MIT OCW Hesapsal Bilim 18.085 Ders 1

Bu derste matrislerden bahsedilecek, onlarin canlanmasini, dile gelmesini istiyoruz. Mesela alttaki gibi bir matris

$$K = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

nedir? Nereden gelir? Bu matris bir seyi temsil edecek, bilimsel bir problemi cozmemizi saglayacak.

Matrisin ozelliklerine bakalim. Ilk bakista bunun simetrik bir matris oldugunu goruyoruz. Yani $K = K^T$. Bu tur matrisler ozellikle dengedeki sistemler (equilibrium) problemlerinde cok ortaya cikiyorlar. Baska ozellikler? K'yi buyutseydik, seyrek (sparse) olacakti, yani icinde cok fazla sayida sifir olacakti. Su haliyle tam seyrek denemez, ama ayni kalipla buyutulursek seyrek olur. Eger Python kullanarak sifir olmayan elemanlari saydirmak isteseydik, sonuc ne gelecekti? 4x4 olan K icin alttaki kod

```
import numpy as np
K = np.array([[2,-1,0,0],[-1,2,-1,0],
              [0,-1,2,-1],[0,0,-1,2]])
print np.count_nonzero(K)
```

10 sonucunu verir. 4x4 = 16 icinden 10 eleman sifir degildir. Eger 100x100 olsaydi? Matris ayni kalibi takip ederse, yani caprazi, ve caprazin bir alti ve bir ustu dolu kalirsa, caprazda 100 eleman olur (boyutla ayni), alt ve ustunde birer az eleman olur, yani 99+99 = 198. Toplayalim, 100 + 198 = 298. Yani 100x100 = 10000 eleman icinden 298 eleman sifir degildir, geri kalan bir suru eleman sifirdir. Matris seyrektir.

Numerik hesaplamada yogun (dense -sifiri fazla olmayan-) matrisler, buyuk boyutlarda basimizi agritabilir. Seyrek matrisleri daha hizli cozmenin yontemleri vardir, ama 1 milyon x 1 milyon bir yogun matris cozmesi imkansiz hale gelebilir.

Baska ozellikler? Matris ucsel caprazli (tridiagonal). Bu tur matrisler cok onemlidir, Newton sagolsun, ikinci seviye diferansiyel denklemlerden surekli ortaya cikarlar mesela.

Dahasi? Bu bir Toeplitz matrisi, caprazdaki degerler sabit degerler, capraz boyunca hic degismiyorlar. Bu matrislere lineer zamana gore degismeyen filtreler (linear time invariant filters) ismi de veriliyor, cunku her satir birbirinin ayni (ve hesabimizda satirlarin zamani temsil ettigi kabulunden hareketle). Python ile bir Toeplitz yaratmanin yontemi soyle:

```
import scipy.linalg as lin
K = lin.toeplitz([2, -1, 0, 0])
print K
```

Sonuc

```
[[ 2 -1  0  0]
 [-1  2 -1  0]
 [ 0 -1  2 -1]
 [ 0  0 -1  2]]
```

100x100 icin Toeplitz komutuna verdigimiz tek satirda daha fazla sifir gerekli. Icinde tamamen sifir olan bir vektor yaratiriz, basindaki birkac elemani istedigimiz degerle atariz.

```
import numpy as np
import scipy.linalg as lin
vec = np.zeros((1,100))
vec[0,0] = 2
vec[0,1] = -1
print lin.toeplitz(vec)
```

Sonuc

```
[[ 2. -1.  0. ...,  0.  0.  0.]
 [-1.  2. -1. ...,  0.  0.  0.]
 [ 0. -1.  2. ...,  0.  0.  0.]
 ...,
 [ 0.  0.  0. ...,  2. -1.  0.]
 [ 0.  0.  0. ..., -1.  2. -1.]
 [ 0.  0.  0. ...,  0. -1.  2.]]
```

Seyrek matrislerle islem yaptigimizi Python'a bir sekilde belirtmemiz lazim, eger mevcut haliyle bu matrisi cozmeye ugrasirsak, Python sifirlara gelene kadar onlarin sifir oldugunu bilemeyecektir.

```
import scipy.sparse as sparse
import numpy as np
import scipy.linalg as lin
vec = np.zeros((1,100))
vec[0,0] = 2
vec[0,1] = -1
K = lin.toeplitz(vec)
A = sparse.lil_matrix(K)
print A
```

Yanliz yukarida yogun matrisi once yarattim, sonra onu degistirerek seyrek matris yarattim, daha iyisi bastan bir seyrek matris yaratmakti. Neyse, bu yontemi ileri de gorecegiz.

Daha derine inelim simdi. K matrisi tersi alinabilen (invertible) bir matris midir? Evet. Bu ne demektir? $KK^{-1} = I$, ve I matrisi birim (identity) matrisidir, Python'da `np.eye(N)` komutuyla yaratilabilir.

Bir matrisin tersinin alinip alinamayacagini nasil anlayabiliriz? Bu cok onemli, temel bir sorudur.

Bazilarinin aklina determinanti hesaplamak gelebilir. Fakat hocanin ilk secimi bu degil. Onun tercihi satir indirgemek (row reduce). Tavsiyesi bu, onunuzde bir matris var, ve icinde neler olup bittigini bilmiyorsunuz. Satir indirgeyin.

Bu nasil yapilir? K'in caprazinin altindaki -1 degerlerini sifirlamak istiyorum. Orayi temizlemek istiyorum, cunku matrislerim eger ucgensel (triangular) ise, olan biteni aninda gorebilirim.

Birinci satiri ikiye bolup, ikinci satira eklerim. Terminoloji: 0,0 kordinati (en ust sol kose) bu islem sirasinda pivot oldu.

$$
\begin{array}{cccccc}
[& 2 & -1 & 0 & 0 &] \\
[& 0 & 3/2 & -1 & 0 &] \\
[& 0 & -1 & 2 & -1 &] \\
[& 0 & 0 & -1 & 2 &]
\end{array}
$$

Simdi pivot 3/2, ve onun altindaki degeri temizlemek istiyoruz. Ikinci satirin 2/3'unu alta eklersek, oradaki -1 sifirlanir.

$$
\begin{array}{cccccc}
[& 2 & -1 & 0 & 0 &]
\end{array}
$$

```
[ 0   3/2  -1      0]
[ 0   0     4/3   -1]
[ 0   0    -1      2]
```

ve sonunda

```
[ 2  -1     0      0]
[ 0   3/2  -1      0]
[ 0   0     4/3   -1]
[ 0   0     0    5/4]
```

Bu gercekten hizli bir islem oldu. Python da determinanti zaten boyle bulacakti. Yoketme (elimination) kullanacakti, teker teker -1'leri yokedecekti. Peki determinantin degeri nedir? 5. Niye 5? Cunku elimizdeki artik ucgensel bir matris, ve boyle matrislerde caprazdaki elemanlari birbiriyle carpmakla determinant hemen hesaplanir. Python aynen boyle yapacakti, $2 \cdot 3/2 \cdot 4/3 \cdot 5/4 = 5$.

Simdi tersinin olup olmadigi sorusuna geri donelim: Bir ust ucgensel (upper triangular) matris ne zaman tersine cevirilebilir haldedir? Determinant kelimesini kullanmamiza gerek yok, capraza bakariz, eger bu capraz sifir degeri olmayan bir capraz ise bu matris tersine cevirilebilir demektir. Terminoloji: demek ki elimizde N tane (K_4 icin 4) tane sifir olmayan pivot var.

1. dersin amaclarindan biri matrislere isim vermek. K matrisi bunlardan biri, onemli bir matris, onu ileride tekrar gorecegiz, gorunce taniyacagiz.

$$C = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Peki su matris? Toeplitz formunda ama ust sag ve alt sol koselerde ekstra bir -1 degeri var. Fakat iddia ediyorum ki bu matris tersine cevirebilir degil ve bunun icin determinant, ya da yoketme teknigine gerek yok. Terminoloji: Matrise C denilmesi onun degerlerinin dairesel (circulant) olmasindan ileri geliyor. -1 degerlerine bakin, sanki bir yuvarlak olusturuyorlar, sifir degerleri ayni sekilde.

Devam edelim: Diyelim ki C bir vektoru carpiyor (zaten matrislerin tek amaci bu, vektorler ile carpilmak), ve ortaya sifir vektoru cikiyor. Bos olan vektor ne olabilir?

$$C = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \\ \\ \\ \\ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Su olabilir

$$C = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Iddia ediyorum ki boyle bir vektorun olabilmesi C'nin tersine cevirilebilir olma olasiligini yoketti. Nasil?

Eger C'nin tersi olabilseydi, $Cu = 0$ denklemi ne olurdu? Iki tarafi bu "olabilen" C^{-1} ile carpip sonuca bakalim:

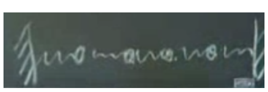
$C^{-1}Cu = C^{-1}0$

$Iu = 0$

$u = 0$

Yani eger C'nin tersi olsaydi, $Cu = 0$ denkleminin tek sonucu $u = 0$ olurdu. Fakat bu boyle degildir, ustte icinde 1 olan vektor bunun kaniti. O zaman bir uyusmazlik, absurtluk elde ettik, demek ki C'nin tersi oldugu iddiasi yanlistir.

Fiziksel olarak K ve C'nin kutle ve yay sistemi olarak kabul edebiliriz. Mesela K soyle bir sistemi temsil edebilir:



Yuvarlak olan C sistemi sunu temsil edebilir

Resimdeki noktalar kutleler, ve yaylar o kutleleri birbirine bagliyorlar.

T Matrisi

Bu matris K'ye benzer, fakat en ust satirda 2 yerine 1 var.

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Kutle ve yay sistemine donersek bu matris bir ucu serbest olan bir mekanik sistemi gosterebilir.

B Matrisi

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

Bu sistem de her iki ucu da serbest olan bir sistemdir. Bu sistemi alip istedigimiz yere goturebiliriz.

Son iki matrisin ikisi de simetriktir, ucgensel ve caprazsal (diagonal) matrislerdir. Niye ucgensel ve caprazsal? Cunku her kutle sag ve solunda tek bir (diger) kutleye baglidir, o yuzden bagli olmadigi kutlelere olan matris degeri 0 olarak gosterilir, bu da bir ucgensel caprazsal sistem ortaya cikarir.

Ama T ve B artik Toeplitz degildir.

Bu noktada sınır sartlari (boundary conditions) kavramina vurgu yapmakta yarar var. Mekanik sistemde ucun ne oldugu matrislere sınır sarti olarak yansiyor. Ve bu sartlar bir sistemin cozulmesinde son derece onemli. Hoca kendisine bir problemle gelenlere genelde ilk once bu soruyu soruyor o yuzden: "sınır sartlarin ne?".

Tersine cevirilme durumu? T tersine cevirilebilir, B cevirilemez. B icin yine ayni u = [1 1 1 1] ispatini kullanabiliriz.

K, T, B, C matrislerini ayni anda yaratan bir Python programi surada. Kullanim mesela 4x4 boyutlari icin `K, T, B, C = ktbc(4)` seklinde, bu bize tum ozel matrisleri bir kerede olusturuyor.

```python
import numpy as np
import scipy.linalg as lin

def ktbc(n):
    vec = np.zeros((1,n))
    vec[0,0] = 2
    vec[0,1] = -1
    K = lin.toeplitz(vec)
    T = np.copy(K)
    T[0,0] = 1
    B = np.copy(K)
    B[0,0] = 1
    B[n-1,n-1] = 1
    C = np.copy(K)
    C[n-1,n-1] = 1

    return K, T, B, C
```

Kapatirken su ozellikleri de ekleyelim.

K, T pozitif kesin (positive definite) matrislerdir.

C, B pozitif yari-kesin (positive semi-definite) matrislerdir.

Eger simetrik bir matrisim var ise ve pivotlarin hepsi pozitif ise, o matris hem tersine cevirelebilir, hem de pozitif kesin demektir. Yani bir matrise bakariz, yoketme teknigini uygulariz sonra pivotlarina bakariz.

Pozitif kesinlik cok onemli bir kavramdir, lineer cebirin tamamini biraraya getirir sanki, ozdegerlere (eigenvalue) baglidir, least square yontemine baglidir, determinantlar. Her yerden cikar.

Geriye Dogru Farklilik Matrisi

Python `toeplitz` cagrisinin degisik bir sekilde kullanarak geriye dogru farklilik (backward difference) matrisi de yaratabiliriz. Bu kullanimda matrisin sol kolonunu, ve ust satirini tamamen belirtmek gerekiyor.

```python
import numpy as np
import scipy.linalg as lin
```

```
D = lin.toeplitz([1, -1, 0, 0], [1, 0, 0, 0])
print D
```

```
[[ 1  0  0  0]
 [-1  1  0  0]
 [ 0 -1  1  0]
 [ 0  0 -1  1]]
```

Cozulmus Soru 1.1 B

Soru: T matrisini H matrisine cevir bunu J matrisini kullanarak yap.

$$H = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$T = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

Kitaptaki bu sorunun cozumundeki J matrisi birimsel matrisin tersidir, su sekildedir:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Yani 1 sayilari sola yatik caprazda degil saga yatik caprazda. Bu matrisin carpim islemi sirasinda ilginc etkileri var. Eger sagdan carpilirsa bir matrisin her satirinin icindeki sirayi tersine ceviriyor. Eger soldan carpilirsa her kolon icindeki sirayi tersine ceviriyor. $J * T * J$ carpimi aradigimiz sonuc. Yani satirlari cevirdikten sonra, kolonlari cevirince istedigimiz sonuca erisiyoruz. Python kodlari

```
import numpy as np
import scipy.linalg as lin
T = lin.toeplitz([2, -1, 0])
T[0,0] = 1
J = np.fliplr(np.eye(3))
print T
print np.dot(T,J)
print np.dot(J, np.dot(T,J))
```

Soru 1.1 2

```
import numpy as np
import scipy.linalg as lin

T = lin.toeplitz([2, -1, 0])

T[0,0] = 1

U = np.array([[1, -1, 0],
              [0, 1, -1],
              [0, 0, 1]])

print np.dot(U.T,U)
print np.dot(U,lin.inv(U))
print np.dot(lin.inv(U), lin.inv(U).T)
```

Soru 1.1.5

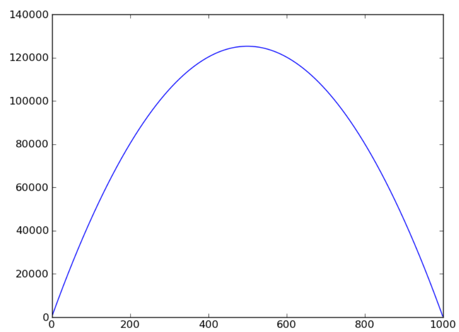
```
import numpy as np
import scipy.linalg as lin
import ktbc

K, T, B, C = ktbc.ktbc(3)
print lin.inv(K)
print lin.det(K)
print lin.det(K) * lin.inv(K)

K, T, B, C = ktbc.ktbc(5)
print lin.det(K)
print lin.inv(K)
print lin.det(K) * lin.inv(K)
```

Soru 1.1.22

Cozulmesi istenen denklem $du^2/dx^2 = 1$, elastik cubuk problemi ve cubugun iki tarafi sabitlenmis.

```
import scipy.sparse as sparse
import scipy.sparse.linalg
import numpy as np
```

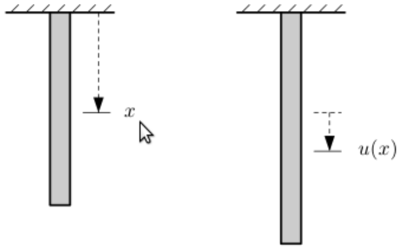
```
import scipy.linalg as lin
import matplotlib.pyplot as plt

n = 1000
vec = np.zeros((1,n))
vec[0,0] = 2; vec[0,1] = -1
K = lin.toeplitz(vec)
A = sparse.csc_matrix(K)
e = np.ones((n,1))

u = sparse.linalg.spsolve(A,e)
plt.plot(u)
plt.show()
```



Sonuc ustteki grafik gibi olmali. Yani cozumumuz olan u degerleri bir parabol olusturuyorlar. Bu demektir ki cubugun orta noktalari daha fazla yer degistiriyor, uc noktalari daha az yer degistiriyor.

Elastik Cubuk

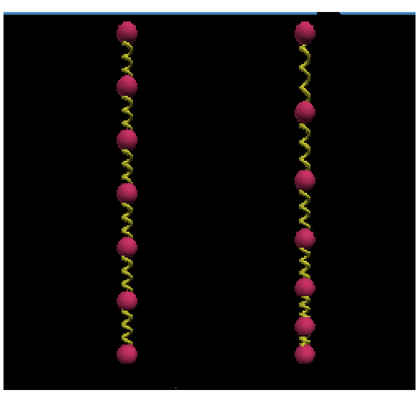
Derste cokca kullanilan elastik cubuk kavramindan simdi bahsetmek iyi olur. Bu cubuk tek boyutlu ve sadece boyuna dogru (yana dogru degil) uzayip kisalabilen matematiksel bir kurgu. Bu cubugu hayalimizde birbirine zincirler ile bagli sonsuz sayida ufak parcacigin toplami olarak dusunebiliriz. x ve $u(x)$ baglaminda ise cubugun iki kere fotografinin cekildigini dusunelim. Ilk fotografta x bu cubugun uzerindeki bir parcacik. $u(x)$ ise tum agirliklar, kuvvetler etkilerini gosterip uzama, kisalma bitince cekilen *ikinci* fotografta ilk resimdeki x noktasinin ne kadar yer degistirmis oldugu.



"Ucu sabitlemek" gibi kavramlar duyacagiz, bunlar bazen fiziksel olarak anlamli, bazen ise ikinci fotografta esneme sonrasi hangi noktaya gelindiginin onceden belirlenmesi anlaminda. du/dx gibi bir turevi irdelerken ise ortada zaman olmadigini dikkate alalim, turev x'e gore yani ilk resimdeki parcacigin yeri. O zaman du/dx ikinci resimdeki esnemenin cubuktaki yer arttikca (asagi indikce) ne kadar degistigi.

Denklemin saginda yer alan degerler, sisteme disaridan verilen guc olarak gorulebiliyor, hakikaten de degisimin ikinci turevi ivmedir. 1.2.22 sorusunu gorsel olarak nasil hayal edebiliriz? Cubugun iki ucu sabitlenmis, o sebeple K matrisi kullaniyoruz zaten, boylece sinir sartlari dahil oluyor.

Python, VPython uzerinden kullanilabilecek KineticsKit adli paket sistemi zihinde canlandirmak icin yardimci olabilir. Birbirine esit uzaklikta, ayni kutlede ve arasinda yaylar olan 7 tane topu birakinca ne oldugunu simule edebiliriz. Resimdeki sol kisim baslamadan once, sag kisim yercekimi isini bitirdikten ve toplar durduktan sonrasini gosteriyor.



Alttaki program hem gorsel simulasyonu yapacak, hem de toplarin once ve sonra degerlerini hatirlayarak yercekimi sonrasi aradaki farki hesaplayacak.

Sonuclara bakinca hakikaten de ortadaki toplarin daha fazla hareket ettigini gorebiliyoruz. Grafiksel olarak dusunursek te mantikli, uste yakin toplar ustten bagli olduklari icin fazla uzaklasamiyorlar, ortalara yakin toplar, bir ustlerinden de aldiklari ek mesafe sayesinde daha fazla yer degistirebiliyor. Ama alt kisima yaklastikca orada bir birikme oluyor, cunku alt uc kisim da sabitlenmis.

```python
from KineticsKit import *
from visual import vector

system = System(timestep=0.04, gravity=1)

mass1 = Mass(m=0.1, pos=(0.0, 0.0, 0.0), fixed=1)
mass2 = Mass(m=0.1, pos=(0.0, 0.5, 0.0))
mass3 = Mass(m=0.1, pos=(0.0, 1.0, 0.0))
mass4 = Mass(m=0.1, pos=(0.0, 1.5, 0.0))
mass5 = Mass(m=0.1, pos=(0.0, 2.0, 0.0))
mass6 = Mass(m=0.1, pos=(0.0, 2.5, 0.0))
mass7 = Mass(m=0.1, pos=(0.0, 3.0, 0.0), fixed=1)

system.insertMass(mass1)
system.insertMass(mass2)
system.insertMass(mass3)
system.insertMass(mass4)
system.insertMass(mass5)
system.insertMass(mass6)
system.insertMass(mass7)

spring1 = SingleHelixSpring(m0=mass1, m1=mass2, k=1, damping=0.5)
system.insertSpring(spring1)
spring2 = SingleHelixSpring(m0=mass2, m1=mass3, k=1, damping=0.5)
system.insertSpring(spring2)
spring3 = SingleHelixSpring(m0=mass3, m1=mass4, k=1, damping=0.5)
system.insertSpring(spring3)
spring4 = SingleHelixSpring(m0=mass4, m1=mass5, k=1, damping=0.5)
system.insertSpring(spring4)
spring5 = SingleHelixSpring(m0=mass5, m1=mass6, k=1, damping=0.5)
system.insertSpring(spring5)
```

```
spring5 = SingleHelixSpring(m0=mass6, m1=mass7, k=1, damping=0.5)
system.insertSpring(spring5)

loc_1 = [mass2.sphere.pos.y, mass3.sphere.pos.y,
         mass4.sphere.pos.y, mass5.sphere.pos.y,
         mass6.sphere.pos.y]

count = 0

while 1:
    system.step()
    count += 1
    if count == 100: break

loc_2 = [mass2.sphere.pos.y, mass3.sphere.pos.y,
         mass4.sphere.pos.y, mass5.sphere.pos.y,
         mass6.sphere.pos.y]

from itertools import izip
for x,y in izip(loc_1, loc_2):
    print x-y
```