Харківський національний університет
імені В.Н.Каразіна

“ІНФОРМАТИКА І ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ
для хіміків”

ЛЕКЦІЯ № 1
Теорія матриць

В.В.Іванов
Кафедра хімічного матеріалознавства

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \\ a_N \end{pmatrix} \qquad \vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_N \end{pmatrix}$$

$$a = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \\ a_N \end{pmatrix} \qquad a^+ = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_N \end{pmatrix}$$

$$c = a + b$$

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

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

$$\cancel{a + b^+}$$

$$c = \lambda\, a$$

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

Скалярний добуток
Скалярное произведение
Dot product

$$a^+ \cdot b = t$$

$$c = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_N \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_N \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^{N} a_i b_i$$

$$t = a^+ \cdot b$$

ортогональність

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

і нормування

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

Поняття базису

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

$$e_1^+ \cdot e_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \cdot 1 + 0 \cdot 0 + \dots + 0 \cdot 0 = 1$$

$$e_1^+ \cdot e_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} = 1 \cdot 0 + 0 \cdot 1 + \dots + 0 \cdot 0 = 0$$

$$e_i^+ \cdot e_j = \delta_{ij}$$

Лінійна незалежність базисних векторів

Чи можливо ? $e_i = ce_j$

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

Лінійно залежні

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

Лінійно незалежні

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

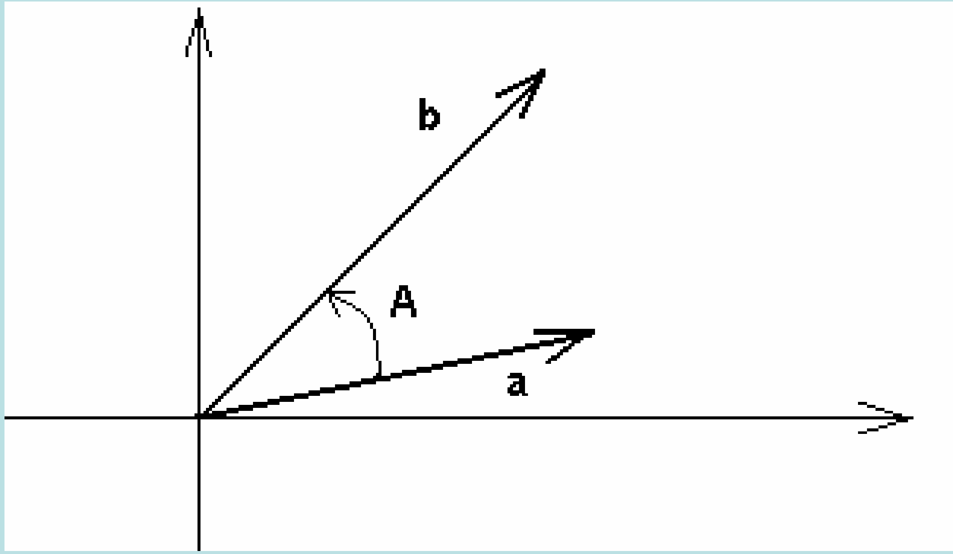
$$\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \dots \\ a_N \end{pmatrix} = a_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} + a_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + a_N \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ 1 \end{pmatrix} = a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_N e_N$$

$$a = a_1 e_1 + a_2 e_2 + \dots + a_k e_k + \dots + a_N e_N$$

$$e_k^+ a = a_1 e_k^+ e_1 + a_2 e_k^+ e_2 + \dots + a_k e_k^+ e_k + \dots + a_N e_k^+ e_N$$

$$\boxed{e_k^+ a = \sum_j a_j e_k^+ e_j^+ = \sum_j a_j \delta_{kj} = a_k}$$

Матриця задає трансформацію вектору



$$b = Aa$$

$$x = Ae_j$$

$$x = x_1 e_1 + x_2 e_2 + \ldots + x_N e_N$$

$$e_k^+ x = x_k = e_k^+ A e_j = A_{kj}$$

$$e_k^+ A e_j = A_{kj}$$

строка

стовпчик

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

Добуток матриці та вектору

$$b = Aa$$

$$a = a_1 e_1 + a_2 e_2 + \ldots + a_N e_N$$

$$b = Aa = Aa_1 e_1 + Aa_2 e_2 + \ldots. + Aa_N e_N = \sum_j a_j A e_j$$

$$b = b_1 e_1 + b_2 e_2 + \ldots. + b_N e_N = \sum_j a_j A e_j$$

$$b_k = e_k^+ \sum_j a_j A e_j = \sum_j a_j e_k^+ A e_j = \sum_j A_{kj} a_j$$

Добуток матриці та вектору

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

$$\boxed{b_k = \sum_j A_{kj} a_j}$$

$$\begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \ldots \\ b_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \ldots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \ldots & A_{2N} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ A_{N1} & A_{N2} & \ldots & A_{NN} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \ldots \\ a_N \end{pmatrix}$$

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

Добуток двох матриць

$$b = Aa$$

$$c = Bb$$

$$c = BAa \quad \Longrightarrow \quad c_i = \sum_{k,j} B_{ik} \overbrace{\boxed{A_{kj} a_j}}^{b_k}$$

$$c = Da$$

$$D = B \cdot A$$

$$\boxed{D_{ij} = \sum_{k} B_{ik} A_{kj}}$$

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

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

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

діагональна

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

Спеціальні типи матриць

Симетрична матриця –недиагональні елементи: (A_{12}=A_{21}, A_{13}=A_{31}…).

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

.

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

Властивості суми:

A+B=B+A

Асоціативність

(A+B)+C=A+(B+C)

Добуток матриці та числа

$C = \lambda \cdot A$:

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

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:

$$[A\,,B]_- = AB\text{-}\,BA = 0$$

Ранг матриці ρ(А) – найбільший з порядків невироджених квадратних матриць породжених викреслюючи строки та/або стовпчики матриці.
У виродженої матриці детермінант дорівнює нулю (для неї неможливо побудувати обернену матрицю **!**).
Приклад: матриця

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 6 \end{pmatrix}$$

ρ(A)=2

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

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

Взаємно обернені матриці

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

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

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

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

Матричне формулювання системи лінійних рівнянь

$$\begin{cases} A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + \ldots + A_{1n}x_n = b_1 \\ A_{21}x_1 + A_{22}x_2 + \ldots + A_{2n}x_n = b_2 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ A_{n1}x_1 + A_{n2}x_2 + \ldots + A_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \ldots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \ldots & A_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ A_{n1} & A_{n2} & \ldots & A_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \ldots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \ldots \\ b_n \end{pmatrix} \Longleftrightarrow Ax = b$$

$$A^{-1}Ax = A^{-1}b \Longrightarrow \boxed{x = A^{-1}b}$$

Приклад: система лінійних рівнянь

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

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

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

Функції від матриць

Шпур (слід, трэйс)

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

Норма матриці

$\|A\| \geqslant 0$ $\quad \|A\| = 0$ если $A = 0$

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

$$\|A + B\| \leqslant \|A\| + \|B\|$$

$$\|AB\| \leqslant \|A\| \cdot \|B\|$$

$$\|A\|_1 = \max |A_{ij}| \qquad \|A\|_2 = \sqrt{\sum_{i,j} A_{ij}^2} \qquad \|A\|_3 = \underbrace{\max}_{i} \sum_j \left|A_{ij}\right|$$

Задача на власні значення

(Eigenvalue problem)

$$Aa = \lambda a \qquad \begin{pmatrix} & & \\ & A & \\ & & \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_1 \\ \dots \\ a_n \end{pmatrix} = (\lambda)\begin{pmatrix} a_1 \\ \dots \\ a_n \end{pmatrix}$$

$$a = \sum_i a_i e_i \qquad a^+ \cdot a = 1 \qquad \sum_i a_i^2 = 1$$

$$e_j^+ \cdot \quad \sum_i a_i A e_i = \sum_i a_i \lambda e_i$$

$$\sum_i a_i e_j^+ A e_i = \lambda \sum_i a_i e_j^+ e_i$$

$$\sum_i a_i e_j^+ A e_i - \lambda \sum_i a_i \delta_{ji} = 0 \qquad A_{ji} = e_j^+ A e_i$$

$$\sum_i (A_{ji} - \lambda \delta_{ij}) a_i = 0, \quad j = 1, n$$

$$\begin{cases} (A_{11}-\lambda)a_1 + A_{12}a_2 + \ldots + A_{1n}a_n = 0 \\ A_{21}a_1 + (A_{22}-\lambda)a_2 + \ldots + A_{2n}a_n = 0 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots = 0 \\ A_{n1}a_1 + A_{n2}a_2 + \ldots + (A_{nn}-\lambda)a_n = 0 \end{cases}$$

$$\begin{pmatrix} A_{11}-\lambda & A_{12} & \ldots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22}-\lambda & \ldots & A_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ A_{n1} & A_{n2} & \ldots & A_{nn}-\lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \ldots \\ a_n \end{pmatrix} = 0$$

$$|A_{ji} - \lambda I| \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \ldots \\ a_n \end{pmatrix} = 0.$$

$$\det \begin{vmatrix} A_{11}-\lambda & A_{12} & \ldots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22}-\lambda & \ldots & A_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ A_{n1} & A_{n2} & \ldots & A_{nn}-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$\det|A_{ji} - \lambda I| = 0.$$

Приклад 1

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

$$\det\begin{pmatrix} 2-\lambda & 1 \\ 1 & 2-\lambda \end{pmatrix} = 0 \qquad (2-\lambda)^2 - 1 = 0$$

$$\lambda^2 - 4\lambda + 3 = 0 \qquad \lambda_{12} = \frac{4 \pm \sqrt{4\cdot 4 - 4\cdot 3}}{2} = \frac{4 \pm 2}{2} = 2 \pm 1$$

$$\lambda_1 = 3 \qquad \lambda_2 = 1$$

$$\begin{pmatrix} 2-\lambda & 1 \\ 1 & 2-\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = 0 \qquad \begin{cases} (2-\lambda)c_1 + c_2 = 0 \\ c_1 + (2-\lambda)c_2 = 0 \end{cases}$$

для $\lambda = 3$

$$\begin{cases} (2-\lambda)c_1 + c_2 = 0 \\ c_1 + (2-\lambda)c_2 = 0 \end{cases}$$

$$\begin{cases} -c_1 + c_2 = 0 \\ c_1 - c_2 = 0 \end{cases} \qquad c_1^2 + c_2^2 = 1$$

$$c_1 = c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \qquad \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = 3 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

для $\lambda = 1$

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = 0 \\ c_1 + c_2 = 0 \end{cases}$$

$$c_1 = -c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = 1 \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}$$

Приклад 2

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

$$\det\begin{pmatrix} 1-\lambda & 1 & 0 \\ 1 & -\lambda & 1 \\ 0 & 1 & 1-\lambda \end{pmatrix} = 0$$

$$(1-\lambda)\begin{pmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & 1-\lambda \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1-\lambda \end{pmatrix} = 0$$

$$(1-\lambda)\big(-\lambda(1-\lambda)-1\big)-(1-\lambda)=0$$

$$(1-\lambda)(\lambda^2-\lambda-2)=0 \qquad \lambda_1 = 1$$

$$\lambda_{2,3} = \frac{1\pm\sqrt{1+2\cdot 4}}{2} = \frac{1\pm 3}{2} \qquad \lambda_2 = 2; \quad \lambda_2 = -1$$

Протягом курсу ми познайомимось з багатьма прикладами використання матричної алгебри