Několik poznámek na téma lineární algebry pro studenty fyzikální chemie

Jiří Kolafa

1 Vektory

1.1 Vektorový prostor

Vektor je často zaveden jako n-tice čísel, $(v_1, \ldots, v_n)$, $v_i \in \mathbb{R}$ (pro reálný vektorový prostor); případně $v_i \in \mathbb{C}$ (komplexní vektorový prostor; další možná zobecnění zde nebudeme uvažovat).

Tuto představu lze zobecnit (zvláště na $n = \infty$) pomocí pojmu vektorového prostoru. **Vektorový prostor** (též lineární prostor) je definován následujícími axiomy (u, v, w značí prvky vektorového prostoru a $a, b \in \mathbb{R}$ nebo $\mathbb{C}$):

$$\begin{aligned}
u + (v + w) &= (u + v) + w \\
u + v &= v + u \\
\exists \text{ nulový vektor } 0 : v + 0 &= v \\
\exists \text{ opačný vektor } -v : v + (-v) &= 0 \\
a(bv) &= (ab)v \\
1v &= v \\
a(u + v) &= au + av \\
(a + b)v &= av + bv
\end{aligned}$$

Vektory značíme různě podle oboru použití: v, $\boldsymbol{v}$, $\vec{v}$ (zvláště reálné vektory ve 3D), $\underline{v}$, $|v\rangle$ („ket“ v kvantové teorii), v_i (formálně složka vektoru, ale lze ji někdy identifikovat s celým vektorem).

Množina vektorů $v^{(i)}$, $i = 1..m$, je **lineárně závislá**, jestliže existuje taková lineární kombinace s alespoň jedním $a_i \neq 0$, která je nulová:

$$\sum a_i v^{(i)} = 0$$

Lineárně nezávislá množina vektorů taková, že pomocí jejích lineárních kombinací lze vyjádřit libovolný vektor (z daného lineární prostoru), se nazývá **báze**. Dá se ukázat, že takové vyjádření je jednoznačné. Vektor je pak někdy identifikován se svými souřadnicemi v_i ve vybrané bázi, $v = \sum v_i b^{(i)}$.

Příklady:

1. Jsou následující vektory v $\mathbb{R}^3$ lineárně závislé?

$$(1, 1, 1), (1, -1, 1), (1, 0, -1)$$

2. Jsou následující vektory v $\mathbb{C}^2$ lineárně závislé?

$$(i, 1), (1 + i, 1 - i)$$

3. Příklady v Maple viz `mmpc1.mw`

1.2 Skalární součin

Nás zajímají především vektorové prostory se skalárním (též vnitřním) součinem. V $\mathbb{R}^n$ se skalární součin definuje vztahem $\vec{u}\cdot\vec{v} = \sum u_i v_i$, v obecném lineárním prostoru však nemáme žádnou speciální bázi a tedy ani žádné souřadnice. **Skalární součin** (u, v) se obecně definuje jako jakékoliv zobrazení dvojic u, v do $\mathbb{R}$ nebo $\mathbb{C}$ takové, že platí axiomy

$$
\begin{aligned}
(u,v) &= (v,u)^* \quad (^* \text{ značí komplexní sdružení}) \\
(au,v) &= a^*(u,v) \quad (\text{ve fyzice}) \\
&= a(u,v) \quad (\text{v matematice}) \\
(u+v,w) &= (u,w)+(v,w) \\
(u,u) &\geq 0 \\
(u,u)=0 &\Rightarrow u=0 \text{ (nulový vektor; též } \vec{0},\ \mathbf{0} \text{ aj.)}
\end{aligned}
$$

Skalární součin se značí $u^{\mathrm{T}}v$, $u^{\mathrm{T}}\cdot v$, $u^{\dagger}v$, (u,v), $\langle u,v\rangle$, $\vec{u}\cdot\vec{v}$, $\boldsymbol{u}\cdot\boldsymbol{v}$, $\langle u|v\rangle$ (bra-ketová symbolika oblíbená v kvantové teorii), $u^i v_i$ (v tenzorovém počtu), případně obdobně jako lineární forma (viz níže).

Ve výrazech $^{\mathrm{T}}$ značí transpozici: jestliže se v interpretuje jako sloupec čísel (sloupcový vektor), je v^{T} řádkový vektor a násobíme „řádek sloupcem“. V komplexních prostorech je † transpozice a komplexní sdružení. Dále „$\cdot$“ v některých zápisech a „$|$“ v bra-ketové notaci značí součet přes jistou dvojici indexů, ve výrazu $u^i v_i$ se sčítá přes jeden index nahoře a jeden dole (Einsteinova sumační konvence).

Vektory u, v, pro které platí $(u,v)=0$, nazýváme **kolmé** neboli ortogonální.

Výraz $(u,u)^{1/2}$ se nazývá **norma**[1] a značí se $|u|$ nebo $||u||$.

Schwartzova nerovnost (též Cauchyova–Schwartzova) praví, že

$$|a||b| \geq |\langle a|b\rangle|$$

Důkaz (pro nenulové a, b – nulový případ je triviální):[2]

$$b_\perp = b - \frac{\langle a|b\rangle}{a^2}a \quad \Rightarrow \quad \langle a|b_\perp\rangle = 0$$

Vektor $b_\perp$ je tedy kolmý k a. Vektor b máme tedy vyjádřen pomocí součtu kolmých vektorů:

$$b = \frac{\langle a|b\rangle}{a^2}a + b_\perp$$

Podle Pythagorovy věty[3]

$$b^2 = \left(\frac{|\langle a|b\rangle|}{a^2}\right)^2 a^2 + b_\perp^2 \geq \left(\frac{|\langle a|b\rangle|}{a^2}\right)^2 a^2 = \frac{|\langle a|b\rangle|^2}{a^2}$$

$$a^2 b^2 \geq |\langle a|b\rangle|^2$$

[1] V Hilbertově prostoru – existují lineární prostory s normou, ale bez skalárního součinu

[2] Značíme $a^2 \equiv |a^2| = \langle a|a\rangle$

[3] V $\mathbb{C}$ musíme být opatrní, protože $\langle b|a\rangle^* = \langle a|b\rangle$; speciálně $|\langle a|b\rangle a|^2 = \langle\langle a|b\rangle^* a|\langle a|b\rangle a\rangle = \langle\langle b|a\rangle a|\langle a|b\rangle a\rangle = |\langle a|b\rangle|^2 a^2$

což jsme měli dokázati. Triviálním důsledkem je trojúhelníková nerovnost,

$$|a+b| < |a| + |b| \quad \text{neboli} \quad |x-z| < |x-y| + |y-z|$$

To znamená, že $|a-b|$ je metrika.

Hilbertův prostor je vektorový prostor se skalárním součinem, který je tzv. úplný (každá Cauchyovská posloupnost[4] v metrice dané (u,u) konverguje) a obvykle ještě separabilní (prostor obsahuje spočetnou hustou podmnožinu). Každý konečný vektorový prostor je Hilbertův. Výše uvedené podmínky vágně řečeno znamenají, že nejsou problémy s rozšířením konečných sum na nekonečné, pokud uvažujeme nekonečnědimenzionální prostory.

Příklad. Práce je skalárním součinem síly a dráhy: $W = \vec{F} \cdot \vec{s}$.

Příklad. Vlnová funkce je vektor komplexního Hilbertova prostoru; musí platit, že existuje $\int |\psi(\boldsymbol{\tau})|^2 \mathrm{d}\boldsymbol{\tau}$ (integrovatelnost s kvadrátem). Skalární součin je (v braketové notaci)

$$\langle \phi | \psi \rangle = \int \phi(\boldsymbol{\tau})^* \psi(\boldsymbol{\tau}) \mathrm{d}\boldsymbol{\tau}$$

Ve výše uvedeném vzorci je obvykle $\boldsymbol{\tau} \in \mathbb{R}^{3n}$, kde n je počet elektronů, ale pokud uvažujeme spin, pak máme 2^n-tice funkcí argumentu z $\mathbb{R}^{3n}$ a integrace obsahuje sumy přes spinové stavy, což není matematicky konzistentní s integrační notací.

1.3 Ortogonální báze

Ortogonální báze Hilbertova prostoru je báze, jejíž všechny prvky jsou navzájem kolmé, **ortonormální báze** má prvky navíc normalizované, tj.

$$b^{(i)} \cdot b^{(j)} = \delta_{ij}$$

Složky vektoru v v ortonormální bázi vyjádříme zvlášť snadno,

$$v_i = v \cdot b^{(i)} \;\Rightarrow\; v = \sum v_i b^{(i)} = \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}_b$$

Skalární součin dvou vektorů rozvinutých ve stejné ortonormální bázi má dobře známý tvar

$$u \cdot v = \sum u_i^* v_i$$

Máme-li bázi b^i, která není ortogonální, můžeme ji ortogonalizovat a normovat **Gramovým–Schmidtovým procesem**, který napíšeme ve formě algoritmu[5]

$$\begin{aligned}
b^{(1)} &:= b^{(1)}/|b^{(1)}| \\
b^{(2)} &:= b^{(2)} - (b^{(2)} \cdot b^{(1)})b^{(1)},\ b^{(2)} := b^{(2)}/|b^{(2)}| \\
b^{(3)} &:= b^{(3)} - (b^{(3)} \cdot b^{(1)})b^{(1)} - (b^{(3)} \cdot b^{(2)})b^{(2)},\ b^{(3)} := b^{(3)}/|b^{(3)}|
\end{aligned}$$

Pokud v Hilbertově prostoru mluvíme o bázi a souřadnicích vektoru v této bázi, máme na mysli zpravidla ortonormální bázi.

Příklady viz `mmpc1.mw`

[4]Posloupnost $\{u_i\}_{i=1}^{\infty}$ je Cauchyovská, jestliže $\forall d > 0\ \exists n : |v_j - v_i| < d\ \forall i,j > n$

[5]„:=“ je dosazení, algoritmus vykonáváme sekvenčně

1.4 Lineární forma

Lineární forma f přiřazuje vektoru číslo $f(v) \in \mathbb{R}$, případně $f(v) \in \mathbb{C}$. Pro libovolné formy f, g, číslo a a libovolný vektor v musí platit

$$\begin{aligned}(f+g)(v) &= f(v)+g(v) \\ f(av) &= af(v)\end{aligned}$$

Pro konečné n lze formu zapsat jako

$$f(u) = \sum_{i=1}^{n} f_i u_i$$

pro nekonečnědimenzionální prostory mohou být problémy s konvergencí, až na ně je ale v Hilbertově prostoru lineární forma „skoro to samé" jako skalární součin, tedy $f(v) = \sum f_i v_i = (f^*, v)$.

V některém kontextu, zpravidla v Euklidovském prostoru (a v tenzorovém počtu), se pak lineární forma nazývá **kovektor**; je-li vektor interpretován jako sloupec čísel (sloupcový vektor), pak kovektor je řádkový vektor, f^{T} (transponovaný). Např. rovina ve 3D procházející počátkem má rovnici $\vec{n} \cdot \vec{r} = 0$, kde $\vec{n}$ je vektor kolmý k rovině a lze jej interpretovat jako kovektor.

Zápisy skalárního součinu pak lze doplnit o $f(u) = f^{\mathrm{T}} \cdot u = f^{\mathrm{T}} u = f^i u_i$ (Einsteinova sumační konvence = sčítá se přes dvojici indexů nahoře/dole). V komplexních Hilbertových prostorech máme † místo $^{\mathrm{T}}$.

1.5 Maple

V Maple při použití `with(LinearAlgebra)` dává funkce `Vector()`, např. `Vector([1,2,3])`, sloupcový vektor a při násobení matice zprava (operátor „."[6]) vektorem vznikne opět sloupcový vektor. Kovektor je řádkový vektor, ale operátor „." nekonzistentně akceptuje jak dva sloupcové vektory (pak je výsledek skalární součin) tak kovektor.vektor (lineární forma), operátor „." se rovněž používá k násobení matic (kde se řádky a sloupce rozlišují), ale již nelze násobit matici kovektorem zprava, tj. používá se pravidlo „řádky násobíme sloupci".

Transpozice (vektoru nebo matice) je `^+`, hermitovsky sdružená matice je `^*`.

2 Čtvercové matice

Čtvercová matice $n \times n$, např.

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix}$$

může reprezentovat:

[6] „." = tečka, nutno rozlišovat od „·", což je * ve 2D zobrazení

- matici koeficientů soustavy n lineárních rovnic o n neznámých:

$$\sum_j A_{ij}x_j = b_i \quad \text{nebo} \quad A \cdot x = b \quad \text{nebo} \quad Ax = b \quad \text{nebo} \quad |\hat{A}|x\rangle = |b\rangle$$

- lineární zobrazení $\mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ resp. $\mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n$:

$$x_i \to \sum_j A_{ij}x_j \quad \text{nebo} \quad x \to A \cdot x \quad \text{nebo} \quad x \to Ax \quad \text{nebo} \quad |x\rangle \to |\hat{A}|x\rangle$$

- matici koeficientů kvadratické formy:

$$x \to \sum_{ij} x_i A_{ij} x_j \quad \text{nebo} \quad x \to x^{\mathrm{T}} \cdot A \cdot x \quad \text{nebo} \quad x \to x^{\mathrm{T}} A x \quad \text{nebo} \quad |x\rangle \to \langle x|\hat{A}|x\rangle$$

- kvadratický tenzor, např. tenzor tlaku (napětí) P.

Matice se občas značí tučně $\boldsymbol{A}$, příp. $\overset{\leftrightarrow}{A}$ (tenzor), jako operátor se stříškou ($\hat{A}$). Co se týče konvence násobení matice vektorem (= aplikace lineárního operátoru), „·“ či „|“ se často vynechává. Je však (pokud nechceme vše vypisovat pomocí sum) potřeba rozlišovat řádky a sloupce.

V nekonečně rozměrných prostorech jsou „matice“ nekonečné a spíš se mluví o lineárních operátorech.

Pokud soustava $A \cdot x = b$ má řešení $\forall b$, říkáme, že A je **regulární** a řešení můžeme napsat ve tvaru

$$x = A^{-1} \cdot b$$

kde A^{-1} je **inverzní matice**, $A \cdot A^{-1} = A^{-1} \cdot A = \delta$, kde $\delta = \mathrm{diag}(1, 1, \ldots)$ je **jednotková matice** (identita, Kroneckerovo delta); jiné značení je $\mathbb{1}$, $\overset{\leftrightarrow}{1}$, $\hat{1}$ nebo jen jako číslo 1, dále I, E, atd.

Determinant matice A je číslo definované součtem přes všech $n!$ permutací p indexů $\{1, 2, \ldots, n\}$:

$$\det A = \sum_p \mathrm{sign}(p) \prod A_{i,p(i)}$$

kde $\mathrm{sign}(p) = (-1)^{\text{počet transpozic } p}$. Jiné značení je $\mathrm{Det}\, A$, $|A|$, $||A||$ (pozor na záměnu s normou matice).

Regulární matice má $\det A \neq 0$. Platí

$$\det(A \cdot B) = \det(A)\det(B), \quad \det(A^{-1}) = \frac{1}{\det A} \text{ (pro regulární matici } A)$$

Determinant diagonální nebo trojúhelníkové matice je roven součinu prvků na diagonále.

Existuje mnoho numerických metod pro inverzi matice (založených např. na LU rozkladu), „na papíře“ je nejjednodušší použít buď Crammerovo pravidlo (do 3×3) nebo Gaussovu eliminaci: Eliminační operace provádíme synchronně na dané matici a na jednotkové matici, je to ekvivalentní násobením zleva jistou maticí; nakonec znásobíme zleva diagonální maticí, abychom dostali vlevo δ.

Příklady. Vypočtěte $\mathrm{sign}(2, 3, 1)$ a $\mathrm{sign}(n, n-1, n-2, \ldots, 2, 1)$.

Ortogonální[7] (v $\mathbb{R}$) nebo **unitární** (v $\mathbb{C}$) matice má všechny řádky i sloupce normalizované, různé řádkové i sloupcové vektory jsou kolmé:

$$\sum_j U^*_{ij} U_{jk} = \delta_{ik} \quad \text{nebo} \quad U^\dagger \cdot U = \delta$$

Tato matice je regulární, platí $U^{-1} = U^\dagger$. Determinant ortogonální matice je $+1$ nebo -1, pro unitární matici platí $|\det U| = 1$. Lineární zobrazení $x \to U \cdot x$ v $\mathbb{R}^n$ představuje rotaci v n-dimenzionálním prostoru okolo počátku (pro $\det U = 1$), resp. rotaci a zrcadlení (pro $\det U = -1$).

Příklady viz `mmpc1.mw`

2.1 Vlastní vektory a čísla matice

Vlastní vektor a **vlastní číslo** matice A jsou definované vztahem

$$A \cdot v = \lambda v \quad \text{neboli} \quad (A - \lambda\delta) \cdot v = 0$$

Druhou rovnic lze splnit (pro nenulové v), pouze když matice $A - \lambda\delta$ je singulární, tedy

$$\det(A - \lambda\delta) = 0 \tag{1}$$

To je algebraická rovnice n-tého stupně, která má n kořenů (vč. násobnosti).

Nejčastěji se setkáte s reálnými **symetrickými** ($A = A^{\mathrm{T}}$ neboli $A_{ij} = A_{ji}$) resp. komplexními **Hermitovskými** maticemi ($A^\dagger = A$ neboli $A^*_{ij} = A_{ji}$); ovšem každá symetrická matice je také Hermitovská. Např. matice (vážených) druhých derivací potenciálu pro výpočet fundamentálních vibrací je symetrická, operátory odpovídající pozorovatelným v kvantové teorii jsou často[8] Hermitovské.

Vlastní čísla Hermitovské matice jsou reálná . Dokážeme to snadno tak, že rovnici $A \cdot v = \lambda v$ resp. $|A|v\rangle = \lambda|v\rangle$ znásobíme zleva $v^{*\mathrm{T}} = v^\dagger = \langle v|$:

$$\begin{aligned} v^\dagger \cdot A \cdot v &= \underline{\sum_{ij} v^*_i A_{ij} v_j} = \sum_i v^*_i \lambda v_i = \lambda |v|^2 \\ &= \sum_{ij} v^*_i A^*_{ji} v_j = \sum_{ij} v_j A^*_{ji} v^*_i = \left(\underline{\sum_{ij} v^*_j A_{ji} v_i} \right)^* = \lambda^* |v|^2 \end{aligned}$$

Tedy $\lambda = \lambda^* \Rightarrow \lambda \in \mathbb{R}$.

Vlastní vektory odpovídající různým vlastním číslům Hermitovské matice jsou kolmé. Důkaz provedeme v bra-ket notaci; máte-li pochyby, rozepište si výrazy pomocí sum. Zprava:

$$\langle v^{(2)}|A|v^{(1)}\rangle = \langle v^{(2)}|\lambda_1 v^{(1)}\rangle = \lambda_1 \langle v^{(2)}|v^{(1)}\rangle$$

a zleva

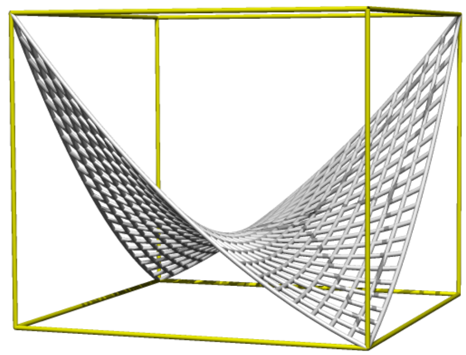
$$\langle v^{(2)}|A|v^{(1)}\rangle = \langle v^{(2)}\lambda_2|v^{(1)}\rangle = \lambda_2^* \langle v^{(2)}|v^{(1)}\rangle$$

což může zároveň platit (pro $\lambda_1 \neq \lambda_2$), pouze když $\langle v^{(1)}|v^{(2)}\rangle = 0$. Pokud je k vlastních čísel stejných (degenerovaných), tvoří vlastní vektory k-dimenzionální podprostor, ve kterém

[7] Logičtější termín ortonormální se nepoužívá

[8] V nekonečnědimenzionálních prostorech musím ještě zajistit konvergenci.

Obrázek 1: Kvadratická forma $x^2 - 4xy + y^2$



můžeme vybrat ortonormální bázi z k vektorů. Symetrická nebo Hermitovská matice tedy generuje ortogonální **bázi** z n vektorů $v^{(i)}$. Můžeme ji ortonormalizovat (místo $v^{(1)}$ vezmeme $v^{(1)}/|v^{(1)}|$, což je také vlastní vektor).

Podobné tvrzení (zvané spektrální teorém) platí pro tzv. kompaktní operátory v ∞-dimenzionálním Hilbertově prostoru. Takový operátor musí být ještě o něco „lepší“ než omezený (tj. zobrazující omezenou množinu na omezenou množinu – neprodukující nekonečna), musí omezenou množinu ještě trochu víc „splácnout“. Lze si jej zhruba představit jako limitu posloupnosti matic se zvětšující se velikostí s tím, že řádky a sloupce přidané k dalšímu členu posloupnosti jsou vždy „menší a menší“.

Pro úplnost jedna z ekvivalentních definic: Omezený operátor (v Hilbertově prostoru) je kompaktní, jestliže z obrazů libovolné posloupnosti vektorů v 1-kouli (tj. $\{v_i\}_{i=1}^{\infty}$, $|v_i| < 1$) lze vybrat Cauchyovskou (tj. zde konvergentní) posloupnost. (Z $\{v_i\}_{i=1}^{\infty}$ v ∞-dimenzionálním prostoru obecně takovou posloupnost vybrat nelze, takže identita není kompaktním operátorem).

Příklady viz `mmpc2.mw`

Omezme se nyní na reálné symetrické matice a sestavme matici U ze sloupcových normalizovaných vektorů $v^{(j)}$, tedy $U_{ij} = v_i^{(j)}$. Protože $v^{(j)} \cdot v^{(k)} = \delta_{jk}$, platí (násobíme řádky transponované matice ($\equiv$ sloupce) sloupci matice) $U^{\mathrm{T}} \cdot U = \delta$. Matice U je tedy orthogonální. Podmínku pro vlastní vektory napíšeme maticově

$$v^{(i)\mathrm{T}} \cdot A \cdot v^{(j)} = v^{(i)\mathrm{T}} \cdot \lambda_j v^{(j)} = \lambda_j \delta_{ij} \quad \Rightarrow \quad U^{\mathrm{T}} \cdot A \cdot U = \Lambda$$

kde $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \ldots)$, $\Lambda_{ij} = \lambda_j \delta_{ij} = \lambda_i \delta_{ij}$ je diagonální matice s vlastními čísly na diagonále. Transformovaná kvadratická forma odpovídající matici A je

$$x^{\mathrm{T}} \cdot A \cdot x = u^{\mathrm{T}} \cdot U^{\mathrm{T}} \cdot A \cdot U \cdot u = u^{\mathrm{T}} \cdot \Lambda \cdot u = \sum_i \lambda_i u_i^2$$

kde

$$x = U \cdot u \quad \text{nebo} \quad u = U^{-1} \cdot x$$

V $\mathbb{C}$ jen nahradíme operátor transpozice $^{\mathrm{T}}$ samosdružením †. Tedy ortogonální resp. unitární transformace U převádí symetrickou resp. Hermitovskou) matici na diagonální. Termín diagonalizace matice je tedy prakticky to samé co výpočet vlastních čísel a vektorů.

Příklad. Kvadratická forma

$$x^2 - 4xy + y^2$$

má matici

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

Charakteristická rovnice je

$$\det \begin{pmatrix} 1-\lambda & -2 \\ -2 & 1-\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - 2\lambda - 3$$

s kořeny $\lambda_1 = -1, \lambda_2 = 3$. Vlastní vektory získáme řešením rovnic

$$Av_1 = -v_1 \quad \Rightarrow \quad v_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$Av_2 = 3v_2 \quad \Rightarrow \quad v_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Po normalizaci

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

To je matice rotace o 45°.

■

Signatura kvadratické formy resp. symetrické matice je daná počtem kladných, záporných a nulových vlastních čísel v diagonálním tvaru (na pořadí nezáleží). Např. signatura formy z příkladu je $(+,-)$ resp. $(n_+, n_-, n_0) = (1, -1, 0)$.

Signaturu kvadratické formy lze použít k stanovení typu extrému funkce. Pro funkce $f(x_i)$ se spojitými druhými derivacemi je podmínka extrému

$$\frac{\partial f}{\partial x_i} = 0, \; i = 1, \ldots, n$$

Je-li tato podmínka splněna pro nějaké x^0, je Taylorův rozvoj funkce do 2. řádu v minimu

$$f(x) = f(x^0) + \frac{1}{2}\sum_{ij}(x_i - x_i^0)A_{ij}(x_j - x_j^0), \quad A_{ij} = \frac{\partial f^2}{\partial x_i x_j}_{|x_i = x_i^0, x_j = x_j^0}$$

Je-li signatura matice A rovna $(n, 0, 0)$, tj. samé $+$, pak matice resp. forma je pozitivně definitní a funkce f má v bodě x_0 lokální minimum. Je-li signatura matice A rovna $(0, n, 0)$, tj. samé $-$, pak matice je negativně definitní a funkce f má v bodě x_0 lokální maximum. Obsahuje-li signatura signatura $+$ i $-$, je matice indefinitní a funkce f má v x_0 sedlový bod.

Jiné kritérium typu extrému je **Sylvestrovo**. Počítáme subdeterminanty $\det |A_{ij}|_{i,j=1}$, $\det |A_{ij}|_{i,j=1..2}$, $\det |A_{ij}|_{i,j=1..3}$. Jsou-li všechny kladné, je v bodě x_0 minimum; střídají-li se znaménka v pořadí $-, +, -, \ldots$, je v bodě x_0 maximum.

2.2 Aplikace – fundamentální vibrace molekuly

Nechť PES (plocha potenciální energie, Potential Energy Surface) ve tvaru $U_{\text{pot}}(\boldsymbol{\tau})$, $\boldsymbol{\tau} = \{\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N, \}$, nabývá minima pro $\boldsymbol{\tau}_{\text{min}}$, výchylku od minima označme $\Delta\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau} - \boldsymbol{\tau}_{\text{min}}$.

Rozvineme PES do 2. řádu v minimu:

$$U_{\text{pot}}(\boldsymbol{\tau}) = U_{\text{pot}}(\boldsymbol{\tau}_{\text{min}}) + \sum_i \frac{\partial U_{\text{pot}}}{\partial \vec{r}_i}(\boldsymbol{\tau}_{\text{min}}) \cdot \Delta\vec{r}_i + \frac{1}{2}\sum_{i,j} \Delta\vec{r}_i \cdot \frac{\partial^2 U_{\text{pot}}}{\partial \vec{r}_i \partial \vec{r}_j}(\boldsymbol{\tau}) \cdot \Delta\vec{r}_j$$

Newtonovy pohybové rovnice jsou

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i \equiv m_i \frac{\partial^2 \vec{r}_i}{\partial t^2} = \vec{f}_j = -\sum_j A_{ij} \Delta\vec{r}_j$$

kde

$$A_{ij} = \frac{\partial^2 U_{\text{pot}}}{\partial \vec{r}_i \partial \vec{r}_j}(\boldsymbol{\tau}_{\text{min}}), \quad \Delta\vec{r}_i = \vec{r}_i - \vec{r}_{i,\text{min}}$$

V maticovém zápisu (vektor má $3N$ složek a matice jsou $3N \times 3N$) přejdou Newtonovy rovnice na

$$\boldsymbol{M} \cdot \Delta\ddot{\boldsymbol{\tau}} = -\boldsymbol{A} \cdot \Delta\boldsymbol{\tau}, \text{ kde } \boldsymbol{M} = \operatorname{diag}(m_1, m_1, m_1, \ldots, m_N, m_N, m_N)$$

Hledáme transformaci (bázi) ve tvaru

$$\Delta\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{M}^{-1/2} \cdot \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{u}$$

kde $\boldsymbol{U}$ je ortogonální matice. Po dosazení:

$$\boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{M}^{-1/2} \cdot \boldsymbol{U} \cdot \ddot{\boldsymbol{u}} = -\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{M}^{-1/2} \cdot \boldsymbol{U} \cdot \boldsymbol{u}$$

Zleva znásobíme $\boldsymbol{M}^{-1/2} \cdot \boldsymbol{U}^{-1} \cdot$:

$$\ddot{\boldsymbol{u}} = -\boldsymbol{\Lambda} \cdot \boldsymbol{u}, \quad \boldsymbol{\Lambda} = \boldsymbol{U}^{-1} \cdot \boldsymbol{M}^{-1/2} \cdot \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{M}^{-1/2} \cdot \boldsymbol{U}$$

Najdeme matici $\boldsymbol{U}$ tak, že $\boldsymbol{\Lambda} = \boldsymbol{U}^{-1} \cdot \boldsymbol{M}^{-1/2} \cdot \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{M}^{-1/2} \cdot \boldsymbol{U}$ je diagonální, to jest diagonalizujeme matici

$$\boldsymbol{A'} = \boldsymbol{M}^{-1/2} \cdot \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{M}^{-1/2}$$

neboli nalezneme její vlastní čísla a vektory. Newtonovy rovnice se nám rozpadnou na $3N$ nezávislých harmonických oscilátorů:

$$\ddot{u}_\alpha = -B_{\alpha\alpha} u_\alpha, \quad \alpha = 1, \ldots, 3N$$

Frekvence jsou

$$\nu_\alpha = \frac{\sqrt{\Lambda_{\alpha\alpha}}}{2\pi}$$

Fundamentální pohyby jsou kolmé, neboť $\boldsymbol{A'}$ je symetrická.

Příklad. Dvě částice o hmotnosti m spojené pružinou na přímce

$$U_{\mathrm{pot}} = \frac{K}{2}(x-y)^2 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{A'} = \begin{pmatrix} K/m & -K/m \\ -K/m & K/m \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{B} = \mathrm{diag}(2K/m, 0)$$

Frekvence jsou

$$\nu_1 = \frac{\sqrt{2K/m}}{2\pi} \text{ (sym. stretch)}, \quad \nu_2 = 0 \text{ (translační pohyb)}$$

Vlastní vektory (nenormalizované) jsou:

$$\boldsymbol{\psi}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\psi}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow\leftarrow \qquad\qquad \rightarrow\rightarrow$$

2.3 Aplikace – Soustava homogenních lineárních diferenciálních rovnic 1. řádu

je soustava

$$\left.\begin{array}{rcl} \dot{x}_1 & = & A_{11}x_1 + A_{12}x_2 + \cdots + A_{1n}x_n \\ \vdots & & \\ \dot{x}_n & = & A_{n1}x_1 + A_{n2}x_2 + \cdots + A_{nn}x_n \end{array}\right\} \quad \dot{x} = A \cdot x \tag{2}$$

kde tečka značí derivaci (např. časovou) a x je vektor n funkcí proměnné t. Snadno ověříme, že jedno z n lineárně nezávislých řešení je

$$x = \mathrm{e}^{\lambda t} v,$$

kde v je vlastní vektor matice A:

$$A \cdot v = \lambda v$$

Pro reálné koeficienty A_{ij} jsou vlastní čísla λ buď reálná nebo se vyskytují v komplexně sdružených párech. Jsou-li všechna vlastní čísla různá (nedegenerovaná), máme n lineárně nezávislých řešení a obecné řešení lze zapsat pomocí n konstant jako

$$x = \sum_{\lambda} C_\lambda \mathrm{e}^{\lambda t} v_\lambda \tag{3}$$

kde neznámé hodnoty C_λ se určí z počátečních podmínek, které jsou typicky ve tvaru (vektorově) $x(0) = x_0$.

Je-li vlastní číslo λ k-krát degenerované, pak příslušných k členů z (3) nahradíme součtem

$$\sum_{i=1}^{k} C_k t^{k-1} \mathrm{e}^{\lambda t} v_{\lambda,k}$$

kde $v_{\lambda,k}$ je libovolná báze podprostoru příslušného k číslu λ.

Soustava (2) je ekvivalentní jedné homogenní lineární diferenciální rovnici n-tého řádu, její charakteristická rovnice (algebraická rovnice n-tého stupně) je ekvivalentní rovnici (1).

Příklad.

$$\dot{x} = y,\ \dot{y} = -x$$

matice soustavy je

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \lambda = \pm i$$

z čehož spočteme vlastní čísla a vektory:

$$v_i = \begin{pmatrix} i \\ 1 \end{pmatrix}, v_{-i} = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$$

Obecné řešení je

$$C_i v_i \mathrm{e}^{it} + C_{-i} v_{-i} \mathrm{e}^{-it}$$

neboli po složkách

$$\begin{aligned} x &= iC_i\mathrm{e}^{it} + C_{-i}\mathrm{e}^{-it} \\ y &= C_i\mathrm{e}^{it} + iC_{-i}\mathrm{e}^{-it} \end{aligned}$$

Pro počáteční podmínky $x(0) = 1, y(0) = 0$ najdeme $iC_i = C_{-i} = 1/2$, načež

$$x = \cos(t),\ y = -\sin(t)$$

$$\ddot{x} = -x$$

což je rovnice pro harmonické kmity.

Příklad viz `mmpc2.mw`