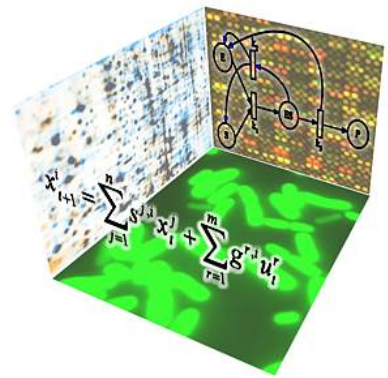


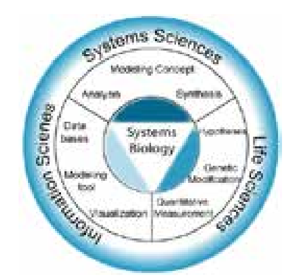
Optativa 4rt curs de Biotecnologia

Modelització i simulació de biosistemes

Revisió: Sistemes lineals

Joan Albiol

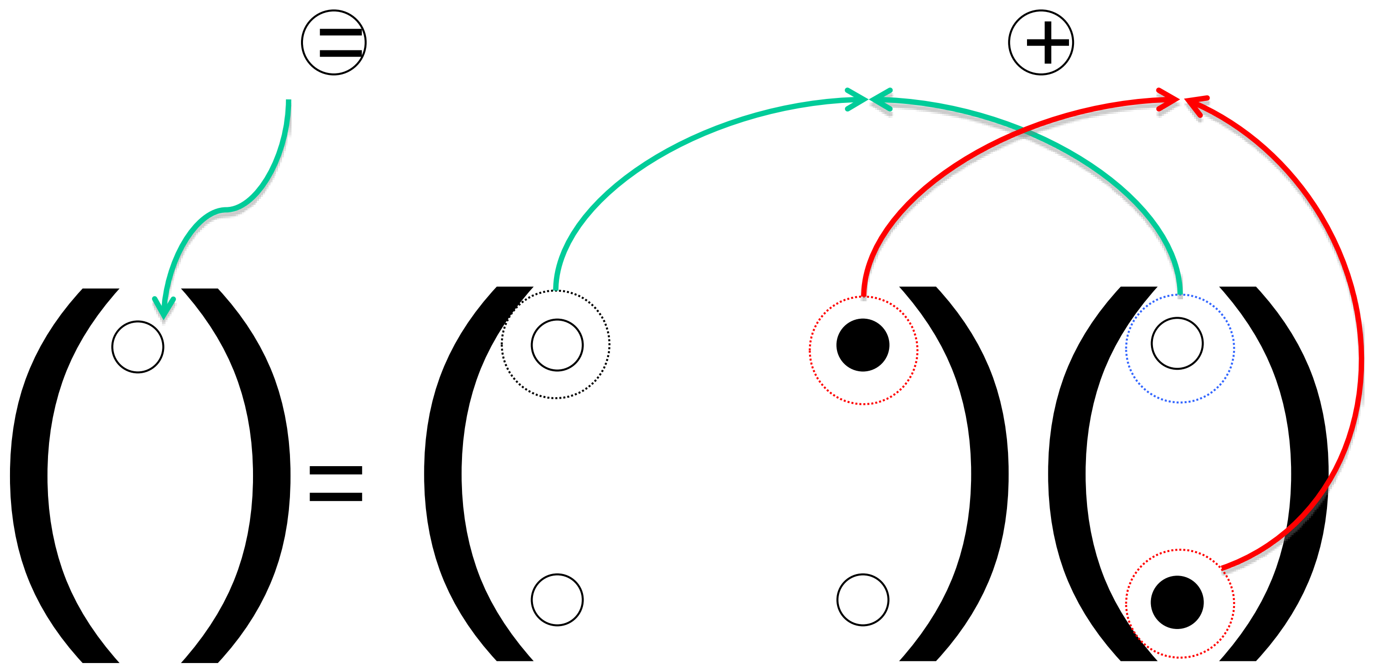
Departament d'Enginyeria Química
Escola d'Enginyeria
Universitat Autònoma de Barcelona



Operacions amb vectors i matrius:

Producte matricial:

Requeriment: el nombre de columnes de la primera matriu ha de ser igual al nombre de files de la segona. Els components es multipliquen un a un i es sumen segons:



Resum d'operacions amb vectors i matrius

$N_{i,j}$ fila i, columna j

$$J = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$ 1 columna, n files

$$N = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & -1 \end{pmatrix}$$ n columnes, m files (m x n)

Normes de càlcul

Multiplicació per constant:

$$k \cdot \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ka_{11} & ka_{12} \\ ka_{21} & ka_{22} \end{pmatrix}$$

Suma

$$\underset{(m \times n)}{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}} + \underset{(m \times n)}{\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}} = \underset{(m \times n)}{\begin{pmatrix} a_{11}+b_{11} & a_{12}+b_{12} \\ a_{21}+b_{21} & a_{22}+b_{22} \end{pmatrix}}$$

Producte

$$\underset{(m \times n)}{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}} \cdot \underset{(n \times p)}{\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}} = \underset{(m \times p)}{\begin{pmatrix} a_{11}b_{11} + a_{12}b_{21} & a_{11}b_{12} + a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} + a_{22}b_{21} & a_{21}b_{12} + a_{22}b_{22} \end{pmatrix}}$$

Inversa

$$A\,B = C \Rightarrow A\,\underbrace{B\,B^{-1}}\, = C\,B^{-1} \Rightarrow A = C\,B^{-1}$$

$$B\,B^{-1} = I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

B ha de ser quadrada no singular

Multiplicar per la dreta o per l'esquerra dona resultats diferents:

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 29 & 27 \\ 42 & 40 \end{bmatrix}$$

1

$$\begin{bmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 17 & 39 \\ 22 & 52 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \mathbf{C}$$

$$\mathbf{B} \times \mathbf{A} = \mathbf{D}$$

Per tant dividir per la dreta o esquerra també

Per transposar el resultat,transposar tot el sistema i canviar l'ordre

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 29 & 27 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 5 & 7 \\ 6 & 8 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 29 \\ 27 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{a} \times \mathbf{B} = \mathbf{c}$$

$$\mathbf{B}^T \times \mathbf{a}^T = \mathbf{c}^T$$

El treball amb sistemes lineals es facilita molt si s'expressen en forma de matrius i vectors

Exemples:

A)

$$p = a \cdot x + b \cdot y$$
$$q = c \cdot x + d \cdot y$$

$$\begin{bmatrix} p \\ q \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$$

B)

$$p = a \cdot x + b \cdot y + c \cdot z$$
$$q = d \cdot x + e \cdot y + f \cdot z$$
$$r = g \cdot x + h \cdot y + j \cdot z$$

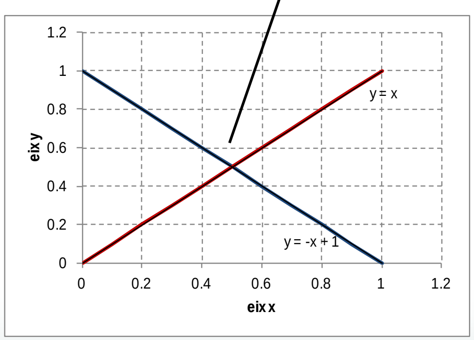
$$\begin{bmatrix} p \\ q \\ r \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & j \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$$

Visió gràfica de la solució d'un sistema:

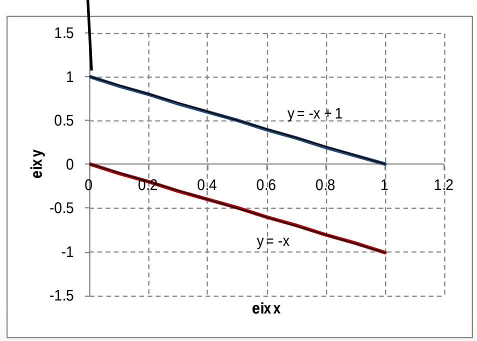
$$1 = x + y \qquad 0 = x - y \qquad \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

solució



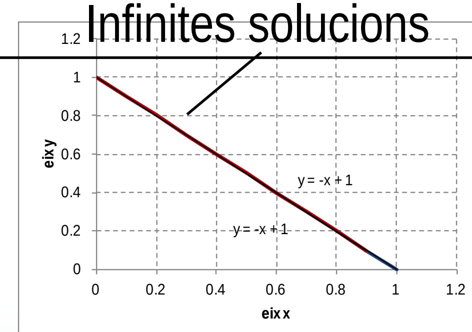
$$1 = x + y \qquad 0 = x + y \qquad \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

No hi ha solució



$$1 = x + y \qquad 2 = 2x + 2y \qquad \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

Línies sobreposades. Infinites solucions



Habitualment interessa trobar la solució d'un sistema tal com:

Solució: $\mathbf{b} = \mathbf{A} \times \mathbf{x}$ equivalentment: $\mathbf{A}^{-1} \times \mathbf{b} = \mathbf{A}^{-1} \times \mathbf{A} \times \mathbf{x}$

$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} \times \mathbf{b}$ $\mathbf{A}^{-1} \times \mathbf{b} = \mathbf{I} \times \mathbf{x}$

$$\begin{bmatrix} 68 \\ 166 \\ 266 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 5 & 4 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}^{-1} \times \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.67 & 0.33 & 0 \\ -0.17 & -0.67 & 0.5 \\ 0.67 & 0.33 & -0.33 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 68 \\ 166 \\ 266 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 11 \\ 12 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & -0.5 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

Un sistema que té solució és '**consistent**'. Si no la té és '**inconsistent**'.

Condicions per tenir solució única:

- El determinant de la matriu A no pot ser zero
- Les files o columnes han de ser 'linealment independents' (num lin. Ind.=rang)
- La matriu ha de tenir rang 'sencer'. (rang igual al nombre de files-columnes)
- La matriu ha de ser quadrada

Si les condicions es compleixen:

• El sistema és determinat i de solució única

Si les condicions no es compleixen:

a) Si hi ha més equacions que incògnites però el rang és igual al nombre d'incògnites (**'sobredeterminat'**, redundant): Es pot trobar una solució amb la **'pseudoinversa'** $\mathbf{x} = \left(\mathbf{A}^T \times \mathbf{A}\right)^{-1} \times \mathbf{A}^T \times \mathbf{b}$

b) Si **no** hi ha un nombre d'equacions suficient o si el rang és 'deficient'. **'subdeterminat'**:

- El nombre de solucions és infinit.
- És necessari determinar els 'graus de llibertat'

  (graus de llibertat) gdl= incògnites - rang
- Cal mesurar tantes variables com **'graus de llibertat'** per trobar una solució al sistema.

Cas particular: si el sistema és '**homogeni**'

$$0 = \mathbf{A} \times \mathbf{x}$$

- Si la matriu és **de rang 'sencer'** els sistema només té una solució: **zeros**
- Si la matriu és **de rang 'deficitari'** els sistema pot tenir altres solucions que la trivial (o no tenir solució)
- Si la matriu representa un sistema '**subdeterminat**' però **consistent**, hi ha infinites solucions
- l'espai vectorial que compren el conjunt de vectors x que fan **zero**= A·x es coneix com l'espai **'nul'** o **'kernel'**.
- Les **dimensions** de l'espai nul són iguals al **màxim nombre** de vectors **'linealment independents'** de l'espai. També son iguals al nombre de vectors que formen una 'base' de l'espai nul. Igual també al nombre de graus de llibertat del sistema.
- La matriu **'kernel' -K-** està formada per tants vectors com les dimensions de l'espai nul. Representa una **'base'** de l'espai nul. Qualsevol vector solució de 0=A·x, és combinació lineal de la base i per tant: $\mathbf{x} = \mathbf{K} \times \boldsymbol{\alpha}$

Suposem que es poden mesurar tantes variables com graus de llibertat

Un sistema: $\mathbf{0} = \mathbf{A} \times \mathbf{x}$

Es pot descompondre en: $\mathbf{0} = \mathbf{A}_c \times \mathbf{x}_c + \mathbf{A}_m \times \mathbf{x}_m$

Subíndex m = mesurats, c=calculats

Amb solució $\mathbf{x}_c = -\mathbf{A}_c^{-1} \times \mathbf{A}_m \times \mathbf{x}_m$ Sempre que existeixi la inversa de A_c

Idènticament per un sistema no homogeni:

$\mathbf{b} = \mathbf{A} \times \mathbf{x}$ $\quad \mathbf{b} = \mathbf{A}_c \times \mathbf{x}_c + \mathbf{A}_m \times \mathbf{x}_m$

$\mathbf{x}_c = \mathbf{A}_c^{-1} \times (\mathbf{b} - \mathbf{A}_m \times \mathbf{x}_m)$ Sempre que existeixi la inversa

Per descompondre el sistema (o la matriu A) (en una part corresponent a les mesures i un altra als calculats) cal recordar que podem reordenar les columnes d’una matriu si reordenem també el vector x sense que canviï la solució del sistema

A qualsevol sistema consistent es pot definir una **'solució general del sistema'** com a combinació lineal d'una solució particular i de la solució del sistema homogeni subjacent:

Es a dir donat un sistema: $\mathbf{b} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{x}$ Que té per solució el vector: $\mathbf{v}$

Llavors: $\mathbf{v} = \mathbf{p} + \mathbf{h}$ on: $\mathbf{p}$ És una solució particular

Per exemple: $\mathbf{p} = \left(\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}\right)^{-1} \cdot \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{b}$

$\mathbf{h}$ És una solució del sistema homogeni: $\mathbf{0} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{h}$ $\mathbf{h} = \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha}$

$$\mathbf{v} = \mathbf{p} + \mathbf{K} \cdot \boldsymbol{\alpha}$$

Alfa és un vector amb tantes files com columnes té K. Igual als graus de llibertat del sistema.
Donant valors a alfa es pot calcular qualsevol solució del sistema.
Es fa servir, per exemple per explorar les solucions possibles que compleixen algun altra condició.

Exemples:

Sistema sobredeterminat:

$$\begin{bmatrix} 34 \\ 77 \\ 124 \\ 56 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 5 & 4 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \\ 5 & 4 & 3 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} = \left(\mathbf{A}^T \cdot \mathbf{A}\right)^{-1} \cdot \mathbf{A}^T \cdot \mathbf{b}$$

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 5 \\ 7 \end{bmatrix}$$

Sistema subdeterminat (A_c invertible):

(Suposem que s'ha mesurat X_1 i X_2)

$$\begin{bmatrix} 70 \\ 131 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 5 & 4 & 6 & 6 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}_c = \mathbf{A}_c^{-1} \cdot \left(\mathbf{b} - \mathbf{A}_m \cdot \mathbf{x}_m\right)$$

$$\begin{bmatrix} x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 6 & 6 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \left(\begin{bmatrix} 70 \\ 131 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 5 & 4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \right)$$

Sistema subdeterminat (A_c no invertible):

$$\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -15 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix}$$

Kernel de A:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} -0.5 \\ 0.5 \\ 0 \\ -0.5 \\ 0.5 \end{bmatrix}$$

Solució particular amb pseudoinversa:

$$\mathbf{p} = \begin{bmatrix} 15 \\ 0 \\ 15 \\ 15 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Qualsevol solució és funció de alfa:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 15 \\ 0 \\ 15 \\ 15 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -0.5 \\ 0.5 \\ 0 \\ -0.5 \\ 0.5 \end{bmatrix} \times a$$

$$\mathbf{v} = \mathbf{p} + \mathbf{K} \times \boldsymbol{\alpha}$$