《欢迎来到三维格的连续世界》。arxiv:2109.11538，2021年。2[13] Matthew J Bright、Andrew I Cooper 和 Vitaliy A Kurlin。《二维格的地理风格地图》。《晶体学报》A辑，79(1):1–13，2023年。2[14] Michael M Bronstein、Joan Bruna、Taco Cohen 和 Petar Veli˘ckovi´c。《几何深度学习：网格、群、图、测地线与规范》。arXiv:2104.13478，2021年。2[15] Michael M Bronstein、Joan Bruna、Yann LeCun、Arthur Szlam 和 Pierre Vandergheynst。《几何深度学习：超越欧几里得数据》。IEEE Signal Processing Magazine，34(4):18–42，2017年。2[16] Paul Chew、Dorit Dor、Alon Efrat 和 Klara Kedem。《d 维空间中的几何模式匹配》。离散与计算几何，21(2):257–274，1999年。2[17] Paul Chew、Michael Goodrich、Daniel Huttenlocher、Klara Kedem、Jon Kleinberg 和 Dina Kravets。《欧几里得运动下的几何模式匹配》。计算几何，7(1-2):113–124，1997年。2，7[18] Paul Chew 和 Klara Kedem。《几何模式匹配问题的改进》。载于斯堪的纳维亚算法理论研讨会，第318–325页，1992年。2[19] Matthew J Colbrook、Vegard Antun 和 Anders C Hansen。《计算稳定且精确的神经网络之难：深度学习的障碍与 Smale第18问题》。美国国家科学院院刊，119(12):e2107151119，2022年。2

[20] Yinpeng Dong、廖方舟、庞天宇、苏航、朱军、胡晓林和李建国。利用动量增强对抗攻击。载于《计算机视觉与模式识别》，第9185–9193页，2018年。2[21] H Edelsbrunner、T Heiss、V Kurlin、P Smith和M Wintraecken。周期点集的密度指纹。载于SoCG论文集，第

32 1 32 16, 2021 2 : – : 。

[22] Alon Efrat、Alon Itai和Matthew J Katz。几何方法有助于瓶颈匹配及相关问题。Algorithmica，31(1):1–28，2001年。5[23] Yury Elkin。用于k近邻搜索的新型压缩覆盖树（博士论文）。arxiv: *2205 10194*, 2022 3 。

[24] Y. Elkin和V. Kurlin。树状图的合并图及其稳定性。载于MFCS论文集， 2020 2 。

[25] Y. Elkin和V. Kurlin。通过扩展

0 9 17 2021 2 d持久性合

[26] 并图，对射影扰动点云进行等距不变形状识别。Mathematics，( )，。Michael L Fredman和Robert Endre Tarjan。斐波那契堆及其在改进网络优化算法中的应用。Journal ACM，34:596–615，1987年。4，5[27] Michael T Goodrich、Joseph SB Mitchell和Mark W Orletsky。在刚体运动下进行近似几何模式匹配。Transactions PAMI，21:371–379，1999年。2[28] Cosmin Grigorescu和Nicolai Petkov。用于形状滤波器和形状识别的距离集。IEEE图像处理汇刊，12(10):1274–1286，2003年。2[29] Darij Grinberg和Peter J Olver。n体矩阵及其行列式。SIAM应用代数与几何杂志，3(1):67–86，2019年。2[30] Chuan Guo、Jacob Gardner、Yurong You、Andrew Gordon Wilson和Kilian Weinberger。简单的黑盒对抗攻击。载于ICML，第2484–2493页，2019年。2[31] Felix Hausdorff。维数与 ¨外β测度β。Mathematische Annalen，79(2):157–179，1919年。2[32] Snir Hordan、Tal Amir、Steven J Gortler和Nadav Dym。用于欧几里得图的完备神经网络。arXiv:2301.13821，2023年。2[33] Daniel Huttenlocher、Gregory Klanderman和William Rucklidge。使用豪斯多夫距离比较图像。Transactions PAMI，15:850–863，1993年。2[34] Ernest Sydney Keeping。统计推断导论。Courier Corporation，

1995 3 。Vitaliy Kurlin。三维晶格的

[35] 完全等距分类。arxiv:2201.10543，2022年。2[36] Vitaliy Kurlin。欧几里得等距下有限无标记点云的可计算完全不变量。arXiv:2207.08502，2022年。2[37] Vitaliy Kurlin。有限序列与一周期序列等距类上可精确计算的连续度量。arxiv:2205.04388，2022年。2[38] Vitaliy Kurlin。二维格的数学。计算数学基础，第

1 59, 2022 2 –页。

[39] Vitaliy Kurlin。带度量和测度的有限空间的单纯形距离分布。arXiv:2303.14161，2023年。2，3，5[40] Vitaliy Kurlin。单纯形强度是对欧几里得无标记点云进行连续等距分类的关键。arXiv:2303.13486，2023年。2，3，6，8

[41] Cassidy Laidlaw和Soheil Feizi。函数式对抗攻击。神经信息处理系统进展，

32, 2019 2。

[42]

Sushovan Majhi、Jeffrey Vitter和Carola Wenk。欧几里得空间中Gromov–Hausdorff距离的近似计算。arXiv:1912.13008，2019年。2[43] Siddharth Manay、Daniel Cremers、Byung-Woo Hong、Anthony Yezzi和Stefano Soatto。用于形状匹配的积分不变量。IEEE模式分析与机器智能汇刊，

28 1602 1618, 2006 2 : – 。Facundo

[44]

Memoli。Gromov–Wasserstein距离及其在对象匹配中的度量方法。计算数学基础，11(4):417–487，2011年。2[45] Facundo M´emoli和Tom Needham。度量测度空间的距离分布与逆问题。应用数学研究，

149 4 943 1001, 2022 2 ( ): – 。Facundo Memoli 、 Zane Smith 和 Zhengchao Wan。超度量空间之间的Gromov–Hausdorff距离：其结构与计算。arXiv:

[46]

2110 03136, 2021 2 。Marco

[47]

M Mosca和Vitaliy Kurlin。基于Voronoi的任意晶体晶格间相似性距离。Crystal Research and Technology，

55 5 1900197, 2020 2 ( ): 。Jigyasa

[48]

Nigam、Michael J Willatt和Michele Ceriotti。用于分子哈密顿量和n中心原子尺度性质的等变表示。化学物理学杂志，156(1):014115，2022年。2[49] François Pomerleau、Francis Colas、Roland Siegwart等。移动机器人点云配准算法综述。机器人学基础与趋势，4:1–104，2015年。1[50] Helmut Pottmann、Johannes Wallner、Qi-Xing Huang和Yong-Liang Yang。用于鲁棒几何处理的积分不变量。计算机辅助几何设计，26:37–60，2009年。2[51] Sergey N Pozdnyakov、Michael J Willatt、Albert P Bart´ok、Christoph Ortner、G´abor Cs´anyi和Michele Ceriotti。原子结构表示的不完备性。物理评论快报，125:166001，2020年。5[52] Stefan Rass、Sandra K¨onig、Shahzad Ahmad和Maksim Goman。将欧几里得空间度量化，以期获得点云中所需的距离关系。arXiv:2211.03674，2022年。8[53] Blaine Rister、Mark A Horowitz和Daniel L Rubin。利用不变关键点进行体积图像配准。图像处理汇刊，26(10):4900–4910，2017年。2[54] Jakob Ropers、Marco M Mosca、Olga D Anosova、Vitaliy A Kurlin和Andrew I Cooper。利用晶体结构的连续等距不变量快速预测晶格能量。载于国际数据密集型领域数据分析与管理会议，第

178 192, 2022 2 –页。Y.

[55]

Rubner、C. Tomasi和L. Guibas。地球移动距离作为图像检索的度量。国际计算机视觉杂志，40(2):99–121，2000年。5[56] Uwe Schmidt和Stefan Roth。学习旋转感知特征。载于CVPR，第2050–2057页，2012年。1[57] Felix Schmiedl。Gromov–Hausdorff距离的计算方面及其在非刚性形状匹配中的应用。离散与计算几何，

57 854 880, 2017 2 : – 。

[58]

Isaac Schoenberg。关于Maurice Frechet的文章《论可将度量空间公理化定义为可向量地映射到希尔伯特空间的一类空间》。数学年刊，第724–732页，1935年。2[59] Jingnan Shi、Heng Yang 和 Luca Carlone。Robin：一种基于图论的方法，利用不变量在鲁棒估计中排除离群值。载于ICRA，第 13820–13827 页，2021年。2[60]Anthony Simeonov、Yilun Du、Andrea Tagliasacchi、Joshua B Tenenbaum、Alberto Rodriguez、Pulkit Agrawal 和 Vincent Sitzmann。神经描述符场：用于操作的 SE(3) 等变对象表示。载于 ICRA，第 6394–6400 页，2022年。2[61] Manfred Sippl 和 Harold Scheraga。Cayley-Menger 坐标。《美国国家科学院院刊》，83:2283–2287，1986年。6[62] Philip Smith 和 Vitaliy Kurlin。具有相同一维持久性的点集族。arxiv:2202.00577，2022年。2[63] Phil Smith 和 Vitaliy Kurlin。三维周期点集的 k 阶 Voronoi 区域实用算法。载于《计算机科学讲义》（ISVC 会议论文集），第 13599 卷，第 377–391 页，2022年。2[64] Riccardo Spezialetti、Samuele Salti 和 Luigi Di Stefano。无需监督学习有效的等变三维描述符。载于 ICCV，第 6401–6410 页，2019年。2[65] Jian Sun、Maks Ovsjanikov 和 Leonidas Guibas。基于热扩散的简洁且可证明具有信息性的多尺度特征。《计算机图形学论坛》，28:1383–1392，2009年。2[66] Matthew Toews 和 William M Wells III。利用三维尺度不变特征进行高效且鲁棒的模型到图像配准。《医学图像分析》，17(3):271–282，2013年。2[67] Aikaterini Vriza、Ioana Sovago、Daniel Widdowson、Peter Wood、Vitaliy Kurlin 和 Matthew Dyer。分子集变换器：关注剑桥结构数据库中的共晶。《数字发现》，1:834–850，2022年。2[68] Yue Wang 和 Justin M Solomon。深度最近点：学习点云配准的表示。载于 CVPR 论文集，第 3523–3532 页，2019年。1[69] E Weisstein。三角形。https://mathworld. wolfram. com。1[70] Carola Wenk。高维空间中的形状匹配。博士论文，柏林自由大学，2003年。2[71] D Widdowson 和 V Kurlin。周期点集的逐点距离分布。arxiv:2108.04798，2021年。2[72] Daniel Widdowson 和 Vitaliy Kurlin。消解周期晶体的数据歧义。《神经信息处理系统进展》（NeurIPS），35，2022年。2, 3, 8[73] Daniel Widdowson、Marco M Mosca、Angeles Pulido、Andrew I Cooper 和 Vitaliy Kurlin。周期点集的平均最小距离——用于映射所有周期晶体的基础不变量。《MATCH 数学与计算化学通讯》，87:529–559，2022年。2, 3, 8[74] N Zava。Gromov–Hausdorff 空间无法粗嵌入任何希尔伯特空间。arXiv:2303.04730，2023年。2[75] Q Zhu、J Johal、D Widdowson、Z Pang、B Li、C Kane、V Kurlin、G Day、M Little 和 A Cooper。由预测和结构不变量驱动的类比：计算驱动的介孔氢键有机笼晶体发现。《美国化学学会志》，144:9893–9901，2022年。2[76] Wen Zhu、Lingchao Chen、Beiping Hou、Weihan Li、Tianliang Chen 和 Shixiong Liang。基于尺度不变点特征直方图的避雷器点云配准。《科学报告》，12(1):1–13，2022年。2