

Tensor rank와 spherical harmonics의 ℓ

Lecture 12 보충 노트: Cartesian tensor를 SO(3) irrep으로 보는 법

한 문장 요약. Tensor rank는 Cartesian 인덱스 개수이고, ℓ 은 회전할 때 서로 섞이는 최소 블록의 번호이다. 일반 rank- r tensor는 여러 ℓ 블록으로 쪼개지고, symmetric traceless rank- r 조각이 $\ell = r$ 에 해당한다.

1. 두 언어가 다르다

Cartesian tensor 언어	SO(3) irrep 언어
인덱스가 몇 개인가를 센다. v_i : rank 1, T_{ij} : rank 2 일반 rank- r tensor는 보통 reducible하다.	회전 아래에서 어떻게 섞이는가를 본다. $0, 1, 2, \dots$ 또는 $0e, 1o, 2e, \dots$ 각 ℓ 블록은 irreducible하다.

2. Group과 irrep

여기서 group은 가능한 대칭 변환들의 모음이다. 3차원 회전의 group은 $SO(3)$ 이고, 각 원소는 하나의 회전 행렬 R 이다. Representation은 각 회전 R 을 어떤 feature vector에 작용하는 행렬 $D(R)$ 로 바꾸는 규칙이다. Irreducible representation, 줄여서 irrep은 더 작은 회전-담힌 블록으로 쪼갤 수 없는 representation이다. $SO(3)$ 의 irreps가 바로 $\ell = 0, 1, 2, \dots$ 이고, e3nn의 $0e, 1o, 2e$ 같은 블록은 이 irreps에 parity label e/o 를 붙인 것이다.

$$\ell \text{ 하나의 성분 수} = 2\ell + 1.$$

ℓ	성분 수	직관
0	1	scalar
1	3	vector처럼 회전
2	5	symmetric traceless rank-2 tensor처럼 회전
3	7	symmetric traceless rank-3 tensor처럼 회전

3. rank-2 예시가 핵심이다

벡터 두 개로 만든 물체

$$T_{ij} = a_i b_j$$

는 Cartesian rank-2 tensor이고 성분이 $3 \times 3 = 9$ 개이다. 하지만 회전 표현으로 보면 세 블록으로 나뉜다.

$$\underbrace{1 \otimes 1}_{9 \text{ components}} = \underbrace{0}_1 \oplus \underbrace{1}_3 \oplus \underbrace{2}_5.$$



각 조각은 다음처럼 생각하면 된다.

$$\begin{aligned} \ell = 0: & \quad \text{tr}(T) = T_{kk} = \vec{a} \cdot \vec{b}, \\ \ell = 1: & \quad T_{ij} - T_{ji} \quad \text{즉 } \vec{a} \times \vec{b} \text{와 같은 정보,} \\ \ell = 2: & \quad \frac{1}{2}(T_{ij} + T_{ji}) - \frac{1}{3}\text{tr}(T)\delta_{ij}. \end{aligned}$$

따라서 “rank-2 tensor”와 “ $\ell = 2$ ”는 같은 말이 아니다. 일반 rank-2 tensor 안에 $\ell = 0, 1, 2$ 가 모두 들어 있고, 그중 symmetric traceless 부분만 $\ell = 2$ 이다.

4. 쪼개지는 방식은 정해져 있다

어떤 ℓ 블록들이 나오지는 회전군 표현론이 정한다. 선택 사항이 아니다.

$$\ell_1 \otimes \ell_2 = |\ell_1 - \ell_2| \oplus (|\ell_1 - \ell_2| + 1) \oplus \dots \oplus (\ell_1 + \ell_2).$$

예를 들면

$$\begin{aligned} 1 \otimes 1 &= 0 \oplus 1 \oplus 2, \\ 2 \otimes 1 &= 1 \oplus 2 \oplus 3, \\ 2 \otimes 2 &= 0 \oplus 1 \oplus 2 \oplus 3 \oplus 4. \end{aligned}$$

다만 각 블록 안의 basis, normalization, sign convention은 정할 수 있다. 그래서 e3nn에서 dot product가 정확히 $\vec{a} \cdot \vec{b}$ 가 아니라

$$\frac{\vec{a} \cdot \vec{b}}{\sqrt{3}}$$

처럼 나올 수 있다. 물리적 내용은 같고 좌표계 convention만 다르다.

5. Spherical harmonics와의 연결

Spherical harmonics $Y_\ell^m(\hat{r})$ 는 각 ℓ irrep의 표준적인 basis이다. 고정된 ℓ 에 대해 $m = -\ell, \dots, \ell$ 이므로 총 $2\ell + 1$ 개가 있다.

회전하면 이 $2\ell + 1$ 개끼리만 섞인다.

$$Y_\ell(R\hat{r}) = D^\ell(R)Y_\ell(\hat{r}).$$

이 말은 $\ell = 2$ spherical harmonics 다섯 개가 회전해도 $\ell = 0$ 이나 $\ell = 1$ 로 새지 않는다는 뜻이다. 이 성질 때문에 e3nn은 feature를

$$0e, 1o, 2e, 3o, \dots$$

같은 블록으로 들고 다닌다.

6. e3nn에서는 어떻게 쓰나

e3nn의 feature 선언

$$\text{"32x0e + 8x1o + 8x2e"}$$

는 다음 뜻이다.

블록	개수	블록당 성분	총 성분
0e	32	1	32
1o	8	3	24
2e	8	5	40
합계			96

더 높은 tensor 정보를 쓰고 싶으면 높은 ℓ 채널을 추가한다.

$$\text{"32x0e + 8x1o + 8x2e + 4x3o + 4x4e"}$$

계산량은 커진다. 그래서 실제 molecular GNN에서는 보통 $\ell_{\max} = 2$ 또는 3 정도를 많이 쓴다.

기억할 것. Cartesian rank는 원래 좌표계의 인덱스 개수이다. ℓ 은 회전 아래에서 닫혀 있는 최소 블록이다. e3nn은 일반 tensor를 그대로 들고 다니기보다, 이 최소 블록들로 분해해서 계산한다.