Genetika ve šlechtění zvířat

část 4. (rough draft version)

6. Základy maticové algebry

Protože učebnice zabývající maticovým počtem jsou obvykle obsáhlé, uvádí se zde jen nejnutnější informace potřebné k použití matic v kvantitativní genetice.

obecná algebra → **MATICOVÁ ALGEBRA** ~ „kontejnerová" doprava čísel

Matice představuje kontejner skládající se z čísel. Tyto kontejnery zjednodušují a zrychlují pohyb čísel – matice zjednodušují složité výpočty velkého množství dat. Matice umožňují řešit problémy kvantitativní genetiky a aplikované biometriky.

Matice jsou pravoúhlé uspořádání čísel v řádcích a sloupcích. V kvantitativní genetice a šlechtění zvířat se využívá maticová algebra v analýze regresní, korelační, variance a kovariance, popř. v lineárních modelech.

Maticová formulace:

$\mathbf{A}\ (m \times n)$

$$\begin{array}{cc} & n \\ \mathbf{A} = \begin{bmatrix} . & . & . \\ . & . & . \\ . & . & . \end{bmatrix} & m \end{array} \longrightarrow$$

zjednodušení
urychlení
zefektivnění pohybu čísel

Obecný popis matic

V tabulce je zaznamenána užitkovost prasnic (počet živě narozených selat ve vrhu) podle pořadí vrhu a plemene.

pořadí vrhu	Plemeno 1	Plemeno 2	Plemeno 3
1	13	6	10
2	15	8	12
3	16	10	7
4	15	8	11

Hlavní vlastností matic je, že lze data *uspořádat*. Z tabulky vybereme data užitkovosti a začleníme je do množiny čísel (**matici**) ve formátu:

$$\begin{bmatrix} 13 & 6 & 10 \\ 15 & 8 & 12 \\ 16 & 10 & 7 \\ 15 & 8 & 11 \end{bmatrix}$$

Každé číslo představuje *prvek* matice[1].

[1] každý prvek matice má přesně určené místo – souřadnice číslo řádku a číslo sloupce: $\mathbf{a}_{11}$, čte se jako „a jedna jedna"

Základní pojmy

Skalár: je jedna veličina (matice 1 x 1, matice o jednom prvku), obvykle označena malým písmenem v kurzívě, např. *a*, *r* či *k*.

Matice: je skupina prvků uspořádaných do řádků a sloupců. Prvky mohou být skaláry, matematické výrazy nebo dokonce jiné matice (submatice). Matice jsou označeny velkým tučným písmenem, např. **A**, **T**, **M**.

Řád nebo **rozměr** matice (typ) je dán počtem řádků (**m**) a sloupců (**n**): matice typu m x n; $\mathbf{A}_{m \times n}$.

$$\mathbf{A}_{3x4} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \end{bmatrix}$$

Matici lze zapsat i ve formě složených závorek: $\mathbf{A} = \{a_{ij}\}$, pro i = 1, 2, 3, ..., m, a j = 1, 2, 3, 4, ..., n.

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 7 & 0 & -15 & 63 \\ 45 & 1 & 3 & 6 \\ -7 & 0 & 0 & 32 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} y+5 & t+g+u & x \\ a-b & \mathbf{Z} & c\log d \\ (a+b)/c & z^2 & \sqrt{x-y} \end{bmatrix}$$

Vektory. Sloupcový vektor je matice s jedním sloupcem a řádkový vektor je matice s jedním řádkem. Obvykle je-li použito slovo vektor, myslí se tím sloupcový vektor. Vektory jsou označeny tučným malým písmenem (**u**, **v**), ale není to univerzální označení.

$$\mathbf{u} = \begin{bmatrix} 3 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{v} = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 2 \end{bmatrix}$$

Transpozice (přemístění). Transpozice je sestavení nové matice zaměněním řádků původní matice za sloupce nové, transponované, ve stejném pořadí. Transpozicí sloupcového vektoru získáme vektor řádkový, transpozicí matice řádu *m* x *n* získáme matici řádu *n* x *m*. Jestliže **A** je původní matice, pak **transponovaná matice** je označena $\mathbf{A}'$ nebo také $\mathbf{A}^{\mathbf{T}}$.

Diagonála. Prvky diagonály matice jsou ty, jejichž číslo řádku a sloupce je stejné. Prvky a_{11}, a_{22}, a_{33} tvoří *hlavní* diagonálu. Např.

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} 5 & 2 & 8 \\ -3 & 6 & 1 \end{bmatrix},$$ pak prvky hlavní diagonály jsou 5 a 6.

Typy matic

1. **Rektangulární**. Matice je rektangulární, jestliže počet řádků *m* není roven počtu sloupců *n*.: $m \neq n$. Všechny vektory jsou rektangulární matice.
2. **Čtvercová**. Matice je čtvercová, když má stejný počet řádků a sloupců: *m* x *n* a $m = n$.
3. **Symetrická**. Symetrická matice je čtvercová matice. Prvek v *i-tém* řádku a *j-tém* sloupci je roven prvku v *j-tém* řádku a *i-tém* sloupci, pro všechny hodnoty *i* a *j*. Transpozicí symetrické matice získáme stejnou matici, tj. $\mathbf{A}' = \mathbf{A}$. Výsledek součinu jakékoliv matice $\mathbf{B}'.\mathbf{B}$ je matice symetrická a čtvercová.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -6 & 2 & 5 \\ 2 & 0 & 4 \\ 5 & 4 & 3 \end{bmatrix} = \mathbf{A}' = \begin{bmatrix} -6 & 2 & 5 \\ 2 & 0 & 4 \\ 5 & 4 & 3 \end{bmatrix}$$

4. **Diagonální**. Diagonální matice je čtvercová, symetrická matice, ve které jsou všechny prvky rovny 0 mimo diagonálu. Diagonální matice může být zapsána jako:
   D = diag($\mathbf{d_1}$ $\mathbf{d_2}$ … $\mathbf{d_n}$), kde d_i jsou prvky diagonály.

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} -6 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$, nebo v zápise **D** = **diag**(-6 2 3)

5. **Jednotková (Identická)**. Matice jednotková je speciální forma diagonální matice, ve které jsou všechny diagonální prvky rovny jedné. Obvykle se označuje **I**. Protože to je diagonální matice, je také čtvercová a symetrická.

$$\mathbf{I} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

6. **Nulová.** Nulová matice je matice jakéhokoliv řádu s prvky rovných 0.

$$\mathbf{0} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 3 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

7. **Matice pouze s jedničkami**. Sloupcový vektor délky n s prvky rovnými 1 se obvykle označuje $\mathbf{1_n}$. Matice s m řádky a n sloupci a všemi prvky rovných 1 se označuje jako **J**.

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

8. **Triangulární (trojúhelníková)**. Triangulární matice jsou čtvercové matice se všemi mimo diagonálními prvky nad (nebo pod) diagonálou rovnými nule. Rozlišujeme tedy dolní **U** (nebo horní **V**) triangulární matici.

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 6 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ 7 & 1 & 2 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{V} = \begin{bmatrix} 2 & 11 & 3 \\ 0 & -1 & 8 \\ 0 & 0 & 4 \end{bmatrix}$$

9. **Tridiagonální**. Tridiagonální matice je čtvercová matice, která má všechny prvky rovny nule kromě prvků diagonály a bezprostředně s nimi sousedícími nalevo a napravo od diagonály. Např.:

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} 5 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 5 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 5 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 5 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 5 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 5 \end{bmatrix}$$

Základní operace s maticemi

Pro výpočet selekčních indexů a pro odhad PH je nutné ovládat tyto základní operace s maticemi:

1. **TRANSPONOVÁNÍ MATICE** (transpozice – přemístění). Transpozice matice úvodního příkladu počet živě narozených selat ve vrhu podle pořadí vrhu a plemene:

$$\mathbf{S}_{4\,x\,3} = \begin{bmatrix} 13 & 6 & 10 \\ 15 & 8 & 12 \\ 16 & 10 & 7 \\ 15 & 8 & 11 \end{bmatrix} \Rightarrow \mathbf{T} = \mathbf{S}'_{3\,x\,4} = \begin{bmatrix} 13 & 15 & 16 & 15 \\ 6 & 8 & 10 & 8 \\ 10 & 12 & 7 & 11 \end{bmatrix}$$

Vztahu, kdy řádky jedné matice jsou sloupce druhé, se říká, že jedna matice je transpozicí druhé. **S** je transpozicí **T** a **T** je transpozicí **S**. Platí, že $\mathbf{T} = \mathbf{S}'$.
Transpozicí již transponované matice $\mathbf{S}'$ získáme opět původní matici **S**: $(\mathbf{S}')' = \mathbf{S}$.

2. **SČÍTÁNÍ A ODČÍTÁNÍ** (matice musí mít stejné rozměry, říká se, že jsou *konformní*)

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 1 \\ -4 & 2 & 0 \\ 1 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A} + \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1+4 & 2+(-1) & 1+1 \\ 2+(-4) & 1+2 & 2+0 \\ 1+1 & 2+(-2) & 3+1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 1 & 2 \\ -2 & 3 & 2 \\ 2 & 0 & 4 \end{bmatrix} = \mathbf{B} + \mathbf{A}$$

$$\mathbf{A} - \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1-4 & 2-(-1) & 1-1 \\ 2-(-4) & 1-2 & 2-0 \\ 1-1 & 2-(-2) & 3-1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 & 3 & 0 \\ 6 & -1 & 2 \\ 0 & 4 & 2 \end{bmatrix}$$

3. **NÁSOBENÍ MATIC KONSTANTOU (SKALÁREM)**

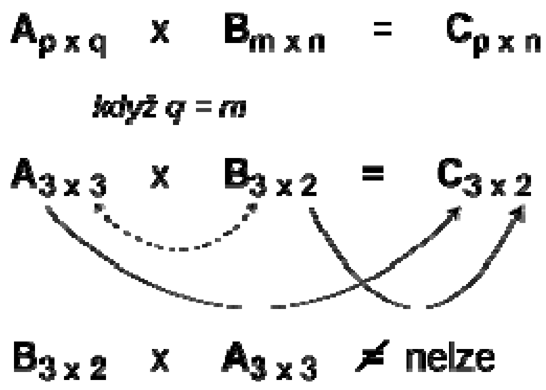
$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 \\ 9 & -7 & 1 \end{bmatrix} \text{ a } c = -4 \qquad \Rightarrow \qquad c.\mathbf{A} = \mathbf{A}.c = \begin{bmatrix} -8 & 4 & 0 \\ -36 & 28 & -4 \end{bmatrix}$$

4. **NÁSOBENÍ MATIC** (<u>2 matice jsou konformní pro násobení, když počet sloupců v 1. matici je roven počtu řádků v 2. matici!</u>)

$\mathbf{F}_{p\,x\,q}$ a $\mathbf{G}_{m\,x\,n}$ pak existuje součin **F.G** pouze když $q = m$. Výsledkem součinu je matice **C** o rozměru p x n. Obecně součin **F.G** nemusí být roven **G.F**, většinou součin **G.F** nemusí dokonce existovat protože **G** nemusí být konformní pro násobení s **F** ($\sim\ n \neq p$). Takže pořadí matic v součinu musí být přesně určeno a dodrženo.

V tomto případě: $\mathbf{F}_{p\,x\,q} = \{f_{ij}\}$ a $\mathbf{G}_{m\,x\,n} = \{g_{ij}\}$, pak

$$\text{součin } \mathbf{F.G}_{p\,x\,n} = \{ \sum_{k=1}^{m} f_{ik} g_{kj} \}, \text{ když } q = m.$$



Př. $\mathbf{A}_{2\,x\,3} = \begin{bmatrix} 3 & 4 & -1 \\ 2 & 1 & 5 \end{bmatrix}$ $\mathbf{B}_{2\,x\,2} = \begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 1 & 9 \end{bmatrix}$

A.B = nelze spočítat (**A** počet sloupců **3** a **B** počet řádků **2**)

B.A = lze spočítat (**B** počet sloupců **2** a **A** počet řádků **2**)

$$\mathbf{C} = \mathbf{B.A} = \begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 1 & 9 \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} 3 & 4 & -1 \\ 2 & 1 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 14 & 12 & 18 \\ 21 & 13 & 44 \end{bmatrix}$$

2.3 + 4.2 = 14	2.4 + 4.1 = 12	2.(-1) + 4.5 = 18
1.3 + 9.2 = 21	1.4 + 9.1 = 13	1.(-1) + 9.5 = 44

Násobí-li se matice **A** maticí jednotkovou, výsledkem je nezměněná matice **A**.

$$\mathbf{A.I} = \mathbf{I.A} = \mathbf{A}$$

Proveďte důkaz s libovolnou maticí!

Transpozice součinu

Transpozice součinu dvou nebo více matic je součin každé transponované matice v opačném pořadí. Např. transponování **ABC** je **C´B´A´.** Je nutné si ověřit, že výsledek je konformní pro násobení a že výsledek má správné rozměry.

Speciální součiny

Matice **A** je ***idempotentní*** jestliže součin matice sama se sebou je roven původní matici, tj. **AA** = **A**. Matice musí být čtvercová, ale ne nutně symetrická.

Matice je ***nulpotentní*** jestliže součin matice sama se sebou je roven nulové matici, tj. **BB** = **0**.

Matice je ***ortogonální*** jestliže součin matice s transponovanou je roven identické matici, tj. $\mathbf{CC'} = \mathbf{I}$, $\mathbf{C'C} = \mathbf{I}$.

Pravidla součinu

- Násobení matice skalárem je, když násobíme každý prvek matice skalárem.
- $\mathbf{ABC} = \mathbf{A}(\mathbf{BC}) = (\mathbf{AB})\mathbf{C}$
- $\mathbf{A}(\mathbf{B} + \mathbf{C}) = \mathbf{AB} + \mathbf{AC}$
- $(\mathbf{A} + \mathbf{B})^2 = (\mathbf{A} + \mathbf{B})(\mathbf{A} + \mathbf{B}) = \mathbf{AA} + \mathbf{AB} + \mathbf{BA} + \mathbf{BB}$

Stopy čtvercové matice

Stopa je operace, která je aplikovaná na čtvercovou matici a je označována písmeny *tr*. Stopa matice se vypočítává jako součet diagonálních prvků matice. Tento součet je skalární hodnota.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix}, \qquad \Rightarrow \text{pak} \quad tr(\mathbf{A}) = 1 + 4 + 3 = 8$$

Stopa součinu konformních matic má speciální vlastnost známou jako pravidlo *rotace stop*. Stopy jsou stejné, protože jsou skaláry, i kdyby dimenze tří součinů byly velmi rozdílné. $tr(\mathbf{ABC}) = tr(\mathbf{BCA}) = tr(\mathbf{CAB})$.

Přímý součin matic (Kroneckerův součin)

Každý prvek první matice je násoben jako skalár, druhou maticí. Jestliže matice **B** je řádu m x n a matice **A** je řádu p x q (např. 2 x 2), pak přímý součin je:

Př. $$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 0 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \\ e & f \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \left[\begin{array}{cc|cc} 3a & 3b & & \\ 3c & 3d & & \\ 3e & 3f & & \\ \hline 1a & 1b & 2a & 2b \\ 1c & 1d & 2c & 2d \\ 1e & 1f & 2e & 2f \end{array}\right] \quad \mathbf{B} \otimes \mathbf{A} = \left[\begin{array}{cc|cc} 3a & & 3b & \\ 1a & 2a & 1b & 2b \\ \hline 3c & & 3d & \\ 1c & 2c & 1d & 2d \\ \hline 3e & & 3f & \\ 1e & 2e & 1f & 2f \end{array}\right]$$

Obecné vyjádření $\mathbf{A} \,.\, \mathbf{B} = \mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11}\mathbf{B} & a_{12}\mathbf{B} \\ a_{21}\mathbf{B} & a_{22}\mathbf{B} \end{bmatrix}$, tento součin je typu *mp* x *mq*.

Když $\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 3 & 1 \end{bmatrix}$,

$$\text{pak } \mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = \begin{bmatrix} 3\begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 3 & 1 \end{bmatrix} & 0\begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 3 & 1 \end{bmatrix} \\ 1\begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 3 & 1 \end{bmatrix} & 2\begin{bmatrix} 2 & 4 \\ 3 & 1 \end{bmatrix} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 & 12 & 0 & 0 \\ 9 & 3 & 0 & 0 \\ 2 & 4 & 4 & 8 \\ 3 & 1 & 6 & 2 \end{bmatrix}, \text{ součin typu 2.2 x 2.2 (4 x 4).}$$

Kroneckerův součin se využívá při predikci PH pomocí víceznakového modelu (*multi-traits model*).

Hadamardův součin

Hadamardův součin je možný pro 2 matice, které jsou konformní pro sčítání. Korespondující prvky obou matic jsou společně násobeny. Řád výsledného součinu je stejný jako dílčích matic součinu. Pro matice **A** a **B** řádu 2 x 2, pak Hadamardův součin je:

$$\mathbf{A} \odot \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11}b_{11} & a_{12}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{22}b_{22} \end{bmatrix}.$$

5. INVERTOVÁNÍ MATIC

Inverze čtvercové matice **A**, označovaná $\mathbf{A}^{-1}$, je matice, která je-li násobená původní maticí (bez ohledu na pořadí), dává identickou (jednotkovou) matici:

$$\mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{I} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}.$$

Inverzní (reciproká) matice $\mathbf{A}^{-1}$.

Platí: $(\mathbf{A}^{-1})^{-1} = \mathbf{A}$

$(\mathbf{ABC})^{-1} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$

$\mathbf{C}^{-1}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{ABC} = \mathbf{I}$

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

Výpočet inverzní matice je zdlouhavá operace. Výkonná výpočetní technika však umožňuje provádět inverzi velmi rozsáhlých matic. Přesto je důležité ovládat základy invertování.

Analogický proces inverze je možné vidět u skalárů:

$$a \times a^{-1} = a \times \frac{1}{a} = 1 \text{ (} a^{-1} \text{ je inverzí a: } a^{-1} = \frac{1}{a}\text{).}$$

Protože dělení matic není definováno, musí být nahrazeno inverzí! Dělení matice **A** maticí **B** se zapisuje a provádí jako $\mathbf{A}.\mathbf{B}^{-1}$ $(\sim \mathbf{A}\frac{1}{\mathbf{B}})$.

POSTUP INVERTOVÁNÍ MATICE:

1. **určení determinantu**
2. **určení přilehlé matice**
3. **transpozice přilehlé matice a vynásobení reciprokou hodnotou determinantu**

ad 1. Jakákoliv *čtvercová* matice s *nenulovým determinantem* (*nesingulární*, *regulární*) může být invertována. Je-li determinant matice roven nule, nazývá se tato matice *singulární*.

Prvním krokem invertování matice je **VÝPOČET DETERMINANTU**[2] matice. Determinant je skalár. Např. u obecné matice **A** 2 x 2,

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix},$$

► determinant je $|\mathbf{A}| = a_{11}.a_{22} - a_{21}.a_{12}$ (rozdíl mezi součinem diagonálních prvků a součinu prvků mimodiagonálních).

Pro matice <u>větší než</u> 2x2 je determinant získán rekurzivně z obecného vyjádření:

$$\det \mathbf{B} = |\mathbf{B}| = \sum_{j=1}^{n} b_{ij}(-1)^{i+j}|\mathbf{M}_{ij}|,$$

kde **B** je matice řádu *n x n* a $\mathbf{M}_{ij}$ je submatice (minor) získaná vymazáním i-tého řádku a j-tého sloupce z matice **B** pro prvek b_{ij}. $|\mathbf{M}_{ij}|$ je subdeterminant submatice $\mathbf{M}_{ij}$. Jakýkoliv řádek matice **B** může být použit k výpočtu determinantu matice, protože výsledek by měl být stejný pro každý řádek. I sloupce mohou být použity místo řádků. Můžete si to ověřit. Pak se pokračuje jako u matic 2 x 2.

Pro matici **B** 3 x 3 může být determinant zredukován do řady determinantů matic 2 x 2. Např.

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 6 & -1 & 2 \\ 3 & 4 & -5 \\ 1 & 0 & -2 \end{bmatrix}$$

pak: $|\mathbf{B}| = 6(-1)^2\begin{vmatrix} 4 & -5 \\ 0 & -2 \end{vmatrix} - 1(-1)^3\begin{vmatrix} 3 & -5 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} + 2(-1)^4\begin{vmatrix} 3 & 4 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = 6(-8) + 1(-1) + 2(-4) = -57$

ad 2. Jestliže determinant je nenulový, pokračuje se v dalším kroku, v kterém se hledá **PŘILEHLÁ MATICE.**

V případě matice $\mathbf{A}_{2\,x\,2}$ je:

- diagonální prvky převrátíme a prvky mimodiagonální vynásobíme (-1)
- přilehlá matice: $\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{bmatrix}$

V případě matice $\mathbf{B}_{3\,x\,3}$ získáme **přilehlou matici** trochu složitěji, když každý prvek matice nahradíme jeho kofaktorem:

- kofaktor: $\mathbf{M}_{ij} = (-1)^{i+j}|\mathbf{M}_{ij}|$, kde
    1. $(-1)^{i+j}$ číslo i-tého řádku a j-tého sloupce obsahující ij-tý prvek
    2. $|\mathbf{M}_{ij}|$ je subdeterminant ij-tého prvku, po vypuštění i-tého řádku a j- tého sloupce obsahující ij-tý prvek (determinant minoru)!

$\mathbf{M}_{11} = +1\begin{vmatrix} 4 & -5 \\ 0 & -2 \end{vmatrix} = -8$; $\mathbf{M}_{12} = -1\begin{vmatrix} 3 & -5 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} = +1$; $\mathbf{M}_{13} = +1\begin{vmatrix} 3 & 4 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = -4$

[2] Determinant je společný dělitel všech prvků inverzní matice.
Nalezení determinantů submatic je hlavní část při výpočtu přilehlé matice.

$$\mathbf{M}_{21} = -1\begin{vmatrix} -1 & 2 \\ 0 & -2 \end{vmatrix} = -2\,; \quad \mathbf{M}_{22} = +1\begin{vmatrix} 6 & 2 \\ 1 & -2 \end{vmatrix} = -14\,; \quad \mathbf{M}_{23} = -1\begin{vmatrix} 6 & -1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix} = -1$$

$$\mathbf{M}_{31} = +1\begin{vmatrix} -1 & 2 \\ 4 & -5 \end{vmatrix} = -3\,; \quad \mathbf{M}_{32} = -1\begin{vmatrix} 6 & 2 \\ 3 & -5 \end{vmatrix} = +36\,; \quad \mathbf{M}_{33} = +1\begin{vmatrix} 6 & -1 \\ 3 & 4 \end{vmatrix} = 27$$

Kofaktory jsou prvky přilehlé matice $\mathbf{M}_B$: $\mathbf{M}_B = \begin{bmatrix} -8 & 1 & -4 \\ -2 & -14 & -1 \\ -3 & 36 & 27 \end{bmatrix}$

ad 3. Přilehlou matici transponujeme a po vynásobení reciprokou hodnotou determinantu získáme **INVERZI MATICE.**

Obecné řešení inverze matice:

$$a_{ij}^{-1} = \left[\frac{(-1)^{i+j}\left|\mathbf{A}_{ij}\right|}{\left|\mathbf{A}\right|}\right]^{T},$$

kde a_{ij}^{-1} je ij-tý prvek matice $\mathbf{A}^{-1}$, $\mathbf{A}_{ij}$ je ij-tá submatice matice $\mathbf{A}$.

Inverze matice **A** je: $\mathbf{A}^{-1} = \dfrac{1}{|\mathbf{A}|}\begin{bmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{bmatrix} = \dfrac{1}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}}\begin{bmatrix} a_{22} & -a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{bmatrix}$

Inverze matice **B** je: $\mathbf{B}^{-1} = |\mathbf{B}|^{-1}\mathbf{M}_B^{'} = \dfrac{1}{|\mathbf{B}|}\mathbf{M}_B^{'} = \dfrac{1}{-57}\begin{bmatrix} -8 & -2 & -3 \\ 1 & -14 & 36 \\ -4 & -1 & 27 \end{bmatrix}$

Ověření správnosti výpočtu: $\mathbf{A}.\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}$, a $\mathbf{B}.\mathbf{B}^{-1} = \mathbf{I}$

PŘÍKLAD INVERZE MATICE 3X3

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 2 & 5 & 4 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix},$$

Nejdříve zjistěte determinanty minorů,

$$|\mathbf{A}_{11}| = \begin{vmatrix} 5 & 4 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = 6\,; \quad |\mathbf{A}_{12}| = \begin{vmatrix} 2 & 4 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = 0\,; \quad |\mathbf{A}_{13}| = \begin{vmatrix} 2 & 5 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = -3$$

$$|\mathbf{A}_{21}| = \begin{vmatrix} 3 & 2 \\ 1 & 2 \end{vmatrix} = 4\,; \quad |\mathbf{A}_{22}| = \begin{vmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 1 \end{vmatrix} = 2\,; \quad |\mathbf{A}_{23}| = \begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 5 & 4 \end{vmatrix} = -6$$

$$|\mathbf{A}_{31}| = \begin{vmatrix} 1 & 2 \\ 5 & 4 \end{vmatrix} = -6\,; \quad |\mathbf{A}_{32}| = \begin{vmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 4 \end{vmatrix} = 8\,; \quad |\mathbf{A}_{33}| = \begin{vmatrix} 3 & 1 \\ 2 & 5 \end{vmatrix} = 13$$

Vypočítejte determinant, když použijete první řádek matice **A**,

$$|\mathbf{A}| = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}(-1)^{i+j}\left|\mathbf{A}_{ij}\right| = 3|\mathbf{A}_{11}| - |\mathbf{A}_{12}| + 2|\mathbf{A}_{13}| = 12$$

Použitím vzorce $\left[\dfrac{(-1)^{i+j}|A_{ij}|}{|A|}\right]^{T}$ získáme,

$$\frac{1}{12}\begin{bmatrix} 1x6 & -1x0 & 1x-3 \\ -1x0 & 1x4 & -1x2 \\ 1x-6 & -1x8 & 1x13 \end{bmatrix} = \frac{1}{12}\begin{bmatrix} 6 & 0 & -3 \\ 0 & 4 & -2 \\ -6 & -8 & 13 \end{bmatrix} = \mathbf{A}^{-1}$$

Ověření, zda je inverze správná, $\mathbf{A}^{-1} x \mathbf{A}$,

$$\frac{1}{12}\begin{bmatrix} 6 & 0 & -3 \\ 0 & 4 & -2 \\ -6 & -8 & 13 \end{bmatrix} x \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 2 & 5 & 4 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} = \frac{1}{12}\begin{bmatrix} 12 & 0 & 0 \\ 0 & 12 & 0 \\ 0 & 0 & 12 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \mathbf{I}$$

Jestliže je determinant nulový, není inverze definována nebo neexistuje.

6. HODNOST MATICE (RANK)

Hodnost matice je vyjádřena počtem lineárně nezávislých řádků nebo sloupců. Čtvercová matice s hodností rovnou počtu řádků nebo sloupců se nazývá **matice plné hodnosti** – je nesingulární, má nenulový determinant a má inverzi. Jsou však matice, kde jsou některé řádky nebo sloupce lineárními kombinacemi jiných řádků nebo sloupců. Hodnost matice je pak menší než je počet řádků nebo sloupců. Pak je to **matice s neúplnou hodností**. Neexistuje pak jedinečná inverze, protože v matici je závislost mezi řádky nebo sloupci.

$4x_1 + 2x_2 + 1x_3 = y_1$

$2x_1 + 0x_2 + 1x_3 = y_2$

$6x_1 + 2x_2 + 2x_3 = y_3$

třetí rovnice je součtem prvních dvou a vektor řešení **x** ($\mathbf{x}' = [x_1\ x_2\ x_3]$) nelze odhadnout pro nedostatečný zdroj informací

$$\begin{bmatrix} 4 & 3 & 1 \\ 2 & 0 & 1 \\ 6 & 3 & 2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$$

Protože v matici **A** je závislost mezi řádky, neexistuje jedinečná inverze! Pouze dva řádky jsou nezávislé a matice má hodnost 2: r(**A**) = 2 Determinant má hodnotu 0 a matice je singulární.

7. ZOBECNĚNÁ INVERZE

Singulární matici nelze invertovat, ale lze vypočítat zobecněnou inverzi. Zobecněnou inverzi matice **A** označujeme jako $\mathbf{A}^-$. Pro zobecněnou inverzi není jedinečné řešení. Zobecněné inverze $\mathbf{A}^-$ **je** matice, která splňuje tyto výrazy: $\mathbf{AA^-A} = \mathbf{A}$. Dále platí že $\mathbf{A^-A}$ ani $\mathbf{AA^-}$ není rovna **I**. Je nekonečný počet zobecněných inverzí pro jednu singulární matici.

Z matice **A** získáme matici s plnou hodností **B**, která je podsouborem matice **A** a za ostatní prvky se dosadí nuly. Pak lze vypočítat inverzi **B** a prvky **A** nahradíme korespondujícími prvky a výsledek se rovná $\mathbf{A}^-$.

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 4 & 3 \\ 2 & 0 \end{bmatrix} \text{ a } \mathbf{B}^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & -3 \\ -2 & 4 \end{bmatrix}$$

Jsou-li nahrazeny prvky v **A** korespondujícími prvky **B** a za zbývající prvky v matici **A** se dosadí nuly a vytvoří se $\mathbf{A}^-$.

$$\mathbf{A}^{-} = \begin{bmatrix} 0 & -3 & 0 \\ -2 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Předpokládejme, že máme sadu rovnic, $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$. Řešením pro $\mathbf{x}$ je vynásobení obou stran rovnice $\mathbf{A}^{-1}$. Pokud je $\mathbf{A}$ regulární (nesingulární) maticí. Pak $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y}$. Stává se, že matice $\mathbf{A}$ je singulární, tzn., že její determinant je roven 0. Řešením sady rovnic může však být vypočítáno použitím zobecněné inverze $\mathbf{A}$.

8. VARIANČNÍ A KOVARIANČNÍ MATICE (VCV)

Genetický zisk u jedné vlastnosti bude záviset na poměru genetické a fenotypové varianci pro vlastnost (~ dědivosti). Je-li však měřeno více vlastností u jedince, je možné mezi nimi vypočítat fenotypové kovariance. Vytváří se varianční-kovarianční matice s variancemi na diagonále a kovariancemi mimo diagonálu.

$x_1, x_2, \ldots x_n$ - proměnné

$var(x_1), var(x_2) \ldots var(x_n)$ - variance

$cov(x_1x_2), cov(x_1x_3), \ldots cov(x_{n-1}, x_n)$ - kovariance

$$\boxed{var(x_1) \sim \sigma^2_{x_1}\ ;\ cov(x_1x_2) \sim \sigma_{x_1x_2}}$$

Variance skaláru náhodné proměnné x je definována jako:

$$V(x) = E(x^2) - E(x)\,E(x) = E(x - E(x))^2 \qquad \sim \sigma^2_x$$

Kovariance mezi dvěma skaláry náhodných proměnných x_1 a x_2:

$$cov(x_1, x_2) = E(x_1, x_2) - E(x_1)\,E(x_2) \qquad \sim \sigma_{x_1x_2}$$

Rozšířením těchto definic na vektor náhodných proměnných $\mathbf{x}$, získáme variančně kovarianční matici (čtvercová, symetrická, pozitivně definovaná nebo alespoň pozitivně semidefinovaná) o rozměrech rovných délce $\mathbf{x}$.

$$V(\mathbf{x}) = E(\mathbf{xx}') - E(\mathbf{x})E(\mathbf{x}')$$

$$\mathbf{V} = \begin{bmatrix} var(x_1) & cov(x_1x_2) & cov(x_1x_3) & . & cov(x_1x_n) \\ cov(x_1x_2) & var(x_2) & cov(x_2x_3) & . & cov(x_2x_n) \\ cov(x_1x_3) & cov(x_2x_3) & var(x_3) & . & . \\ . & . & . & . & . \\ cov(x_1x_n) & . & . & . & var(x_n) \end{bmatrix}$$

- variance na diagonále
- kovariance mimo diagonálu

- tato matice je nutná pro odhad PH a výpočtu selekčních indexů!!!

- nechť $\mathbf{A}$ je matice konstant konformní pro násobení s vektorem $\mathbf{x}$, pak:

$$V(\mathbf{Ax}) = E(\mathbf{Axx}'\mathbf{A}') - E(\mathbf{Ax})\,E(\mathbf{x}'\mathbf{A}') = \mathbf{A}E(\mathbf{xx}')\mathbf{A}' - \mathbf{A}E(\mathbf{x})E(\mathbf{x}')\mathbf{A}'$$
$$= \mathbf{A}(E(\mathbf{xx}') - E(\mathbf{x})E(\mathbf{x}'))\mathbf{A}' = \mathbf{A}V(\mathbf{x})\mathbf{A}' = \mathbf{AVA}'$$

- máme-li dvě sady funkcí $\mathbf{x}$, máme $\mathbf{Ax}$ a $\mathbf{Bx}$, pak: $cov(\mathbf{Ax}, \mathbf{Bx}) = \mathbf{AVB}'$

- máme-li dvě funkce různých náhodných vektorů, máme $\mathbf{Ax}$, $\mathbf{My}$, a $cov(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \mathbf{C}$, pak:

$$cov(\mathbf{Ax}, \mathbf{My}) = \mathbf{ACM}'$$

Např. Sledujeme dvě vlastnosti měřené u mléčného skotu, produkce mléka a procento tuku v mléce. Předpokládejme, že fenotypové variance pro mléko a tuk jsou 2 000 000 kg^2 a 0,12 $\%^2$. a kovariance je –294 kg-%. Matice varianční-kovarianční pak bude:

$$\begin{bmatrix} 2000000 & -294 \\ -294 & 0{,}12 \end{bmatrix}$$

Varianěně-kovarianční matice je vždy čtvercová symetrická matice. Můžeme podobně zkonstruovat geneticko varianční-kovarianční matici, s genetickými variancemi na diagonále a genetickými kovariancemi mimo diagonálu. Genetické kovariance budou rovny zlomku celkové kovariance determinované aditivními genetickými faktory. V tomto případě budeme předpokládat následující genetickou varianěně-kovarianční matici:

$$\begin{bmatrix} 500000 & -86{,}6 \\ -86{,}6 & 0{,}06 \end{bmatrix}$$

Takže dědivost v tomto případě pro:

- produkci mléka je $h^2 = 500\,000 / 2000000 = 0{,}25$
- procento tuku je $h^2 = 0{,}06/0{,}12 = 0{,}50$

Fenotypové korelace se počítají jako podíl fenotypové kovariance a druhé odmocnině součinu fenotypových variancí. Genetické korelace se počítají jako podíl genetické kovariance a druhé odmocnině součinu genetických variancí. Pak genetické korelace v našem případ jsou:

$$r_g = \frac{-86{,}6}{\sqrt{500000 * 0{,}06}} \cong 0{,}50$$

Aplikace maticového počtu

Na rozdíl od sčítání, odečítání a násobení matic, nejsou jednoduché algoritmy pro inverzi matic. Byly vyvinuty spíše složitější algoritmy. Množství času pro výpočet závisí exponenciálně na počtu řádků (nebo sloupců) v matici. Moderní výpočetní technika umožňuje inverzi poměrně rychle. Určité důležité maticové algoritmy však byly zkráceny (Henderson, 1976).

Čtvercová soustava lineárních rovnic – soustava n lineárních rovnic o n neznámých:

$$\mathbf{A}.\mathbf{b} = \mathbf{y}$$

A (n x n), nesingulární; **b** (n x 1)

Vynásobením rovnice $\mathbf{A}^{-1}$ získáme vektor řešení: $\mathbf{b} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y}$

Užitečná vlastnost inverze je, že je-li maticový součin **AB** čtvercová matice, pak $(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$

Základní vztah mezi inverzí matice a řešením systému lineárních rovnic:

> Čtvercová nesingulární matice **A**, jediné řešení pro b v rovnici matic **A**.**b** = **y**, je získáno vynásobením inverzí $\mathbf{A}^{-1}$, $\mathbf{b} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{b} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y}$. Když matice **A** je singulární nebo nečtvercová, řešení pro b může být získáno zobecněnou inverzí (viz str.42), ale takovéto řešení není jedinečné.

Př. 1

- 2 rovnice o 2 neznámých:

9 pomerančů + 4 jablka = 422 Kč
5 pomerančů + 6 jablek = 344 Kč

- způsob výpočtu: eliminace jedné neznáme a vypočítat druhou (metoda odečítací nebo substituční)

$$9x + 4y = 422$$
$$5x + 6y = 344$$

řešení: $x = 34$ Kč
$y = 29$ Kč

- řešení na základě obecné algebry:

$$9x = 422 - 4y$$
$$x = 422/9 - 4y/9$$
$$6y = 344 - 5x$$
$$6y = 344 - 5(422/9 - 4y/9)$$
$$6y = 344 - 2110/9 + 20y/9$$
$$54y = 3096 - 2110 + 20y$$
$$34y = 986$$
$$\boxed{y = 29}$$
$$x = 422/9 - 4.29/9$$
$$\boxed{x = 34}$$

Řešení na základě maticové algebry:

$$\begin{matrix} 9x + 4y = 422 \\ 5x + 6y = 344 \end{matrix} \sim \underset{\textbf{A}}{\begin{bmatrix} 9 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix}} \quad \underset{\textbf{b}}{\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}} \quad = \underset{\textbf{y}}{\begin{bmatrix} 422 \\ 344 \end{bmatrix}}$$

matice koeficientů vektor proměnných vektor cen nákupu

Maticový zápis:

$$\begin{bmatrix} 9 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 422 \\ 344 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 422 \\ 344 \end{bmatrix}$$

Řešení: 1) **čtvercová inverzní matice A**

$$\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} = \frac{1}{a.d - b.c}\begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix} = \frac{1}{9.6 - 4.5}\begin{bmatrix} 6 & -4 \\ -5 & 9 \end{bmatrix} = \frac{1}{34}\begin{bmatrix} 6 & -4 \\ -5 & 9 \end{bmatrix} = 0{,}0294117\begin{bmatrix} 6 & -4 \\ -5 & 9 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 0{,}1764706 & -0{,}1176471 \\ -0{,}1470588 & 0{,}2647059 \end{bmatrix}$$

2) **dosazení inverzní matice A^{-1} do soustavy matic a vypočítat**:

$$\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0{,}1764706 & -0{,}1176471 \\ -0{,}1470588 & 0{,}2647059 \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} 422 \\ 344 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 74{,}4705932 + (-40{,}4706024) \\ -62{,}0588136 + 91{,}0588296 \end{bmatrix} = \langle \begin{matrix} 34 \\ 29 \end{matrix}$$

Výhody řešení: - velký počet rovnic
- velký počet proměnných

řeší počítače a software!!!

Př. 2 Použití maticové algebry je také v řešení systému 3 lineárních rovnic o 3 neznámých:

$$5x_1 + 3x_2 - 4x_3 = 21$$
$$3x_1 - 8x_2 + 5x_3 = 10$$
$$8x_1 + 10x_2 - 3x_3 = -5$$

Je možné řešit následující systém tří rovnic pro tři neznámé: x_1, x_2, x_3. Použitím maticové algebry na tento systém rovnic získáme:

$$\underset{\textbf{A}}{\begin{bmatrix} 5 & 3 & -4 \\ 3 & -8 & 5 \\ 8 & 10 & -3 \end{bmatrix}} \underset{\textbf{x}}{\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}} = \underset{\textbf{y}}{\begin{bmatrix} 21 \\ 10 \\ -5 \end{bmatrix}}$$

A – matice koeficientů
x – vektor řešení
y – vektor pravé strany

$$\mathbf{A} \, . \, \mathbf{x} = \mathbf{y}$$

Řešení rovnic:

$\mathbf{A}^{-1} . \mathbf{A} \, . \, \mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} . \mathbf{y}$ Obě strany se násobí inverzní maticí **A**

$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1} . \mathbf{y}$ Protože $\mathbf{A}^{-1} . \mathbf{A} = \mathbf{I}$

Př. 3 Rovnice nejmenších čtverců

Předpokládejme, že existuje systém rovnic podoby $\mathbf{Ax} = \mathbf{y}$, pro které neexistuje řešení:

- buď je více rovnic než neznámých (**A** nebude čtvercová matice) nebo je lineární závislost mezi rovnicemi

$\mathbf{y} = \mathbf{Ax} + \mathbf{e}$

y – známý vektor (např. vektor měření získaný na vzorku zvířat: výška, váha, produkce mléka, ...)
A – známá matice (matice známých „šetření“ aplikovaná na tyto zvířata)
x – neznámý vektor (vektor řešení; vektor efektů těchto šetření na vzorku zvířat)
e – neznámý vektor (vektor reziduální)

Přejeme si vyřešit pro hodnoty **x** minimální součet reziduálních čtverců. Tento součet čtverců je roven čtverci rozdílů mezi **Ax** a **y**:

$$\mathbf{e}'\mathbf{e} = (\mathbf{y} - \mathbf{Ax})' \, (\mathbf{y} - \mathbf{Ax}) = \mathbf{x}'\mathbf{A}'\mathbf{Ax} - 2\mathbf{x}'\mathbf{A}'\mathbf{y} + \mathbf{y}'\mathbf{y}$$

Odečtením s ohledem na **x** a porovnáním k nule získáme: $2\mathbf{A}'\mathbf{Ax} = 2\mathbf{A}'\mathbf{y}$

a nakonec: $\mathbf{x} = (\mathbf{A}'\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}'\mathbf{y}$

Tato rovnice se nazývá „normální“ a používá se k odvození řešení nejmenších čtverců pro **x**. Je-li matice **A** singulární, pak zobecněná inverze $(\mathbf{A}'\mathbf{A})^{-}$ může nahradit pravou inverzi. V tomto případě však není jedinečné řešení normálních rovnic, ale je množné získat specifické řešení, přidáním omezení do systému rovnic, např. omezení, že všechny úrovně efektu by se měly přičíst k dané hodnotě.

Materiály určené pro studenty specializace „Genetika a šlechtění hospodářských zvířat“ pro předmět **Genetika ve šlechtění zvířat** (letní semestr 2006).

Dr. Ing. Tomáš Urban
ÚMFGZ – pracoviště genetiky MZLU v Brně
http://www.af.mendelu.cz/genetika/
urban@mendelu.cz

únor ’06