Tiesinės algebros ir geometrijos paskaitos bioinformatikams.

Rimantas Grigutis

14 Paskaita. Realieji kvaternionai ir posūkiai erdvėje

Nagrinėkime šias matricas virš kompleksinių skaičių:

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, I = \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}, J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, K = \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

14.1 Apibrėžimas. *Visų šių matricų tiesinių kombinacijų aibė*

$$\mathbf{H} = \{aE + bI + cJ + dK | a, b, c, d \in \mathbf{R}\}$$

yra vektorinė erdvė virš $\boldsymbol{R}$*, kurios vektoriai vadinamai realiais kvaternionais (arba tiesiog kvaternionais).*

Taigi, kvaternionas $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbf{H}$ yra matrica :

$$\boldsymbol{\alpha} = aE + bI + cJ + dK =$$
$$a\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + b\begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix} + c\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} + d\begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a+ib & c+id \\ c-id & a-ib \end{pmatrix}.$$

Kvaternionų reiškimas matricomis yra patogus tuo, kad šiems vektoriams galima apibrėžti sandaugą. Pažiūrėkime į matricų E, I, J, K daugybos lentelę:

$\times$	E	I	J	K
E	E	I	J	K
I	I	$-E$	K	$-J$
J	J	$-K$	$-E$	I
K	K	J	$-I$	$-E$

Jeigu, kaip ir kompleksinių skaičių atveju, matricą E žymėsime *1*, o matricos I, J, K, kurias žymėsime atitinkamai $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$, kvaternionų aibėje $\mathbf{H}$ bus trimis menamaisiais vienetais*:* $\mathbf{i}^2 = \mathbf{j}^2 = \mathbf{k}^2 = -\mathbf{1}$. Visa daugybos lentelė yra:

$\times$	$\mathbf{i}$	$\mathbf{j}$	$\mathbf{k}$
$\mathbf{i}$	$-\mathbf{1}$	$\mathbf{k}$	$-\mathbf{j}$
$\mathbf{j}$	$-\mathbf{k}$	$-\mathbf{1}$	$\mathbf{i}$
$\mathbf{k}$	$\mathbf{j}$	$-\mathbf{i}$	$-\mathbf{1}$

.

Dabar kvaternioną $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbf{H}$ galime užrašyti ir taip:

$$\boldsymbol{\alpha} = a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k}$$

14.2. Apibrėžimas. *Jei kvaternionas* $\boldsymbol{\alpha} = a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k}$, *tai skaičius* a *vadinamas skaliarine kvaterniono* $\boldsymbol{\alpha}$ *dalimi,* o $b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k}$ - *vektorine kvaterniono* $\boldsymbol{\alpha}$ *dalimi. Kvaternionas, kurio skaliarinė dalis lygi 0, vadinamas vektoriumi.* Kvaternionas $\overline{\boldsymbol{\alpha}} = a - b\mathbf{i} - c\mathbf{j} - d\mathbf{k}$ *vadinamas jungtiniu* $\boldsymbol{\alpha}$..

14.3. Apibrėžimas. *Vektorių sistema* $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$ *vadinama dešinine sistema, jei jos daugybos lentelė yra*

$\times$	$\mathbf{u}$	$\mathbf{v}$	$\mathbf{w}$
$\mathbf{u}$	$-\mathbf{1}$	$\mathbf{w}$	$-\mathbf{v}$
$\mathbf{v}$	$-\mathbf{w}$	$-\mathbf{1}$	$\mathbf{u}$
$\mathbf{w}$	$\mathbf{v}$	$-\mathbf{u}$	$-\mathbf{1}$

Pagal 14.3 Apibrėžimą turime, kad vektorių sistema $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ yra dešininė sistema.

Sudauginkime du vektorius $\mathbf{u}_1 = b_1\mathbf{i} + c_1\mathbf{j} + d_1\mathbf{k}$ ir $\mathbf{u}_2 = b_2\mathbf{i} + c_2\mathbf{j} + d_2\mathbf{k}$:

$$\begin{gathered}\mathbf{u}_1\mathbf{u}_2 = (b_1\mathbf{i} + c_1\mathbf{j} + d_1\mathbf{k})(b_2\mathbf{i} + c_2\mathbf{j} + d_2\mathbf{k}) = \\ -b_1b_2 - c_1c_2 - d_1d_2 + (c_1d_2 - d_1c_2)\,\mathbf{i} + (d_1b_2 - b_1d_2)\,\mathbf{j} + (b_1c_2 - c_1b_2)\,\mathbf{k} = \\ -\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{u}_2 + \mathbf{u}_1 \times \mathbf{u}_2,\end{gathered}$$

čia $\mathbf{u}_1 \cdot \mathbf{u}_2$ vektorių $\mathbf{u}_1$ ir $\mathbf{u}_2$ skaliarinė sandauga, o $\mathbf{u}_1 \times \mathbf{u}_2$ vektorių $\mathbf{u}_1$ ir $\mathbf{u}_2$ vektorinė sandauga.

Dalyba kvaternionų aibėje.

Tegu $\boldsymbol{\alpha} = a + \mathbf{u}$ ir $\overline{\boldsymbol{\alpha}} = a - \mathbf{u}$, čia $\mathbf{u}$ - kvaterniono $\boldsymbol{\alpha}$ vektorinė dalis. Sudauginus $\boldsymbol{\alpha}$ ir $\overline{\boldsymbol{\alpha}}$ turėsime

$$\begin{gathered}\boldsymbol{\alpha}\overline{\boldsymbol{\alpha}} = (a + \mathbf{u})(a - \mathbf{u}) = a^2 + \mathbf{u}a - a\mathbf{u} - \mathbf{u}^2 = a^2 - \mathbf{u}^2 = \\ a^2 + \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} - \mathbf{u} \times \mathbf{u} = a^2 + b^2 + c^2 + d^2.\end{gathered}$$

Turime, kad $\boldsymbol{\alpha} \neq \mathbf{o}$ tada ir tik tada, kai $\boldsymbol{\alpha}\overline{\boldsymbol{\alpha}} = a^2 + b^2 + c^2 + d^2 > 0$. Todėl

$$\boldsymbol{\alpha} \cdot \frac{\overline{\boldsymbol{\alpha}}}{\boldsymbol{\alpha}\overline{\boldsymbol{\alpha}}} = 1$$

ir

$$\boldsymbol{\alpha}^{-1} = \tfrac{1}{\boldsymbol{\alpha}\overline{\boldsymbol{\alpha}}}\overline{\boldsymbol{\alpha}}.$$

14.4 Išvada. Kvaternionų aibėje $\mathbf{H}$ apibrėžti visi skaičiams būdingi veiksmai: sudėtis, atimtis, daugyba, dalyba. Šių veiksmų atžvilgiu galioja visos skaičiams būdingos savybės, išskyrus vieną - kvaternionų aibėje negalioja sandaugos komutatyvumas, pvz. $\mathbf{i}\cdot\mathbf{j}\neq\mathbf{j}\cdot\mathbf{i}$.

Erdvės $\mathbf{R}^3$ posūkiai.

14.5 Teorema. *Jeigu* $\mathbf{u}$ *yra vektorius, tai* $\boldsymbol{\alpha}\mathbf{u}\boldsymbol{\alpha}^{-1}$ *yra vektorius su visais nenuliniais* $\boldsymbol{\alpha}\in\mathbf{H}$.

Įrodymas. Jei $\boldsymbol{\alpha} = a+\mathbf{v}$, tai $\boldsymbol{\alpha}^{-1} = \frac{1}{\boldsymbol{\alpha}\overline{\boldsymbol{\alpha}}}(a-\mathbf{v})$. Todėl

$$\begin{gathered}\boldsymbol{\alpha}\mathbf{u}\boldsymbol{\alpha}^{-1}=\tfrac{1}{\boldsymbol{\alpha}\overline{\boldsymbol{\alpha}}}(a+\mathbf{v})\,\mathbf{u}\,(a-\mathbf{v}) = \tfrac{1}{\boldsymbol{\alpha}\overline{\boldsymbol{\alpha}}}(a\mathbf{u}+\mathbf{v}\mathbf{u})(a-\mathbf{v}) = \\ \tfrac{1}{\boldsymbol{\alpha}\overline{\boldsymbol{\alpha}}}\left(a^2\mathbf{u}-a\mathbf{u}\mathbf{v}+a\mathbf{v}\mathbf{u}-\mathbf{v}\mathbf{u}\mathbf{v}\right).\end{gathered}$$

Čia skliaustuose yra vektorius, nes

$$a^2\mathbf{u}$$

yra vektorius,

$$\begin{gathered}-a\mathbf{u}\mathbf{v}+a\mathbf{v}\mathbf{u} = \\ -a(\mathbf{u}\mathbf{v}-\mathbf{v}\mathbf{u}) = -a(-\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}+\mathbf{u}\times\mathbf{v}+\mathbf{v}\cdot\mathbf{u}+\mathbf{v}\times\mathbf{u}) = \\ 2(\mathbf{u}\times\mathbf{v})\end{gathered}$$

yra vektorius, ir

$$\begin{gathered}\mathbf{v}\mathbf{u}\mathbf{v} = \\ (\mathbf{v}\mathbf{u})\,\mathbf{v} = (-\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}+\mathbf{u}\times\mathbf{v})\,\mathbf{v} = -(\mathbf{u}\cdot\mathbf{v})\,\mathbf{v}+(\mathbf{u}\times\mathbf{v})\,\mathbf{v} = \\ -(\mathbf{u}\cdot\mathbf{v})\,\mathbf{v}+(-(\mathbf{u}\times\mathbf{v})\cdot\mathbf{v}+(\mathbf{u}\times\mathbf{v})\times\mathbf{v}) = \\ -(\mathbf{u}\cdot\mathbf{v})\,\mathbf{v}-(\mathbf{u}\times\mathbf{v})\cdot\mathbf{v}\end{gathered}$$

yra vektorius.

Įrodyta.

Funkcija $\mathcal{A}_\alpha(\mathbf{u}) = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{u}\boldsymbol{\alpha}^{-1}$ yra tiesinė transformacija erdvėje $\mathbf{R}^3$ su visais $\boldsymbol{\alpha}\neq\mathbf{o}$. Pastebėkime, kad $\mathcal{A}_{a\alpha} = \mathcal{A}_\alpha$ su visais realiais a :

$$\mathcal{A}_{a\alpha}(\mathbf{u}) = a\boldsymbol{\alpha}\mathbf{u}(a\boldsymbol{\alpha})^{-1} = a\boldsymbol{\alpha}\mathbf{u}a^{-1}\boldsymbol{\alpha}^{-1} = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{u}\boldsymbol{\alpha}^{-1} = \mathcal{A}_{\alpha}(\mathbf{u}).$$

14.6 Teorema. *$\mathcal{A}_{\alpha}$ yra ortogonalioji transformacija.*

Įrodymas. Tegu $\mathbf{u}$ ir $\mathbf{v}$ - vektoriai. Tada iš vienos pusės

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{uv})\boldsymbol{\alpha}^{-1} = (\boldsymbol{\alpha}\mathbf{u}\boldsymbol{\alpha}^{-1})(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{v}\boldsymbol{\alpha}^{-1}) = -(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{u}\boldsymbol{\alpha}^{-1})\cdot(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{v}\boldsymbol{\alpha}^{-1}) + (\boldsymbol{\alpha}\mathbf{u}\boldsymbol{\alpha}^{-1})\times(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{v}\boldsymbol{\alpha}^{-1}),$$

čia pirmasis dėmuo yra skaliarinė kvaterniono dalis(skaičius).
Iš kitos pusės

$$\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{uv})\boldsymbol{\alpha}^{-1} = \boldsymbol{\alpha}(-\mathbf{u}\cdot\mathbf{v} + \mathbf{u}\times\mathbf{v})\boldsymbol{\alpha}^{-1} = -\boldsymbol{\alpha}(\mathbf{u}\cdot\mathbf{v})\boldsymbol{\alpha}^{-1} + \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{u}\times\mathbf{v})\boldsymbol{\alpha}^{-1} =$$
$$-(\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}) + \boldsymbol{\alpha}(\mathbf{u}\times\mathbf{v})\boldsymbol{\alpha}^{-1},$$

čia pirmasis dėmuo yra skaliarinė kvaterniono dalis(skaičius).
Iš čia turime, kad

$$(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{u}\boldsymbol{\alpha}^{-1})\cdot(\boldsymbol{\alpha}\mathbf{v}\boldsymbol{\alpha}^{-1}) = (\mathbf{u}\cdot\mathbf{v})$$
$$\mathcal{A}_{\alpha}(\mathbf{u})\cdot\mathcal{A}_{\alpha}(\mathbf{v}) = \mathbf{u}\cdot\mathbf{v}.$$

Įrodyta.

14.7 Teorema. *Vektorių sistemų* $\mathbf{u},\mathbf{v},\mathbf{w}$ ir $\mathcal{A}_{\alpha}(\mathbf{u}),\mathcal{A}_{\alpha}(\mathbf{v}),\mathcal{A}_{\alpha}(\mathbf{w})$ *orientacijos yra vienodos.*

Įrodymas paliekamas skaitytojui.

Tegu $\boldsymbol{\alpha} = a + b\mathbf{i} + c\mathbf{j} + d\mathbf{k} = a + \mathbf{u}_0$ yra ilgio 1 kvaternionas, t.y.

$$a^2 + b^2 + c^2 + d^2 = a^2 + \|\mathbf{u}_0\|^2 = 1$$

Tada egzistuoja toks kampas $\varphi, 0 \leq \varphi \leq \pi$, kad

$$\begin{cases} a = \cos\varphi \\ \|\mathbf{u}_0\| = \sin\varphi \end{cases}$$

ir

$$\boldsymbol{\alpha} = \cos\boldsymbol{\varphi} + \frac{\mathbf{u}_0}{\|\mathbf{u}_0\|}\sin\varphi = \cos\boldsymbol{\varphi} + \mathbf{u}\sin\varphi,$$

čia $\mathbf{u} = \dfrac{\mathbf{u}_0}{\|\mathbf{u}_0\|}$ yra ilgio 1 vektorius, t.y. $\|\mathbf{u}\| = 1$.

14.8 Teorema. *Jeigu* $\mathbf{v}$ *yra ilgio 1 vektorius statmenas* $\mathbf{u}$**,** o $\mathbf{w} = \mathbf{uv} = \mathbf{u} \times \mathbf{v}$, *tai vektorių sistema* $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$ *yra ortonormuota dešininė sistema , ir* $\mathcal{A}_\alpha$ *yra posūkio kampu* 2φ *apie vektorių* $\mathbf{u}$ *tiesinė transformacija.*

Įrodymas. Įrodymą, kad *vektorių sistema* $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$ *yra ortonormuota dešininė sistema* paliekame skaitytojui. Parodysime, kad $\mathcal{A}_\alpha$ *yra posūkio kampu* 2φ *apie vektorių* $\mathbf{u}$ *tiesinė transformacija*

$$\mathcal{A}_\alpha(\mathbf{u}) = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{u}\boldsymbol{\alpha}^{-1} = (\cos\boldsymbol{\varphi} + \mathbf{u}\sin\varphi)\,\mathbf{u}\,(\cos\boldsymbol{\varphi} - \mathbf{u}\sin\varphi) =$$
$$(\mathbf{u}\cos\boldsymbol{\varphi} - \sin\varphi)(\cos\boldsymbol{\varphi} - \mathbf{u}\sin\varphi) = \mathbf{u}\left(\cos^2\varphi + \sin^2\varphi\right) = \mathbf{u} = (\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$
$$\mathcal{A}_\alpha(\mathbf{v}) = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{v}\boldsymbol{\alpha}^{-1} = (\cos\boldsymbol{\varphi} + \mathbf{u}\sin\varphi)\,\mathbf{v}\,(\cos\boldsymbol{\varphi} - \mathbf{u}\sin\varphi) =$$
$$(\mathbf{v}\cos\boldsymbol{\varphi} + \mathbf{w}\sin\varphi)(\cos\boldsymbol{\varphi} - \mathbf{u}\sin\varphi) = \mathbf{v}\left(\cos^2\varphi - \sin^2\varphi\right) + \mathbf{w}\,(2\sin\varphi\cos\varphi) =$$
$$\mathbf{v}\,(\cos 2\varphi) + \mathbf{w}\,(\sin 2\varphi) = (\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})\begin{pmatrix} 0 \\ \cos 2\varphi \\ \sin 2\varphi \end{pmatrix}$$
$$\mathcal{A}_\alpha(\mathbf{w}) = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{w}\boldsymbol{\alpha}^{-1} = (\cos\boldsymbol{\varphi} + \mathbf{u}\sin\varphi)\,\mathbf{w}\,(\cos\boldsymbol{\varphi} - \mathbf{u}\sin\varphi) =$$
$$(\mathbf{w}\cos\boldsymbol{\varphi} - \mathbf{v}\sin\varphi)(\cos\boldsymbol{\varphi} - \mathbf{u}\sin\varphi) = \mathbf{v}\,(-\sin 2\varphi) + \mathbf{w}\,(\cos 2\varphi) =$$
$$(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w})\begin{pmatrix} 0 \\ -\sin 2\varphi \\ \cos 2\varphi \end{pmatrix}.$$

Gavome, kad $\mathcal{A}_\alpha$ matrica bazėje $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$ yra

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 2\varphi & -\sin 2\varphi \\ 0 & \sin 2\varphi & \cos 2\varphi \end{pmatrix}.$$

Bet tai ir yra posūkio kampu 2φ apie vektorių $\mathbf{u}$ tiesinės transformacijos matrica.

Įrodyta.

14.9 Pavyzdys. Tegu $\boldsymbol{\alpha} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\mathbf{i} + \frac{1}{2}\mathbf{j} + \frac{1}{2}\mathbf{k}$. Tai ilgio 1 kvaternionas, kurio realioji dalis lygi $a = \frac{1}{2}$, o vektorinė dalis yra vektorius $\mathbf{u}_0 = \frac{1}{2}\mathbf{i} + \frac{1}{2}\mathbf{j} + \frac{1}{2}\mathbf{k} = \frac{1}{2}(1;1;1)$. Tada $\|\mathbf{u}_0\| = \frac{\sqrt{3}}{2}$ ir sistemos

$$\begin{cases} \frac{1}{2} = \cos\varphi \\ \frac{\sqrt{3}}{2} = \sin\varphi \end{cases}$$

sprendinys intervale $0 \leq \varphi \leq \pi$ yra $\varphi = \frac{\pi}{3}$.
Normavę vektorių $\mathbf{u}_0$ gausime $\mathbf{u} = \dfrac{\mathbf{u}_0}{\|\mathbf{u}_0\|} = \frac{\sqrt{3}}{3}(1;1;1)$.
Tegu $\mathbf{v} = \frac{\sqrt{2}}{2}(1;-1;0)$ normuotas vektorius ortogonalus vektoriui $\mathbf{u}$. Tada

$$\mathbf{w} = \mathbf{uv} = \mathbf{u} \times \mathbf{v} = \begin{vmatrix} i & j & k \\ \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{3}}{3} & \frac{\sqrt{3}}{3} \\ \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} & 0 \end{vmatrix} = \frac{\sqrt{6}}{6}i + \frac{\sqrt{6}}{6}j - \frac{\sqrt{6}}{3}k = \frac{\sqrt{6}}{6}(1;1;-2)$$

Taigi, $\mathcal{A}_\alpha$ yra ortogonali transformacija, kuri erdvėje esnačius vektorius pasuka $2\varphi = \frac{2\pi}{3}$ kampu vektoriaus $\mathbf{u}$ kryptimi nuo vektoriaus $\mathbf{v}$ link vektoriaus **w.**