

*Харківський національний університет  
імені В.Н.Каразіна*



“ІНФОРМАТИКА І ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ  
для хіміків”

# **ЛЕКЦІЯ № 1**

## **Теорія матриць**

**В.В.Іванов**

*Кафедра хімічного матеріалознавства*

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$$

$$\vec{a} = (a_1 \quad a_2 \quad \dots \quad a_N)$$

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix}$$

$$a^+ = (a_1 \quad a_2 \quad \dots \quad a_N)$$

$$c = a + b$$

$$c^+ = a^+ + b^+$$

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_N \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_N \end{pmatrix}$$

~~$$a + b^+$$~~

$$\mathbf{c} = \lambda \mathbf{a}$$

$$\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_N \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda a_1 \\ \lambda a_2 \\ \dots \\ \lambda a_N \end{pmatrix}$$

Скалярный добуток  
Скалярное произведение  
Dot product

$$\mathbf{t} = \mathbf{a}^+ \cdot \mathbf{b}$$

$$\mathbf{t} = (a_1 \quad a_2 \quad \dots \quad a_N) \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_N \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^N a_i b_i$$

## ортогональність

$$\vec{a} \cdot \vec{b} = \mathbf{a}^+ \cdot \mathbf{b} = \sum a_i b_i = 0$$

і нормування

$$\vec{a} \cdot \vec{a} = \mathbf{a}^+ \cdot \mathbf{a} = \sum a_i^2 = 1$$

Поняття базису

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_N \end{pmatrix} = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + a_N \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 1 \end{pmatrix} = a_1 \vec{e}_1 + a_2 \vec{e}_2 + \dots + a_N \vec{e}_N$$

$$\mathbf{e}_1^+ \cdot \mathbf{e}_1 = (1 \quad 0 \quad \dots \quad 0) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 + \dots + 0 \cdot 0 = 1$$

$$\mathbf{e}_1^+ \cdot \mathbf{e}_2 = (1 \quad 0 \quad \dots \quad 0) \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \cdot 0 + 0 \cdot 1 + \dots + 0 \cdot 0 = 0$$

$$\mathbf{e}_i^+ \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}$$

# Лінійна незалежність базисних векторів

Чи можливо?  $e_i = c e_j$

$$e_i \neq \sum_{k \neq i} c_k e_k$$

Лінійно залежні

$$X_1 = c_2 X_2 + c_3 X_3 + \dots + c_N X_N$$

Лінійно незалежні

$$X_1 \neq c_2 X_2 + c_3 X_3 + \dots + c_N X_N$$

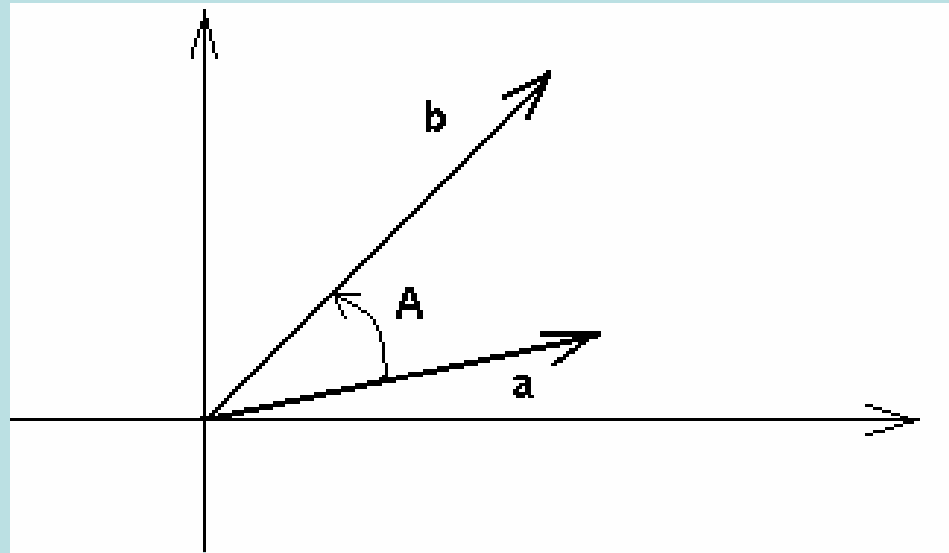
$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_N \end{pmatrix} = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + a_N \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 1 \end{pmatrix} = a_1 \mathbf{e}_1 + a_2 \mathbf{e}_2 + \dots + a_N \mathbf{e}_N$$

$$\mathbf{a} = a_1 \mathbf{e}_1 + a_2 \mathbf{e}_2 + \dots + a_k \mathbf{e}_k + \dots + a_N \mathbf{e}_N$$

$$\mathbf{e}_k^+ \mathbf{a} = a_1 \mathbf{e}_k^+ \mathbf{e}_1 + a_2 \mathbf{e}_k^+ \mathbf{e}_2 + \dots + a_k \mathbf{e}_k^+ \mathbf{e}_k + \dots + a_N \mathbf{e}_k^+ \mathbf{e}_N$$

$$\mathbf{e}_k^+ \mathbf{a} = \sum_j a_j \mathbf{e}_k^+ \mathbf{e}_j = \sum_j a_j \delta_{kj} = a_k$$

# Матриця задає трансформацію вектору



$$\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{a}$$



$$\mathbf{x} = \mathbf{A}\mathbf{e}_j$$

$$\mathbf{x} = x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + \dots + x_N\mathbf{e}_N$$

$$\mathbf{e}_k^+\mathbf{x} = x_k = \mathbf{e}_k^+\mathbf{A}\mathbf{e}_j = A_{kj}$$

$$\mathbf{e}_k^+\mathbf{A}\mathbf{e}_j = A_{kj}$$

строка

СТОВПЧИК

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \dots & A_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{N1} & A_{N2} & \dots & A_{NN} \end{pmatrix}$$

# Добуток матриці та вектору

$$\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{a}$$

$$\mathbf{a} = a_1\mathbf{e}_1 + a_2\mathbf{e}_2 + \dots + a_N\mathbf{e}_N$$

$$\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{a} = \mathbf{A}a_1\mathbf{e}_1 + \mathbf{A}a_2\mathbf{e}_2 + \dots + \mathbf{A}a_N\mathbf{e}_N = \sum_j a_j \mathbf{A}\mathbf{e}_j$$

$$\mathbf{b} = b_1\mathbf{e}_1 + b_2\mathbf{e}_2 + \dots + b_N\mathbf{e}_N = \sum_j a_j \mathbf{A}\mathbf{e}_j$$

$$b_k = \mathbf{e}_k^+ \sum_j a_j \mathbf{A}\mathbf{e}_j = \sum_j a_j \mathbf{e}_k^+ \mathbf{A}\mathbf{e}_j = \sum_j A_{kj} a_j$$

# Добуток матриці та вектору

$$\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{a}$$

$$\mathbf{b}_k = \sum_j \mathbf{A}_{kj} \mathbf{a}_j$$

$$\begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \\ \dots \\ \mathbf{b}_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} & \dots & \mathbf{A}_{1N} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} & \dots & \mathbf{A}_{2N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathbf{A}_{N1} & \mathbf{A}_{N2} & \dots & \mathbf{A}_{NN} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{a}_2 \\ \dots \\ \mathbf{a}_N \end{pmatrix}$$

~~$$\mathbf{A}\mathbf{a}^+$$~~

# Добуток двох матриць

$$\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{a}$$

$$\mathbf{c} = \mathbf{B}\mathbf{b}$$

$$\mathbf{c} = \mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{a} \quad \longrightarrow \quad c_i = \sum_{k,j} B_{ik} \overset{\substack{b_k \\ ||}}{\boxed{A_{kj} a_j}}$$

$$\mathbf{c} = \mathbf{D}\mathbf{a}$$

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

$$D_{ij} = \sum_k B_{ik} A_{kj}$$

# Спеціальні типи матриць

$$0 \cdot \vec{a} = \vec{0}$$

$$A + 0 = A$$

нульова

$$0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

одинична

$$I \cdot \vec{a} = \vec{a}$$

діагональна

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} A_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & A_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & A_{NN} \end{pmatrix}$$

# Спеціальні типи матриць

**Симетрична матриця** – недиагональні елементи:

$(A_{12}=A_{21}, A_{13}=A_{31}\dots)$ .

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots & A_{1N} \\ A_{12} & A_{22} & \dots & A_{1N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ A_{1N} & A_{2N} & \dots & A_{NN} \end{pmatrix}$$

$$C_{ij} = A_{ij} + B_{ij}$$

## Властивості суми:

$$A+B=B+A$$

**Асоціативність**  
 $(A+B)+C=A+(B+C)$

**Добуток матриці та числа**

$$C = \lambda \cdot A:$$

$$C_{ij} = \lambda A_{ij}$$

## Властивості добутку

(асоціативність):

$$\lambda (A+B) = \lambda A + \lambda B$$

$$(\gamma+\lambda) A = \gamma A + \lambda A$$

$$(\gamma\lambda) A = \gamma (\lambda A)$$

$$C_{ij} = \sum_k A_{ik} B_{kj}$$

Умова: щоб матриці можна було б перемножити  
необхідно:

$$\begin{array}{ccc} C & A & B \\ (m \times \ell) & = & (m \times n) \cdot (n \times \ell) \end{array}$$



# Властивості добутку матриць

(асоціативність)

$$(A B) \cdot C = A (B C)$$

$$\left. \begin{aligned} (A + B) \cdot C &= AC + BC \\ A (B + C) &= AB + AC \end{aligned} \right\}$$

У загальному випадку матриці не комутують

$$[A, B] = AB - BA \neq 0$$

Матриці комутують:

$$[A, B] = AB - BA = 0$$

**Ранг матриці  $\rho(\mathbf{A})$**  – найбільший з порядків невикроджених квадратних матриць породжених викреслюючи строки та/або стовпчики матриці. У викродженій матриці детермінант дорівнює нулю (для неї неможливо побудувати обернену матрицю !).

**Приклад:** матриця

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 6 \end{pmatrix} \quad \rho(\mathbf{A})=2$$

Можна побудувати матрицю другого **порядку** з ненульовим детермінантом викреслюючи третій стовпчик

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$$

## Взаємно обернені матриці

$$A^{-1}A = AA^{-1} = I$$

$$(A^{-1})^{-1} = A$$

$$(\lambda A)^{-1} = \frac{1}{\lambda} A^{-1}$$

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$$



## Приклад: система лінійних рівнянь

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 1 \\ x_2 + x_3 = 2 \\ x_1 + x_2 + x_3 = 3 \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} \quad A^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix} \quad \Longrightarrow \quad \begin{aligned} x_1 &= 1 \\ x_2 &= 0 \\ x_3 &= 2 \end{aligned}$$

$$Ax = b$$

Якщо  $\det(A)=0$ ,  $b \neq 0$

Нескінчена кількість розв'язків  $\text{rank}(A) = \text{rank}([A, -b])$

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 1 \\ x_2 + x_3 = 2 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 = 3 \end{cases} \quad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

$\text{rank}(A)=2$

Розширена матриця:  $\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 1 & -2 \\ 1 & 2 & 1 & -3 \end{pmatrix}$   $\text{rank}([A, -b])=2$

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 1 \\ x_2 + x_3 = 2 \end{cases} \rightarrow \begin{cases} x_1 = 1 - x_2 \\ x_2 = 2 - x_3 \end{cases}$$

$$Ax = b$$

Якщо  $\det(A)=0$ ,  $b \neq 0$

Немає розв'язків  $\text{rank}(A) \neq \text{rank}([A, -b])$

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 1 \\ x_2 + x_3 = 2 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 = 4 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1 = 1 - x_2 \\ x_2 = 2 - x_3 \end{cases}$$

наприклад

$$x_3 = 0, \quad x_2 = 2, \quad x_1 = -1$$

$$x_1 + 2x_2 + x_3 = -1 + 2 \cdot 2 = 3 \neq 4$$

$$Ax = b$$

Якщо  $\det(A)=0$ ,  $b = 0$

**Нескінчена кількість розв'язків**

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 0 \\ x_2 + x_3 = 0 \\ x_1 + 2x_2 + x_3 = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1 = 1 - x_2 \\ x_2 = 2 - x_3 \end{cases}$$

наприклад

$$x_3 = 0, \quad x_2 = 2, \quad x_1 = -1$$



# Функції від матриць

Шпур (слід, трэйс)

$$s = \sum_i A_{ii}$$

Норма матриці

$$\|A\| \geq 0 \quad \|A\| = 0 \text{ если } A = 0$$

$$\|\alpha A\| = |\alpha| \cdot \|A\|$$

$$\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$$

$$\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$$

$$\|A\|_1 = \max_{ij} |A_{ij}| \quad \|A\|_2 = \sqrt{\sum_{i,j} A_{ij}^2} \quad \|A\|_3 = \max_i \sum_j |A_{ij}|$$

# Протягом курсу ми познайомимось з багатьма прикладними використаннями матричної алгебри

