1. МАТРИЦЫ КОСИНУСОВ

Матрицы косинусов как математический объект были предложены ранее в рамках курсовых и дипломной работ. Теоретические результаты предыдущих работ здесь будут изложены, по возможности, кратко и без доказательств, но систематично. Здесь они необходимы, прежде всего, для правильного изложения новых результатов, касающихся нового объекта — релятивистской матрицы косинусов. Кроме того, терминология данной главы может местами отличаться от терминологии предыдущих работ, что связано с тем, что она ещё не устоялась, и требует некоторых изменений для большей систематичности.

1.1. Базовые определения

Пусть имеется некоторое гильбертово пространство $\mathcal{H}$ (в частном случае некоторое конечномерное евклидово пространство $\mathbb{R}^k$). Пусть в данном пространстве задана последовательность точек (ломаная) $X = (\vec{x}_i)$, где $i = \overline{0, n}$. Обозначим $\vec{p}_i = \vec{x}_i - \vec{x}_{i-1}$, где $i = \overline{1, n}$, тогда *ненормализованной матрицей косинусов* по ломаной X будем называть квадратную матрицу вида:

$$C_E = (< \vec{p}_i, \vec{p}_j >)_{ij} \in \mathbb{R}_{n,n}. \tag{1.1}$$

Если выполняется условие:

$$||\vec{p}_i|| = 1, i = \overline{1, n}, \tag{1.2}$$

то говорят о *нормализованных матрицах косинусов* или собственно *матрицах косинусов*. На практике, удобнее всего работать с нормализованными матрицами косинусов, ненормализованные матрицы косинусов могут возникнуть при некоторых операциях над обычными матрицами косинусов. Далее в работе, если не оговорено противное, будет подразумеваться наличие нормализации.

Название матриц следует из того факта, что при условии 1.2:

$$C_E = (< \vec{p}_i, \vec{p}_j >)_{ij} = (||\vec{p}_i||||\vec{p}_j|| \cos \vec{p}_i \wedge \vec{p}_j)_{ij} = (\cos \vec{p}_i \wedge \vec{p}_j)_{ij}. \tag{1.3}$$

Объект, определенный выше, строится по и описывает одну ломаную. Пусть имеется две последовательности точек: $X' = (\vec{x'}_i)$, где $i = \overline{0, m}$ и $X'' = (\vec{x''}_j)$, где $j = \overline{0, n}$. Тогда аналогично 1.1 можно построить матрицу косинусов по двум ломаным X' и X'':

$$C_{X',X''} = (< \vec{p'}_i, \vec{p''}_j >)_{ij} \in \mathbb{R}_{m,n}. \tag{1.4}$$

Определения 1.1 и 1.4 здесь фундаментальны, на практике полезны также матрица косинусов, кодирующая поворот ломаной C_A, и кодирующая вектор относительно ломаной C_ν — они являются частными случаями 1.4. Здесь определим C_ν, в следующей секции — C_A:

Пусть задан некоторый вектор $\vec{\nu} \in \mathbb{R}^k$ и $X = (\vec{x}_i)$ с $i = \overline{0, m}$, тогда *матрицей косинусов кодирующей вектор* назовём матрицу вида:

$$C_\nu = (< \vec{p}_i, \vec{\nu} >)_{ij} \in \mathbb{R}_{m,n}. \tag{1.5}$$

Здесь $n \geq 1$ не зависит от ни от X, ни от $\vec{\nu}$, а выбирается из других практических соображений.

Непрерывным обобщение матрицы косинусов можно назвать *поверхностью косинусов*. Пусть $x(\alpha)$ - гладкая кривая $x : [0, l] \to \mathcal{H}$ и $\vec{p}(\alpha) = \frac{\partial x(\alpha)}{\partial \alpha}$. Тогда 1.1 можно переписать как:

$$C(\alpha_1, \alpha_2) =< \vec{p}(\alpha_1), \vec{p}(\alpha_2) > . \tag{1.6}$$

Таким образом, получаем действительную функцию о двух параметров $C : [0, l] \times [0, l] \to \mathbb{R}$. Условие нормализации для 1.6 выглядит следующим образом:

$$||\vec{p}(\alpha)|| = 1, \forall i \in [0, l]. \tag{1.7}$$

Использование непрерывной 1.6 для вычислений затруденено. Гораздо удобнее исследовать и использовать матрицы.

1.2. Свойства матриц косинусов

Для исследования свойств описанных матриц, необходимо записать их в более удобном виде. Пусть речь идёт об евклидовом простанстве $\mathbb{R}^k$, тогда в нём можно ввести репер $O = (x_0, \vec{v}_1, ..., \vec{v}_k)$, пораждающий декартову систему координат. Тогда каждой точке x_i и вектору $\vec{p}_i$ можно поставить в соответствие координатный вектор-столбец $p_i \in \mathbb{R}_{k,1}$. Полученные столбцы координат p_i можно объединить в матрицу $P = [p_1, ..., p_k] \in \mathbb{R}_n$. Тогда 1.1 и 1.4 можно переписать как:

$$C_E = P^{\mathrm{T}} P, \tag{1.8}$$

$$C_{X_1,X_2} = {P_1}^{\mathrm{T}} P_2. \tag{1.9}$$

1.2.1. Базовые свойства

Приведём основные свойства матриц косинусов (без доказательств):

1. Все значения матриц косинусов лежат на отрезке $[-1, 1]$;
2. Все диагональные элементы матрицы C_E равны 1;
3. Матрицы косинусов не зависят от выбора системы координат;
4. Ранг матрицы C_E равен размерности ломаной X;
5. Матрица C_E - симметричная. Все её собственные значения неотрицательны, и в сумме равны n;
6. Ломаную X (ломаные X_1 и X_2) можно восстановить из C_E (C_{X_1,X_2}) с точностью до выбора системы координат, причём как для нормированных, так и для ненормированных матриц (в случае последних с C_{X_1,X_2} необходимо знание длин векторов $\vec{p}_i$).

1.2.2. Восстановление исходных ломаных

Последнее свойство наиболее важно, так как оно позволяет использовать матрицы косинусов как инвариантное представление геометричеких ломаных (что крайне полезно при исследовании белковых молекул и их взаимодействий). Зная и легко построить соответсвующие матрицы. Ниже приведём без доказательств алгоритмы, которые позволяют строить ломаные по этим матрицам:

1. *Восстановление X из C_E*

   Из описанного выше свойства 5 следует, что матрица C_E будет обладать k неотрицательными собственными значениями $\lambda_1, ..., \lambda_k$ и собственными векторами $v_1, ..., v_k \in \mathbb{R}_{n,1}$. Тогда в некоторой системе координат матрица P примет вид:

   $$P = \mathrm{diag}(\sqrt{\lambda_1}, ..., \sqrt{\lambda_k})[v_1, ..., v_k]^{\mathrm{T}}. \tag{1.10}$$

   Где координаты точек ломаной X восстанавливаются из P через кумулятивную сумму. Формула 1.10 работает и для ненормализованных матриц.

2. *Восстановление X_2 из C_{X_1,X_2} при известном X_1*

   Введём следующую крайне важную матрицу:

   $$T_P = (PP^{\mathrm{T}})^{-1}P, \tag{1.11}$$

   данная матрица (с поправкой на транспонирование) представляет собой матрицу вычисления параметров линейной регрессии. Из 1.2.2 и 1.11 следует, что:

   $$T_{P_1}C_{X_1,X_2} = (P_1{P_1}^{\mathrm{T}})^{-1}P_1{P_1}^{\mathrm{T}}P_2 = P_2, \tag{1.12}$$

   данная формула позволяет посчитать P_2 из C_{X_1,X_2} при известном P_1, из которого, с помощью кумулятивной суммы, можно получить X_2. Формула 1.12, опять же, работает и для ненормализованных матриц.

3. *Восстановление X_1 и X_2 из C_{X_1,X_2}*

   Для выполнения данной операций существует следующий алгоритм, доказательство которого было приведено в предыдущей работе:

   1. let X_1 be matrix of $C_{P_1,P_2}C^{\mathrm{T}}_{P_1,P_2}$ eigenvectors and X_2 be matrix of $C^{\mathrm{T}}_{P_1,P_2}C_{P_1,P_2}$ eigenvectors
   2. let $Y_1 \leftarrow X_1^{\mathrm{T}}C_{P_1,P_2}$ and $Y_2 \leftarrow (C_{P_1,P_2}X_2)^{\mathrm{T}}$
   3. let $Z_1 \leftarrow T_{Y_2}C_{P_1,P_2}T^{\mathrm{T}}_{Y_1}$
   4. let Z_2 be matrix of $Y_1Y_1^{\mathrm{T}}$ eigenvectors

5. let $Z_3 \leftarrow Z_2^{\mathrm{T}} Z_1 Y_2$
6. sum $T_{[Z_3]^2}$ along rows into a column-vector s
7. let $\hat{P}_1$ be $diag(sqrt(s))Z_3$ with normalized column-vectors
8. let $\hat{P}_2$ be $T_{\hat{P}_1} C_{P_1,P_2}$ with normalized column-vectors

[здесь перевести и оформить - мне пока лень]

1.2.3. Арифметические свойства матриц косинусов

TO DO

1.2.4. Применение матриц косинусов

TO DO

1.3. Релятивистская матрица косинусов

В данном разделе представлен полностью новый результат, касающийся матриц косинусов. *Релятивистская матрица косинусов* C_{rel} отличается от обычной C_E тем, что позволяет закодировать не только лишь некоторую последовательность точек, но точку, из которой эта последовательность наблюдается. Таким образом получается инвариантное относительно выбора декартовой системы координат (а вообще говоря — Лоренц-инвариантное) представление пары точка-ломаная, что позволяет задавать функции (поля), порождаемые ломаной (белковой молекулой), как преобразования матриц косинусов. Для релятивистских матриц будет дано полное определение, в соответствии со специальной теорией относительности (СТО), и приближённая запись, используемая на практике.

1.3.1. Полное определение

Пусть существует некоторая последовательность точек X, точки которой перемещаются в пространстве $\mathbb{R}^k$ со скоростями, не превышающими скорость света c:

$X(t) = (\vec{x}_i(t))$, где $i = \overline{0, n}$;
$\vec{x}_i : \mathbb{R} \to \mathbb{R}^k$;
$||\frac{\partial \vec{x}_i}{\partial t}|| < c$.

Следуя Минковскому [ref!], в пространстве-времени можно ввести систему координат, в которой точке $\vec{x}_i$ в момент времени t будет поставлен в соответствие вектор-столбец $x_i = [x_i^1(t), ..., x_i^k(t), ict]^{\mathrm{T}} \in \mathbb{C}_{k+1,1}$.

Пусть имеется некоторая точка $\vec{x}_{ref}$ и момент времени t_{ref}, из которых наблюдается ломаная X. Этой точке в пространстве-времени соответствуют координаты $x_{ref} = [x_{ref}^1(t), ..., x_{ref}^k(t), ict_{ref}]^{\mathrm{T}}$. Каждая точка из X будет наблюдаться в $\vec{x}_{ref}$ в момент t_{ref} при пересечении траектории $\vec{x}_i(t)$ и светового конуса, порождённого $\vec{x}_{ref}$ и t_{ref}. Из того, что все скорости не превышают c, следует, что такое пересечение единственно, и для каждой точки $\vec{x}_i$ произойдёт в некоторый момент времени $t_i^* \leq t_{ref}$. Таким образом, в $\vec{x}_{ref}$ в момент t_{ref} будет наблюдаться X^* - образ ломаной $X(t)$ вида: $X^* = (\vec{x}_i^*)$, где $i = \overline{0,n}$ и координаты $\vec{x}_i^*$ равны $x_i^* = [x_i^1(t_i^*), ..., x_i^k(t_i^*), ict_i^*]^{\mathrm{T}}$.

Если теперь посчитать $\vec{p}_i = \vec{x}_i^* - \vec{x}_{i-1}^*$ и использовать произведение Минковского, 1.1 или 1.2.2 можно получить *релятивистскую матрицу косинусов*:

$$C_{rel} = (< \vec{p}_i, \vec{p}_j >)_{ij} = \left(\sum_{s=1}^{k} p_i^s p_j^s - c^2 (t_i^* - t_{i-1}^*)(t_j^* - t_{j-1}^*) \right)_{ij} \in \mathbb{R}_{n,n}. \quad (1.13)$$

1.3.2. Упрощённая формулировка

Теперь, для упрощения, положим, что $\forall i : \vec{x}_i(t) = \vec{x}_i = const$. Также, не нарушая общности, положим $t_{ref} = 0$. При таких предположениях вычисление пересечения светового конуса и траекторий заметно упростится, и можно будет записать:

$$t_i^* = t_{ref} - \frac{||\vec{x}_i - \vec{x}_{ref}||}{c} = -\frac{1}{c} \sqrt{\sum_{s=1}^{k} (x_i^s - x_{ref}^s)^2}, \quad (1.14)$$

и на основании 1.14 получим следующие значения координат:

$$x_i^* = \begin{bmatrix} x_i^1 \\ ... \\ x_i^k \\ -i\sqrt{\sum_{s=1}^{k} (x_i^s - x_{ref}^s)^2} \end{bmatrix}. \quad (1.15)$$

По 1.15 можно посчитать $P = \begin{bmatrix} P_x \\ -id \end{bmatrix} \in \mathbb{C}_{k+1,n}$ и по 1.2.2 посчитать:

$$C_{rel} = \begin{bmatrix} P_x \\ -id \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} \begin{bmatrix} P_x \\ -id \end{bmatrix} = P_x^{\mathrm{T}} P_x - d^{\mathrm{T}} d \in \mathbb{R}_{n,n}. \tag{1.16}$$

В случае, когда $||\frac{\partial \vec{x}_i}{\partial t}|| << c$ разница между $\vec{x}_i(t_i^*)$ и $\vec{x}_i(t_{ref})$ будет иметь порядок вычислительной погрешности, а следовательно использование 1.13 неоправдано. Далее свойства матриц косинусов будем исследовать исключительно на основе 1.16.

1.3.3. Свойства релятивистских матриц косинусов

TO DO