Reflection Matrix Note

FanmingL

2018 年 11 月 29 日

1 反射、旋转的矩阵表示

1.1 二维世界中的旋转

对于某一点 $(x,y)^T$，绕原点逆时针旋转 θ 角，新的点 $(x',y')^T$ 可以表示为

$$\begin{aligned} x' &= x\cos\theta - y\sin\theta \\ y' &= x\sin\theta + y\cos\theta \end{aligned} \tag{1}$$

可以写为矩阵形式，

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \tag{2}$$

实际上我们可以把上述过程，用复数如下表示

$$\begin{aligned} (x'+iy') &= (\cos\theta + i\sin\theta)(x+iy) \\ &= x\cos\theta - y\sin\theta + i(x\sin\theta + y\cos\theta) \end{aligned} \tag{3}$$

我们可以对 $\mathbf{1}$ 和 $\mathbf{i}$，作如下解释，建立矩阵和复数的联系

$$\begin{aligned} \mathbf{1} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \mathbf{i} &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{4}$$

可以发现 $\mathbf{1}^2 = \mathbf{1}, \mathbf{1i} = \mathbf{i1} = \mathbf{i}, \mathbf{i}^2 = -\mathbf{1}$ 仍然成立。所以，

$$\begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} = \cos\theta\mathbf{1} + \sin\theta\mathbf{i} \tag{5}$$

更一般的

$$\begin{pmatrix} a & -b \\ b & a \end{pmatrix} = a\mathbf{1} + b\mathbf{i} \tag{6}$$

若将矩阵拓展至复数域，令

$$q = \begin{pmatrix} \alpha & -\beta \\ \bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix} \tag{7}$$

$$\begin{aligned} \alpha &= a + ib \\ \beta &= c + id \end{aligned} \tag{8}$$

其中 $\bar{*}$ 表示共轭。令

$$\begin{aligned} \mathbf{1} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \mathbf{i} &= \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{j} &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix} & \mathbf{k} &= \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{9}$$

于是 q 可写为

$$q = a\mathbf{1} + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k}$$

这便是四元数的基本形式。

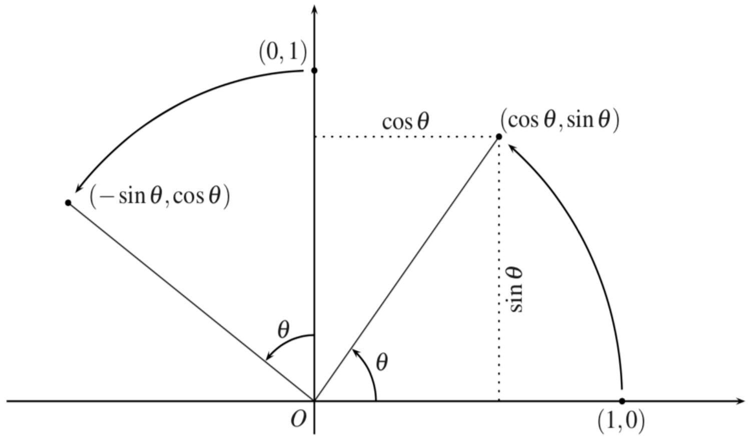

图 1: 旋转示意图

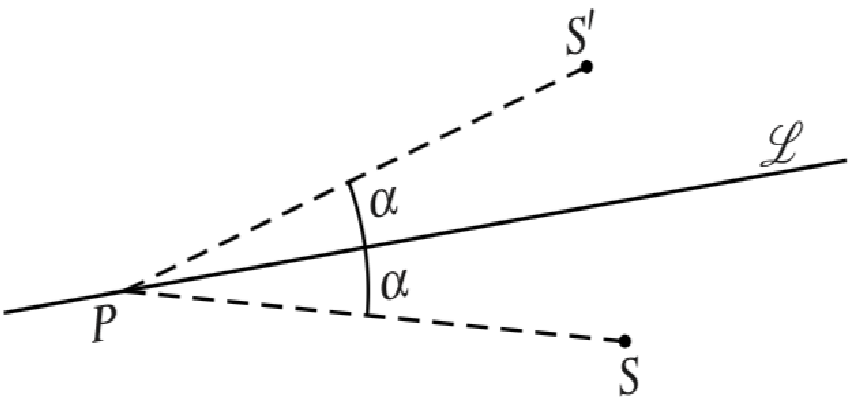

图 2: 反射示意图

1.2 反射的矩阵表示

如图2，$\mathcal{L}$ 为一超平面，$\overrightarrow{SP}$ 为入射光线，$\overrightarrow{S'P}$ 为反射光线，为方便表示，将 $\overrightarrow{SP}$ 写为 $\mathbf{p}$，将 $\overrightarrow{S'P}$ 写作 $\mathbf{p}'$，将 $\overrightarrow{S'S}$ 写为 $\mathbf{s}$。假设 $\mathcal{L}$ 的法向量为 $\mathbf{a}$，对应的单位法向量为 $\hat{\mathbf{a}}$

我们的目的是，已知任意入射光线 $\mathbf{p}$ 和任意法向量 $\mathbf{a}$ 求出射光线 $\mathbf{p}'$ 的表示式。

从图2中，很容易可以看出来

$$\overrightarrow{S'P} = \overrightarrow{S'S} + \overrightarrow{SP}$$

即

$$\mathbf{p}' = \mathbf{s} + \mathbf{p} \tag{10}$$

而 $\triangle\ S'SP$ 为等腰三角形，且 $\mathcal{L}$ 平分 $\angle S'PS$，所以 $\mathcal{L}$ 必然垂直平分 $S'S$，那么 $\overrightarrow{SS'}$ 就是 $\overrightarrow{SP}$ 在 a 方向上的投影的两倍，即

$$\mathbf{s} = -2\frac{\mathbf{p}\cdot\mathbf{a}}{|\mathbf{a}|}\frac{\mathbf{a}}{|\mathbf{a}|} \tag{11}$$

写成向量形式，即

$$\mathbf{s} = -2\frac{\mathbf{a}^T\mathbf{p}}{\mathbf{a}^T\mathbf{a}}\mathbf{a} \tag{12}$$

标量 $\mathbf{a}^T\mathbf{p}$ 和矢量 $\mathbf{a}$ 位置互换得到，

$$\mathbf{s} = -2\frac{\mathbf{a}\mathbf{a}^T}{\mathbf{a}^T\mathbf{a}}\mathbf{p} \tag{13}$$

即

$$\mathbf{s} = -2\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{p} \tag{14}$$

将式14代入至10中，得

$$\mathbf{p}' = -2\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{p} + \mathbf{p} \tag{15}$$

即

$$\mathbf{p}' = \left(I - 2\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T\right)\mathbf{p} \tag{16}$$

令

$$\mathbf{M} = I - 2\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T \tag{17}$$

$\mathbf{M}$ 即反射矩阵。

1.3 反射矩阵的性质

1.3.1 对称性

即 $\mathbf{M} = \mathbf{M}$

$$\begin{aligned}\mathbf{M}^T &= \left(I - 2\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T\right)^T \\ &= I - 2\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T\end{aligned}$$

1.3.2 正交性

即 $\mathbf{M}\mathbf{M}^T = \mathbf{M}^T\mathbf{M} = I$

$$\begin{aligned}\mathbf{M}\mathbf{M}^T &= (I - 2\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T)(I - 2\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T) \\ &= I - 2\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T - 2\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T + 4\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T \\ &= I - 4\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T + 4\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T \\ &= I\end{aligned}$$

1.3.3 行列式的值为-1

$det(\mathbf{M}) = -1$ 首先对 $\hat{\mathbf{a}}$ 进行奇异值分解

$$\hat{\mathbf{a}} = \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T \tag{18}$$

由于 $\hat{\mathbf{a}}$ 为一列向量，所以 Σ 也为一列向量，且行数与 $\hat{\mathbf{a}}$ 一样，并且只有第一行大于零，其余等于零。即

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \tag{19}$$

所以

$$\Sigma^T\Sigma = \sigma_1^2 \tag{20}$$

$$\Sigma\Sigma^T = \begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \tag{21}$$

由于 $\hat{\mathbf{a}}^T\hat{\mathbf{a}} = 1$，所以

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}^T\hat{\mathbf{a}} &= 1 \\ \mathbf{V}\Sigma^T\mathbf{U}^T\mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T &= 1 \\ \mathbf{V}\Sigma^T\Sigma\mathbf{V}^T &= 1 \\ \mathbf{V}\sigma_1^2\mathbf{V}^T &= 1 \\ \sigma_1^2\mathbf{V}\mathbf{V}^T &= 1 \\ \sigma_1^2 &= 1 \end{aligned} \tag{22}$$

所以

$$\Sigma\Sigma^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \tag{23}$$

而

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T &= \mathbf{U}\Sigma\mathbf{V}^T\mathbf{V}\Sigma^T\mathbf{U}^T \\ &= \mathbf{U}\Sigma\Sigma^T\mathbf{U}^T \end{aligned} \tag{24}$$

所以

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= I - 2\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T \\ &= \mathbf{U}\mathbf{U}^T - 2\mathbf{U}\Sigma\Sigma^T\mathbf{U}^T \\ &= \mathbf{U}(I - 2\Sigma\Sigma^T)\mathbf{U}^T \\ det(\mathbf{M}) &= det\left(\mathbf{U}(I - 2\Sigma\Sigma^T)\mathbf{U}^T\right) \\ &= det(\mathbf{U})det(\mathbf{U}^T)det(I - 2\Sigma\Sigma^T) \\ &= det(\mathbf{U}\mathbf{U}^T)det(I - 2\Sigma\Sigma^T) \\ &= det(I)det(I - 2\Sigma\Sigma^T) \\ &= det(I - 2\Sigma\Sigma^T) \end{aligned} \tag{25}$$

由式23得

$$I - 2\Sigma\Sigma^T = \begin{bmatrix} -1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{26}$$

所以 $det(I - 2\Sigma\Sigma^T) = -1$ 即

$$det(\mathbf{M}) = -1 \tag{27}$$

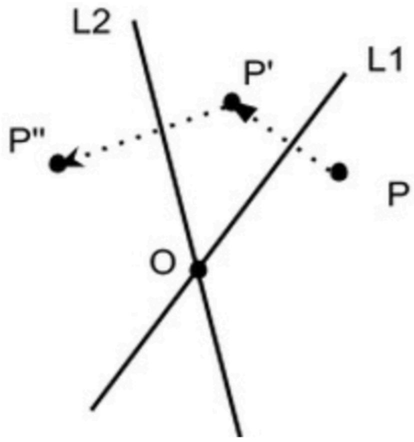

图 3: 两次反射表示旋转

1.4 反射矩阵的组合表示旋转

正交群可以根据其行列式的值分为两类，一类行列式的值为 1，我们称它为特殊正交群，通常表示旋转，另一类行列式的值为-1，表示反射。如上一节所示，$det(\mathbf{M}) = -1$，若我们有两个反射矩阵 $\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2$，那么它们的组合 $\mathbf{M} = \mathbf{M}_1\mathbf{M}_2$ 的行列式显然为 1。那么 $\mathbf{M}$ 就表示一个旋转了。可以两个反射的组合，就能够表示为一个旋转。从几何上可以如图3理解。

1.5 Householder 变换

反射矩阵 $\mathbf{M}$ 也称 Householder 矩阵，该矩阵在线性代数中有很大的意义。其中 Householder 变换，即是最基本的一个。假设我们有一 m 行的列向量 $\mathbf{a}$，将其化为单位向量 $\hat{\mathbf{a}} = \frac{\mathbf{a}}{\|\mathbf{a}\|}$，用向量 $\mathbf{u} = \mathbf{a} - \|\mathbf{a}\|\mathbf{e}$ 构造 householder 矩阵，其中 $\mathbf{e}$ 为一单位向量。

$$\begin{aligned}
\mathbf{M} &= I - 2\frac{(\mathbf{a} - \|\mathbf{a}\|\mathbf{e})(\mathbf{a} - \|\mathbf{a}\|\mathbf{e})^T}{(\mathbf{a} - \|\mathbf{a}\|\mathbf{e})^T(\mathbf{a} - \|\mathbf{a}\|\mathbf{e})} \\
&= I - 2\frac{(\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{e})(\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{e})^T}{(\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{e})^T(\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{e})} \\
&= I - 2\frac{\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T - \hat{\mathbf{a}}\mathbf{e}^T - \mathbf{e}\hat{\mathbf{a}}^T + \mathbf{e}\mathbf{e}^T}{\hat{\mathbf{a}}^T\hat{\mathbf{a}} - 2\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e} + \mathbf{e}^T\mathbf{e}} \\
&= I - 2\frac{\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T - \hat{\mathbf{a}}\mathbf{e}^T - \mathbf{e}\hat{\mathbf{a}}^T + \mathbf{e}\mathbf{e}^T}{2 - 2\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e}} \\
&= I + \frac{\hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T - \hat{\mathbf{a}}\mathbf{e}^T - \mathbf{e}\hat{\mathbf{a}}^T + \mathbf{e}\mathbf{e}^T}{\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e} - 1} \\
&= \frac{1}{\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e} - 1}\left((\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e} - 1)I + \hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T - \hat{\mathbf{a}}\mathbf{e}^T - \mathbf{e}\hat{\mathbf{a}}^T + \mathbf{e}\mathbf{e}^T\right)
\end{aligned} \tag{28}$$

于是 $\mathbf{M}$ 对 $\mathbf{a}$ 作用的结果为

$$\begin{aligned}\mathbf{Ma} &= \frac{\|\mathbf{a}\|}{(\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e}-1)}\left((\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e}-1)I + \hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T - \hat{\mathbf{a}}\mathbf{e}^T - \mathbf{e}\hat{\mathbf{a}}^T + \mathbf{e}\mathbf{e}^T\right)\hat{\mathbf{a}} \\ &= \frac{\|\mathbf{a}\|}{(\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e}-1)}\left((\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e}-1)\hat{\mathbf{a}} + \hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T\hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{a}}\mathbf{e}^T\hat{\mathbf{a}} - \mathbf{e}\hat{\mathbf{a}}^T\hat{\mathbf{a}} + \mathbf{e}\mathbf{e}^T\hat{\mathbf{a}}\right) \\ &= \frac{\|\mathbf{a}\|}{(\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e}-1)}\left((\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e}-1)\hat{\mathbf{a}} + \hat{\mathbf{a}} - \hat{\mathbf{a}}\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e} - \mathbf{e} + \mathbf{e}\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e}\right) \\ &= \frac{\|\mathbf{a}\|}{(\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e}-1)}\left(-\mathbf{e} + \mathbf{e}\hat{\mathbf{a}}^T\mathbf{e}\right) \\ &= \|\mathbf{a}\|\mathbf{e}\end{aligned} \tag{29}$$

可以看出用可以用 $\mathbf{M}$ 将 $\mathbf{a}$ 反射到任意一个方向 $\mathbf{e}$ 上，并保持范数不变。若 $\mathbf{e} = \mathbf{e}_i$，其中 $\mathbf{e}_i$ 为第 i 列为 1，其余元素为零的列向量，那么最后 $\mathbf{Ma}$ 显然也是第 i 列为 $\|\mathbf{a}\|$ 的向量。

那么如何从几何的角度去理解 Householder 变换呢，构建 Householder 矩阵的过程实际上是构建以 $\mathbf{u}$ 为法向量的平面的过程，对向量 $\mathbf{a}$ 的变换即关于该平面的反射。那么这里我们构造了一个怎样的平面呢?

我们构建的法向量 $\mathbf{u} = \mathbf{a} - \|\mathbf{a}\|\mathbf{e}$ 是由向量 $\mathbf{a}$ 和与之模长相等的向量 $-\|\mathbf{a}\|\mathbf{e}$ 相加构成的，三个向量构成一个三角形，由于 $\mathbf{a}$ 和 $-\|\mathbf{a}\|\mathbf{e}$ 模长相等，所以该三角形为等腰三角形，而等腰三角形的底边 $\mathbf{u}$ 的中垂线必然经过其对角，且 $\mathbf{a}$ 和 $-\|\mathbf{a}\|\mathbf{e}$ 关于该中垂线对称。所以我们构造的平面恰好是 $\mathbf{a}$ 和 $-\|\mathbf{a}\|\mathbf{e}$ 的对称平面，即 $\mathbf{a}$ 和 $\|\mathbf{a}\|\mathbf{e}$ 的反射平面。

1.6 基于 Householder 变换的 QR 分解

QR 分解即

$$\mathbf{A} = \mathbf{QR} \tag{30}$$

其中 $\mathbf{Q}$ 为正交矩阵，$\mathbf{R}$ 是上三角矩阵，除了对角线和对角线以上的元素以外，均为零。$\mathbf{R}$ 与 $\mathbf{A}$ 形状一样。

下面简单描述如何用 Householder 变换实现 QR 分解第一步我们需要构建一个矩阵 $\mathbf{M}_1$ 使得 $\mathbf{A}$ 的第一列变换为只有第一个元素不为零的向量，由上一节，我们知道，用来构造 Householder 矩阵 $\mathbf{M}_1$ 的向量 $\mathbf{u}_1 = \mathbf{A}_{:1} - \|\mathbf{A}_{:1}\|\mathbf{e}_1$，其中 $\mathbf{A}_{:1}$ 为 $\mathbf{A}$ 的第一列。

于是新矩阵

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{M_1A}$$

可以将 $\mathbf{A}_1$ 写成分块矩阵的形式

$$\mathbf{A}_1 = \begin{bmatrix} \|\mathbf{A}_{:1}\| & \mathbf{b} \\ \mathbf{0} & \tilde{\mathbf{A}} \end{bmatrix}$$

把 $\tilde{\mathbf{A}}$ 的第一列也用 Householder 变换变换为只有第一个元素不为零的向量，即用 $\mathbf{u}_2 = \tilde{\mathbf{A}}_{:1} - \|\tilde{\mathbf{A}}_{:1}\|\tilde{\mathbf{e}}_1$ 构造 Householder 矩阵 $\tilde{\mathbf{M}}_2$，令

$$\mathbf{M}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \tilde{\mathbf{M}}_2 \end{bmatrix}$$

则处理后的矩阵 $\mathbf{A}_2 = \mathbf{M}_2\mathbf{M}_1\mathbf{A}$ 的前两列均满足上三角的性质。

以此迭代，当 $\mathbf{A}_m$ 为上三角矩阵时，即结束迭代，QR 分解的结果为。

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}_m &= \mathbf{M}_m\mathbf{M}_{m-1}\cdots\mathbf{M}_1\mathbf{A} \\
\mathbf{A} &= \mathbf{M}_1^T\cdots\mathbf{M}_{m-1}^T\mathbf{M}_m^T\mathbf{A}_m \\
\mathbf{A} &= \mathbf{QR}
\end{aligned}$$