Matematický software

Lineární algebra

RNDr. Zbyšek Posel, Ph.D.

Katedra informatiky

Vektory v algebře

Vektor

Nechť n je pevně zvolené přirozené číslo. Poté n-tým *komplexním vektorem* $\mathbf{a}$ rozumíme uspořádanou n-tici $\mathbf{a} = (a_1, a_2, ..., a_n)$.

Vektory v algebře

Vektor

Nechť n je pevně zvolené přirozené číslo. Poté n-tým *komplexním vektorem* $\mathbf{a}$ rozumíme uspořádanou n-tici $\mathbf{a} = (a_1, a_2, \ldots, a_n)$.

Vektorový prostor

Množina všech uspořádaných n-tic komplexních čísel tvoří tzv. n-rozměrný vektorový prostor $\mathbf{V}_n$.

Vektory v algebře

Vektor

Nechť n je pevně zvolené přirozené číslo. Poté n-tým *komplexním vektorem* $\mathbf{a}$ rozumíme uspořádanou n-tici $\mathbf{a} = (a_1, a_2, ..., a_n)$.

Vektorový prostor

Množina všech uspořádaných n-tic komplexních čísel tvoří tzv. n-rozměrný vektorový prostor $\mathbf{V}_n$.

Lineární závislost vektorů

Vektory $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, ..., \mathbf{a}_k \in \mathbf{V}_n$ jsou lineárně závislé, existují-li taková komplexní čísla $c_1, ..., c_k$ (z nichž alespoň jedno je různé od nuly), pro která platí:
$c_1\mathbf{a}_1 + c_2\mathbf{a}2 + ... + c_k\mathbf{a}_k = \mathbf{0}$

Soustava vektorů

Hodnost

Soustava vektorů $\{\mathbf{a}_1, ..., \mathbf{a}_k\}$ z $\mathbf{V}_n$ má hodnost h, jestliže mezi vektory existuje h lineárně nezávislých vektorů, ale každých $h+1$ vektorů je již lineárně závislých.

- Každá soustava vektorů má $h \leq n$.
- Hodnost soustavy se nemění pokud:
  1. Zaměníme pořadí vektorů v soustavě.
  2. Provedeme jakoukoli operaci s vektory, která vede k lineárně závislému vektoru.

Více lze nalézt například v [1] nebo v [2].

Vektory ve fyzice

- Klasická mechanika: polohový vektor $\mathbf{r}(t) \rightarrow \mathbf{F} = m\frac{\mathrm{d}^2\mathbf{r}}{\mathrm{d}t^2}$
- Kvantová teorie: Schrödingerova rovnice $i\hbar\frac{\partial\mathbf{\Psi}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\mathbf{\Psi}}{\partial x^2} + V\mathbf{\Psi}$
- Speciální teorie relativity: relativistická kinematika $u_1' = \frac{u_1 - v}{1 - \frac{vu_1}{c}}$
- Elektromagnetismus: $div\mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}$

Pro lepší představu o využití vektorů ve fyzice obecně prostudujte [3]. Pro použití vektorů v mechanice prostudujte [4] a v teorii elektromagnetického pole [5].

Vektory v informatice

- Shannonova entropie $S(\mathbf{X}) = -\sum_{x\in\mathbf{M}} p(x)\log p(x)$

Aplikovaná informatika pracuje většinou s vektory definovanými v jiných oblastech vědy a techniky.

- Vektorová grafika: polygon, ray-tracing
- Analýza dat: časové řady, korelace, distribuce, transformace
- Kyberbezpečnost: šifrování, reprezentace dat, komprese atd.

Vektorová algebra

Mějme soustavu lineárně nezávislých vektorů $\{\mathbf{a}, \mathbf{b}\} \in \mathbb{R}^3$ takové, že $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$ a $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)$.

Skalární součin

$$\mathbf{S} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \begin{cases} a_1 b_1 + a_2 b_2 + a_3 b_3 \\ |\mathbf{a}|\,|\mathbf{b}| \cos(\varphi) & 0 \le \varphi \le \pi \end{cases}$$

Pro skalární součin platí:

- $\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \mathbf{b} \cdot \mathbf{a}$
- $(\mathbf{a} + \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c} = \mathbf{a} \cdot \mathbf{c} + \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}$
- $\mathbf{a} \cdot \mathbf{a} = |\mathbf{a}|^2$

Vektorová algebra

Mějme soustavu lineárně nezávislých vektorů $\{\mathbf{a}, \mathbf{b}\} \in \mathbb{R}^3$ takové, že $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$ a $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)$.

Vektorový součin

Vektor **c** nazýváme *vektorovým součinem* vektorů **a** a **b**.

$$\mathbf{c} = \left(\begin{vmatrix} a_2, a_3 \\ b_2, b_3 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} a_3, a_1 \\ b_3, b_1 \end{vmatrix}, \begin{vmatrix} a_1, a_2 \\ b_1, b_2 \end{vmatrix} \right)$$

Pro vektorový součin platí:

- Vektorový součin dvou lineárně závislých vektorů je **nulový**.
- **c** je kolmý na vektory **a** a **b**.
- Jeho délka je číslenĕ rovna obsahu rovnoběžníka určeného vektory **a** a **b**.
- $|\mathbf{c}| = |\mathbf{a}||\mathbf{b}| \sin(\varphi)$

Vektorová algebra

Mějme soustavu lineárně nezávislých vektorů $\{\mathbf{a}, \mathbf{b}\} \in \mathbb{R}^3$ takové, že $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$ a $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)$.

Dyadický (tenzorový) součin vektorů

$$\mathbf{A} = \mathbf{a} \otimes \mathbf{b} = \begin{pmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 & a_1 b_3 \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 & a_2 b_3 \\ a_3 b_1 & a_3 b_2 & a_3 b_3 \end{pmatrix}$$

- Výpočty deformací, pružnosti a pevnosti ve stavební mechanice.
- Speciální teorie relativity - čtyřvektor.
- Transformace souřadnic při přechodu mezi soustavami.

Více o tenzorech lze nalézt např. v [2].

Matice

Maticí $A(m, n)$ nazýváme soustavu mn reálných, resp. komplexních čísel $a_{11}, a_{12}, ..., a_{mn}$ sestavených v m řádích a n sloupích[2],[1]:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & .... & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & .... & a_{2n} \\ .... & .... & .... & .... \\ a_{m1} & a_{m2} & .... & a_{mn} \end{pmatrix}$$

- Je-li $m = n$, je A čtvercová matice m-tého stupně.
- Hodnost matice h je počet lineárně nezávislých řádků.
- Hodnost matice lze zjistit pomocí
  - Gaussovy eliminace $\rightarrow$ horní trojúhelníková matice
  - determinantu matice A $\rightarrow$ Existuje subdeterminant h-tého stupně různý od nuly a každý subdeterminat stupně vyššího je roven nule.

Základní operace s maticemi

A a B jsou matice typu (m, n) a $\alpha \in \mathbb{R}$, potom

- $A + B = (a_{ij} + b_{ij})$
- $\alpha A = (\alpha a_{ij})$

je součet matic A a B, resp. součin matice A a čísla α.

Matice A je typu (m, n), matice B je typu (n, p). Potom matice C vzniklá jejich součinem bude typu (m, p) a pro její prvky platí.

$$c_{ij} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \ldots + a_{in}b_{nj}$$

$$\underbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ . & . & . \\ . & . & . \end{pmatrix}}_{A(m,n)} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} b_{11} & . \\ b_{21} & . \\ b_{31} & . \end{pmatrix}}_{B(n,p)} = \underbrace{\begin{pmatrix} c_{11} & . \\ . & . \\ . & . \end{pmatrix}}_{C(m,p)}$$

Základní operace s maticemi

- Transpozice matice

Základní operace s maticemi

- Transpozice matice

Stopa čtvercové matice $A(n, n)$ je číslo $\mathrm{tr}\ A = a_{11} + a_{22} + ... + a_{nn}$

Základní operace s maticemi

- Transpozice matice

Stopa čtvercové matice $A(n, n)$ je číslo $\mathrm{tr}\, A = a_{11} + a_{22} + \ldots + a_{nn}$

Matice A,X a E jsou čtvercové matice typu (n, n) a E je jednotková matice. Pokud platí rovnice

$$AX = E$$

potom X nazýváme **inverzní maticí** k matici A a zapisujeme jako $X = A^{-1}$.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 2 & 0 & 1 \\ 1 & -2 & 1 \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 2 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & -2 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right)$$

Determinant matice

Determinantem matice A nazýváme číslo

$$d_A = \sum (-1)^r a_{1k_1} a_{2k_2} \dots . a_{nk_n}$$

kde se sčítá přes všechny permutace $k_1, k_2, ..., k_n$ čísel $1, 2, ..., n$ a r udává počet inverzí v permutaci.

- Determinant se rovná nule, pokud je alespoň jeden z jeho řádků lineární kombinací ostatních.
- Determinant mění znaménko, prohodí-li se dva řádky mezi sebou.
- Pro výpočet determinantu používáme např. Sarrusovo pravidlo nebo Laplaceův rozvoj

Soustava lineárních rovnic

Soustavou m lineárních rovnic o n neznámých $x_1, x_2, ...x_n$ nazýváme soustavu

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + ... + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + ... + a_{2n}x_n &= b_2 \\ .... &= .. \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + ... + a_{mn}x_n &= b_m \end{aligned}$$

kde $a_{11}, a_{12}, ..., a_{mn}$ a $b_1, b_2, ..., b_m$ jsou daná reálná, reps. komplexní čísla.

Soustavu lze zapsat v maticovém tvaru jako

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & ... & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & ... & a_{2n} \\ ... & ... & ... & ... \\ a_{m1} & a_{m2} & ... & a_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ . \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ . \\ b_n \end{pmatrix}$$

Metody řešení soustav lineárních rovnic

Frobeniova věta

Soustava lineárních rovnic je řešitelná tehdy a jen tehdy, je-li hodnost matice soustavy rovna hodnosti rozšířené matice.

- Soustava homogenních rovnic má vždy triviální řešení $\mathbf{0} = (\mathbf{0}, \mathbf{0}, ..., \mathbf{0})$.
- Soustavu lze řešit např. pomocí
  - Eliminační metody (Gauss. eliminace).
  - Cramerova pravidla
  - Pomocí metod numerické matematiky (přímé a iterační metody).

Metody řešení soustav lineárních rovnic

Cramerovo pravidlo

Soustavu rovnic o n neznámých s nenulovým determinantem soustavy $d_A \neq 0$ má právě jedno řešení $x_1, \ldots, x_n$, kde

$$x_i = \frac{d_{A_i}}{d_A}$$

kde d_{A_i} je determinant soustavy, který vznikne z d_A tak, že nahradíme i-tý sloupec vektorem pravých stran

Spočítejte pomocí Cramerova pravidla řešení x_1, x_2, x_3 následující soustavy.

$$\begin{aligned} 3x_1 + 2x_2 + x_3 &= 5 \\ 2x_1 + 3x_2 + x_3 &= 1 \\ 2x_1 + x_2 + 3x_3 &= 11 \end{aligned}$$

Metody řešení soustav lineárních rovnic

$$d_A = \begin{vmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 3 \end{vmatrix} = 12$$

$$d_{A_1} = \begin{vmatrix} 5 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \\ 11 & 1 & 3 \end{vmatrix} = 24 \quad d_{A_2} = \begin{vmatrix} 3 & 5 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \\ 2 & 11 & 3 \end{vmatrix} = -24 \quad d_A = \begin{vmatrix} 3 & 2 & 5 \\ 2 & 3 & 1 \\ 2 & 1 & 11 \end{vmatrix} = 36$$

$$x_1 = \frac{d_{A_1}}{d_A} = \frac{24}{12} = \mathbf{2} \quad x_2 = \frac{d_{A_2}}{d_A} = \frac{-24}{12} = -\mathbf{2} \quad x_3 = \frac{d_{A_3}}{d_A} = \frac{36}{12} = \mathbf{3}$$

Numerické metody

Existuje celá řada metod pro řešení soustav lineárních rovnic $Ax = b$.

- Přímé metody (Gaussova, Gaussova-Jordanova,..)
- **Iterační metody** (Jacobiova, Gaussova-Seidelova, Superrelaxační)
- Metody Monte Carlo (Sekvenční metoda, Metoda náhodné procházky, ...)
- Speciální metody (Metoda největšího spádu, Metoda sdružených gradientů,..)

Více o numerických metodách pro řešení soustavy lineárních rovnice lze nalézt např. v [6] nebo v [7].

Numerické metody - iterační

$$Ax = b$$

- Získáme posloupnost přibližných řešení ve tvaru $x^{i+1} = F_i(x^i, x^{i-1}, ..., x^{i-k})$
- Řešení konverguje k přesnému řešení x pokud: $\lim_{i\to\infty} x^i = x$.
- Uvedeme si „pouze“ metody, kde rovnice má speciální tvar: $x^{i+1} = Bx^i + Cb$.
- Ukončovací podmínka iteračního procesu: $||x^{i+1} - x^i|| \leq \epsilon$, kde $\epsilon \in \mathbb{R}$ je dostatečně malé.
- Podmínky konvergence iteračních metod:
  - Matice A je symetrická a pozitivně definitní

$$d_{A_k} > 0 \qquad k = 1, ..., n$$

  - Matice A je diagonálně dominantní. Součet prvků v libovolném řádku matice B musí být menší, než prvek na diagonále:

$$\sum_{\substack{j=1 \\ i\neq j}}^{n} |B_{ij}| \leq |B_i| \qquad i = 1, ..., n$$

Jacobiova iterační metoda

Matici soustavy A rozložíme na součet tří matic

- Horní trojúhelníková matice bez diagonály: U

Jacobiova iterační metoda

Matici soustavy A rozložíme na součet tří matic

- Horní trojúhelníková matice bez diagonály: U
- Dolní trojúhelníková matice bez diagonály: L

Jacobiova iterační metoda

Matici soustavy A rozložíme na součet tří matic

- Horní trojúhelníková matice bez diagonály: U
- Dolní trojúhelníková matice bez diagonály: L
- Diagonální matice: D

Jacobiova iterační metoda

Matici soustavy A rozložíme na součet tří matic

- Horní trojúhelníková matice bez diagonály: U
- Dolní trojúhelníková matice bez diagonály: L
- Diagonální matice: D

a soustavu poté upravíme následujícím způsobem.

$$
\begin{aligned}
(D + L + U)x &= b \\
Dx + (L + U)x &= b \\
Dx &= b - (L + U)x \\
x &= D^{-1}\left[b - (L + U)x\right]
\end{aligned}
$$

Jacobiova iterační metoda

Matici soustavy A rozložíme na součet tří matic

- Horní trojúhelníková matice bez diagonály: U
- Dolní trojúhelníková matice bez diagonály: L
- Diagonální matice: D

a soustavu poté upravíme následujícím způsobem.

$$
\begin{aligned}
(D + L + U)x &= b \\
Dx + (L + U)x &= b \\
Dx &= b - (L + U)x \\
x &= D^{-1}\left[b - (L + U)x\right]
\end{aligned}
$$

$$
\boxed{x^{i+1} = D^{-1}\left[b - (L + U)x^{i}\right]}
$$

Gaussova-Seidelova iterační metoda

Použijeme stejný rozklad, jako v případě Jacobiovy metody, ale vyjádříme x^{i+1} v jiném tvaru.

$$\begin{aligned}
(D + L + U)x &= b \\
(D + L)x + Ux &= b \\
(D + L)x &= b - Ux \\
x &= (D + L)^{-1} [b - Ux]
\end{aligned}$$

Gaussova-Seidelova iterační metoda

Použijeme stejný rozklad, jako v případě Jacobiovy metody, ale vyjádříme x^{i+1} v jiném tvaru.

$$\begin{aligned}(D+L+U)x &= b\\ (D+L)x+Ux &= b\\ (D+L)x &= b-Ux\\ x &= (D+L)^{-1}\left[b-Ux\right]\end{aligned}$$

$$x^{i+1} = (D+L)^{-1}\left[b-Ux^{i}\right]$$

Superrelaxační metoda

Využívá se pro urychlení procesů, resp. konvergence iteračních metod.

Superrelaxační metoda

Využívá se pro urychlení procesů, resp. konvergence iteračních metod.

$x^{i+1} = F(x^i)$	Mějme např. Gauss.-Seidel. metodu
$x^{i+1} = x^i + F(x^i) - x^i$	Upravíme následujícím způsobem
$x^{i+1} = x^i + \Delta x_i$	kde $\Delta x_i = F(x^i) - x^i$
$x^{i+1} = x^i + \omega \Delta x_i$	Místo opravy přičteme opravu o ω větší

Superrelaxační metoda

Využívá se pro urychlení procesů, resp. konvergence iteračních metod.

$x^{i+1} = F(x^i)$	Mějme např. Gauss.-Seidel. metodu
$x^{i+1} = x^i + F(x^i) - x^i$	Upravíme následujícím způsobem
$x^{i+1} = x^i + \Delta x_i$	kde $\Delta x_i = F(x^i) - x^i$
$x^{i+1} = x^i + \omega \Delta x_i$	Místo opravy přičteme opravu o ω větší

$$\boxed{x^{i+1} = (1 - \omega)x^i + \omega F(x^i)}$$

Vhodnou volbou parametru ω lze dosáhnout rychlejší konvergence metody. Volba $\omega < 1$ **zpomalí** konvergenci, ale **zvýší** stabilitu metody.

Práce s vektory a maticemi v Pythonu

- Reprezentace vektorů a matic v Pythonu (NumPy SciPy, atd.)
- Demonstrace: vytváření vektorů, dotazovací příklady, vestavěné funkce
- Příklady(rychlé) pro násobení vektorů (různé součiny)
- Demonstrace: vytváření matic, dotazovací příklady, vestavěné funkce, speciální matice a jejich generování
- Vestavěné funkce/balíky pro práci s maticemi: násobení, hodnost, Gauss. eliminace atd.
- Využití symbolické matematiky pro práci s vektory, maticemi

Úkoly z této kapitoly

- Vektory: Vektorový součin pomocí Levi-Civitova symbolu
- Determinant: Laplaceův rozvoj
- Soustava rovnic: Cramerovo pravidlo
- Soustava rovnic: Numerická úloha (dle výběru) a porovnání, generování náhodné matice atd..

Vektorový součin - cvičení

Napište program pro vektorový součin dvou vektorů $\mathbf{a} = (a_1, a_2, a_3)$ a $\mathbf{b} = (b_1, b_2, b_3)$ pomocí tzv. Levi-Civitova symbolu.

$$\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \begin{vmatrix} \mathbf{e_1} & \mathbf{e_2} & \mathbf{e_3} \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} = \sum_{i=1}^{3} \sum_{j=1}^{3} \sum_{k=1}^{3} \gamma_{ijk} \mathbf{e_i} a_j b_k$$

kde

$$\gamma_{ijk} = \begin{cases} +1 & (i,j,k) \in \{(1,2,3),(2,3,1),(3,1,2)\} \\ -1 & (i,j,k) \in \{(3,2,1),(1,3,2),(2,1,3)\} \\ 0 & i = j, j = k, i = k \end{cases}$$

Výsledek srovnejte s vestavěnou funkcí pro výpočet vektorového součinu dvou vektorů.

Laplaceův rozvoj - cvičení

Pomocí Laplaceova rozvoje spočítejte determinant matice A.

Nagenerujte čtvercovou matici A o rozměrech (N, N) a pomocí Laplaceova rozvoje spočítejte determinant této matice.

- Nagenerujte náhodnou matici celých čísel o rozměru (N, N).
- Zkontrolujte, zda je matice čtvercová.
- Spočítejte determinant pomocí Laplaceova rozvoje.
- Zkuste změnit velikost matice A v rozmezí $N \in (5, 200)$ a vykreslete časovou náročnost výpočtů. Dejte pozor na reprezentaci čísel.

Laplaceův rozvoj - cvičení

Pomocí Laplaceova rozvoje spočítejte determinant následující matice.

Laplaceův rozvoj pro výpočet determinantu matice

Dle Laplaceova rozvoje lze determinant čtvercové matice A o rozměrech (N, N) získat následovně:

$$\begin{aligned} |A| &= \sum_{j=1}^{N} (-1)^{i+j} a_{ij} M_{ij} \\ M_{ij} &= |S_{ij}^{A}| \end{aligned}$$

kde S_{ij}^{A} je submatice, která vznikne vynecháním i-tého řádku a j-tého sloupce matice A. M_{ij} se nazývá minor matice A a spočítá se jako determinant submatice S_{ij}^{A}. a_{ij} je prvek matice A. Postup je platný i pro případ, kdy provádíme rozvoj přes sloupec nebo řádek.

Cramerovo pravidlo - cvičení

Pomocí Cramerova pravidla, $x_i = \frac{d_{A_i}}{d_A}$, vyřešte následující soustavu rovnic.

$$
\begin{aligned}
5x_1 - 6x_2 + 4x_3 &= 3\\
3x_1 \qquad\;\; + 2x_3 &= 5\\
4x_1 - 5x_2 + 2x_3 &= 1
\end{aligned}
$$

Jacobiova metoda - cvičení

Pomocí Jacobiovy iterační metody spočítejte následující soustavu rovnic.

$$x^{i+1} = D^{-1}\left[b - (L+U)x^i\right]$$

$$\begin{aligned} 6x_1 + 2x_2 - 3x_3 &= 10 \\ x_1 + 4x_2 - 2x_3 &= 6 \\ 3x_1 + 2x_2 - 7x_3 &= -4 \end{aligned}$$

Literatura I

- Jura Charvát Bruno Budínský.
  Matematika I - část 1.
  Vydavatelství ČVUT, 2000.
- Karel Rektorys a kol.
  Přehled užité matematiky I.
  SNTL, 1988.
- Matthew Sands Richard P. Feynman, Robert P. Leighton.
  Feynmanovy přednášky z fyziky s řešenými příklady 1-3.
  Fragment, 2000.
- Jiří Králík.
  Mechanika.
  Ediční středisko PF UJEP, 2003.
- Dušan Novotný.
  Elektromagnetické pole.
  Ediční středisko PF UJEP, 2008.

Literatura II

William H. Press; Saul A. Teukolsky; William T. Vetterling; Brian P. Flannery.
Numerical Recipes in C - The art of scientific computing.
Cambridge university press, 2002.

Miroslav Vicher.
Numerická matematika.
Ediční středisko PF UJEP, 2003.