Matematika pro chemické inženýry

Drahoslava Janovská

3. Lineární algebra.

Základy maticového počtu.
Řešení soustav lineárních algebraických rovnic.
Inverzní matice.
Vlastní čísla a vlastni vektory matice.
Zobecněné vlastní vektory.

EVROPSKÁ UNIE
Evropské strukturální a investiční fondy
Operační program Výzkum, vývoj a vzdělávání

MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY

Povinná látka. Bude v písemkách a bude se zkoušet při ústní zkoušce (žádné označení)

★ Řešené příklady k procvičení - dobrovolné

★ Pro studenty, kteří chtějí vědět víc. Tato látka se nebude přednášet, nebude v písemkách, nebude se zkoušet.

Obsah

Vektorový prostor

Vektorový (lineární) prostor $(V, +, \cdot)$, V ... množina, na které jsou definovány operace $+$ a $\cdot$, pro které platí

(i) $u + v = v + u \; \forall u, v \in V$,

(ii) $(u + v) + w = u + (v + w) \; \forall u, v, w \in V$,

(iii) $\exists o \in V : \; \forall u \in V \; u + o = u$,

(iv) $\forall u \in V \; \exists u \in V \; u + (-u) = o$,

(v) $\alpha \cdot (u + v) = \alpha \cdot u + \alpha \cdot v \; \forall u, v \in V \forall \alpha \in \mathbb{R}$,

(vi) $(a + b) \cdot u = a \cdot u + b \cdot u \; \forall u \in V \forall a, b \in \mathbb{R}$,

(vii) $(a \cdot b) \cdot u = a \cdot (b \cdot u) \; \forall u \in V \forall a, b \in \mathbb{R}$,

(viii) $1 \cdot u = u \; \forall u \in V$.

Sčítání: $a, b \in \mathbb{R}^n \;\Rightarrow\; a + b = (a_1 + b_1, a_2 + b_2, \ldots, a_n + b_n)$.
Násobení reálným číslem: $a \in \mathbb{R}^n, \alpha \in \mathbb{R} \;\Rightarrow\; \alpha \cdot a = (\alpha a_1, \alpha a_2, \ldots, \alpha a_n)$.

$$\begin{aligned} \mathbb{R}^2 &= \{(x_1, x_2), x_i \in \mathbb{R}, i = 1, 2\} \\ \mathbb{R}^n &= \{\underbrace{(x_1, x_2, \ldots . x_n)}_{\text{uspořádaná } n-\text{tice}}, x_i \in \mathbb{R}, i = 1, 2 \ldots, n\} \end{aligned}$$

Lineární závislost a nezávislost

Definice: Jsou-li $a_1, a_2, \ldots, a_k$ vektory z $\mathbb{R}^n$, $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_k$ reálná čísla, pak vektor

$$a = \alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2 + \cdots + \alpha_k a_k = \sum_{i=1}^{K} \alpha_i a_i \qquad (1)$$

je lineární kombinace vektorů $a_1, a_2, \ldots, a_k$.

Poznámka: Jsou-li v rovnici (1) všechna α_i nulová, je lineární kombinace triviální.

Definice:

1. Soustava vektorů $a_1, \ldots, a_k \in \mathbb{R}^n$ je lineárně nezávislá (LN) $\Leftrightarrow$ jediná lineární kombinace, která dává nulový vektor, je triviální:
$$\sum_{i=1}^{k} \alpha_i a_i = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha_i = 0 \; \forall i = 1, \ldots, k\,.$$
2. Soustava vektorů $a_1, \ldots, a_k \in \mathbb{R}^n$ je lineárně závislá (LZ) jestliže existuje alespoň jeden koeficient α_i, který není nulový, a přesto $\sum_{i=1}^{k} \alpha_i a_i = 0\,.$

Příklad Tvoří vektory $a_1 = (2, -3),\ a_2 = (3, -4)$ lineárně nezávislý systém v $\mathbb{R}^2$?

Řešení: Sestavíme lineární kombinaci $\alpha a_1 + \beta a_2$, položíme ji rovnu nulovému vektoru a vypočteme koeficienty α a β:

$$\alpha a_1 + \beta a_2 = 0 \ \Leftrightarrow\ \alpha(2, -3) + \beta(3, -4) = (0, 0)\,.$$

Dostaneme soustavu

$$\begin{array}{rcl} 2\alpha + 3\beta & = & 0 \\ -3\alpha - 4\beta & = & 0 \end{array} \quad \Rightarrow \quad \alpha = 0, \beta = 0\,.$$

Tedy jediná lineární kombinace, která dává nulový vektor je triviální. Systém vektorů je lineárně nezávislý.

Poznámka V $\mathbb{R}^2$ jsou každé dva vektory, které nejsou rovnoběžné, lineárně nezávislé.

Cvičení: Lineárně nezávislý nebo lineárně závislý systém?

$$b_1 = (2, -3, 1), \quad b_2 = (-4, 6, 0), \quad b_3 = (0, 0, 2) \in \mathbb{R}^3 .$$

Věta: Vektory $a_1, a_2, \ldots, a_k \in \mathbb{R}^n$ jsou lineárně závislé $\Leftrightarrow$ jeden z vektorů lze vyjádřit jako lineární kombinaci ostatních.

Důkaz:

$\Rightarrow$ Necht $a_1, a_2, \ldots, a_k \in \mathbb{R}^n$ jsou lineárně závislé, tj. existuje např. $\alpha_1 \neq 0$ tak že

$$\alpha_1 a_1 + \alpha_2 a_2 + \cdots + \alpha_k a_k = 0 \quad | : \alpha_1$$

$$a_1 = -\frac{\alpha_2}{\alpha_1} - \frac{\alpha_3}{\alpha_1} - \ldots - \frac{\alpha_k}{\alpha_1} .$$

Tedy a_1 je lineární kombinací vektorů $a_2, \ldots, a_k$.

$\Leftarrow$ Necht například $a_1 = \alpha_2 a_2 + \cdots + \alpha_k a_k$. Pak $-a_1 + \alpha_2 a_2 + \cdots + \alpha_k a_k = 0$, přičemž koeficient u a_1 je roven -1, jde tedy o netriviální lineární kombinaci. Systém je LZ.

Věta Necht $a_1, a_2, \dots a_k \in \mathbb{R}^n$. Pak

1) Vynásobením libovolného vektoru z tohoto systému nenulovým číslem $\alpha \in \mathbb{R}$ se lineární závislost ani lineární nezávislost systému nezmění.
2) Přičtením některého vektoru z tohoto systému k jinému vektoru tohoto systému se lineární závislost ani lineární nezávislost systému nezmění.

Obecně:

Je-li dán systém vektorů $a_1, \dots, a_k \in \mathbb{R}^n$, pak přičteme-li k jednomu z těchto vektorů lineární kombinaci ostatních, lineární závislost ani lineární nezávislost systému se nezmění.

Operace s maticemi

Necht $A, B, C \in \mathbb{R}^{m \times n}$ jsou tři obecně obdélníkové matice. Pak platí:

1. $A + B = B + A$, tj. sčítání je komutativní.
2. $(A + B) + C = A + (B + C)$, tj. sčítání je asociativní
3. $\alpha(A + B) = \alpha A + \alpha B$ distributivita
4. $(\alpha + \beta)A = \alpha A + \beta A$ distributivita
5. $(\alpha\beta)A = \alpha(\beta A)$

Násobení matic

Připomeňme si skalární součin dvou vektorů:
$a = (a_1, a_2, \dots, a_k)$, $b = (b_1, b_2, \dots, b_k)$. Pak

$$a \cdot b = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_k b_k = \sum_{i=1}^{k} a_i b_i$$

je skalární součin vektorů a a b.

Násobím-li dvě matice $A \cdot B$, pak provádím vždy skalární součin řádku matice vlevo se sloupcem matice vpravo. Platí přitom, že dvě matice mohou násobit jen tehdy, pokud pro násobené matice platí:

$$A_{m \times k} \cdot B_{k \times n} = C_{m \times n} \, .$$

Je-li

$$A = (a_{ij})_{\substack{i = 1, \dots, m \\ j = 1, \dots, k}} \, , \; B = (b_{ij})_{\substack{i = 1, \dots, k \\ j = 1, \dots, n}} \, , \; C = (c_{ij})_{\substack{i = 1, \dots, m \\ j = 1, \dots, n}} \, ,$$

pak c_{ij} dostaneme skalárním součinem $i-$tého řádku matice A s $j-$tým sloupcem matice B:

$$c_{ij} = \sum_{\ell=1}^{k} a_{i\ell} b_{\ell j} \, .$$

Příklad

$$A_{3\times 2} = \begin{bmatrix} 2 & 3 \\ 0 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad B_{2\times 4} = \begin{bmatrix} -2 & 1 & 0 & 3 \\ 1 & 2 & 1 & 2 \end{bmatrix} \Rightarrow C_{3\times 4},$$

$$C = \begin{bmatrix} -1 & 8 & 3 & 12 \\ 1 & 2 & 1 & 2 \\ 0 & 5 & 2 & 7 \end{bmatrix}.$$

Pozor! **Naopak matice násobit nelze.** Zkuste si!

Definice Jednotková matice E_n je čtvercová matice $n \times n$ s jedničkami na diagonále a všude jinde jsou nuly:

$$E_n = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix}.$$

Pravidla pro násobení matic

Vlastnosti maticového násobení. V následujících vlastnostech předpokládáme, že násobení je vždy dobře definované.

$$\begin{aligned}
(A \cdot B) \cdot C &= A \cdot (B \cdot C) \\
A \cdot (B + C) &= A \cdot B + A \cdot C \\
(A + B) \cdot C &= A \cdot C + B \cdot C \\
\alpha(A \cdot B) &= (\alpha A) \cdot B = A(\alpha B), \quad \alpha \in \mathbb{R}
\end{aligned}$$

Poznámka: Násobení jednotkovou maticí

$$A_{n\times n} \cdot E_n = E \cdot A = A\,,$$

$$A_{m\times n} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} A \cdot E_n &= A \\ E_m \cdot A &= A \end{aligned}$$

Operace transpozice

Je-li matice $A_{m\times n} = (a_{ij})$, pak matice k ní transponovaná je matice $A^{\mathrm{T}}_{n\times m} = (a_{ji})$. Tedy $j-$tý řádek matice A^{T} je $j-$tý sloupec matice A a $i-$tý sloupec matice A^{T} je $i-$tý řádek A.

Příklad

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 0 \\ 1 & 2 & -1 \end{bmatrix} \quad A^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 2 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Vlastnosti transpozice. V následujících pravidlech předpokládáme, že všechny operace jsou dobře definovány.

$$\begin{aligned} (A+B)^{\mathrm{T}} &= A^{\mathrm{T}} + B^{\mathrm{T}} \\ (\alpha A)^{\mathrm{T}} &= \alpha A^{\mathrm{T}} \\ (A\cdot B)^{\mathrm{T}} &= B^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}} \\ (A^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}} &= A\,. \end{aligned}$$

Je-li A čtvercová, $A = A^{\mathrm{T}}$, je matice A symetrická.

Hodnost matice

Řekneme, že matice A má hodnost k, $\mathrm{h}(A) = k$, právě když maximální počet lineárně nezávislých řádků matice A je roven k.

Poznámka: Tedy vektory $a_1, \ldots, a_k$ jsou lineárně nezávislé $\Leftrightarrow$

$$\text{hodnost matice } A = \begin{bmatrix} --- & a_1 & --- \\ --- & a_2 & --- \\ & \vdots & \\ --- & a_k & --- \end{bmatrix} \text{ je přesně } k\,.$$

Věta Maximální počet LN řádků (řádková hodnost) matice A = maximální počet LN sloupců (sloupcová hodnost) matice A = maximální počet LN řádků matice A^{T} .
Tedy

$$\mathrm{h}(A) \quad = \quad \mathrm{h}(A^{\mathrm{T}})\,.$$

Důsledek

$$A_{m\times n} \quad \Rightarrow \quad \mathrm{h}(A) \leq \min(m, n)\,.$$

Horní trojúhelníková matice

Definice Matice $A_{m\times n}$ je horní trojúhelníková matice (HT-matice) $\Leftrightarrow$

(i) $m \leq n$

(ii) $a_{ii} \neq 0 \quad \forall i = 1, \ldots, m$

(iii) $a_{ij} = 0$ pro $i > j$

$$\mathrm{HT-matice} = \begin{bmatrix} * & x & x & x \\ 0 & * & x & x \\ 0 & 0 & * & x \end{bmatrix}_{3\times 4}$$

Na diagonále nenulová čísla,
pod diagonálou nuly.

Věta Hodnost HT-matice je rovna počtu jejích řádků.

Cvičení: Dokažte tuto větu.

Podobné matice

Abychom matici převedli do HT- tvaru, využijeme elementární řádkové a sloupcové operace, které nemění hodnost matice.

Elementární řádkové operace

1. Vynásobení libovolného řádku nenulovým reálným číslem
2. Přehození dvou řádků
3. Přičtení násobku jednoho řádku k jinému
4. Nulový řádek vynecháme

Elementární sloupcové operace

1. Vynásobení libovolného sloupce nenulovým reálným číslem
2. Přehození dvou sloupců
3. Přičtení násobku jednoho sloupce k jinému
4. Nulový sloupec vynecháme

Aplikujeme postupně tyto operace na matici A až získáme matici B v HT-tvaru. Říkáme, že matice A a B jsou podobné a píšeme $A \sim B$. Hodnost matice A je pak rovna počtu řádků matice B.

Poznámka: "$\sim$"je relace ekvivalence. Dokažte.

Věta $A \sim B \quad \Rightarrow \quad h(A) = h(B)$.

Věta Každou matici lze elementárními úpravami převést na HT-tvar.

Příklad Zjistěte hodnost matice A.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & -3 & 0 \\ 2 & 3 & 1 & 1 \\ -3 & -5 & 2 & -1 \\ 1 & 1 & 4 & 2 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 2 & -3 & 0 \\ \downarrow 0 & -1 & 7 & 1 \\ \downarrow 0 & 1 & -7 & -1 \\ \downarrow 0 & -1 & 7 & 2 \end{bmatrix} \sim$$

$$\sim \begin{bmatrix} 1 & 2 & -3 & 0 \\ 0 & -1 & 7 & 1 \\ 0 & \downarrow 0 & 0 & 0 \\ 0 & \downarrow 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 1 & 2 & -3 & 0 \\ 0 & -1 & 7 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \sim \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & -3 \\ 0 & -1 & 1 & 7 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}}_{\text{HT-tvar}}$$

Algoritmus, který převede matici na HT-tvar pomoci úprav, které nemění hodnost matice

Gaussova eliminace

Frobeniova věta

Mějme soustavu m lineárních rovnic o n neznámých:

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

Maticový zápis : $Ax = b$, kde A je matice soustavy, x je vektor neznámých, b je vektor pravé strany.

$$A_{m\times n} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & & \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}, \; x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n, \; b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^m.$$

Je-li $b = 0 \dots$ homogenní soustava, $b \neq 0 \dots$ nehomogenní soustava.

Přidejme k matici A jako $(n+1)-$ní sloupec vektor pravé strany b. Dostaneme tzv. rozšířenou matici soustavy $(A|b)$

Frobeniova věta

Soustava $Ax = b$ má řešení $\Leftrightarrow$ $h(A) = h(A|b)$.

Věta Homogenní soustava má vždy řešení. Platí: Jsou-li x_1, x_2 dvě různá řešení homogenní soustavy $Ax = b$, pak také $x_1 + x_2$ je řešením a αx_1 je také řešení. Počet LN řešení homogenní soustavy je $k = n - h(A)$.

Poznámka: Tedy jsou-li $y_1, \dots, y_k$ LN řešení soustavy $Ax = 0$, je jejich lineární kombinace vždy také řešení $y_H = c_1 y_1 + c_2 y_2 + \dots + c_k y_k$.

Necht $A_{m \times n}$. Označme
$V_H = \{x \in \mathbb{R}^n, Ax = 0\}$ . . . lineární prostor všech řešení homogenní soustavy $Ax = 0$,
$V_N = \{x \in \mathbb{R}^n, Ax = b \neq 0\}$ . . . množina všech řešení nehomogenní soustavy $Ax = b \neq 0$. Množina V_N není lineární prostor.

Počet řešení

Věta Nechť x_0 je řešení soustavy $Ax = b \neq 0$. Pak libovolné řešení této soustavy lze zapsat ve tvaru

$$x = x_0 + v, \quad v \in V_H \,.$$

Věta Počet řešení soustavy $Ax = b$, $A_{m \times n}$:

1. $h(A) < h(A|b)$ ... žádné řešení
2. $h(A) = h(A|b) = n$ ... právě jedno řešení
3. $h(A) = h(A|b) < n$ ... nekonečně mnoho řešení .

Poznámka
Gaussova eliminace: Elementárními úpravami převede matici $(A|b)$ na H-T tvar.
Gaussova-Jordanova metoda: Elementárními úpravami převede matici $(A|b)$ na diagonální tvar.

Gaussova eliminace - Přímý chod

Necht $A_{m \times n} = (a_{ij})$.

- Záměnou řádků případně sloupců upravíme matici tak, aby $a_{11} \neq 0$.
- Pro $i = 2, \ldots, m$ přičteme $\alpha-$násobek prvního řádku, kde

$$\alpha = -\frac{a_{i1}}{a_{11}}$$

  k $i-$tému řádku matice A. Dostaneme tak matici, která má v prvním sloupci samé nuly až na a_{11}, které je nenulové. Vznikne-li úpravami v matici nulový řádek, vynecháme ho.
- Záměnou řádků s výjimkou prvního, případně sloupců s výjimkou prvního (pokud je tato záměna nutná), upravíme matici tak, aby $a_{22} \neq 0$.
- Pro $i = 3, \ldots, m$ přičteme $\alpha-$násobek druhého řádku, kde

$$\alpha = -\frac{a_{i2}}{a_{22}}$$

  k $i-$tému řádku matice A. Dostaneme tak matici, ve která se nuly v prvním sloupci nezměnily, první řádek se také nezměnil. Ve druhém sloupci je a_{22} nenulové, $a_{i2} = 0$ pro $i = 3, \ldots, m$. Celý postup opakujeme, dokud nedostaneme HT-matici.

★

Gaussovu eliminaci lze schématicky zapsat takto:
$\mathbf{A} \sim \mathbf{B}$, $\mathbf{B}$ je HT-matice . . . Gaussova eliminace vpřed, přímý chod,

$$\begin{pmatrix} * & x & x & x \\ 0 & * & x & x \\ 0 & 0 & * & x \end{pmatrix} \quad \uparrow \ \ldots \text{ Gaussova eliminace vzad, zpětný chod} \ .$$

Příklad Řešte soustavu lineárních algebraických rovnic:

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 - x_3 &= 1 \\ 3x_1 + 5x_2 + x_3 &= 0 \\ x_1 \qquad + 2x_3 &= 3 \\ x_1 + 3x_2 \qquad &= -4 \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} 1 & 2 & -1 \\ 3 & 5 & 1 \\ 1 & 0 & 2 \\ 1 & 3 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \\ -4 \end{bmatrix} .$$

$$(A|b) = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 1 \\ 3 & 5 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 0 & -4 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & 4 & -3 \\ 0 & -2 & 3 & 2 \\ 0 & 1 & 1 & -5 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & 4 & -3 \\ 0 & 0 & -5 & 8 \\ 0 & 0 & 5 & -8 \end{array}\right] \sim$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & 4 & -3 \\ 0 & 0 & 5 & -8 \end{array}\right]$$

$h(A) = h(A|b) = n = 3 \ \Rightarrow$ soustava má právě jedno řešení. Zpětný chod $\Rightarrow \ x = \left(\frac{31}{5}, -\frac{17}{5}, -\frac{8}{5}\right)^{\mathrm{T}}$

★

Příklad Řešte soustavu lineárních algebraických rovnic:

$$\begin{aligned} 3x_1 - 2x_2 + x_3 - x_4 &= 1 \\ x_1 \quad - 2x_3 + 2x_4 &= 5 \\ x_1 - 2x_2 + 5x_3 - 5x_4 &= 2 \end{aligned} \Rightarrow \left[\begin{array}{cccc|c} 3 & -2 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -2 & 2 & 5 \\ 1 & -2 & 5 & -5 & 2 \end{array}\right] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 5 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

$$(A|b) = \left[\begin{array}{cccc|c} 3 & -2 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & 0 & -2 & 2 & 5 \\ 1 & -2 & 5 & -5 & 2 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & -2 & 2 & 5 \\ 3 & -2 & 1 & -1 & 1 \\ 1 & -2 & 5 & -5 & 2 \end{array}\right] \sim$$

$$\sim \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & -2 & 2 & 5 \\ 0 & -2 & 7 & -7 & -14 \\ 0 & -2 & 7 & -7 & -3 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & -2 & 2 & 5 \\ 0 & -2 & 7 & -7 & -14 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 11 \end{array}\right]$$

Podle Frobeniovy věty soustava nemá řešení, protože $h(A) = 2,\ h(A|b) = 3$.

Příklad V následující soustavě lineárních rovnic diskutujte počet řešení pro různé hodnoty parametrů q a t. Najděte řešení, pro které je $z = 1$.

$$\begin{aligned} x + 4y - 2z &= 1 \\ x + 7y - 6z &= 6 \\ 3y + qz &= t \end{aligned} \qquad (A|b) = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 4 & -2 & 1 \\ 1 & 7 & -6 & 6 \\ 0 & 3 & q & t \end{array}\right] \sim$$

$$\sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 4 & -2 & 1 \\ 0 & 3 & -4 & 5 \\ 0 & 3 & q & t \end{array}\right] \sim \begin{array}{c} \begin{array}{cccc} x & y & z & \end{array} \\ \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 4 & -2 & 1 \\ 0 & 3 & -4 & 5 \\ 0 & 0 & q+4 & t-5 \end{array}\right] \end{array}$$

Diskuse řešení:

- Pro $q \neq -4$ a $t \neq 5$. $h(A) = h(A|b) = n = 3 \;\Rightarrow$ Soustava má právě jedno řešení:

$$(q+4)z = t - 5 \Rightarrow z = \frac{t-5}{q+4},\; y = \frac{5q+4t}{3(q+4)},\; x = -\frac{17q+10t+18}{3(q+4)}$$

$$z = 9 \;\Leftrightarrow t - 5 = q + 4 \;\Rightarrow t = q + 9 \ldots \text{ přímka v rovině parametrů.}$$

- Pro $q + 4 = 0$ a $t \neq 5$ je $h(A) = 2 \neq h(A|b) = 3 \;\Rightarrow$ tedy podle Frobeniovy věty soustava nemá řešení.

★

- Pro $q = -4$ a $t = 5$ dostaneme

$$(A|b) \sim \begin{array}{c} \begin{array}{ccc|c} x & y & z & \end{array} \\ \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 4 & -2 & 1 \\ 0 & 3 & -4 & 5 \end{array}\right] \end{array}, \quad h(A) = h(A|b) = 2,\ n = 3\,.$$

Soustava má nekonečně mnoho řešení. Jednu neznámou ($n - h(A) = 1$) volíme jako parametr, obvykle tu, která je nejblíže čáře oddělující A od b. Tedy položíme $z := \alpha\ ,\ \ \alpha \in \mathbb{R}$. Pak

$$3y - 4\alpha = 5 \ \Rightarrow\ y = \frac{5 + 4\alpha}{3}\,, \qquad x = -4y + 2z + 1 = -\frac{10}{3}\alpha - \frac{17}{3}\,.$$

Tedy pro řešení soustavy $\mathbf{x}$ jsme v tomto případě dostali

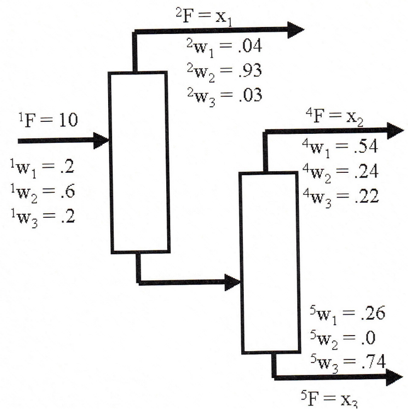
$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} = \underbrace{\begin{bmatrix} -\frac{17}{3} \\ \frac{5}{3} \\ 0 \end{bmatrix}}_{\text{partikulární řešení}} + \alpha \underbrace{\begin{bmatrix} -\frac{10}{3} \\ \frac{4}{3} \\ 1 \end{bmatrix}}_{\text{báze } V_H},\ \alpha \in \mathbb{R}.$$

$$V_H = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3,\ \mathbf{x} = \alpha \begin{bmatrix} -10 \\ 4 \\ 3 \end{bmatrix}, \alpha \in \mathbb{R}\}, \quad \dim V_H = 1\,.$$

Pro $z = 1$ je $\alpha = 1$ a dostaneme řešení $\mathbf{x} = (-9, 3, 1)^{\mathrm{T}}$.

★ Řešení problému látkové bilance

Mějme následující separační systém:



Chceme vypočítat neznámý hmotnostní tok [kg/s] každého výstupního proudu. Definujeme neznámé $x_1 = {}^2F$[kg/s], $x_2 = {}^4F$[kg/s] a $x_3 = {}^5F$[kg/s].

Hmotnostní bilance

Poznámka: Systém se třemi složkami má právě tři nezávislé bilance, víme tedy, že musíme sestavit tři nezávislé rovnice.

Zápisem hmotnostní bilance pro (a) Celkový hmotnostní průtok, (b) hmotnostní průtok složky *A*, a (c), hmotnostní průtok složky *B* , dostaneme soustavu tří lineárních algebraických rovnic pro tři neznámé toky:

$$
\begin{array}{ccccccc}
x_1 & + & x_2 & + & x_3 & = & 10 \\
0.04x_1 & + & 0.54x_2 & + & 0.26x_3 & = & 2 \\
0.93x_1 & + & 0.24x_2 & & & = & 6
\end{array}
$$

Zapíšeme maticově

$$
\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0.04 & 0.54 & 0.26 \\ 0.93 & 0.24 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10 \\ 2 \\ 6 \end{bmatrix}.
$$

Řešíme Gaussovou eliminací. Přímý chod

$$[\mathbf{A}|\mathbf{b}] = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 10 \\ 0.04 & 0.54 & 0.26 & 2 \\ 0.93 & 0.24 & 0 & 6 \end{array}\right] \sim \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 10 \\ 0 & -0.69 & -0.93 & -3.3 \\ 0 & 0 & -0.4539 & -0.7913 \end{array}\right]$$

Zpětný chod

$$\begin{aligned} -0.4539x_3 = -0.7913 \quad &\Rightarrow \quad x_3 = 1.7433, \\ -0.69x_2 - 0.93 \cdot 1.7433 = -3.3 \quad &\Rightarrow \quad x_2 = 2.4330 \\ x_1 + 2.4330 + 1.7433 = 10 \quad &\Rightarrow \quad x_1 = 5.8238 \end{aligned}$$

Podle Frobeniovy věty má soustava řešení, nebot $h(\mathbf{A}) = h(\mathbf{A}|\mathbf{b}) = 3$. Protože počet neznámých je také 3, má soustava právě jedno řešení.

Hmotnostní toky jsou ${}^2F = 5.8238$ [kg/s], ${}^4F = 2.4330$ [kg/s] a ${}^5F = 1.7433$[kg/s] .

Příklad

K výrobě určité směsi jsou zapotřebí tři složky A, B, a C, které se nejprve musí rozpustit každá zvlášt ve vodě. Předpokládejme, že smícháním roztoku o hustotě $1,5\mathrm{g}/\mathrm{cm}^3$ složky A s roztokem o hustotě $3,6\mathrm{g}/\mathrm{cm}^3$ složky B a roztokem o hustotě $5,3\mathrm{g}/\mathrm{cm}^3$ složky C získáme 25.07 g směsi. Pokud bude hustota roztoků složek A, B, C v jednotlivých roztocích $2,5; 4,3$, a $2,4\mathrm{g}/\mathrm{cm}^3$ v daném pořadí, pak při smíchání stejných objemů jako v předchozím případě získáme 22,36 g výsledné směsi. Je-li hustota roztoků složek $2,7; 5,5$ a $3,2\mathrm{g}/\mathrm{cm}^3$, pak (opět při použití stejných objemů) vznikne 28,14 g výsledné směsi. Jaké jsou objemy (v krychlových centimetrech) roztoků obsahujících složky A, B, a C za předpokladu aditivity objemu?

Řešení

Necht x, y, z jsou odpovídající objemy (v cm^3) roztoků obsahujících složky A, B, C. Dostaneme soustavu tří algebraických rovnic

$$\begin{array}{ccccccc} 1.5x & + & 3.6y & + & 5.3z & = & 25.07 \\ 2.5x & + & 4.3y & + & 2.4z & = & 22.36 \\ 2.7x & + & 5.5y & + & 3.2z & = & 28.14 \end{array}$$

Matice soustavy a rozšířená matice soustavy mají hodnost 3, počet neznámých je také 3, tedy soustava má právě jedno řešení, a to

$$x = 1.5\mathrm{cm}^3, \quad y = 3.1\mathrm{cm}^3, \quad z = 2.2\mathrm{cm}^3 .$$

Řešení soustav lineárních algebraických rovnic.

Řešme soustavu lineárních algebraických rovnic

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}\,, \qquad \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}\,,\ \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\,,\ \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$$

Metody:

- přímé . . . po konečném počtu kroků získáme $\mathbf{x}$
- iterační . . . $\mathbf{x}$ získáme jako limitu posloupnosti iterací $\mathbf{x}_n$:

$$\mathbf{x} = \lim_{n\longrightarrow\infty} \mathbf{x}_n$$

Důležité – kritérium pro ukončení iteračního procesu (”stopping criterion”)

Přímé metody

1. Gaussova eliminace

$\mathbf{A} \sim \mathbf{B}$, $\mathbf{B}$ v horním trojúhelníkovém tvaru (HT-tvaru) ... přímý chod

$$\begin{pmatrix} * & x & x & x \\ 0 & * & x & x \\ 0 & 0 & * & x \end{pmatrix} \quad \uparrow \ \ldots \text{ zpětný chod}$$

Frobeniova věta

Soustava lineárních algebraických rovnic $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ má řešení

$$\Longleftrightarrow$$

$$h(\mathbf{A}) = h(\mathbf{A}|\mathbf{b})$$

Počet řešení:

- Je-li $h(\mathbf{A}) = h(\mathbf{A}|\mathbf{b}) = n \implies$ soustava má právě jedno řešení
- Je-li $h(\mathbf{A}) = h(\mathbf{A}|\mathbf{b}) < n \implies \dim V_h = n - h(\mathbf{A}) > 0 \implies$ soustava má nekonečně mnoho řešení.

★ Rozkladové metody řešení soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$

2.a) LU–rozklad (Gaussova eliminace je speciálním případem LU–rozkladu)

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU}$$

L . . . dolní (lower) trojúhelníková s jedničkami na diagonále,
U . . . horní (upper) trojúhelníková, $u_{ii} \neq 0$ (pokud toto neplatí, je třeba permutovat řádky matice **A** maticí **P** a rozklad provádíme pro matici **PA**) .

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ x & 1 & 0 & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ x & \dots & x & 1 \end{pmatrix} \qquad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} * & x & x & x \\ 0 & * & x & x \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & \dots & 0 & * \end{pmatrix}$$

Protože

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \iff (\mathbf{LU})\mathbf{x} = \mathbf{b} \iff \mathbf{L}(\mathbf{Ux}) = \mathbf{b},$$

řešíme dvě soustavy s trojúhelníkovou maticí:

$$\text{nejprve} \quad \mathbf{Ly} = \mathbf{b}, \quad \text{pak} \quad \mathbf{Ux} = \mathbf{y}.$$

★

2.b) QR–rozklad

$$\mathbf{A} = \mathbf{QR}$$

Q ... ortogonální matice: $\mathbf{Q}\mathbf{Q}^{\mathrm{T}} = \mathbf{E} \iff \mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{Q}^{\mathrm{T}}$
R ... horní trojúhelníková

Rovnost $(\mathbf{QR})\mathbf{x} = \mathbf{b}$ vynásobíme zleva maticí $\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}$, a dostaneme

$$\underbrace{\mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}}_{\mathbf{E}}\mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\mathbf{b} \qquad \mathbf{R}\mathbf{x} = \mathbf{Q}^{\mathrm{T}}\mathbf{b}$$

a opět máme soustavu s trojúhelníkovou maticí.

Jak už jsme poznamenali, LU–rozklad nemusí existovat. QR–rozklad existuje vždy.
LU–rozklad je výhodný, řešíme-li mnoho lineárních soustav se stejnou maticí soustavy a s pravými stranami, které se mění během výpočtu. Matice **L** a **U** pak stačí spočítat jen pro první soustavu.

Další přímé metody

3. Cramerovo pravidlo – ideální pro regulární matice 2×2, pro větší soustavy nepoužitelné.
4. Pomocí inverzní matice

$$\underbrace{\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}}_{}, \quad \mathbf{A} \text{ regulární} \quad \Longrightarrow \quad \exists \mathbf{A}^{-1} : \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{E}.$$

nejjednodušší maticová rovnice

Rovnici $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ vynásobíme zleva maticí $\mathbf{A}^{-1}$:

$$\underbrace{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}}_{\mathbf{E}}\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$$

Numerický výpočet je nedoporučeníhodný, výpočet je velmi nestabilní. Vhodné pro důkazy teoretických výsledků.

Iterační metody

5. Jacobiova metoda

Princip: Matici soustavy $\mathbf{A}$ rozepíšeme na součet matic

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}\,, \qquad \text{kde} \tag{2}$$

$\mathbf{D} = a_{ii}$

$-\mathbf{L}$ ostře dolní trojúhelníková matice

$-\mathbf{U}$ ostře horní trojúhelníková matice

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & x & x & x \\ x & a_{22} & x & x \\ x & x & a_{33} & x \\ x & x & x & a_{44} \end{pmatrix}$$

Necht $a_{ii} \neq 0,\ i = 1, \dots, n$, naopak $\mathbf{L} + \mathbf{U}$ má diagonální prvky všechny nulové. Pak

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad \Longleftrightarrow \quad (\mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U})\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{D}\underbrace{\mathbf{x}}_{(k+1)-\text{ní iterace}} = \mathbf{b} + (\mathbf{L} + \mathbf{U})\underbrace{\mathbf{x}}_{k-\text{tá iterace}} \quad \Longrightarrow \quad \underbrace{\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{b} + (\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x}^{(k)})}_{\text{Jacobiova metoda}}$$

Iterační metody

6. Gaussova-Seidelova metoda
   Rovnici (2) opět dosadíme do řešené soustavy a rozepíšeme, tentokrát jako

$$(\mathbf{D}-\mathbf{L}-\mathbf{U})\mathbf{x}=\mathbf{b} \quad\Longleftrightarrow\quad (\mathbf{D}-\mathbf{L})\underbrace{\mathbf{x}}_{(k+1)\text{-ní iterace}}=\mathbf{b}+\mathbf{U}\underbrace{\mathbf{x}}_{k-\text{tá iterace}} \quad\Longrightarrow$$

Gaussova-Seidelova metoda :

$$\mathbf{x}^{(k+1)}=(\mathbf{D}-\mathbf{L})^{-1}(\mathbf{b}+\mathbf{U}\mathbf{x}^{(k)})\,.$$

★ Metoda SOR

7. Metoda SOR
Tentokrát matici $\mathbf{A}$ zapíšeme jako

$$\mathbf{A} = \mathbf{B} + (\mathbf{A} - \mathbf{B}), \tag{3}$$

kde $\mathbf{B}$ je regulární. Pak $\mathbf{Bx} = (\mathbf{B} - \mathbf{A})\mathbf{x} + \mathbf{b}$. Dostaneme tak iterační metodu

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}^{-1}\left((\mathbf{B} - \mathbf{A})\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}\right). \tag{4}$$

Vynásobíme-li rovnost (3) reálným číslem ω, tzv. relaxačním parametrem, a položíme-li $\mathbf{B} = \mathbf{D} - \omega\mathbf{L}$, dostaneme rozklad matice $\mathbf{A}$ ve tvaru

$$\omega\mathbf{A} = (\mathbf{D} - \omega\mathbf{L}) - (\omega\mathbf{U} + (1 - \omega)\mathbf{D}).$$

Vznikne tak metoda SOR, jejíž iterace jsou definovány předpisem

$$(\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})\mathbf{x}^{(k+1)} = (\omega\mathbf{U} + (1 - \omega)\mathbf{D})\,\mathbf{x}^{(k)} + \omega\mathbf{b}\,, \qquad \text{neboli}$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = (\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})^{-1}\left((1 - \omega)\mathbf{D} + \omega\mathbf{U}\right)\mathbf{x}^{(k)} + \omega(\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})^{-1}\mathbf{b}. \tag{5}$$

Inverzní matice

Necht **A** je čtvercová matice $n \times n$. Říkáme, že matice **B** je inverzní k matici **A**, jestliže $\mathbf{AB} = \mathbf{BA} = \mathbf{E}$. Inverzní matici k matici **A** obvykle značíme $\mathbf{A}^{-1}$, tedy

$$AA^{-1} = A^{-1}A = E\,.$$

Inverzní matice k matici **A** existuje $\iff$ **A** je regulární $(\det\mathbf{A} \neq \mathbf{0})$.

- Necht $\mathbf{A} = (a_{ij})_{n\times n}$, $\det \mathbf{A} \neq 0$ (**A** je regulární). Pak

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det \mathbf{A}} \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11}, & \dots & \mathbf{A}_{1n} \\ \mathbf{A}_{21}, & \dots & \mathbf{A}_{2n} \\ \vdots & & \vdots \\ \mathbf{A}_{n1}, & \dots & \mathbf{A}_{nn} \end{pmatrix}^{\mathrm{T}}, \quad \text{kde } \mathbf{A}_{ij} = (-1)^{i+j}\,\mathbf{M}_{ij}\,,$$

  $\mathbf{A}_{ij}$ je algebraický doplněk prvku a_{ij}, $\mathbf{M}_{ij}$ je minor příslušný prvku a_{ij}, tj. determinant matice o řád menší, která vznikne z původní matice vynecháním $i-$tého řádku a $j-$tého sloupce.
- Gaussova-Jordanova metoda
  Nemusíme předem vědět, že matice **A** je regulární. Pomocí ekvivalentních úprav:

$$(\mathbf{A}|\mathbf{E}) \sim (\mathbf{E}|\mathbf{A}^{-1})\,.$$

★ Koncentrace meziproduktů v reakčním systému

Příklad V daném reakčním systému jsou časově nezávislé (stacionární) koncentrace meziproduktů určeny maticovou rovnicí

$$\begin{bmatrix} \nu_{11} & \nu_{12} & \dots & \nu_{1R} \\ \nu_{21} & \nu_{22} & \dots & \nu_{2R} \\ \vdots & & \vdots & \\ \nu_{N1} & \nu_{N2} & \dots & \nu_{NR} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_R \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \text{kde} \tag{6}$$

$\{\nu_{ij}\}$, $i = 1, \dots, N$, $j = 1 \dots, R$, je stechiometrická matice, ν_{ij} je stechiometrický koeficient $i-$té složky v $j-$té reakci, a $\{w_j\}$ je sloupcový vektor neznámých reakčních rychlostí. Tedy složek je N, reakcí R. Poznamenejme, že reakce zahrnuje i přítoky (což jsou efektivně reakce nultého řádu) a odtoky (efektivní reakce prvního řádu). Přítoky/odtoky (nebo ekvivalentně reakce nultého/prvního řádu) tam musí být, pokud hledáme netriviální (=termodynamicky nerovnovážné) stacionární stavy.

★

Hledáme řešení homogenní soustavy lineárních algebraických rovnic (6).

Lineárně nezávislá řešení této soustavy jsou označována jako reakční cesty, ke kterým přiřazujme nějaké sítové reakce.

Abychom tyto sítové reakční rovnice vytvořili, vynásobíme R reakcí stechiometrické matice (které obsahují stále reaktanty, produkty a meziprodukty) jedním z lineárně nezávislých řešení $(w_1, w_2, \ldots, w_R)^{\mathrm{T}}$ a přidáme získané rovnice. Sítové reakční rovnice už neobsahují meziprodukty.

Příklad Brusselátor
Brusselátor je oscilující autokatalytická chemická reakce popsaná rovnicemi

$$\begin{array}{ccc} A & \longrightarrow & X \\ B+X & \longrightarrow & Y+D \\ 2X+Y & \longrightarrow & 3X \\ X & \longrightarrow & E \end{array} \qquad \text{meziprodukty: } X, Y \tag{7}$$

První reakce je vlastně efektivní přítok X a čtvrtá reakce je efektivní odtok X, tedy systém je otevřený a může mít (nerovnovážný) stacionární stav.

★ Příklad Brusselátor

Stechiometrická matice pro meziprodukty X, Y je

X	1	−1	1	−1
Y	0	1	−1	0

a soustava rovnic pro stacionární stavy meziproduktů je

$$\mathbf{S}\mathbf{w} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{8}$$

Hodnost matice **S** je $h(\mathbf{S}) = 2$, počet neznámých je $n = 4$, tedy dimenze prostoru V_H je 2. Soustava má 2 lineárně nezávislá řešení, která tvoří bázi V_H. Vypočteme je.

Volíme 2 neznámé jako parametry: $w_4 = t$, $w_3 = s$. Všechna řešení soustavy (8) jsou

$$\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ w_3 \\ w_4 \end{bmatrix} = t \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} + s \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad t, s \in \mathbb{R}\,.$$

Tedy $V_H = \{(1,0,0,1)^{\mathrm{T}}, (0,1,1,0)^{\mathrm{T}}\} \Rightarrow$ 2 LN řešení (báze V_H), tedy 2 reakční cesty. Vynásobením celkové (produkty i meziprodukty) stechiometrické matice reakčními cestami dostaneme odpovídající sítové reakce:

$$\begin{array}{c} X \\ Y \\ A \\ B \\ D \\ E \end{array} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad A = E$$

$$\begin{array}{c} X \\ Y \\ A \\ B \\ D \\ E \end{array} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad B = D$$

Příklad

Zjistěte hodnost stechiometrické matice, najděte lineárně nezávislé chemické reakce v systému a určete bázi

$$\begin{array}{lcr}
Cl_2 & \longrightarrow & 2\,Cl \\
2\,Cl & \longrightarrow & Cl_2 \\
Cl + CO & \longrightarrow & COCl \\
COCl & \longrightarrow & Cl + CO \\
COCl + Cl_2 & \longrightarrow & COCl_2 + Cl \\
COCl_2 + Cl & \longrightarrow & COCl + Cl_2
\end{array}$$

Tenhle systém je rovnovážný (tři vratné reakce) a uzavřený, takže výsledkem jsou rovnovážné stacionární stavy = reakční cesty.

★

Řešení

Stechiometrická matice $\boldsymbol{\nu}$

$$\begin{array}{c} \mathrm{Cl} \\ \mathrm{Cl_2} \\ \mathrm{CO} \\ \mathrm{COCl} \\ \mathrm{COCl_2} \end{array} \begin{bmatrix} 2 & -2 & -1 & 1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{\nu}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & -1 & 0 \\ 1 & -1 & 0 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 1 & -1 \end{bmatrix} \sim \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 \end{bmatrix} \begin{array}{l} 1. \\ 3. \\ 5. \end{array}$$

$$h(\boldsymbol{\nu}^{\mathrm{T}}) = h(\boldsymbol{\nu}) = 3\,.$$

Lineárně nezávislé jsou například reakce 1., 3., 5. nebo reakce 2., 4., 6.

Soustava $\boldsymbol{\nu}^{\mathrm{T}} \cdot \mathbf{w} = \mathbf{0}$ má nekonečně mnoho řešení, volíme 2 neznámé jako parametry: $w_4 = t,\ w_5 = s$.
Pak lineární prostor

$$V_H = \{\mathbf{w} \in \mathbb{R}^5,\ \mathbf{w} = t \begin{bmatrix} -1 \\ -2 \\ 2 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + s \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix},\ t, s \in \mathbb{R}\}$$

Soustava má dvě lineárně nezávislá řešení, tedy 2 reakční cesty.

Maticové rovnice

Nejjednodušší maticová rovnice

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}\,, \quad \mathbf{A} \text{ čtvercová, regulární}\,, \ n \times n \quad \Longrightarrow \quad \exists \mathbf{A}^{-1}$$

Vynásobíme A^{-1} zleva a dostaneme

$$\underbrace{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}}_{\mathbf{E}}\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$$

Kdybych násobila maticí $\mathbf{A}^{-1}$ zprava:

$$\underbrace{\mathbf{A}}_{n\times n}\ \underbrace{\mathbf{x}}_{n\times 1}\ \underbrace{\overset{-1}{\mathbf{A}}}_{n\times n} = \underbrace{\mathbf{b}}_{n\times 1}\ \underbrace{\mathbf{A}^{-1}}_{n\times n} \quad \ldots \quad \text{nelze násobit}$$

Příklad:

$$\mathbf{XA} - \mathbf{E} = 2\mathbf{X} + \mathbf{A}\,, \qquad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{XA} - 2\,\mathbf{X} = \mathbf{A} + \mathbf{E} \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{X}(\mathbf{A} - 2\mathbf{E}) = \mathbf{A} + \mathbf{E}\,, \quad \mathbf{A} - 2\mathbf{E} = \begin{pmatrix} -1 & 3 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$\det(\mathbf{A} - 2\mathbf{E}) = 0 \quad \Longrightarrow$ k matici $\mathbf{A} - 2\mathbf{E}$ neexistuje matice inverzní. Maticová rovnice nemá řešení.

★

Příklad:

$$\mathbf{A}\,\mathbf{X} + \mathbf{X} = \mathbf{A} - \mathbf{E}\,, \qquad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$(\mathbf{A}+\mathbf{E})\,\mathbf{X} = \mathbf{A} - \mathbf{E} \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{X} = (\mathbf{A}+\mathbf{E})^{-1}\,(\mathbf{A}-\mathbf{E})$$

$$\mathbf{A}+\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \det(\mathbf{A}+\mathbf{E}) = 1 \neq 0 \quad \Longrightarrow \quad \exists\,(\mathbf{A}+\mathbf{E})^{-1}$$

$$(\mathbf{A}+\mathbf{E}|\mathbf{E}) = \left(\begin{array}{ccc|ccc} 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|ccc} 2 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 1 & 1 & -2 & 0 \\ 0 & 1 & -1 & 1 & 0 & -2 \end{array}\right) \sim$$

$$\sim \left(\begin{array}{ccc|ccc} 6 & 0 & 4 & 4 & -2 & 0 \\ 0 & -3 & 1 & 1 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 4 & -2 & -6 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{ccc|ccc} 6 & 0 & 0 & 12 & -6 & -12 \\ 0 & -6 & 0 & 6 & -6 & -6 \\ 0 & 0 & -2 & 4 & -2 & -6 \end{array}\right) \sim$$

$$\sim \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & 2 & -1 & -2 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & -2 & 1 & 3 \end{array}\right) \sim (\mathbf{E}|(\mathbf{A}+\mathbf{E})^{-1})$$

$$\mathbf{X} = (\mathbf{A}+\mathbf{E})^{-1}\,(\mathbf{A}-\mathbf{E}) = \begin{pmatrix} -3 & 2 & 4 \\ 2 & -1 & -2 \\ 4 & -2 & -5 \end{pmatrix}.$$

Vlastní čísla a vlastní vektory matice

Definice Vlastním číslem matice **A** (reálné nebo komplexní) se nazývá každé (obecně komplexní) číslo λ, splňující pro některý nenulový vektor **x** rovnici

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\,\mathbf{x}\,,$$

$\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ ... vlastní vektor matice **A** příslušný k vlastnímu číslu λ
Množina všech vlastních čísel matice **A** ... spektrum matice **A**

$\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$ ... maticová rovnice pro neznámý vektor **x**

$\mathbf{A}\mathbf{x} - \lambda\mathbf{x} = \mathbf{0}\,,\quad (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{E})\mathbf{x} = \mathbf{0}\,,\ \mathbf{x} \neq \mathbf{0}\,,\quad \mathbf{A} - \lambda\mathbf{E}$ musí být singulární $\Longrightarrow$

$\underbrace{\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{E})} = 0$ ... charakteristická rovnice matice **A**

charakteristický polynom matice **A** = polynom stupně n :

$$P(\lambda) = \det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{E}) = (-1)^n(\lambda^n + p_1\lambda^{n-1} + p_2\lambda^{n-2} + \cdots + p_n)\,,\quad \text{kde}$$

$$\begin{aligned} -p_1 &= a_{11} + a_{22} + \cdots + a_{nn} = \text{stopa matice } \mathbf{A} \\ p_n &= (-1)^n \det \mathbf{A} \end{aligned}$$

Pozor! Vlastní čísla reálné matice mohou být imaginární .

★

Příklad: Vypočtěte vlastní čísla a vlastní vektory matice $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ -5 & 0 \end{pmatrix}$.

$$\mathbf{A} - \lambda\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 2-\lambda & 1 \\ -5 & -\lambda \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{E}) = \lambda^2 - 2\lambda + 5$$

Charakteristická rovnice: $\lambda^2 - 2\lambda + 5 = 0 \Longrightarrow \lambda_1 = 1 + 2\mathrm{i}\,, \quad \lambda_2 = 1 - 2\mathrm{i}\,,$
vlastní čísla matice **A** jsou navzájem komplexně sdružená.

Vypočteme vlastní vektor $\mathbf{x}_1$ příslušný vlastnímu číslu $\lambda_1 = 1 + 2\mathrm{i}$, tj. řešíme soustavu se singulární maticí :

$$(\mathbf{A} - \lambda_1\mathbf{E})\mathbf{x}_1 = \mathbf{0}\,, \ \mathbf{x}_1 = (h_1, h_2) \neq \mathbf{0}\,, \quad \text{tedy soustavu}$$

$$\begin{pmatrix} 1-2\mathrm{i} & 1 \\ -5 & -1-2\mathrm{i} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Tato soustava má nekonečně mnoho řešení, ale my chceme jen jeden vlastní vektor. Zvolme např. $h_1 = 1$, pak $h_2 = -1 + 2\mathrm{i}$. Jsou-li vlastní čísla komplexně sdružená, jsou také komplexně sdružené vlastní vektory. Dostáváme

$$\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1+2\mathrm{i} \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{x}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1-2\mathrm{i} \end{pmatrix}.$$

Poznámka Tři nutné a postačující podmínky pro to, aby λ bylo vlastním číslem matice $\mathbf{A}$:

- Existuje nenulový vektor $\mathbf{x}$ takový, že $\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$
- Matice $\mathbf{A} - \lambda\mathbf{E}$ je singulární
- $\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{E}) = \mathbf{0}$

Věta Jestliže nenulové vlastní vektory $x_1, x_2, \ldots, x_k$ jsou vlastní vektory příslušné různým vlastním číslům $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_k$, pak jsou tyto vlastní vektory lineárně nezávislé.

★ **Důkaz** Ukážeme pro $k = 2$. Provedeme lineární kombinaci $c_1\mathbf{x}_1 + c_2\mathbf{x}_2 = \mathbf{0} \ldots \Longrightarrow$ Rovnici vynásobíme maticí $\mathbf{A}$ zleva. Dostaneme $c_1\lambda_1\mathbf{x}_1 + c_2\lambda_2\mathbf{x}_2 = \mathbf{0}$. Od této rovnice odečteme první rovnici vynásobenou λ_2. Dostaneme

$$c_1(\lambda_1 - \lambda_2)\mathbf{x}_1 = \mathbf{0}.$$

Protože $\lambda_1 \neq \lambda_2$ a $\mathbf{x}_1 \neq \mathbf{0}$, je $c_1 = 0$. Obdobně pro c_2 a obdobně pro $k > 2$.

Algebraická násobnost vlastního čísla

Kořeny charakteristické rovnice jsou vlastní čísla matice **A**. Vlastní vektory vypočteme z rovnice $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{E})\mathbf{x} = \mathbf{0}$, kde dosadíme konkrétní vypočtené vlastní číslo λ. Vlastní číslo může mít více vlastních vektorů.

Poznámka Je-li $\mathbf{x}$ vlastní vektor, je také $c\mathbf{x}$ vlastní vektor pro každé $c \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$. "Délku"vlastního vektoru si tedy můžeme zvolit libovolně.

Základní věta algebry: Polynom $n-$tého stupně má n kořenů (kořeny jsou počítány včetně jejich algebraické násobnosti).

Algebraická násobnost vlastního čísla λ:
Je-li $p(r) = (r - \lambda)^k q(r)$ a $q(\lambda) \neq 0$, pak λ je kořen p s algebraickou násobností k. Je-li $k > 1$, říkáme, že λ je vícenásobné vlastní číslo.

Geometrická násobnost vlastního čísla

Necht $\mathbf{A}_{n\times n}$, λ je vlastní číslo matice **A**.

Geometrická násobnost vlastního čísla λ je definována jako dimenze nulového prostoru matice $\mathbf{B} = \mathbf{A} - \lambda\mathbf{E}$. Je-li $h(\mathbf{B})$ hodnost matice **B**, pak dimenze nulového prostoru matice **B** je $\dim \mathbf{B} = n - h(\mathbf{B})$.
Obvykle označujeme:

$$\underbrace{\dim\mathcal{N}(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{E})}_{\text{tzv. nulita matice } (\mathbf{A} - \lambda\mathbf{E})} = \text{dimenze nulového prostoru matice } \mathbf{A} - \lambda\mathbf{E}\,.$$

Poznámka

$$0 \leq \text{geometrická násobnost } \lambda \underbrace{\leq}_{\text{je-li nerovnost ostrá } < \ldots \text{deficit vlastních vektorů}} \text{algebraická násobnost } \lambda. \tag{9}$$

Příklad: vlastní číslo má dva lineárně nezávislé vlastní vektory

Příklad $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{A} - \lambda\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 2-\lambda & 0 \\ 0 & 2-\lambda \end{pmatrix}$, $\lambda = 2$ je dvojnásobné vlastní číslo, přesněji, algebraická násobnost vlastního čísla $\lambda = 2$ je 2. Vypočteme vlastní vektory:

$$(\mathbf{A} - 2\mathbf{E})\mathbf{h} = \mathbf{0}, \text{ t.j. } \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \ \mathbf{h} = \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Tedy, dvojnásobnému vlastnímu číslu $\lambda = 2$ odpovídají dva lineárně nezávislé vlastní vektory

$$\mathbf{h}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{a} \quad \mathbf{h}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Říkáme, že vlastnímu číslu $\lambda = 2$ odpovídá úplný systém vlastních vektorů. Zde je tento systém tvořen vektory $\mathbf{h}_1$ a $\mathbf{h}_2$.
Jaká je geometrická násobnost?

$$\mathbf{A} - 2\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Longrightarrow \dim \mathcal{N}(\mathbf{A} - 2\mathbf{E}) = 2 - 0 = 2.$$

Tedy i geometrická násobnost vlastního čísla $\lambda = 2$ je rovna 2.

Příklad: deficit vlastních vektorů

Příklad $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{A} - \lambda\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 2-\lambda & 1 \\ 0 & 2-\lambda \end{pmatrix}$, algebraická násobnost vlastního čísla $\lambda = 2$ je 2. Vypočteme vlastní vektory:

$$(\mathbf{A} - 2\mathbf{E})\mathbf{h} = \mathbf{0}, \text{ t.j. } \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_1 \\ h_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \; \mathbf{h} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Tedy, dvojnásobnému vlastnímu číslu $\lambda = 2$ odpovídá jen jeden vlastní vektor. Jaká je geometrická násobnost?

$$\mathbf{A} - 2\mathbf{E} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \Longrightarrow \dim \mathcal{N}(\mathbf{A} - 2\mathbf{E}) = 2 - 1 = 1, \quad \text{tedy}$$

$$\text{geometrická násobnost} = 1 \; < \; \text{algebraická násobnost} \; = 2\,.$$

V tomto případě říkáme, že matice **A** má deficit vlastních vektorů.

Co to znamená ?

Deficit vlastních vektorů

Říkáme, že matice

$\mathbf{A}_{n\times n}$ má deficit vlastních vektorů, jestliže její vlastní vektory netvoří bázi $\mathbb{R}^n$,

tj. vlastních vektorů je méně než n. Deficit vlastních vektorů nastane vždy, jestliže pro alespoň jedno vlastní číslo λ matice $\mathbf{A}$ je algebraická násobnost λ ostře větší než geometrická násobnost λ, viz (9).

Systém vlastních vektorů lze doplnit na bázi $\mathbb{R}^n$ pomocí tzv.

zobecněných vlastních vektorů.

Poznámka Má-li matice deficit vlastních vektorů, není diagonalizovatelná.

Cvičení Ukažte, že vlastní vektory matice tvoří lineárně nezávislý systém vektorů.

Zobecněné vlastní vektory

Vektor **k** je zobecněný vlastní vektor řádu r příslušný k vlastnímu číslu $\lambda \iff$

$$\begin{aligned} (\mathbf{A}-\lambda\mathbf{E})^r\,\mathbf{k} &= \mathbf{0} \\ (\mathbf{A}-\lambda\mathbf{E})^{r-1}\,\mathbf{k} &\neq \mathbf{0}\,. \end{aligned}$$

Poznámka Vlastní vektor je zobecněný vlastní vektor řádu 1, protože

$$(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{E})\,\mathbf{k} = \mathbf{0} \quad \text{a} \quad \mathbf{k} \neq \mathbf{0}\,.$$

Je-li **k** zobecněný vlastní vektor řádu r, definujeme vektory $\mathbf{h}_1, \ldots \mathbf{h}_r$ takto:

$$\begin{aligned} \mathbf{h}_r &= (\mathbf{A}-\lambda\mathbf{E})^0\mathbf{k} = \mathbf{k}, \\ \mathbf{h}_{r-1} &= (\mathbf{A}-\lambda\mathbf{E})^1\mathbf{k}, \\ &\vdots \\ \mathbf{h}_1 &= (\mathbf{A}-\lambda\mathbf{E})^{r-1}\mathbf{k}\,. \end{aligned}$$

Lineárně nezávislé (ukažte) vektory $\mathbf{h}_1, \ldots, \mathbf{h}_r$ tvoří řetězec zobecněných vlastních vektorů délky r.

Poznámka Vektor $\mathbf{h}_1$ je vlastní vektor, protože

$$\mathbf{h}_1 \neq \mathbf{0} \quad \text{a} \quad (\mathbf{A}-\lambda\mathbf{E})\mathbf{h}_1 = (\mathbf{A}-\lambda\mathbf{E})^r\mathbf{k} = \mathbf{0}\,.$$

Příklad: deficit vlastních vektorů, pokračování

Vratme se k příkladu matice $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$. Algebraická násobnost vlastního čísla $\lambda = 2$ je 2, geometrická násobnost je 1, vlastnímu číslu λ přísluší jen jeden vlastní vektor $\mathbf{h} = (1, 0)^{\mathrm{T}}$. Abychom získali bázi $\mathbb{R}^2$, potřebujeme najít jeden zobecněný vlastní vektor $\mathbf{k}$. Ten najdeme jako řešení nehomogenní lineární soustavy algebraických rovnic

$$(\mathbf{A} - 2\mathbf{E})\mathbf{k} = \mathbf{h}, \quad \mathbf{k} = (k_1, k_2)^{\mathrm{T}} \neq \mathbf{0}, \quad \text{t.j.}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_1 \\ k_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{pmatrix} k_2 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Tedy $k_2 = 1$, $k_1 \in \mathbb{R}$ je libovolné, pro jednoduchost můžeme zvolit $k_1 = 0$.

Ukažme, že $\mathbf{k} = (0, 1)^{\mathrm{T}}$ je zobecněný vlastní vektor řádu 2:

$$(\mathbf{A} - 2\mathbf{E})^2\mathbf{k} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$(\mathbf{A} - 2\mathbf{E})\mathbf{k} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \neq \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Odhad spektrálního poloměru

Odhad spektrálního poloměru – Geršgorinova věta
Necht $\mathbf{A} = (a_{jk})$ je čtvercová matice $n \times n$. Označme

$$K_j = \{\mu \in \mathbb{C},\ |\mu - a_{jj}| \le \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{n} |a_{jk}|\}$$ je kruh se středem S_j a poloměrem r_j,

$S_j = a_{jj}$, $r_j = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^{n} |a_{jk}|$, t.j poloměr r_j kruhu K_j je roven součtu absolutních hodnot mimodiagonálních prvků v $j-$tém řádku.

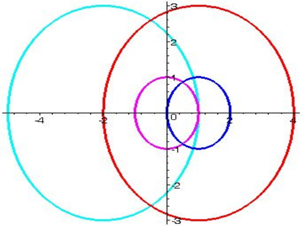
Pak všechna vlastní čísla matice **A** leží ve sjednocení kruhů $\bigcup_{j=1}^{n} K_j$.

Numerické metody výpočtu vlastních čísel a vlastních vektorů jsou založeny na LU nebo QR rozkladu matice **A**.

★

Příklad

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 2 & -2 \end{pmatrix}, \qquad \begin{array}{rcrrcr} S_1 & = & 1 & r_1 & = & 3 \\ S_2 & = & 1 & r_2 & = & 1 \\ S_3 & = & 0 & r_3 & = & 2 \\ S_4 & = & -2 & r_4 & = & 3 \end{array}$$



Vlastní čísla jsou

$$1.126575852 \pm 0.7768133722\,\mathrm{i}, \quad -1.126575852 \pm 1.391009448\,\mathrm{i}.$$

Všechna leží v množině $M = K_1 \cup K_2 \cup K_3 \cup K_4$.

★ Givensovy matice rovinné rotace

Matice $\mathbf{G}_{pq} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $p < q$, tvaru

$$\mathbf{G}_{p,q} = \begin{array}{c} \left(\begin{array}{ccccccccc} 1 & & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & & \\ & & 1 & & & & & & \\ & & & c & \dots & s & & & \\ & & & \vdots & 1 & \vdots & & & \\ & & & \vdots & \ddots & \vdots & & & \\ & & & \vdots & 1 & \vdots & & & \\ & & & -s & \dots & c & & & \\ & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & & 1 \end{array}\right) \\ \begin{array}{ccc} \uparrow & \qquad & \uparrow \\ p & & q \end{array} \end{array} \begin{array}{l} \\ \\ \\ \longleftarrow p \\ \\ \\ \\ \longleftarrow q \\ \\ \\ \\ \end{array},$$

kde $s = \sin\phi$, $c = \cos\phi$, ϕ reálné, se nazývá Givensova matice rovinné rotace. Matice $\mathbf{G}_{pq}$ popisuje rotaci (otočení) $\mathbb{R}^n$ kolem počátku o úhel ϕ v rovině p-q.

Elementární matice rotace

Idea:

$$\mathbf{G}_{12} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}, \ \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \implies \mathbf{G}_{12}\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1\cos\varphi + x_2\sin\varphi \\ -x_1\sin\varphi + x_2\cos\varphi \end{pmatrix}.$$

Vhodnou volbou φ lze dosáhnout toho, že se jedna ze složek vektoru $\mathbf{x}$ vynuluje. Např. zvolíme φ tak, aby se druhá složka vynulovala:

$$-x_1\sin\varphi + x_2\cos\varphi = 0. \quad \text{Nyní využijeme rovnost} \quad \cos\varphi = \sqrt{1-\sin^2\varphi}.$$

Pak

$$x_1^2\sin^2\varphi = x_2^2(1-\sin^2\varphi) \quad \implies \quad \sin^2\varphi = \frac{x_2^2}{x_1^2+x_2^2} \quad \text{pro } (x_1, x_2) \neq (0,0).$$

Dostaneme:

$$\sin\varphi = \frac{|x_2|}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}}; \quad \text{obdobně} \quad \cos\varphi = \frac{|x_1|}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}}.$$

(úhel φ znát nepotřebujeme, stačí znát $\sin\varphi$ a $\cos\varphi$).

$\mathbf{G}_{1,2}$ ... elementární matice rotace.

$\mathbf{G}_{1,2}$ je ortogonální matice:

$$\mathbf{G}_{1,2}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}_{1,2} = \mathbf{G}_{1,2}\mathbf{G}_{1,2}^{\mathrm{T}} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \mathbf{E}$$

Položme

$$\sin\varphi = \frac{|x_2|}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} \quad \text{a} \quad \cos\varphi = \frac{|x_1|}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}.$$

Pak

$$\mathbf{G}_{12}\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1\cos\varphi + x_2\sin\varphi \\ -x_1\sin\varphi + x_2\cos\varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \dfrac{x_1^2}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}} + \dfrac{x_2^2}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}} \\ \dfrac{-x_1x_2}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}} + \dfrac{x_1x_2}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ||\mathbf{x}|| \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Příklad Necht $\mathbf{x} = (3,4)^{\mathrm{T}}$. Položme $\sin\phi = \frac{4}{5}$, $\cos\phi = \frac{3}{5}$. Pak

$$\mathbf{G}_{12}\mathbf{x} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 3 & 4 \\ -4 & 3 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} = (5,0)^{\mathrm{T}}.$$

Vynásobíme-li vektor $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}$ maticí $\mathbf{G}_{pq}^{\mathrm{T}}$ zprava:

$$\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}_{12}^{\mathrm{T}} = \frac{1}{5}(\,3,\ 4\,)\begin{pmatrix} 3 & -4 \\ 4 & 3 \end{pmatrix} = (\,5,\ 0\,).$$

Položíme-li $\sin\phi = \frac{3}{5}$, $\cos\phi = -\frac{4}{5}$, dostaneme

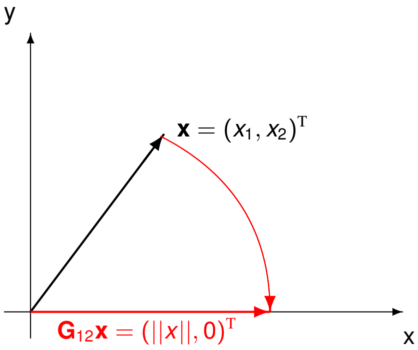
$$\mathbf{G}_{12}\mathbf{x} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} -4 & 3 \\ -3 & -4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix} = (0,-5)^{\mathrm{T}}.$$

Obdobně při násobení zprava:

$$\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}_{12}^{\mathrm{T}} = \frac{1}{5}(\,3,\ 4\,)\begin{pmatrix} -4 & -3 \\ 3 & -4 \end{pmatrix} = (\,0,\ -5\,).$$

Givensovy matice rovinné rotace

$$\mathbf{G}_{12}\mathbf{x} = \begin{pmatrix} ||\mathbf{x}|| \\ 0 \end{pmatrix}$$



Matice rotace **G** pro vektor **x** $\in \mathbb{R}^3$?

Idea: vložíme matici $\mathbf{G}_{1,2}$ do jednotkové matice $\mathbf{E}_{3\times 3}$ - tři možnosti:

- Pro vhodnou volbu φ

$$\widetilde{\mathbf{G}}_{12} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Longrightarrow \widetilde{\mathbf{G}}_{12} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widetilde{x}_1 \\ 0 \\ x_3 \end{pmatrix}$$

- Pro vhodnou volbu φ

$$\widetilde{\mathbf{G}}_{13} = \begin{pmatrix} \cos\varphi & 0 & \sin\varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin\varphi & 0 & \cos\varphi \end{pmatrix} \Longrightarrow \widetilde{\mathbf{G}}_{13} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widetilde{x}_1 \\ x_2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

- Pro vhodnou volbu φ

$$\widetilde{\mathbf{G}}_{23} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & \sin\varphi \\ 0 & -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \Longrightarrow \widetilde{\mathbf{G}}_{23} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \widetilde{x}_2 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Givensovou maticí rovinné rotace lze vždy vynulovat jen jednu složku vektoru.

$$\mathbf{G} := \widetilde{\mathbf{G}_{13}}\widetilde{\mathbf{G}_{12}} \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{G}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \widetilde{\mathbf{G}_{13}}\begin{pmatrix} \widetilde{x}_1 \\ 0 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widetilde{\widetilde{x}}_1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Postupnou aplikací matic rotace se nám podařilo vynulovat dvě (všechny až na jednu) složky vektoru **x**.

$\mathbf{G}_{12}$ je ortogonální matice $\quad \Longrightarrow \quad \mathbf{G}_{12}^{-1} = \mathbf{G}_{12}^{\mathrm{T}}$

$$\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{G}_{12}^{-1} = (x_1, x_2) \cdot \mathbf{G}_{12}^{-1} = (x_1, x_2) \cdot \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} =$$

$$= \left(\frac{(x_1)^2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} + \frac{(x_2)^2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}}, -\frac{x_1 x_2}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} + \frac{x_2 x_1}{\sqrt{x_1^2 + x_2^2}} \right) = (||x||, 0)$$

Násobení vektoru $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}$ zprava maticí $\mathbf{G}_{12}^{-1}$ vynuluje druhou složku vektoru $\mathbf{x}^{\mathrm{T}}$.

Givensova matice rovinné rotace $\mathbf{G}_{pq} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je ortogonální matice

$$\mathbf{G}_{pq}^{\mathrm{T}} \mathbf{G}_{pq} = \mathbf{G}_{pq} \mathbf{G}_{pq}^{\mathrm{T}} = \mathbf{E}\,.$$

Od jednotkové matice $\mathbf{E}$ se liší pouze prvky v pozicích

$$(p,p),\ (p,q),\ (q,p)\ \text{ a }\ (q,q)\,.$$

Vynásobíme-li libovolnou matici $\mathbf{A}$ maticí $\mathbf{G}_{pq}$ zleva, změní se pouze p-tý a q-tý řádek matice $\mathbf{A}$, vynásobíme-li matici $\mathbf{A}$ maticí $\mathbf{G}_{pq}$ zprava, změní se pouze p-tý a q-tý sloupec matice $\mathbf{A}$.

★

Pomocí vhodně zvolených Givensových matic lze postupně vynulovat v dané matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ prvky pod diagonálou a transformovat tak matici **A** na horní trojúhelníkový tvar. Podstatně záleží na pořadí, v němž prvky nulujeme, nebot chceme, abychom při nulování dalšího prvku dříve získané nuly nezničili.

Sestavme vždy matici $\mathbf{G}_{pq}$ $(p < q)$ tak, aby se vynulovala q-tá složka daného vektoru, a násobme postupně matici **A** zleva maticemi

$$\begin{array}{cccc} \mathbf{G}_{12} & \mathbf{G}_{13} & \dots & \mathbf{G}_{1n} \\ & \mathbf{G}_{23} & \dots & \mathbf{G}_{2n} \\ & & \ddots & \\ & & & \mathbf{G}_{n-1,n} \end{array} .$$

Po provedení k násobení, $k \leq \frac{1}{2}n(n-1)$ (Givensovu rotaci neaplikujeme na prvek matice, který už nulový je), bude matice **A** v horním trojúhelníkovém tvaru **R** a matice

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_{n-1,n}\mathbf{G}_{n-2,n}\dots\mathbf{G}_{13}\mathbf{G}_{12}$$

bude ortogonální matice,

$$\mathbf{G}\,\mathbf{A} = \mathbf{R} \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{A} = \mathbf{G}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{R}.$$

Znázorněme si schématicky Givensovu metodu redukce matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{4\times 4}$ na horní trojúhelníkový tvar ($+$ značí prvky, které se transformací nemění, $*$ značí prvky, které se změní):

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} + & + & + & + \\ + & + & + & + \\ + & + & + & + \\ + & + & + & + \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathbf{G}_{12}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ + & + & + & + \\ + & + & + & + \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathbf{G}_{13}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & + & + & + \\ 0 & * & * & * \\ + & + & + & + \end{pmatrix} \longrightarrow$$

$$\xrightarrow{\mathbf{G}_{14}} \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & + & + & + \\ 0 & + & + & + \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathbf{G}_{23}} \begin{pmatrix} + & + & + & + \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & + & + & + \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathbf{G}_{24}} \begin{pmatrix} + & + & + & + \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & + & + \\ 0 & 0 & * & * \end{pmatrix} \xrightarrow{\mathbf{G}_{34}} \begin{pmatrix} + & + & + & + \\ 0 & + & + & + \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix} = \mathbf{R}.$$

Nevýhoda: Givensova matice vynuluje vždy jen jeden prvek v dané matici.

Výhoda (zejména pro práci s řídkými maticemi): Aplikujeme-li Givensovu rotaci na danou matici, pak se v této matici změní pouze dva řádky nebo sloupce. Ostatní prvky zůstanou nezměněny.

★ Householderovy matice zrcadlení

Householderova matice zrcadlení ... matice, která vynuluje více složek vektoru najednou.

$$\mathbf{H_v} = \mathbf{E} - 2\,\frac{\mathbf{v}\,\mathbf{v}^{\mathrm{T}}}{||\mathbf{v}||^2}\,, \quad \mathbf{v} \in \mathbb{R}^n\,,\ \mathbf{v} \neq \mathbf{0}\,.$$

$\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{H}\,\mathbf{x} := \mathbf{H_v x}$ je vektor souměrný s vektorem $\mathbf{x}$ podle nadroviny ϱ, která je ortogonální k vektoru $\mathbf{v}$.

$$\mathbf{H}^{\mathrm{T}} = (\mathbf{E} - 2\,\frac{\mathbf{v}\,\mathbf{v}^{\mathrm{T}}}{||\mathbf{v}||^2})^{\mathrm{T}} = \mathbf{H} \Longrightarrow \mathbf{H} \text{ je symetrická}$$

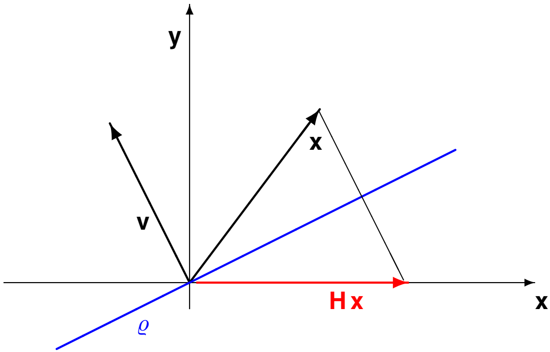
$$\mathbf{H}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{H} = \mathbf{H}^2 = \mathbf{E} \Longrightarrow \mathbf{H} \text{ je ortogonální}\,.$$

Poznámka: $\mathbf{Hx} = \mathbf{x} - \mathbf{v} \quad \Longrightarrow \quad$ pro $\mathbf{v} = \mathbf{x} - ||\mathbf{x}||\mathbf{e}_1$ je $\mathbf{Hx} = ||\mathbf{x}||\mathbf{e}_1$ vektor, který má všechny složky až na první nulové.

Příklad

$$\mathbf{x} = (3,4)^{\mathrm{T}}, \quad \mathbf{v} = \mathbf{x} - ||\mathbf{x}||\mathbf{e}_1 = (-2,4)^{\mathrm{T}},$$

$$\mathbf{H} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 4 & -3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}\,\mathbf{x} = (5,0)^{\mathrm{T}}.$$



★ Householderova metoda pro řešení soustavy lineárních algebraických rovnic

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}\,, \quad \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}\,.$$

Najdeme $n-1$ Householderových matic $\mathbf{H}_1,\ \mathbf{H}_2,\ \dots\ ,\mathbf{H}_{n-1}$, takových, že

$$\mathbf{H\,A} := \mathbf{H}_{n-1}\cdot\cdots\cdot\mathbf{H}_2\cdot\mathbf{H}_1\cdot\mathbf{A} = \mathbf{R}\,,$$

$\mathbf{R}$ je horní trojúhelníková matice, a pak řešíme soustavu s trojúhelníkovou maticí:

$$\mathbf{H\,A} = \mathbf{R}\,, \quad \mathbf{H} \quad \text{je ortogonální, tedy} \quad \mathbf{H}^{\mathrm{T}} = \mathbf{H}^{-1} \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{A} = \mathbf{H}^{\mathrm{T}}\,\mathbf{R}\,.$$

$$\mathbf{H\,Ax} = \mathbf{Hb} \quad \Longrightarrow \quad \mathbf{Rx} = \mathbf{Hb}$$

Doporučená literatura

- Fiedler M.: Speciální matice a jejich použití v numerické matematice, SNTL, Praha, 1981 .
- Ford W.: Numerical Linear Algebra with Applications Using MATLAB. Elsevier, 2015 .
- Golub G., Van Loan Ch: Matrix computations, The Johns Hopkins University press, Baltimore, 1996 (third edition) .
- Horn R. A., Johnson Ch. R.: Matrix analysis, Cambridge University Press, 1985 .
- Kubíček M., Dubcová M., Janovská D.: Numerické metody a algoritmy, VŠCHT Praha, 2005 (second edition).
- Póta G.: Mathematical Problems for Chemistry Students, Elsevier, 2006, ISBN 13:978-0-444-52793-6 (pbk.).
- Strang G.: Differential Equations and Linear Algebra. Cambridge Press, 2014. ISBN 978-0-9802327-9-0.
- Jurjen Duintjer Tebbens [et al.]: Analýza metod pro maticové výpočty. Základní metody. Praha : Matfyzpress, 2012, ISBN 978-80-7378-201-6 (brož.).
- Trefethen N., Bau D.: Numerical linear algebra, SIAM Philadelphia, 1997 . ISBN 978-0-898713-61-9 (pbk.).
- Turzík D. et all: Matematika II, VŠCHT Praha, 2002.
- Wilkinson J. H., Reinsch C.: Handbook for Automatie Computation. Vol. II Linear Algebra, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1971