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) $X = (x_i)$, где $i = \overline{0, n}$. Обозначим $\mathbf{p}_i = x_i - x_{i-1}$, где $i = \overline{1, n}$, тогда *ненормализованной матрицей косинусов* по ломаной X будем называть квадратную матрицу вида:

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

Если выполняется условие:

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

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:

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

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

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

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, и их определения для краткости опустим.

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

$$C(\alpha_1, \alpha_2) =< \mathbf{p}(\alpha_1), \mathbf{p}(\alpha_2) > . \tag{1.5}$$

Таким образом, получаем действительную функцию о двух параметров $C : [0, l] \times [0, l] \to \mathbb{R}$. Условие нормализации для 1.5 выглядит следующим образом:

$$||\mathbf{p}(\alpha)|| = 1, \forall i \in [0, l]. \tag{1.6}$$

Использование непрерывной 1.5 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 $O = (x_0, \mathbf{v}_1, ..., \mathbf{v}_k)$, пораждающий декартову систему координат. Тогда каждой точке x_i и вектору $\mathbf{p}_i$ можно поставить в соответствие координатный вектор-столбец из $\mathbb{R}_{k,1}$. Полученные столбцы координат $\mathbf{p}_i$ можно объединить в матрицу $P \in \mathbb{R}_n$. Тогда 1.1 и 1.4 можно переписать как:

$$C_E = P^{\mathrm{T}} P, \tag{1.7}$$

$$C_{X_1,X_2} = {P_1}^{\mathrm{T}} P_2. \tag{1.8}$$

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 $\mathbf{p}_i$).

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:

$$P = \mathrm{diag}(\sqrt{\lambda_1}, ..., \sqrt{\lambda_k})[v_1, ..., v_k]^{\mathrm{T}}. \tag{1.9}$$

Где координаты точек ломаной X восстанавливаются из P через кумулятивную сумму. Формула 1.9 работает и для ненормализованных матриц.

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

   Введём следующую крайне важную матрицу:

$$T_P = (PP^{\mathrm{T}})^{-1}P, \tag{1.10}$$

   данная матрица (с поправкой на транспонирование) представляет собой матрицу вычисления параметров линейной регрессии. Из 1.2 и 1.10 следует, что:

$$T_{P_1}C_{X_1,X_2} = (P_1{P_1}^{\mathrm{T}})^{-1}P_1{P_1}^{\mathrm{T}}P_2 = P_2, \tag{1.11}$$

   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 1.11, 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 $Z_3 \leftarrow Z_2^{\mathrm{T}}Z_1Y_2$
   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]