VII. Lineáris terek, lineáris algebra

A lineáris terek és a lineáris algebra különösen a kvantummechanikával kapcsolatos fizikai-kémiai problémák megoldása során kiemelten fontos, de a kémia sok területén kerülnek fogalmai és technikái alkalmazásra.

<u>*Fogalmak*</u>

(a) A **lineáris vektortereket** (*linear vector space*, LVS) olyan $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \ldots \in S$ vektorok alkotják, melyekre fennáll, hogy amennyiben $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in S$, úgy bármely $\alpha\mathbf{u} + \beta\mathbf{v}$ lineárkombináció is eleme *S*-nek. **Valós LVS**-ben α és β valós számok, **komplex LVS**-ben α és β komplex számok is lehetnek. Néhány példa LVS-ekre: (1) a valós számok halmaza, (2) a komplex számok halmaza, (3) a háromdimenziós (3D) Euklideszi tér vektorai.

(b) Egy lineáris vektortér egy nem-üres részhalmazát **lineáris altérnek** (*linear subspace*) nevezzük az LVS-ben, amennyiben maga is vektortér az LVS-beli műveletekre nézve. A lineáris altér a teljes LVS-t lényegileg két részre osztja, az egyik maga az altér, a másik annak kiegészítő tere.

(c) A LVS-ek egy fontos tulajdonsága, hogy esetükben belső (skaláris) és külső (vektoriális) szorzatokat lehet definiálni (ekkor speciális vektorterekről beszélünk). Két vektor, **u** és **v**, **belső szorzatának** (skalárszorzatának) jele (**u**,**v**), és az a következő fontos tulajdonságokkal rendelkezik: (1) $(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = (\mathbf{v}, \mathbf{u})^*$, (2) $(\mathbf{u}, \mathbf{u}) \geq 0$, és (3) $(\mathbf{u}, a\mathbf{v}_1 + b\mathbf{v}_2) = a(\mathbf{u}, \mathbf{v}_1) + b(\mathbf{u}, \mathbf{v}_2)$.

(d) A kvantummechanikában a hullámfüggvény négyzetének integrálja a részecske térbeli megtalálásának **valószínűségi sűrűségfüggvényét** adja. Ennek megfelelően csak azon hullámfüggvények lesznek fizikailag elfogadható hullámfüggvények, melyekre fennáll, hogy $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx < +\infty$ (alkalmas normálással biztosítható a valószínűségi értelmezés $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = 1$ összefüggése). Az ezen feltételnek megfelelő függvényeket **négyzetesen integrálható** (röviden L_2) függvényeknek nevezzük ($L_2(a,b)$-vel jelöljük tehát az olyan valós változójú, komplex értékű folytonos függvények összességét, amelyek abszolút értékének négyzetintegrálja adott (a,b) intervallumban véges; megjegyzendő, hogy az integrálási határok a különböző függvényterek esetében változhatnak). Az összes négyzetesen integrálható függvény a lineáris vektorterek tulajdonságaival rendelkezik. Amennyiben a négyzetesen integrálható hullámfüggvények tere lineáris és végtelen dimenziós, a teret szokás röviden **Hilbert-térnek** nevezni.

tulajdonság	valós vektorok	hullámfüggvények
$(\mathbf{u},\mathbf{v})=(\mathbf{v},\mathbf{u})^*$	$\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}=\mathbf{v}\cdot\mathbf{u}$	$\int\phi^*(x)\psi(x)dx=\left[\int\psi^*(x)\phi(x)dx\right]^*$
$(\mathbf{u},\mathbf{u})\geq 0$	$\lVert\mathbf{u}\rVert=(\mathbf{u},\mathbf{u})^{1/2}$	$\int\psi^*(x)\psi(x)dx=\int\lvert\psi(x)\rvert^2dx\geq 0$
$(\mathbf{u},a\mathbf{v}_1+b\mathbf{v}_2)=$ $a(\mathbf{u},\mathbf{v}_1)+b(\mathbf{u},\mathbf{v}_2)$	$\mathbf{u}\cdot(a\mathbf{v}_1+b\mathbf{v}_2)=a\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}_1+b\mathbf{u}\cdot\mathbf{v}_2$	$\int\phi^*(x)[\alpha\psi_1(x)+\beta\psi_2(x)]dx=$ $\alpha\int\phi^*(x)\psi_1(x)dx+\beta\int\phi^*(x)\psi_2(x)dx$

(e) Megjegyezzük, hogy a belső szorzat két valós vektor átfedésének mértéke az Euklideszi térben, míg két hullámfüggvény belső szorzata azok **átfedése** a Hilbert-térben.

(f) A vektorok esetében a **normálás**, $\lVert\mathbf{u}\rVert=(\mathbf{u},\mathbf{u})^{1/2}$, a vektorok hosszáról nyújt felvilágosítást (az **u** vektor **normált**, amennyiben $\lVert\mathbf{u}\rVert=1$), míg hullámfüggvények esetében a kifejezés alakja $\lVert\psi\rVert=\left\{\int_{-\infty}^{+\infty}\lvert\psi(x)\rvert^2dx\right\}^{1/2}$.

(g) Két vektort akkor hívunk **ortogonálisnak** (merőlegesnek), amennyiben (**u**,**v**) = 0, ennek felel meg a hullámfüggvények ortogonalitása, ami $\int_{-\infty}^{+\infty}\phi^*(x)\psi(x)dx=0$ alakban írható fel. Egy vektorhalmaz elemeit akkor nevezzük **ortonormáltnak**, amennyiben minden vektor normált és a vektorok páronként ortogonálisak (merőlegesek) egymásra. Természetesen ennek is megvan a megfelelője a L_2 függvények Hilbert-terében.

(h) A belső szorzat definíciójából következik az ún. **Schwarz-egyenlőtlenség**: $\lvert(\mathbf{u},\mathbf{v})\rvert\leq\lVert\mathbf{u}\rVert\lVert\mathbf{v}\rVert$.

(i) Az alábbi háromszög-egyenlőtlenség, $\lVert\mathbf{u}+\mathbf{v}\rVert\leq\lVert\mathbf{u}\rVert+\lVert\mathbf{v}\rVert$, is teljesül bármely két vektorra.

Mintafeladatok

- Mutassuk meg, hogy a Schwarz-egyenlőtlenség elvezet a Heisenberg-féle határozatlansági relációhoz ($\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2$) a koordináta (*x*) és az impulzus (p_x) kapcsán. (Javaslat: ehhez vizsgáljuk az $I = \int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x}\left[\psi^*(x)\psi(x)\right]dx$ határozott integrált.)

  Megoldás: Parciális integrálás segítségével $I = x|\psi(x)|^2\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty}|\psi(x)|^2\,dx$. Amennyiben a hullámfüggvény normált (ezt feltételezhetjük), a második tag értéke -1, míg az első tag eltűnik, hiszen L^2 függvények esetében $|\psi(x)|^2$ gyorsabban kell hogy 0-hoz tartson a határoknál, mint ahogy *x* nő (illetve csökken). Azaz, $1 = \left|\int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial}{\partial x}[\psi^*\psi]dx\right| = \left|\int_{-\infty}^{+\infty} x \frac{\partial \psi^*}{\partial x}\psi dx + \int_{-\infty}^{+\infty}\psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x}dx\right|$, erre viszont igaz, hogy $\left|\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial x} x\psi dx\right| + \left|\int_{-\infty}^{+\infty}(x\psi)^* \frac{\partial \psi}{\partial x}dx\right| = \left|\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}, x\psi\right)\right| + \left|\left(x\psi, \frac{\partial \psi}{\partial x}\right)\right| \leq 2\left\|\frac{\partial \psi}{\partial x}\right\|\|x\psi\|$. A normákat kiírva $1 \leq 2\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^* \frac{\hat{p}_x^{\,2}}{\hbar^2}\psi dx\right]^{1/2}\left[\int_{-\infty}^{+\infty}\psi^* \hat{x}^2\psi dx\right]^{1/2}$, mely a kvantummechanika szabályai szerint azt jelenti, hogy $\Delta p_x \Delta x \geq \hbar/2$.

- Adjuk meg a $L_2[0,1]$ függvénytérben az $f(x) = 2x + 3x^4$ függvény normáját.

Megoldás: Ezt az alábbi integrál segítségével számíthatjuk:

$$\|f\| = \sqrt{\int_0^1 \left(2x+3x^4\right)\left(2x+3x^4\right)dx} = \sqrt{\int_0^1 \left(4x^2+9x^8+12x^5\right)dx}\text{, azaz}$$

$$\|f\| = \sqrt{4\left[\frac{x^3}{3}\right]_0^1 + 9\left[\frac{x^9}{9}\right]_0^1 + 12\left[\frac{x^6}{6}\right]_0^1} = \sqrt{\frac{4}{3}+1+2} = \sqrt{\frac{13}{3}}.$$

Gyakorló feladatok

- Mutassa meg, hogy $\left(au_1 + bu_2, v\right) = a^*\left(u_1, v\right) + b^*\left(u_2, v\right)$.
- Mutassa meg, hogy tetszőleges LVS-ben teljesül a Schwarz-egyenlőtlenség.
- Elemei-e a $L_2[-\infty,+\infty]$ függvénytérnek az alábbi függvények: (a) $f_1(x) = x^2 - 1/3$, (b) $f_2(x) = e^{-x}$, (c) $f_3(x) = e^{-\frac{1}{2}x^2}$, (d) $f_4(x) = e^{\frac{1}{2}x^2}$?

VII.1 Schmidt-féle (szukcesszív) ortogonalizáció

Legyenek az adott vektorkészlet elemei rendre $|1\rangle, |2\rangle, |3\rangle$,..., a vektorok kezdetben ne legyenek normálva és semmiképpen ne legyenek ortogonálisak egymásra, azaz pl. $\langle 1|2\rangle = S_{12} \neq 0$.

A szukcesszív (szigorúan egymást követő lépéseket tartalmazó) ortogonalizáció egyes lépései a következők:

$|1'\rangle = |1\rangle$

$|2'\rangle = |2\rangle - \frac{S_{1'2}}{S_{1'1'}}|1'\rangle$ (hiszen $S_{1'1'} = 1$ esetében $\langle 1'|2'\rangle = \langle 1'|2\rangle - S_{1'2}\langle 1'|1'\rangle = S_{1'2} - S_{1'2} = 0$)

$|3'\rangle = |3\rangle - \frac{S_{1'3}}{S_{1'1'}}|1'\rangle - \frac{S_{2'3}}{S_{2'2'}}|2'\rangle$

stb., jól látszik a követendő iteratív eljárás.

Mintafeladatok:

- Alkalmazzuk a Schmidt-féle ortogonalizáló eljárást az R^2 2D euklideszi tér alábbi vektoraira: $\mathbf{x}_1{}^T = (1 \quad 2)$ és $\mathbf{x}_2{}^T = (0 \quad 1)$.

  Megoldás: A normált kiindulási vektorok: $\tilde{\mathbf{x}}_1 = \frac{1}{\sqrt{5}}(1 \quad 2)$ és $\tilde{\mathbf{x}}_2 = (0 \quad 1)$.

  Az átfedés: $S_{12} = \langle \tilde{1}|\tilde{2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}2 = \frac{2}{\sqrt{5}} \neq 0$, azaz a (normált) vektorok nem ortogonálisak.

  $|1'\rangle = |\tilde{1}\rangle \Rightarrow x_1' = \frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}$

  $|2'\rangle = |\tilde{2}\rangle - S_{12}|1'\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} - \frac{2}{\sqrt{5}}\frac{1}{\sqrt{5}}\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}0\\1\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}2/5\\4/5\end{pmatrix} = \frac{1}{5}\begin{pmatrix}-2\\1\end{pmatrix}$

  Ellenőrzés: $\langle \mathbf{x}_1'|\mathbf{x}_2'\rangle = \frac{1}{\sqrt{5}}(1 \quad 2)\cdot\frac{1}{5}\begin{pmatrix}-2\\1\end{pmatrix} = \frac{1}{5\sqrt{5}}(-2+2) = 0$.

VII.2 Ortogonális polinomok

Az ortogonális polinomok tagjaira fennáll, hogy $\langle P_n | P_m \rangle = N\delta_{nm}$. A polinomok alakját az alábbi három kritérium határozza meg egyértelműen: (a) az integrálási intervallum, (a,b) rögzítése, (b) a belső szorzat (skalárszorzat), $\langle f | g \rangle = \int_a^b fgw\,\mathrm{d}x$ esetében alkalmazott súlyfüggvény, w, és (c) az alkalmazandó norma, $\langle f | f \rangle$. A különböző ortogonális polinomcsaládok esetében ezen tulajdonságok ismerete alapján azok alakját egyértelműen meg tudjuk adni az $\{1, x, x^2, x^3, \ \ldots\}$ nem-ortogonális, nem-normált polinombázis segítségével.

A Legendre-féle ortogonális polinomok (Legendre-polinomok), $P_n(x)$, esetében $a = -1$, $b = 1$, $w(x) = 1$, $\langle P_n | P_n \rangle = \dfrac{2}{2n+1}$, illetve $\langle P_n | P_m \rangle = \dfrac{2}{2n+1}\delta_{nm}$, ahol $n = 0, 1, 2, \ldots$.

Egyes, a fizikai kémiában gyakran előforduló ortogonális polinomok táblázatos összefoglalása:

Név	Jelölés	Intervallum	Súlyfüggvény	Norma / δ_{nm}
Legendre	$P_n(x)$	$[-1,+1]$	1	$\dfrac{2}{2n+1}$
Csebisev (elsőfajú)	$T_n(x)$	$[-1,+1]$	$(1-x^2)^{-1/2}$	$\begin{cases} \pi/2, & n \neq 0 \\ \pi, & n = 0 \end{cases}$
Laguerre	$L_n(x)$	$[0,+\infty)$	e^{-x}	1
Hermite	$H_n(x)$	$(-\infty,+\infty)$	e^{-x^2}	$2^n n!\sqrt{\pi}$
Jacobi	$P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$	$[-1,+1]$	$(1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta}$	$\dfrac{2^{\alpha+\beta+1}}{2n+\alpha+\beta+1}\,\dfrac{\Gamma(n+\alpha+1)\Gamma(n+\beta+1)}{n!\Gamma(n+\alpha+\beta+1)}$
Általánosított Laguerre	$L_n^{(\alpha)}(x)$	$[0,+\infty)$	$e^{-x}x^{\alpha}$	$\dfrac{\Gamma(n+\alpha+1)}{n!}$

Sokféle definíció létezik az ortogonális polinomok megadására. Álljon itt ezek közül néhány, az ortogonális Legendre-függvények esetére specializálva:

- Generálófüggvény: $\left(1-2zt+t^2\right)^{-1/2} = \sum_{n=0}^{\infty} P_n(z)t^n$.
- Rodriguez-féle definíció: $P_n(z) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dz^n}\left(1-z^2\right)^n$
- Differenciálegyenlettel: $(1-z^2)\frac{d^2P_n(z)}{dz^2} - 2x\frac{dP_n(z)}{dz} + n(n+1)P_n(z) = 0$
- Rekurzív összefüggéssel: $P_{n+1}(x) = \frac{2n+1}{n+1}xP_n(x) - \frac{n}{n+1}P_{n-1}(x)$
- Integrálalakkal: $P_n(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}\left(z+\sqrt{z^2+1}\cos\theta\right)^n d\theta$

Mintafeladatok

- Állítsuk elő az első két Legendre-polinomot. (Javaslat: használjuk ehhez az elemi polinomfüggvények bázisát.)
  Megoldás: A javaslatnak megfelelően $|0\rangle = 1$, $|1\rangle = x$, $|2\rangle = x^2$, $|3\rangle = x^3$, stb. Ekkor $\langle 0|0\rangle = \int_{-1}^{1} 1\,\mathrm{d}x = 2$, ami a norma definíciójának ($\frac{2}{2n+1}\delta_{nm}$) megfelel. Folytassuk az ortogonális polinomok legyártását: $\langle 1|1\rangle = \int_{-1}^{1} x^2\,\mathrm{d}x = 2/3$, ami szintén megfelel a kívánatos normának. Továbbá, $\langle 0|1\rangle = \int_{-1}^{1} x\,\mathrm{d}x = 0$ alapján a két függvény ortogonális egymásra (figyelem, adott súlyfüggvény és integrálási határok mellett).
- Igazoljuk, hogy a $P_2(z) = z^2 - \frac{1}{3}$ polinom kielégíti a Legendre-féle differenciálegyenletet: $(1-z^2)\frac{d^2P_n(z)}{dz^2} - 2z\frac{dP_n(z)}{dz} + n(n+1)P_n(z) = 0$.
  Megoldás: A $P_2(z) = z^2 - \frac{1}{3}$ polinom esetében $n = 2$, $P_2'(z) = 2z$ és $P_2''(z) = 2$, azaz $\left(1-z^2\right)\cdot 2 - 2z\cdot 2z + 2\cdot 3\cdot\left(z^2 - \frac{1}{3}\right) = 2 - 2z^2 - 4z^2 + 6z^2 - 2 = 0$. QED

Gyakorló feladatok

- Állítsa elő a $P_2(x)$ és $P_3(x)$ Legendre-polinomokat, ahol az ortogonalitást a Schmidt-féle ortogonalizációs eljárás segítségével végezhetjük.
- Igazolja, hogy a $P_3(x)$ polinom (a „harmadik Legendre-polinom”) kielégíti a Legendre-féle differenciálegyenletet: $(1-x^2)\frac{d^2P_n(x)}{dx^2} - 2x\frac{dP_n(x)}{dx} + n(n+1)P_n(x) = 0$.

VII.3 Determinánsok

A determinánsok fogalmát Gottfried Wilhelm von Leibniz (1646-1716) német matematikus és filozófus vezette be.

<u>*Fogalmak*</u>

A **lineáris inhomogén egyenletrendszer** általános alakja:

$$\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
&\vdots \\
a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mn}x_n &= b_m
\end{aligned}$$

ahol a_{ij} és b_i ($i = 1, ..., m$; $j = 1, ..., n$) adott valós (vagy komplex) számok, x_i ($i = 1, ..., n$) ismeretlen valós (vagy komplex) számok, a_{ij} a lineáris inhomogén egyenletrendszer (ER) **együtthatói**, míg b_i az i-edik egyenlet **szabad tagja**. **Szabályosnak** nevezzük az ER-t, amennyiben $m = n$. **Megoldhatónak** nevezzük az egyenletrendszert, amennyiben van annak megoldása, ellenkező esetben az ER **ellentmondásos**. **Határozott** az ER, ha pontosan egy megoldása van, **határozatlan**, ha több. Két ER **ekvivalens**, ha megoldásaik halmaza egyenlő.

A determinánsok egyik fontos alkalmazása a **lineáris homogén egyenletrendszerek** nem-triviális megoldásának létezéséhez kapcsolódik. Tegyük fel az egyszerűség kedvéért, hogy csupán három ismeretlenünk van, x_1, x_2 és x_3 és három egyenletünk:

$$\begin{aligned}
a_1x_1 + a_2x_2 + a_3x_3 &= 0 \\
b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 &= 0 \\
c_1x_1 + c_2x_2 + c_3x_3 &= 0
\end{aligned}$$

A felvetendő probléma az, hogy el tudjuk-e dönteni, hogy mikor van az $x_1 = x_2 = x_3 = 0$ **triviális megoldástól** eltérő megoldása a szabályos egyenletrendszernek. Ha az $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ vektor jelölést használjuk a megoldás felírására, valamint a koefficienseket is vektorokba gyűjtjük, úgy $\mathbf{a} \cdot \mathbf{x} = 0$, $\mathbf{b} \cdot \mathbf{x} = 0$, és $\mathbf{c} \cdot \mathbf{x} = 0$ alakban írható fel a három egyenlet. A három egyenlet geometriai interpretációja az, hogy az $\mathbf{x}$ megoldásvektor merőleges az $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ és $\mathbf{c}$ vektorokra. A hármas skalárszorzat ($\mathbf{a} \times \mathbf{b} \cdot \mathbf{c}$) segítségével azt mondhatjuk, hogy amennyiben a

$$D_3 = (\mathbf{a} \times \mathbf{b}) \cdot \mathbf{c} = \det(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}) = \begin{vmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{vmatrix}$$

mennyiség, amelyet **determinánsnak** nevezünk, nem zérus, úgy csak a triviális $\mathbf{x} = \mathbf{0}$ megoldása van az egyenletnek. Amennyiben a bevezetett D_3 determináns zérus, úgy azt tudjuk, hogy az egyik sor a másik két sor lineárkombinációjaként határozható meg.

Tehát amennyiben ismert egy négyzetes $\mathbf{A}$ mátrix, úgy hozzárendelhetünk egy gyakran det($\mathbf{A}$)-val jelölt számot, melyet a mátrixhoz tartozó determinánsnak nevezünk.

Fontos állítás, hogy amennyiben egy **A** mátrix determinánsa nulla, úgy nem létezik az $\mathbf{A}^{-1}$ inverz mátrix, és fordítva, ha a determináns nem nulla, az inverz létezik. Ennek segítségével könnyen belátható, hogy egy

$$\begin{matrix} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + ... + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + ... + a_{2n}x_n = b_2 \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + ... + a_{nn}x_n = b_n \end{matrix} \quad \leftrightarrow \quad \mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

szabályos **lineáris inhomogén egyenletrendszernek** akkor van egyértelmű megoldása, amennyiben az **A** együttható mátrix determinánsa nem nulla, hiszen ekkor létezik $\mathbf{A}^{-1}$ és így a megoldás $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ alakban egyértelműen előállítható.

A determináns értékének kiszámításához további fogalmak bevezetésére van szükség. **Aldeterminánsnak** (*minor* angolul) nevezzük az $n \times n$-es determináns adott, a_{jk} eleméhez tartozó $n - 1$-ed rendű mátrixot, melyet úgy kapunk, hogy j-edik sort és k-adik oszlopot töröljük, majd a kapott minormátrixból készítünk determinánst. Amennyiben az aldeterminánst beszorozzuk $(-1)^{j+k}$-nal, az eredményt **kofaktornak** (*cofactor*) nevezzük, de elterjedt az **algebrai aldetermináns** megnevezés is.

Az kofaktor segítségével definiálható a determináns **kifejtési szabálya**, mely kimondja, hogy $\det(\mathbf{A}) = \sum_{k=1}^{n} a_{jk} A_{jk}$, azaz a determináns értékének kiszámításához bármely sor (vagy oszlop) elemein (a_{jk}) végighaladunk, megszorozzuk azt a neki megfelelő kofaktorral (A_{jk}), majd az így kapott számokat összegezzük.

A determinánsok főbb tulajdonságai:

- det($\mathbf{A}^T$) = det(**A**), a sorok és oszlopok ekvivalensek, azaz a determináns értéke a sorok és oszlopok felcserélésével nem változik
- a determináns bármely sor illetve oszlop szerint kifejezhető, értéke ettől nem fog változni
- ha egy sor (oszlop) csupa zérusból áll, úgy det(**A**) = 0
- ha egy sor (oszlop) összes eleme, egy kivétellel zérus, úgy a determináns értéke meghatározható, mint ennek az elemnek és kofaktorának szorzata
- tetszőleges két sor (oszlop) felcserélésére a determináns előjelet vált
- ha két sor (oszlop) egyenlő, úgy det(**A**) = 0
- ha két sor (oszlop) arányos, úgy det(**A**) = 0
- egy sor (oszlop) konstans c-vel történő szorzása c det(**A**)-t eredményez
- det($\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$) = det(**A**) det(**B**)

VII.4 Mátrixok

A vektorok és determinánsok mellett a lineáris algebra legfontosabb konstrukciói a **mátrixok**.

Fogalmak

A mátrixok lineáris operátorok (ez az állítás egyben meghatározza a mátrixokkal végzett műveleteket). A mátrixok négyzetes vagy téglalap alakú tömbök, melyek **elemei** számok vagy függvények, adott sorrendben elrendezve. Példa téglalap alakú, $m \times n$-es mátrixra:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ldots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \ldots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

A mátrixok **sorokból** illetve **oszlopokból** állnak. Jelen esetben a_{13} azon mátrixelemet jelöli, mely az első sorban és a harmadik oszlopban található. A mátrixokat félkövér betűkkel jelöljük, pl. **A**, vagy egy reprezentatív elemével, pl. (a_{jk}). A felírt mátrix **rendje** $m \times n$ (azaz m sorból és n oszlopból áll).

Az egyetlen sorból álló mátrixot **sormátrixnak** (vagy **sorvektornak**), az egyetlen oszlopból álló mátrixot **oszlopmátrixnak** (vagy **oszlopvektornak**) nevezzük. Amennyiben a sorok és oszlopok száma megegyezik, úgy **négyzetes mátrixról** beszélünk. **Valós** vagy **komplex** mátrixról beszélünk annak megfelelően, hogy a mátrix-elemek valós vagy komplex számok. A mátrix rendje

Az azonos rendű $\mathbf{A} = (a_{jk})$ és $\mathbf{B} = (b_{jk})$ mátrixok akkor és csak akkor **egyenlőek**, amennyiben $a_{jk} = b_{jk}$.

Az azonos rendű $\mathbf{A} = (a_{jk})$ és $\mathbf{B} = (b_{jk})$ mátrixok **összege** $\mathbf{A} + \mathbf{B} = (a_{jk} + b_{jk})$. A mátrixok összeadása kielégíti az asszociativitás és kommutativitás szabályait. Az **A** és **B** mátrixok **különbségét** az $\mathbf{A} - \mathbf{B} = (a_{jk} - b_{jk})$ összefüggés definiálja.

Az $\mathbf{A} = (a_{jk})$ mátrix és egy λ szám (skalár) **szorzata** $\lambda\mathbf{A} = \mathbf{A}\lambda = (\lambda a_{jk})$.

Amennyiben $\mathbf{A} = (a_{jk})$ egy $m \times n$-es mátrix, valamint $\mathbf{B} = (b_{jk})$ egy $n \times p$-es mátrix, úgy a két mátrix **AB** szorzata az $m \times p$ rendű **C** mátrix, melyre igaz, hogy $c_{jk} = \sum_{i=1}^{n} a_{ji} b_{ik}$. Jegyezzük meg, hogy általában $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$. Amennyiben az egyenlőség fennáll, a két mátrix egymással **kommutál**, azaz $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$ kommutátoruk, $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA}$ zérus.

Amennyiben egy $\mathbf{A} = (a_{jk})$ mátrix sorait és oszlopait felcseréljük, az eredményül kapott mátrixot az eredeti mátrix **transzponáltjának** nevezzük és $\mathbf{A}^T$-vel jelöljük. Bebizonyítható, hogy $(\mathbf{A} + \mathbf{B})^T = \mathbf{A}^T + \mathbf{B}^T$, $(\mathbf{AB})^T = \mathbf{B}^T \mathbf{A}^T$ és $(\mathbf{A}^T)^T = \mathbf{A}$.

A négyzetes $\mathbf{A} = (a_{jk})$ mátrixot szimmetrikusnak nevezzük, amennyiben $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$. A mátrix **antiszimmetrikus**, amennyiben $\mathbf{A}^T = -\mathbf{A}$.

Amennyiben az $\mathbf{A} = (a_{jk})$ mátrix összes elemét azok komplex konjugáltjával helyettesítjül, a mátrix **komplex konjugáltját** állítjuk elő.

Amennyiben a négyzetes **A** mátrix megegyezik transzponáltjának komplex konjugáltjával, a mátrixot **önadjungáltnak**, vagy **hermitikusnak** (*Hermitian*) nevezzük. Amennyiben ez a mátrix (-1)-szeresére áll ez fenn, a mátrixot **antihermitikusnak** nevezzük.

A négyzetes mátrix (fő) **diagonálisának** nevezzük azon a_{jk} elemeinek összességét, melyekre $j = k$. Az összes ilyen elem összegét az **A** mátrix nyomának (spurjának) nevezzük és tr**A**-val, illetve Sp**A**-val jelöljük.

Amennyiben a mátrix összes eleme zérus, úgy a mátrixot **zérus mátrixnak** nevezzük.

Az $n \times n$-es négyzetes **egységmátrix** összes diagonálison kívüli eleme 0, míg a diagonálisban csupa 1-esek állnak, jele gyakran **E** vagy **I** vagy $\mathbf{E}_{n\times n}$.

Amennyiben egy adott négyzetes **A** mátrix kapcsán létezik egy olyan **B** mátrix, melyekre fennáll, hogy $\mathbf{A} \cdot \mathbf{B} = \mathbf{E}$, úgy **B**-t az **A** mátrix **inverzének** nevezzük. Nemszinguláris, négyzetes, n-edrendű **A** mátrixok (azaz $\det(\mathbf{A}) \neq 0$) esetén létezik egy egyedi inverz mátrix, melyre igaz, hogy $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{E}$, valamint az inverz mátrix előállítható a következő módon: $\mathbf{A}^{-1} = \dfrac{(\mathbf{A}_{jk})^T}{\det(\mathbf{A})}$, ahol $\mathbf{A}_{jk}$ a minormátrix. Az inverz mátrixokkal végzendő műveletekre belátható, hogy $(\mathbf{AB})^{-1} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{A}^{-1}$ és $\left(\mathbf{A}^{-1}\right)^{-1} = \mathbf{A}$.

A valós **A** mátrixot **ortogonálisnak** nevezzük, amennyiben transzponáltja megegyezik az inverzével.

A komplex **A** mátrixot **unitér** mátrixnak nevezzük, amennyiben komplex konjugáltjának transzponáltja megegyezik a inverzével.

A valós szimmetrikus és a komplex önadjungált mátrixok hasonló szerkezetűek, ahogy a valós ortogonális és komplex unitér mátrixok is.

A mátrixalgebrában alkalmazott főbb definíciók táblázatos összefoglalása:

Fogalom, jelölés	Értelmezés, tulajdonság
transzponált, $\mathbf{A}^T$	$\left(\mathbf{A}^T\right)_{ij} = A_{ji}$
szimmetrikus mátrix	$\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$, azaz $A_{ij} = A_{ji}$
antiszimmetrikus mátrix	$-\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$, azaz $A_{ij} = -A_{ji}$
adjungált, $\mathbf{A}^+$	$\left(\mathbf{A}^+\right)_{ij} = A^*_{ji} = \left(\mathbf{A}^T\right)^*_{ij}$
önadjungált (hermitikus) mátrix	$\mathbf{A} = \mathbf{A}^+$, azaz $A_{ij} = A^*_{ji}$
antihermitikus mátrix	$-\mathbf{A} = \mathbf{A}^+$, azaz $A_{ij} = -A^*_{ji}$
egységmátrix, $\mathbf{E}$	$E_{ij} = 0$, ha $i \neq j$ és $E_{ij} = 1$, ha $i = j$
inverz mátrix, $\mathbf{A}^{-1}$	$\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{E}$
ortogonális mátrix	$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^T$, azaz $\left(A^{-1}\right)_{ij} = A_{ji}$
unitér mátrix	$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^+$, azaz $\left(A^{-1}\right)_{ij} = A^*_{ji}$
diagonális mátrix	$A_{ij} = 0$, ha $i \neq j$
kommutátor, $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$	$\mathbf{AB} - \mathbf{BA}$
nyom (spúr)	$\chi = \sum_i A_{ii}$

Mintafeladatok

- Unitér-e a következő mátrix: $\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$, ahol $i^2 = -1$. Mennyi **M** nyoma?

  Megoldás: Az unitér tulajdonság megállapításához tesztelnünk kell, hogy $\mathbf{MM}^+ = \mathbf{E}$ fennáll-e. Ehhez előbb transzponálnunk kell **M**-t, majd az elemek komplex konjugáltját kell képeznünk: $\mathbf{M}^T = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{-i}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$ és $\mathbf{M}^+ = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}$. Látjuk, hogy nem unitér ez a mátrix, hiszen $\mathbf{MM}^+ = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -i & 1 \end{bmatrix}$. A mátrix nyoma a diagonális elemek összege, azaz $\frac{1}{\sqrt{2}} + \frac{1}{\sqrt{2}} = \sqrt{2}$.

VII.5 Mátrix sajátérték egyenletek

A sajátérték egyenletek különlegesen fontos szerepet játszanak a fizikai kémiában és még annál is fontosabb szerepet a kvantumkémiában.

Fogalmak

Legyen $\mathbf{A} = (a_{jk})$ egy $n \times n$-es mátrix és $\mathbf{X}$ egy n-elemű oszlopvektor. Ekkor az $\mathbf{AX} = \lambda \mathbf{X}$ egyenlet, ahol λ egy szám, a következő alakokban írható fel:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

vagy

$$\begin{aligned} (a_{11} - \lambda)x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n &= 0 \\ a_{21}x_1 + (a_{22} - \lambda)x_2 + \ldots + a_{2n}x_n &= 0 \\ &\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + (a_{nn} - \lambda)x_n &= 0 \end{aligned}$$

Az utóbbi homogén lineáris egyenletrendszer akkor és csak akkor rendelkezik nem-triviális megoldással, amennyiben fennáll az **A**-hoz kapcsolódó determinánsra, hogy

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

mely egy λ-ban n-edrendű polinom. Azt is írhatjuk, hogy $\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{E}) = 0$ és ezt az egyenletet legtöbbször **karakterisztikus egyenletként** emlegetjük.

A karakterisztikus egyenlet alapján felírható karakterisztikus polinomnak a gyökeit az **A** mátrix **sajátértékeinek**, vagy karakterisztikus értékeinek szokás nevezni. Minden egyes sajátértékhez tartozik egy $\mathbf{X} \neq \mathbf{0}$ nemtriviális megoldásvektor, melyet az adott sajátértékhez tartozó **sajátvektornak** (karakterisztikus vektornak) nevezünk.

Tételek a sajátértékek és sajátvektorok kapcsán:

(1) Önadjungált (hermitikus) mátrix (szimmetrikus valós mátrix) sajátértékei valósak. Antihermitikus (antiszimmetrikus valós) mátrix sajátértékei zérusok vagy tisztán képzetesek. Unitér (ortogonális valós) mátrixok sajátértékeinek abszolút értéke 1.

(2) Önadjungált (szimmetrikus valós) mátrix különböző sajátértékekhez tartozó sajátvektorai egymásra merőlegesek (ortogonálisak).

(3) A mátrix kielégíti a saját karakterisztikus egyenletét.

(4) Amennyiben egy nem-szinguláris $n \times n$-es **A** mátrix különböző $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \ldots$ sajátértékeihez tartozó sajátvektorok mint egy mátrix oszlopvektorai szerepelnek,

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & b_{13} & \dots \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ b_{n1} & b_{n2} & b_{n3} & \dots \end{pmatrix}$$

úgy

$$\mathbf{B}^{-1}\mathbf{AB} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \lambda_2 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_n \end{pmatrix}$$

és az eredménymátrix A-nak B általi **transzformáltja**, mely az **A** mátrix sajátértékeit tartalmazza a diagonálisban, minden más eleme pedig zérus. Azt mondjuk, hogy **A**-t diagonális alakra redukáltuk.

<u>*Mintafeladatok*</u>

- Vizsgáljuk a két-dimenziós α szögű forgatási mátrixot, $\mathbf{C}_\alpha = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}$-t.

  (a) Határozzuk meg a mátrix determinánsát. (b) Önadjungált-e a mátrix? (c) Unitér-e a mátrix? (d) Mi az inverz mátrix? (e) Keressük meg a $\mathbf{C}_\alpha$ mátrix sajátértékeit. (f) Keressük meg a $\mathbf{C}_\alpha$ mátrix egyik normált sajátvektorát.

  Megoldás: (a) det($\mathbf{C}_\alpha$) = $\cos\alpha \cdot \cos\alpha + \sin\alpha \cdot \sin\alpha = \underline{\underline{1}}$

  (b) a mátrix valós, nem szimmetrikus, azaz nem önadjungált

  (c) unitér mátrixok sorai és oszlopai ortonormáltak, valamint fennáll az $\mathbf{UU}^+ = \mathbf{U}^+\mathbf{U} = \mathbf{E}$ kommutativitás, valamint a mátrix inverze és adjungáltja megegyezik. Jelen esetben $\mathbf{C}_\alpha \mathbf{C}_\alpha^+ = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} = \mathbf{E}$. Ugyanez belátható az ellenkező sorrendű szorzásra, azaz a két-dimenziós forgatási mátrix unitér.

  (d) a mátrix inverzének definíciója szerint $A^{-1} = \dfrac{1}{\det(A)}[A_{ki}] = 1 \cdot \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}$, tehát az ellenkező előjelű forgatás mátrixa az inverz mátrix

  (e) úgy látszik, nincs sajátvektora a forgatásnak, de a komplex térben van. A karakterisztikus egyenlet $\begin{vmatrix} \cos\alpha - \lambda & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha - \lambda \end{vmatrix} = 0$, azaz $\lambda^2 - 2\lambda\cos\alpha + \sin^2\alpha = 0$, a két karakterisztikus gyök (sajátérték) pedig $\lambda_{1,2} = \cos\alpha \pm i\sin\alpha = e^{\pm i\alpha}$. Egy mátrix sajátértékeinek ismert tulajdonsága, hogy $\sum_{i=1}^{n} \lambda_i = \mathrm{Sp}\mathbf{A}$ és $\prod_{i=1}^{n} \lambda_i = \det(\mathbf{A})$, jelen esetben mindkettő ellenőrizhetően fennáll.

(f) $\mathbf{C}_\alpha - \lambda_1\mathbf{E} = \begin{pmatrix} \cos\alpha - (\cos\alpha + i\sin\alpha) & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha - (\cos\alpha + i\sin\alpha) \end{pmatrix}$ a következő alakra vezet: $\begin{pmatrix} -i\sin\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & -i\sin\alpha \end{pmatrix} = \sin\alpha \begin{pmatrix} -i & -1 \\ 1 & -i \end{pmatrix}$. A sin$\alpha$-val történő szorzás csak a sajátvektor hosszát befolyásolja, így elegendő a következő egyenlet vizsgálata: $\begin{pmatrix} -i & -1 \\ 1 & -i \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_{11} \\ x_{21} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, melyből azt kapjuk, hogy $\frac{x_{11}}{x_{21}} = i$, azaz pl. $\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} i & 1 \end{pmatrix}^T$, normálás után $\mathbf{x}_1 = \begin{pmatrix} i/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$.

Gyakorló feladatok

- Kommutál-e egymással az α szögű, illetve a β szögű forgatás mátrixa ($\mathbf{C}_\alpha$ illetve $\mathbf{C}_\beta$)?
- Van-e közös sajátvektor-rendszere az α szögű, illetve a β szögű forgatás mátrixának?
- Mutassa meg, hogy (a) az $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ mátrix egy tetszőleges (valós elemű) kétdimenziós vektort 90 fokkal elforgat, és (b) a mátrixszal való négyszer egymás utáni forgatás (azaz a 4*90 = 360°-kal történő forgatás) olyan, mintha nem is forgattunk volna!
- Legyen $\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ és $\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ 1 \end{pmatrix}$. Egy tetszőleges háromdimenziós vektort a $\mathbf{P}$ mátrix az *xy*-síkba vetít, míg a $\mathbf{Q}$ mátrix a *z*-tengelyre. Vizsgálja meg $\mathbf{v}$ példáján, hogy a két vetület merőleges-e egymásra! Mi a két vetület vektoriális szorzata, és mekkora ennek a hossza?
- Legyen $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}$ és $\mathbf{B} = \begin{pmatrix} -1 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$. (a) Mennyi **AB** és mennyi **BA**? (b) Mutassa meg, hogy a $\mathbf{C} = \mathbf{BA} + \begin{pmatrix} 0 & -2 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ mátrix inverze saját maga! (c) Mennyi **BA** determinánsa?
- (Nehéz!) A Taylor-sorfejtésnek van egy olyan haszna is, hogy segítségével lehet értelmezni mátrixok függvényét. Például, egy négyzetes **A** mátrix exponenciálisa egy olyan mátrix, amelyet a következő hatványsorral értelmezünk: $e^{\mathbf{A}} = \mathbf{1} + \mathbf{A} + \frac{1}{2}\mathbf{A}^2 + \frac{1}{3!}\mathbf{A}^3 + ... = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\mathbf{A}^k}{k!}$ és **1** az egységmátrix. Ezek alapján számolja ki az $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}$ és a $\mathbf{B} = \begin{pmatrix} a & b \\ 0 & a \end{pmatrix}$ mátrixok exponenciálisát.
- Vajon asszociatív-e a vektoriális szorzás? Döntse el ezt annak alapján, hogy teljesül-e az $(e_1 \times e_2) \times e_2 = e_1 \times (e_2 \times e_2)$ egyenlőség, ahol $e_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ és $e_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$!
- Ellenőrizze, hogy az $\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ mátrix forgatási mátrix-e. Használja fel, hogy két vektor elforgatottjának skaláris szorzata megegyezik a vektorok forgatás előtti skaláris szorzatával, valamint hogy a forgatási mátrixok determinánsa egy.