Optimalna ortogonalna transformacija

Premik togega telesa $\mathbb{R}^k \to \mathbb{R}^k$ je sestavljen iz zasuka in vzporednega premika. Krajevni vektor $\mathbf{x}$ točke na telesu se preslika v nov krajevni vektor $\mathbf{y} = Q\mathbf{x} + \mathbf{b}$, pri čemer matrika Q opisuje zasuk telesa, vektor $\mathbf{b}$ pa vzporedni premik težišča.

Naloga je poiskati matriko Q in vektor $\mathbf{b}$, če poznamo krajevne vektorje $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ značilnih točk telesa pred premikom in krajevne vektorje $\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n$ istih točk po premiku. To je zelo znan problem, ki se pojavlja v računalniški grafiki, kemoinformatiki in bioinformatiki.

Naivni pristop

Za podatke $\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n$ in $\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n$ imamo spodnji sistem enačb:

$$\begin{aligned} Q\mathbf{x}_i + \mathbf{b} &= \mathbf{y}_i, \; i = 1, \ldots, n \\ Q^\mathsf{T} Q &= I \end{aligned}$$

z neznakami

$$Q = \begin{bmatrix} q_{11} & q_{12} & \cdots & q_{1k} \\ q_{21} & q_{22} & \cdots & q_{2k} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_{k1} & q_{k2} & \cdots & q_{kk} \end{bmatrix} \quad \text{ter} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_k \end{bmatrix}.$$

(To je sistem $kn + k^2$ enačb za $k^2 + k$ neznank, kjer je $k = \dim \mathbb{R}^k$.) Težava: k^2 enačb, ki jih določa $Q^\mathsf{T} Q = I$ *ni* linearnih. Naivna rešitev: Enakost $Q^\mathsf{T} Q = I$ ignoriramo in ostane sistem kn enačb za $k^2 + k$ neznank:

$$Q\mathbf{x}_i + \mathbf{b} = \mathbf{y}_i, \; i = 1, \ldots, n.$$

Privzeli bomo, da je $n \geq 2k$, saj tako dobimo (predoločen) sistem linearnih enačb.

Zapiši matriko tega sistema in poišči rešitev sistema, matriko Q' in vektor $\mathbf{b}$, po linearni metodi najmanjših kvadratov. Ker Q' ni nujno ortogonalna jo (spet naivno) popravimo: Poiščemo QR razcep $Q' = QR$ matrike Q'. Rešitev problema sedaj tvorita matrika Q in vektor $\mathbf{b}$.

Kabschev algoritem

Vektor vzporednega premika $\mathbf{b}$ dobimo tako, da izračunamo premik težišča točk $\mathbf{x}_i$ in $\mathbf{y}_i$. Pišimo

$$\overline{\mathbf{x}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{x}_i \quad \text{in} \quad \overline{\mathbf{y}} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \mathbf{y}_i,$$

potem je $\mathbf{b} = \overline{\mathbf{y}} - Q\overline{\mathbf{x}}$.

Označimo sedaj $\mathbf{x}_i' = \mathbf{x}_i - \overline{\mathbf{x}}$ in $\mathbf{y}_i' = \mathbf{y}_i - \overline{\mathbf{y}}$. Matrika zasuka Q je ortogonalna matrika, ki mora sedaj zadoščati pogoju $Q\mathbf{x}_i' = \mathbf{y}_i'$ za vse $i = 1, \ldots, n$. (Preveri to!) Če označimo z X' in Y' matriki

$$X' = [\mathbf{x}_1', \ldots, \mathbf{x}_n'] \quad \text{ter} \quad Y' = [\mathbf{y}_1', \ldots, \mathbf{y}_n'],$$

lahko naš pogoj strnemo v $QX' = Y'$. Matriko Q nato poiščemo s pomočjo SVD razcepa z naslednjim postopkom:

1. Izračunamo kovariančno matriko $C = Y'X'^{\mathsf{T}}$, ki ima dimenzijo $k \times k$.

2. Poiščemo SVD razcep matrike C, $C = USV^{\mathsf{T}}$.

3. Matriko S nadomestimo z diagonalno matriko

   $$D = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & d \end{bmatrix},$$

   kjer je $d = \pm 1$ predznak $\det(C)$ oziroma $\det(UV^{\mathsf{T}})$.

4. Iskana matrika Q je enaka $Q = UDV^{\mathsf{T}}$.

Dodatno: Nelinearno izboljšanje naivne rešitve

Pri naivnem pristopu smo v sistemu

$$\begin{aligned} Q\mathbf{x}_i + \mathbf{b} &= \mathbf{y}_i, \; i = 1, \ldots, n \\ Q^{\mathsf{T}}Q &= I \end{aligned}$$

ignorirali enačbo $Q^{\mathsf{T}}Q = I$ in za rešitev sistema, ki ga določa le prva enačba, dobili Q' ter $\mathbf{b}$. To sedaj uporabi za začetni pribižek Gauss–Newtonove iteracije na celotnem (nelinearnem) sistemu enačb. Zapiši pripadajočo vektorsko funkcijo ter njeno Jacobijevo matriko.

Naloga

1. Izpelji in zapiši matriko in desno stran sistema linearnih enačb za 'naivni pristop'.

2. Napiši octave funkcijo `[Q, b] = naive(X, Y)`, ki za vhodne podatke $X = [\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n]$ in $Y = [\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n]$ vrne matriko Q in vektor $\mathbf{b}$ opisana z 'naivnim pristopom'. *Drži se specifikacij: X in Y sta matriki, katerih stolpci so krajevni vektorji posameznih točk, Q je kvadratna matrika,* $\mathbf{b}$ *je stolpec.*

3. Utemelji, da imata determinanti matrik C in UV^{T} iz Kabschevega algoritma enaka predznaka.

4. Napiši octave funkcijo `[Q, b] = kabsch(X, Y)`, ki za vhodne podatke $X = [\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n]$ in $Y = [\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n]$ vrne matriko Q in vektor $\mathbf{b}$ opisana v Kabschevem algoritmu. *Drži se specifikacij: X in Y sta matriki, katerih stolpci so krajevni vektorji posameznih točk, Q je kvadratna matrika,* $\mathbf{b}$ *je stolpec.*

5. Zapiši vektorsko funkcijo, ki pripada nelinearnemu sistemu, in njeno Jacobijevo matriko.

6. Napiši octave funkcijo `[Q, b] = notSoNaive(X, Y)`, ki za vhodne podatke $X = [\mathbf{x}_1, \ldots, \mathbf{x}_n]$ in $Y = [\mathbf{y}_1, \ldots, \mathbf{y}_n]$ vrne matriko Q in vektor $\mathbf{b}$ dobljena z nelinearno izboljšavo naivne rešitve. *Drži se specifikacij: X in Y sta matriki, katerih stolpci so krajevni vektorji posameznih točk, Q je kvadratna matrika,* $\mathbf{b}$ *je stolpec.*

Oddaja naloge

Na spletno učilnico oddaj naslednje:

1. datoteki **naive.m** in **kabsch.m**, ki naj vsebujeta *komentarje* **in** *test(e)*,

2. datoteko (poročilo) **solution.pdf**, ki vsebuje izpeljavo rešitve in odgovore na vprašanja,

3. datoteko **notSoNaive.m**, ki naj vsebuje *komentarje* **in** *test(e)*.

S kolegi se lahko posvetuješ in lahko tudi skupaj rešujete nalogo, vendar moraš program in poročilo izdelati sam. Uporabljaš lahko vse octave funkcije, ki smo jih izdelali na vajah.