APLIKACE MATICOVÉHO POČTU

MINERÁLNÍ MATICE

2-rozměrný systém MgO a SiO_2

enstatit	en	$MgSiO_3$	$MgO.SiO_2$
forsterit	fo	Mg_2SiO_4	$2\ MgO.SiO_2$
křemen	qz	SiO_2	SiO_2

Ve dvourozměrném prostoru nemohou být tři a více vektorů nezávislých!!!

Na tvorbě minerálu se z určité části podílí složka (podíl /frakce/ složky na fázi)

en = 1/2 MgO + 1/2 SiO_2

fo = 2/3 MgO + 1/3 SiO_2

qz = + 1 SiO_2

V dvourozměrném vektorovém prostoru MgO, SiO_2 vektory:

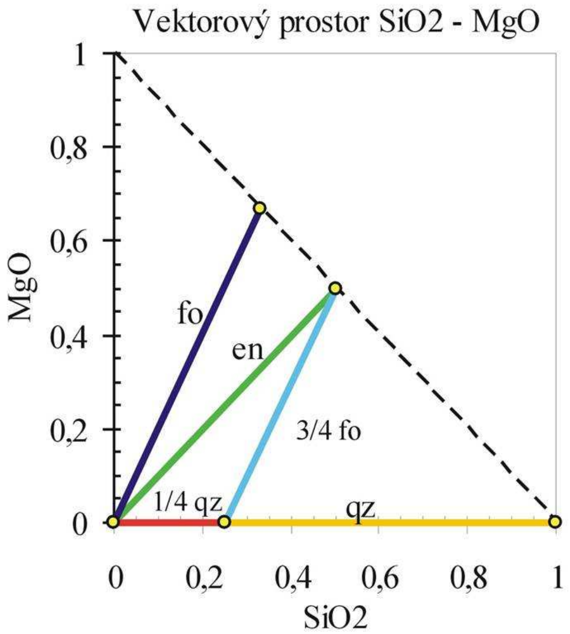
en = $[1/2\ \ 1/2]^T$

fo = $[2/3\ \ 1/3]^T$

qz = $[0\ \ 1]^T$

enstatit je vytvořen lineární kombinací fo a qz!

1 en = 3/4 fo + 1/4 qz



2 $MgO.SiO_2$ + SiO_2 celkem 4 moly: fo se podílí na 3 molech, qz se podílí na 1 molu

3-rozměrný systém CaO, MgO, SiO_2

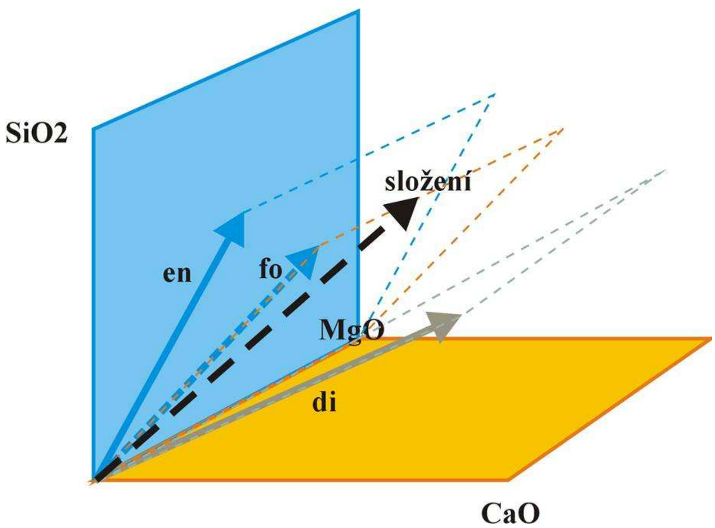
Enstatit, forsterit, diopsid

en:	$MgO + SiO_2$
fo:	$2\ MgO + SiO_2$
di:	$CaO + MgO + 2\ SiO_2$

CaO =			di
MgO =	en +	2 fo +	di
SiO2 =	en +	fo +	2 di

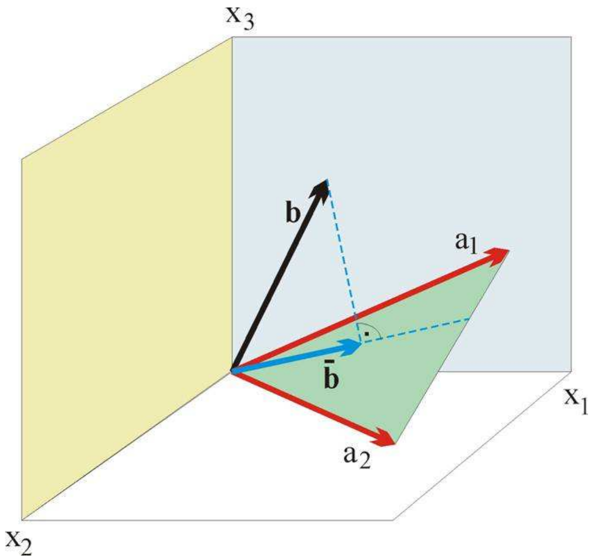
$$\begin{bmatrix} CaO \\ MgO \\ SiO_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} en \\ fo \\ di \end{bmatrix}$$

Projekce **vektoru složení** na osy podprostoru **en, di, fo**



PROJEKCE DO PODPROSTORU

matice $\begin{array}{c} \\ \mathbf{A} = \end{array}\begin{array}{cc} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 \\ \multicolumn{2}{c}{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{bmatrix}} \end{array}$ vektor složení $\mathbf{b} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$



$$\bar{\mathbf{b}} = \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \\ \bar{x}_3 \end{bmatrix} \qquad \bar{\mathbf{y}} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}$$

$$\bar{\mathbf{b}} = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = (\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{b}$$

$$\bar{\mathbf{b}} = \begin{bmatrix} \bar{x}_1 \\ \bar{x}_2 \\ \bar{x}_3 \end{bmatrix} = \mathbf{P}\,\mathbf{b} = \mathbf{A}(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{b}$$

Působení matice **A** na vektor **x** odpovídá lineární kombinaci sloupcových vektorů **A**

y = Ax

$$\mathbf{y} = \begin{array}{cc} \mathbf{a}_1 & \mathbf{a}_2 \\ \multicolumn{2}{c}{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \\ a_{31} & a_{32} \end{bmatrix}} \end{array} \begin{array}{c} \mathbf{x} \\ \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} \end{array} = x_1 \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \end{bmatrix} + x_2 \begin{bmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ a_{32} \end{bmatrix}$$

Matice **A** transformuje (promítá) vektor **x** do sloupcového podprostoru $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$.

Rozpětí vektorů $\mathbf{a}_1$ a $\mathbf{a}_2$ (plocha) tvoří dvojrozměrný podprostor trojrozměrného prostoru $\mathbf{R}_3$

Podprostor (plocha) je daná všemi lineárními kombinacemi vektorů $\mathbf{a}_1$ a $\mathbf{a}_2$!

Pravoúhlá projekce vektoru **b** z $\mathbf{R}_3$ do podprostoru tvořeného vektory $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$

Projektor P:

$\mathbf{P} = \mathbf{A}(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T$

$\mathbf{P}\,\mathbf{b} = \mathbf{A}(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\mathbf{b}$ asociativní zákon: $\mathbf{P}\,\mathbf{b} = \mathbf{A}[(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\,\mathbf{b}]$

výsledný vektor: $\mathbf{y} = (\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\,\mathbf{b}$ (v koordinátách $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$)

$\mathbf{P}\,\mathbf{b} = \mathbf{A}\mathbf{x}$ (v koordinátách x, y, z)

Příklad:

Přepočet složení horniny do normativních minerálů

Složení horniny: $\mathbf{y} = \begin{bmatrix} \mathrm{CaO} \\ \mathrm{MgO} \\ \mathrm{SiO_2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0{,}77 \\ 3{,}38 \\ 3{,}32 \end{bmatrix}$ moly jednotlivých složek

Promítnout do vektorového prostoru **en – fo - di**

en:	$MgO + SiO_2$
fo:	$2\ MgO + SiO_2$
di:	$CaO + MgO + 2\ SiO_2$

CaO = di
MgO = en + 2 fo + di
SiO2 = en + fo + 2 di

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{ccc} \mathrm{en} & \mathrm{fo} & \mathrm{di} \end{array} \\ \mathbf{A} = & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \end{array} \quad \mathbf{A}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \quad \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 3 \\ 3 & 5 & 4 \\ 3 & 4 & 6 \end{bmatrix} \quad \left(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\right)^{-1} = \begin{bmatrix} 14 & -6 & -3 \\ -6 & 3 & 1 \\ -3 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\left(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\right)^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} -3 & -1 & 2 \\ 1 & 1 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

výsledné minerální složení: $\left(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\right)^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0{,}95 \\ 0{,}83 \\ 0{,}77 \end{bmatrix}$

teoretické složení: $\mathbf{Py} = \mathbf{A}\left(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\right)^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{y} = \begin{bmatrix} 0{,}77 \\ 3{,}38 \\ 3{,}32 \end{bmatrix}$ ukazuje rozdíl (chybu) mezi zadaným složením

a projektovaným do podprostoru.

Příklad:

Přepočet chemického složení na minerální fáze

M			x
M		**wt %**	**mol Q**
60,08	**SiO_2**	65,98	1,0982
101,96	**Al_2O_3**	20,22	0,1983
159,69	**Fe_2O_3**	3,01	0,0188
56,08	**CaO**	4,26	0,0760
44,01	**CO_2**	2,03	0,0461
18,02	**H_2O**	4,67	0,2592
	suma:	100,17	moly na 100 g horniny

Matice **A**:

$$
\begin{array}{l}
 \\
SiO_2 \\
Al_2O_3 \\
Fe_2O_3 \\
CaO \\
CO_2 \\
H_2O
\end{array}
\begin{array}{c}
\begin{array}{ccccc} \mathbf{Q} & \mathbf{K} & \mathbf{G} & \mathbf{C} & \mathbf{S} \end{array} \\
\left|\begin{array}{ccccc}
1,00 & 2,00 & 0,00 & 0,00 & 3,34 \\
0,00 & 1,00 & 0,00 & 0,00 & 1,33 \\
0,00 & 0,00 & 0,50 & 0,00 & 0,00 \\
0,00 & 0,00 & 0,00 & 1,00 & 0,33 \\
0,00 & 0,00 & 0,00 & 1,00 & 0,00 \\
0,00 & 2,00 & 0,50 & 0,00 & 1,00
\end{array}\right|
\end{array}
$$

Q	**Q**	křemen	SiO_2
$Al_2Si_2O_5(OH)_4$	**K**	kaolinit	$Al_2O_3 + 2\ SiO_2 + 2\ H_2O$
FeO(OH)	**G**	göthit	$0,5\ Fe_2O_3 + 0,5\ H_2O$
$CaCO_3$	**C**	kalcit	$CaO + CO_2$
$Ca_{0,33}Al_{2,66}Si_{3,34}O_{10}(OH)_2$	**S**	smektit	$0,33\ CaO + 1,33\ Al_2O_3 + 3,34\ SiO_2 + H_2O$

$$
\mathbf{A^T}: \quad
\left|\begin{array}{cccccc}
1,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 \\
2,00 & 1,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 2,00 \\
0,00 & 0,00 & 0,50 & 0,00 & 0,00 & 0,50 \\
0,00 & 0,00 & 0,00 & 1,00 & 1,00 & 0,00 \\
3,34 & 1,33 & 0,00 & 0,33 & 0,00 & 1,00
\end{array}\right|
$$

$$
\mathbf{A^TA}: \quad
\left|\begin{array}{ccccc}
1,00 & 2,00 & 0,00 & 0,00 & 3,34 \\
2,00 & 9,00 & 1,00 & 0,00 & 10,01 \\
0,00 & 1,00 & 0,50 & 0,00 & 0,50 \\
0,00 & 0,00 & 0,00 & 2,00 & 0,33
\end{array}\right|
$$

$$\begin{vmatrix} 3{,}34 & 10{,}01 & 0{,}50 & 0{,}33 & 14{,}03 \end{vmatrix}$$

$$\mathbf{(A^TA)^{-1}:}\quad \begin{vmatrix} 8{,}55 & 2{,}03 & -0{,}59 & 0{,}57 & -3{,}48 \\ 2{,}03 & 1{,}51 & -1{,}50 & 0{,}25 & -1{,}51 \\ -0{,}59 & -1{,}50 & 3{,}93 & -0{,}18 & 1{,}08 \\ 0{,}57 & 0{,}25 & -0{,}18 & 0{,}55 & -0{,}32 \\ -3{,}48 & -1{,}51 & 1{,}08 & -0{,}32 & 1{,}95 \end{vmatrix}$$

$$\mathbf{(A^TA)^{-1}A^T:}\quad \begin{vmatrix} 1{,}00 & -2{,}59 & -0{,}30 & -0{,}57 & 0{,}57 & 0{,}30 \\ 0{,}00 & -0{,}50 & -0{,}75 & -0{,}25 & 0{,}25 & 0{,}75 \\ 0{,}00 & -0{,}07 & 1{,}96 & 0{,}18 & -0{,}18 & 0{,}04 \\ 0{,}00 & -0{,}18 & -0{,}09 & 0{,}45 & 0{,}55 & 0{,}09 \\ 0{,}00 & 1{,}08 & 0{,}54 & 0{,}32 & -0{,}32 & -0{,}54 \end{vmatrix}$$

Vektor minerálů **m**

$$\mathbf{m = (A^TA)^{-1}A^T\, x} = \begin{array}{c} \begin{vmatrix} 0{,}638 \\ 0{,}073 \\ 0{,}037 \\ 0{,}046 \\ 0{,}094 \end{vmatrix} \end{array} \begin{array}{l} \mathbf{Q} \\ \mathbf{K} \\ \mathbf{G} \\ \mathbf{C} \\ \mathbf{S} \end{array}$$

Teoretické složení - projekce do vektoru chem. složení (oxidů):

$$\mathbf{P = A(A^TA)^{-1}A^T} = \begin{vmatrix} 1{,}00 & 0{,}00 & 0{,}00 & 0{,}00 & 0{,}00 & 0{,}00 \\ 0{,}00 & 0{,}93 & -0{,}04 & 0{,}18 & -0{,}18 & 0{,}04 \\ 0{,}00 & -0{,}04 & 0{,}98 & 0{,}09 & -0{,}09 & 0{,}02 \\ 0{,}00 & 0{,}18 & 0{,}09 & 0{,}55 & 0{,}45 & -0{,}09 \\ 0{,}00 & -0{,}18 & -0{,}09 & 0{,}45 & 0{,}55 & 0{,}09 \\ 0{,}00 & 0{,}04 & 0{,}02 & -0{,}09 & 0{,}09 & 0{,}98 \end{vmatrix}$$

$$\mathbf{Px} = \begin{vmatrix} 1{,}0982 \\ 0{,}1981 \\ 0{,}0187 \\ 0{,}0765 \\ 0{,}0456 \\ 0{,}2593 \end{vmatrix}$$

Příklad:

Přepočet analýzy na normativní minerály

složení

	x
SiO_2	42,0
TiO_2	0,3
Al_2O_3	8,0
FeO	6,5
MgO	22,0
CaO	8,0
Na_2O	0,5
	87,3 hm. %

Složení minerálních fází na které chceme analýzu rozpočítat:

	ol	**cpx**	**gar**
A:	41,90	54,60	41,50
	0,07	0,13	0,11
	0,00	1,90	18,00
	7,77	2,22	7,04
	48,50	15,80	18,10
	0,06	20,60	6,70
	0,00	1,44	0,00
	98,30	96,69	91,45

$$\mathbf{A^T}: \begin{vmatrix} 41{,}90 & 0{,}07 & 0{,}00 & 7{,}77 & 48{,}50 & 0{,}06 & 0{,}00 \\ 54{,}60 & 0{,}13 & 1{,}90 & 2{,}22 & 15{,}80 & 20{,}60 & 1{,}44 \\ 41{,}50 & 0{,}11 & 18{,}00 & 7{,}04 & 18{,}10 & 6{,}70 & 0{,}00 \end{vmatrix}$$

$$\mathbf{A^TA}: \begin{vmatrix} 4168{,}2 & 3072{,}5 & 2671{,}8 \\ 3072{,}5 & 3665{,}8 & 2739{,}7 \\ 2671{,}8 & 2739{,}7 & 2468{,}3 \end{vmatrix}$$

$$\mathbf{(A^TA)^{-1}}: \begin{vmatrix} 0{,}0008 & -1E-04 & -7E-04 \\ -1E-04 & 0{,}0016 & -0{,}002 \\ -7E-04 & -0{,}002 & 0{,}003 \end{vmatrix}$$

$$\mathbf{(A^TA)^{-1}A^T}: \begin{vmatrix} -0{,}004 & -4E-05 & -0{,}013 & 0{,}0009 & 0{,}0236 & -0{,}008 & -2E-04 \\ 0{,}0143 & 2E-05 & -0{,}027 & -0{,}009 & -0{,}011 & 0{,}0224 & 0{,}0023 \\ 0{,}0048 & 7E-05 & 0{,}051 & 0{,}012 & -0{,}006 & -0{,}014 & -0{,}002 \end{vmatrix}$$

Vektor minerálů:

$$(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\,\mathbf{x}: \quad \begin{vmatrix} 0{,}210 \\ 0{,}267 \\ 0{,}442 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 22{,}849 \\ 29{,}023 \\ 48{,}128 \end{vmatrix} \begin{array}{l} \textbf{ol} \\ \textbf{cpx} \\ \textbf{gar} \end{array}$$

suma 0,919 100 %

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

$$\begin{vmatrix}
0{,}8304 & 0{,}0021 & 0{,}114 & 0{,}038 & 0{,}1401 & 0{,}3262 & 0{,}0206 \\
0{,}0021 & 7E\text{-}06 & 0{,}0012 & 0{,}0002 & -4E\text{-}04 & 0{,}0008 & 3E\text{-}05 \\
0{,}114 & 0{,}0012 & 0{,}868 & 0{,}1988 & -0{,}13 & -0{,}209 & -0{,}038 \\
0{,}038 & 0{,}0002 & 0{,}1988 & 0{,}0711 & 0{,}1161 & -0{,}107 & -0{,}013 \\
0{,}1401 & -4E\text{-}04 & -0{,}13 & 0{,}1161 & 0{,}8607 & -0{,}264 & -0{,}016 \\
0{,}3262 & 0{,}0008 & -0{,}209 & -0{,}107 & -0{,}264 & 0{,}3664 & 0{,}0322 \\
0{,}0206 & 3E\text{-}05 & -0{,}038 & -0{,}013 & -0{,}016 & 0{,}0322 & 0{,}0034
\end{vmatrix}$$

Vektor teoretického složení:

$$\mathbf{Px} = \begin{vmatrix} 41{,}74 \\ 0{,}10 \\ 8{,}47 \\ 5{,}34 \\ 22{,}41 \\ 8{,}47 \\ 0{,}38 \end{vmatrix}$$

Příklad:

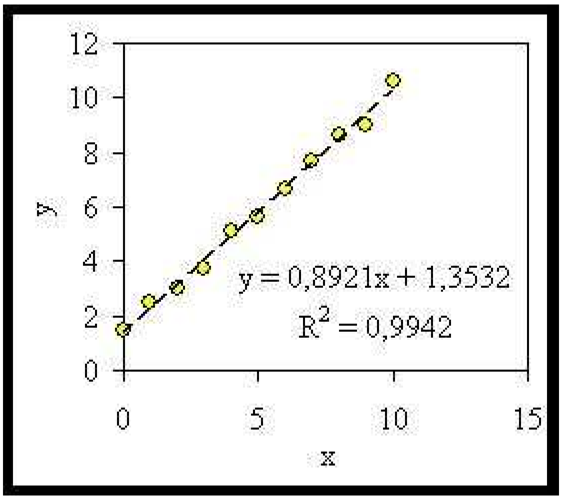
Regrese dat

Metoda nejmenších čtverců jako ortogonální projekce datového vektoru do sloupcového vektorového prostoru parametrů (matice A)

regrese: $\mathbf{y} = a_1\mathbf{x} + a_2$

Data:

x	y
0	1,46
1	2,48
2	2,99
3	3,72
4	5,13
5	5,63
6	6,65
7	7,66
8	8,6
9	9,03
10	10,6



$$\begin{array}{ccc} \mathbf{y} & & \mathbf{A} & \mathbf{a} \\ \begin{bmatrix}1{,}46\\2{,}48\\2{,}99\\3{,}72\\5{,}13\\5{,}63\\6{,}65\\7{,}66\\8{,}60\\9{,}03\\10{,}6\end{bmatrix} & = & \begin{bmatrix}0&1\\1&1\\2&1\\3&1\\4&1\\5&1\\6&1\\7&1\\8&1\\9&1\\10&1\end{bmatrix} & \begin{bmatrix}\mathbf{a}_1\\\mathbf{a}_2\end{bmatrix}\end{array}$$

projekce do vektoru parametrů **a:**

$\mathbf{a} = (\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T\,\mathbf{y}$

$\mathbf{P} = \mathbf{A}(\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^T$ projekce dat $\mathbf{y} = \mathbf{P}\underline{\mathbf{y}}$

$$\mathbf{A}^T = \begin{bmatrix}0&1&2&3&4&5&6&7&8&9&10\\1&1&1&1&1&1&1&1&1&1&1\end{bmatrix} \qquad \mathbf{A}^T\mathbf{A} = \begin{bmatrix}385&55\\55&11\end{bmatrix} \qquad (\mathbf{A}^T\mathbf{A})^{-1} = \begin{bmatrix}0{,}009&-0{,}05\\-0{,}05&0{,}318\end{bmatrix}$$

$$\left(\mathbf{A}^{T}\mathbf{A}\right)^{-1}\mathbf{A}^{T}=\begin{bmatrix}-0{,}045 & -0{,}036 & -0{,}027 & -0{,}018 & -0{,}009 & 0{,}000 & 0{,}009 & 0{,}018 & 0{,}027 & 0{,}036 & 0{,}045\\ 0{,}318 & 0{,}273 & 0{,}227 & 0{,}182 & 0{,}136 & 0{,}091 & 0{,}045 & 0{,}000 & -0{,}045 & -0{,}091 & -0{,}136\end{bmatrix}$$

$$\mathbf{a}=\left(\mathbf{A}^{T}\mathbf{A}\right)^{-1}\mathbf{A}^{T}\mathbf{y}=\begin{bmatrix}0{,}8921\\ 1{,}3532\end{bmatrix}$$ hledané parametry rovnice - výsledná regrese

$\mathbf{P} = \mathbf{A}(\mathbf{A}^{T}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{T} =$

0,318	0,273	0,227	0,182	0,136	0,091	0,045	0,000	-0,045	-0,091	-0,136
0,273	0,236	0,200	0,164	0,127	0,091	0,055	0,018	-0,018	-0,055	-0,091
0,227	0,200	0,173	0,145	0,118	0,091	0,064	0,036	0,009	-0,018	-0,045
0,182	0,164	0,145	0,127	0,109	0,091	0,073	0,055	0,036	0,018	0,000
0,136	0,127	0,118	0,109	0,100	0,091	0,082	0,073	0,064	0,055	0,045
0,091	0,091	0,091	0,091	0,091	0,091	0,091	0,091	0,091	0,091	0,091
0,045	0,055	0,064	0,073	0,082	0,091	0,100	0,109	0,118	0,127	0,136
0,000	0,018	0,036	0,055	0,073	0,091	0,109	0,127	0,145	0,164	0,182
-0,045	-0,018	0,009	0,036	0,064	0,091	0,118	0,145	0,173	0,200	0,227
-0,091	-0,055	-0,018	0,018	0,055	0,091	0,127	0,164	0,200	0,236	0,273
-0,136	-0,091	-0,045	0,000	0,045	0,091	0,136	0,182	0,227	0,273	0,318

$\mathbf{y} = \mathbf{P}\,\underline{\mathbf{y}} =$

$$\begin{vmatrix}1{,}353\\ 2{,}245\\ 3{,}137\\ 4{,}029\\ 4{,}922\\ 5{,}814\\ 6{,}706\\ 7{,}598\\ 8{,}490\\ 9{,}382\\ 10{,}274\end{vmatrix}$$ teoretické hodnoty