

FREDERICK W. BYRON,
ROBERT W. FULLER

MATEMATYKA
W FIZYCE
KLASYCZNEJ
I KWANTOWEJ

Tom 1

Wydanie II poprawione



WARSZAWA 1975
PAŃSTWOWE
WYDAWNICTWO
NAUKOWE

Tom 1

1. Wektory w fizyce klasycznej

Wstęp	7
1.1. Geometryczna i algebraiczna definicja wektora	7
1.2. Rozkład wektora na składowe	9
1.3. Iloczyn skalarny	10
1.4. Obrót układu współrzędnych: przekształcenia ortogonalne	11
1.5. Iloczyn wektorowy	19
1.6. Wektorowy opis praw Keplera	22
1.7. Różniczkowanie pól skalarnych i wektorowych	24
1.8. Tensory kartezyjskie.	36

2. Rachunek wariacyjny

Wstęp	45
2.1. Kilka znanych problemów	45
2.2. Równanie Eulera–Lagrange’a	47
2.3. Kilka znanych rozwiązań	51
2.4. Zadania izoperymetryczne z więzami	54
2.5. Zastosowanie do mechaniki klasycznej	62
2.6. Szukanie ekstremów całek wielokrotnych	66
2.7. Zasady zachowania i twierdzenie Noether	72

3. Wektory i macierze

Wstęp	84
3.1. Grupy, ciała i przestrzenie wektorowe	84
3.2. Niezależność liniowa	88
3.3. Baza i wymiar	90
3.4. Izomorfizm	93
3.5. Przekształcenia liniowe	96
3.6. Przekształcenia liniowe odwrotne	97
3.7. Macierze	99
3.8. Wyznaczniki	106
3.9. Przekształcenie podobieństwa	114
3.10. Wartości i wektory własne	116
3.11. Iloczyn Kroneckera	126

4. Przestrzenie wektorowe w fizyce

Wstęp	137
4.1. Iloczyn wewnętrzny	137

4.2. Ortogonalność i zupełność	140
4.3. Zbiory ortonormalne zupełne	143
4.4. Operatory samosprężone (hermitowskie i symetryczne)	146
4.5. Izometrie — przekształcenia unitarne i ortogonalne	150
4.6. Wartości i wektory własne przekształceń samosprężonych i izometrycznych	152
4.7. Diagonalizacja	158
4.8. O rozwiązalności równań liniowych	164
4.9. Zasady minimum	168
4.10. Drgania normalne	176
4.11. Rachunek zaburzeń — przypadek bez degeneracji	183
4.12. Rachunek zaburzeń — przypadek zdegenerowany	189
5. Przestrzeń Hilberta — zupełne ortonormalne zbiory funkcji	
Wstęp	203
5.1. Przestrzeń funkcyjna i przestrzeń Hilberta	204
5.2. Zupełne ortonormalne zbiory funkcji.	208
5.3. Funkcja δ Diraca	214
5.4. Twierdzenie Weierstrassa — aproksymacja wielomianami	219
5.5. Wielomiany Legendre'a	223
5.6. Szeregi Fouriera	229
5.7. Transformaty Fouriera	236
5.8. Funkcje kuliste i stowarzyszone funkcje Legendre'a	242
5.9. Wielomiany Hermite'a	249
5.10. Układy Sturm-Liouville'a — wielomiany ortogonalne	251
5.11. Matematyczne sformułowanie mechaniki kwantowej	264

Tom 2

6. Elementy teorii funkcji analitycznych. Zastosowania
7. Funkcje Greena
8. Wstęp do równań całkowych
9. Równania całkowe w przestrzeni Hilberta
10. Wstęp do teorii grup

WEKTORY W FIZYCE KLASYCZNEJ

WSTĘP

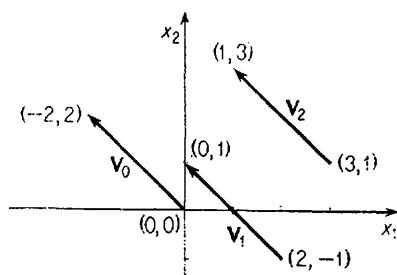
W rozdziale tym przedstawimy pokrótce własności wektorów i pól wektorowych występujących w fizyce klasycznej. Zrobimy to w sposób, który umożliwi nam łatwe przejście do bardziej abstrakcyjnych rozważań w następnych rozdziałach. Celem naszym jest wypełnienie luki istniejącej między klasyczną trójwymiarową analizą wektorów a formalizmem abstrakcyjnych przestrzeni wektorowych, będącym językiem fizyki kwantowej. Zanim jednak przejdziemy do szczegółowego przedstawienia różnych pojęć w wielowymiarowych przestrzeniach wektorowych, omówimy je w pierw w przypadku najprostszym — w przestrzeni trójwymiarowej. Pozwoli to nam następnie nawiązać do konkretnych wyobrażeń. Rozdział ten będzie zawierać także przegląd zagadnień fizyki klasycznej, które można prosto i elegancko przedstawić w języku analizy wektorowej, języku stworzonym właśnie do tego celu. Naszym zadaniem jest jedynie wprowadzenie i przegląd własności wektorów i pól wektorowych, dlatego też stosowany tu aparat matematyczny nie będzie tak ścisły jak w następnych rozdziałach.

1.1. GEOMETRYCZNA I ALGEBRAICZNA DEFINICJA WEKTORA

W podstawowym kursie fizyki szczególny nacisk kładzie się na geometryczną postać wektorów. Wektor x jest początkowo przedstawiany jako ukierunkowany odcinek linii prostej lub jako wielkość z określoną długością i kierunkiem, jak na przykład prędkość i siła*. W ten sposób wektor jest odróżniany od skalara, wielkości określanej tylko jedną liczbą (na przykład temperatury, entropii lub masy). W przestrzeni dwuwymiarowej przedstawionej na rys. 1.1 pokazano trzy wektory o jednakowych długościach i kierunkach. Wektory te tworzą klasę równoważności, która może być reprezentowana przez wektor wodzący V_0 , którego początkowy punkt leży w środku układu współrzędnych. Stopniowo będziemy zastępować tę elementarną charakterystykę wektorów i skalarów bardziej podstawową, lecz najpierw musimy rozwinąć odpowiedni do tego celu język.

* Niektórzy autorzy odróżniają pojęcia kierunku i zwrotu wektora. W powyższym ujęciu kierunek zawiera zarazem i zwrot (przyj. tłum.).

Algebraiczny aspekt wektora wynika z jedno-jednoznaczego przyporządkowania wektorowi wodzącemu (wychodzącemu ze środka układu współrzędnych i reprezentującemu klasę równoważności wektorów) współrzędnych jego punktów końcowych — uporządkowanej pary liczb rzeczywistych (x_1, x_2) . Analogicznie, w przestrzeni trójwymiarowej geometryczny wektor wiążemy z uporządkowaną trójką liczb rzeczywistych (x_1, x_2, x_3) . Liczby te nazywamy *składowymi* (współrzednymi) wektora. Wektor taki możemy krótko zapisywać jako x_i ; zapis ten oznacza, że i zmienia się od 1 do 3. W przestrzeni o wymiarze większym niż 3 nadal przypisujemy wektorowi algebraiczny zapis w postaci uporządkowanej n -tki, tzn. uporządkowanego ciągu n liczb rzeczywistych (x_1, x_2, \dots, x_n) . Pomimo, że dla n większego niż 3 nie możemy konstruować realnych wektorów, będziemy jednak dla tego n -wymiarowego uogólnienia zachowywać język geometryczny. Formalny opis własności tych abstrakcyjnych wektorów, które mają zasadnicze znaczenie w mechanice relatywistycznej i kwantowej, będzie treścią rozdziałów 3 i 4. W niniejszym rozdziale skupimy uwagę na przypadku trójwymiarowym.



Rys. 1.1. Trzy równoważne wektory w przestrzeni trójwymiarowej

Mamy więc dwa uzupełniające się opisy wektora: geometryczny lub inaczej fizyczny i algebraiczny. Odpowiadają one planimetrii (lub stereometrii) i geometrii analitycznej. Najpierw wprowadzono opis geometryczny i utrzymywał się on przez stulecia, do czasu gdy Kartezjusz stworzył geometrię analityczną. Wszystko, co można udowodnić geometrycznie, można również wykazać algebraicznie, i na odwrót. Lecz dowód danego twierdzenia może być dużo prościej przeprowadzony w jednym języku niż w drugim.

Język algebraiczny jest dużo prostszy niż język geometryczny; prowadzi do łatwiejszego formułowania różnych zagadnień niż można to byłoby zrobić przy użyciu języka geometrycznego. Na przykład, styczna do krzywej w danym punkcie może być bardzo prosto zdefiniowana w języku algebraicznym, co ułatwia dalsze badania wielu problemów opierających się na tym ważnym pojęciu.

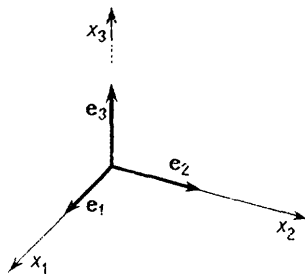
Niels Bohr powiedział kiedyś, że nigdy nie uznał myśli filozoficznych za zrozumiałe, dopóki nie przedyskutował ich sam zarówno w języku niemieckim, francuskim, angielskim jak i w ojczystym duńskim. Podobnie i my pogłębiamy zrozumienie geometrii, gdy możemy spojrzeć na jej podstawowe twierdzenia zarówno z geometrycznego jak i algebraicznego punktu widzenia. Jest to również prawdą w odniesieniu do badania wektorów. Dużo łatwiej jest posługiwać się algebraicznym opisem analizy wektorowej pomijając fizyczną, geometryczną interpretację operatorów różniczkowych. Spróbujemy znaleźć fizyczny sens tych operatorów, jak również zbadamy ich algebraiczne działanie. Podstawowe operatory

analizy wektorowej występują we wszystkich działach fizyki, dlatego warto rozwijać fizyczny obraz działania tych operatorów. Chodzi bowiem o to, byśmy wiedzieli, jakie własności pól skalarnych i wektorowych „mierzą” te operatory.

1.2. ROZKŁAD WEKTORA NA SKŁADOWE

Jednym z najważniejszych zagadnień wektorowych jest rozkład wektorów na składowe. Będzie on główną treścią rozdziału 5, w którym zajmiemy się przestrzenią Hilberta — uogólnieniem przestrzeni wektorowej na nieskończenie wiele wymiarów. W przestrzeni trójwymiarowej każdy wektor \mathbf{x} może być wyrażony w postaci kombinacji liniowej dowolnych trzech niekomplanarnych wektorów*. Tak więc $\mathbf{x} = \alpha\mathbf{V}_1 + \beta\mathbf{V}_2 + \gamma\mathbf{V}_3$, gdzie α , β i γ są skalarami. Jeżeli oznaczymy długość wektora \mathbf{x} przez $|\mathbf{x}|$, wtedy $\alpha|\mathbf{V}_1|$, $\beta|\mathbf{V}_2|$ i $\gamma|\mathbf{V}_3|$ będą składowymi wektora \mathbf{x} w kierunkach \mathbf{V}_1 , \mathbf{V}_2 i \mathbf{V}_3 . Trzy wektory \mathbf{V}_1 , \mathbf{V}_2 i \mathbf{V}_3 nie muszą być prostopadłe do siebie — każde trzy niekomplanarne wektory tworzą *bazę*, a każdy wektor może być wyrażony przez wektory bazy. Najczęściej jednak wybiera się wektory bazy prostopadłe do siebie. W tym przypadku bazę nazywamy *ortogonalną*, w pozostałych przypadkach mamy bazę skośną. My będziemy się zajmować prawie wyłącznie bazami ortogonalnymi.

Szczególnie często używaną bazą wektorów jest *baza kartezjańska* składająca się z trzech prostopadłych do siebie wektorów o długości jednostkowej. Wektory tej bazy zachowują te same kierunki we wszystkich punktach przestrzeni. W tym rozdziale będziemy oznaczać wektory jednostkowe literą \mathbf{e} , zgodnie z tą umową baza kartezjańska to zbiór $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$ pokazany na rys. 1.2. Bazę taką nazywamy bazą *ortonormalną*, ponieważ wektory jej są do siebie ortogonalne i znormalizowane (mają jednostkową długość). Nie będziemy tutaj odróżniać pojęcia „bazy” od pojęcia „układu współrzędnych”. Baza



Rys. 1.2. Baza kartezjańska prawoskrętna (prawoskrętny układ współrzędnych)

z rys. 1.2 jest *prawoskrętna*, to znaczy, że jeżeli ustawimy palce prawej ręki w kierunku dodatniej osi x_1 , a następnie zamykając dłoń ustawimy je w kierunku dodatniej osi x_2 , odstawiony kciuk powinien wskazywać dodatni kierunek osi x_3 . Jeżeli któryś z wektorów bazy jest odwrócony, mamy bazę *lewoskrętną*. Matematyczna definicja skrętności bazy będzie podana w § 1.5.

Dowolny wektor może być wyrażony w przedstawionej tu bazie kartezjańskiej: $\mathbf{x} = x_1\mathbf{e}_1 + x_2\mathbf{e}_2 + x_3\mathbf{e}_3$. Tutaj x_i jest i -tą składową wektora \mathbf{x} w tej bazie ($i = 1, 2, 3$).

* Są to wektory nie leżące na jednej płaszczyźnie (przyp. tłum.).

Istnieje wiele innych ortonormalnych układów współrzędnych, na przykład walcowy, sferyczny i inne układy krzywoliniowe, które mogą znacznie uprościć rozwiązywanie problemów o specjalnych własnościach symetrii. Będziemy o tym mówić w § 1.7.

1.3. ILOCZYN SKALARNY

Iloczyn skalarny (inaczej iloczyn wewnętrzny lub iloczyn z kropką) dwu wektorów \mathbf{x} i \mathbf{y} jest to liczba rzeczywista zdefiniowana w języku geometrycznym równaniem

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = |\mathbf{x}| |\mathbf{y}| \cos \theta,$$

gdzie θ jest kątem między dwoma wektorami, mierzonym od \mathbf{x} do \mathbf{y} . Ponieważ $\cos \theta$ jest funkcją parzystą, iloczyn skalarny jest przemienne:

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = \mathbf{y} \cdot \mathbf{x}.$$

Co więcej, iloczyn skalarny jest rozłączny ze względu na dodawanie

$$\mathbf{x} \cdot (\mathbf{y} + \mathbf{z}) = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} + \mathbf{x} \cdot \mathbf{z}.$$

Równanie to ma postać znaną z algebry, w której prawo rozłączności przyjmujemy jako podstawową własność liczb. Dla czytelnika będzie pouczające dojść do tego wniosku przy pomocy konstrukcji geometrycznej.

Równość $\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = 0$ nie oznacza, że jeden lub oba wektory są równe zeru. Może tak być również wtedy, gdy wektory są prostopadłe. Zauważmy, że długość wektora \mathbf{x} jest dana wzorem

$$|\mathbf{x}| \equiv x = (\mathbf{x} \cdot \mathbf{x})^{1/2}$$

(ponieważ $\cos \theta = 1$ dla $\theta = 0$). W szczególności, dla wektorów bazy kartezjańskiej mamy

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij},$$

gdzie δ_{ij} jest deltą Kroneckera zdefiniowaną następująco

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{jeżeli } i = j, \\ 0, & \text{jeżeli } i \neq j. \end{cases} \quad (1.1)$$

Jeżeli wyrazimy dwa dowolne wektory \mathbf{x} i \mathbf{y} w bazie kartezjańskiej

$$\mathbf{x} = x_1 \mathbf{e}_1 + x_2 \mathbf{e}_2 + x_3 \mathbf{e}_3 = \sum_{i=1}^3 x_i \mathbf{e}_i,$$

$$\mathbf{y} = y_1 \mathbf{e}_1 + y_2 \mathbf{e}_2 + y_3 \mathbf{e}_3 = \sum_{i=1}^3 y_i \mathbf{e}_i,$$

wtedy

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} = \left(\sum_i x_i \mathbf{e}_i \right) \cdot \left(\sum_j y_j \mathbf{e}_j \right) = \sum_{i,j} x_i y_j \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \sum_{i,j} x_i y_j \delta_{ij} = \sum_i x_i y_i. \quad (1.3)$$

Wykorzystaliśmy tutaj rozłączność iloczynów skalarnych; symbol $\sum_{i,j}$ oznacza $\sum_i \sum_j$. To ostatnie wyrażenie może być traktowane jako algebraiczna definicja iloczynu skalarnego.

Wynika stąd, że długość wektora wyraża się przez $|\mathbf{x}| = (\mathbf{x} \cdot \mathbf{x})^{1/2} = \left(\sum_i x_i^2 \right)^{1/2}$. Równanie to przypisuje każdemu wektorowi liczbę, zwaną jego długością. Widzimy, że pojęcie długości nie musi być traktowane jako nierozłącznie związane z pojęciem wektora, jest

ono raczej konsekwencją definicji iloczynu skalarnego w przestrzeni abstrakcyjnych wektorów. W rozdziale 3 będziemy badać abstrakcyjne przestrzenie wektorowe, w których w ogóle nie będziemy wprowadzać pojęcia długości. Następnie w rozdziale 4 dołączymy do tych przestrzeni iloczyn wewnętrzny (lub skalarny) i skupimy nasze rozważania na tak wzbogaconej strukturze.

Wprowadzimy teraz skrót notacyjny, znany pod nazwą *umowy sumacyjnej Einsteina*. Einstein w swej pracy nad wektorami i tensorami zauważył, że ilekroć wykonujemy sumowanie po danym wskaźniku, wskaźnik ten pojawia się *dwukrotnie* w sumowanym wyrażeniu, i na odwrót. Można więc po prostu opuścić znak sumy, rozumiejąc, że wyrażenie typu $x_i y_i$ oznacza sumowanie po powtórzonym wskaźniku od 1 do (w naszym przypadku) 3. Jeżeli w wyrażeniu pojawią się dwa różne powtarzające się wskaźniki, oznacza to, że należy wykonać dwa sumowania. Einstein w liście żartobliwie wyraził się o tej swojej obserwacji jako o wielkim odkryciu matematycznym. Jeżeli jednak ktoś się nie zgadza z tym określeniem, niech spróbuje obejść się bez tego odkrycia! (Inna anegdota z tym związana podaje, że to drukarz składający Einsteinowi jakąś pracę zauważył, że można pominąć znak sumowania).

W całym tym rozdziale będziemy przyjmować umowę sumacyjną Einsteina. Stosując tę umowę mamy na przykład

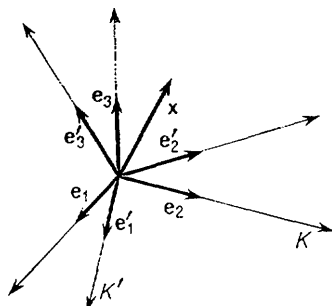
$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= x_i \mathbf{e}_i, \\ \mathbf{x} \cdot \mathbf{y} &= x_i y_j \delta_{ij} = x_i y_i = x_j y_j, \\ \mathbf{x} \cdot \mathbf{e}_i &= x_j \mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_i = x_j \delta_{ij} = x_i. \end{aligned}$$

Ostatnie równanie definiuje składową \mathbf{x} w kierunku \mathbf{e}_i ; wielkość $\mathbf{x} \cdot \mathbf{e}_i$ jest również nazywana *rzutem* wektora \mathbf{x} na oś \mathbf{e}_i . Zbiór liczb $\{x_i\}$ nazywamy *przedstawieniem* (lub *współrzednymi*) wektora \mathbf{x} w bazie (lub układzie współrzędnych) $\{\mathbf{e}_i\}$.

1.4. OBROTY UKŁADU WSPÓRZĘDNYCH: PRZEKSZTAŁCENIA ORTOGONALNE

Będziemy się teraz zajmować związkami między składowymi wektora w dwóch różnych bazach kartezjańskich o wspólnym środku (rys. 1.3). Każdy wektor \mathbf{x} może być rozłożony na składowe zarówno w bazie K jak i K' . Na przykład, w bazie K mamy

$$\mathbf{x} = (\mathbf{x} \cdot \mathbf{e}_j) \mathbf{e}_j = x_j \mathbf{e}_j, \quad (1.4)$$



Rys. 1.3. Dwie różne bazy kartezjańskie o wspólnym początku. Wektor \mathbf{x} może być wyrażony w każdej z tych baz

gdzie zastosowaliśmy umowę sumacyjną. W szczególności, jeżeli $\mathbf{x} = \mathbf{e}'_i$ ($i = 1, 2, 3$), możemy wyrazić bazę primowaną przez bazę nieprimowaną:

$$\mathbf{e}'_i = (\mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_j) \mathbf{e}_j \equiv a_{ij} \mathbf{e}_j \quad (j = 1, 2, 3). \quad (1.5)$$

Równanie (1.5) definiuje nam dziewięć wielkości a_{ij} ; są to cosinusy kierunkowe kątów między sześcioma osiami. Liczby te mogą być zapisane w postaci macierzy kwadratowej

$$R \equiv (a_{ij}) \equiv \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}. \quad (1.6)$$

Macierz R jest znana pod nazwą *macierzy obrotu* w trójwymiarowej przestrzeni, opisuje ona bowiem konsekwencje przejścia od jednego układu do drugiego (obróconego).

Zauważmy, że definiując elementy macierzy przez równość

$$a_{ij} \equiv \mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}_j \quad (1.7a)$$

przyjeliśmy określoną konwencję. Mogliśmy jednak równie dobrze zdefiniować elementy macierzowe a'_{ij} następująco

$$a'_{ij} \equiv \mathbf{e}'_j \cdot \mathbf{e}_i = a_{ji}. \quad (1.7b)$$

Prawie wszyscy autorzy stosują konwencję (1.7a), ale jest to dowolny wybór, całkowicie konsyistentne rozwinięcie teorii może bazować na definicji (1.7b). I tak w teorii abstrakcyjnych przestrzeni wektorowych macierze definiuje się częściej w oparciu o równanie (1.7b) niż w oparciu o (1.7a). Niemniej jednak przez zastąpienie a_{ij} przez a_{ji} w równaniu (1.6) i równaniach, które niebawem wyprowadzimy, możemy przechodzić od jednej konwencji do drugiej. W rozdziale 4 będziemy jeszcze raz badać tę kwestię w bardziej ogólnym ujęciu, co pozwoli na prostą i pełną systematyzację problemu.

Jest rzeczą oczywistą, że elementy macierzy obrotu nie są niezależne. Ponieważ wektory bazy są ortonormalne, z równania (1.5) wynika, że

$$\delta_{ij} = \mathbf{e}'_i \cdot \mathbf{e}'_j = a_{ik} (\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{e}'_j) = a_{ik} a_{jk}. \quad (1.8)$$

Równanie (1.8) składa się z dziewięciu równań, z których tylko sześć różni się między sobą. Każde z tych równań zawiera sumę trzech członów kwadratowych. Pozostawiamy czytelnikowi pokazanie (przez wyrażenie wektorów nieprimowanych w bazie primowanej i wzięcie iloczynów skalarnych), że zachodzi również związek

$$a_{ki} a_{kj} = \delta_{ij}. \quad (1.9)$$

Równania (1.8) i (1.9) nazywamy relacjami ortogonalności; odpowiednie przekształcenia (1.5) noszą nazwę *przekształceń ortogonalnych*.

W przestrzeni n -wymiarowej macierz obrotu będzie miała n^2 elementów, relacje ortogonalności dają $\frac{1}{2}(n^2 + n)$ związków między tymi elementami, co pozostawiamy do sprawdzenia czytelnikowi. Tak więc

$$n^2 - \frac{1}{2}(n^2 + n) = \frac{1}{2}n(n-1)$$

elementów a_{ij} jest dowolne. W przestrzeni dwuwymiarowej pozostawia to jeden parametr wolny: możemy przyjąć, że jest to kąt obrotu. W przestrzeni trójwymiarowej występują

trzy stopnie swobody odpowiadające trzem *kątom Eulera* stosowanym do opisu położenia ciała sztywnego.

Równanie (1.5) razem z warunkami ortogonalności mówi nam, jak wyrażają się wektory bazy pierwotnej w bazie obróconej. Teraz możemy zapytać, jak zmieniają się współrzędne wektora w bazie K przy przejściu do bazy K' i na odwrót.

Każdy wektor \mathbf{x} może być przedstawiony zarówno w bazie K ($\mathbf{x} = x_j \mathbf{e}_j$) jak i w bazie K' ($\mathbf{x}' = x'_i \mathbf{e}'_i$). Wyrazimy najpierw współrzędne x_j wektora \mathbf{x} w bazie \mathbf{e}_j przez współrzędne x'_i tego wektora w bazie \mathbf{e}'_i . Stosując (1.5) mamy

$$\mathbf{x} = x'_i \mathbf{e}'_i = x'_i a_{ij} \mathbf{e}_j = x_j \mathbf{e}_j. \quad (1.10)$$

Teraz z uwagi na to, że wektory bazy są ortogonalne, możemy identyfikować ich współczynniki w równaniu (1.10):

$$x_j = a_{ij} x'_i. \quad (1.11)$$

(Ścisłej biorąc, jeżeli $\alpha_i \mathbf{e}_i = \beta_i \mathbf{e}_i$ to $(\alpha_i - \beta_i) \mathbf{e}_i = 0$. Ponieważ jest to suma, z powyższego równania nie wynika automatycznie, że $\alpha_i = \beta_i$. Jednakże, mnożąc skalarnie to równanie przez \mathbf{e}_j otrzymujemy $(\alpha_i - \beta_i) \delta_{ij} = 0$, a stąd $\alpha_j = \beta_j$).

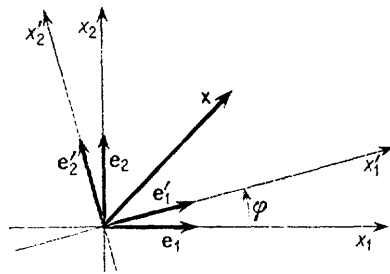
Aby otrzymać transformację odwrotną, możemy oczywiście powtórzyć powyższą procedurę wstawiając wektory nieprimowane. To znaczy, zamiast stosować równanie (1.5) można zastosować odpowiednie równanie na wektory bazy nieprimowanej

$$\mathbf{e}_i = (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}'_j) \mathbf{e}'_j = a_{ji} \mathbf{e}'_j.$$

Jednakże, przy użyciu warunków ortogonalności możemy otrzymać ten wynik bezpośrednio z (1.11). Mnożąc to równanie przez a_{kj} , sumując po j i stosując (1.8) otrzymamy związek

$$a_{kj} x_j = a_{kj} a_{ij} x'_i = \delta_{ki} x'_i = x'_k, \quad (1.12)$$

który wyraża primowane współrzędne przez nieprimowane.



Rys. 1.4. Obrót w przestrzeni dwuwymiarowej lub obrót w przestrzeni trójwymiarowej wokół osi x_3 , prostopadłej do osi x_1, x_2, x'_1 i x'_2

Podsumowując, mamy następujące związki

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= x'_i \mathbf{e}'_i = x_j \mathbf{e}_j, \\ \mathbf{e}'_i &= a_{ij} \mathbf{e}_j, \quad \mathbf{e}_i = a_{ji} \mathbf{e}'_j, \\ x'_i &= a_{ij} x_j, \quad x_i = a_{ji} x'_j, \\ a_{ik} a_{jk} &= a_{ki} a_{kj} = \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (1.13)$$

Równania te przedstawiają współrzędne *jednego* wektora wyrażone przez wektory dwu różnych baz, e_i i e'_i . Tak więc wektory bazy nieprimowanej mogą być wyrażone przez inną (primowaną) bazę; a_{ij} jest j -tą składową wektora e'_i , wyrażoną w bazie nieprimowanej, a a_{ji} jest j -tą składową wektora e_i wyrażoną w bazie primowanej.

Przykład 1.1. Dwuwymiarowa macierz obrotu. W równaniu (1.5) i równaniu (1.6) zdefiniowaliśmy elementy macierzy obrotu. Dla przypadku dwuwymiarowego mamy cztery współczynniki: $a_{ij} \equiv (e'_i \cdot e_j)$, gdzie $i, j = 1, 2$. Z rys. 1.4 wynika, że

$$(a_{ij}) = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}. \quad (1.14a)$$

Pierwszy wskaźnik określa wiersz, drugi kolumnę elementu a_{ij} . Ta macierz obrotu mówi nam, co się dzieje ze składowymi wektora x , kiedy przechodzimy od bazy e_i do nowej bazy e'_i przez obrót bazy o kąt $(+\varphi)$ przeciwny do kierunku ruchu wskazówek zegara. Z równania (1.13) wynika, że składowe x_i wektora x w bazie e_i i składowe x'_i tego samego wektora w bazie e'_i są związane równaniem $x'_i = a_{ij}x_j$; wypisując w pełni

$$\begin{aligned} x'_1 &= \cos \varphi x_1 + \sin \varphi x_2, \\ x'_2 &= -\sin \varphi x_1 + \cos \varphi x_2. \end{aligned} \quad (1.15a)$$

Tutaj x_i i x'_i są składowymi pojedynczego wektora w dwóch bazach. Wektor x zachowuje się *passywnie* wówczas, gdy baza, w której go przedstawiamy, obraca się.

Ale istnieje również inny sposób interpretacji. Możemy uważać x_i za składową wektora x , a x'_i za składową *innego* wektora x' otrzymanego przez obrót wektora x o kąt $(-\varphi)$. Niech $X \equiv \{e_i\}$ będzie początkową bazą i niech $X' \equiv \{e'_i\}$ oznacza bazę otrzymaną przez obrót wektorów bazy X o kąt $(+\varphi)$. Składowe wektora x' w bazie X są liczbowo równe składowym wektora x w bazie X' . Rozumowanie to stanie się bardziej zrozumiałe, gdy sporządzimy odpowiedni rysunek. W wyniku obrotu wektora o kąt $(-\varphi)$ otrzymujemy nowy wektor o składowych w starej bazie równych składowym początkowego wektora w nowej bazie.

Tak więc równania, które opisują transformację *aktywną* jednego wektora w nowy wektor, obrócony względem pierwszego o kąt $(+\varphi)$, otrzymuje się przez wstawienie kąta $(-\varphi)$ w równanie (1.15a), które daje teraz

$$\begin{aligned} x'_1 &= \cos \varphi x_1 - \sin \varphi x_2, \\ x'_2 &= \sin \varphi x_1 + \cos \varphi x_2. \end{aligned} \quad (1.16a)$$

Tutaj x_i i x'_i odpowiadają składowym dwóch wektorów w określonej bazie. Zauważmy, że równanie (1.16a) może być zapisane w postaci

$$x'_i = a_{ji}x_j, \quad (1.16b)$$

gdzie a_{ij} są zdefiniowane w równaniu (1.14a).

Jeżeli teraz wprowadzimy macierz obrotu *transponowaną* do (a_{ij}) , to znaczy, jeżeli zastosujemy równanie (1.7b), wtedy otrzymamy zamiast wzoru (1.14a) wzór

$$a'_{ij} = \begin{bmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{bmatrix}, \quad (1.14b)$$

a zamiast równania (1.15a), dla składowych jednego wektora w dwu różnych bazach, równania

$$x'_i = a_{ji}x_j \quad \text{lub} \quad x_i = a_{ij}x'_j, \quad (1.15b)$$

oraz równania

$$x'_i = a_{ij}x_j \quad \text{lub} \quad x_i = a_{ji}x'_j, \quad (1.16c)$$

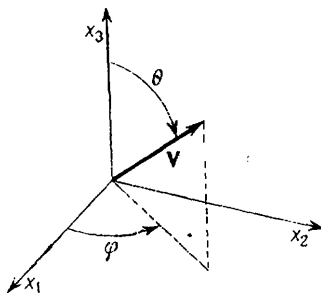
zamiast równania (1.16b) dla składowych transformowanego wektora w pewnej bazie.

Macierz obrotu (1.14a) możemy rozszerzyć na przypadek trójwymiarowego obrotu wektorów bazy wokół osi x_3 . Oznaczając tę macierz przez $R(\varphi)$ otrzymujemy

$$R(\varphi) \equiv (a_{ij}) = \begin{bmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (1.17)$$

Przykład 1.2. Trójwymiarowa macierz obrotu $R(\varphi, \Theta, \psi)$. Przypuśćmy, że chcemy przejść do układu współrzędnych, w którym nowa oś z , x'_3 , jest dowolnie wybranym kierunkiem, powiedzmy wzdłuż wektora V przedstawionego na rys. 1.5. Taki obrót może być złożony z dwóch obrotów trójwymiarowych wokół osi, takich jak dyskutowane w przykładzie 1.1. Obrócimy najpierw układ współrzędnych o kąt φ w kierunku przeciwnym do kierunku wskazówek zegara wokół wspólnej osi x_3 - x'_3 . Otrzymamy wtedy

$$e'_i = a_{ij}e_j, \quad (1.18)$$



Rys. 1.5. Wektor V wyznaczający oś z obróconego układu współrzędnych

elementy a_{ij} są podane w równaniu (1.17). Obrócimy teraz układ o kąt Θ zgodnie z kierunkiem ruchu wskazówek zegara, to znaczy, o kąt $-\Theta$ w kierunku przeciwnym do ruchu wskazówek zegara, wokół osi x'_2 . (Mogliśmy równie dobrze dokonać obrotu wokół osi x'_1 , lecz zazwyczaj stosuje się tę kolejność). Obrotowi temu odpowiada macierz

$$(b_{ij}) \equiv \begin{bmatrix} \cos \Theta & 0 & -\sin \Theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \Theta & 0 & \cos \Theta \end{bmatrix}, \quad (1.19)$$

zaś wektory nowej bazy wyrażone w bazie nieprimowanej są równe

$$e''_i = b_{ij}e'_j.$$

Teraz stosując równanie (1.18) mamy

$$e''_i = b_{ij}a_{jk}e_k. \quad (1.20)$$

Aby przejść bezpośrednio od nieprimowanego układu do układu podwójnie primowanego, musimy znać współczynniki c_{ik} w równaniu

$$\mathbf{e}_i'' = c_{ik} \mathbf{e}_k. \quad (1.21)$$

Znajomość tych współczynników jest równoważna znajomości trójwymiarowej macierzy obrotu. Z równań (1.20) i (1.21) widać, że

$$c_{ik} = b_{ij} a_{jk}. \quad (1.22)$$

Wykorzystując ten rezultat oraz macierze (1.17) i (1.19) możemy wyliczyć elementy c_{ik} . W rezultacie otrzymujemy następującą macierz obrotu

$$R(\varphi, \Theta) \equiv (c_{ik}) = \begin{bmatrix} \cos\varphi \cos\Theta & \sin\varphi \cos\Theta & -\sin\Theta \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ \cos\varphi \sin\Theta & \sin\varphi \sin\Theta & \cos\Theta \end{bmatrix}. \quad (1.23)$$

Ta macierz obrotu zawiera macierz $R(\varphi)$ (wzór (1.17)) jako szczególny przypadek dla $\Theta = 0$. Tak więc $R(\varphi, 0) = R(\varphi)$. Równanie (1.22) jest szczególnym przypadkiem ogólnej operacji mnożenia macierzy, która będzie dokładnie omówiona w rozdziale 3. Składowe wektora \mathbf{x} w bazie \mathbf{e}_i i składowe tego samego wektora w bazie \mathbf{e}_i'' są związane ze sobą równaniem

$$x_i'' = c_{ij} x_j. \quad (1.24)$$

Macierz obrotu $R(\varphi, \Theta)$ nie reprezentuje najbardziej ogólnego obrotu. Możliwy jest jeszcze jeden obrót — przeciwny do kierunku ruchu wskazówek zegara o kąt ψ w płaszczyźnie $x_1'' x_2''$ wokół osi x_3'' . Ten trzeci obrót opisywany jest przez macierz

$$(d_{ij}) = \begin{bmatrix} \cos\psi & \sin\psi & 0 \\ -\sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Pełny obrót, który może być otrzymany przez złożenie tych trzech obrotów wokół osi odpowiednio o kąty φ , Θ i ψ , opisuje macierz obrotu, której elementy są dane przez:

$$[R(\varphi, \Theta, \psi)]_{ij} = d_{ik} b_{kl} a_{lj}.$$

Czytelnik może sprawdzić, że wypadkowa macierz ma postać następującą: $R(\varphi, \Theta, \psi) =$

$$= \begin{bmatrix} \cos\varphi \cos\Theta \cos\psi - \sin\varphi \sin\psi & \sin\varphi \cos\Theta \cos\psi + \cos\varphi \sin\psi & -\sin\Theta \cos\psi \\ -\cos\varphi \cos\Theta \sin\psi - \sin\varphi \cos\psi & -\sin\varphi \cos\Theta \sin\psi + \cos\varphi \cos\psi & \sin\Theta \sin\psi \\ \cos\varphi \sin\Theta & \sin\varphi \sin\Theta & \cos\Theta \end{bmatrix}. \quad (1.25)$$

Występujące tu kąty φ , Θ , ψ nazywamy *kątami Eulera*. Podaje się bardzo różne definicje tej macierzy — małe jest prawdopodobieństwo, że macierze pełnego obrotu podane przez dwóch różnych autorów będą takie same. Zauważmy, że $R(\varphi, \Theta, 0) = R(\varphi, \Theta)$ i $R(\varphi, 0, 0) = R(\varphi)$. Czytelnik może przy okazji zapamiętać, że wyznacznik macierzy $R(\varphi, \Theta, \psi)$ jak i wszystkich innych macierzy obrotu jest równy 1. Pokażemy to w rozdziale 4.

Początkowo wprowadziliśmy wektor jako uporządkowaną trójkę liczb. Prawo transformacyjne wyrażające składowe wektora w jednym układzie współrzędnych przez jego składowe w innym układzie mówi nam, że jeżeli ograniczymy się do fizycznych wektorów, to przy obrocie układu współrzędnych ($K \rightarrow K'$) wektor będzie miał w obróconym układzie

składowe o innych wartościach liczbowych. Tak więc jesteśmy zmuszeni uznać, że w rzeczywistości wektor jest czymś więcej niż uporządkowaną trójką liczb. Jest to raczej zbiór uporządkowanych trójek związanych ze sobą w określony sposób. Mimo to można określać wektor przez podanie trzech uporządkowanych liczb, lecz należy pamiętać, że ta trójka liczb jest wyróżniona w dowolnym zbiorze trójek liczb przez włączenie jako części definicji prawa transformacji przy obrocie układu współrzędnych. To prawo mówi, jak zmienia się każdy wektor, gdy zmienia się układ współrzędnych. Tak więc wektor fizyczny może być reprezentowany przez nieskończenie wiele uporządkowanych trójek liczb. Konkretna trójka zależy od orientacji układu współrzędnych względem obserwatora. Jest to bardzo ważne, ponieważ rezultat fizyczny musi być taki sam, niezależnie od miejsca obserwacji, tzn. niezależnie od orientacji układu współrzędnych. Tak będzie, jeżeli dane prawo fizyczne zawiera wektory po obu stronach równania. Zatem z tego punktu widzenia prawo transformacyjne (1.11) i warunek ortogonalności (1.9) mogą być użyte do *definiowania* wektorów. Jest to naturalny punkt wyjścia do analizy tensorowej.

Z tego, że transformacje ortogonalne są liniowe i jednorodne wynika, że suma wektorów jest wektorem i będzie się transformować przy transformacjach ortogonalnych zgodnie z (1.11). Tak więc, jeżeli w jednym układzie jest spełnione równanie $\mathbf{x} = \alpha \mathbf{y}$ (np. $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$), gdzie α jest skalar, to jest ono spełnione w każdym układzie, który jest związany z początkowym układem przekształceniem ortogonalnym. Może czytelnik zechce przeprowadzić formalny dowód tego twierdzenia.

Udowodnimy teraz proste, ale bardzo ważne twierdzenie.

Twierdzenie. Iloczyn skalarny jest niezmienniczy względem przekształceń ortogonalnych.

Dowód. Widać, że to twierdzenie jest na pewno prawdziwe, jeżeli badamy geometryczną definicję iloczynu skalarnego, gdyż długości wektorów i kąty między nimi nie zmieniają się podczas obrotu osi. Algebraiczny dowód jest mniej przejrzysty, ale pozwala na kilka ważnych uogólnień. Mamy bowiem

$$\mathbf{x}' \cdot \mathbf{y}' = x'_i y'_i = a_{ij} x_j a_{ik} y_k = a_{ij} a_{ik} x_j y_k = \delta_{jk} x_j y_k = x_j y_j = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y},$$

co stanowi dowód twierdzenia.

A więc skalary ϕ są niezmiennicze względem obrotów

$$\phi' = \phi, \tag{1.26}$$

a składowe wektora przekształcają się zgodnie z

$$x'_i = a_{ij} x_j. \tag{1.27}$$

Można bardzo łatwo rozszerzyć te pojęcia i wprowadzić tak zwany *tensor kartezyjski drugiego rzędu*. W przestrzeni trójwymiarowej jest to zbiór 9 składowych T_{ij} , które przy przekształceniach ortogonalnych zachowują się zgodnie z następującym prawem

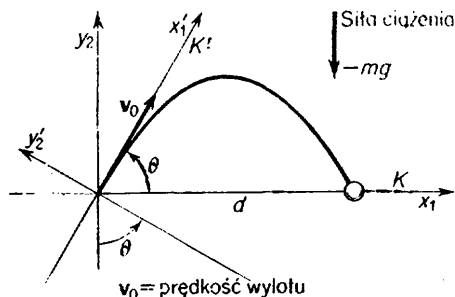
$$T'_{ij} = a_{im} a_{jn} T_{mn}.$$

Wektor jest tensorem pierwszego rzędu, a skalar jest tensorem rzędu zerowego. Uogólnienie na tensory wyższego rzędu jest oczywiście możliwe, ale odkładamy dalszą dyskusję tych zagadnień do § 1.8.

Znaczenie opisywania tych wielkości poprzez ich własności transformacyjne wiąże się z żądaniem, by teorie fizyczne były niezmiennicze względem obrotów układu współrzędnych. Odchylenie osi współrzędnych nie może wpłynąć na uzyskiwane przez nas wyniki

fizyczne. Mówiąc inaczej, obserwatorzy śledzący sytuację w różnych układach współrzędnych muszą się zgadzać co do wszystkich fizycznych rezultatów. Na przykład, możemy obserwować lot pocisku (rys. 1.6) zarówno z układu K jak i K' . W układzie K drugie prawo Newtona mówi, że $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$ i mamy następujące równania ruchu

$$m\ddot{x}_1 = 0, \quad m\ddot{x}_2 = -mg.$$



Rys. 1.6. Paraboliczny tor pocisku obserwowany w układach współrzędnych K i K'

Przyjmując początkowe warunki ($t = 0$)

$$\begin{aligned} x_i(0) &= 0, \quad i = 1, 2, \\ \dot{x}_1(0) &= v_0 \cos \Theta, \\ \dot{x}_2(0) &= v_0 \sin \Theta, \end{aligned}$$

znajdujemy tor w układzie K

$$x_2 = \frac{-g}{2v_0^2 \cos^2 \Theta} x_1^2 + \operatorname{tg} \Theta x_1.$$

W układzie K' prawo Newtona ma postać $\mathbf{F}' = m\mathbf{a}'$ i równania ruchu są dane przez

$$m\ddot{x}'_1 = -mg \sin \Theta, \quad m\ddot{x}'_2 = -mg \cos \Theta.$$

Początkowe warunki są następujące:

$$\begin{aligned} x_i(0) &= 0, \quad i = 1, 2, \\ \dot{x}'_1(0) &= v_0, \\ \dot{x}'_2(0) &= 0, \end{aligned}$$

a tor jest dany równaniem

$$x'_1 = x'_2 \operatorname{tg} \Theta + v_0 \left(\frac{2x'_2}{-g \cos \Theta} \right)^{1/2}$$

Czy równania te wyrażone w zmiennych primowanych i nieprimowanych opisują ten sam fizyczny tor? Oczywiście, inaczej bowiem prawa Newtona nie dostarczałyby opisu niezależnego od układu. Pozostawia się czytelnikowi rozproszenie wątpliwości, czy wszystko jest w porządku.

Można postawić sobie ważne pytanie, po co to wszystko się robi. Gdzie dokładnie w prawie Newtona wbudowana jest niezależność od układu w przypadku, gdy mamy obracający się układ współrzędnych? Odpowiedź na to jest następująca: dwa wektory,

które są równe w jednym układzie, powiedzmy K , są równe i w obracającym się układzie K' . *Gwarantuje* to liniowy, jednorodny charakter praw transformacyjnych dla składowych wektora. Zamiast otrzymać równania ruchu w K' przez obserwację fizycznej sytuacji w tym układzie, moglibyśmy otrzymać to z równań ruchu danych w K przez zastosowanie macierzy obrotu do odpowiednich wektorów — sił i przyspieszeń. Jest rzeczą pouczającą wyprowadzić to choć raz w życiu.

Najistotniejszym punktem jest tu fakt, że po obu stronach równania występują wielkości wektorowe; tak więc przy obrotach wektorów bazy obie strony transformuje się w jednaki sposób. Jeżeli po jednej stronie byłyby dwie liczby, które pozostają stałe podczas obrotu (takie dwie liczby nie mogłyby być składowymi wektora), podczas gdy druga strona transformowałaby się jak wektor, równanie miałoby różne przewidywania. Świat jest niezależny od nachylenia naszego układu współrzędnych i my od początku włączamy tę izotropię przestrzeni w nasze teorie w założeniu, że wszystkie człony równania muszą być tensorami tego samego rzędu: np. tensorami drugiego rzędu, wektorami lub skalarami.

Innym punktem godnym uwagi jest fakt, że ponieważ otrzymujemy takie same rezultaty fizyczne w każdym układzie, możemy rozwiązywać problemy w takim układzie, w którym rozwiązuje się je najprościej — w naszym przypadku w układzie K . W ogólności, możemy dowieść słuszności równania tensorowego w jakimś szczególnym układzie i od razu wiemy, że jest ono słuszne w każdym układzie.

Podsumowując: niezmienniczość praw fizycznych przy transformacjach ortogonalnych przestrzennego układu współrzędnych wymaga, aby wszystkie człony równania były tensorami tego samego rzędu. Widzimy więc, że człony te są *kowariantne* względem przekształceń ortogonalnych, to znaczy są one zmienne równocześnie.

Zajmiemy się później transformacją Lorentza, transformacją ortogonalną w czterowymiarowej przestrzeni (czasoprzestrzeni lub przestrzeni Minkowskiego) i znów przekonamy się, że wszystkie człony równania będą tensorami (w tym wypadku czterowektorami) tego samego rzędu. Zapewnia to niezmienniczość praw fizycznych względem transformacji Lorentza; to jest dla wszystkich obserwatorów poruszających się ze stałą prędkością względną.

1.5. ILOCZYN WEKTOROWY

Iloczyn wektorowy (iloczyn z krzyżykiem) dwóch wektorów x i y jest wektorem — jak można się spodziewać — i zapisuje się go $z \equiv x \times y$. W języku geometrycznym definiujemy długość wektora następująco:

$$|z| = |x \times y| = |x| |y| \sin \theta,$$

gdzie θ jest kątem mierzonym od x do y w ten sposób, że $\theta \leq \pi$. Wektor z jest zdefiniowany jako wektor prostopadły do płaszczyzny zawierającej x i y i skierowany w kierunku danym przez regułę prawej dłoni zastosowaną do x i y (palce zamykające się w kierunku kąta θ , tzn. od x do y , kciuk daje kierunek z). Przy zamykaniu dłoni od x do y kciuk ustawiony jest do góry, gdy zaś zamykać będziemy palce od y do x , kciuk będzie skierowany do dołu (pamiętajmy, że $\theta \leq \pi$). Dlatego też iloczyn wektorowy antykomutuje:

$$(x \times y) = -(y \times x).$$

Stąd $\mathbf{x} \times \mathbf{x} = 0$ (co jest oczywiste w opisie geometrycznym, ponieważ w tym przypadku $\sin 0 = 0$).

Jako przykład iloczynu wektorowego zbadamy grupę ortogonalnych wektorów bazy w prawoskrętnym układzie współrzędnych z rys. 1.2. Jak wynika z definicji iloczynu wektorowego, wektory bazy spełniają równanie

$$\mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j = \mathbf{e}_k, \quad (1.28)$$

gdzie i, j, k są parzystą permutacją 1, 2 i 3. Nieparzystość i parzystość permutacji liczb (1, 2, 3) związane są z nieparzystością lub parzystością liczby przestawień sąsiednich liczb, potrzebną do otrzymania uporządkowania (1, 2, 3). Tak więc (3, 1, 2) jest parzystą permutacją, a (3, 2, 1) jest nieparzystą permutacją. W związku z tym definiujemy symbol ε_{ijk} , który będzie równie użyteczny jak delta Kroneckera:

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{jeżeli } (i, j, k) \text{ jest parzystą permutacją liczb } (1, 2, 3), \\ -1 & \text{jeżeli } (i, j, k) \text{ jest nieparzystą permutacją liczb } (1, 2, 3), \\ 0 & \text{w pozostałych przypadkach (jeżeli występuje dwa} \\ & \text{lub więcej jednakowych wskaźników)}. \end{cases} \quad (1.29)$$

Istnieje bardzo użyteczna identyczność wiążąca symbol ε_{ijk} i deltę Kroneckera:

$$\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{klm} = \delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{jl} \delta_{im}. \quad (1.30)$$

Sprawdzenie pozostawiamy czytelnikowi. Z równania (1.29) wynika natychmiast, że

$$\varepsilon_{ijk} = \varepsilon_{kij} = \varepsilon_{jki} = -\varepsilon_{jik} = -\varepsilon_{kji} = -\varepsilon_{ikj}.$$

Możemy teraz matematycznie zdefiniować skrętność układu współrzędnych: mówimy, że zbiór wektorów bazy przedstawia prawoskrętny, kartezjański układ współrzędnych, jeżeli

$$\mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j = \varepsilon_{ijk} \mathbf{e}_k. \quad (1.31)$$

Układ współrzędnych jest lewoskrętny, gdy $\mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j = -\varepsilon_{ijk} \mathbf{e}_k$. Zastąpienie każdego wektora bazy jego odbiciem zwierciadlanym zmienia skrętność układu współrzędnych na przeciwną. W całej książce będziemy stosować układy prawoskrętne.

Podamy teraz algebraiczną definicję iloczynu wektorowego:

$$\mathbf{z} = \mathbf{x} \times \mathbf{y} = x_j \mathbf{e}_j \times y_k \mathbf{e}_k = x_j y_k \mathbf{e}_j \times \mathbf{e}_k = x_j y_k \varepsilon_{jki} \mathbf{e}_i = \varepsilon_{ijk} x_j y_k \mathbf{e}_i. \quad (1.32)$$

(Założyliśmy tu, że iloczyn wektorowy jest rozłączny). Widać, że i -ta składowa wektora \mathbf{z} jest równa

$$z_i = \mathbf{z} \cdot \mathbf{e}_i = \varepsilon_{ijk} x_j y_k. \quad (1.33)$$

Przy użyciu tej symboliki dowody różnych tożsamości wektorowych stają się bardzo proste.

Przykład 1.3. Aby wykazać tożsamość wektorową

$$\mathbf{x} \times (\mathbf{y} \times \mathbf{z}) = \mathbf{y}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{z}) - \mathbf{z}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}), \quad (1.34)$$

musimy udowodnić równość i -tych składowych dwóch wyrażeń

$$\begin{aligned} [\mathbf{x} \times (\mathbf{y} \times \mathbf{z})]_i &= \varepsilon_{ijk} x_j \varepsilon_{klm} y_l z_m = (\delta_{il} \delta_{jm} - \delta_{jl} \delta_{im}) x_j y_l z_m = y_i x_j z_j - z_i x_j y_j = \\ &= [\mathbf{y}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{z}) - \mathbf{z}(\mathbf{x} \cdot \mathbf{y})]_i. \end{aligned}$$

Jeszcze łatwiej można udowodnić tożsamość

$$\mathbf{x} \cdot (\mathbf{y} \times \mathbf{z}) = \mathbf{z} \cdot (\mathbf{x} \times \mathbf{y}) = \mathbf{y} \cdot (\mathbf{z} \times \mathbf{x}). \quad (1.35)$$

Dowód pozostawiamy czytelnikowi.

W rozdziale 1.4 badając iloczyny skalarne wektorów baz otrzymaliśmy relacje ortogonalności

$$a_{ik}a_{jk} = a_{ki}a_{kj} = \delta_{ij}. \quad (1.36)$$

Istnienie związków między elementami macierzy obrotu oznacza, że elementy a_{ij} nie są liniowo niezależne. Prosta metoda rozwiązania równań (1.36) polega na obliczeniu składowych wektorowego związku, zachodzącego dla wektorów bazy. l -ta składowa równania

$$\mathbf{e}_i \times \mathbf{e}_j = \varepsilon_{ijk} \mathbf{e}_k,$$

wzięta w bazie primowanej jest równa

$$\varepsilon_{lmn}(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_m')(\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_n') = \varepsilon_{ijk}(\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{e}_i');$$

zastosowaliśmy tu równanie (1.33) w bazie primowanej. Z uwagi na to, że $a_{ij} = \mathbf{e}_i' \cdot \mathbf{e}_j$ otrzymujemy natychmiast, że

$$\varepsilon_{ijk}a_{lk} = \varepsilon_{lmn}a_{mi}a_{nj}. \quad (1.37)$$

Powyższy wzór pozwala wyrazić każdy element a_{ij} przez inne elementy, ponieważ po lewej stronie równania mamy dla wybranych wartości i oraz j tylko jako człon.

Możemy zastosować ten wynik, aby wykazać, że iloczyn wektorowy dwóch wektorów transformuje się tak jak wektor. Załóżmy, że dwa obiekty \mathbf{x} i \mathbf{y} przekształcają się przy transformacjach ortogonalnych jak wektory

$$x'_j = a_{jn}x_n \quad \text{i} \quad y'_k = a_{km}y_m.$$

Mamy pokazać, że $\mathbf{z} = \mathbf{x} \times \mathbf{y}$ też przekształca się jak wektor, tzn. że

$$z'_i \equiv (\mathbf{x}' \times \mathbf{y}')_i = a_{ij}z_j.$$

Korzystając z równania (1.37) i odpowiednio dobierając nieme wskaźniki można to łatwo udowodnić. Mamy bowiem

$$z'_i = \varepsilon_{ijk}x'_jy'_k = \varepsilon_{ijk}a_{jn}x_n a_{km}y_m = \varepsilon_{nmi}a_{il}x_n y_m = a_{ij}\varepsilon_{jnm}x_n y_m = a_{ij}z_j.$$

Chociaż iloczyn wektorowy przy obrotach transformuje się jak wektor, jednak nie zawsze zachowuje się jak zwykły wektor. Jest on mimo wszystko *iloczynem* dwóch wektorów. Każdy z wektorów wchodzących do iloczynu zmienia znak, jeżeli zastąpimy wszystkie wektory bazy \mathbf{e}_i wektorami $-\mathbf{e}_i$. Taka zmiana nosi nazwę *inwersji* układu współrzędnych.

W dwuwymiarowej przestrzeni inwersja jest po prostu obrotem o 180° . W trzech wymiarach jednakże inwersja jest równoważna zmianie układu prawoskrętnego na lewoskrętny. Analogiczny rezultat jest słuszny dla przestrzeni o wyższym wymiarze. W parzystowym wymiarowej przestrzeni inwersję otrzymamy przez obrót układu współrzędnych, podczas gdy w przestrzeniach o nieparzystej liczbie wymiarów inwersja wymaga *odbicia* wektorów bazy w środku układu współrzędnych.

Wektory typu wektora położenia \mathbf{r} i pędu \mathbf{p} zmieniają znak przy inwersji. Nazywamy je wektorami *polarnymi* lub po prostu wektorami. Ale iloczyn wektorowy dwóch wektorów polarnych, tak jak $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, nie zmienia znaku przy inwersji. Takie wektory nazywamy

wektorami *aksjalnymi* lub *pseudowektorami*. Iloczyn skalarny wektora polarnego i pseudowektora jest *pseudoskalarem*; zmienia znak przy inwersji, podczas gdy skalar nie zmienia znaku.

Tak jak równania w fizyce klasycznej nie mogą porównywać tensorów różnych rzędów, ponieważ mają one różne własności transformacyjne przy obrotach, nie możemy również porównywać pseudowektorów z wektorami lub pseudoskalarów ze skalarami, ponieważ obiekty te zachowują się różnie przy inwersji. Na przykład równanie

$$\frac{d\mathbf{L}}{dt} = \mathbf{r} \times \mathbf{F} = \mathbf{N}$$

wiąże dwa pseudowektory — moment pędu i moment siły.

1.6. WEKTOROWY OPIS PRAW KEPLERA

Aby zilustrować możliwości i użyteczność metody wektorowej, posłużymy się nią przy opisie orbit Keplera. Podejście to różni się w sposób zasadniczy od podejścia opartego na rozwiązywaniu różniczkowych równań ruchu, przedstawionego w książce H. Goldsteina*.

Najpierw udowodnimy drugie prawo Keplera, które mówi, że w polu sił centralnych moment pędu jest stały. Różniczkując moment pędu

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$$

po czasie, otrzymujemy

$$\dot{\mathbf{L}} = \dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{p} + \mathbf{r} \times \dot{\mathbf{p}}.$$

Pierwszy iloczyn znika, ponieważ $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$, a więc \mathbf{r} i \mathbf{p} są równoległe. Drugi iloczyn jest po prostu równy $\mathbf{r} \times \mathbf{F}$, co wynika z drugiego prawa Newtona, znika zatem dla wszystkich sił skierowanych wzdłuż wektora położenia, to znaczy dla wszystkich sił centralnych. Tak więc w ruchu pod wpływem sił centralnych wektor $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v}$ jest wektorem stałym. Jeżeli tak, to wektor położenia \mathbf{r} , a zatem i cała orbita, leży w ustalonej płaszczyźnie w przestrzeni trójwymiarowej. Wynik ten jest właściwie treścią drugiego prawa Keplera, które często jest formułowane jako prawo zachowania prędkości polowej $|\mathbf{L}|/2m$.

Powracamy teraz do znanych, lecz bardzo specyficznych sił centralnych — grawitacyjnych i elektrostatycznych. Dla takich sił drugie prawo Newtona przyjmuje postać

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = -\frac{k}{r^2} \mathbf{n}, \quad (1.38)$$

gdzie $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ jest wektorem jednostkowym w kierunku promienia \mathbf{r} , k jest stałą równą w przypadku sił grawitacyjnych Gm_1m_2 , a w przypadku sił elektrostatycznych q_1q_2 (w jednostkach CGS).

Zauważmy najpierw, że

$$\mathbf{v} = \dot{\mathbf{r}} = \dot{r}\mathbf{n} + r\dot{\mathbf{n}}.$$

* H. Goldstein, *Classical Mechanics*. Reading, Mass.: Addison-Wesley, 1950 (rozdział 3).

Wstawiając ten wzór do definicji momentu pędu otrzymamy

$$\mathbf{L} = mr^2(\mathbf{n} \times \dot{\mathbf{n}}). \quad (1.39)$$

Zbadamy teraz pochodną

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{v} \times \mathbf{L}) = \dot{\mathbf{v}} \times \mathbf{L} = \frac{-k}{mr^2}(\mathbf{n} \times \mathbf{L}) = -k[\mathbf{n}(\dot{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{n}) - \dot{\mathbf{n}}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n})].$$

Wykorzystaliśmy tu stałość momentu pędu \mathbf{L} , równania (1.38) i (1.39) oraz tożsamość wektorową (1.34). Ponieważ $\mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1$, zatem $\dot{\mathbf{n}} \cdot \mathbf{n} = 0$. Mamy więc następującą równość

$$\frac{d}{dt}(\mathbf{v} \times \mathbf{L}) = k\dot{\mathbf{n}}.$$

Całkując to otrzymamy

$$\mathbf{v} \times \mathbf{L} = k\mathbf{n} + \mathbf{C}, \quad (1.40)$$

gdzie \mathbf{C} oznacza pewien stały wektor. Tym sposobem wektor $\mathbf{C} = \mathbf{v} \times \mathbf{L} - k\mathbf{n}$ jest wektorową stałą ruchu. Później zobaczymy, że wektor \mathbf{C} leży wzdłuż wielkiej osi orbity i ustala położenie tej osi.

Korzystając z (1.35) i (1.40) zbudujemy teraz wielkość skalarną

$$L^2 = \mathbf{L} \cdot (\mathbf{r} \times m\mathbf{v}) = m\mathbf{r} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{L}) = mr(k + C\cos\theta), \quad (1.41)$$

gdzie kąt θ mierzymy w kierunku od wektora \mathbf{C} do \mathbf{r} . Wyliczając stąd r otrzymujemy

$$r = \frac{L^2/km}{1 + C/k\cos\theta} = \frac{A}{1 + \varepsilon\cos\theta}. \quad (1.42)$$

Powyższe równanie opisuje w zmiennych biegunowych krzywą stożkową z jednym ogniskiem w początku układu współrzędnych. Kąt θ jest mierzony od stałego wektora \mathbf{C} (który możemy przyjąć za oś x) do wektora \mathbf{r} ; ε reprezentuje *mimośród* krzywej, zależnie od jego wartości krzywa stożkowa jest hiperbolą, parabolą, elipsą lub okręgiem. Mimośród można łatwo wyrazić poprzez stałe ruchu

$$\varepsilon = \frac{|\mathbf{C}|}{k} = \frac{1}{k}|\mathbf{v} \times \mathbf{L} - k\mathbf{n}| = \frac{1}{k}[|\mathbf{v} \times \mathbf{L}|^2 + k^2 - 2k\mathbf{n} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{L})]^{1/2}.$$

Teraz $|\mathbf{v} \times \mathbf{L}|^2 = v^2 L^2$, ponieważ \mathbf{v} jest prostopadłe do \mathbf{L} . Stosując równanie (1.41) mamy

$$\varepsilon = \frac{1}{k} \left[v^2 L^2 + k^2 - \frac{2kL^2}{mr} \right]^{1/2} = \left[1 + \frac{2L^2}{mk^2} \left(\frac{m}{2} v^2 - \frac{k}{r} \right) \right]^{1/2} = \left[\frac{1 + 2L^2 E}{mk^2} \right]^{1/2},$$

gdzie E jest stałą energią układu. Możemy teraz wyprowadzić pierwsze prawo Keplera (równanie orbit)

$$r = \frac{L^2/km}{1 + (1 + 2L^2 E/mk^2)^{1/2} \cos\theta}. \quad (1.43)$$

Wektor \mathbf{C} leży wzdłuż wielkiej osi w kierunku od ogniska do perihelium, a jego długość jest dana wzorem*

$$|\mathbf{C}| = k\varepsilon = k(1 + 2L^2 E/mk^2)^{1/2}.$$

* Punkt leżący na krzywej w najmniejszej odległości od ogniska nosi nazwę *perihelium*, natomiast punkt o największej odległości nazywa się *aphelium* (przyp. tłum.).

Zauważmy, że wektor ten znika dla okręgu ($\varepsilon = 0$), ponieważ nie ma tu żadnej wyróżnionej osi. Istnienie innych całek ruchu (obok energii i momentu pędu) jest możliwe dzięki degeneracji ruchu, właściwej dla potencjału Coulomba k/r^* . Degeneracja ta jest zapewne bardziej znana w analogicznym zagadnieniu mechaniki kwantowej — atomie wodoru, niż w klasycznej teorii orbit. Przedstawiona tu metoda wektorowa bazuje na istnieniu specjalnej całki ruchu i dlatego nie może w ogólnym przypadku zastąpić zwykłych metod opartych na różniczkowych równaniach ruchu.

1.7. RÓŻNICZKOWANIE PÓL SKALARNYCH I WEKTOROWYCH

Jeżeli każdemu punktowi x_i ($i = 1, 2, 3$) w pewnym obszarze przestrzeni przyporządkowany jest skalar $\varphi(x_i)$ lub wektor $V(x_i)$, to mamy pole skalarne lub wektorowe. Typowymi polami skalarnymi są rozkłady temperatur lub gęstości w pewnej objętości oraz potencjał elektrostatyczny. Typowymi polami wektorowymi są siły grawitacyjne, prędkość w każdym punkcie poruszającej się cieczy lub natężenie pola magnetycznego. Pola są funkcjami zdefiniowanymi w punktach fizycznej przestrzeni i mogą zależeć lub nie zależeć od czasu. W tym paragrafie zdefiniujemy różne operacje różniczkowania pól skalarnych i wektorowych — gradient, dywergencję, rotację i laplasjan. Zbadamy kształt tych operatorów w krzywoliniowych układach współrzędnych. Zbadamy również, jaki typ pola „mierzy” każdy z tych operatorów. Gdy dowiemy się, jakiego typu informacje wydobywają z danego pola różne operatory, będziemy mogli lepiej zrozumieć fizyczną treść zawartą w podstawowych prawach fizyki klasycznej.

Przy rozwiązywaniu określonych problemów fizycznych współrzędne sferyczne, walcowe lub jeszcze inne, często przewyższają użytecznością współrzędne kartezjańskie. Na przykład, znajdowanie potencjału elektrostatycznego między dwiema naładowanymi współśrodkowymi powierzchniami kulistymi jest dużo łatwiejsze we współrzędnych sferycznych niż we współrzędnych kartezjańskich lub walcowych, gdyż we współrzędnych sferycznych szukany potencjał może być wyrażany jako funkcja tylko jednej z trzech współrzędnych, mianowicie r .

Formalnie można z definicji operacji różniczkowania we współrzędnych kartezjańskich otrzymać, korzystając z praw transformacyjnych dla współrzędnych, definicje tych operacji w innych układach współrzędnych. Alternatywna metoda polega na wykorzystaniu definicji geometrycznej, niezależnej od współrzędnych. Pokażemy później ogólne wyprowadzenie słuszne dla każdego układu ortogonalnych współrzędnych krzywoliniowych q_i związanych z odległością ds przez element liniowy lub metrykę

$$ds^2 = h_1^2 dq_1^2 + h_2^2 dq_2^2 + h_3^2 dq_3^2. \quad (1.44)$$

Jeżeli tylko jedna z trzech ortogonalnych współrzędnych q_1, q_2, q_3 zmienia się, odpowiedni element liniowy może być zapisany w postaci

$$ds_i = h_i dq_i, \quad i = 1, 2, \text{ lub } 3 \text{ (bez sumowania)}. \quad (1.45)$$

W tablicy 1.1 przedstawiono trzy znane układy współrzędnych i jeden układ mniej znany.

* Znakomita dyskusja tego problemu zawarta jest w pracy Davida F. Greenberga: Accidental Degeneracy, *Am. J. Phys.* 34, 1101 (1966). Przedstawiono tu szczegółową dyskusję własności wektora C , nazywanego wektorem Runge-Lenza.

Tablica 1.1.

Nazwa układu: współrzędnych	kartezjański	walcowy	sferyczny	paraboliczny*
q_1	x	r	r	ξ
q_2	y	Θ	Θ	η
q_3	z	z	φ	φ
h_1	1	1	1	$\sqrt{\xi^2 + \eta^2}$
h_2	1	r	r	$\sqrt{\xi^2 + \eta^2}$
h_3	1	1	$r \sin \Theta$	$\xi \eta$

* Współrzędne paraboliczne stosuje się przy kwantowomechanicznym opisie atomu wodoru oraz przy rozpatrywaniu efektu Starka.

Gradient

Gradient jest operatorem różniczkowym zdefiniowanym na polu skalarnym φ . Gradient pola skalarnego (zapisujemy go $\text{grad} \varphi$) jest wektorowym polem zdefiniowanym przez warunek

$$\text{grad} \varphi \cdot ds = d\varphi, \quad (1.46)$$

gdzie $d\varphi$ jest różniczkową zmianą φ (różniczką) odpowiadającą dowolnemu przesunięciu przestrzennemu ds . Stąd widać, że

$$d\varphi = |\text{grad} \varphi| |ds| \cos \Theta, \quad (1.47)$$

gdzie Θ jest kątem między wektorem $\text{grad} \varphi$ a wektorem przemieszczenia ds . Oczywiście prędkość zmian φ jest największa, gdy różniczkowe przesunięcie zachodzi w kierunku $\text{grad} \varphi$, to znaczy kiedy $\Theta = 0$ i $\cos \Theta$ ma swoją największą wartość równą 1. To definiuje kierunek wektora $\text{grad} \varphi$ w każdym punkcie przestrzeni: jest to kierunek największej szybkości zmian φ z tego punktu, to jest kierunek, w którym $d\varphi/ds$ jest największe. Z równania (1.47) wynika również, że wielkość wektora $\text{grad} \varphi$ jest po prostu największą szybkością zmian, tzn. prędkością zmian $|d\varphi/ds|$ w kierunku, w którym φ zmienia się najgwałtowniej.

Możemy to podsumować mówiąc, że gradient φ jest pochodną kierunkową w kierunku największej szybkości zmian φ . Na przykład, niech φ będzie wzniesieniem ponad poziom morza punktów na powierzchni góry. Wielkość φ będzie więc proporcjonalna do potencjału grawitacyjnego. Liniami ekwipotencjalnymi są tu linie stałych φ lub inaczej stałej wysokości. Przesunięcie wzdłuż tych linii nie zmienia φ ($d\varphi = 0$), lecz przesunięcia prostopadłe do tych linii zachodzą w kierunku najgwałtowniejszych zmian wysokości i $d\varphi$ przybiera swoją wartość maksymalną. Wektor $\text{grad} \varphi$ jest zawsze prostopadły do linii lub powierzchni ekwipotencjalnych.

Ogólna postać i -tej składowej gradientu wynika z definicji (1.46) i (1.45). Mamy

$$(\text{grad} \varphi)_i = \lim_{\Delta s_i \rightarrow 0} \frac{\varphi(q_i + \Delta s_i) - \varphi(q_i)}{\Delta s_i} = \frac{1}{h_i} \frac{\partial \varphi}{\partial q_i}. \quad (1.48)$$

Wprowadzimy oznaczenie

$$\frac{\partial}{\partial q_i} \equiv \partial_i. \quad (1.49)$$

Teraz

$$(\text{grad } \varphi)_i = \frac{1}{h_i} \partial_i \varphi. \quad (1.50)$$

We współrzędnych kartezjańskich, gdzie $h_i = 1$, mamy

$$(\text{grad } \varphi)_i = \partial_i \varphi, \quad (1.51)$$

i w konsekwencji

$$\text{grad } \varphi = \mathbf{e}_i \partial_i \varphi, \quad (1.52)$$

gdzie zastosowaliśmy sumowanie od 1 do 3. Równanie to często zapisuje się przy pomocy specjalnego symbolu ∇ , nazywanego operatorem del*; we współrzędnych kartezjańskich jest on zdefiniowany następująco:

$$\nabla_{\mathbf{K}} \equiv \mathbf{e}_i \partial_i. \quad (1.53)$$

Przy użyciu tego symbolu gradient we współrzędnych kartezjańskich przedstawia się następująco

$$\text{grad } \varphi = \nabla_{\mathbf{K}} \varphi. \quad (1.54)$$

Symbol ∇ jest często używany do niezależnego od współrzędnych definiowania operatora gradientu:

$$\text{grad } \varphi \equiv \nabla \varphi = \frac{1}{h_1} (\partial_1 \varphi) \mathbf{e}_1 + \frac{1}{h_2} (\partial_2 \varphi) \mathbf{e}_2 + \frac{1}{h_3} (\partial_3 \varphi) \mathbf{e}_3, \quad (1.55)$$

gdzie \mathbf{e}_i jest wektorem jednostkowym współrzędnej q_i . Symbol ∇ jest operatorem wektorowym, lecz nie może być utożsamiany z wektorem. Różni się on od wektora tak jak d/dx różni się od liczby. ∇ nabiera znaczenia dopiero wtedy, kiedy działa na funkcję skalarną lub wektorową. Operator ten bywa często traktowany formalnie jak wektor, bo chociaż nie posiada długości, przy obrotach transformuje się jak zwykły wektor.

Dywergencja

Dywergencja jest operatorem różniczkowym określonym na polu wektorowym \mathbf{V} . Dywergencja pola wektorowego, $\text{div } \mathbf{V}$, jest polem skalarnym. Dywergencja w punkcie x_i jest dana wzorem

$$\text{div } \mathbf{V} = \lim_{\Delta\tau \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\tau} \int_{\sigma} \mathbf{V} \cdot d\boldsymbol{\sigma}, \quad (1.56)$$

gdzie $\Delta\tau$ jest elementem objętości ograniczonym powierzchnią σ ; $d\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{n} d\sigma$, gdzie \mathbf{n} jest wektorem jednostkowym, normalnym do infinitezymalnej powierzchni $d\sigma$ (otaczającej punkt x_i) i skierowanym na zewnątrz tej powierzchni. Można pokazać, że definicja ta nie zależy od kształtu $\Delta\tau$. Z powyższej definicji można odczytać sens fizyczny dywergencji pola wektorowego. Dywergencja mierzy w danym punkcie przestrzeni strumień pola wektorowego przechodzący przez infinitezymalną powierzchnię w jednostce objętości lub inaczej mówiąc moc źródła w jednostce objętości.

* W literaturze przyjęto również nazywać ten symbol operatorem nabra (przyp. tłum.).

Udowodnimy teraz twierdzenie Gaussa*, a następnie omówimy kilka szczególnych przykładów.

Twierdzenie to wynika prawie natychmiast z definicji 1.56. Obliczmy całkę z $\text{div} \mathbf{V}$ po skończonej objętości τ . Obszar ten może być rozbity na dowolnie wiele, dowolnie małych obszarów $\Delta\tau_i$. Każdy infitezymalny element powierzchni $d\sigma$, ograniczający obszar $\Delta\tau_i$ występuje w dwóch całkach (po dwóch sąsiednich obszarach). Z uwagi na to, że wektor \mathbf{n} jest dla obu stron powierzchni przeciwnie skierowany, całki po tych obszarach się znoszą. Jedyne elementy powierzchniowe, dla których całki nie kasują się parami, leżą na powierzchni σ skończonego obszaru τ . Tym sposobem otrzymaliśmy twierdzenie Gaussa:

$$\int_{\tau} \text{div} \mathbf{V} d\tau = \int_{\sigma} \mathbf{V} \cdot d\sigma. \quad (1.57)$$

Przedstawimy teraz ważny przykład, ilustrujący działanie operatora dywergencji. **Przykład 1.4.** Niech ustalona w przestrzeni objętość τ o powierzchni σ zawiera ciecz o gęstości ρ poruszającą się z prędkością \mathbf{v} . Masa zawarta w τ jest równa

$$\int_{\tau} \rho d\tau,$$

prędkość zmian masy w objętości τ jest dana przez

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\tau} \rho d\tau.$$

Masa cieczy opuszczająca objętość τ w jednostce czasu jest równa

$$\int_{\sigma} \rho \mathbf{v} \cdot d\sigma = \int_{\tau} \text{div}(\rho \mathbf{v}) d\tau.$$

Zastosowaliśmy tu twierdzenie (1.57). Z zachowania masy wynika, że

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\tau} \rho d\tau + \int_{\tau} \text{div}(\rho \mathbf{v}) d\tau = 0$$

lub inaczej

$$\int_{\tau} \left[\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{v}) \right] d\tau = 0.$$

Aby było to spełnione w dowolnym obszarze τ , musi znikać funkcja podcałkowa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (1.58)$$

Jest to równanie ciągłości lub inaczej równanie zachowania masy. Wyraża ono zachowanie masy, które założyliśmy w tym wyprowadzaniu. Podobne równanie zachodzi dla ładunku, wtedy ρ oznacza gęstość ładunku, a $\rho \mathbf{v} = \mathbf{J}$ jest gęstością prądu.

Przedstawimy teraz definicję dywergencji pola wektorowego, otrzymaną w oparciu o wzór (1.56), w krzywoliniowych współrzędnych ortogonalnych. Musimy obliczyć całkę

* Twierdzenie to często nazywa się twierdzeniem Gaussa–Ostrogradskiego (przyp. tłum.).

ze skierowanej na zewnątrz normalnej składowej $\mathbf{V} \cdot \mathbf{n}$, po infinitezymalnej objętości $\Delta\tau = ds_1 ds_2 ds_3$. Niech objętość ta będzie ograniczona przez sześć powierzchni

$$q_i = a_i \quad \text{i} \quad a_i + \delta q_i \quad \text{dla} \quad i = 1, 2, 3.$$

Całka z $\mathbf{V} \cdot \mathbf{n}$ po powierzchni stałego q_1 w punkcie $q_1 = a_1 + \delta q_1$ jest dana przez

$$\int_{a_2}^{a_2 + \delta q_2} dq_2 \int_{a_3}^{a_3 + \delta q_3} dq_3 h_2(a_1 + \delta q_1, q_2, q_3) h_3(a_1 + \delta q_1, q_2, q_3) V_1(a_1 + \delta q_1, q_2, q_3)$$

(pamiętajmy, że w tym przypadku \mathbf{n} ma zwrot współrzędnej q_1), podczas gdy całka z $\mathbf{V} \cdot \mathbf{n}$ po powierzchni stałego q_1 w punkcie $q_1 = a_1$ jest równa

$$- \int_{a_2}^{a_2 + \delta q_2} dq_2 \int_{a_3}^{a_3 + \delta q_3} dq_3 h_2(a_1, q_2, q_3) h_3(a_1, q_2, q_3) V_1(a_1, q_2, q_3)$$

(tu \mathbf{n} ma zwrot *przeciwny* niż q_1). Dodając oba te człony otrzymujemy

$$\int_{a_2}^{a_2 + \delta q_2} dq_2 \int_{a_3}^{a_3 + \delta q_3} dq_3 [V_1(a_1 + \delta q_1, q_2, q_3) h_2(a_1 + \delta q_1, q_2, q_3) h_3(a_1 + \delta q_1, q_2, q_3) - V_1(a_1, q_2, q_3) h_2(a_1, q_2, q_3) h_3(a_1, q_2, q_3)].$$

Gdy δq_1 staje się małe, możemy to zapisać w postaci

$$\int_{a_2}^{a_2 + \delta q_2} dq_2 \int_{a_3}^{a_3 + \delta q_3} dq_3 \left[\frac{\partial}{\partial q_1} (V_1 h_2 h_3) \right]_{q_1 = a_1} \delta q_1.$$

Na koniec, gdy przyjmiemy, że δq_2 i δq_3 stają się małe, możemy to wyrażenie zastąpić przez

$$\left[\frac{\partial}{\partial q_1} (V_1 h_2 h_3) \right]_{q_i = a_i} \delta q_1 \delta q_2 \delta q_3.$$

Analogiczne wyrażenie otrzymamy dla innych par powierzchni. Dodając te trzy wyrażenia i dzieląc obie strony równania (1.57) przez

$$d\tau = h_1 h_2 h_3 \delta q_1 \delta q_2 \delta q_3,$$

dostajemy ogólny wzór na dywergencję:

$$\operatorname{div} \mathbf{V} = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial (h_2 h_3 V_1)}{\partial q_1} + \frac{\partial (h_3 h_1 V_2)}{\partial q_2} + \frac{\partial (h_1 h_2 V_3)}{\partial q_3} \right]. \quad (1.59)$$

A więc tak jak powinno być, dywergencja pola wektorowego jest polem skalarnym. We współrzędnych kartezjańskich równanie (1.59) sprowadza się do równania

$$\operatorname{div} \mathbf{V} = \partial_i V_i = \nabla_{\mathbf{K}} \cdot \mathbf{V}. \quad (1.60)$$

Iloczyn skalarny symbolu ∇ i pola wektorowego jest często używany do określenia $\operatorname{div} \mathbf{V}$ bez odwoływania się do określonego układu współrzędnych:

$$\operatorname{div} \mathbf{V} = \nabla \cdot \mathbf{V} = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial (h_2 h_3 V_1)}{\partial q_1} + \frac{\partial (h_3 h_1 V_2)}{\partial q_2} + \frac{\partial (h_1 h_2 V_3)}{\partial q_3} \right]. \quad (1.61)$$

Zauważmy, że we współrzędnych krzywoliniowych składowe gradientu i dywergencji, traktowane jako operatory wektorowe, nie są równe, chociaż można je zapisać przy użyciu tego samego symbolu ∇ .

Rotacja

Rotacja jest operacją różniczkową zdefiniowaną na polu wektorowym \mathbf{V} . Oznaczamy ją $\text{rot } \mathbf{V}$. Rotacja pola wektorowego sama jest również polem wektorowym. Określa ją, niezależnie od współrzędnych, następujący wzór

$$(\text{rot } \mathbf{V}) \cdot \mathbf{n} = \lim_{\Delta\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\sigma} \oint_{\lambda} \mathbf{V} \cdot d\lambda, \quad (1.62)$$

gdzie $\Delta\sigma$ jest częścią powierzchni ograniczoną krzywą zamkniętą λ ; $d\lambda = t d\lambda$, gdzie t jest jednostkowym wektorem stycznym do krzywej λ ; $(\text{rot } \mathbf{V}) \cdot \mathbf{n}$ jest składową $\text{rot } \mathbf{V}$ w kierunku wektora \mathbf{n} , to znaczy jest normalną do powierzchni $\Delta\sigma$, a jej zwrot wyznacza reguła prawej dłoni zastosowana do drogi całkowania po λ . Powierzchnie różnych kształtów i orientacji dają równoważne rezultaty, dowód tego pomijamy. Kierunek wektora $\text{rot } \mathbf{V}$ jest dany przez orientację płaskiej przestrzeni, podobnie jak kierunek iloczynu wektorowego. Wykażemy, że $\text{rot } \mathbf{V}$ jest pseudowektorem tak jak iloczyn wektorowy.

Z definicji rotacji wynika bezpośrednio twierdzenie Stokesa. Zbudujmy całkę z $\text{rot } \mathbf{V}$ po skończonej powierzchni σ ograniczonej przez skończoną krzywą λ . Podzielimy teraz powierzchnię na dowolnie dużo dowolnie małych części, z których każda może być traktowana jako nieskończenie mała powierzchnia płaska. Dla każdej takiej nieskończenie małej powierzchni tworzymy całki (1.62), a następnie dodajemy je. Wszystkie wkłady do całek pochodzące z łuków krzywych wewnętrznych znoszą się z wkładami pochodzącymi z łuków sąsiednich nieskończenie małych powierzchni, ponieważ wektor t jest przeciwnie skierowany dla dwu stron łuków. Jedyne łuki, wzdłuż których całki nie znoszą się parami, leżą na granicznej krzywej λ . Tym sposobem otrzymaliśmy twierdzenie Stokesa

$$\int_{\sigma} (\text{rot } \mathbf{V}) \cdot d\sigma = \oint_{\lambda} \mathbf{V} \cdot d\lambda, \quad (1.63)$$

gdzie $d\sigma = \mathbf{n} d\sigma$.

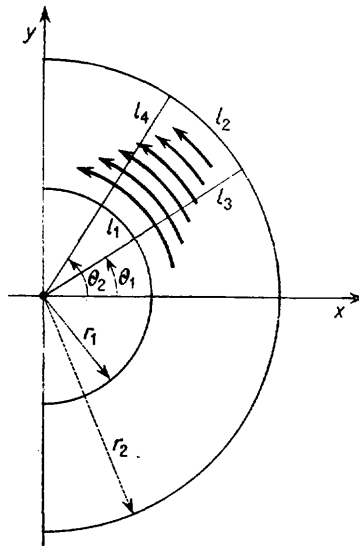
Zilustrujemy teraz poszczególnymi przykładami fizyczne znaczenie rotacji pola wektorowego.

Przykład 1.5. Wiadro wody obraca się ze stałą prędkością kątową wokół osi pionowej \mathbf{k} , przechodzącej przez środek wiadra, przy ustalonej powierzchni wody. Zakładamy, że prędkość wody we współrzędnych walcowych jest równa $\mathbf{v} = \omega r \boldsymbol{\theta}$, gdzie $\boldsymbol{\theta}$ jest wektorem jednostkowym w kierunku wzrostu kąta θ . Obliczmy $\text{rot } \mathbf{v}$ (1.62), przyjmując za krzywą λ okrąg o promieniu r

$$\begin{aligned} \mathbf{k} \cdot \text{rot } \mathbf{v} &= \lim_{\Delta\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta\sigma} \oint_{\lambda} \mathbf{v} \cdot d\lambda = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{1}{\pi r^2} \oint_{\lambda} r\omega \boldsymbol{\theta} \cdot \boldsymbol{\theta} d\lambda = \\ &= \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\omega r}{\pi r^2} \oint_{\lambda} d\lambda = \lim_{r \rightarrow 0} \frac{\omega r}{\pi r^2} (2\pi r) = 2\omega. \end{aligned}$$

Składowa rotacji w kierunku wektora \mathbf{k} jest równa podwojonej prędkości kątowej. Rotacja pola prędkości jest w takim razie miarą prędkości kątowej cieczy. Jeżeli umieścimy w każdym punkcie pola prędkości miniaturowe koło łopatkowe, to jego prędkość kątowa mierzy rotację pola. Jeżeli się ono nie porusza, to składowa rotacji w kierunku prostopadłym do płaszczyzny koła jest równa zero. Jednakże nawet w wypadku przepływu prostoliniowego mogą wystąpić wiry. Na przykład z powodu tarcia woda płynąca w rurze porusza się wolniej wzdłuż ściany rury niż w środku. Dlatego też koło łopatkowe będzie się obracało nawet wtedy, gdy woda płynie wzdłuż linii prostej. Z drugiej zaś strony rotacja może być równa zero dla przepływu krzywoliniowego. Jeżeli koło łopatkowe ustawione jest w dowolnym wirze, w którym ciecz porusza się z prędkością $\mathbf{v} = \Theta v_0(a/r)$ (współrzędne walcowe a i v_0 są stałymi), pole prędkości będzie miało rotację równą zero we wszystkich punktach z wyjątkiem punktów, dla których $r = 0$ i koło łopatkowe nie będzie się poruszało. Aby to pokazać, wyliczymy *explicite* $\text{rot } \mathbf{v}$ w każdym punkcie wiru, dla którego $r \neq 0$; \mathbf{v} jest tu polem prędkości przepływającej cieczy. Składowa $\text{rot } \mathbf{v}$ w kierunku \mathbf{k} jest równa

$$\mathbf{k} \cdot \text{rot } \mathbf{v} = \lim_{A \rightarrow 0} \frac{1}{A} \oint_A \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l},$$



Rys. 1.7. Rotacja wiru. Linie prądu są zaznaczone tłustym drukiem; długość linii odpowiada prędkości przepływu

gdzie A jest obszarem zawierającym koło łopatkowe i ograniczonym przez cztery łuki: l_1, l_2, l_3 i l_4 (rys. 1.7). Całka po obwodzie A jest sumą całek krzywoliniowych po tych czterech łukach. Całki po l_3 i l_4 znikają, bowiem dla wszystkich punktów leżących na tych łukach \mathbf{v} jest prostopadłe do $d\mathbf{l}$. Tym sposobem otrzymujemy, że

$$\begin{aligned} \mathbf{k} \cdot \text{rot } \mathbf{v} = \lim_{A \rightarrow 0} \frac{1}{A} \left[\int_{l_1}^{\Theta_1} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l} + \int_{l_2}^{\Theta_2} \mathbf{v} \cdot d\mathbf{l} \right] = \lim_{A \rightarrow 0} \frac{1}{A} \left[\int_{\Theta_2}^{\Theta_1} \frac{av_0}{r_1} \Theta \cdot \Theta r_1 d\Theta + \right. \\ \left. + \int_{\Theta_1}^{\Theta_2} \frac{av_0}{r_2} \Theta \cdot \Theta r_2 d\Theta \right] = 0. \end{aligned}$$

Wkłady od łuków l_1 i l_2 znoszą się, ponieważ całki te są równe co do wielkości i mają przeciwne znaki. Składowe x -owa i y -owa rot \mathbf{v} są, oczywiście, równe zeru.

Oczywiście, koło łopatkowe można wstawić jedynie w pole prędkości cieczy. Dla pól elektrycznych, grawitacyjnych i innych należy sobie wyobrazić odpowiednie „uogólnione koło łopatkowe” lub inaczej przyrząd do mierzenia rotacji.

Zakończymy nasze rozważania o operatorze rotacji, jak dotąd niezależne od układu współrzędnych, wyprowadzeniem wyrażenia na składowe rotacji pola wektorowego w ortogonalnym, krzywoliniowym układzie współrzędnych. Aby otrzymać i -tą składową rot \mathbf{V} , musimy obliczyć krzywoliniową całkę ze stycznej składowej pola wektorowego $\mathbf{V} \cdot \mathbf{t}$, wzdłuż granicy infinytezymalnej powierzchni $d\sigma$ prostopadłej do i -tego wektora bazy. Zbadajmy element powierzchni w płaszczyźnie $q_2 q_3$, $d\sigma = ds_2 ds_3$, zorientowany w kierunku osi q_1 . Pierwsza składowa rot \mathbf{V} jest dana przez sumę całek $\int \mathbf{V} \cdot d\mathbf{l}$ wzdłuż czterech łuków, otaczających element $d\sigma$. Droga całkowania wiedzie od punktu (q_2, q_3) przez punkty $(q_2 + dq_2, dq_3)$, $(q_2 + dq_2, q_3 + dq_3)$, $(q_2, q_3 + dq_3)$ z powrotem do punktu (q_2, q_3) . Mamy więc

$$\begin{aligned} (\text{rot } \mathbf{V})_1 &= \lim_{d\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{ds_2 ds_3} [(V_2 ds_2)_{q_3} + (V_3 ds_3)_{q_2 + dq_2} - (V_2 ds_2)_{q_3 + dq_3} - (V_3 ds_3)_{q_2}] = \\ &= \lim_{ds_2 ds_3 \rightarrow 0} \left[\frac{(V_3 ds_3)_{q_2 + dq_2} - (V_3 ds_3)_{q_2}}{ds_2 ds_3} - \frac{(V_2 ds_2)_{q_3 + dq_3} - (V_2 ds_2)_{q_3}}{ds_2 ds_3} \right]. \end{aligned}$$

I dalej

$$(\text{rot } \mathbf{V})_1 = \frac{1}{h_2 h_3} \left[\frac{\partial(h_3 V_3)}{\partial q_2} - \frac{\partial(h_2 V_2)}{\partial q_3} \right]. \quad (1.64)$$

Czytelnik zechce rozszerzyć tę dyskusję, tak jak to było zrobione przy wyprowadzaniu wzorów na dywergencję. Pozostałe dwie składowe rot \mathbf{V} można otrzymać przez cykliczną permutację wskaźników współrzędnych.

We współrzędnych kartezjańskich równanie (1.64) i dwa dodatkowe równania na pozostałe składowe można zapisać w postaci

$$(\text{rot } \mathbf{V})_i = \varepsilon_{ijk} \partial_j V_k, \quad (1.65)$$

a więc w tych współrzędnych mamy

$$\text{rot } \mathbf{V} = \varepsilon_{ijk} \mathbf{e}_i \partial_j V_k = \nabla_{\mathbf{K}} \times \mathbf{V}. \quad (1.66)$$

Iloczyn wektorowy symbolu ∇ i pola wektorowego jest często używany do niezależnego od współrzędnych definiowania rot \mathbf{V} :

$$\begin{aligned} (\text{rot } \mathbf{V}) \equiv (\nabla \times \mathbf{V}) &= \frac{1}{h_2 h_3} [\partial_2(h_3 V_3) - \partial_3(h_2 V_2)] \mathbf{e}_1 + \frac{1}{h_3 h_1} [\partial_3(h_1 V_1) - \partial_1(h_3 V_3)] \mathbf{e}_2 + \\ &+ \frac{1}{h_1 h_2} [\partial_1(h_2 V_2) - \partial_2(h_1 V_1)] \mathbf{e}_3, \end{aligned} \quad (1.67)$$

gdzie \mathbf{e}_i jest wektorem jednostkowym wzdłuż współrzędnej q_i .

Laplasjan

Laplasjan pola skalarnego jest zdefiniowany jako dywergencja gradientu pola skalarnego. Z (1.50) i (1.61) wynika następujące określenie laplasjanu w ortogonalnych współrzędnych krzywoliniowych

$$\begin{aligned} \text{laplasjan } \varphi \equiv \text{div}(\text{grad } \varphi) \equiv \nabla \cdot (\nabla \varphi) \equiv \nabla^2 \varphi = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\partial_1 \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \partial_1 \varphi \right) + \right. \\ \left. + \partial_2 \left(\frac{h_3 h_1}{h_2} \partial_2 \varphi \right) + \partial_3 \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \partial_3 \varphi \right) \right]. \end{aligned} \quad (1.68)$$

We współrzędnych kartezjańskich sprowadza się to do wzoru

$$\nabla_{\mathbf{k}}^2 \varphi = \partial_i \partial_i \varphi. \quad (1.69)$$

Najważniejsze różniczkowe równania cząstkowe fizyki klasycznej zawierają laplasjan, np. równanie Laplace'a ($\nabla^2 \varphi = 0$), równanie Poissona ($\nabla^2 \varphi = \rho$), równania przewodnictwa cieplnego i dyfuzji ($\nabla^2 \varphi = K(\partial \varphi / \partial t)$), równanie falowe ($\nabla^2 \varphi + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = 0$), równanie Helmholtza ($\nabla^2 \varphi + k^2 \varphi = 0$) i inne. Aby zrozumieć sens fizyczny tych równań opisujących znaczną część fizyki klasycznej, musimy dowiedzieć się, jakiego typu informację wydobywa laplasjan działając na pola skalarne.

W celu uproszczenia naszych rozważań będziemy stosować współrzędne kartezjańskie. Niech pole skalarne φ ma w pewnym punkcie, który obieramy za początek układu współrzędnych, wartość φ_0 . Badamy sześcian o boku a i środku w początku układu. Średnia wartość φ w sześcianie jest równa

$$\bar{\varphi} = \frac{1}{a^3} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-a/2}^{a/2} \int_{-a/2}^{a/2} \varphi \, dx_1 \, dx_2 \, dx_3, \quad (1.70)$$

gdzie całkowanie wykonujemy po wnętrzu sześcianu. Aby obliczyć tę całkę, rozwijamy $\varphi(x_i)$ w potrójny szereg Taylora w trzech współrzędnych x_i

$$\varphi(x_i) = \varphi_0 + (\partial_i \varphi)_0 x_i + \frac{1}{2} (\partial_i \partial_j \varphi)_0 x_i x_j + \dots$$

Wstawiając rozwinięcie Taylora funkcji $\varphi(x)$ do równania (1.70) i całkując od $-a/2$ do $a/2$ widzimy, że całka od każdego wyrazu liniowego w x_i (a właściwie każdego członu zawierającego nieparzystą funkcję x_i) powinna zniknąć. Całki kwadratowych (parzystych) członów można łatwo obliczyć. Dodając otrzymane wyniki dostajemy

$$\bar{\varphi} \cong \varphi_0 + \frac{a^2}{24} (\partial_i \partial_i \varphi)_0$$

lub

$$(\nabla^2 \varphi)_0 \cong \frac{24}{a^2} (\bar{\varphi} - \varphi_0). \quad (1.71)$$

Przybliżenie to staje się lepsze, gdy bok sześcianu maleje do zera. Wartość laplasjanu pola skalarnego w danym punkcie jest więc miarą różnicy średniej wartości pola w nieskończenie małym otoczeniu tego punktu i wartości pola w tym punkcie.

Ten rezultat daje nam intuicyjną interpretację równań zawierających operator Laplace'a. Najprostszym z tych równań jest równanie Laplace'a.

$$\nabla^2 \varphi = 0, \quad (1.72)$$

które opisuje potencjały skalarne pól grawitacyjnych i elektrostatycznych w nieobecności mas lub ładunków. Widzimy, że średnia wartość takich potencjałów w otoczeniu punktu P

musi być równa wartości potencjałów w punkcie P . Funkcje o tych własnościach nazywają się *funkcjami harmonicznymi*. Zobaczmy w rozdziale 6, że w przestrzeni dwuwymiarowej rzeczywista i urojona część funkcji analitycznej są funkcjami harmonicznymi. Równanie Laplace'a mówi nam, że funkcja harmoniczna nie może jednocześnie wzrastać lub maleć we wszystkich kierunkach z danego punktu P , gdyż wtedy $\bar{\varphi}$ nie będzie równe φ_P . Jeżeli φ ma wzdłuż danej linii lokalne maksimum w punkcie P , musi wystąpić lokalne minimum wzdłuż innej linii przechodzącej przez P ; tym samym P musi być punktem siodłowym.

Istnieją także sytuacje, w których wartość skalarą w punkcie różni się od średniej wartości w otoczeniu tego punktu o wielkość, która jest funkcją przestrzeni. Jest to sytuacja opisywana przez równanie Poissona

$$\nabla^2 \varphi = \rho(x_i). \quad (1.73)$$

Funkcja skalarna $\rho(x_i)$ określa tu gęstość masy lub ładunku w punkcie x_i . Równanie Poissona mówi, że różnica wartości $\bar{\varphi}$ wokół x_i i wartości $\varphi(x_i)$ jest proporcjonalna do gęstości w punkcie x_i .

Istnieje kilka fizycznych procesów, w których zmiana różnicy między wartością φ_P a wartością średnią $\bar{\varphi}$ w otoczeniu punktu P jest równa prędkości zmian funkcji φ potrzebnej do wyrównania tej różnicy. Matematycznie wyraża się to równaniem

$$\nabla^2 \varphi = K \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \quad (1.74)$$

gdzie K jest stałą większą od zera. To równanie opisuje przewodnictwo cieplne (φ jest wtedy temperaturą) i dyfuzję (wtedy φ jest gęstością dyfundującego materiału). Zgodnie z tym równaniem temperatura lub gęstość zmieniają się w czasie z szybkością proporcjonalną do różnicy ich lokalnych i średnich wartości.

Wreszcie, odchylenie wartości lokalnej od wartości średniej może być proporcjonalne do drugiej pochodnej po czasie, jak w równaniu falowym:

$$\nabla^2 \varphi = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}. \quad (1.75)$$

Druga pochodna odpowiada takiemu przyspieszeniu zmian wielkości φ w kierunku $\bar{\varphi}$, dla którego $\partial \varphi / \partial t \neq 0$ w położeniu równowagi (tj. dla $\varphi_P = \bar{\varphi}$). Układ przechodzi przez położenie równowagi i znów powtarza ten ruch, jak zwykły oscylator harmoniczny.

Interpretację równania Helmholtza

$$\nabla^2 \varphi + k^2 \varphi = 0 \quad (1.76)$$

pozostawiamy czytelnikowi (Zadanie 10).

Dotychczas traktowaliśmy laplasjan jako operator, działający jedynie na pola skalarne. Rozszerzymy teraz zastosowanie tego operatora również na pola wektorowe. We współrzędnych kartezjańskich zdefiniujemy wielkość

$$\nabla_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{V} \equiv \mathbf{e}_i \nabla^2 V_i. \quad (1.77)$$

Tym sposobem we współrzędnych kartezjańskich i -ta składowa wektora $\nabla_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{V}$ jest laplasjanem i -tej składowej wektora \mathbf{V} , to znaczy jest skalarą zdefiniowaną w równaniu (1.69); mamy więc

$$(\nabla_{\mathbf{k}}^2 \mathbf{V})_i = \partial_j \partial_j V_i. \quad (1.78)$$

Aby uogólnić definicję laplasjanu wektora w krzywoliniowych ortogonalnych współrzędnych wykażemy, że we współrzędnych kartezjańskich zachodzi następująca tożsamość

$$\nabla \times (\nabla \times \mathbf{V}) = -\nabla^2 \mathbf{V} + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{V}), \quad (1.79)$$

która określa rotację rotacji pola wektorowego. Następnie stosując (1.79) *definiujemy* laplasjan wektora we współrzędnych *krzywoliniowych*

$$\nabla^2 \mathbf{V} \equiv -\nabla \times (\nabla \times \mathbf{V}) + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{V}). \quad (1.80)$$

Ponieważ operatory rotacji, gradientu, dywergencji są zdefiniowane we współrzędnych krzywoliniowych, a równanie (1.80) jest prawdziwe do współrzędnych kartezjańskich, powyższe równanie jest naturalną definicją wielkości $\nabla^2 \mathbf{V}$ we współrzędnych krzywoliniowych. Dowód równania (1.79) jest analogiczny jak dowód tożsamości (1.34). Należy tu skorzystać z następującego związku zachodzącego dla współrzędnych kartezjańskich

$$[\nabla \times (\nabla \times \mathbf{V})]_i = \varepsilon_{ijk} \partial_j \varepsilon_{klm} \partial_l V_m.$$

Zawsze gdy mamy do czynienia z operatorami różniczkowymi, należy pamiętać o skalarnym lub wektorowym charakterze operatorów, jak również o tym, jakiego typu pola (skalarne czy wektorowe) uzyskuje się w wyniku działania odpowiednich operatorów. Laplasjan jest jedynym operatorem, który jest zdefiniowany w działaniu zarówno na skalarne jak i wektorowe pola i daje w wyniku oba te typy pól. Gradient działa na pole skalarne i produkuje pole wektorowe, dywergencja działa na pola wektorowe i daje pola skalarne, rotacja zaś działa na pola wektorowe i produkuje pola wektorowe.

Istnieje naturalne uogólnienie operatora Laplace'a w czterowymiarowej czasoprzestrzeni (przestrzeni Minkowskiego) nazywane operatorem d'Alemberta, \square^2 . Definiujemy go przez laplasjan

$$\square^2 \equiv \nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}. \quad (1.81)$$

W § 4.6 będziemy bliżej omawiać występujący w tej definicji znak minus. Operator d'Alemberta jak i operator Laplace'a może być zarówno polem skalarnym jak i wektorowym. Równanie falowe wyrażone przy pomocy operatora d'Alemberta jest postaci

$$\square^2 \varphi = 0. \quad (1.82)$$

Dywergencja wektora $\text{grad } \varphi$ jest laplasjanem φ . Pojawiają się więc następujące pytania:

- 1) Co to jest rotacja $\text{grad } \varphi$?
- 2) Co to jest dywergencja rotacji \mathbf{V} ?

Bezpośrednie obliczenie we współrzędnych kartezjańskich dają

$$1) \quad [\text{rot}(\text{grad } \varphi)]_i = \varepsilon_{ijk} \partial_j \partial_k \varphi = 0; \quad (1.83)$$

$$2) \quad \text{div}(\text{rot } \mathbf{V}) = \partial_i \varepsilon_{ijk} \partial_j V_k = \varepsilon_{ijk} \partial_i \partial_j V_k = 0. \quad (1.84)$$

Dowody te wymagają małego omówienia. W obu mamy iloczyn członu ε_{ijk} , który jest antysymetryczny w każdej parze wskaźników i członu postaci $\partial_m \partial_n$, który jest symetryczny we wskaźnikach. (Warunkiem dostatecznym na to, by pochodne mieszane były równe ($\partial_m \partial_n \psi = \partial_n \partial_m \psi$ dla $m \neq n$) jest ich ciągłość, co można sprawdzić w każdym podręczniku rachunku różniczkowego i całkowego. Zakładamy, że pola występujące w fizyce posiadają

tę własność). Suma iloczynów wyrazów symetrycznych i antysymetrycznych znika. Czytelnik może to łatwo zobaczyć albo przez wypisanie tego lub zauważenie, że jeżeli

$$a_{ij} = a_{ji} \quad i \quad b_{ij} = -b_{ji},$$

to

$$s \equiv a_{ij}b_{ij} = -a_{ji}b_{ji} = -s,$$

ponieważ i oraz j są tu wskaźnikami niemymi; stąd $s = 0$.

Te twierdzenia są słuszne w każdym układzie współrzędnych krzywoliniowych. Jedną z dróg wykazania, że $\text{div}(\text{rot } \mathbf{V})$ znika, jest zastosowanie niezależnego od współrzędnych twierdzenia Gaussa

$$\int_{\tau} \text{div}(\text{rot } \mathbf{V}) d\tau = \int_{\sigma} (\text{rot } \mathbf{V}) \cdot d\sigma.$$

Aby obliczyć całkę z rotacji \mathbf{V} po zamkniętej powierzchni σ ograniczającej obszar τ , wprowadzamy na powierzchni σ dowolną, zamkniętą krzywą λ . Krzywa ta dzieli powierzchnię na dwie powierzchnie, obie ograniczane przez λ . Teraz do oszacowania całki z rotacji \mathbf{V} po tych dwóch powierzchniach zastosujemy twierdzenie Stokesa (1.63). Ponieważ dwie całki mają dowolne ograniczenie λ obchodzone w pierwszej całce w kierunku zgodnym z kierunkiem wskazówek zegara, a w przeciwnym kierunku w drugiej, ich wartości są równe co do wielkości, a przeciwne co do znaku. Tak więc ich suma równa całce z rotacji \mathbf{V} wynosi zero. Ponieważ jest to słuszne dla każdej objętości τ , więc $\text{div}(\text{rot } \mathbf{V})$ musi znikać.

Istnieją również twierdzenia odwrotne do wyrażonych w równaniach (1.83) i (1.84), Brzmia one następująco: 1) jeżeli $\text{rot } \mathbf{V} = 0$, to \mathbf{V} jest gradientem pola skalarnego $\mathbf{V} = \nabla\varphi$, 2) jeżeli $\text{div } \mathbf{V} = 0$, to \mathbf{V} jest rotacją pola wektorowego $\mathbf{V} = \text{rot } \mathbf{A}$, gdzie φ i \mathbf{A} są odpowiednio potencjałem skalarnym i wektorowym. Ponieważ staraliśmy się tu jedynie uzyskać fizyczny obraz operatorów różniczkowych i zbadać ich rolę w fizyce klasycznej, nie będziemy dowodzić powyższych twierdzeń, które znajdują się w każdym podręczniku analizy wektorowej. Interesującym wynikiem teorii potencjalnej jest fakt, że można określić pole wektorowe znając jedynie rotację i dywergencję tego pola oraz odpowiednie warunki graniczne. Ponieważ równania Maxwella wyrażają się przez rotację i dywergencję pola elektromagnetycznego, w klasycznej teorii pola elektromagnetycznego powinny one wystarczać do znalezienia tego pola. Twierdzenie to jest szczegółowo przedstawione w książce Panofsky'ego i Phillipsa*.

Podsumowujemy ten paragraf analizą wewnętrzną spójności równań Maxwella w oparciu o twierdzenie, że $\text{div}(\text{rot } \mathbf{V}) = 0$. Przy okazji będziemy mogli przekonać się, jak dużo daje zwarty i elegancki zapis wektorowych operatorów różniczkowych.

Większość równań noszących dziś nazwę równań Maxwella była znana już przed Maxwellem. Maxwell dodał do jednego z czterech empirycznych równań, opisujących zjawiska elektryczne i magnetyczne, pewien istotny człon, który zapewnił pełną symetrię tych równań oraz stworzył podstawy do przewidywań zjawisk falowych. Przed Maxwellem były znane następujące cztery prawa (podajemy je w postaci różniczkowej, w jednostkach CGS i używając przyjętych oznaczeń).

* W. H. K. Panofsky, M. Phillips, *Classical Electricity and Magnetism*, Reading Mass.: Addison-Wesley, 1955.

Prawo Coulomba $\mathbf{V} \cdot \mathbf{D} = 4\pi\rho$. (1.85)

Nieistnienie pojedynczych ładunków magnetycznych $\mathbf{V} \cdot \mathbf{B} = 0$. (1.86)

Prawo Faradaya (indukcji elektromagnetycznej) $\mathbf{V} \times \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}$. (1.87)

Prawo Ampère'a (dla stałych przepływów prądu) $\mathbf{V} \times \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J}$. (1.88)

W czasach Maxwella prawa te przedstawiano w postaci skomplikowanych cząstkowych równań różniczkowych, co oczywiście utrudniało ich analizę. Wypisane w obecnej postaci łatwo poddają się analizie i każdy wybitniejszy fizyk mógłby spostrzec, co w swoim czasie uczynił Maxwell, że z równania (1.88) wynika, że $\text{div} \mathbf{J} = 0$. Równanie to jest słuszne jedynie dla stałych przepływów prądu w zamkniętych obwodach. Jeżeli jednak ładunek zmienia się w czasie, to przy założeniu prawa zachowania ładunku prawdziwe jest prawo ciągłości (1.58). Z równania ciągłości i równania (1.85) wynika, że

$$\mathbf{V} \cdot \mathbf{J} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{4\pi} \mathbf{V} \cdot \mathbf{D} \right) = -\mathbf{V} \cdot \frac{1}{4\pi} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}.$$

Tak więc, jeżeli do prawej strony równania (1.88) dodamy człon $(1/4\pi) (\partial \mathbf{D} / \partial t)$ otrzymamy, że

$$\mathbf{V} \times \mathbf{H} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{J} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}. \quad (1.89)$$

Dodany człon zapewnia, że $\mathbf{V} \cdot (\mathbf{V} \times \mathbf{H}) \equiv 0$, a otrzymane równanie będzie słuszne nie tylko w przypadku stacjonarnym. Dodanie tego członu, nazywanego *prądem przesunięcia*, jest zasługą Maxwella. Zapewnia on pełną symetrię równań, które teraz wyrażają fakt, że zmienne pole elektryczne wytwarza pole magnetyczne, tak jak prawo Faradaya mówi, że zmienne pole magnetyczne wytwarza pole elektryczne. Jednocześnie z dodaniem członu Maxwella do równania (1.88) pojawiła się możliwość istnienia niegasnących fal elektromagnetycznych. Bez prądu przesunięcia równania te nie przewidywały zjawisk falowych. Dlatego ten człon ma tak wielkie znaczenie i dziś wszystkie te równania określa się mianem równań Maxwella.

1.8. TENSORY KARTEZJAŃSKIE

Wiele ważnych fizycznych wielkości jest skalarami lub wektorami. Oznacza to, że przy przekształceniach ortogonalnych transformują się one według prawa

$$\phi' = \phi, \quad (1.90)$$

które definiuje skalary (wzór (1.26)), lub według prawa

$$x'_i = a_{ij} x_j, \quad (1.91)$$

które definiuje wektory (wzór (1.27)).

Jeżeli w przestrzeni trójwymiarowej przy ortogonalnym przekształceniu współrzędnych 3^N wielkości $T_{i_1 i_2 \dots i_N}$ (każdy z N wskaźników zmienia się od 1 do 3) transformuje się zgodnie z prawem

$$T'_{i_1 i_2 \dots i_N} = a_{i_1 j_1} a_{i_2 j_2} \dots a_{i_N j_N} T_{j_1 j_2 \dots j_N}, \quad (1.92)$$

to $T_{i_1 i_2 \dots i_N}$ są składowymi *tensora* rzędu N (w trzech wymiarach). Zauważmy, że w równaniu (1.92) występuje N sumowań. Tensor pierwszego rzędu ma trzy składowe, spełniające równanie (1.91) — jest więc wektorem. Tensor rzędu 0 ma jedną niezmienniczą składową, jest więc skalarem. Innym często stosowanym tensorem jest tensor drugiego rzędu. Ma on dziewięć składowych T_{ij} , które podlegają prawu transformacyjnemu

$$T'_{ij} = a_{ik} a_{jl} T_{kl}. \quad (1.93)$$

Pod koniec tego paragrafu przedstawimy kilka fizycznych zastosowań tensorów drugiego rzędu. Musimy się zastrzec, że to co my tutaj robimy, nie może być uważane za analizę tensorową. Zajmować się będziemy jedynie tensorami kartezjańskimi, które zdefiniowane są przez swoje własności transformacyjne przy bardzo szczególnej klasie przekształceń, mianowicie przekształceń ortogonalnych. Tensory kartezjańskie są obiektami transformującymi się przy przekształceniach *ortogonalnych* zgodnie z prawem (1.92). W ogólności tensory są obiektami z określonym prawem transformacyjnym dla *dowolnych* transformacji współrzędnych, co jest warunkiem dużo silniejszym. Tak więc dużo łatwiej zakwalifikować dany obiekt jako tensor kartezjański niż jako zwykły tensor. Każdy bowiem tensor jest tensorem kartezjańskim, ale nie każdy tensor kartezjański jest tensorem, gdyż tensor kartezjański spełnia właściwe prawo transformacyjne jedynie dla transformacji ortogonalnych, a dla innych transformacji może go nie spełniać. Tensory kartezjańskie nie są podklasą tensorów, lecz nowym obiektem.

Omówimy teraz kilka pojęć analizy wektorowej ograniczając nasze rozważania do trójwymiarowych tensorów kartezjańskich. Jednakże opuścimy określenie „kartezjański”, umawiając się, że wszystkie występujące tu tensory są tensorami kartezjańskimi.

Zbadamy najpierw *kontrakcję* tensorów, która jest jedną z najważniejszych operacji określonych na tensorach. Kontrakcja jest operacją produkującą nowy tensor z obiektów o określonym charakterze tensorowym.

Będziemy korzystać z faktu, że jeżeli $S_{i_1 i_2 \dots i_N}$ jest tensorem N -tego rzędu, a $T_{j_1 j_2 \dots j_M}$ jest tensorem M -tego rzędu, to $S_{i_1 \dots i_N} T_{j_1 \dots j_M}$ jest tensorem $(N+M)$ -tego rzędu o 3^{N+M} składowych. Dowód tego pozostawiamy czytelnikowi.

Kontrakcja tensora $T_{i_1 i_2 \dots i_N}$ jest zdefiniowana jako mnożenie tego tensora przez deltę Kroneckera $\delta_{i_l i_m}$ (i sumowanie po wskaźnikach), gdzie $l \neq m$ i $l, m \leq N$. Tak więc, jeżeli $T_{i_1 \dots i_N}$ jest wektorem N -tego rzędu, to

$$H_{i_1 \dots i_{j-1} i_{j+1} \dots i_{m-1} i_{m+1} \dots i_N} = \delta_{ij} T_{i_1 \dots i_j \dots i_m \dots i_N} \quad (1.94)$$

jest kontrakcją tensora T . Pokażemy teraz, że H jest tensorem $(N-2)$ -go rzędu. Zauważmy najpierw, że ma on 3^{N-2} składowych, więc jeżeli jest tensorem, to rzędu $N-2$. Teraz

$$\begin{aligned} H'_{i_1 \dots i_{j-1} i_{j+1} \dots i_{m-1} i_{m+1} \dots i_N} &= \delta'_{ij} T'_{i_1 \dots i_j \dots i_m \dots i_N} = \delta_{ij} a_{i_1 n_1} \dots a_{i_j n_j} \dots a_{i_m n_m} \dots a_{i_N n_N} \times \\ &\times T_{n_1 \dots n_j \dots n_m \dots n_N} = a_{i_1 n_1} \dots a_{i_m n_j} \dots a_{i_m n_m} \dots a_{i_N n_N} T_{n_1 \dots n_j \dots n_m \dots n_N}. \end{aligned}$$

Korzystając z (1.94) i z uwagi na to, że $a_{i_m n_j} a_{i_m n_m} = \delta_{n_j n_m}$, ostatnie wyrażenie można zapisać w postaci

$$a_{i_1 n_1} \dots a_{i_{j-1} n_{j-1}} a_{i_{j+1} n_{j+1}} \dots a_{i_{m-1} n_{m-1}} a_{i_{m+1} n_{m+1}} \dots a_{i_N n_N} H_{n_1 \dots n_{j-1} n_{j+1} \dots n_{m-1} n_{m+1} \dots n_N},$$

co dowodzi, że H jest tensorem $(N-2)$ -go rzędu.

Tego typu dowody dla tensorów N -tego rzędu wymagają pewnej zręczności w manipulowaniu wskaźnikami. Mając wprowadzoną powyższą ogólną metodę dowodów, wrócimy teraz do najbardziej interesującego z punktu widzenia fizyki przypadku $N = 2$.

Dla ilustracji zbadamy iloczyn dwu wektorów x_i i y_i . Wiemy, że iloczyn $x_i y_j$ jest tensorem 2-go rzędu i możemy skonstruować go tak, by uzyskać wielkość skalarną, czyli zgodnie z powyższym twierdzeniem tensor rzędu $2-2 = 0$. Tak więc

$$\delta_{ij} x_i y_j = x_i y_i = \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}, \quad (1.95)$$

czyli otrzymaliśmy iloczyn skalarny.

Są dwa ważne typy tensorów 2-go rzędu: tensory symetryczne i antysymetryczne. W ogólności tensory nie są łatwe do wyobrażenia geometrycznego w przeciwieństwie do wektorów, jednak w wypadku symetrycznych ($T_{ij} = T_{ji}$) i antysymetrycznych ($T_{ij} = -T_{ji}$) tensorów 2-go rzędu możliwe jest ich przedstawienie geometryczne.

Dla tensorów antysymetrycznych drugiego rzędu znikają trzy elementy diagonalne, ponieważ $T_{ii} = -T_{ii}$. Pozostałe elementy są parami równe, lecz mają przeciwne znaki. Tak więc tensor tego typu charakteryzują trzy niezależne wielkości (powiedzmy T_{12} , T_{13} i T_{23}) i można związać z nim wektor A_i

$$A_i = \frac{1}{2} \varepsilon_{ijk} T_{jk}. \quad (1.96)$$

Porównując (1.96) z (1.33) widzimy, że wektor związany z antysymetrycznym tensorem drugiego rzędu jest w rzeczywistości pseudowektorem.

Dla symetrycznego tensora drugiego rzędu mamy 6 niezależnych składników: trzy elementy diagonalne i trzy pary równych niediagonalnych elementów. Nie można więc identyfikować symetrycznego tensora drugiego rzędu z wektorem. Jednakże tensor ten daje 6 niezależnych parametrów określających powierzchnię drugiego stopnia

$$Ax_1^2 + Bx_2^2 + Cx_3^2 + Dx_1 x_2 + Ex_1 x_3 + Fx_2 x_3 = 1.$$

Nic więc dziwnego, że każdy symetryczny tensor drugiego rzędu może być jednoznacznie reprezentowany przez powierzchnię

$$T_{ij} x_i x_j = \pm 1,$$

gdzie po prawej stronie równania należy wybrać znak zgodny ze znakiem wyznacznika T_{ij} . W przeciwnym wypadku, na przykład dla symetrycznego tensora $T_{ij} = -\delta_{ij}$, moglibyśmy otrzymać powierzchnię

$$-x_1^2 - x_2^2 - x_3^2 = 1,$$

nie istniejącą w rzeczywistej przestrzeni. Przyjmując odpowiedni znak otrzymamy kulę o promieniu 1 i środku w początku układu współrzędnych.

Dowolny tensor drugiego rzędu R_{ij} można zapisać w postaci sumy tensora symetrycznego i antysymetrycznego

$$R_{ij} = \underbrace{\frac{1}{2}(R_{ij} + R_{ji})}_{\text{symetryczny}} + \underbrace{\frac{1}{2}(R_{ij} - R_{ji})}_{\text{antysymetryczny}}.$$

Często zdarza się, że student po pierwszym zetknięciu się z tensorami zapyta: No dobrze, ale co to właściwie jest tensor? Pokażemy kilka przykładów tensorów, a przez wielokrotne

powtarzanie definicji tensorów poprzez ich własności transformacyjne postaramy się jeszcze lepiej zilustrować te obiekty. Dla większej jasności lepiej nie mówić o tensorach jako takich, lecz raczej definiować charakter tensorowy i mówić o pewnych wielkościach, że posiadają (lub nie) określony charakter tensorowy. Podsumowujemy ten rozdział omawiając trzy wielkości fizyczne, które mają charakter tensorowy: tensor momentu bezwładności, tensor polaryzacji elektrycznej i tensor multipolowy.

Przykład 1.6. Tensor momentu bezwładności. Całkowity moment pędu bryły sztywnej o ciągłym rozkładzie masy mającej gęstość $\rho(\mathbf{r})$, obracającej się wokół ustalonego punktu ciała jest równy

$$\mathbf{L} = \int \rho(\mathbf{r} \times \mathbf{v}) d\tau,$$

gdzie \mathbf{r} jest wektorem położenia elementu masy $dm = \rho d\tau$, a \mathbf{v} jest prędkością elementu dm . (Przyjmujemy za punkt odniesienia ustalony punkt bryły). Z rozważań kinematycznych wynika, że $\mathbf{v} = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}$, gdzie $\boldsymbol{\omega}$ jest prędkością kątową bryły sztywnej. Stąd

$$\mathbf{L} = \int \rho[\mathbf{r} \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})] d\tau = \int \rho[\boldsymbol{\omega} r^2 - \mathbf{r}(\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{r})] d\tau.$$

Zauważmy, że wektor \mathbf{L} nie jest równoległy do $\boldsymbol{\omega}$, z wyjątkiem sytuacji, gdy $\boldsymbol{\omega}$ jest prostopadłe do \mathbf{r} .

Tensor momentu bezwładności I_{ij} jest zdefiniowany następująco

$$I_{ij} = \int \rho[r^2 \delta_{ij} - r_i r_j] d\tau. \quad (1.98)$$

Zauważmy, że jest to suma iloczynów wektorów, czyli rzeczywiście tensor. Ściśle rzecz biorąc, jest to tensor symetryczny drugiego rzędu. W rozdziale 4 zobaczymy, że ten tensor może być diagonalizowany, tzn. że można znaleźć kierunki główne i główne momenty bezwładności. Stosując tensor momentu bezwładności I_{ij} możemy przepisać poprzednie wyrażenie na \mathbf{L} w postaci

$$I_{ij} \omega_j = \int \rho[r^2 \delta_{ij} \omega_j - r_i r_j \omega_j] d\tau = \int \rho[r^2 \omega_i - r_i (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\omega})] d\tau = L_i.$$

Można zapisać to równanie w postaci symbolicznej: $\mathbf{L} = \mathbf{I} \cdot \boldsymbol{\omega}$, gdzie \mathbf{I} jest operatorem działającym na $\boldsymbol{\omega}$. \mathbf{I} nie jest skalarem, zmieniającym po prostu wielkość $\boldsymbol{\omega}$; jest to tensor i można patrzeć na niego jako na operator zmieniający zarówno wielkość jak i kierunek wektora prędkości kątowej $\boldsymbol{\omega}$.

Przykład 1.7. Tensor polaryzacji elektrycznej*. Wektor polaryzacji \mathbf{P} jest związany z wektorem indukcji elektrycznej \mathbf{D}

$$\mathbf{D} = \epsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}.$$

Jeżeli \mathbf{P} jest równoległe do \mathbf{E} , co można zapisać $\mathbf{P} = \epsilon_0 \chi \mathbf{E}$ (gdzie χ jest podatnością dielektryczną), to $\mathbf{D} = \epsilon_0 (1 + \chi) \mathbf{E} = \epsilon_0 k \mathbf{E}$, gdzie k jest stałą dielektryczną. Wektor \mathbf{P} jest równoległy do \mathbf{E} jedynie wtedy, gdy dielektryk polaryzuje się izotropowo. Można tego oczekiwać w kryształach ze strukturą molekularną o niskiej symetrii. W kryształach o symetrii niższej niż sześcienna związek między każdą składową wektora \mathbf{P} i wektora \mathbf{E} jest nadal liniowy, ale stałe proporcjonalności w różnych kierunkach nie muszą być takie same. Przypadek, gdy \mathbf{P} jest równoległe do \mathbf{E} , zachodzi w gazach, cieczach, ciałach bez-

* Wszystkie wzory w tym przykładzie zostały podane w układzie MKSA (przyp. tłum.).

postaciowych i kryształach sześciennych. W innych przypadkach, proporcjonalność między \mathbf{P} i \mathbf{E} musi być zastąpiona równaniem tensorowym, które dopuszcza różne stałe proporcjonalności w różnych kierunkach \mathbf{E} . Mamy więc związek

$$P_i = \sum_{j=1}^3 \varepsilon_0 \chi_{ij} E_j,$$

gdzie χ_{ij} jest tensorem podatności.

Przykład 1.8. Tensor momentu multipolowego. Tensor multipolowy pochodzi z multipolowego potencjału $\varphi(\mathbf{r})$, związanego z dowolnym rozkładem ładunku $\varrho(\mathbf{r}')$. Z teorii potencjalnej (np. Panofsky i Phillips, rozdział 1) wiemy, że jeżeli $\text{div} \mathbf{E} = \varrho$ i $\text{rot} \mathbf{E} = 0$, wtedy $\mathbf{E} = -\nabla\varphi$, gdzie

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int_{\tau'} \frac{\varrho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d\tau'. \quad (1.99)$$

Ładunek o gęstości $\varrho(\mathbf{r}')$ znajduje się w objętości τ' . Aby obliczyć pole w punkcie \mathbf{r} odległym od źródła, to jest dla $|\mathbf{r}| > |\mathbf{r}'|$, rozwijamy $1/R$ w potęgach r'/r :

$$\begin{aligned} \frac{1}{R} &\equiv |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1} = (r^2 - 2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' + r'^2)^{-1/2} = \frac{1}{r} \left[1 + \left(-\frac{2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2} \right) \right]^{-1/2} = \\ &= \frac{1}{r} \left[1 - \frac{1}{2} \left(-\frac{2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2} \right) + \frac{1}{2} \cdot \frac{3}{4} \left(-\frac{2\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} + \frac{r'^2}{r^2} \right)^2 + \dots \right] = \\ &= \frac{1}{r} \left[1 + \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} - \frac{1}{2} \frac{r'^2}{r^2} + \frac{3}{8} \left(\frac{4(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}')^2}{r^4} \right) + \dots \right] = \\ &= \frac{1}{r} \left[1 + \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2} + \frac{1}{2} \left(\frac{3(\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}')^2}{r^4} - \frac{r'^2}{r^2} \right) + \text{człony rzędu } \left(\frac{r'}{r} \right)^3 \text{ i wyższych} \right]. \end{aligned}$$

Zauważmy tutaj, że jeżeli położymy $\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}' = rr' \cos \theta$, rozwinięcie multipolowe może być zapisane w postaci

$$\frac{1}{R} = \frac{1}{r} \left[1 + \left(\frac{r'}{r} \right) \cos \theta + \left(\frac{r'}{r} \right)^2 \frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} + \dots \right]. \quad (1.100)$$

W rozdziale 6 udowodnimy, że dla $r' < r$

$$\frac{1}{R} \equiv \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \frac{1}{r} \sum_{i=0}^{\infty} \left(\frac{r'}{r} \right)^i P_i(\cos \theta), \quad (1.101)$$

gdzie $P_i(\cos \theta)$ są wielomianami Legendre'a:

$$\begin{aligned} P_0(\cos \theta) &= 1, \\ P_1(\cos \theta) &= \cos \theta, \\ P_2(\cos \theta) &= \frac{1}{2}(3 \cos^2 \theta - 1), \\ P_3(\cos \theta) &= \frac{1}{2}(5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta), \text{ itd.} \end{aligned} \quad (1.102)$$

Przez bezpośrednie rozwinięcie wykazaliśmy poprawność pierwszych trzech członów równania (1.101). Jeżeli teraz wstawimy rozwinięcie $1/R$ do wyrażenia na $\varphi(r)$, otrzymamy

$$\varphi(r) = \frac{1}{r} \int_{\tau'} \rho(\mathbf{r}') d\tau' + \frac{\mathbf{r}}{r^3} \cdot \int_{\tau'} \mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') d\tau' + \frac{1}{2} \frac{x_i x_j}{r^5} \int_{\tau'} [3x'_i x'_j - \delta_{ij} r'^2] \rho(\mathbf{r}') d\tau' + \dots \quad (1.103)$$

Pierwsze trzy multipole są zdefiniowane w tablicy 1.2.

Tablica 1.2.

Oznaczenie	Definicja	Nazwa	Charakter tensorowy
q	$\int_{\tau'} \rho(\mathbf{r}') d\tau'$	monopol (ładunek)	skalar
\mathbf{p}	$\int_{\tau'} \mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') d\tau'$	dipol	wektor
Q_{ij}	$\int_{\tau'} (3x'_i x'_j - \delta_{ij} r'^2) \rho(\mathbf{r}') d\tau'$	kwadrupol	tensor symetryczny drugiego rzędu

Multipole wyższego rzędu są zdefiniowane przez dalsze wyrazy rozwinięcia potencjału. Z definicji tensora momentu kwadrupolowego wynika, że jest on symetryczny. Ślad tensora T_{ij} jest to suma elementów diagonalnych. Zauważmy, że $(\text{Tr}(T_{ij}) \equiv \sum_i T_{ii})$.

$$\text{Tr} Q_{ij} = \sum_i Q_{ii} = \sum_i \int_{\tau'} (3x'_i x'_i - \delta_{ii} r'^2) \rho(\mathbf{r}') d\tau' = \int_{\tau'} (3r'^2 - 3r'^2) \rho d\tau' = 0.$$

Tak więc ślad tensora momentu kwadrupolowego jest tożsamościowo równy zeru. Znajomość momentu kwadrupolowego jest użyteczna przy określaniu kształtu jądra i tym samym przy otrzymywaniu informacji o siłach jądrowych. W rozwinięciu multipolowym pierwszy człon jest równy całkowitemu ładunkowi jądra; a drugi człon jest momentem dipolowym, który, jak można pokazać, znika dla stacjonarnych stanów układów kwantowych. Trzeci człon jest momentem kwadrupolowym. Przez jego pomiar i następnie dopasowanie rezultatów do modelu, który przewiduje taki moment kwadrupolowy, poznajemy kształt badanego jądra. I. I. Rabi i jego współpracownicy wykazali, że deuteron posiada niezerowy moment kwadrupolowy, i wyciągnęli wniosek, że deuteron musi mieć kształt wydłużonej elipsoidy, której długość jest 1,5 raza większa od szerokości. Świadczy to o istnieniu *niecentralnych sił jądrowych* między neutronem a protonem, co jest faktem o dużym znaczeniu.

ZADANIA

1. Udowodnić, posługując się metodą wektorową, że przekątne rombu są do siebie prostopadłe.

2. Cząstka porusza się w płaszczyźnie $x_1 x_2$ tak, że jej wektor położenia jest określony równaniem

$$\mathbf{r} = a \cos \omega t \mathbf{e}_1 + a \sin \omega t \mathbf{e}_2 \quad (\omega = \text{const}).$$

Pokazać, że w tym ruchu

- a) prędkość \mathbf{v} jest prostopadła do \mathbf{r} ,
- b) przyspieszenie \mathbf{a} jest skierowane do środka układu; znaleźć jego wartość,
- c) $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v}$ jest stałym wektorem; znaleźć jego długość.

3. W oparciu o prawa zachowania udowodnić, że w elastycznym zderzeniu dwóch cząstek o jednakowych masach, przy założeniu, że początkowo jedna z tych cząstek była nieruchoma, wektory prędkości po zderzeniu są do siebie prostopadłe (gdy są różne od zera).

4. Naładowana cząstka porusza się w jednorodnym polu magnetycznym \mathbf{B} , skierowanym w kierunku osi z i jednorodnym polu elektrycznym \mathbf{E} w płaszczyźnie yz . Napisać równania ruchu dla tej cząstki. Następnie rozwiązać je, przyjmując jako warunki początkowe ($t = 0$) $x = y = z = 0$; $\dot{x} = \dot{x}_0$, $\dot{y} = \dot{z} = 0$. Pokazać, że prędkość unoszenia w kierunku osi x jest równa E_y/B . Jeżeli $E_y = 0$, tor cząstki staje się spiralą nawiniętą wokół linii równoległej do osi z .

5. Udowodnić, że $\varepsilon_{ijk} \varepsilon_{ijk} = 6$.

6. Udowodnić tożsamości:

a) $\text{grad}(\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}) = (\mathbf{A} \cdot \text{grad})\mathbf{B} + (\mathbf{B} \cdot \text{grad})\mathbf{A} + \mathbf{A} \text{rot} \mathbf{B} + \mathbf{B} \text{rot} \mathbf{A}$,

b) $\mathbf{V} \cdot (\mathbf{U} \times \mathbf{V}) = \mathbf{V} \cdot (\mathbf{V} \times \mathbf{U}) - \mathbf{U} \cdot (\mathbf{V} \times \mathbf{V})$.

7. Udowodnić twierdzenie Gaussa:

$$\int_{\tau} (\varphi \nabla^2 \psi - \psi \nabla^2 \varphi) d\tau = \int_{\sigma} (\varphi \nabla \psi - \psi \nabla \varphi) \cdot d\sigma.$$

Wskazówka: Zastosować twierdzenie Gaussa o dywergencji do wektorów $\mathbf{A} = \varphi \nabla \psi$ i $\mathbf{B} = \psi \nabla \varphi$.

8. Gdyby elektryczny potencjał ładunku punktowego był równy

$$\varphi(r) = \frac{q}{r^{1-\varepsilon}}, \quad \varepsilon \ll 1 \quad (\text{dodatnie lub ujemne})$$

zamiast q/r , uległoby zmianie wiele wniosków fizycznych. Wyliczyć dla $r \neq 0$

a) $\mathbf{E} = -\nabla \varphi$, b) $\mathbf{V} \cdot \mathbf{E} = -\nabla^2 \varphi$, c) $\mathbf{V} \times \mathbf{E}$,

d) wyprowadzić odpowiednik prawa Gaussa dla kuli o promieniu R . Przedyskutować granicę $\varepsilon \rightarrow 0$ i porównać ze zwykłym potencjałem kulombowskim. W książce Panofsky'ego i Phillipsa (rozdział 1, zadanie 8) omówiono jedną z konsekwencji przyjęcia takiego potencjału.

9. Twór fizyczny znany jako mezon wektorowy opisuje się przez trzy pola wektorowe \mathbf{E} , \mathbf{H} , \mathbf{A} i rzeczywiste pole skalarne V . Pola te spełniają następujące równania

$$\nabla \cdot \mathbf{E} = -\mu^2 V,$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} - \mu^2 \mathbf{A} \quad (\mu^2 \text{ jest dodatnią stałą}),$$

$$\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \nabla V.$$

a) Pokazać, że $\nabla \cdot \mathbf{A} + \frac{\partial V}{\partial t} = 0$.

b) Pokazać, że V spełnia następujące równanie

$$\nabla^2 V - \mu^2 V - \frac{\partial^2 V}{\partial t^2} = 0.$$

c) Jeżeli V nie zależy od czasu to $\nabla^2 V - \mu^2 V = 0$. Pokazać, że jeżeli V znika na zamkniętej powierzchni, to $V = 0$ wewnątrz tej powierzchni.

10. a) Jaką klasę zjawisk fizycznych opisuje równanie Helmholtza

$$\nabla^2 \varphi + k^2 \varphi = 0?$$

b) Podać interpretację fizyczną tego równania w świetle dyskusji o fizycznym znaczeniu laplasjanu i uzgodnić tę interpretację z odpowiedzią na pytanie a.

11. a) Z równań Maxwella wyprowadzić prawo zachowania ładunku.

b) Wyrazić pole elektryczne poprzez potencjał skalarny φ i potencjał wektorowy \mathbf{A} , gdzie $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$. (Uwaga: w przypadku, gdy pole elektryczne zależy w dowolny sposób od czasu, \mathbf{E} nie musi się równać $\text{grad } \varphi$).

12. Antysymetryczny tensor drugiego rzędu F_{ij} jest scharakteryzowany trzema niezależnymi wielkościami. W efekcie, z takim tensorem można związać wektor H_k . Udowodnić, że $H_k = 1/2 \varepsilon_{ijk} F_{ij}$ wtedy i tylko wtedy, gdy $F_{ij} = \varepsilon_{ijk} H_k$.

13. Tensor pola elektromagnetycznego w próżni. Zadania 11 i 12 dają podstawy do rozwinięcia czterowymiarowej teorii pola elektromagnetycznego. Będziemy stosować układ jednostek Gaussa. Jeżeli utożsamimy wektor H_k z zadania 11 z polem magnetycznym, to zadanie 12 zwiąże H_k z antysymetrycznym tensorem drugiego rzędu, F_{ij} .

a) Udowodnić, że

$$F_{ij} = \frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \equiv \partial_i A_j - \partial_j A_i,$$

gdzie $\text{rot } \mathbf{A} = \mathbf{H}$.

b) Korzystając z (a) pokazać, że tensor F_{ij} jest antysymetryczny. Dotychczas F_{ij} był trzywymiarowym tensorem z $3^2 = 9$ składowymi. Rozszerzymy go teraz do czterech wymiarów.

c) Przyjąć, że $x_4 = ict$ i $A_4 = i\varphi$, gdzie $i = \sqrt{-1}$, a φ jest potencjałem elektrostatycznym. Wykazać, używając wyrażenia na F_{ij} z punktu (a) i korzystając z zadania 11 (b), że $F_{4j} = -F_{j4} = iE_j$ ($j = 1, 2, 3$).

d) Sprawdzić, że $F_{ii} = 0$ ($i = 1, 2, 3, 4$).

Tak więc, F_{ij} jest czterowymiarowym antysymetrycznym tensorem drugiego rzędu z $4^2 = 16$ składowymi. Cztery elementy diagonalne są równe zeru. Z pozostałych 12 elementów jedynie sześć jest niezależnych. Wyraża to fakt, że \mathbf{E} i \mathbf{H} mają sześć składowych.

e) Wypisać explicite tensor F_{ij} jako macierz 4×4 przy użyciu składowych \mathbf{E} i \mathbf{H} . Ważne jest, jaką metodą się to robi. Powinno się otrzymać

$$F_{ij} = \begin{bmatrix} 0 & H_z & -H_y & -iE_x \\ -H_z & 0 & H_x & -iE_y \\ H_y & -H_x & 0 & -iE_z \\ iE_x & iE_y & iE_z & 0 \end{bmatrix}$$

f) Wszystkie równania Maxwella mogą być wyrażone przy użyciu tensora pola elektromagnetycznego przez następujące dwa równania:

$$i. \partial_l F_{ik} + \partial_i F_{kl} + \partial_k F_{li} = 0,$$

$$ii. \partial_k F_{ik} = (4\pi/c)J_i,$$

gdzie $J_i = (\mathbf{J})_i$ dla $i = 1, 2, 3$ i $J_4 = ic\rho$ ($\rho =$ gęstość ładunku elektrycznego). W tych dwóch równaniach i, k i l przebiegają wartości od 1 do 4. Udowodnić, że te równania są równoważne równaniom Maxwella i nie dają nic więcej. (Należy zbadać różne kombinacje wskaźników).

g) Bezpośrednio z równania Maxwella (ii) z punktu (f) wyprowadzić czterowymiarową postać równania zachowania ładunku. Zinterpretować to równanie w tej postaci.

h) Pokazać, że siła Lorentza jest równa

$$f_i = \frac{1}{c} F_{ik} J_k, \quad i = 1, 2, 3,$$

gdzie f_i są trzema składowymi siły Lorentza. Podać interpretację wielkości icf_4 .

14. Udowodnić, że ślad elektromagnetycznego tensora energii-pędu T_{ik} jest równy zeru.

$$T_{ij} = \frac{1}{4\pi} \left(F_{il} F_{kj} - \frac{1}{4} F_{lm}^2 \delta_{ik} \right);$$

F_{ij} jest tensorem pola elektromagnetycznego z zadania 13.

15. Udowodnić, że jeżeli całkowity ładunek jest równy zeru, to moment dipolowy rozkładu ładunku jest niezależny od wyboru początku układu współrzędnych.

16. a) Ładunek q jest równomiernie rozłożony na okręgu o promieniu R leżącym w płaszczyźnie $z = 0$, koncentrycznym z osią z . Nabój $(-q)$ jest umieszczony w środku okręgu. Znaleźć (i) elektryczny moment monopolowy, (ii) wektor elektrycznego momentu dipolowego, (iii) tensor elektrycznego momentu kwadrupolowego, wyrażając go później przez odpowiednią macierz 3×3 . Można sobie znacznie ułatwić pracę, korzystając z symetrii tensora kwadrupolowego i znikania jego śladu, jak również z symetrii układu fizycznego.

b) Dla tego rozkładu ładunku znaleźć rozwinięcie multipolowe dla potencjału w dużej odległości od środka układu ($r/R \gg 1$); rozwinąć do wyrazów kwadrupolowych włącznie i znaleźć zależność końcowego wyniku od współrzędnych sferycznych r, θ, φ .

17. Znaleźć pierwsze trzy momenty multipolowe dla pojedynczego ładunku punktowego q umieszczonego w punkcie $\mathbf{r} = R(\mathbf{i} + \mathbf{j} - \mathbf{k})$. Określić, przy użyciu trzech członów rozwinięcia multipolowego, potencjał (we współrzędnych sferycznych) w punkcie bardzo odległym od ładunku.

LITERATURA POMOCNICZA

Karaśkiewicz, E., *Zarys teorii wektorów i tensorów*, PWN Warszawa 1971

Landau, L. E. Lifszyc, *Teoria pola*, PWN Warszawa 1958

Synge, I. L. i A. Schild, *Tensor Calculus*, Toronto: University of Toronto Press, 1949

Рашевский, П. К., *Риманова геометрия и тензорный анализ*, Москва 1967

RACHUNEK WARIACYJNY

WSTĘP

Jednym z najstarszych zagadnień fizyki matematycznej jest problem minimalizowania wyrażeń zależnych od pewnych funkcji. W zadaniach tego typu szukamy zazwyczaj funkcji, dla których całki z tych funkcji i ich pochodnych przyjmują wartości najmniejsze. A więc nie chodzi tu o znalezienie punktu, w którym jakaś konkretna funkcja przyjmuje wartość najmniejszą, lecz o określenie pełnego kształtu funkcji, dla której odpowiednia całka ma minimum. Problemy te odegrały zasadniczą rolę w XVIII i XIX wieku, ich znaczenie nie zmniejszyło się również w XX wieku pomimo pojawienia się idei kwantowych. W celu zapoznania czytelnika z podstawowymi pojęciami i metodami w niniejszym rozdziale przedstawimy pokrótce idee i zastosowania rachunku wariacyjnego w fizyce klasycznej. W następnych rozdziałach będziemy mieli okazję do ponownego zajęcia się tymi zagadnieniami w bardziej nowoczesnym ujęciu.

2.1. KILKA ZNANYCH PROBLEMÓW

Rachunek wariacyjny jest starą gałęzią matematyki. Samodzielny rozwój tej gałęzi rozpoczął się na kilka lat przed sformułowaniem kilku problemów, które dziś uważamy za podstawowe dla tego działu. Przedstawimy trzy takie problemy.

1) Jaka krzywa na płaszczyźnie łącząca dwa punkty ma najmniejszą długość?

Pytanie to można sformułować następująco. Niech (x_A, y_A) i (x_B, y_B) będą dwoma punktami w płaszczyźnie xy i niech $x_A < x_B$. Funkcja $y = y(x)$ wiąże te punkty, więc $y(x_A) = y_A$ i $y(x_B) = y_B$. Długość łuku łączącego te punkty jest równa

$$I = \int_{(x_A, y_A)}^{(x_B, y_B)} ds.$$

Ponieważ $ds^2 = dx^2 + dy^2$, mamy więc

$$ds = \sqrt{1 + y'^2} dx,$$

gdzie y' oznacza pochodną y ze względu na x . Naszym zadaniem jest znalezienie takiej funkcji $y(x)$, zawartej w funkcji *podcałkowej*, dla której *całka* I osiąga najmniejszą wartość.

2) W 1696 Johann Bernoulli z Uniwersytetu w Basel postawił następujący problem: Dane są dwa punkty A i B w płaszczyźnie pionowej, znaleźć tor AMB mający tę własność, że punkt materialny spada wzdłuż niego z punktu A do punktu B w najkrótszym czasie. Zakładamy, że punkt materialny porusza się jedynie pod wpływem siły ciężkości. Jest to znany problem *brachistochrony* (z greckiego *brachistos* — najkrótszy, *chronos* — czas), i rozpoczął on ogólne zainteresowanie rachunkiem wariacyjnym.

Przyjmijmy punkt A za początek naszego układu współrzędnych i założmy, że cząstka o masie m ma początkowo prędkość zero. (Przyjmujemy, jak to zrobił Bernoulli, że nie ma tarcia). Oś y prowadzimy pionowo w dół. Prędkość wzdłuż krzywej AMB z rys. 2.1 jest równa $v = ds/dt$, tak więc całkowity czas spadku jest dany wzorem

$$I = \int_A^B \frac{ds}{v} = \int_{x_A=0}^{x_B} \frac{\sqrt{1+y'^2}}{v} dx.$$

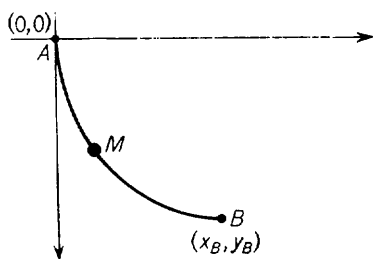
Musimy jeszcze wyrazić v w funkcji położenia. Wiemy, że jeżeli nie występuje tarcie, wzrost energii kinetycznej równy jest ubytkowi energii potencjalnej. Stąd

$$\frac{1}{2}mv^2 = mgy,$$

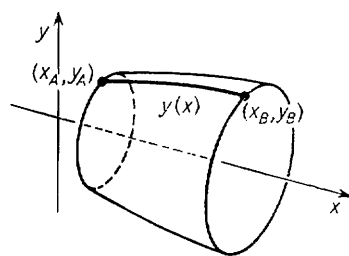
tak więc

$$I = \frac{1}{\sqrt{2g}} \int_0^{x_B} \sqrt{\frac{1+y'^2}{y}} dx.$$

I znowu należy znaleźć funkcję $y(x)$, dla której I ma wartość najmniejszą.



Rys. 2.1. Brachistochna Bernoulliego



Rys. 2.2. Najmniejsza powierzchnia obrotowa

3) Trzeci problem dotyczy znalezienia najmniejszej powierzchni obrotowej przechodzącej przez ustalone punkty (x_A, y_A) i (x_B, y_B) . Przypuśćmy, że krzywa $y(x)$ obraca się wokół osi x jak przedstawiono na rys. 2.2. Chcemy zminimalizować pole stworzonej w ten sposób powierzchni. Zakładamy, że dla $x_A \leq x \leq x_B$, $y_A > 0$, $y_B > 0$ oraz $y(x) \geq 0$. Szukamy minimum pola powierzchni

$$I = 2\pi \int_A^B y ds = 2\pi \int_{x_A}^{x_B} y \sqrt{1+y'^2} dx,$$

gdzie $y(x_A) = y_A$ i $y(x_B) = y_B$.

Wszystkie te trzy problemy są szczególnymi przypadkami bardziej ogólnego zadania: Jaka jest funkcja $y(x)$ z warunkami brzegowymi $y(x_A) = y_A$ i $y(x_B) = y_B$, dla której całka

$$I = \int_{x_A}^{x_B} f(x, y, y') dx,$$

osiąga minimum (f jest znaną funkcją x, y, y'). Innymi słowy, szukamy *minimum całki* wybierając odpowiednią drogę całkowania od x_A do x_B .

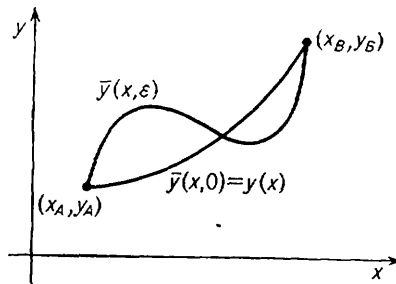
2.2 RÓWNANIE EULERA-LAGRANGE'A

W tym paragrafie wyprowadzimy równanie różniczkowe, które musi spełniać funkcja $y(x)$, aby całka

$$I = \int_{x_A}^{x_B} f(x, y, y') dx$$

osiągała minimum. $x_A, x_B, y(x_A) = y_A, y(x_B) = y_B$ i f są dane, funkcja f jest z założenia dwukrotnie różniczkowalną funkcją wszystkich swoich argumentów. Oznaczamy funkcję, dla której całka I osiąga minimum przez $y(x)$ (rys. 2.3) i badamy jednoparametrową rodzinę funkcji porównawczych $\bar{y}(x, \varepsilon)$, które spełniają warunki:

- $\bar{y}(x_A, \varepsilon) = y_A, \bar{y}(x_B, \varepsilon) = y_B$ dla każdego ε ;
- $\bar{y}(x, 0) = y(x)$ — funkcja poszukiwana;
- $\bar{y}(x, \varepsilon)$ i wszystkie jej pochodne aż do pochodnych drugiego rzędu są ciągłymi funkcjami x i ε .



Rys. 2.3. Jednoparametrowa rodzina funkcji porównawczych

Dla danej funkcji porównawczej całka

$$I(\varepsilon) = \int_{x_A}^{x_B} f(x, \bar{y}, \bar{y}') dx$$

jest oczywiście funkcją ε . A ponieważ wstawienie $\varepsilon = 0$ odpowiada (warunek b) zastąpieniu \bar{y} przez $y(x)$ i \bar{y}' przez $y'(x)$, widzimy, że $I(\varepsilon)$ będzie miało minimum dla wartości $\varepsilon = 0$, co jest zgodne z przyjętymi oznaczeniami. Jest to prawda dla *każdej* krzywej $\bar{y}(x, \varepsilon)$.

Będziemy się teraz w dalszym ciągu zajmować badaniem rodziny gładkich krzywych przechodzących przez punkty (x_A, y_A) i (x_B, y_B) i numerowanych zmienną ε . Krzywa,

dla której całka I przyjmuje najmniejszą możliwą wartość, odpowiada zmiennej $\varepsilon = 0$. Chcielibyśmy podkreślić, że wybór $\varepsilon = 0$ jest zupełnie dowolny. Moglibyśmy równie dobrze oznaczyć funkcję minimalizującą przez $\varepsilon = 1,67$ i zmienić odpowiednio warunek b. Ponieważ krzywa ta z założenia minimalizuje I , a I zależy w sposób ciągły od ε i jest różniczkowalną funkcją ε , co wynika z warunku c, możemy do znajdowania minimum tego funkcjonału stosować znane metody rachunku różniczkowego i całkowego.

Warunkiem koniecznym, *ale nie dostatecznym*, na występowanie minimum jest znikanie pierwszej pochodnej. To znaczy warunek

$$\left[\frac{dI}{d\varepsilon} \right]_{\varepsilon=0} = 0 \quad (2.1)$$

jest warunkiem koniecznym na to, aby dla $\varepsilon = 0$ całka przybierała swą najmniejszą wartość. Różniczkujemy teraz całkę $I(\varepsilon)$ po ε (należy pamiętać, że x nie jest funkcją ε , jedynie \bar{y} i \bar{y}' zależą od ε)

$$\frac{dI}{d\varepsilon} = \int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial f}{\partial \bar{y}} \frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} + \frac{\partial f}{\partial \bar{y}'} \frac{d\bar{y}'}{d\varepsilon} \right] dx,$$

co zgodnie z warunkiem c możemy zapisać w postaci

$$\frac{dI}{d\varepsilon} = \int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial f}{\partial \bar{y}} \frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} + \frac{\partial f}{\partial \bar{y}'} \frac{d}{dx} \left(\frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} \right) \right] dx.$$

Teraz, jeżeli scałkujemy przez części drugi człon, otrzymamy

$$\frac{dI}{d\varepsilon} = \int_{x_A}^{x_B} \frac{\partial f}{\partial \bar{y}} \frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} dx + \left[\frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} \frac{\partial f}{\partial \bar{y}'} \right]_{x_A}^{x_B} - \int_{x_A}^{x_B} \frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial \bar{y}'} \right) dx.$$

Lecz z warunku a, dla każdego ε , $\bar{y}(x_A, \varepsilon) = y_A$ i $\bar{y}(x_B, \varepsilon) = y_B$. Więc

$$\frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} \Big|_{x=x_A} = 0 = \frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} \Big|_{x=x_B}$$

i w końcu otrzymamy

$$\frac{dI}{d\varepsilon} = \int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial f}{\partial \bar{y}} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial \bar{y}'} \right) \right] \frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} dx.$$

Teraz zażądamy, by $I(\varepsilon)$ miało minimum dla $\varepsilon = 0$, a więc

$$\left[\frac{dI}{d\varepsilon} \right]_{\varepsilon=0} = 0 = \int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial f}{\partial \bar{y}} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial \bar{y}'} \right) \right]_{\varepsilon=0} \left[\frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} \right]_{\varepsilon=0} dx.$$

Położenie $\varepsilon = 0$ jest równoważne położeniu $\bar{y}(x, \varepsilon) = y(x)$, $\bar{y}'(x, \varepsilon) = y'(x)$ i $\bar{y}''(x, \varepsilon) = y''(x)$. (Zauważmy, że funkcja podcałkowa zależy od \bar{y} i kładąc granicę $\varepsilon = 0$ powinniśmy wiedzieć, czy druga pochodna $y''(x, \varepsilon)$ jest ciągłą funkcją swoich dwóch zmiennych. Jest to zagwarantowane warunkiem c). Wprowadzając oznaczenie

$$\left[\frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} \right]_{\varepsilon=0} = \eta(x),$$

otrzymujemy

$$\int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right) \right] \eta(x) dx = 0. \quad (2.2)$$

Lecz $\eta(x)$ jest zupełnie dowolna z wyjątkiem tego, że na mocy warunku a) znika w x_A i x_B oraz, że jest ciągła i różniczkowalna (warunek c). Tak więc, aby całka (2.2) zniknęła, musi zachodzić

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right) = 0. \quad (2.3)$$

Równanie to zostało wyprowadzone przez Eulera w 1744 r. Jest ono znane jako równanie Eulera–Lagrange’a, ponieważ jest ono także podstawą mechaniki klasycznej w ujęciu Lagrange’a. Jeżeli rozpiszemy pełną pochodną ze względu na x , równanie (2.3) przyjmuje postać:

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y'} - \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial y'} y' - \frac{\partial^2 f}{\partial^2 y'} y'' = 0.$$

Jest to równanie różniczkowe drugiego rzędu, którego rozwiązanie (pod warunkiem, że minimum istnieje) dostarcza nam szukanej, dwukrotnie różniczkowalnej funkcji $y(x)$. Warunek (2.1) jest jedynie warunkiem koniecznym na istnienie minimum, rozwiązanie dla $\varepsilon = 0$, $y(x)$, mogłoby produkować także maksimum, a nawet punkt przegięcia funkcji $I(\varepsilon)$. Tak więc to, co naprawdę znaleźliśmy, jest funkcją dającą ekstremum (*ekstremalą*). Z natury problemu wynika, że możemy zwykle podać naturę ekstremum bez badania znaków wyższych pochodnych $I(\varepsilon)$, co jest w ogólności bardzo skomplikowaną procedurą. Na przykład, w trzecim problemie dyskutowanym w § 2.1 ze względów fizycznych jest oczywiste, że maksimum nie istnieje. Pojawia się tu także pytanie, czy znaleźliśmy minimum względne czy też bezwzględne. W ogólności, nie badamy tych problemów szczegółowo w sensie matematycznym, lecz opieramy się na fizycznej interpretacji sytuacji, co pozwala określić nam typ badanych ekstremów.

W wielu interesujących z fizycznego punktu widzenia przypadkach, równanie Eulera–Lagrange’a może być znacznie uproszczone. W szczególności zauważmy, że we wszystkich przykładach badanych w paragrafie 2.1 funkcja $f(x, y, y')$ nie zależała *explicite* od x ; jedynie pośrednio przez zależność x od y i y' . Biorąc to pod uwagę zbadajmy wielkość

$$\frac{d}{dx} \left[y' \frac{\partial f}{\partial y'} - f \right].$$

Wykonując różniczkowanie otrzymujemy

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \left[y' \frac{\partial f}{\partial y'} - f \right] &= y'' \frac{\partial f}{\partial y'} + y' \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'} - \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{\partial f}{\partial y} y' - \frac{\partial f}{\partial y'} y'' = \\ &= -y' \left[\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right) \right] - \frac{\partial f}{\partial x}. \end{aligned}$$

Ale jeżeli y spełnia równanie Eulera–Lagrange’a, to znaczy równanie (2.3) i jeżeli f nie zależy *explicite* od x to

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 0,$$

skąd wyciągamy wniosek, że

$$\frac{d}{dx} \left[y' \frac{\partial f}{\partial y'} - f \right] = 0.$$

Możemy scałkować to równanie i otrzymamy:

$$y' \frac{\partial f}{\partial y'} - f = \text{const.} \quad (2.4)$$

Tym sposobem otrzymaliśmy proste równanie różniczkowe *pierwszego rzędu* na $y(x)$.

Technika zastosowana przy wyprowadzaniu równania Eulera–Lagrange’a dla jednej zmiennej, może być z łatwością rozszerzona na całki postaci

$$I = \int_{x_A}^{x_B} f(x, y_1, y_2, \dots, y_n; y'_1, y'_2, \dots, y'_n) dx.$$

Będziemy teraz szukać funkcji $y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x)$, dla których I przyjmuje wartość minimalną, przy warunkach

$$\begin{aligned} y_1(x_A) &= y_{1A}, & y_1(x_B) &= y_{1B}, \\ y_2(x_A) &= y_{2A}, & y_2(x_B) &= y_{2B}, \\ &\vdots & &\vdots \\ y_n(x_A) &= y_{nA}, & y_n(x_B) &= y_{nB}. \end{aligned}$$

Zagadnienie to jest prawie identyczne z tym, które właśnie rozwiązaliśmy. Jeżeli bowiem wyobrazimy sobie, że $(n-1)$ funkcji \bar{y}_j ma szukaną postać $y_j(x)$ i jeżeli będziemy teraz zmieniać pozostałą funkcję, powiedzmy \bar{y}_i tak, by całka I osiągnęła minimum, to otrzymamy problem identyczny z tym, który właśnie rozwiązaliśmy. Równanie spełnione przez $y_i(x)$ (i -tą szukaną funkcję) jest, zgodnie z (2.3), po prostu równe

$$\frac{\partial f}{\partial y_i} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y'_i} \right) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

I znów, tak jak w przypadku jednej zmiennej, jeżeli f nie zależy od x , otrzymujemy całkę pierwszą

$$\sum_{i=1}^n y'_i \frac{\partial f}{\partial y'_i} - f = \text{const}, \quad (2.6)$$

która wynika natychmiast z oszacowania

$$\frac{d}{dx} \left[\sum_{i=1}^n y'_i \frac{\partial f}{\partial y'_i} - f \right]$$

i założenia, że $y_i(x)$ spełnia równanie (2.5).

Zauważmy, że równanie (2.6), prowadzące do rozwiązania problemu dla przypadku kilku zmiennych, wcale nie jest tak użyteczne jak równanie (2.4) dla jednej zmiennej zależnej. Równanie (2.4) sprowadza całe zadanie do rozwiązania prostego równania różniczkowego pierwszego rzędu, podczas gdy (2.6) daje równanie łączące pierwsze pochodne *wszystkich* y_i .

2.3. KILKA ZNANYCH ROZWIĄZAŃ

W tym paragrafie będziemy omawiać rozwiązania trzech klasycznych problemów, przedstawionych w paragrafie (2.1), w kolejności, w której były one omawiane.

Problem 1. Najkrótsza linia. W tym przypadku $f = \sqrt{1+y'^2}$. Bezpośrednio z równania Eulera-Lagrange'a wynika, że

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right) = 0 \quad \text{lub} \quad \frac{\partial f}{\partial y'} = \frac{y'}{\sqrt{1+y'^2}} = \text{const},$$

gdyż $\partial f / \partial y = 0$. Równania te mówią, że y' równa się jakiejś stałej, powiedzmy $y' = A$, więc

$$y = Ax + B,$$

gdzie A , B są stałymi, które możemy tak wybrać, by ta linia prosta przechodziła przez punkty końcowe.

W tym przypadku, ponieważ f nie zależy explicite od x , możemy równie dobrze stosować równanie (2.4)

$$y' \frac{\partial f}{\partial y'} - f = \text{const}.$$

Podstawiając funkcję f otrzymujemy stąd, że

$$\frac{1}{\sqrt{1+y'^2}} = \text{const},$$

z czego wnioskujemy, że y' jest stałą, a więc znów $y' = Ax + B$.

Problem 2. Brachistochrona. Dla tego problemu (§ 2.1)

$$f = \sqrt{\frac{1+y'^2}{y}}$$

(opuściliśmy tu nieistotny czynnik $1/\sqrt{2g}$). Ponieważ f nie zależy explicite od x , stosujemy równanie (2.4)

$$\frac{y'^2}{\sqrt{y(1+y'^2)}} - \sqrt{\frac{1+y'^2}{y}} = C \quad \text{lub} \quad \frac{1}{y(1+y'^2)} = C^2.$$

Kładąc $1/C^2 = 2a$, mamy

$$y' = \sqrt{\frac{2a-y}{y}},$$

a całkowanie daje

$$x - x_0 = \int \sqrt{\frac{y}{2a-y}} dy.$$

Jeżeli wykonamy zamianę zmiennych $y = a(1 - \cos\theta)$, to całka ta przyjmie postać

$$x - x_0 = 2a \int \sin^2 \frac{\theta}{2} d\theta = a(\theta - \sin\theta).$$

Tak więc mamy rozwiązanie tego problemu w postaci parametrycznej

$$x = a(\theta - \sin\theta) + x_0, \quad y = a(1 - \cos\theta).$$

Są to równania cykloidy generowanej przez ruch stałego punktu na obwodzie koła o promieniu a , które toczy się po dodatniej stronie linii $y = 0$, to znaczy po dolnej stronie osi x z rys. 2.1. Istnieje jedna i tylko jedna cykloida przechodząca przez początek układu i punkt (x_B, y_B) ; należy tu odpowiednio dobrać stałe a i x_0 .

Bernoulli, który pierwszy rozwiązał to zadanie, nie zrobił tego w przedstawiony tu sposób. Ciekawe, że Bernoulli, chociaż chwalił się, że znalazł wspaniałe rozwiązanie tego problemu, nie opublikował go od razu tylko wyzwał innych matematyków, a szczególnie swego starszego brata Jakuba, z którym prowadził zawzięte boje, aby znaleźli rozwiązanie. Swoją rezultat opublikował dopiero w 1697 r.*

Na krótko przed pracą Bernoulliego opisano krzywą, którą nazywamy cykloidą, w związku z rozważaniami dotyczącymi idealnego wahadła matematycznego. (Wahadło idealne jest to wahadło, którego okres nie zależy od amplitudy wychyleń. Dla wahadła, w którym ciężarek opisuje część okręgu — jest to jedyny łatwy do skonstruowania przypadek — okres jest niezależny od amplitudy jedynie wtedy, gdy amplituda jest równa zero). Huygens stwierdził, że punkt materialny oscylujący bez tarcia w stałym polu ciężkości po pionowej cykloidzie ma okres niezależny od amplitudy. Po odkryciu Bernoulliego krzywą tę nazywa się nieraz brachistochroną.

Problem 3. Najmniejsza powierzchnia. W tym przypadku $f = y \sqrt{1+y'^2}$ (§ 2.1). Ponieważ i tu f nie zależy explicite od x , więc

$$y' \frac{\partial f}{\partial y'} - f = -b,$$

gdzie stałą b , zgodnie ze zwyczajem, zapisujemy z minusem. Wstawiając naszą funkcję f mamy

$$\frac{y}{\sqrt{1+y'^2}} = b,$$

z czego otrzymujemy

$$x - x_0 = \int \frac{dy}{\sqrt{\frac{y^2}{b^2} - 1}} = b \operatorname{Arch} \left(\frac{y}{b} \right).$$

Tak więc

$$y = b \operatorname{ch} \frac{x - x_0}{b}.$$

Ponieważ spodziewamy się, że krzywa ta leży całkowicie powyżej osi x , b musi być większe od zera.

Jest to krzywa łańcuchowa, generuje ona pewną powierzchnię obrotową (*katenoide*). Stałe b i x_0 muszą być tak dobrane, aby krzywa ta przechodziła przez punkty (x_A, y_A) i (x_B, y_B) nie przecinając osi x . To nie zawsze da się zrobić. Rozwinięta tu teoria jest niekompletna przede wszystkim dlatego, że wyznacza nam jedynie krzywe dwukrotnie różniczkalne. Prześledźmy dokładnie problem ze związanymi końcami (x_A, y_A) i (x_B, y_B) . Jeżeli krzywa łańcuchowa przechodzi przez (x_A, y_A) , wtedy b i x_0 są związane równaniem

$$y_A = b \operatorname{ch} \frac{x_A - x_0}{b}.$$

* Patrz Courant and Robbins, *What is Mathematics?*, strony 379–384.

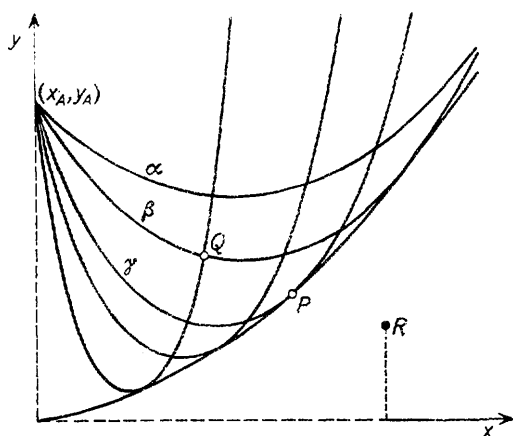
Mówi to nam, że

$$x_0 = x_A - b \operatorname{Arch} \frac{y_A}{b},$$

tak więc otrzymujemy następujące równanie krzywej łańcuchowej:

$$y = b \operatorname{ch} \left[\frac{x - x_A}{b} + \operatorname{Arch} \left(\frac{y_A}{b} \right) \right].$$

Równanie to opisuje jednoparametrową rodzinę krzywych łańcuchowych, które przechodzą przez punkt (x_A, y_A) , jak pokazano na rys. 2.4. W ostatnim równaniu wyrażenie $\operatorname{Arch}(y_A/b)$ musi być ujemne, jeżeli krzywe mają minimum na prawo od x_A . Można pokazać, że każda taka krzywa $\alpha, \beta, \gamma \dots$ z rys. 2.4 przechodząca przez (x_A, y_A) i nie przecinająca osi x jest styczna do obwiedni. Obwiednia jest parabolą z ogniskiem w (x_A, y_A) . Żadna z tych krzywych nie może przechodzić przez punkt, który jest oddzielony od (x_A, y_A) przez



Rys. 2.4.

obwiednię (leżący na zewnątrz obwiedni), jak na przykład punkt R . Przez punkt leżący na obwiedni (np. P) przechodzi tylko jedna krzywa łańcuchowa, natomiast przez punkt Q , leżący po tej samej stronie obwiedni co (x_A, y_A) przechodzą dwie krzywe. Widzimy więc, że dla punktów typu R nie istnieją dwukrotnie różniczkowalne krzywe minimalizujące. Można pokazać, że najmniejsza powierzchnia jest w tym przypadku generowana przez krzywą łamaną, której odcinki są następujące:

$$\begin{aligned} x &= x_A & \text{dla} & & 0 \leq y \leq y_A, \\ y &= 0 & \text{dla} & & x_A \leq x \leq x_R, \\ x &= x_R & \text{dla} & & 0 \leq y \leq y_R. \end{aligned}$$

Rozwiązanie to nosi nazwę rozwiązania nieciągłości Goldschmidta. Generuje ono powierzchnię obrotową, której pole jest równe $\pi(y_A^2 + y_R^2)$. Powierzchnia ta jest zwykle względnym minimum, ale okazuje się, że istnieje obszar punktów (x_B, y_B) , dla których krzywe te dają minimum bezwzględne. Wchodzimy do obszaru tych punktów, jeżeli odejdziemy wystarczająco daleko w górę lub na lewo od obwiedni. Wtedy górna krzywa łańcuchowa

daje bezwzględnie najmniejszą powierzchnię obrotową. Górna krzywa przechodząca przez punkt taki jak Q zawsze daje minimum względne. Najniższa krzywa przechodząca przez ten punkt, jak również krzywe przechodzące przez punkt taki jak P nie generują nawet względnego minimum.

Przeanalizowaliśmy szczegółowo to niepełne rozwiązanie, aby uwypuklić ograniczenia i subtelności teorii występujące przy dokładniejszej analizie.

2.4. PROBLEMY IZOPERYMETRYCZNE Z WIĘZAMI

Był kiedyś następujący zwyczaj nagradzania wyjątkowej służby wojskowej lub cywilnej. Król dawał wyróżnianej osobie tyle ziemi, ile zdołała ona okrążyć pługiem w określonym czasie. Pojawia się tu problem znalezienia płaskiej krzywej o danej długości, obejmującej możliwie największą powierzchnię — tzw. problem izoperymetryczny.

Formułując to w języku matematycznym, mówimy, że chcemy otrzymać równanie różniczkowe, które ma być spełnione przez funkcję $y(x)$, dla której całka

$$I = \int_{x_A}^{x_B} f(x, y, y') dx$$

przyjmuje wartość ekstremalną, jak również zachodzi drugi związek, dany przez całkę

$$J = \int_{x_A}^{x_B} g(x, y, y') dx$$

przy ustalonych wartościach $y(x_A) = y_A$ i $y(x_B) = y_B$. Oczywiście, można sobie łatwo wyobrazić bardziej ogólną klasę problemów. Na przykład, możemy dopuścić możliwość występowania większej liczby zmiennych zależnych, powiedzmy $y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x)$ i możemy wyobrazić sobie kilka całek J_1, J_2, \dots, J_m . Jednakże ten prosty przypadek przedstawiony powyżej wystarczy do zilustrowania metody. Potem napiszemy bardziej ogólny wynik, którego dowód pozostawiamy czytelnikom jako ćwiczenie rozwijające sprawne posługiwanie się wskaźnikami. Procedura jest właściwie taka sama jak w § 2.2. Badamy *awuparametrową* rodzinę funkcji $\bar{y}(x_1, \varepsilon_1, \varepsilon_2)$ z następującymi warunkami

- (α) $\bar{y}(x_A, \varepsilon_1, \varepsilon_2) = y_A, \quad \bar{y}(x_B, \varepsilon_1, \varepsilon_2) = y_B$ dla wszystkich ε_1 i ε_2 ,
- (β) $\bar{y}(x, 0, 0) = y(x)$ — szukana funkcja,
- (γ) $\bar{y}(x, \varepsilon_1, \varepsilon_2)$ ma ciągłe pochodne pierwszego i drugiego rzędu względem wszystkich zmiennych.

Tworzymy całki

$$I(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \int_{x_A}^{x_B} f(x, \bar{y}, \bar{y}') dx,$$

$$J(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \int_{x_A}^{x_B} g(x, \bar{y}, \bar{y}') dx = \text{const.}$$

Tak jak w § 2.2 chcemy znaleźć ekstremum całki $I(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ ze względu na ε_1 i ε_2 , żądając by ekstremum to występowało dla $\varepsilon_1 = 0, \varepsilon_2 = 0$, lecz teraz przy dodatkowym warunku

$J(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \text{const}$. Oczywiście, ε_1 i ε_2 nie są niezależne, jeżeli $J(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ ma ustaloną wartość, i z tego to powodu postanowiliśmy wprowadzić dwuparametrową rodzinę funkcji $\bar{y}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$. Jeżeli mielibyśmy całkę $J(\varepsilon)$, wtedy stała wartość J wyznaczałaby ε , co z kolei określiłoby całkę $I(\varepsilon)$.

Zastosujemy teraz technikę rachunku różniczkowego i całkowego do zbudowania wielkości

$$K(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = I(\varepsilon_1, \varepsilon_2) + \lambda J(\varepsilon_1, \varepsilon_2),$$

gdzie λ jest stałą, na razie nie określoną, nazywaną *mnożnikiem Lagrange'a*. Warunek, aby ekstremum $K(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ i jednocześnie $I(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ występowało dla $\varepsilon_1 = 0$, $\varepsilon_2 = 0$, brzmi następująco:

$$\left[\frac{\partial K}{\partial \varepsilon_j} \right]_{\substack{\varepsilon_1=0 \\ \varepsilon_2=0}} = 0 = \left[\frac{\partial K}{\partial \varepsilon_j} \right]_{\substack{\varepsilon_1=0 \\ \varepsilon_2=0}},$$

gdzie K jest po prostu dane przez

$$K(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \int_{x_A}^{x_B} h(x, \bar{y}, \bar{y}') dx,$$

i $h = f + \lambda g$. Musimy teraz obliczyć dwie pochodne cząstkowe pierwszego rzędu

$$\frac{\partial K}{\partial \varepsilon_j} = \int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial h}{\partial \bar{y}} \frac{\partial \bar{y}}{\partial \varepsilon_j} + \frac{\partial h}{\partial \bar{y}'} \frac{\partial \bar{y}'}{\partial \varepsilon_j} \right] dx, \quad j = 1, 2.$$

Całkując przez części tak jak w § 2.2 mamy

$$\frac{\partial K}{\partial \varepsilon_j} = \int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial h}{\partial \bar{y}} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial h}{\partial \bar{y}'} \right) \right] \frac{\partial \bar{y}}{\partial \varepsilon_j} dx, \quad j = 1, 2,$$

gdzie po zastosowaniu warunku (α) opuściliśmy człon z granicami. Kładziemy teraz $\varepsilon_1 = 0$ i $\varepsilon_2 = 0$ i żądamy, aby dwie pierwsze pochodne K zniknęły. Tak więc

$$\int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial h}{\partial \bar{y}} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial h}{\partial \bar{y}'} \right) \right] \eta_j(x) dx = 0, \quad j = 1, 2,$$

gdzie wprowadziliśmy oznaczenie

$$\left[\frac{\partial \bar{y}}{\partial \varepsilon_j} \right]_{\substack{\varepsilon_1=0 \\ \varepsilon_2=0}} = \eta_j(x).$$

Lecz funkcje $\eta_1(x)$ i $\eta_2(x)$ są dowolne. Wnioskujemy więc, że

$$\frac{\partial h}{\partial \bar{y}} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial h}{\partial \bar{y}'} \right) = 0.$$

Równanie to jest równaniem na szukaną funkcję $y(x)$.

To wygląda dokładnie tak jak równanie Eulera-Lagrange'a (§ 2.2), z tym, że występuje tu wielkość $h = f + \lambda g$ zamiast f . Zauważmy, że rozwiązanie równania Eulera-Lagrange'a zawiera dwie stałe całkowania i mnożnik λ . Te trzy liczby wystarczą do zapewnienia, by funkcja $y(x)$ przechodziła przez dwa punkty końcowe (x_A, y_A) i (x_B, y_B) oraz by całka I

miała wymaganą wartość. Uogólnienie tego wyniku nie jest trudne. Po pierwsze, jeżeli mamy m całek więzów J_1, J_2, \dots, J_m , wtedy funkcja h spełniająca równanie Eulera-Lagrange'a jest postaci

$$h = f + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i,$$

gdzie

$$J_i = \int_{x_A}^{x_B} g_i(x, y, y') dx = \text{const.}$$

Jeżeli dopuszczamy możliwość występowania n zmiennych zależnych, proste rozszerzenie zapisu pokazuje (§ 2.2), że otrzymamy zbiór równań Eulera-Lagrange'a

$$\frac{\partial h}{\partial y_i} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial h}{\partial y_i'} \right) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (2.7)$$

gdzie znowu mamy

$$h = f + \sum_{i=1}^m \lambda_i g_i. \quad (2.8)$$

Czytelnik może bez trudu zrobić sam te kilka kroków koniecznych do wyprowadzenia równań (2.7) i (2.8). Zauważmy, że w przypadku gdy mamy m całek więzów, należy koniecznie stosować $(m+1)$ -parametrową rodzinę funkcji $\bar{y}(x_1, \varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_{m+1})$.

Zajmiemy się teraz rozwiązaniem oryginalnego problemu izoperymetrycznego. Aby znaleźć krzywą o ustalonej długości L , otaczającą największą powierzchnię, należy znaleźć funkcje $x(t)$ i $y(t)$, dla których

$$A = \frac{1}{2} \int_{t_A}^{t_B} (xy' - x'y) dt$$

ma minimum. Jest to wzór na powierzchnię wewnątrz krzywej zamkniętej w płaszczyźnie xy , współrzędne x i y parametryzuje zmienna t . Czytelnik zechce pokazać, że to wyrażenie we współrzędnych biegunowych ma postać

$$A = \frac{1}{2} \int_0^{2\pi} r^2(\theta) d\theta.$$

Długość jest dana przez

$$L = \int_A^B ds = \int_{t_A}^{t_B} \sqrt{x'^2 + y'^2} dt.$$

Tak więc nasza funkcja $h(t, x, y, x', y')$ jest równa

$$h = \frac{1}{2} (xy' - x'y) + \lambda \sqrt{x'^2 + y'^2}.$$

Mamy jedną zmienną niezależną t , dwie zmienne zależne $x(t)$ i $y(t)$ i jedną całkę więzów (i stąd jeden mnożnik Lagrange'a). Stosując (2.7) otrzymujemy

$$\frac{\partial h}{\partial x} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial h}{\partial x'} \right) = 0 = \frac{1}{2} y' - \frac{d}{dt} \left(-\frac{1}{2} y + \lambda \frac{x'}{\sqrt{x'^2 + y'^2}} \right),$$

tak więc

$$y' - \lambda \frac{d}{dt} \left(\frac{x'}{\sqrt{x'^2 + y'^2}} \right) = 0.$$

Podobnie równanie na y daje

$$x' + \lambda \frac{d}{dt} \left(\frac{y'}{\sqrt{x'^2 + y'^2}} \right) = 0.$$

Te dwa równania są różniczkami, więc możemy je bezpośrednio scałkować

$$y - \lambda \frac{x'}{\sqrt{x'^2 + y'^2}} = y_0, \quad x + \lambda \frac{y'}{\sqrt{x'^2 + y'^2}} = x_0,$$

gdzie x_0 i y_0 są stałymi określanymi przez warunek stałości punktów końcowych. Możemy przepisać te równania w postaci

$$x - x_0 = -\lambda \frac{y'}{\sqrt{x'^2 + y'^2}}, \quad y - y_0 = \lambda \frac{x'}{\sqrt{x'^2 + y'^2}}.$$

Jeżeli podniesiemy do kwadratu obie strony tych równań i dodamy je do siebie, otrzymamy natychmiast

$$(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 = \lambda^2,$$

co oznacza, że szukaną krzywą jest okrąg o promieniu λ i środku (x_0, y_0) . Ponieważ ustaloną długość krzywej oznaczaliśmy przez L , widzimy, że

$$\lambda = \frac{L}{2\pi}.$$

Stałe x_0 i y_0 są tak dobrane, że okrąg o promieniu $L/2\pi$ przechodzi przez żądany punkt końcowy, który pokrywa się z punktem początkowym, gdyż jest to krzywa zamknięta. Z fizycznego punktu widzenia jest jasne, że mamy tu do czynienia z maksimum, a nie minimum.

Rozwiązanie tego izoperymetrycznego problemu jest szczególnie proste — okazuje się, że jest to po prostu okrąg. Jednakże czytelnik powinien zauważyć, że równania otrzymywane w formalizmie Eulera–Lagrange’a są bardzo skomplikowanymi, powiązаныmi ze sobą, nieliniowymi równaniami różniczkowymi. Jeżeli wybierzemy funkcje $f(t, x, y, x', y')$ i $g(t, x, y, x', y')$ przypadkowo, szansa, że te funkcje będą dobre do rozwiązania wyjściowych równań Eulera–Lagrange’a jest bardzo mała.

Innym znanym problemem izoperymetrycznym jest określenie kształtu wiszącego, elastycznego sznurka o danej długości, umocowanego za dwa końce. Zakładamy, że sznurek przyjmuje kształt, zgodny z więzami, który odpowiada minimalnej energii potencjalnej. Przypuśćmy, że sznurek jest umocowany w punktach (x_A, y_A) i (x_B, y_B) , jak pokazano na rys. 2.5. Chcemy znaleźć krzywą $y(x)$ przechodzącą przez te ustalone końce, dla której energia potencjalna przyjmuje wartość najmniejszą. Jeżeli ρ oznacza stałą masę elementu sznurka, wtedy energia potencjalna liczona względem osi x jest dana przez

$$I = \rho g \int_A^B y ds = \rho g \int_{x_A}^{x_B} y \sqrt{1 + y'^2} dx.$$

Długość sznurka jest ustalona — są to właśnie więzy

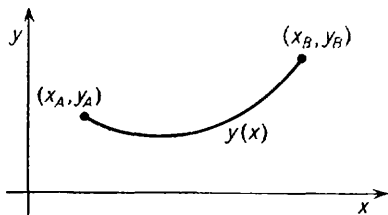
$$L = \int_{x_A}^{x_B} ds = \int_{x_A}^{x_B} \sqrt{1+y'^2} dx.$$

Tak więc

$$h = \rho g y \sqrt{1+y'^2} - \rho g y_0 \sqrt{1+y'^2},$$

gdzie zapisaaliśmy nasz mnożnik Lagrange'a jako $\lambda = -\rho g y_0$, y_0 będzie później określone. Jeżeli teraz zmienimy zmienną y na $\eta = y - y_0$, to

$$h = \rho g \eta \sqrt{1+\eta'^2}, \quad \eta = \eta(x).$$



Rys. 2.5. Swobodnie wiszący sznur z zamocowanymi końcami

Ale h ma tę samą formę co funkcja f , której używaliśmy do znalezienia najmniejszej powierzchni obrotowej. Czyli, tak jak w tamtym przypadku, równanie Eulera–Lagrange'a prowadzi do wzoru

$$\eta = b \operatorname{ch} \left(\frac{x-x_0}{b} \right),$$

gdzie b i x_0 są stałymi, które trzeba wyznaczyć. Ponieważ $\eta = y - y_0$, okazuje się, że równanie krzywej, której kształt przyjmuje swobodnie wiszący sznurek z umocowanymi końcami, jest postaci

$$y = y_0 + b \operatorname{ch} \left(\frac{x-x_0}{b} \right).$$

Trzy stałe x_0 , y_0 i b wybieramy tak, by krzywa przechodziła przez (x_A, y_A) i (x_B, y_B) oraz miała długość równą L . Jest to już problem numeryczny i w zasadzie zawsze możliwy do rozwiązania.

Istnieją inne typy równań więzów, które mogą się pojawiać w praktyce. Zakończymy ten paragraf omówieniem szczególnie ważnej klasy więzów, które mają zastosowanie przede wszystkim w mechanice klasycznej. Przypuśćmy, że mamy całkę

$$I = \int_{x_A}^{x_B} f(x, y_1, y_2, \dots, y_n; y'_1, y'_2, \dots, y'_n) dx$$

i chcemy znaleźć jej minimum przy założeniu następujących warunków

$$g_1(x, y_1, y_2, \dots, y_n) = 0,$$

$$g_2(x, y_1, y_2, \dots, y_n) = 0,$$

$$\vdots$$

$$g_m(x, y_1, y_2, \dots, y_n) = 0,$$

gdzie $m < n$. Jedną z możliwych metod postępowania jest rozwiązanie m równań i wyrażenie m funkcji y_i przez pozostałe funkcje y oraz wstawienie tych wielkości do funkcji podcałkowej w I . Jednakże w wielu wypadkach funkcje g_i są zbyt skomplikowane, aby tak postąpić. Również ze względu na symetrię lepiej nie wyróżniać pewnych zmiennych i nie wyrażać innych zmiennych poprzez te wyróżnione. A nawet jeżeli byłoby prościej tak eliminować zmienne, możemy nie chcieć tego robić ze względów fizycznych. Przekonamy się w następnym paragrafie, że w mechanice klasycznej te względy często przeważają.

Naszukujemy teraz alternatywną metodę, biorąc pod uwagę przypadek, w którym mamy tylko jeden warunek więzów

$$g(x, y_1, y_2, \dots, y_n) = 0,$$

i chcemy znaleźć minimum całki

$$I = \int_{x_A}^{x_B} f(x, y_1, y_2, \dots, y_n; y'_1, y'_2, \dots, y'_n) dx.$$

Jak zwykle, wprowadzamy zbiór funkcji porównawczych $\bar{y}_i(x_1, \varepsilon_1, \varepsilon_2)$ spełniających warunki:

α') $\bar{y}_i(x_A, \varepsilon_1, \varepsilon_2) = y_{iA}$, $\bar{y}_i(x_B, \varepsilon_1, \varepsilon_2) = y_{iB}$ dla wszystkich $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ — tzn. znów mamy stałe punkty końcowe;

β') $\bar{y}_i(x, 0, 0) = y_i(x)$ — gdzie $y_i(x)$ są szukanymi funkcjami, i

γ') $\bar{y}_i(x, \varepsilon_1, \varepsilon_2)$ ma ciągłe pierwsze i drugie pochodne.

Budujemy teraz całkę

$$I(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \int_{x_A}^{x_B} f(x, \bar{y}_1, \dots, \bar{y}_n; \bar{y}'_1, \dots, \bar{y}'_n) dx$$

i jak przedtem żądamy, aby $I(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ miało wartość ekstremalną dla $\varepsilon_1 = 0 = \varepsilon_2$, przy warunku, że

$$g(x, \bar{y}_1, \dots, \bar{y}_n) = 0.$$

Równanie tej postaci daje więzy *lokalne* zachodzące we wszystkich punktach, podczas gdy więzy *całkowe*, które spotykaliśmy do tej pory, są więzami *globalnymi* — wnioski z nich są słabsze niż z więzów lokalnych. (Równanie więzów lokalnych implikuje, że jedną ze zmiennych \bar{y}_i można wyrazić przez $(n-1)$ pozostałych zmiennych \bar{y}_i , podczas gdy więzy globalne dają tylko związek między zmiennymi ε_i). Oczywiście można przekształcić to równanie w więzy globalne całkując je po prostu od x_A do x_B , lecz czyniąc tak gubimy istotę równania. Jednakże, możemy przywrócić ogólność tego równania a jednocześnie zachować znaną postać całkową, jeżeli w pierw pomnożymy równanie przez *dowolną* funkcję x , np. $\phi(x)$, a następnie scałkujemy iloczyn od x_A do x_B . Tak postępując, otrzymamy

$$I(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \int_{x_A}^{x_B} \phi(x) g(x, \bar{y}_1, \dots, \bar{y}_n) dx = 0,$$

gdzie $\phi(x)$ jest zupełnie dowolną funkcją.

Tak jak w pierwszej części paragrafu, kładziemy

$$K(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = I(\varepsilon_1, \varepsilon_2) + \lambda J(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$$

i otrzymujemy warunek konieczny na ekstremum żądając, aby

$$\left[\frac{\partial K}{\partial \varepsilon_1} \right]_{\substack{\varepsilon_1=0 \\ \varepsilon_2=0}} = 0 = \left[\frac{\partial K}{\partial \varepsilon_2} \right]_{\substack{\varepsilon_1=0 \\ \varepsilon_2=0}}, \quad (2.9)$$

gdzie K jest dane przez

$$K(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = \int_{x_A}^{x_B} h(x, \bar{y}_1, \dots, \bar{y}_n; \bar{y}'_1, \dots, \bar{y}'_n) dx,$$

i

$$h = f + \lambda \phi(x) g.$$

Zgodnie z konwencją definiujemy $\lambda(x) \equiv \lambda \phi(x)$; $\lambda(x)$ jest na razie nieokreśloną funkcją. Stosując naszą standardową metodę, obliczamy dwie pierwsze cząstkowe pochodne $K(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$

$$\frac{\partial K}{\partial \varepsilon_j} = \sum_{i=1}^n \int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial h}{\partial \bar{y}_i} \frac{\partial \bar{y}_i}{\partial \varepsilon_j} + \frac{\partial h}{\partial \bar{y}'_i} \frac{\partial \bar{y}'_i}{\partial \varepsilon_j} \right] dx, \quad j = 1, 2.$$

Całkując drugi człon przez części znajdujemy, że

$$\frac{\partial K}{\partial \varepsilon_j} = \sum_{i=1}^n \int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial h}{\partial \bar{y}_i} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial h}{\partial \bar{y}'_i} \right) \right] \frac{\partial \bar{y}_i}{\partial \varepsilon_j} dx, \quad j = 1, 2,$$

gdzie warunek α') prowadzi do opuszczenia członu z punktami końcowymi. Teraz narzucamy równanie (2.9) jako warunek konieczny na ekstremum. Kładąc

$$\left[\frac{\partial \bar{y}_i}{\partial \varepsilon_j} \right]_{\substack{\varepsilon_1=0 \\ \varepsilon_2=0}} = \eta_j^{(i)}(x), \quad (2.10)$$

mamy

$$\sum_{i=1}^n \int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial h}{\partial \bar{y}_i} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial h}{\partial \bar{y}'_i} \right) \right] \eta_j^{(i)}(x) dx = 0. \quad (2.11)$$

Jest to moment, w którym musimy być ostrożni. Miałoby się ochotę użyć znanego argumentu, że funkcje $\eta_j^{(i)}(x)$ są zupełnie dowolne z wyjątkiem tego, że są one gładkie i znikają w x_A i x_B . Jednakże w tym przypadku ten argument nie jest prawdziwy! Weźmy funkcję $g(x, y_1, \dots, y_n) = 0$ i zróżniczkujmy po ε_1 . Otrzymamy

$$\frac{dg}{d\varepsilon_1} = 0 = \frac{\partial g}{\partial \bar{y}_1} \frac{\partial \bar{y}_1}{\partial \varepsilon_1} + \frac{\partial g}{\partial \bar{y}_2} \frac{\partial \bar{y}_2}{\partial \varepsilon_1} + \dots + \frac{\partial g}{\partial \bar{y}_n} \frac{\partial \bar{y}_n}{\partial \varepsilon_1}.$$

Jeżeli położymy teraz $\varepsilon_1 = 0 = \varepsilon_2$ i zastosujemy definicję (2.10) otrzymamy

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial g}{\partial \bar{y}_i} \eta_1^{(i)}(x) = 0.$$

Istnieje więc liniowy związek między funkcjami $\eta_1^{(i)}(x)$ oraz podobny między funkcjami $\eta_2^{(i)}(x)$ i nie możemy utrzymywać, że $\eta_j^{(i)}(x)$ są w pełni dowolne. Jednakże mamy jeszcze

do dyspozycji funkcję $\lambda(x)$. Zatrzymajmy się na równaniu (2.11) z $j = 1$; przypadek $j = 2$ jest zupełnie analogiczny. Ponieważ g nie zależy od pochodnych funkcji $y_i(x)$, możemy rozpisać równanie (2.11) jako

$$\sum_{i=1}^n \int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial f}{\partial y_i} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y_i'} \right) + \lambda(x) \frac{\partial g}{\partial y_i} \right] \eta_1^{(i)}(x) dx = 0. \quad (2.12)$$

Teraz założmy, że $\eta_1^{(1)}(x)$ wyraża się przez pozostałe funkcje $\eta_1^{(i)}(x)$. Zamiast wstawiać to wyrażenie na $\eta_1^{(1)}(x)$ do równania (2.12), wybierzmy $\lambda(x)$ tak, by

$$\frac{\partial f}{\partial y_1} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y_1'} \right) + \lambda(x) \frac{\partial g}{\partial y_1} = 0. \quad (2.13)$$

A więc nie potrzebujemy wcale znać wyrażenia na $\eta_1^{(1)}(x)$, ponieważ w naszym podstawowym równaniu współczynnik stojący przy tej funkcji jest równy zeru. Równanie (2.12) przy powyższym określeniu funkcji $\lambda(x)$ przybiera postać:

$$\sum_{i=2}^n \int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial f}{\partial y_i} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y_i'} \right) + \lambda(x) \frac{\partial g}{\partial y_i} \right] \eta_1^{(i)}(x) dx = 0,$$

gdzie nie występuje już człon z $i = 1$. Pozostałe $(n - 1)$ funkcji $\eta_1^{(i)}(x)$ nie zależą od siebie, możemy więc wyciągnąć wniosek, że

$$\frac{\partial f}{\partial y_i} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y_i'} \right) + \lambda(x) \frac{\partial g}{\partial y_i} = 0, \quad i = 2, 3, \dots, n, \quad (2.14)$$

Otrzymane równania są takie same jak równanie (2.13), chociaż doszliśmy do nich różnymi metodami. Połączmy teraz równania (2.13) i (2.14) w prosty związek

$$\frac{\partial h}{\partial y_i} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial h}{\partial y_i'} \right) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (2.15)$$

gdzie $h = f + \lambda(x)g$. Zauważmy, że nie potrzebujemy wydzielać funkcji $\eta_1^{(1)}(x)$ w otrzymanym równaniu (2.15); każda funkcja $\eta_1^{(i)}(x)$ doprowadziłaby do takiego samego rezultatu, w którym wszystkie pierwotnie zależne zmienne występują na równej stopie.

Tym sposobem mamy n równań różniczkowych drugiego rzędu na n nieznanymi funkcjami $y_n(x)$ i funkcję $\lambda(x)$. (Zauważmy, że nie występują tu pochodne $\lambda(x)$). Równania te nie są różniczkowe ze względu na $\lambda(x)$. Jest to związane z naszym założeniem, że funkcja g nie zależy od pochodnych $y_i(x)$). Aby problem był dobrze postawiony, potrzebne jest jeszcze równanie więzów

$$g(x, y_1, y_2, \dots, y_n) = 0,$$

gdzie g jest *zadaną* funkcją. Rozwiązania $y_1(x), y_2(x), \dots, y_n(x)$ są jednoznacznie wyznaczone przez warunki graniczne:

$$y_i(x_A) = y_{iA}, \quad y_i(x_B) = y_{iB}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Czytelnik może sprawdzić, że jeżeli mamy m równań więzów postaci

$$g_i(x, y_1, y_2, \dots, y_n) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, m,$$

to otrzymamy znowu układ równań (2.15), lecz w tym przypadku funkcja h będzie dana wzorem

$$h = f + \sum_{i=1}^m \lambda_i(x) g_i,$$

gdzie $\lambda_i(x)$ powinny być znalezione jako część pełnego rozwiązania układu.

2.5. ZASTOSOWANIE DO MECHANIKI KLASYCZNEJ

Znaczna część mechaniki klasycznej może być opisana przy pomocy aparatu matematycznego z ostatnich czterech paragrafów. Jeżeli klasycznomechaniczny układ opisywany przez uogólnione zmienne $q_1(t), q_2(t), \dots, q_n(t)$ ma funkcję potencjalną $V(q_1, q_2, \dots, q_n, t)$, jego lagrangian jest postaci:

$$L(t, q_i, \dot{q}_i) = T(q_i, \dot{q}_i) - V(q_i, t),$$

gdzie T jest energią kinetyczną, a kropki oznaczają różniczkowanie po czasie. Można pokazać, że ruch takiego układu można wyprowadzić z zasady Hamiltona.

Zasada Hamiltona. Ruch układu, opisywanego lagrangianem L , od chwili czasu t_A do t_B ($t_A < t_B$) jest taki, że przy zadanych wartościach $q_i(t_A)$ i $q_i(t_B)$ całka

$$I = \int_{t_A}^{t_B} L dt$$

przyjmuje wartość ekstremalną ze względu na funkcje $q_i(t)$ ($i = 1, 2, \dots, n$); t_A i t_B są dowolnymi, lecz ustalonymi momentami czasu. Z naszych rozważań wynika wprost, że I ma ekstremum wtedy i tylko wtedy, gdy

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.16)$$

Otrzymaliśmy równania Lagrange'a dla ruchu. Jest to układ równań różniczkowych drugiego rzędu, którego rozwiązaniami są funkcje $q_i(t)$. Stałe całkowania (a jest ich $2n$) wylicza się określając stan układu w chwili t_A , tzn. zakładając określone wartości $q_i(t_A)$ i $\dot{q}_i(t_A)$ dla wszystkich i .

Na przykład, załóżmy, że

$$T = \frac{1}{2} m(\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2 + \dot{x}_3^2), \quad V = V(x_1, x_2, x_3),$$

to znaczy zakładamy, że cząstka o masie m porusza się w dowolnym polu potencjalnym. Wtedy

$$L = \frac{1}{2} m(\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2 + \dot{x}_3^2) - V(x_1, x_2, x_3),$$

a równania Lagrange'a dają nam

$$-\frac{\partial V}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} (m\dot{x}_i) = 0, \quad i = 1, 2, 3,$$

lub

$$m\ddot{x}_i = -\frac{\partial V}{\partial x_i}.$$

Ponieważ $-\partial V/\partial x_i$ jest siłą działającą wzdłuż osi x_i , równanie to jest po prostu drugim prawem Newtona, które możemy zapisać w postaci wektorowej:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -\nabla V = \mathbf{F}.$$

Należy zwrócić tu uwagę, że istnieje możliwość rozszerzenia formalizmu Lagrange'a na bardziej ogólne potencjały, np. typu elektromagnetycznych potencjałów zależnych od prędkości, jeżeli tylko występujące siły mogą być zapisane w postaci

$$F_i = -\frac{\partial V}{\partial q_i} + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial V}{\partial \dot{q}_i} \right).$$

W tym przypadku znajdujemy znowu, że

$$L = T - V,$$

i spełniona jest zasada Hamiltona. Tak więc równanie (2.16) nadal będzie opisywać ruch takiego układu.

Jeżeli L nie zależy explicite od t , to z równania (2.6) wynika, że

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L = E, \quad (2.17)$$

gdzie E jest stałą. Znajdziemy teraz sens fizyczny stałej E . Jeżeli V nie zależy od q_i , to

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i = \sum_{i=1}^n \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i.$$

Jak się okazuje, T przyjmuje postać

$$T = \sum_{i,m} a_{im}(q_i) \dot{q}_i \dot{q}_m$$

tak, że

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i = 2T.$$

Równanie (2.17) może być zapisane w postaci

$$2T - L = 2T - (T - V) = T + V = E,$$

to znaczy, możemy utożsamić E z całkowitą energią układu.

Wielkość

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

nosi nazwę *pędu uogólnionego*, sprzężonego z uogólnioną współrzędną q_i . Jeżeli jakaś współrzędna $q_k(t)$ nie występuje w L , nazywamy ją współrzędną *cykliczną*. Dla pędu uogólnionego p_k sprzężonego ze współrzędną cykliczną mamy równanie

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) = \dot{p}_k = 0.$$

Stąd widać, że p_k jest stałą. Jest to po prostu zasada zachowania pędu.

Zbadajmy dla przykładu ruch cząstki w płaszczyźnie, kiedy potencjał, jak również i siła, zależą tylko od promienia. Stosując współrzędne biegunowe mamy

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) - V(r);$$

θ jest współrzędną cykliczną i dlatego

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = mr^2\dot{\theta} = p_{\theta}, \quad (2.18)$$

gdzie p_{θ} jest stałą, która jak widać jest momentem pędu cząstki. W tym przypadku, ponieważ lagrangian nie zależy explicite od t , więc z równania (2.17) wynika również, że

$$\frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2) + V(r) = E. \quad (2.19)$$

Łącząc równania (2.18) i (2.19) otrzymujemy

$$\dot{\theta} = \frac{p_{\theta}}{mr^2}, \quad \frac{1}{2}m\left(\dot{r}^2 + \frac{p_{\theta}^2}{m^2r^2}\right) + V(r) = E,$$

więc w tym przypadku nasze stałe ruchu, p_{θ} i E , redukują problem do rozwiązania równań pierwszego rzędu, tzn. do wyliczenia dwu całek. Oczywiście, dla bardziej skomplikowanych potencjałów $V(r)$ całki te można wykonać jedynie numerycznie.

Na zakończenie zbadajmy ruch z więzami. W szczególności możemy się zapytać, jakim ruchem porusza się cząstka w polu siły ciężkości, jeżeli zażądamy, by ruch odbywał się jedynie na powierzchni nieruchomej sztywnej kuli o promieniu a . Jasne jest że najwygodniej będzie posługiwać się współrzędnymi sferycznymi. W tych współrzędnych wypiszemy lagrangian:

$$T = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\dot{\phi}^2),$$

$$V = mgz = mgr\cos\theta,$$

a więc

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\dot{\phi}^2) - mgr\cos\theta.$$

Chcemy znaleźć ekstremum całki

$$I = \int_{t_A}^{t_B} L dt$$

przy nałożonych więzach postaci:

$$g(t, r, \theta, \phi) = r - a = 0.$$

Zgodnie z naszą dyskusją w § 2.4 tworzymy funkcję

$$L' = L + \lambda g = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\dot{\phi}^2) - mgr\cos\theta + \lambda r - \lambda a.$$

i wstawiamy tę funkcję do równań Eulera-Lagrange'a. Dla współrzędnej r znajdujemy następujące równanie

$$\lambda - mg\cos\theta + mr\sin^2\theta\dot{\phi}^2 + mr\dot{\theta}^2 - m\ddot{r} = 0, \quad (2.20a)$$

a dla współrzędnej Θ

$$mgr \sin \Theta + mr^2 \sin \Theta \cos \Theta \dot{\phi}^2 - m \frac{d}{dt} (r^2 \dot{\Theta}) = 0. \quad (2.20b)$$

Tutaj ϕ jest współrzędną cykliczną, więc

$$mr^2 \sin^2 \Theta \dot{\phi} = p_\phi,$$

czyli

$$\dot{\phi} = \frac{p_\phi}{mr^2 \sin^2 \Theta}. \quad (2.20c)$$

Mamy rozwiązać powyższe trzy związane ze sobą równania przy założeniu, że

$$r - a = 0 \quad (2.20d)$$

Wstawiając do równań (2.20a) i (2.20b) związki (2.20c) i (2.20d) otrzymujemy, że

$$\lambda = mg \cos \Theta - ma \dot{\Theta}^2 - \frac{p_\phi^2}{ma^3 \sin^2 \Theta} \quad (2.21a)$$

i

$$\ddot{\Theta} = \frac{g}{a} \sin \Theta + \frac{p_\phi^2 \cos \Theta}{m^2 a^4 \sin^3 \Theta}. \quad (2.21b)$$

Równanie (2.20c) upraszcza się i mamy

$$\dot{\phi} = \frac{p_\phi}{ma^2 \sin^2 \Theta}. \quad (2.21c)$$

Widzimy więc, że wszystko zależy od rozwiązania równania (2.21b); ponieważ zależność $\Theta(t)$ jest określona, równanie (2.21a) daje nam $\lambda(t)$ i po scałkowaniu (2.21c) otrzymamy $\phi(t)$. W rzeczywistości równanie (2.21b) nie jest tak skomplikowane, na jakie wygląda. Jeżeli pomnożymy obie strony równania przez $\dot{\Theta}(t)$, wtedy po obu stronach dostajemy różniczki i możemy je wyciąkować, otrzymując:

$$\dot{\Theta}^2 = C - 2 \frac{g}{a} \cos \Theta - \frac{p_\phi^2}{m^2 a^4 \sin^2 \Theta}. \quad (2.22)$$

Związek taki nie jest niespodzianką; można pokazać, że wynika on wprost z zasady zachowania energii. Stała C jest po prostu równa $2E/ma^2$, gdzie E jest całkowitą stałą energią. Wynika stąd, że cały problem zredukował się do rozwiązania całki z równania (2.22). Jednak całka ta w ogólnym przypadku nie ma tak zwartej postaci, chociaż w poszczególnych prostszych przypadkach ogólne własności rozwiązania mogą być określone bez większych trudności.

Warto przyjrzeć się bliżej funkcji $\lambda(t)$. Pierwszy człon w równaniu (2.21a) jest składową radialną siły grawitacyjnej działającej na cząstkę, wziętą z przeciwnym znakiem. Drugi człon jest siłą odśrodkową związaną z ruchem w kierunku wzrostu kąta Θ , wziętą również z przeciwnym znakiem, a ostatni człon jest radialną składową siły odśrodkowej związaną z ruchem w kierunku wzrostu kąta ϕ . Tak więc $\lambda(t)$ jest dokładnie siłą, którą kula musi działać, aby utrzymać cząstkę na swej powierzchni. Można pokazać, że w ogólności mnożniki Lagrange'a są w prosty sposób związane z siłami potrzebnymi do utrzymania więzów. Dostarczają więc nam bezpośrednio fizycznych informacji o badanych układach.

2.6. SZUKANIE EKSTREMÓW CAŁEK WIELOKROTNYCH

Jako nasze ostatnie rozszerzenie problemów wariacyjnych, chcemy teraz zbadać przypadek, kiedy całki mają więcej niż jedną zmienną niezależną. Będziemy się zajmować bezpośrednio przypadkiem dwu zmiennych niezależnych, pozostawiając czytelnikowi bardziej ogólne przypadki jako ćwiczenie.

Zbadajmy więc całkę

$$I = \iint_D f\left(x_1, x_2, y, \frac{\partial y}{\partial x_1}, \frac{\partial y}{\partial x_2}\right) dx_1 dx_2,$$

gdzie x_1 i x_2 są dwiema niezależnymi zmiennymi, a D jest ustalonym obszarem w płaszczyźnie $x_1 x_2$. Oznaczmy granicę obszaru D literą C . Tak jak poprzednio, zadajemy wartości $y(x_1, x_2)$ we wszystkich punktach brzegu C , to znaczy mamy

$$[y(x_1, x_2)]_{(x_1, x_2) \in C} = g(C),$$

gdzie $g(C)$ jest zadaną funkcją, zdefiniowaną na jednowymiarowej krzywej C .

Chcemy, aby nasza jednoparametrowa rodzina funkcji próbnych spełniała następujące warunki

- $[\bar{y}(x_1, x_2, \varepsilon)]_{(x_1, x_2) \in C} = g(C)$ dla każdego ε ;
- $\bar{y}(x_1, x_2, 0) = y(x_1, x_2)$ — szukana funkcja;
- $\bar{y}(x_1, x_2, \varepsilon)$ ma ciągłą pierwszą i drugą pochodną.

Budujemy teraz całkę

$$I(\varepsilon) = \iint_D f\left(x_1, x_2, \bar{y}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial x_1}, \frac{\partial \bar{y}}{\partial x_2}\right) dx_1 dx_2$$

i żądamy, by

$$\left[\frac{dI}{d\varepsilon}\right]_{\varepsilon=0} = 0.$$

Postępując w zwykły sposób, znajdujemy, że

$$\begin{aligned} \frac{dI}{d\varepsilon} &= \iint_D \left[\frac{\partial f}{\partial \bar{y}} \frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} + \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial x_1}\right)} \frac{d}{d\varepsilon} \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial x_1}\right) + \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial x_2}\right)} \frac{d}{d\varepsilon} \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial x_2}\right) \right] dx_1 dx_2 = \\ &= \iint_D \left[\frac{\partial f}{\partial \bar{y}} \frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} + \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial x_1}\right)} \frac{\partial}{\partial x_1} \left(\frac{d\bar{y}}{d\varepsilon}\right) + \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial x_2}\right)} \frac{\partial}{\partial x_2} \left(\frac{d\bar{y}}{d\varepsilon}\right) \right] dx_1 dx_2. \end{aligned}$$

Powinniśmy zrobić teraz użytek z dwuwymiarowego całkowania przez części, czyli tzw. twierdzenia Greena, które brzmi następująco:

$$\iint_D \left[\frac{\partial P}{\partial x_1} + \frac{\partial Q}{\partial x_2} \right] dx_1 dx_2 = \int_C (P dx_2 - Q dx_1).$$

Jest ono słuszne, jeżeli $P(x_1, x_2)$ i $Q(x_1, x_2)$ oraz ich pierwsze pochodne cząstkowe są ciągle w obszarze D . Zapisując

$$P = \phi(x_1, x_2)A(x_1, x_2) \quad \text{i} \quad Q = \phi(x_1, x_2)B(x_1, x_2),$$

otrzymujemy

$$\iint_D \left[A \frac{\partial \phi}{\partial x_1} + B \frac{\partial \phi}{\partial x_2} \right] dx_1 dx_2 = - \iint_D \left[\frac{\partial A}{\partial x_1} + \frac{\partial B}{\partial x_2} \right] \phi dx_1 dx_2 + \int_C [A dx_2 - B dx_1] \phi.$$

Identyfikując wprowadzone funkcje z odpowiednimi pochodnymi

$$\phi = \frac{d\bar{y}}{d\varepsilon}, \quad A = - \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial x_1} \right)}, \quad B = - \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial x_2} \right)},$$

otrzymujemy

$$\begin{aligned} \frac{dI}{d\varepsilon} = & \iint_D \left[\frac{\partial f}{\partial \bar{y}} - \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial x_1} \right)} - \frac{\partial}{\partial x_2} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial x_2} \right)} \right] \frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} dx_1 dx_2 + \\ & + \int_C \frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} \left[\frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial x_1} \right)} dx_2 - \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial x_2} \right)} dx_1 \right]. \end{aligned}$$

Z warunku a), $d\bar{y}/d\varepsilon$ znika na C , tak więc, stosując warunek na ekstremum mamy

$$\iint_D \left[\frac{\partial f}{\partial \bar{y}} - \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial x_1} \right)} - \frac{\partial}{\partial x_2} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial \bar{y}}{\partial x_2} \right)} \right] \eta(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = 0,$$

gdzie

$$\left[\frac{d\bar{y}}{d\varepsilon} \right]_{\varepsilon=0} = \eta(x_1, x_2).$$

Ponieważ $\eta(x_1, x_2)$ jest dowolną gładką funkcją wewnątrz obszaru D , równanie

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x_1} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial y}{\partial x_1} \right)} - \frac{\partial}{\partial x_2} \frac{\partial f}{\partial \left(\frac{\partial y}{\partial x_2} \right)} = 0 \quad (2.23)$$

musi być spełnione w całym obszarze D . Jest to równanie Eulera-Lagrange'a z dwiema niezależnymi zmiennymi; pochodne cząstkowe odzwierciedlają istnienie większej niż jeden liczby zmiennych niezależnych.

Zbadamy teraz drgającą strunę jako przykład wariacyjnego problemu z dwiema niezależnymi zmiennymi. Przypuśćmy, że doskonale giętka elastyczna struna jest naciągnięta przy stałym naprężeniu τ wzdłuż osi x (z końcami umocowanymi w punktach $x = 0$ i $x = l$). Badamy — możliwie najprostszy przypadek — małe poprzeczne drgania bez tarcia (bez tłumienia), zaniedbując przyciąganie ziemskie. Amplituda drgań jest daną funkcją $y(x, t)$, gdzie t oznacza moment czasu, a x położenie ($0 \leq x \leq l$). Wychylenie struny jest dane przez pochodną $\partial y / \partial x$; zakładamy, że jest ono małe

$$\left| \frac{\partial y}{\partial x} \right| \ll 1.$$

Jest to najczęściej w praktyce spotykany przypadek. Prędkość jest dana przez $\partial y / \partial t$. Warunki graniczne (nieruchome punkty końcowe) zapiszemy następująco: $y(0, t) = y(l, t) = 0$ dla wszystkich t .

Chcemy teraz obliczyć lagrangian dla tego układu, a następnie określić ruch przy użyciu zasady Hamiltona. Znajdziemy najpierw energię potencjalną V . Praca wykonana nad struną przez odkształcenie zużywana jest w całości na zmianę długości struny (zakładamy doskonałą elastyczność). Ponieważ siła sprężystości jest równa stałemu naprężeniu τ , energia potencjalna jest po prostu równa:

$$V = \tau \left[\int_0^l \sqrt{1 + \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)^2} dx - l \right].$$

Człon w nawiasie jest różnicą między chwilową długością struny i jej długością w równowadze l . Energia potencjalna jest równa zero, gdy długość struny jest równa l . Ponieważ cały czas zakładamy, że

$$\left| \frac{\partial y}{\partial x} \right| \ll 1,$$

możemy napisać

$$\sqrt{1 + \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)^2} \cong 1 + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)^2.$$

Aby obliczyć energię kinetyczną, zakładamy pewien rozkład masy wzdłuż struny $\varrho(x) > 0$. A więc masa zawarta w elemencie długości dx jest równa $\varrho(x)dx$, a energia kinetyczna związana z tą masą jest równa

$$dT = \frac{1}{2} \varrho(x) dx \left(\frac{\partial y}{\partial t} \right)^2.$$

Całkowita energia kinetyczna jest więc równa

$$T = \frac{1}{2} \int_0^l \varrho(x) \left(\frac{\partial y}{\partial t} \right)^2 dx.$$

Gdy już mamy określone energie T i V , możemy zbudować lagrangian:

$$L = T - V = \int_0^l \left[\frac{1}{2} \varrho(x) \left(\frac{\partial y}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} \tau \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)^2 \right] dx.$$

Wielkość w nawiasach

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \varrho(x) \left(\frac{\partial y}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} \tau \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)^2,$$

nazywamy *gęstością lagrangianu*, ponieważ jej całka przestrzenna daje lagrangian. Zasada Hamiltona mówi, że funkcja opisująca ruch struny czyni poniższą całkę

$$I = \int_{t_1}^{t_2} L dt = \int_{t_1}^{t_2} \int_0^l \mathcal{L} dx dt$$

ekstremalną ze względu na funkcje $y(x, t)$, które dodatkowo spełniają równanie $y(0, t) = y(l, t) = 0$ dla każdego t i dla których $y(x, t_1)$ i $y(x, t_2)$ są określonymi funkcjami x .

Teraz rozporządząmy już aparatem matematycznym potrzebnym do znalezienia równania, które musi spełniać $y(x, t)$. Obszar D w płaszczyźnie x, t jest prostokątem o bokach $0 \leq x \leq l$ i $t_1 \leq t \leq t_2$. Stosując równanie (2.23) otrzymujemy

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial y}{\partial x} \right)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial y}{\partial t} \right)} = 0.$$

Wstawiając do tego wyrażenie na \mathcal{L} dostajemy równanie

$$\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{\rho(x)}{\tau} \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}.$$

Jest to równanie różniczkowe cząstkowe opisujące ruch struny; nosi ono nazwę równania falowego.

Rozszerzymy teraz powyższą metodę na przypadek n niezależnych zmiennych. Zamierzamy znaleźć ekstremum całki wielokrotnej

$$I = \int_D \mathcal{L} \left(x_1, x_2, \dots, x_n, \phi; \frac{\partial \phi}{\partial x_1}, \frac{\partial \phi}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial \phi}{\partial x_n} \right) dx_1 dx_2 \dots dx_n,$$

gdzie $\phi = \phi(x_1, x_2, \dots, x_n)$. D jest pewnym obszarem w przestrzeni n -wymiarowej, a ϕ jest znaną funkcją zdefiniowaną na $(n-1)$ -wymiarowym brzegu obszaru D . Równanie Eulera-Lagrange'a, które daje szukaną funkcję ϕ , jest postaci

$$\frac{\delta \mathcal{L}}{\delta \phi} \equiv \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right)} = 0, \quad (2.24)$$

gdzie wprowadziliśmy wielkość $\delta \mathcal{L} / \delta \phi$, która nosi nazwę pochodnej funkcjonalnej. Poprzednio widzieliśmy, że gęstość lagrangianu

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left[\rho(x) \left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 - \tau \left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 \right]$$

prowadzi do jednowymiarowego równania falowego.

Zbadamy przykładowo inną gęstość lagrangianu

$$\mathcal{L} = (\nabla \phi)^2 = \nabla \phi \cdot \nabla \phi = \left[\left(\frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)^2 \right].$$

Zauważmy, że z podstawowych własności gradientu wynika niezmienniczość \mathcal{L} względem obrotów. Mamy tu przypadek trzech zmiennych niezależnych i jednej zmiennej zależnej. Równanie Eulera-Lagrange'a przyjmuje więc postać

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial x_i} \right)} = 0,$$

gdzie $x_1 = x, x_2 = y, x_3 = z$. Zastępując \mathcal{L} przez $(\nabla \phi)^2$ otrzymujemy

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = \nabla^2 \phi = 0.$$

Tak więc równanie Laplace'a jest warunkiem koniecznym, aby całka

$$I = \int_D (\nabla\phi)^2 dx dy dz$$

osiągała ekstremum, przy założeniu, że funkcja $\phi(x, y, z)$ jest stała na brzegu D . Widzimy, że niezmienniczość obrotowa \mathcal{L} doprowadziła do niezmienniczego względem obrotów równania na ϕ .

Osiągnięte tu wyniki można otrzymać w ogólnym przypadku, gdy w \mathcal{L} występuje kilka (powiedzmy m) zmiennych zależnych $\phi_j(x_1, x_2, \dots, x_n)$. Na przykład, szukając ekstremum całki

$$I = \int_D \mathcal{L} \left(x_i, \phi_j, \frac{\partial\phi_j}{\partial x_i} \right) dx_1 dx_2, \dots, dx_n,$$

otrzymujemy układ m równań różniczkowych drugiego rzędu

$$\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi_j} - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial\phi_j}{\partial x_i} \right)} = 0, \quad j = 1, 2, \dots, m. \quad (2.25)$$

Tę postać równania Eulera–Lagrange'a stosuje się w teorii pola, gdzie różniczkowe równanie cząstkowe opisujące zjawiska fizyczne otrzymuje się konstruując „rozsądne” gęstości lagrangianu \mathcal{L} , a następnie postulując uogólnioną zasadę Hamiltona, która z kolei prowadzi do znikania pochodnych funkcjonalnych, czyli do równań Eulera–Lagrange'a. Taki rozsądny lagrangian może być częściowo określony z rozważań dotyczących niezmienniczości i własności symetrii problemu, np. można zażądać, żeby gęstość lagrangianu była niezmiennikiem Lorentza lub niezmiennikiem transformacji cechowania.

Jak dotąd, nic jeszcze nie powiedzieliśmy o więzach, które prowadzą do problemów izoperymetrycznych. Ale zastosowania powyższej procedury do problemów izoperymetrycznych dokonuje się tak, jak to robiliśmy przedtem. Przypomnijmy tutaj rezultaty otrzymane w ogólnym przypadku m zmiennych zależnych, n zmiennych niezależnych i p więzów całkowych postaci

$$J_k = \int_D g_k \left(x_i, \phi_j, \frac{\partial\phi_j}{\partial x_i} \right) dx_1 dx_2 \dots dx_n,$$

gdzie $i = 1, \dots, n$; $j = 1, \dots, m$; $k = 1, \dots, p$. Tutaj J_k są zadanymi więzami. Celem naszym jest znalezienie ekstremum całki wielokrotnej

$$I = \int_D \mathcal{L} \left(x_i, \phi_j, \frac{\partial\phi_j}{\partial x_i} \right) dx_1 dx_2 \dots dx_n,$$

przy założeniu występowania p więzów J_k . Aby zachować ścisłą analogię z problemem izoperymetrycznym omawianym poprzednio, zbudujemy nową funkcję

$$h = \mathcal{L} + \sum_{k=1}^p \lambda_k g_k, \quad (2.26)$$

gdzie λ_k są mnożnikami Lagrange'a. Funkcje h spełniają odpowiednie równania Eulera-Lagrange'a, mianowicie

$$\frac{\partial h}{\partial \phi_j} - \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial h}{\partial \left(\frac{\partial \phi_j}{\partial x_i} \right)} = 0, \quad j = 1, \dots, m. \quad (2.27)$$

Aby zilustrować ten ogólny formalizm, zbadajmy gęstość

$$\mathcal{L} = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial \psi^*}{\partial x} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial \psi^*}{\partial y} \frac{\partial \psi}{\partial y} + \frac{\partial \psi^*}{\partial z} \frac{\partial \psi}{\partial z} \right] + V(x, y, z) \psi^* \psi,$$

gdzie $\psi^*(x, y, z)$ i $\psi(x, y, z)$ są funkcjami zespolonymi, a V jest wielkością rzeczywistą. (Gwiazdka oznacza sprzężenia zespolone). Chcemy znaleźć ekstremum całki

$$I = \int_D \mathcal{L} dx dy dz,$$

przy założeniu więzów w postaci

$$J = \int_D \psi^* \psi dx dy dz = 1.$$

Jest to problem wariacyjny z trzema niezależnymi zmiennymi x, y, z , dwiema zmiennymi zależnymi (rzeczywistą i urojoną część ψ — oznaczamy odpowiednio ψ_{Re} i ψ_{Im}) i jednym równaniem więzów. Zgodnie z (2.26), budujemy teraz wielkość h

$$h = \mathcal{L} + \lambda \psi^* \psi = \frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial \psi_{\text{Re}}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi_{\text{Re}}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi_{\text{Re}}}{\partial z} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi_{\text{Im}}}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi_{\text{Im}}}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi_{\text{Im}}}{\partial z} \right)^2 \right] + [V(x, y, z) + \lambda] [\psi_{\text{Re}}^2 + \psi_{\text{Im}}^2].$$

Wstawiając to do równania (2.27) i oznaczając $\phi_1 = \psi_{\text{Re}}$ i $\phi_2 = \psi_{\text{Im}}$ otrzymujemy, dla $j = 1$

$$\lambda \psi_{\text{Re}} + V \psi_{\text{Re}} - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \psi_{\text{Re}}}{\partial x_i} \right) = 0$$

i dla $j = 2$

$$\lambda \psi_{\text{Im}} + V \psi_{\text{Im}} - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial \psi_{\text{Im}}}{\partial x_i} \right) = 0,$$

gdzie jak zwykle wprowadziliśmy oznaczenia: $x = x_1, y = x_2, z = x_3$. Możemy to zapisać jako proste równanie

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi = E \psi,$$

gdzie wprowadziliśmy zamiast λ stałą $-E$. Równanie to jest niezależnym od czasu równaniem Schrödingera dla ruchu nierelatywistycznej cząstki w potencjale $V(x, y, z)$. W tym przypadku mnożnik Lagrange'a gra rolę wartości własnej energii. Będziemy to szerzej omawiać w rozdziale 4, gdzie zajmiemy się również interesującym problemem czy dla wartości ekstremalnej pojawia się minimum czy też nie.

2.7. ZASADY ZACHOWANIA I TWIERDZENIE NOETHER

Po wprowadzeniu podstawowych zasad rachunku wariacyjnego przyjrzymy się jeszcze raz naszym początkowym rozważaniom i zapytajmy się, dlaczego w poprzednich paragrafach badając funkcje próbne $\bar{y}(x, \varepsilon)$ zawsze zakładaliśmy, że $\bar{y}(x, \varepsilon)$ mają ustalone punkty końcowe. Oczywiście, jest duża klasa problemów, które należą do tej kategorii, lecz wiele innych problemów do niej nie należy. Na przykład znajdowanie toru łączącego ustalony punkt P z linią pionową L , dla którego cząstka poruszająca się pod wpływem siły ciężkości przejdzie z P do L w czasie najkrótszym. Mamy tu jeden punkt końcowy ustalony, a drugi jest swobodny, leżący gdziekolwiek na L .

Z matematycznego punktu widzenia najprostszą rzeczą jest ograniczenie się najpierw do badania ustalonych punktów końcowych. Z fizycznego punktu widzenia powód takiego ograniczenia jest jeszcze prostszy, mianowicie, zasada Hamiltona wiąże się z wariowaniem rozmaitości ustalonych punktów końcowych. Ponieważ zasada ta odegrała istotną rolę w rozwoju fizyki, nic dziwnego, że uwaga fizyków skupiła się początkowo na tych szczególnych problemach wariacyjnych.

Dotychczas zapoznaliśmy się z najprostszymi problemami, popatrzmy teraz na problem wariowania całki

$$I = \int_{x_A}^{x_B} f(x, y, y') dx \quad (2.28)$$

z ogólniejszego punktu widzenia. Dla uproszczenia będziemy badać przypadek transformacji nieskończenie małych, parametryzowanych przez małą liczbę ε . Tak jak poprzednio, zajmiemy się przekształceniem

$$y(x) \rightarrow \bar{y}(x) \equiv y(x) + \varepsilon \eta(x),$$

które jest po prostu szczególnym przypadkiem transformacji $y(x) \rightarrow \bar{y}(x, \varepsilon)$ rozważanych w § 2.2, jeżeli zażądamy, żeby $\eta(x)$ zniknęła w x_A i x_B tak, by $\bar{y}(x_A) = y(x_A)$ i $\bar{y}(x_B) = y(x_B)$ dla wszystkich ε . Najprostsze uogólnienie tego polega na odrzuceniu ograniczeń na $\eta(x)$. Dalsze uogólnienie będzie polegało na przyjęciu, że η ma bardziej skomplikowaną formę funkcjonalną. Na przykład, η może zależeć explicite od funkcji y i y' . Wtedy

$$y(x) \rightarrow \bar{y}(x, y, y') \equiv y(x) + \varepsilon \eta(x, y, y'). \quad (2.29)$$

Głównym powodem badania takich wyszukanych transformacji, w szczególności tych, dla których punkty końcowe nie są ustalone, jest fakt ich częstego występowania w świecie fizyki, częstszego nawet niż tych prostszych transformacji. Dla przykładu można rozważyć tor cząstki klasycznej przesunięty ($x(t) \rightarrow x(t) + \varepsilon$) lub obrócony. Zobaczymy, że dopuszczając możliwość takich wariacji, możemy otrzymać bardzo ogólną informację o wielkościach, które nie ulegają zmianie w procesach fizycznych.

Idąc śladem analogii sugerowanej przez fizykę klasyczną (poprzez zasadę Hamiltona) możemy sobie także wyobrazić przesuwanie w czasie toru cząstki, na przykład przez przekształcenie $t \rightarrow t + \varepsilon$. Obliczając wariację tego typu mamy do czynienia z nowym rozszerzeniem metody wariacyjnej polegającym na *przesuwaniu* krzywej, po której całkujemy do innego obszaru przestrzeni. Przypuśćmy, że chcemy przekształcić każdy punkt x w punkt \bar{x} poprzez transformację

$$x \rightarrow \bar{x} = x + \varepsilon \xi(x, y, y'). \quad (2.30)$$

Transformacja ta zależy nie tylko od punktu x , lecz także od funkcji y , występującej w całce I . W oparciu o wzory (2.29) i (2.30) możemy zbudować wielkość $\bar{I}(\varepsilon)$ analogiczną do I (2.28):

$$\bar{I}(\varepsilon) = \int_{\bar{x}_A}^{\bar{x}_B} f[\bar{x}, \tilde{y}(\bar{x}), \tilde{y}'(\bar{x})] d\bar{x}. \quad (2.31)$$

Zauważmy, że $\bar{I}(\varepsilon = 0) = I$. W równaniu (2.31) wielkości \bar{x}_A i \bar{x}_B otrzymujemy stosując odwzorowanie (2.30) odpowiednio do x_A i x_B . W równaniu (2.31) najważniejszą wielkością jest $\tilde{y}(\bar{x})$. Symbol ten *nie znaczy*, że w (2.29) zastąpiliśmy po prostu x przez \bar{x} ; oznacza on, że badamy *przekształconą krzywą* \tilde{y} otrzymaną przez wyrażenie x przez \bar{x} (stosując (2.30)), a następnie wstawiamy to wyrażenie na x do równania (2.29). Ponieważ będziemy się w dalszym ciągu interesować jedynie *pierwszym przybliżeniem* całki $\bar{I}(\varepsilon)$, możemy w funkcji ξ i η używać wymiennie x lub \bar{x} , gdyż w zerowym przybliżeniu są one równe. W równaniu (2.31) \tilde{y}' oznacza pochodną po \bar{x} , podczas gdy w równaniu (2.28) y' oznaczało pochodną po x . Tak więc prim będzie zawsze oznaczać różniczkowanie po *niezależnej* zmiennej, czym by ona nie była.

Ponieważ ε jest małe, spróbujmy wyrazić $\bar{I}(\varepsilon)$ w postaci szeregu potęgowego. Ograniczmy się do dwóch pierwszych wyrazów szeregu; przyczynę tego ograniczenia wyjaśnimy później; Stosując (2.29) i (2.30), mamy

$$\tilde{y}(\bar{x}) = y[(\bar{x} - \varepsilon \xi(\bar{x}, y, y')) + \varepsilon \eta(\bar{x}, y, y')],$$

gdzie y i y' są funkcjami \bar{x} . Rozwijając w szereg względem ε znajdujemy, że

$$\tilde{y}(\bar{x}) = y(\bar{x}) - \varepsilon \frac{\partial y}{\partial \bar{x}} \xi(\bar{x}, y, y') + \varepsilon \eta(\bar{x}, y, y')$$

lub inaczej

$$\tilde{y}(\bar{x}) = y(\bar{x}) + \varepsilon \varrho(\bar{x}, y, y'), \quad (2.32)$$

gdzie dla ułatwienia rachunków wprowadziliśmy oznaczenie

$$\varrho(\bar{x}, y, y') \equiv \eta(\bar{x}, y, y') - \frac{\partial y}{\partial \bar{x}} \xi(\bar{x}, y, y'). \quad (2.33)$$

Biorąc pod uwagę równania (2.31) i (2.32) możemy zapisać $\bar{I}(\varepsilon)$ w postaci

$$\bar{I}(\varepsilon) = \int_{\bar{x}_A}^{\bar{x}_B} f[\bar{x}, y(\bar{x}) + \varepsilon \varrho(\bar{x}, y, y'), y'(\bar{x}) + \varepsilon \varrho'(\bar{x}, y, y')] d\bar{x}. \quad (2.34)$$

Teraz zgodnie z (2.30),

$$\bar{x}_A = x_A + \varepsilon \xi(x, y, y')|_{x=x_A} \equiv x_A + \delta_A, \quad (2.35a)$$

$$\bar{x}_B = x_B + \varepsilon \xi(x, y, y')|_{x=x_B} \equiv x_B + \delta_B, \quad (2.35b)$$

zapiszemy całkę (2.34) w postaci

$$\int_{\bar{x}_A}^{\bar{x}_B} = \int_{x_A + \delta_A}^{x_B + \delta_B} = \int_{x_A + \delta_A}^{x_B} + \int_{x_B}^{x_B + \delta_B} = \int_{x_A}^{x_B} - \int_{x_A}^{x_A + \delta_A} + \int_{x_B}^{x_B + \delta_B}.$$

Zatem

$$\begin{aligned} \bar{I}(\varepsilon) = & \int_{x_A}^{x_B} f[\bar{x}, y(\bar{x}) + \varepsilon \varrho(\bar{x}, y, y'), y'(\bar{x}) + \varepsilon \varrho'(\bar{x}, y, y')] d\bar{x} + \\ & + \int_{x_B}^{x_B + \delta_B} f[\bar{x}, y(\bar{x}), y'(\bar{x})] d\bar{x} - \int_{x_A}^{x_A + \delta_A} f[\bar{x}, y(\bar{x}), y'(\bar{x})] d\bar{x} + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \end{aligned}$$

gdzie $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$ jest małą rzędu ε^2 . W tym wzorze w dwu ostatnich całkach opuściliśmy człony zawierające ε , ponieważ te całki są proporcjonalne do ε (ponieważ długość obszaru całkowania jest proporcjonalna do ε). A więc człony w funkcji podcałkowej, w których występuje ε , będą dawać przyczynki rzędu ε^2 . Rozwińmy teraz pierwszą całkę względem ε i obliczymy, dwie ostatnie całki

$$\begin{aligned} \bar{I}(\varepsilon) = & \int_{x_A}^{x_B} f[\bar{x}, y(\bar{x}), y'(\bar{x})] d\bar{x} + \varepsilon \int_{x_A}^{x_B} \left[\varrho(\bar{x}, y, y') \frac{\partial}{\partial y} f(\bar{x}, y, y') + \right. \\ & \left. + \varrho'(\bar{x}, y, y') \frac{\partial}{\partial y'} f(\bar{x}, y, y') \right] d\bar{x} + \delta_B [f(\bar{x}, y, y')]_{\bar{x}=x_B} - \delta_A [f(\bar{x}, y, y')]_{\bar{x}=x_A} + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

Całkując ostatni człon w drugiej całce i stosując wzory (2.33), (2.35a) i (2.35b) otrzymujemy

$$\begin{aligned} \bar{I}(\varepsilon) = & \int_{x_A}^{x_B} f(\bar{x}, y, y') d\bar{x} + \varepsilon \int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{d\bar{x}} \frac{\partial f}{\partial y'} \right] \left[\eta(\bar{x}, y, y') - \frac{dy}{d\bar{x}} \xi(\bar{x}, y, y') \right] d\bar{x} + \\ & + \varepsilon \left\{ \frac{\partial f}{\partial y'} \eta(\bar{x}, y, y') + \left[f(\bar{x}, y, y') - y' \frac{\partial f}{\partial y'} \right] \xi(\bar{x}, y, y') \right\}_{x_A}^{x_B} + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \end{aligned}$$

Pierwszy człon po prawej stronie jest po prostu równy I (pamiętajmy, że zmienną całkowania możemy nazwać albo x albo \bar{x}), więc możemy napisać

$$\bar{I}(\varepsilon) - I = \varepsilon \int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'} \right] (\eta - y' \xi) dx + \varepsilon \left[\frac{\partial f}{\partial y'} \eta + \left(f - y' \frac{\partial f}{\partial y'} \right) \xi \right]_{x_A}^{x_B} + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \quad (2.36)$$

gdzie x jest zmienną całkowania.

Zauważmy, że jeżeli w równaniu (2.36) położymy $\xi \equiv 0$ (to znaczy, $x = \bar{x}$) i zażądamy, by η zniknęła w punktach x_A i x_B , to z uwagi na to, że $\bar{I}(\varepsilon = 0) = I$, otrzymamy

$$\bar{I}(\varepsilon) - \bar{I}(\varepsilon = 0) = \varepsilon \int_{x_A}^{x_B} \left[\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'} \right] \eta dx + \mathcal{O}(\varepsilon^2). \quad (2.37)$$

Jeżeli zażądamy jeszcze, by

$$\frac{\bar{I}(\varepsilon) - \bar{I}(\varepsilon = 0)}{\varepsilon} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} 0,$$

to całka po prawej stronie równania (2.37) musi zniknąć. Stąd wnioskujemy, że

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right) = 0.$$

Jest to po prostu równanie Eulera–Lagrange’a (2.3) wyprowadzone z § 2.2. Widzimy więc, że jeżeli zażądamy, żeby stosunek zmian \bar{I} do ε znikał dla wariacji typu $\xi \equiv 0$, $\eta|_{x_A} = 0 = \eta|_{x_B}$, wtedy otrzymamy identyczne równanie różniczkowe na y jak w § 2.2. Czytelnik zechce się zastanowić dlaczego tak jest.

Uogólnienie równania (2.36) w przypadku kilku zmiennych zależnych y_1, y_2, \dots, y_n jest tak samo proste, jak w § 2.2. Czytelnik może pokazać, że w tym przypadku dla

$$I = \int_{x_A}^{x_B} f(x, y_1, y_2, \dots, y_n; y'_1, y'_2, \dots, y'_n) dx, \quad (2.38)$$

mamy

$$\begin{aligned} \bar{I}(\varepsilon) - \bar{I}(\varepsilon = 0) &= \varepsilon \int_{x_A}^{x_B} \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial f}{\partial y_i} - \frac{d}{dx} \frac{\partial f}{\partial y'_i} \right] (\eta_i - y'_i \xi) dx + \\ &+ \varepsilon \left[\sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial y_i} \eta_i + \left(f - \sum_{i=1}^n y'_i \frac{\partial f}{\partial y'_i} \right) \xi \right]_{x_A}^{x_B} + \mathcal{O}(\varepsilon^2), \end{aligned} \quad (2.39)$$

gdzie

$$\begin{aligned} \bar{y}_i(x) &= y_i(x) + \varepsilon \eta_i(x, y_1, \dots, y_n; y'_1, \dots, y'_n), \\ \bar{x} &= x + \varepsilon \xi(x, y_1, \dots, y_n; y'_1, \dots, y'_n). \end{aligned}$$

I znów, jeżeli założymy, że $\xi \equiv 0$, $\eta_i|_{x_A} = 0 = \eta_i|_{x_B}$ ($i = 1, 2, \dots, n$), otrzymamy równania Eulera–Lagrange’a na n funkcji (porównaj (2.5))

$$\frac{\partial f}{\partial y_i} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y'_i} \right) = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Szczególnie interesująca sytuacja ma miejsce wtedy, gdy funkcje y_i , które wariujemy, są rozwiązaniami równań Eulera–Lagrange’a. Wtedy zgodnie z (2.5) całka w równaniu (2.39) znika i mamy po prostu

$$\bar{I}(\varepsilon) - \bar{I}(\varepsilon = 0) = \varepsilon \left[\sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial y'_i} \eta_i + \left(f - \sum_{i=1}^n y'_i \frac{\partial f}{\partial y'_i} \right) \xi \right]_{x_A}^{x_B}. \quad (2.40)$$

Niedawno stwierdziliśmy, że przynajmniej w jednym szczególnym przypadku równania Eulera–Lagrange’a mogą być przekształcone w ten sposób, by produkować stałe ruchu lub inaczej całki pierwsze. Z przypadkiem takim mamy do czynienia wtedy, gdy $f(x, y, y')$ nie zależy *explicite* od x a jedynie poprzez y i y' . Wtedy z prostego przeliczenia wynika, że

$$y' \frac{\partial f}{\partial y'} - f = \text{const}, \quad (2.41a)$$

a w przypadku kilku zmiennych zależnych

$$\sum_{i=1}^n y'_i \frac{\partial f}{\partial y'_i} - f = \text{const}. \quad (2.41b)$$

Jeżeli funkcja f jest funkcją Lagrange’a L a czas t jest zmienną niezależną, to ostatnie równanie staje się równe

$$\sum_{i=1}^n \dot{q}_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} - L = \text{const}, \quad (2.42)$$

gdzie q_i są współzrędnymi uogólnionymi, a kropka nad q_i oznacza różniczkowanie po czasie. Jak już podkreślaliśmy w paragrafie 2.5, w większości wypadków interesujących z fizycznego punktu widzenia stała w równaniu (2.42) jest całkowitą energią układu.

Istotnym założeniem przy wyprowadzaniu równania (2.41a), jak również (2.41b) jest założenie, że f nie zależy explicite od x . Inną drogą otrzymania równania (2.41a) jest pokazanie, że całka I jest niezmiennicza względem transformacji

$$\bar{x} = x + \varepsilon\xi, \quad \bar{y} = y(x) + \varepsilon\eta \quad (2.43)$$

dla

$$\xi = 1, \quad \eta = 0. \quad (2.44)$$

Przez niezmienniczość rozumiemy po prostu, że

$$\bar{I}(\varepsilon) = \bar{I}(\varepsilon = 0) = I. \quad (2.45)$$

Równanie (2.45) może być wyprowadzone następująco. Jeżeli $f(x, y, y') = F(y, y')$, to

$$I = \int_{x_A}^{x_B} F(y, y') dx$$

oraz

$$\bar{I}(\varepsilon) = \int_{\bar{x}_A}^{\bar{x}_B} F[\bar{y}(\bar{x}), \bar{y}'(\bar{x})] d\bar{x}.$$

Zastosujemy teraz przepis na otrzymywanie \bar{x} i \bar{y} :

$$\bar{x}_A = x_A + \varepsilon, \quad \bar{x}_B = x_B + \varepsilon,$$

i

$$\bar{y}(\bar{x}) = y(\bar{x} - \varepsilon).$$

Z tego wynika, że

$$\bar{I}(\varepsilon) = \int_{x_A + \varepsilon}^{x_B + \varepsilon} F \left[y(\bar{x} - \varepsilon), \frac{d}{d\bar{x}} y(\bar{x} - \varepsilon) \right] d\bar{x}.$$

Lecz

$$\frac{d}{d\bar{x}} y(\bar{x} - \varepsilon) = \frac{dy(\bar{x} - \varepsilon)}{d(\bar{x} - \varepsilon)},$$

stąd

$$\bar{I}(\varepsilon) = \int_{x_A + \varepsilon}^{x_B + \varepsilon} F \left[y(\bar{x} - \varepsilon), \frac{dy(\bar{x} - \varepsilon)}{d(\bar{x} - \varepsilon)} \right] d\bar{x}.$$

Wykorzystując związek między \bar{x} i x ($x = \bar{x} - \varepsilon$) możemy powyższą całkę zapisać w postaci

$$\bar{I}(\varepsilon) = \int_{x_A}^{x_B} F \left[y(x), \frac{dy(x)}{dx} \right] dx = \bar{I}(\varepsilon = 0) = I.$$

A więc rzeczywiście I jest niezmiennicze względem grupy transformacji zdefiniowanej przez (2.43) i (2.44). Znaczy to, że różnica $\bar{I}(\varepsilon) - I$ musi znikać, co zgodnie z (2.40) prowadzi nas do równania

$$\varepsilon \left[\frac{\partial f}{\partial y'} \eta + \left(f - y' \frac{\partial f}{\partial y'} \right) \xi \right]_{x_A}^{x_B} = 0.$$

Stosując warunki (2.44) można to równanie dalej uprościć:

$$\left(f - y' \frac{\partial f}{\partial y'} \right)_{x=x_A} = \left(f - y' \frac{\partial f}{\partial y'} \right)_{x=x_B}.$$

Z uwagi na to, że x_A i x_B są dowolne, z powyższej równości wynika, że

$$f - y' \frac{\partial f}{\partial y'} = \text{const.}$$

Jest to dokładnie ta sama całka pierwsza, którą otrzymaliśmy zupełnie inną metodą w § 2.2. Widzimy więc, że istnienie całki pierwszej (lub stałej ruchu, jeżeli mamy na uwadze problem fizyczny) wiąże się z niezmienniczością I względem rozważanych powyżej transformacji. Ten ważny wynik jest szczególnym przypadkiem silnego twierdzenia, które zawdzięczamy Emmy Noether.

Twierdzenie 2.1. Jeżeli funkcjonal

$$I = \int_{x_A}^{x_B} f(x, y_1, \dots, y_n; y'_1, \dots, y'_n) dx$$

jest niezmienniczy względem infinitezymalnej transformacji generowanej przez związki

$$\bar{x} = x + \varepsilon \xi(x, y_1, \dots, y_n; y'_1, \dots, y'_n),$$

$$\bar{y}_i(x) = y_i(x) + \varepsilon \eta_i(x, y_1, \dots, y_n; y'_1, \dots, y'_n),$$

w tym sensie, że

$$I(\varepsilon) = \int_{x_A}^{x_B} f[\bar{x}, \bar{y}_1(\bar{x}), \dots, \bar{y}_n(\bar{x}); \bar{y}'_1(\bar{x}), \dots, \bar{y}'_n(\bar{x})] d\bar{x} = I,$$

to istnieje całka pierwsza odpowiednich równań Eulera-Lagrange'a

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial y'_i} \eta_i + \left(f - \sum_{i=1}^n y'_i \frac{\partial f}{\partial y'_i} \right) \xi = \text{const.} \quad (2.46)$$

Dowód. Ponieważ y_1, \dots, y_n są rozwiązaniami równania Eulera-Lagrange'a, więc z (2.40) wynika, że

$$\bar{I}(\varepsilon) - I = \varepsilon \left[\sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial y'_i} \eta_i + \left(f - \sum_{i=1}^n y'_i \frac{\partial f}{\partial y'_i} \right) \xi \right]_{x_A}^{x_B} + \mathcal{O}(\varepsilon^2).$$

Funkcjonal I z założenia jest niezmienniczy, $\bar{I}(\varepsilon) - I = 0$, tak więc

$$\left[\sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial y'_i} \eta_i + \left(f - \sum_{i=1}^n y'_i \frac{\partial f}{\partial y'_i} \right) \xi \right]_{x=x_A} = \left[\sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial y'_i} \eta_i + \left(f - \sum_{i=1}^n y'_i \frac{\partial f}{\partial y'_i} \right) \xi \right]_{x=x_B}.$$

Ponieważ x_A i x_B są dowolne, wnioskujemy, że

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial f}{\partial y_i} \eta_i + \left(f - \sum_{i=1}^n y_i' \frac{\partial f}{\partial y_i'} \right) \xi = \text{const},$$

co chcieliśmy wykazać.

Przykładem powyższego twierdzenia jest całka pierwsza otrzymana w przypadku, gdy f nie zależy explicite od x . Zauważmy, że użycie terminu całka pierwsza jest usprawiedliwione, ponieważ równanie (2.46) zawiera jedynie *pierwsze* pochodne y_i , podczas gdy równania Eulera-Lagrange'a są równaniami różniczkowymi *drugiego* rzędu. Mówiliśmy już o tym, że jeżeli f jest lagrangianem układu dynamicznego

$$f = L(t, q_1, \dots, q_n; \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_n) \equiv T - V,$$

niezależnym *explicite* od czasu, wtedy całka pierwsza odpowiada zachowaniu energii.

Innym interesującym przykładem z mechaniki klasycznej jest przypadek, gdy V (energia potencjalna) zależy jedynie od wektora łączącego pary cząstek. Na przykład, w układzie dwu cząstek oznacza to, że lagrangian jest równy

$$L = \frac{m_1}{2} (\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2 + \dot{z}_1^2) + \frac{m_2}{2} (\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2 + \dot{z}_2^2) - V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2).$$

Lagrangian tego typu jest niezmienniczy względem transformacji

$$\begin{aligned} \bar{t} &= t + \varepsilon\tau, & \bar{x}_1 &= x_1 + \varepsilon\xi_1, & \bar{x}_2 &= x_2 + \varepsilon\xi_2, & \bar{y}_1 &= y_1 + \varepsilon\eta_1, \\ & & \bar{y}_2 &= y_2 + \varepsilon\eta_2, & \bar{z}_1 &= z_1 + \varepsilon\zeta_1, & \bar{z}_2 &= z_2 + \varepsilon\zeta_2, \end{aligned}$$

dla których

$$\begin{aligned} \tau &= 0, & \xi_1 &= 1, & \xi_2 &= 1, \\ \eta_1 &= \eta_2 = \zeta_1 = \zeta_2 = 0. \end{aligned}$$

Stosując wzór (2.46) otrzymujemy natychmiast, że

$$\sum_{i=1}^2 \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \xi_i = \text{const}, \text{ lub } \text{rozpisując } \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_1} + \frac{\partial L}{\partial \dot{x}_2} = m_1 \dot{x}_1 + m_2 \dot{x}_2 = \text{const}.$$

Równania te wyrażają fakt, że x -owa składowa całkowitego pędu układu jest całką ruchu. Podobnie, niezmienniczość względem translacji składowej y prowadzi do podobnego rezultatu dla y -owej składowej całkowitego pędu, a niezmienniczość względem translacji współrzędnej z prowadzi do zachowania z -owej składowej całkowitego pędu. Widzimy więc, że zachowanie pędu jest bezpośrednią konsekwencją *niezmienniczości* układu względem translacji zdefiniowanej poprzez całkę I z zasady Hamiltona.

Na koniec zajmiemy się lagrangianem cząstki poruszającej się w centralnym polu potencjalnym $V(r)$. Mamy wtedy

$$L = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - V(r), \quad r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} \quad (2.47)$$

Zbadajmy teraz dowolny obrót wokół osi z . Odpowiada on przekształceniu (1.15)

$$\bar{t} = t, \quad \bar{x} = x \cos \varepsilon + y \sin \varepsilon, \quad \bar{y} = -x \sin \varepsilon + y \cos \varepsilon, \quad \bar{z} = z. \quad (2.48)$$

Odpowiednie wartości τ , ξ , η i ζ są następujące

$$\tau = 0, \quad \xi = y, \quad \eta = -x, \quad \zeta = 0.$$

Bierze się to stąd, że transformacja infinitesimalna, odpowiadająca \bar{x} i \bar{y} , przy założeniu, że w równaniu (2.48) ε jest małe, jest dana wzorem

$$\bar{x} = x + \varepsilon y, \quad \bar{y} = y - \varepsilon x.$$

Wstawiając równania (2.48) do lagrangianu (2.47), widzimy, że jest on niezmienniczy względem obrotów wokół osi z . Równanie (2.46) daje więc

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \xi + \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} \eta = \text{const}, \quad \text{czyli} \quad x \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} - y \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = \text{const}.$$

Biorąc jednak pod uwagę, że

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = p_x, \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = p_y,$$

otrzymujemy równość

$$xp_y - yp_x = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})_z = L_z = \text{const},$$

która wyraża prawo zachowania z -owej składowej momentu pędu. W identyczny sposób z niezmienniczości układu względem obrotów wokół osi x i y wynika, że w ruchu układu L_x i L_y również pozostają stałe. Stąd wynika, że całkowity moment pędu układu jest zachowany

Z rozpatrywanych tu przykładów wynika, że w oparciu o zasadę Hamiltona możemy łatwo powiązać prawa zachowania z występowaniem określonych symetrii, dla których wielkość

$$I = \int_{t_A}^{t_B} L dt$$

jest niezmiennicza. Jest to jeden z powodów formułowania mechaniki klasycznej w oparciu o tę zasadę.

ZADANIA

1. *Najkrótsza droga (współrzędne biegunowe)*. Znaleźć przy użyciu współrzędnych biegunowych najkrótszą drogę łączącą dwa punkty. Element odległości w tych współrzędnych jest równy

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2.$$

2. *Najkrótsza droga (w trzech wymiarach)*. Udowodnić, że najkrótszą drogą łączącą dwa punkty w trójwymiarowej przestrzeni jest linia prosta. Należy szukać równania krzywej łączącej początek układu $(0, 0, 0)$ i punkt (a, b, c) .

3. *Geodezyjne na kuli*. Na powierzchni kuli o ustalonym promieniu element długości jest dany wzorem

$$ds^2 = a^2 d\theta^2 + a^2 \sin^2 \theta d\varphi^2.$$

Znaleźć równanie krzywej o ekstremalnej długości, łączącej dane dwa punkty kuli. Czym jest ekstremum: minimum, maksimum czy może czymś innym? (Wskazówka: Niech θ

będzie zmienną niezależną, wtedy funkcja podcałkowa będzie niezależna od zmiennej zależnej φ). Następnie wykazać, że $\varphi = \alpha - \arcsin(ktg\theta)$, gdzie α i k są pewnymi stałymi. Przejść od współrzędnych sferycznych do kartezjańskich i pokazać, że jest to równanie płaszczyzny przechodzącej przez początek układu współrzędnych. Przecięcie tej płaszczyzny z kulą o promieniu $r = a$ jest geodezyjną — kołem wielkim — na powierzchni kuli.

4. *Problem odwrotny do izoperymetrycznego* (problem izoareometryczny). Udowodnić, że ze wszystkich prostych krzywych zamkniętych otaczających daną powierzchnię, okrąg ma najmniejszy obwód.

5. Wykazać, że dla problemu izoperymetrycznego zachodzi następująca relacja. Funkcja, dla której całka

$$I = \int_{x_1}^{x_2} f(x, y, y') dx$$

osiąga ekstremum, a która jednocześnie zapewnia całce

$$J = \int_{x_1}^{x_2} g(x, y, y') dx$$

określoną wartość, czyni również całkę J ekstremalną ze względu na funkcję, która z kolei zapewnia określoną wartość całce I , jeżeli tylko mnożnik Lagrange'a $\lambda \neq 0$.

6. Wszystkie nasze dotychczasowe rozważania, dotyczące funkcji f , dla której całka $I = \int_{x_1}^{x_2} f dx$ ma wartość ekstremalną, oparte były na założeniu, że f zależy jedynie od x, y i y'

$$f = f(x, y, y').$$

Pokazać, że dla problemu z ustalonymi końcami, jeżeli f zawiera również drugą pochodną y po x , tzn. $f = f(x, y, y', y'')$ i znane są wartości y' w punktach końcowych, równanie Eulera-Lagrange'a jest postaci

$$\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{d}{dx} \left(\frac{\partial f}{\partial y'} \right) + \frac{d^2}{dx^2} \left(\frac{\partial f}{\partial y''} \right) = 0.$$

Jakie należy przyjąć założenia o ciągłości pochodnych funkcji y ?

7. Zasada Fermata głosi: *Światło przebiegające z określoną prędkością $u = u(y)$ odległość między dwoma punktami (x_1, y_1) i (x_2, y_2) wybiera zawsze taką drogę, by czas zużyty na jej przebycie*

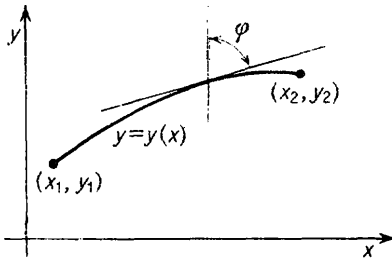
$$I = \int_{(x_1, y_1)}^{(x_2, y_2)} \frac{ds}{u}$$

był ekstremalny. (Aby ta zasada Fermata była słuszna we wszystkich przypadkach, należy to sformułowanie nieco zmodyfikować).

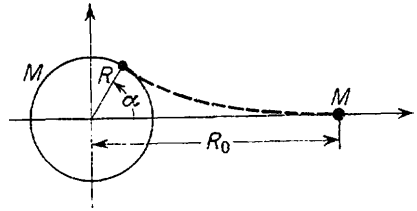
a) Wyprowadzić z zasady Fermata prawo Sneliusa, to znaczy udowodnić, że $\frac{\sin \varphi}{u} = \text{const}$, gdzie φ jest kątem zaznaczonym na rys. 2.6.

b) Przyjmując, że ruch światła w płaszczyźnie xy jest taki, że jego prędkość jest proporcjonalna do y , na rys. 2.6 udowodnić, że promienie świetlne emitowane z każdego punktu są okręgami o środkach na osi x .

8. Problem brachistochrony w centralnym polu grawitacyjnym. Cząstka o masie m porusza się w polu ciężkości nieruchomej masy kulistej M z punktu odległego o $r = R_0$ od centrum ciała M do punktu na jego powierzchni. Chcemy wyznaczyć tor, po jakim powinna poruszać się cząstka między tymi ustalonymi punktami, aby przebyć tę odległość w czasie najkrótszym. Przyjmując punkty końcowe jako $\Theta = 0, r = R_0$ i $\Theta = \alpha, r = R$ (rys. 2.7) wypisać we współrzędnych biegunowych równanie określające tor i wyrazić Θ w funkcji r . Analitycznie możemy wyrazić Θ co najwyżej przez całkę eliptyczną ze zmienną



Rys. 2.6.



Rys. 2.7.

górną granicą i dolną granicą wybraną tak, by spełniała jeden z warunków granicznych. Daje nam to wyobrażenie, z jaką dokładnością można wyznaczyć tor pocisku międzyplanetarnego.

9. Pokazać, że jeżeli ψ i ψ^* są dwiema zmiennymi zależnymi pola, rzeczywista gęstość lagrangianu

$$\mathcal{L} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla\psi \cdot \nabla\psi^* + V\psi\psi^* - \frac{i\hbar}{2} (\psi^*\dot{\psi} - \dot{\psi}\psi^*)$$

($\dot{\psi} = \partial\psi/\partial t$) prowadzi do zależnego od czasu równania Schrödingera

$$H\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi = i\hbar \frac{\partial\psi}{\partial t}$$

i równania sprzężonego (w sensie zespolonym) do powyższego.

10. a) Naładowany mezon skalarny jest opisywany przez dwa rzeczywiste pola $\varphi_1(x_\mu)$, $\varphi_2(x_\mu)$, gdzie $x_\mu = (x, y, z, it)$. Używamy tu tzw. jednostek naturalnych: $\hbar = c = 1$. Gęstością Lagrange'a dla takiego mezonu jest zewnętrzne pole elektromagnetyczne, opisywane przez potencjał wektorowy $A_\mu(x)$, czyli

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial\varphi_1}{\partial x_\mu} \frac{\partial\varphi_1}{\partial x_\mu} + \frac{\partial\varphi_2}{\partial x_\mu} \frac{\partial\varphi_2}{\partial x_\mu} \right) - \frac{m^2}{2} (\varphi_1^2 + \varphi_2^2) + eA_\mu \left[\varphi_2 \frac{\partial\varphi_1}{\partial x_\mu} - \varphi_1 \frac{\partial\varphi_2}{\partial x_\mu} \right] + \frac{1}{2} e^2 A_\mu A_\mu (\varphi_1^2 + \varphi_2^2).$$

(Zastosowaliśmy tu umowę sumacyjną Einsteina, czyli sumowanie po powtarzających się indeksach). Znaleźć równania Eulera-Lagrange'a dla φ_1 i φ_2 odpowiadające temu lagrangianowi; e i m są stałymi, a A_μ jest daną funkcją x .

b) Nieraz wprowadza się zespolone pola φ i φ^* zamiast dwu rzeczywistych pól φ_1 i φ_2 :

$$\varphi(x_\mu) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1(x_\mu) - i\varphi_2(x_\mu)],$$

$$\varphi^*(x_\mu) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_1(x_\mu) + i\varphi_2(x_\mu)].$$

Pokazać, że gęstość lagrangianu wyrażona przez te dwie nowe zespolone zmienne, w przypadku gdy $A_\mu = 0$, jest dana wzorem

$$\mathcal{L}_0 = - \left(\frac{\partial\phi^*}{\partial x_\mu} \frac{\partial\phi}{\partial x_\mu} + m^2\varphi^*\varphi \right).$$

Znaleźć równania Eulera–Lagrange’a dla tej gęstości (niezależnie lub w oparciu o punkt a , przekształcając φ_1 i φ_2 na φ i φ^*). Znalezione równania Eulera–Lagrange’a powinny być postaci

$$(\square^2 - m^2)\varphi = 0 \quad \text{i} \quad (\square^2 - m^2)\varphi^* = 0.$$

Są to tzw. równania Kleina–Gordona dla swobodnych bezspinowych cząstek. Powyższe równania opisują dwa naładowane mezony π .

11. Gęstość lagrangianu \mathcal{L} , która prowadzi do równań Eulera–Lagrange’a, nie jest jednoznacznie określona. Udowodnić to, pokazując, że dodanie do \mathcal{L} dywergencji jakiegoś wektora nie zmienia równań Eulera–Lagrange’a. Niech

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L} + \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial x_k},$$

gdzie

$$\mathcal{L} = \mathcal{L} \left(x_k, \varphi_j, \frac{\partial\varphi_j}{\partial x_k} \right);$$

$$f_k = f_k(\varphi_j);$$

$j = 1, \dots, m$ są wskaźnikami zależnych zmiennych polowych,
 $k = 1, \dots, n$ są wskaźnikami zmiennych niezależnych.

Teraz należy wykazać, że

$$\frac{\delta\mathcal{L}'}{\delta\varphi_j} = \frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\varphi_j},$$

gdzie wprowadzimy oznaczenie

$$\frac{\delta\mathcal{L}}{\delta\varphi_j} \equiv \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\varphi_j} - \sum_i \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial\varphi_j/\partial x_i)}.$$

12. W klasycznej elektrodynamice gęstość lagrangianu wyraża się wzorem

$$\mathcal{L} = -\frac{1}{16\pi} \sum_{i,j} F_{ij}F_{ij} + \frac{1}{c} \sum_i J_i A_i,$$

gdzie

$$F_{ij} = \frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j}.$$

Definiujemy czterowektory $\{A_i\}$ i $\{J_i\}$

$$\{A_i\} \equiv \{A_1, A_2, A_3, i\varphi\} \equiv \{\mathbf{A}, i\varphi\},$$

$$\{J_i\} \equiv \{j_1, j_2, j_3, ic\rho\} \equiv \{\mathbf{j}, ic\rho\},$$

gdzie \mathbf{A} jest potencjałem wektorowym ($\mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{A}$), φ jest potencjałem skalarnym ($\mathbf{E} = -\nabla\varphi$), \mathbf{j} jest wektorem prądu, a ρ jest gęstością ładunku (patrz zadania 1–13). Pokazać, że ta gęstość lagrangianu może być zapisana w bardziej znanej postaci

$$\mathcal{L} = \frac{1}{8\pi} (\mathbf{E}^2 - \mathbf{H}^2) + \frac{1}{c} \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} - \rho\varphi.$$

Wykorzystując równania Lagrange'a z zależnymi zmiennymi \mathbf{A} i φ pokazać, że ta gęstość lagrangianu prowadzi do znanych równań Maxwella.

13. Udowodnić, że cząstka poruszająca się w polu siły ciężkości w płaszczyźnie z ustalonego punktu P do linii pionowej L osiągnie tę linię w czasie najkrótszym poruszając się po cyklidzie przecinającej L dla kątów dodatnich.

LITERATURA POMOCNICZA

Elsgolc, L. E. *Rachunek wariacyjny*, PWN, Warszawa 1960

Landau, L. i Lifszyc E., *Teoria pola*, PWN, Warszawa 1958

WEKTORY I MACIERZE

WSTĘP

Teoria przestrzeni wektorowych jest dla mechaniki kwantowej tym, czym rachunek różniczkowy i całkowy dla mechaniki klasycznej. W rozdziale tym będziemy badać przede wszystkim skończone wymiarowe przestrzenie wektorowe. Zrobimy to taki sposób, żeby uogólnienie do nieskończone wielowymiarowych przestrzeni (rozdział 5 i 8), które są matematycznym językiem teorii kwantowej, było naturalne i wymagało jedynie drobnych zmian. Większość twierdzeń udowodnionych w tym rozdziale dla przestrzeni skończone wymiarowych będzie słuszna i dla przypadku nieskończone wymiarowego. Nasze rozważania o przestrzeniach wektorowych będą w dużej mierze bardziej abstrakcyjne i formalne niż rozważania o wektorach w rozdziale 1. Zajmować się teraz będziemy przede wszystkim algebraicznym opisem wektorów. Jednakże do interpretacji uzyskiwanych wyników będziemy się również posługiwać opisem geometrycznym.

3.1. GRUPY, CIAŁA I PRZESTRZENIE WEKTOROWE

Definicja abstrakcyjnego wektora podana w tym rozdziale zależy w istotny sposób od własności skalarów, chociaż wektory, jak się później okaże, spełniają zupełnie inne reguły kombinatoryczne niż skalary. Związane jest to z tym, że składowe wektora są skalarami, jak również z tym, że skalary działając na wektory mogą na przykład zmieniać ich długość.

Często mówi się o wektorach lub przestrzeni wektorowej jako o obiektach zdefiniowanych nad ciałem skalarnym. Określenie *ciało* jest po prostu skrótem określającym zbiór aksjomatów, które muszą spełniać *skalary*. Zwykle udowadnia się te reguły, lecz my tutaj przyjmiemy je *explicite*. Przyjęło się wprawdzie wprowadzać inną strukturę algebraiczną zwaną *grupą*. Tak jak i ciało, grupa jest pewnym systemem składającym się ze zbioru elementów i praw, pozwalających składać elementy tego zbioru.

Założmy, że G jest zbiorem elementów. Niech \cdot (kropka) będzie operacją zdefiniowaną na zbiorze G taką, że jeżeli a i $b \in G$, wtedy również $(a \cdot b) \in G$. O takiej operacji mówimy, że jest *zamknięta*. Możemy teraz zdefiniować pojęcie grupy.

* Symbol \in oznacza „należy do” lub „jest elementem”.

Definicja 3.1. Grupą nazywamy parę $\{G, \cdot\}$, składającą się ze zbioru elementów G i zamkniętej operacji \cdot , która spełnia następujące warunki:

1. Jeżeli $a, b, c \in G$, to $a \cdot (b \cdot c) = (a \cdot b) \cdot c$ (łączność).
2. Istnieje element jednostkowy $e \in G$ taki, że dla każdego $a \in G$, $a \cdot e = e \cdot a = a$.
3. Dla każdego $a \in G$ istnieje element odwrotny należący do G , a^{-1} , taki że $a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e^*$.

O grupie mówimy, że jest *abelowa*, jeżeli jest grupą przemienną, to znaczy jeżeli $a \cdot b = b \cdot a$ dla $a, b \in G$. Często opuszczamy kropkę (\cdot), jeżeli chodzi o zwykłe mnożenie, dla wielu zbiorów kropka oznacza dodawanie ($+$). W naszej definicji oznacza ona każdą operację, która z dwóch elementów grupy tworzy trzeci element również należący do grupy i spełnia powyższe aksjomaty.

Teoria grup odgrywa bardzo ważną rolę w fizyce. Ucząc się mechaniki kwantowej często słyszy się: „Można pokazać na gruncie teorii grup, że...”. Będziemy o tym mówić szerzej w rozdziale 10.

Przykłady grup

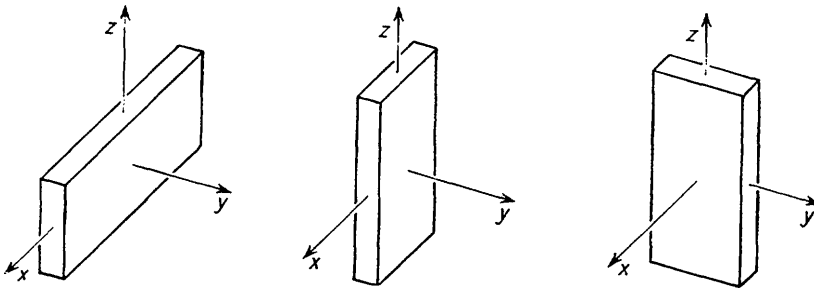
1. Zbiór liczb rzeczywistych bez 0 jest grupą ze względu na zwykłe mnożenie (\cdot).

Elementem jednostkowym jest 1, dla każdego x elementem odwrotnym jest $x^{-1} \equiv \frac{1}{x}$.

Jest to grupa abelowa.

2. Liczby całkowite z dodawaniem jako operacją składania tworzą inną grupę abelową. 0 jest tu elementem jednostkowym, a elementem odwrotnym jest $n^{-1} \equiv -n$.

3. Zbiór wszystkich dwuwymiarowych macierzy obrotu [patrz (1.14)] jest grupą abelową, ciągłą. Ciągłą, ponieważ istnieje nieskończona liczba elementów zdefiniowanych przez ciągłą zmianę parametru ϕ . Mnożenie elementów grup (macierzy) zostało związane podane w równaniu (1.22). Szczegółowo omówimy je w dalszej części tego rozdziału. Elementem jednostkowym tej grupy jest $r(0)$, a odwrotnością $r(\phi)$ jest $r(-\phi)$.



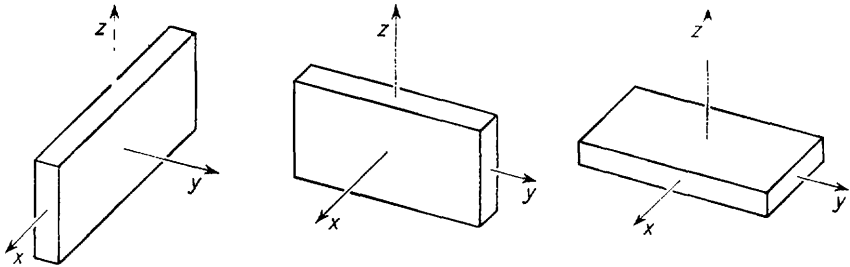
Rys. 3.1. Obrót wokół osi y , a następnie wokół osi z

4. Zbiór trójwymiarowych obrotów jest ciągłą grupą nieprzemienną. Czytelnik może wykazać to, zauważwszy, że wynik dwóch następujących kolejno po sobie obrotów w trzech wymiarach zależy od ich kolejności (patrz rys. 3.1 i 3.2).

* Nie jest to z matematycznego punktu widzenia definicja minimalna; tego typu definicję podamy w rozdziale 10.

5. Zbiór permutacji n elementów stanowi grupę. Na przykład $3! = 6$ możliwych permutacji 3 elementów może być zapisanych w postaci

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} &= I, & \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{bmatrix} &= F, & \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{bmatrix} &= D, \\ \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{bmatrix} &= A, & \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{bmatrix} &= C, & \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{bmatrix} &= B. \end{aligned} \quad (3.2)$$



Rys. 3.2. Obrót wokół osi z , a następnie wokół osi y

Na przykład permutacja F oznacza, że 1 jest zastąpione przez 3, 2 jest zastąpione przez 1, a 3 przez 2. Iloczyn dwóch permutacji, oznaczony przez $*$, jest permutacją, która daje w wyniku to, co dałyby dwie permutacje zastosowane kolejno od prawej do lewej. Na przykład

$$A * C = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{bmatrix} = D.$$

Otrzymuje się ten wynik w następujący sposób. Najpierw permutacja C przekształca $1 \rightarrow 1, 2 \rightarrow 3, 3 \rightarrow 2$. Następnie A zamienia $1 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 1, 3 \rightarrow 3$. W efekcie, w wyniku działania najpierw C , a potem A otrzymamy $1 \rightarrow 1 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 3 \rightarrow 3, 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1$. Wynikiem dwu kolejnych permutacji jest więc zamiana $1 \rightarrow 2, 2 \rightarrow 3, 3 \rightarrow 1$; jest to permutacja D . Podobnie widzimy, że ta grupa nie jest abelowa.

$$C * A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{bmatrix} * \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{bmatrix} = F \quad (3.3)$$

W tabeli 3.1 przedstawione są wszystkie możliwe złożenia (jest ich 36) grupy permutacji trzech elementów.

W oparciu o pojęcie grupy zdefiniujemy teraz pojęcie ciała.
Tabela 3.1.

	I	A	B	C	D	F
I	I	A	B	C	D	F
A	A	I	F	D	C	B
B	B	D	I	F	A	C
C	C	F	D	I	B	A
D	D	B	C	A	F	I
F	F	C	A	B	I	D

Definicja 3.2. *Ciało* jest zbiorem $\{F, +, \cdot\}$ spełniającym trzy warunki:

1. $\{F, +\}$ jest grupą abelową z elementem jednostkowym 0.
2. Niech F' będzie zbiorem wszystkich $x \in F$ z wyjątkiem $x = 0$, wtedy $\{F', \cdot\}$ jest grupą abelową z elementem jednostkowym e .
3. Jeżeli $a, b, c \in F$, to $a \cdot (b+c) = a \cdot b + a \cdot c$ (rozłączność mnożenia (\cdot) względem dodawania $(+)$).

Przykłady ciał. Zbiór wszystkich liczb wymiernych, zbiór wszystkich liczb rzeczywistych i zbiór wszystkich liczb zespolonych ze zwykłym mnożeniem i dodawaniem są najbardziej znanymi przykładami ciał.

Zdefiniujemy teraz przestrzeń wektorową V . Zakładamy, że mamy dane ciało F , którego elementami są skalary.

Definicja 3.3. *Przestrzeń wektorowa* nad ciałem F jest to zbiór elementów $V(F)$, nazywanych wektorami, spełniających następujące warunki:

1. Istnieje operacja dodawania $(+)$ wektorów, taka że $\{V(F), +\}$ jest grupą abelową; element jednostkowy oznaczać będziemy przez 0.

2. Dla każdego $\alpha \in F$ i $x \in V(F)$ istnieje wektor $\alpha x \in V(F)$;
ponadto

- a) $\alpha(\beta x) = (\alpha\beta)x$, b) $1(x) = x$, dla każdego x ,
c) $\alpha(x+y) = \alpha x + \alpha y$, d) $(\alpha+\beta)x = \alpha x + \beta x$.

Przestrzeń wektorową $V(F)$ nazywamy rzeczywistą lub zespoloną przestrzenią wektorową w zależności od tego czy F jest ciałem liczb rzeczywistych czy zespolonych.

Przyjmujemy następującą umowę notacyjną:

a) Przestrzeń wektorową będziemy zapisywać jako $V_n(F)$, gdzie wskaźnik oznacza wymiar przestrzeni, wielkość w nawiasach zaś jest ciałem, nad którym zdefiniowana jest przestrzeń wektorowa. Jeżeli z kontekstu w sposób oczywisty wynikać będzie wymiar lub ciało, wtedy będziemy używać skróconych oznaczeń V_n lub V .

b) Wektory przestrzeni będziemy oznaczać końcowymi literami alfabetu, np. x, y, z ; *nie* będziemy ich oznaczać tłustym drukiem tak jak w rozdziale 1. Rozróżnienie między skalarom a wektorem zerowym wynikać będzie z kontekstu.

c) Skalarne składowe wektorów będziemy zapisywać przy użyciu indeksowanych liter greckich np. $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$. Elementy macierzy będziemy zapisywać posługując się literami łańcuskimi z dwoma wskaźnikami np. a_{12} .

d) Skalary działające na wektory będziemy oznaczać literami łańcuskimi i greckimi bez wskaźników np. a, b, c lub α, β, γ . Mogą one być rzeczywiste lub zespolone.

e) Zbiór wektorów bazy oznaczać będziemy przez $\{x_i\}$ lub $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$. Zgodnie powyższą umową możemy napisać

$$x = \sum_i \alpha_i \cdot x_i,$$

gdzie x jest wektorem, którego i -tą składową w bazie $\{x_i\}$ jest wielkość α_i .

Przykłady przestrzeni wektorowych

1. Dla ustalonego dodatniego n , zbiór uporządkowanych ciągów n liczb zespolonych $(x = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n))$ jest przestrzenią wektorową, jeżeli dodawanie wektorów i mnożenie wektorów przez liczbę określimy następująco

$$\begin{aligned}
 x+y &= (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n) + (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n) = \\
 &= (\xi_1 + \eta_1, \xi_2 + \eta_2, \dots, \xi_n + \eta_n); \\
 \alpha x &= \alpha(\xi_1, \dots, \xi_n) = (\alpha\xi_1, \dots, \alpha\xi_n);
 \end{aligned}$$

oraz dodatkowo przyjmiemy, że

$$\begin{aligned}
 &0 = (0, 0, \dots, 0); \\
 \text{i} \quad &-x = (-\xi_1, -\xi_2, \dots, -\xi_n).
 \end{aligned}$$

Można łatwo pokazać, że spełnione są tu wszystkie warunki stawiane przestrzeni wektorowej. (Zobaczmy później, że ta przestrzeń wektorowa jest wzorcem wszystkich przestrzeni skończone wymiarowych).

2. Zbiór wszystkich liczb zespolonych ze zwykłym mnożeniem i dodawaniem liczb zespolonych stanowi przestrzeń wektorową.

3. Zbiór P wszystkich wielomianów zmiennej rzeczywistej t z zespolonymi współczynnikami jest zespoloną przestrzenią wektorową, jeżeli dodawanie wektorów i mnożenie przez skalar określimy jako zwykle dodawanie wielomianów i mnożenie wielomianów przez liczbę zespoloną. Wektorem zerowym 0 jest tu wielomian równy tożsamościowo zeru. P jest nieskończenie wymiarową przestrzenią wektorową.

Szczególnym przypadkiem przestrzeni (2) i (3) jest rzeczywista przestrzeń wektorowa, składająca się ze zbioru wszystkich liczb rzeczywistych i wszystkich wielomianów w t z rzeczywistymi współczynnikami. Operacje $+$ i \cdot są to operacje znane z podstaw arytmetyki.

3.2. NIEZALEŻNOŚĆ LINIOWA

Mamy już pewne wyobrażenie co to oznacza, że każde dwa niewspółliniowe wektory leżące na płaszczyźnie są liniowo niezależne, i wiemy także, że jeżeli dodamy do nich wektor leżący również w tej płaszczyźnie, to w wyniku otrzymamy zbiór trzech wektorów liniowo zależnych. Oznacza to, że każdy z tych trzech wektorów może być wyrażony przez dwa pozostałe — nie można bowiem znaleźć w przestrzeni dwuwymiarowej trzech liniowo niezależnych wektorów. W poszczególnych twierdzeniach, które będziemy wyprowadzać w tym paragrafie, będziemy się powoływać na te proste fakty. Definicja liniowej niezależności przedstawiona poniżej będzie związana właśnie z tym intuicyjnym wyobrażeniem.

Słowo o konwencji sumacyjnej: w ogólności nie będziemy stosować w tym rozdziale umowy Einsteina o sumowaniu, ponieważ często będzie konieczne sygnalizowanie granic sumowania. Tak więc znak $\sum_{i=1}^n$ będzie oznaczać sumę od 1 do n . Jednakże nieraz, gdy granice sumowania wynikają jasno z kontekstu, możemy opuścić granice i pisać po prostu \sum_i .

Definicja 3.4. Skończony zbiór n wektorów $\{x_i\}$ jest *liniowo niezależny* wtedy i tylko wtedy, gdy

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i x_i = 0 \Rightarrow \alpha_i = 0$$

dla każdego i . Jeżeli istnieje zbiór skalarów $\{\alpha_i\}$, nie wszystkich równych zeru, taki że

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i x_i = 0,$$

wtedy zbiór wektorów $\{x_i\}$ jest *liniowo zależny*.

Definicja ta mówi, że jeżeli $\{x_i\}$ są liniowo niezależne — jak np. wektory jednostkowe e_i w 3-wymiarowej przestrzeni kartezjańskiej — wektor zerowy może być otrzymany jako liniowa kombinacja tych wektorów tylko w trywialnym przypadku, gdy wszystkie $\alpha_i = 0$. Jeżeli zaś wektor zerowy jest nietrywialną kombinacją liniową x_i , to znaczy nie wszystkie $\alpha_i = 0$, wtedy

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i x_i = 0 \Rightarrow x_j = -\frac{1}{\alpha_j} \sum_{i \neq j} \alpha_i x_i,$$

gdzie α_j jest różne od zera. (Symbol $\sum_{i \neq j}$ oznacza sumowanie po wszystkich i z wyjątkiem $i = j$). W tym przypadku wektor x_j *zależy* liniowo od pozostałych wektorów w tym sensie, że x_j jest ich liniową kombinacją. Zauważmy, że każdy zbiór wektorów zawierających wektor zerowy jest liniowo zależny.

Jak już mówiliśmy, każde dwa niezerowe, niewspółliniowe wektory są liniowo niezależne, podczas gdy każde trzy wektory są liniowo zależne. Inną ilustrację definicji 3.4 można znaleźć w przestrzeni wektorowej wielomianów, P . Niech

$$x_1(t) = 2 - t + t^2, \quad x_2(t) = t - t^2 + 2t^3, \quad x_3(t) = 1 + t^3,$$

są trzema wektorami $\in P$. Jeżeli położymy $\alpha_1 = \alpha_2 = 1$ i $\alpha_3 = -2$, to

$$\sum_{i=1}^3 \alpha_i x_i = x_1 + x_2 - 2x_3 = 0.$$

Oznacza to, że x_1, x_2 i x_3 są liniowo zależne, gdyż znaleźliśmy dla nich zbiór niezerowych α_i taki, że $\sum_i \alpha_i x_i$ znika. Jednakże nieskończony zbiór wektorów

$$\begin{aligned} x_0(t) &= 1, \\ x_1(t) &= t, \\ &\vdots \\ &\vdots \\ x_n(t) &= t^n, \\ &\vdots \\ &\vdots \end{aligned}$$

jest liniowo niezależny, jeżeli dla każdego n

$$\sum_{i=0}^n \alpha_i x_i = 0.$$

Wówczas otrzymujemy tożsamość

$$\alpha_0 + \alpha_1 t + \dots + \alpha_n t^n = 0,$$

która implikuje, że $\alpha_i = 0$, dla $0 \leq i \leq n$, ponieważ musi to być spełnione dla każdego t

Poniższe twierdzenie jest najważniejszym rezultatem uzyskanym w oparciu o pojęcie liniowej zależności.

Twierdzenie 3.1. Zbiór niezerowych wektorów $\{x_i\}$ jest liniowo zależny wtedy i tylko wtedy, jeżeli jakiś wektor x_i ($2 \leq i \leq n$) jest liniową kombinacją wektorów x_j o wskaźnikach $j < i$.

Dowód. Najpierw wykażemy konieczność tego warunku. Załóżmy, że wektory x_i są liniowo zależne. Oznacza to, że dla jakiegoś i zachodzi:

$$\sum_{i=1}^k \alpha_i x_i = 0,$$

gdzie k oznacza najmniejsze takie i ; $k \leq n$ i nie wszystkie α_i są równe zeru. Wiemy, że $\alpha_k \neq 0$, ponieważ gdyby $\alpha_k = 0$, zbiór $\{x_i, \dots, x_{k-1}\}$ byłby liniowo zależny, co jest sprzeczne z definicją k jako *najmniejszej* wartości i , dla której x_1, \dots, x_k są liniowo zależne. Dlatego też

$$x_k = -\frac{1}{\alpha_k} \left[\sum_{i=1}^{k-1} \alpha_i x_i \right].$$

Tak więc x_k zostało explicite wyrażone przez liniową kombinację poprzednich wektorów. Dowód na dostateczność warunku jest prosty. Jeżeli wiemy, że dla jakiegoś j

$$x_j = \sum_{i=1}^{j-1} \alpha_i x_i$$

to kładąc $\alpha_j = -1$, mamy

$$\sum_{i=1}^j \alpha_i x_i = 0.$$

Dla pozostałych wektorów (x_{j+1}, \dots, x_n) przyjmujemy $\alpha_{j+1} = \alpha_{j+2} = \dots = \alpha_n = 0$, to znaczy

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i x_i = 0,$$

co z uwagi na to, że nie wszystkie α_i są zerowe, dowodzi liniowej zależności. c.b.d.o.

W następnym paragrafie powiążemy pojęcie liniowej niezależności z pojęciem wymiaru.

3.3. BAZA I WYMIAR

Definicja 3.5. W przestrzeni wektorowej V *bazą* nazywamy taki zbiór liniowo niezależnych wektorów $\{x_i\}$, że każdy wektor z przestrzeni V jest liniową kombinacją elementów bazy $\{x_i\}$. Przestrzeń wektorowa jest *przestrzenią skończenie wymiarową*, jeżeli posiada skończony zbiór wektorów bazy. W przeciwnym wypadku mamy do czynienia z przestrzenią nieskończenie wymiarową.

Inaczej, baza jest maksymalną liniowo niezależną podprzestrzenią V . Czytelnik zechce pokazać, że jest to równoważne definicji poprzedniej.

Jeżeli każdy wektor $x \in V$ jest liniową kombinacją elementów bazy $\{x_i\}$, mówimy, że zbiór $\{x_i\}$ *rozpina* przestrzeń V . Tak więc baza jest liniowo niezależnym zbiorem wektorów rozpinających V .

Przykłady baz

1. W rzeczywistej trójwymiarowej przestrzeni, trzy wektory

$$e_1 = (1, 0, 0), \quad e_2 = (0, 1, 0), \quad e_3 = (0, 0, 1)$$

tworzą bazę. Można łatwo pokazać, że są one liniowo niezależne i że każdy wektor x może być przedstawiony jako liniowa kombinacja tych trzech wektorów bazy

$$x = (\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \sum_{i=1}^3 \xi_i e_i.$$

2. W przestrzeni wektorowej wielomianów P zbiór $\{x_n\}$, gdzie $x_n(t) = t^n$ ($n = 0, 1, 2, \dots$) jest bazą. Ponieważ jest to baza nieskończona, przestrzeń P jest przestrzenią nieskończenie wymiarową.

Twierdzenie 3.2. Każdy wektor x z przestrzeni V ma w określonej bazie jednoznaczne przedstawienie w postaci liniowej kombinacji wektorów bazy.

Dowód. Niech $\{x_i\}$ będzie ustaloną bazą w V . Wtedy każdy $x \in V$ może być zapisany w postaci $x = \sum_i \alpha_i x_i$. Twierdzenie mówi, że α_i jest jednoznacznie określone. Aby to udowodnić, założymy, że istnieje inna reprezentacja x , mianowicie $x = \sum_i \beta_i x_i$. Jeżeli tak, to po wstawieniu tych kombinacji mamy

$$0 = x - x = \sum_i (\alpha_i - \beta_i) x_i.$$

Ale ponieważ x_i tworzą bazę, muszą być liniowo niezależne, a z definicji liniowej niezależności $(\alpha_i - \beta_i) = 0$ dla każdego i . A więc $\alpha_i = \beta_i$ i rozkład jest jednoznaczny. c.b.d.o.

Założmy, że mamy zbiór liniowo niezależnych wektorów $\{y_i\}$, gdzie dla każdego i , $y_i \in V$. Jeżeli badamy zbiór wszystkich liniowych kombinacji y_i , widzimy, że ten zbiór wektorów jest sam przestrzenią wektorową, której każdy element należy do V . Mówimy, że ten zbiór jest *podprzestrzenią V rozpiętą na zbiorze $\{y_i\}$* . W szczególności V jest własną podprzestrzenią. Może się zdarzyć, że zbiór $\{y_i\}$ nie jest bazą przestrzeni V . Spodziewamy się jednak, że być może dodając jakieś wektory do zbioru $\{y_i\}$ otrzymamy bazę badanej przestrzeni. Poniższe twierdzenie pokaże nam, że tak jest w istocie.

Twierdzenie 3.3. Jeżeli V jest skończenie wymiarową przestrzenią wektorową, a $\{y_1, y_2, \dots, y_m\}$ jest zbiorem liniowo niezależnych wektorów, to o ile wektory y_i nie tworzą bazy, możemy przez dodanie y_{m+1}, \dots, y_n zawsze rozszerzyć zbiór $\{y_1, y_2, \dots, y_m\}$ tak, że zbiór $\{y_1, y_2, \dots, y_n\}$ będzie już bazą przestrzeni V .

Dowód. Niech $\{x_1, x_2, \dots, x_l\}$ będzie bazą w V . Wtedy zbiór wektorów

$$S_1 = \{y_1, y_2, \dots, y_m, x_1, x_2, \dots, x_l\}$$

jest liniowo zależny. Z twierdzenia 3.1 wynika, że jakiś element S_1 jest liniową kombinacją wektorów poprzednich. Musi to być jeden z wektorów x_i , gdyż y_i są liniowo niezależne. Nazwijmy ten element x_i i usuńmy go z S_1 , wprowadzając nowy zbiór S_2 :

$$S_2 = \{y_1, y_2, \dots, y_m, x_1, x_2, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_l\}.$$

Żądamy, by każdy wektor należący do V wyrażał się przez liniową kombinację elementów S . Aby to stało się jasne, zauważmy, że zbiór S_1 rozpina V . Jedyny zaś element różniący

S_1 od S_2 to x_i , który jest liniową kombinacją elementów S_2 , dokładniej x_i jest liniową kombinacją wektorów $\{y_1, y_2, \dots, y_n, x_1, \dots, x_{i-1}\}$.

Teraz, jeżeli zbiór S_2 jest liniowo niezależny, to znaleźliśmy bazę dla V , jeżeli nie, musi istnieć jakiś x , które jest liniową kombinacją poprzedzających je elementów S_2 . I znów musi to być x , ponieważ y_i są liniowo niezależne. Eliminujemy to x i tworzymy S_3 . Z tych samych przyczyn, co poprzednio, każdy wektor należący do V może być zapisany jako liniowa kombinacja elementów S_3 . Jeżeli S_3 jest liniowo niezależne, to jest ono bazą przestrzeni V , jeżeli zaś nie, kontynuujemy tę procedurę, dopóki nie znajdziemy jakiegoś S_n liniowo niezależnego. Ponieważ rozważane zbiory S_i mają skończoną ilość elementów, to poszukiwanie może mieć jedynie skończoną liczbę kroków. W ten sposób znajdujemy bazę, która zawiera żądany zbiór $\{y_1, y_2, \dots, y_m\}$. c.b.d.o.

Tak więc podprzestrzeń rozpinana przez zbiór $\{y_i\}$ jest zawarta w V , a baza tej podprzestrzeni jest zawarta w bazie V . Tym samym, podprzestrzeń ma mniejszy wymiar niż V , a wymiar przestrzeni jest równy liczbie elementów jej bazy. Jednakże jeszcze nie wiemy, czy ta liczba jest jednoznacznie określona. Czytelnik mógłby sądzić, że oczywiście wszystko jest w porządku, lecz wykazanie jednoznaczności liczby elementów bazy wymaga bardzo subtelnego rozumowania. Ponieważ wymiar przestrzeni jest pojęciem bezsprzecznie podstawowym, przeprowadzimy ten dowód szczegółowo.

Twierdzenie 3.4. Liczba elementów bazy w skończenie wymiarowej przestrzeni wektorowej nie zależy od wyboru bazy.

Dowód. Niech $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ i $\{y_1, y_2, \dots, y_m\}$ będą bazami w przestrzeni V . Ponieważ n jest albo równe m albo różne od m , możemy bez zmniejszenia ogólności rozumowania przyjąć, że $n \leq m$. Idea dowodu polega na pokazaniu, że $n \geq m$, co w połączeniu z naszym założeniem ($n \leq m$) prowadzi do wniosku, że $n = m$, czyli do tego, co chcieliśmy wykazać.

Zbiór wektorów bazy ma dwie podstawowe własności: 1) wektory muszą być liniowo niezależne, 2) każdy wektor należący do V musi być liniową kombinacją elementów bazy. Będziemy badać zbiór $\{y_i\}$, który posiada własność (1) oraz zbiór $\{x_i\}$, posiadający własność (2). Oczywiście oba zbiory posiadają zarówno własność (1) jak i (2), ale dla dowodu wystarczy ustalić, że każdy zbiór ma tylko jedną własność.

Zbadajmy zbiór

$$S_1 = \{y_m, x_1, x_2, \dots, x_n\}.$$

Ponieważ $\{x_i\}$ ma własność (2), każdy wektor należący do V jest liniową kombinacją elementów S_1 . S_1 jest zbiorem liniowo zależnym. Z twierdzenia 3.3 wynika, że istnieje wobec tego jakiś wektor x , powiedzmy x_i , będący liniową kombinacją poprzedzających go elementów z S_1 . Wyrzucimy ten element i zbudujemy zbiór T_1 :

$$T_1 = \{y_m, x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n\}.$$

Z twierdzenia 3.3 wynika, że każdy wektor należący do V jest liniową kombinacją elementów T_1 . Teraz zbudujmy nowy zbiór

$$S_2 = \{y_{m-1}, y_m, x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_n\}.$$

Oczywiście zbiór S_2 jest liniowo zależny i każdy wektor z przestrzeni V jest liniową kombinacją elementów S_2 . A więc jakiś wektor x musi być liniową kombinacją poprzedzających

go elementów ze zbioru S_2 (to musi być x , a nie y , ponieważ wektory y są liniowo niezależne). Oznaczając ten element przez x_j i wyrzucając go z S_2 tworzymy nowy zbiór T_2 :

$$T_2 = \{y_{m-1}, y_m, x_1, \dots, x_{i-1}, x_{i+1}, \dots, x_{j-1}, x_{j+1}, \dots, x_n\}.$$

Kontynuując ten proces, w każdym kroku eliminujemy wektory x_i wstawiając równocześnie wektory y_i . Po n krokach pozbędziemy się wszystkich x_i i otrzymamy

$$T_n = \{y_{m-n+1}, \dots, y_m\}.$$

Ale wszystkie elementy T_n mają własność (2), czyli wszystkie one rozpinają przestrzeń V . Jeżeli więc $m > n$, każdy wektor y jest liniową kombinacją pozostałych y -ów. Lecz to przeczy założeniu, że baza $\{y_i\}$ jest liniowo niezależna. Jediną drogą uniknięcia tej sprzeczności jest przyjęcie, że $n \geq m$. Lecz myśmy założyli, że $n \leq m$, co prowadzi do oczekiwanego wyniku. c.b.d.o.

Gdybyśmy założyli, że $n \geq m$, to należałoby w naszym dowodzie zamienić rolami $\{y_i\}$ i $\{x_i\}$. Otrzymalibyśmy wtedy, że $m \geq n$, co razem z założeniem doprowadziłoby do tego samego wyniku. Możemy więc przyjąć poprzednio podaną definicję

Definicja 3.6. Wymiar skończenie wymiarowej przestrzeni wektorowej V jest równy liczbie elementów bazy V ; liczba ta jest niezależna od wyboru bazy.

Zauważmy, że w n -wymiarowej przestrzeni wektorowej każdy zbiór zawierający więcej niż n wektorów jest liniowo zależny.

3.4. IZOMORFIZM

Niech F^n będzie zbiorem n -tek elementów (n -elementowych ciągów $(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$) w ciele F . W pierwszym przykładzie przestrzeni wektorowych było powiedziane, że F^n może być traktowane jak wzorzec n -wymiarowych przestrzeni wektorowych V nad F . Chcemy pokazać, że każda skończenie wymiarowa przestrzeń nad ciałem F jest właściwie tożsama z odpowiednią przestrzenią F^n .

Definicja 3.7. Dwie przestrzenie wektorowe U i V (nad tym samym ciałem) są izomorficzne, jeżeli istnieje jedno-jednoznaczne przyporządkowanie wektorów $x^{(1)} \in U$ i $y^{(1)} \in V$, $y^{(1)} = f(x^{(1)})$, i zachodzi związek

$$f(\alpha_1 x^{(1)} + \alpha_2 x^{(2)}) = \alpha_1 f(x^{(1)}) + \alpha_2 f(x^{(2)}),$$

oraz istnieje również jedno-jednoznaczna odpowiedniość między wektorami należącymi do V i do U . Tak więc, izomorfizm jest to jedno-jednoznaczne przyporządkowanie, zachowujące wszystkie związki liniowe, lub mówiąc inaczej, zachowujące strukturę algebraiczną. Będziemy teraz badać tę definicję, aby zobaczyć, co ona zawiera oraz co należy zrobić, aby ją uogólnić.

Zbadajmy dwa zamknięte systemy z jedną operacją, $S = \{E, *\}$ oraz $S' = \{E', \cdot\}$. Zakładamy, że istnieje jedno-jednoznaczna mapa (lub funkcja) f , która przypisuje każdemu elementowi $a, b, c, \dots, \in E$ element $f(a), f(b), f(c), \dots, \in E'$, co można zapisać następująco

$$\begin{array}{c} \underline{E \quad E'} \\ a \xrightarrow{f} f(a) \\ b \xrightarrow{f} f(b). \end{array}$$

Zakładając, że $a * b = c$, mamy, że $c \rightarrow f(c) = f(a * b)$. Jeżeli struktury algebraiczne S i S' są identyczne, to oczywiście mnożenie wprowadzone po lewej stronie (w S) jest odpowiednikiem mnożenia odpowiednich elementów po prawej stronie (w S'). Ponieważ $a * b = c$, musi być spełniona następująca równość

$$f(a) \cdot f(b) = f(c) = f(a * b).$$

Jeżeli równanie to jest spełnione dla każdego a, b , to mówimy, że systemy $S = \{E, *\}$ i $S' = \{E', \cdot\}$ są *izomorficzne*.

Jako przykład dwu izomorficznych struktur różniących się znacznie na pierwszy rzut oka zbadamy sześć permutacji (równania 3.2) i sześć macierzy 2×2

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I', & \quad \begin{bmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix} = F', & \quad \begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{bmatrix} = D', \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = A', & \quad \begin{bmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 \end{bmatrix} = C', & \quad \begin{bmatrix} -1/2 & \sqrt{3}/2 \\ \sqrt{3}/2 & 1/2 \end{bmatrix} = B'. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Nie zajmowaliśmy się dotąd szczegółowo mnożeniem macierzy, chociaż czytelnik przypomina sobie zapewne, że problem ten był pokrótce przedstawiony w § 1.4 (równanie (1.22)). Spotkaliśmy się tam z mnożeniem dwu macierzy liczbowych (a_{ij}) i (b_{ij}) , dających trzecią macierz (c_{ij}) zgodnie z regułą

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^2 a_{ik} b_{kj}, \quad (3.6)$$

gdzie pierwszy wskaźnik numeruje wiersze, a drugi kolumny macierzy.

Łatwo sprawdzić, że sześć macierzy (3.5) tworzy nieabelową grupę ze względu na mnożenie macierzowe (3.6), które, jak później wykażemy, jest łącznie. Można również łatwo pokazać, że tablica mnożenia grupowego macierzy (3.4) jest identyczna z analogiczną tablicą dla grupy permutacji trzech elementów. Tak więc struktura grupy multiplikatywnej utrzymuje się, jeżeli każdy element grupy permutacji zwiążemy z odpowiednim primowanym elementem grupy macierzy. A więc przy mapie f mamy

$$\begin{aligned} B &\xrightarrow{f} B' \\ D &\xrightarrow{f} D' \\ B * D &= A \xrightarrow{f} A' = B' \cdot D' \end{aligned}$$

tak, że

$$f(B * D) = B' \cdot D' = f(B) \cdot f(D).$$

Związki tej samej postaci zachodzą dla wszystkich elementów, więc te dwa systemy są izomorficzne.

W ogólności, jeżeli dwa systemy mają taką samą tablicę grupową to są one izomorficzne, lub inaczej, posiadają *identyczną strukturę*. Nieraz chcąc poznać jeden system możemy badać inny, a następnie przejść z powrotem do języka pierwszego układu. Przypuśćmy dla przykładu, że chcemy badać grupę obrotów; możemy w tym przypadku zająć się grupą macierzy i stąd uzyskać informację o obrotach. Taką grupę macierzy nazywamy *reprezentacją* pierwotnej grupy. Tak więc powyższa grupa macierzy $\{I', A', B', C', D', F'\}$ jest reprezentacją macierzową grupy permutacji (nazywaną nieraz *grupą symetryczną*) dla trzech elementów. Reprezentacjami grup będziemy się zajmować w rozdziale 10.

W definicji izomorfizmu (3.7) dla dwóch przestrzeni wektorowych operacja $+$ jest taka sama w obu systemach U i V . Z przykładu przytoczonego powyżej wynika, że operacje te mogą być różne dla dwóch systemów. Możemy również dołączyć do liniowej operacji dodawania wektorów liniową operację mnożenia wektora przez skalar. Wtedy warunek z definicji 3.7 rozpada się na dwa warunki;

$$f(x^{(1)} + x^{(2)}) = f(x^{(1)}) + f(x^{(2)}), \quad f(\alpha x) = \alpha f(x).$$

Udowodnimy teraz podstawowe twierdzenie o algebraicznej strukturze przestrzeni wektorowych.

Twierdzenie 3.5. Każda n -wymiarowa przestrzeń wektorowa $V_n(F)$ nad ciałem F jest izomorficzna z przestrzenią F^n .

Dowód. Niech $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ będzie bazą w V . Każdy wektor $x \in V$ może być w takim razie zapisany w postaci

$$x = \sum_{i=1}^n \alpha_i x_i.$$

Wiemy, że skalarnie współrzędne α_i ($i = 1, \dots, n$) są jednoznacznie określone (twierdzenie 3.2). Przyjmijmy teraz jedno-jednoznaczne przyporządkowanie między V i F^n , $x \rightleftharpoons (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$, to znaczy, że

$$f(x) = (\alpha_1, \dots, \alpha_n),$$

jest izomorfizmem przestrzeni V i F^n . Jeżeli

$$y = \sum_{i=1}^n \beta_i x_i,$$

to

$$cx + dy = c \sum_{i=1}^n \alpha_i x_i + d \sum_{i=1}^n \beta_i x_i = \sum_{i=1}^n (c\alpha_i + d\beta_i) x_i,$$

więc

$$f(cx + dy) = (c\alpha_1 + d\beta_1, c\alpha_2 + d\beta_2, \dots, c\alpha_n + d\beta_n).$$

Teraz musimy obliczyć sumę $cf(x) + df(y)$ i porównać to z $f(cx + dy)$:

$$cf(x) = c(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) = (c\alpha_1, c\alpha_2, \dots, c\alpha_n),$$

$$df(y) = d(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n) = (d\beta_1, d\beta_2, \dots, d\beta_n),$$

tak więc w rezultacie otrzymujemy

$$cf(x) + df(y) = (c\alpha_1 + d\beta_1, \dots, c\alpha_n + d\beta_n) = f(cx + dy).$$

Tym samym jedno-jednoznaczne przyporządkowanie f jest izomorfizmem, czyli $V(F)$ i F^n są izomorficzne. c.b.d.o.

Z tego twierdzenia wynika, że każde dwie przestrzenie wektorowe mające ten sam wymiar i zbudowane nad tym samym ciałem są izomorficzne, ponieważ obie są izomorficzne z F^n i tym samym są izomorficzne ze sobą. Oznacza to również, że możemy bez utraty ogólności ograniczyć się do badania zbiorów n liczb, które są wzorcami wektorów. Lecz wymaga to wyboru reprezentacji (lub bazy) i pracy ze współrzędnymi a oprócz tego, że jest to dość żmudne, zaciemnia ważne własności wektorów i przestrzeni wektorowych niezależne od wyboru bazy. Dlatego też przeważnie będziemy omawiać przestrzenie wektorowe bez odwoływania się do określonej bazy.

3.5. PRZEKSZTAŁCENIA LINIOWE

Definicja 3.8. *Przekształceniem liniowym* przestrzeni wektorowej V nazywamy takie przyporządkowanie każdemu wektorowi $x, y \in V$ wektora $Ax, Ay \in V$, że

$$A(ax+by) = aAx+bBy,$$

gdzie a i b są skalarami. Przekształcenie A nosi również nazwę *operatora liniowego* działającego na przestrzeń wektorową*. Iloczyn C dwu przekształceń liniowych A i B jest zdefiniowany przez równanie $Cx \equiv A(Bx)$, co zapisujemy w skrócie $C = AB$. Sumę dwóch odwzorowań liniowych definiujemy równaniem $(A+B)x \equiv Ax+Bx$.

Przykłady przekształceń liniowych

1. Niech $V(F)$ będzie przestrzenią wektorową wektorów o n współrzędnych rzeczywistych i niech a_{ij} ($i, j = 1, 2, \dots, n$) będzie zbiorem n^2 liczb rzeczywistych. Jeżeli przekształcenie $y = Ax$ zdefiniujemy następująco

$$y_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j,$$

to otrzymamy przekształcenie liniowe. Jeżeli dla $n = 2$ przyjmimy, że $a_{11} = a_{22} = \cos\phi$ i $a_{12} = -a_{21} = \sin\phi$, to $A \equiv (a_{ij})$ stanie się macierzą obrotu z równania (1.14). Liniowa transformacja odpowiada tu obrotowi wektora x o kąt ϕ tak, aby otrzymać nowy wektor y .

2. Liniowe przekształcenie zerowe \mathcal{O} definiujemy równaniem

$$\mathcal{O}x \equiv 0,$$

a liniowe przekształcenie tożsamościowe (jednostkowe) równaniem

$$Ix \equiv x.$$

3. Definiujemy różniczkowanie D_x i mnożenie X przekształcenia liniowego

$$D_x f(x) \equiv \frac{df(x)}{dx} \quad \text{oraz} \quad Xf(x) \equiv xf(x).$$

Dokładnie rzecz biorąc, D_x jest operatorem w sensie definicji 3.8 tylko wtedy, gdy dla danej funkcji f , należącej do V , pochodna tej funkcji również należy do V . Na przykład, jeżeli V jest przestrzenią funkcji ciągłych, wtedy $|x| \in V$ lecz $d/dx|x|$ nie należy do V . Tak więc operacja D_x nie jest określona wszędzie w przestrzeni.

Iloczyn D_x i X w działaniu na wektor $f(x)$ daje nam

$$(D_x X)f(x) = D_x(Xf(x)) = \frac{d}{dx}(xf(x)) = f(x) + x \frac{df(x)}{dx}.$$

Z drugiej strony iloczyn X i D_x jest równy

$$(XD_x)f(x) = X(D_x f(x)) = x \frac{df(x)}{dx}.$$

Stąd wynika, że

$$(D_x X)f(x) \neq (XD_x)f(x),$$

* Będziemy używać również nazw operacja liniowa, transformacja liniowa lub odwzorowanie liniowe (przyp. tłum.).

lub w skrócie

$$D_x X \neq X D_x.$$

Rzeczywiście,

$$(D_x X - X D_x) f(x) = f(x) \quad \text{lub inaczej} \quad D_x X - X D_x = I.$$

Ta para nieprzemiennych operatorów (inaczej mówiąc niekomutujących) odgrywa podstawową rolę w mechanice kwantowej, gdzie operator odpowiadający x -owej składowej pędu jest dany wzorem $p_x = -i\hbar D_x$, a X jest operatorem położenia. (Pojawia się tu mały kłopot z oznaczeniami. Dotychczas oznaczaliśmy operator mnożenia przez X , lecz wśród fizyków przyjęło się zapisywać operator po prostu jako x , ponieważ ma on sens mnożenia przez x . Odtąd będziemy stosować ten zapis). Tak więc możemy zapisać

$$(p_x x - x p_x) f(x) = -i\hbar f(x) \quad \text{lub} \quad p_x x - x p_x = -i\hbar.$$

Operator $(p_x x - x p_x)$ nazywamy *komutatorem* p_x i x . Zapisujemy go jako $[p_x, x]$. Związek $[p_x, x] = -i\hbar$ przyjmuje się jako podstawowy aksjomat mechaniki kwantowej.

4. W przestrzeni P_m wielomianów stopnia $\leq m$ transformacja liniowa D jest dana wzorem

$$D p_m(x) = \frac{d}{dx} p_m(x).$$

Niech

$$D^1 = D, \quad D^2 = DD, \quad D^n = \underbrace{DD \dots D}_{n \text{ razy}}.$$

Jeżeli $n > m$, $D^n p_m = 0$ dla wszystkich wielomianów należących do P_m , a więc $D^n = 0$. Tak więc, jeżeli nawet operator nie jest operatorem zerowym, któraś potęga tego operatora może być operatorem zerowym!

Większość formalnych, algebraicznych własności mnożenia liczb, z wyjątkiem przemienności, jest słuszna dla algebry transformacji liniowych. Mamy więc:

- a) $A\emptyset = \emptyset A = \emptyset$,
- b) $AI = IA = A$,
- c) $A(B+C) = AB+AC$,
- d) $A(BC) = (AB)C$,
- e) $(aA) = a(A)$, gdzie a jest skalar.

Wyprowadzimy własność (c)

$$[A(B+C)]x = A[(B+C)x] = A(Bx) + A(Cx) = (AB)x + (AC)x = (AB+AC)x,$$

gdzie zastosowaliśmy definicję 3.8. Widać, że *suma* dwóch liniowych transformacji jest przemienna i łączna, ponieważ takie jest dodawanie w przestrzeni V . Własność (d) mówi, że mnożenie jest również łączne. Czytelnik może wykazać, że zbiór wszystkich liniowych transformacji przestrzeni wektorowej $V(F)$ jest przestrzenią wektorową nad tym samym ciałem F .

3.6. PRZEKSZTAŁCENIE LINIOWE ODWROTNE

Przedstawimy definicję odnoszącą się zarówno do przypadku nieskończenie jak i skończenie wymiarowego.

Definicja 3.9. Jeżeli przekształcenie liniowe A posiada następujące własności

- a) $x \neq y \Rightarrow Ax \neq Ay$ lub $Ax = Ay \Rightarrow x = y$,
- b) dla każdego $y \in V$ istnieje $x \in V$ takie, że $Ax = y$,

to istnieje przekształcenie odwrotne do A , które oznaczamy przez A^{-1} . Mówimy wtedy, że A jest *odwracalne*.

Konstrukcja transformacji A^{-1} przebiega następująco. Jeżeli y_0 jest danym wektorem, to na podstawie własności (b) można zawsze znaleźć taki wektor x_0 , że $y_0 = Ax_0$. Ten wektor x_0 jest wyznaczony jednoznacznie, ponieważ jeżeli $Ax_0 = y_0$ i $Ax = y_0$, to z tego, że $Ax_0 = Ax \Rightarrow x_0 = x$ (z warunku (a)). Z definicji $A^{-1}y_0 \equiv x_0$. Teraz można się zapytać czy A^{-1} jest transformacją liniową? Aby to wykazać, należy udowodnić, że zachodzi równość

$$A^{-1}(\alpha x + \beta y) = \alpha A^{-1}x + \beta A^{-1}y.$$

Jeżeli $Ax = u$ i $Ay = v$, wtedy z liniowości przekształcenia A wynika równość

$$A(\alpha x + \beta y) = \alpha u + \beta v,$$

co daje

$$A^{-1}(\alpha u + \beta v) = \alpha x + \beta y = \alpha A^{-1}u + \beta A^{-1}v.$$

Otrzymaliśmy więc, że transformacja odwrotna do A jest liniowa. Bezpośrednio z definicji transformacji odwrotnej wynika, że jeżeli A jest odwracalne, to

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

Przedstawimy teraz twierdzenie o odwzorowaniach.

Twierdzenie 3.6. Jeżeli A , B i C są odwzorowaniami liniowymi spełniającymi związek $AB = CA = I$, to odwzorowanie A jest odwracalne i $A^{-1} = B = C$.

Dowód. Aby wykazać, że A jest odwracalne, musimy udowodnić, że z definicji 3.9. zachodzą warunki (a) i (b)

- a) Jeżeli $Ax = Ay$, to $C Ax = C Ay$, co z uwagi na to, że $CA = I$ implikuje, że $x = y$.
- b) Jeżeli y jest danym wektorem i $x = By$, to $y = ABy = Ax$, ponieważ $AB = I$.

A więc A jest odwracalne.

Mnożąc teraz równanie $AB = I$ z lewej strony oraz równanie $CA = I$ z prawej strony przez A^{-1} , otrzymujemy $A^{-1} = B = C$. c.b.d.o.

Żaden z warunków $AB = I$ lub $CA = I$ nie wystarczą oddzielnie do zapewnienia odwracalności A , chyba że jesteśmy w skończenie wymiarowej przestrzeni lub wiemy dodatkowo, że B lub C są przekształceniami jednostkowymi (patrz zadanie 10); w tych przypadkach jeden z tych warunków wystarcza.

Aby to zilustrować, zbadajmy dwa operatory D_x i S działające na wektory nieskończenie wymiarowej przestrzeni wektorowej P , gdzie

$$D_x p(x) \equiv \frac{d}{dx} p(x), \quad S p(x) \equiv \int_0^x p(t) dt.$$

Pomimo że $D_x S = I$, ani D_x , ani S nie jest przekształceniem odwracalnym. D_x nie spełnia warunku (a), na przykład $D_x(x^2 + 3) = D_x(x^2 + 1)$; S nie spełnia warunku (b), gdyż na przykład dla $p_0 = x^2 + 1$ nie istnieje taka funkcja $p(t)$, żeby $\int_0^x p(t) dt = p_0$.

Twierdzenie 3.7. Niech A będzie liniową transformacją zdefiniowaną w skończenie wymiarowej przestrzeni wektorowej V . Jeżeli z tego, że $Ax = 0$ wynika, że $x = 0$, to transformacja A jest odwracalna.

Dowód. Jeżeli $Ax = Ay$, to $Ax - Ay = A(x - y) = 0$. Przypuśćmy, że wynika stąd równość $x - y = 0$ lub inaczej $x = y$, mamy wtedy spełniony warunek (a). Aby wykazać warunek (b), przyjmijmy, że $\{x_1, \dots, x_n\}$ jest bazą w przestrzeni V . Jeżeli teraz zdołamy pokazać, że $\{Ax_1, \dots, Ax_n\}$ jest również bazą, to możemy spełnić również warunek (b) z twierdzenia 3.9, gdyż każdy wektor $y \in V$ możemy zapisać w postaci

$$y = \sum_{i=1}^n \alpha_i Ax_i = A \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i x_i \right).$$

Pozostaje więc pytanie czy $\{Ax_1, \dots, Ax_n\}$ jest także bazą: $\{Ax_1, \dots, Ax_n\}$ jest to zbiór n wektorów w n -wymiarowej przestrzeni wektorowej. Może on być bazą tej przestrzeni, o ile tylko wektory Ax_i są liniowo niezależne. Aby udowodnić to, zakładamy, że

$$\sum_i \alpha_i Ax_i = 0.$$

Stąd, jak również z założenia twierdzenia wynika, że

$$A \left(\sum_{i=1}^n \alpha_i x_i \right) = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^n \alpha_i x_i = 0.$$

Liniowa niezależność x_i pociąga za sobą znikanie wszystkich α_i , tak więc zbiór $\{Ax_i\}$ jest liniowo niezależny i może stanowić bazę. c.b.d.o.

Słuszne jest również twierdzenie odwrotne: Jeżeli A jest odwracalne, to oczywiście równość $Ax = 0$ implikuje $x = 0$.

Zobaczymy, że warunek $Ax = 0 \Rightarrow x = 0$ jest równoważny warunkowi (a) z definicji 3.9. A więc z twierdzenia 3.7 wynika, że dla skończonej wymiarowej przestrzeni warunek (a) jest wystarczający na to, by A było odwracalne.

Przy pomocy twierdzenia 3.6 czytelnik bez trudu może udowodnić poniższe twierdzenie.

Twierdzenie 3.8. Jeżeli A i B są odwracalne, to iloczyn AB jest odwracalny i $(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$. Jeżeli A jest odwracalne i $\alpha \neq 0$, to αA jest odwracalne, i $(\alpha A)^{-1} = \frac{1}{\alpha} A^{-1}$. Jeżeli A jest odwracalne, to A^{-1} jest odwracalne i $(A^{-1})^{-1} = A$.

3.7. MACIERZE

Tak jak abstrakcyjne wektory mogą być w poszczególnych bazach reprezentowane przez swoje współrzędne, tak i abstrakcyjne transformacje liniowe mogą być przedstawione w określonej bazie w postaci macierzy. Przedstawimy teraz związek odwzorowań liniowych z macierzami.

Definicja 3.10. Niech V będzie n -wymiarową przestrzenią wektorową z bazą $X = \{x_1, \dots, x_n\}$, a A niech będzie odwzorowaniem liniowym przestrzeni V w siebie. Ponieważ każdy wektor jest liniową kombinacją $\{x_i\}$, w szczególności możemy zapisać, że

$$Ax_j = \sum_{i=1}^n a_{ij} x_i, \quad \text{gdzie } j = 1, \dots, n. \quad (3.7)$$

Zbiór n^2 skalarów a_{ij} nazywamy *macierzą odwzorowania* A w bazie X . Macierz ta jest stopnia n .

$$(a_{ij}) \equiv \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & & a_{nn} \end{bmatrix} \equiv [A] \equiv A.$$

Każdy przekształcony wektor Ax_j może być przedstawiony przy pomocy wektorów bazy x_i przez n współczynników. Ponieważ mamy n wektorów bazy, więc mamy n wektorów Ax_j a co za tym idzie, pojawia się n^2 współczynników a_{ij} .

Zwróćmy uwagę na kolejność występowania wskaźników w równaniu (3.7). Wypisujemy wektor Ax_j jako kombinację liniową (x_1, \dots, x_n) i otrzymane w ten sposób współczynniki ustawiamy w *kolumnę* macierzy A . Pierwszy wskaźnik elementu $a_{ij} \equiv [A]_{ij}$ wskazuje numer wiersza, drugi — numer kolumny. Położenie elementów w macierzowym przedstawieniu transformacji A zależy od kolejności wektorów w bazie, lecz zawsze możemy ustalić kolejność wektorów bazy, jeżeli chcemy mieć jednoznacznie uporządkowaną macierz. Mówimy, że dwie macierze (a_{ij}) i (b_{ij}) są równe wtedy i tylko wtedy, gdy $a_{ij} = b_{ij}$ dla wszystkich i oraz j .

W paragrafie 1.4 (równanie (1.13)), aby zdefiniować macierz, wyrażaliśmy jeden zbiór wektorów bazy e'_j przez zbiór wektorów bazy e_i . Mieliśmy tam równanie

$$e'_j = \sum_i a_{ji} e_i.$$

Wektory e_i grały tę samą rolę co obecnie wektory x_i . W rozdziale 1 x_i były składowymi wektora x , podczas gdy teraz x_i są wektorami w abstrakcyjnej przestrzeni wektorowej. Powyższe równanie z rozdziału 1 zapisane zgodnie z umową stosowaną w tym rozdziale powinno wyglądać następująco

$$e'_j = \sum_i a_{ij} e_i.$$

W rozdziale 1 omówiliśmy tę różnicę notacji i przyczynę jej występowania. Wszystkie równania z rozdziału 1 można zapisać w naszej obecnej konwencji zastępując a_{ij} przez a_{ji} .

Przyjrzyjmy się teraz jak wygląda działanie transformacji liniowej A na wektor x , przedstawiony w bazie $X = \{x_1, \dots, x_n\}$. Dla każdego $x \in V$

$$x = \sum_{j=1}^n \alpha_j x_j,$$

a macierz transformacji liniowej jest zdefiniowana przez

$$Ax_j = \sum_{i=1}^n a_{ij} x_i.$$

Zgodnie z tym

$$y = Ax = A \sum_{j=1}^n \alpha_j x_j = \sum_{j=1}^n \alpha_j Ax_j = \sum_{j=1}^n \alpha_j \sum_{i=1}^n a_{ij} x_i = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \alpha_j x_i. \quad (3.8)$$

Lecz wektor y produkowany przez działania operatora A na x , może być również przedstawiony w bazie X :

$$y = \sum_{i=1}^n \beta_i x_i.$$

Wstawiając to do równania (3.8) dostajemy

$$\sum_{i=1}^n \left[\beta_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} \alpha_j \right] x_i = 0.$$

Biorąc pod uwagę, że wektory bazy są niezależne, otrzymujemy związek

$$\beta_i = \sum_{j=1}^n a_{ij} \alpha_j.$$

To odpowiada dokładnie naszemu wcześniejszemu wynikowi (1.16c), jeżeli zastąpić β_i przez x'_i . Równanie to często zapisujemy symbolicznie w postaci

$$y = Ax, \quad (3.9)$$

gdzie y i x oznacza przedstawienie wektorów y i x w bazie X , a A oznacza reprezentację macierzową transformacji liniowej A w tej samej bazie. Odpowiedniejszym zapisem niż ten z równania (3.9) jest zapis

$$[\beta] = [A][\alpha], \quad (3.10)$$

gdzie $[\beta]$ i $[\alpha]$ są macierzami jednokolumnowymi o n wierszach (wektorami kolumnowymi) zdefiniowanymi następująco

$$[\beta]_{i1} = \beta_i, \quad i = 1, \dots, n$$

i analogicznie dla α . $[A]$ oznacza tu macierz A . Jednakże w praktyce zazwyczaj stosujemy uproszczony zapis przedstawiony w równaniu (3.9).

Macierze zawierające jeden wiersz i n kolumn nazywamy *wektorem wierszowym*. Nie będziemy specjalnie rozróżniać wektorów kolumnowych i wierszowych, choć wielu innych autorów starannie tego przestrzega, gdyż zawsze z kontekstu wynika o jaki typ wektora chodzi.

Zajmowaliśmy się dotąd jedynie macierzami kwadratowymi, tzn. mającymi tę samą ilość wierszy i kolumn. Powodem tego był fakt, że operator A z definicji odwzorowywał wektory z przestrzeni V na wektory należące również do V , to znaczy odwzorowywał przestrzeń V na siebie. Jednakże moglibyśmy sobie równie łatwo wyobrazić operator liniowy B odwzorowujący V na inną przestrzeń wektorową U . Jeżeli V i U mają różne wymiary, macierz reprezentująca B nie jest kwadratowa.

Załóżmy, że wektory $\{x_i\}$ stanowią bazę przestrzeni V , a wektory $\{y_i\}$ bazę przestrzeni U . Wtedy Bx_j jest wektorem należącym do U i możemy zapisać go w postaci

$$Bx_j = \sum_{i=1}^m b_{ij} y_i, \quad j = 1, 2, \dots, n,$$

gdzie przyjęliśmy, że V jest przestrzenią n -wymiarową, a U m -wymiarową. Tak więc macierz

(b_{ij}) ma wymiar $m \times n$, tzn. posiada m wierszy i n kolumn. Pozostawiamy czytelnikowi wykazanie, że jeżeli $x \in V$ i $y \in U$ oraz $y = Bx$, to przedstawiając te wektory w postaci

$$y = \sum_{i=1}^m \beta_i y_i, \quad x = \sum_{i=1}^n \alpha_i x_i,$$

otrzymamy związek

$$\beta_i = \sum_{j=1}^n b_{ij} \alpha_j, \quad i = 1, 2, \dots, m,$$

który można zapisać analogicznie jak (3.10).

Przykład. Chcemy zbadać kształt macierzy operatorów różniczkowania D oraz mnożenia X . Wspominaliśmy wcześniej, że aby móc mówić o operatorach liniowych, musimy być pewni, że są one zdefiniowane w całej badanej przestrzeni. Na przykład operator D jest w szczególności zdefiniowany w przestrzeni P_n wielomianów stopnia $\leq n$. Operator ten przeprowadza każdy element z przestrzeni P_n w element z przestrzeni P_{n-1} , dlatego też jest on nieodwracalny, gdy badamy go jako odwzorowanie P_n w P_n .

Ponieważ P_{n-1} jest podprzestrzenią P_n , możemy badać operator D zarówno jako odwzorowanie P_n w P_{n-1} jak i P_n w P_n . W pierwszym przypadku D będzie reprezentowane przez macierz $n \times (n+1)$, w drugim zaś przez macierz $(n+1) \times (n+1)$ (przestrzeń P_n jest $(n+1)$ -wymiarowa).

W przestrzeniach tych wybieramy następujące bazy

$$\begin{aligned} \text{dla } P_{n-1} \quad & y_j(t) = t^{j-1}, \quad j = 1, 2, \dots, n, \\ \text{dla } P_n \quad & x_j(t) = t^{j-1}, \quad j = 1, 2, \dots, n+1. \end{aligned}$$

Wtedy

$$Dx_j = (j-1)t^{j-2} = (j-1)y_{j-1} = \sum_{i=1}^n d_{ij} y_i, \quad j = 1, 2, \dots, n+1.$$

Jeżeli $i = j-1$, to $d_{ij} = j-1$, w innych przypadkach $d_{ij} = 0$. A więc mamy

$$[D] = (d_{ij}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & \vdots & \\ \vdots & & & & & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & n-1 & 0 & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & n \end{bmatrix}. \quad (3.11)$$

Widać, że D jest macierzą o $n \times (n+1)$ wymiarach. Jeżeli chcemy przedstawić operator D jako odwzorowanie P_n w P_n , przypiszemy mu macierz otrzymaną z powyższej macierzy przez dodanie $(n+1)$ -go wiersza złożonego z samych zer.

Operator X może być przedstawiony jedynie w postaci macierzy prostokątnej, ponieważ rzutuje on przestrzeń P_{n-1} na P_n , a P_n nie jest podprzestrzenią P_{n-1} . Widzimy więc, że X może być reprezentowany przez macierz o wymiarach $(n+1) \times n$. Pozostawiamy czytelnikowi pokazanie, że

$$[X] \equiv (x_{ij}) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & 0 & 0 & & 0 \\ 0 & 1 & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & 1 & & 0 \\ \cdot & & & & \cdot \\ \cdot & & & & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (3.12)$$

Po tym wstępnym zapoznaniu się z dodawaniem i mnożeniem transformacji liniowych powrócimy jeszcze do macierzowej reprezentacji komutatora $[D, X]$.

Zajmiemy się teraz znalezieniem macierzy odpowiadającej sumie i iloczynowi dwóch transformacji liniowych. Załóżmy, że operatory A i B są w bazie $X, X = \{x_1, \dots, x_n\}$, reprezentowane przez macierze (a_{ij}) i (b_{ij}) . Chcemy poznać macierze reprezentujące w bazie X operatory

1. $S \equiv \alpha A + \beta B$, gdzie α i β są skalarami, oraz
2. $C = AB$,

$$\begin{aligned} 1. Sx_j &= (\alpha A + \beta B)x_j = \alpha Ax_j + \beta Bx_j = \alpha \sum_{i=1}^n a_{ij}x_i + \beta \sum_{i=1}^n b_{ij}x_i = \sum_{i=1}^n (\alpha a_{ij} + \beta b_{ij})x_i = \\ &= \sum_{i=1}^n s_{ij}x_i, \end{aligned}$$

gdzie ostatnie wyrażenie definiuje nam macierz operatora $S, (s_{ij})$. Z niezależności liniowej wektorów bazy wynika, że

$$[S]_{ij} = s_{ij} = \alpha a_{ij} + \beta b_{ij},$$

$$\begin{aligned} 2. Cx_j &= ABx_j = A(Bx_j) = A\left(\sum_{k=1}^n b_{kj}x_k\right) = \sum_{k=1}^n b_{kj}Ax_k = \sum_{k=1}^n b_{kj} \sum_{i=1}^n a_{ik}x_i = \\ &= \sum_{i,k=1}^n a_{ik}b_{kj}x_i = \sum_{i=1}^n c_{ij}x_i. \end{aligned}$$

Stąd, przy użyciu argumentów takich jak w punkcie (1), otrzymujemy

$$[C]_{ij} = c_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik}b_{kj}. \quad (3.13)$$

Równanie to określa prawo mnożenia dwu macierzy o wymiarach $n \times n$. Równanie (1.22) opisuje mnożenie macierzy w szczególnym przypadku.

Możemy teraz stosować otrzymane równanie (3.13) do określenia mnożenia dwu tablic liczbowych. Lecz iloczyn AB dwu macierzy będzie określony wtedy i tylko wtedy, gdy liczba kolumn macierzy A jest równa liczbie wierszy macierzy B . Na przykład

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 3 & 5 & 7 \\ 2 & 4 & 6 & 8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 & 11 & 17 & 23 \\ 11 & 25 & 39 & 53 \\ 17 & 39 & 61 & 83 \end{bmatrix}.$$

Iloczyn macierzy $l \times m$ (l wierszy i m kolumn) oraz macierzy $m \times n$ jest macierzą o wymiarze $l \times n$. Tak więc równanie (3.10) reprezentuje mnożenie macierzy A o wymiarze $n \times n$ przez

macierz jednokolumnową α o wymiarze $n \times 1$, co daje w wyniku jednokolumnową macierz β o wymiarze $n \times 1$.

Macierze odwzorowań \mathcal{O} i I mają następującą postać

$$[\mathcal{O}]_{ij} = 0, \quad [I]_{ij} = \delta_{ij}. \quad (3.14)$$

Zauważmy, że dla macierzy zerowej i jednostkowej

$$\mathcal{O}A = A\mathcal{O} = \mathcal{O}, \quad IA = AI = A,$$

tak jak dla odpowiednich transformacji liniowych.

W tym stanie rzeczy można by wykazać, że odwzorowania liniowe są izomorficznie związane z macierzami. Dowód jest prosty i pominiemy go. Widać, że jest to nieznaczne uogólnienie twierdzenia 3.5 o izomorfizmie wektorów z układami n liczb. Odtąd możemy być pewni, że każde twierdzenie udowodnione dla odwzorowań liniowych jest automatycznie słuszne dla odpowiadających im w określonej bazie macierzy i odwrotnie. Tak więc uproszczony zapis nie odróżniający odwzorowań liniowych i odpowiadających im macierzy ma teoretyczne usprawiedliwienie.

Najbardziej niezwykłą własnością odwzorowań liniowych, która kontrastuje z własnościami liczb, jest to, że odwzorowania te nie muszą być przemienne. Macierze odwzorowań liniowych posiadają oczywiście tę samą własność. Z równania (3.13) wynika, że w ogólności macierz $(AB)_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik}b_{kj}$ nie musi być równa macierzy $(BA)_{ij} = \sum_{k=1}^n b_{ik}a_{kj}$.

Przykład. Zbadajmy iloczyn macierzy operatorów różniczkowania i mnożenia zdefiniowanych równaniami (3.11) i (3.12). Ponieważ D jest macierzą $n \times (n+1)$, a X jest macierzą $(n+1) \times n$, macierz DX będzie miała wymiar $n \times n$. Postać jej jest następująca

$$(DX)_{ij} = \sum_{k=1}^{n+1} d_{ik}x_{kj} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & \cdot & 0 \\ 0 & 2 & 0 & & & 0 \\ 0 & 0 & 3 & & & 0 \\ \cdot & & & & & \cdot \\ \cdot & & & & & \cdot \\ \cdot & & & & n-1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & n \end{bmatrix}.$$

Z równań (3.11) i (3.12) wynika, że macierz XD będzie $(n+1)$ -wymiarowa, podczas gdy macierz DX jest n -wymiarowa. Jest to zrozumiałe, ponieważ X rzutuje przestrzeń P_{n-1} na P_n , zaś D rzutuje P_n z powrotem na P_{n-1} ; tak więc macierz DX rzutuje P_{n-1} na P_{n-1} i jest n -wymiarowa. Z kolei XD odwzorowuje P_n w P_n , ponieważ najpierw D odwzorowuje P_n w P_{n-1} , a następnie X odwzorowuje P_{n-1} w P_n i dlatego macierz XD jest $(n+1)$ -wymiarowa. Po wykonaniu prostych obliczeń dostajemy

$$(XD)_{ij} = \sum_{k=1}^n x_{ik}d_{kj} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & \cdot & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & & n-1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & & 0 & n \end{bmatrix}.$$

Przypuśćmy, że ograniczymy działanie operatora XD do odwzorowywania P_{n-1} w P_{n-1} , tak że D będzie wtedy macierzą $(n-1) \times n$, a X macierzą $n \times (n-1)$. Wtedy macierz operatora XD (o wymiarze $n \times n$) otrzymamy z powyższej macierzy przez odrzucenie wiersza i kolumny o numerze $n+1$. Jeżeli teraz porównamy działanie operatorów DX i XD na P_{n-1} zobaczymy, że operatory te nie komutują i, że

$$DX - XD = I,$$

co jest zgodne z rozważaniami z § 3.5.

Jeżeli nawet dla jakiegś przestrzeni o skończonej, lecz bardzo dużej liczbie wymiarów n macierze D i X nie są kwadratowe możemy je traktować w przybliżeniu jak kwadratowe, gdyż dla dużych n różnicę między n a $n+1$ można zaniedbać. Czyni się tak często w teorii pola.

Zakończymy ten paragraf wprowadzeniem kilku specjalnych typów macierzy.

1. *Macierze diagonalne.* Własnością macierzy *diagonalnej* jest to, że jej jedyne różne od zera elementy leżą na głównej przekątnej (diagonali) macierzy, tzn. $a_{ij} = 0$ dla $i \neq j$, lub inaczej $a_{ij} = d_i \delta_{ij}$. Oczywiście każde dwie macierze diagonalne $n \times n$ komutują, a ich iloczyn jest również macierzą diagonalną.

2. *Macierze idempotentne.* O macierzy A mówimy, że jest *idempotentna*, jeżeli $A^2 = A$. Widać, że macierze I , \emptyset oraz macierz

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

są idempotentne.

3. *Macierz transponowana.* Macierz A^T nazywamy macierzą transponowaną (przeistawioną) macierzy $A = (a_{ij})$, jeżeli

$$[A^T]_{ij} = a_{ji}.$$

Twierdzenie 3.9.

a) Jeżeli $A^T = B$, to $B^T = A$ (a w konsekwencji $(A^T)^T = A$),

b) $(A+B)^T = A^T + B^T$,

c) $(AB)^T = B^T A^T$.

Dowód. Dowody punktów (a) i (b) są trywialne. Dowód punktu (c) jest następujący. Niech $C = AB$, wtedy

$$[C^T]_{ij} \equiv [(AB^T)]_{ij} = [AB]_{ji} = \sum_k [A]_{jk} [B]_{ki} = \sum_k [B^T]_{ik} [A^T]_{kj} = [(BA)^T]_{ij},$$

oznacza to, że

$$C^T \equiv (AB)^T = B^T A^T. \quad \text{c.b.d.o.}$$

4. *Macierz sprzężona hermitowsko.* Macierzą *sprzężoną hermitowsko* do macierzy A nazywamy macierz A^\dagger , której elementy są dane przez

$$[A^\dagger]_{ij} = a_{ji}^*.$$

Oczywiście, możemy również napisać, że $A^\dagger = (A^T)^*$. Z twierdzenia (3.9) wynikają następujące wnioski:

a) jeżeli $A^\dagger = B$, to $B^\dagger = A$, tzn. $(A^\dagger)^\dagger = A$,

b) $(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$,

c) $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$.

5. *Macierze symetryczne i antysymetryczne.* Macierz A o wymiarze $n \times n$ jest *symetryczna*, jeżeli $A = A^T$, tzn. jeżeli $a_{ij} = a_{ji}$. Macierz A jest *antysymetryczna*, gdy $A = -A^T$, to znaczy gdy $a_{ij} = -a_{ji}$. Wszystkie elementy diagonalne macierzy *antysymetrycznej* muszą być równe zeru. Każdą macierz A można wyrazić w postaci sumy macierzy symetrycznej i antysymetrycznej, co możemy zapisać

$$A = \underbrace{\frac{1}{2}(A+A^T)}_{\text{symetryczna}} + \underbrace{\frac{1}{2}(A-A^T)}_{\text{antysymetryczna}},$$

tak jak dla tensorów (równanie (1.97)).

6. *Macierze osobliwe i nieosobliwe.* Macierz A o wymiarze $n \times n$ nazywamy *nieosobliwą*, jeżeli istnieje macierz B o tym samym wymiarze taka, że $AB = I$. W przeciwnym wypadku macierz A jest *osobliwa*. Zobaczmy, że jeżeli macierz odwzorowania liniowego jest nieosobliwa, to odwzorowanie liniowe jest odwracalne i na odwrót. Innymi słowy, warunkiem koniecznym i dostatecznym na odwracalność macierzy zarówno A jak i B w skończeniu wymiarowej przestrzeni wektorowej jest warunek $AB = I$. Warunek $BA = I$ nie jest potrzebny dla skończenia wymiarowej przestrzeni (porównaj twierdzenie (3.6)).

3.8. WYZNACZNIKI

Wyznaczniki macierzy są bardzo pomocne przy rozwiązywaniu układów równań liniowych, ich znaczenie polega jednak przede wszystkim na tym, że dostarczają informacji o związanych z nimi transformacjach liniowych. Dla przykładu udowodnimy ogólne twierdzenie, o którym wspominaliśmy już w § 1.4, że wyznacznik macierzy odpowiadającej transformacji ortogonalnej jest zawsze równy ± 1 . Zobaczmy również, że wyznacznik macierzy A jest równy zeru wtedy i tylko wtedy, gdy A jest macierzą osobliwą.

Wyznacznik macierzy A , $\det A$, jest funkcją, która każdej macierzy przyporządkowuje liczbę.

Definicja 3.11. Wyznacznik macierzy A_{ij} odpowiadającej transformacji liniowej A jest równy

$$\det A \equiv \varepsilon_{abc\dots n} A_{1a} A_{2b} \dots A_{Nn}, \quad (3.16a)$$

gdzie n jest stopniem macierzy A . W powyższej definicji zastosowaliśmy umowę sumacyjną, którą będziemy się posługiwać do końca tego paragrafu. $\varepsilon_{abc\dots n}$ jest antysymetrycznym symbolem zdefiniowanym następująco:

$$\varepsilon_{abc\dots n} \begin{cases} +1, & \text{jeżeli } (a, b, c, \dots, n) \text{ jest parzystą permutacją liczb } (1, 2, \dots, N), \\ -1, & \text{jeżeli } (a, b, c, \dots, n) \text{ jest nieparzystą permutacją liczb } (1, 2, \dots, N), \\ 0, & \text{w pozostałych przypadkach.} \end{cases}$$

Czytelnik zauważy zapewne, że ten zapis nie jest całkowicie poprawny. Oznaczyliśmy tu wskaźniki sumowania literami a, b, c, \dots itd. Oczywiście, jeżeli mamy przestrzeń wektorową o 100 wymiarach, to zabraknie nam liter w alfabecie do zapisania wskaźników w definicji 3.11. Jednakże czytelnik bez trudu może sobie wyobrazić alfabet składający się ze 100 liter, który możemy w tym wypadku stosować, np. alfabet powstały z połączenia różnych alfabetów świata. Badając w dalszym ciągu wyznaczniki będziemy posługiwać się

literami łacińskimi. Dlatego też, w tym paragrafie w zapisie A_{Nn} , n oznacza N -tą literę alfabetu. Oczywiście moglibyśmy zawsze uciec się do indeksowania wskaźników, to znaczy wprowadzając oznaczenia $i_1, i_2 \dots$ itd., jednakże ponieważ większość zagadnień związanych z wyznacznikami opiera się na manipulowaniu wskaźnikami, wygodniej jest ograniczyć się do możliwie małej ilości symboli.

Jeżeli (a, b, c, \dots, n) jest permutacją liczb $(1, 2, 3, \dots, N)$, możemy napisać, że $\varepsilon_{abc\dots n} = (-1)^P$, gdzie P jest liczbą przestawień wskaźników konieczną do utworzenia zwykłej kolejności $1, 2, 3, \dots, N$. W zależności od tego czy P jest liczbą parzystą czy nieparzystą, mówimy, że permutacja jest parzysta lub nieparzysta. Występujący tu symbol ε jest naturalnym uogólnieniem symbolu ε_{ijk} , który okazał się być tak użyteczny w opisie wektorów i tensorów w rozdziale 1.

Widać, że $\det A$ składa się z sumy $N!$ iloczynów, przy czym każdy iloczyn zawiera po jednym elemencie z każdego wiersza i każdej kolumny. Iloczyn, który zawiera więcej niż jeden wyraz z danej kolumny, nie daje wkładu do $\det A$, gdyż znika odpowiedni symbol ε . Wynika stąd natychmiast, że

$$\det A = \varepsilon_{abc\dots n} A_{a1} A_{b2} \dots A_{nN}, \quad (3.16b)$$

jest równoważną definicją $\det A$.

Zostały tu zamienione role wierszy i kolumn lub inaczej mówiąc, wiersze stały się kolumnami, a kolumny wierszami. Tym samym, równanie (3.16b) mówi nam, że

$$\det A = \det A^T = (\det A^\dagger)^*. \quad (3.17)$$

Z tej alternatywnej definicji $\det A$ wynika, że dla każdego twierdzenia, które można udowodnić dla wierszy, istnieją odpowiednie twierdzenia słuszne dla kolumn.

Jeżeli w dotychczasowych rozważaniach o wyznacznikach macierzy n -tego stopnia czytelnik nie mógł zobaczyć sensu występujących tu wskaźników, powinien po prostu wypisać powyższe równania w przypadku macierzy 2×2 lub 3×3 . Bowiem zarówno przy dowodzeniu jak i obalaniu tezy mówiącej o macierzach $n \times n$ bardzo pomocnym jest zbadanie jej sensu w przypadku macierzy 2×2 . Wypróbowanie tych ogólnych twierdzeń na najprostszych, nietrywialnych przypadkach nie przynosi ujmy — przecieŜ ogólnie twierdzenia są wyprowadzane przez uogólnienie tych prostych przypadków.

Przedstawiamy teraz kilka własności wyznaczników.

1. Wspólny czynnik wszystkich elementów wiersza (lub kolumny) może być wyłączony jako stała multiplikatywna.

2. Jeżeli jakiś wiersz (lub kolumna) składa się z samych zer, to wyznacznik jest równy zeru.

3. $\det I = 1$.

4. Przy zamianie dwóch wierszy (lub kolumn) zmienia się znak wyznacznika.

5. Jeżeli w macierzy dwa wiersze (lub kolumny) są identyczne, to wyznacznik jest równy zeru.

6. $\det(AB) = \det A \det B$.

7. Wartość wyznacznika nie ulegnie zmianie, gdy do elementów wiersza (lub kolumny) dodać odpowiednie elementy innego wiersza (lub kolumny) pomnoŜone przez skalar.

8. $\det A = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy wektory wierszowe (lub kolumnowe) tej macierzy są liniowo zależne.

Dowody własności (1), (2), (3) są proste. Udowodnimy własności (4), (5) i (6). Po tych dowodach stanie się jasne, jak można wykazać własności (7) i (8). Pozostawiamy to czytelnikowi dla nabrania przez niego wprawy.

Pierwszym krokiem w dowodzie punktu (4) jest pokazanie, że przy zamianie miejscami dwóch sąsiednich wierszy macierzy jej wyznacznik zmienia jedynie znak. Niech A' będzie macierzą otrzymaną z macierzy A przez zamianę miejscami K -tego i L -tego wiersza, o których zakładamy, że są wierszami sąsiednimi. Wtedy

$$\det A' = \varepsilon_{a\dots kl\dots n} A_{1a} A_{2b} \dots A_{Lk} A_{Kl} \dots A_{Nn} = \varepsilon_{a\dots lk\dots n} A_{1a} \dots A_{Kk} A_{Ll} \dots A_{Nn} = -\det A,$$

gdzie zamieniliśmy kolejność czynników w iloczynie $A_{Kk} A_{Ll}$, zamieniliśmy nieme wskaźniki sumowania k i l , jak również zamieniliśmy kolejność lk w symbolu ε , co wprowadziło do wzoru znak minus. Własność (4) wynika teraz stąd, że zamiana każdych dwóch wierszy może być przeprowadzona przez nieparzystą liczbę przestawień sąsiednich wierszy. Własność (5) jest bezpośrednią konsekwencją własności (4).

Udowodnimy teraz własność (6), która mówi, że wyznacznik iloczynu dwu macierzy jest iloczynem ich wyznaczników. Zauważmy najpierw, że

$$\varepsilon_{abc\dots n} \det A = \varepsilon_{a'b'c'\dots n'} A_{aa'} A_{bb'} \dots A_{nn'}, \quad (3.18a)$$

ponieważ gdy wskaźniki a, b, c, \dots, n są odpowiednio równe $1, 2, 3, \dots, N$, to równanie (3.18a) sprowadza się do definicji $\det A$ (3.16a). Jeżeli jakieś nieprimowane wskaźniki są równe, to z uwagi na to, że prawa strona powyższego równania przedstawia wówczas wyznacznik macierzy z jednakowymi wierszami, obie strony równania stają się równe zero. Jeżeli $abc\dots n$ jest permutacją liczb $(1, 2, 3, \dots, N)$, wtedy wyrażenie po prawej i lewej stronie równania (3.18a) da czynnik $(-1)^P \det A$, gdzie P jest parzystością permutacji. Z tego samego powodu wynika, że

$$\varepsilon_{abc\dots n} \det A = \varepsilon_{a'b'c'\dots n'} A_{a'a} A_{b'b} \dots A_{n'n}. \quad (3.18b)$$

Rozważmy teraz iloczyn $(\det A)(\det B)$. Stosując do B równanie (3.16b) mamy

$$(\det A)(\det B) = (\det A) \varepsilon_{abc\dots n} B_{a1} B_{b2} \dots B_{nN};$$

stosując następnie (3.18b), możemy to zapisać jako

$$\begin{aligned} (\det A)(\det B) &= \varepsilon_{a'b'c'\dots n'} A_{a'a} A_{b'b} \dots A_{n'n} B_{a1} B_{b2} \dots B_{nN} = \\ &= \varepsilon_{a'b'c'\dots n'} (A_{a'a} B_{a1}) (A_{b'b} B_{b2}) \dots (A_{n'n} B_{nN}) = \\ &= \varepsilon_{a'b'c'\dots n'} (AB)_{a'1} (AB)_{b'2} \dots (AB)_{n'N} = \\ &= \det(AB). \quad \text{c. b. d. o.} \end{aligned}$$

Ten wynik można przedstawić geometrycznie: w trójwymiarowej przestrzeni objętość równoległościanu jest określona przez trzy wektory \mathbf{A} , \mathbf{B} i \mathbf{C} (rys. (3.3))

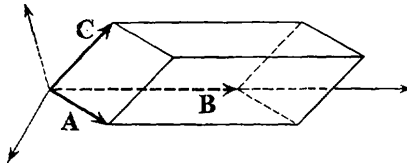
$$\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = \varepsilon_{ijk} A_i B_j C_k = \det \begin{bmatrix} A_1 & A_2 & A_3 \\ B_1 & B_2 & B_3 \\ C_1 & C_2 & C_3 \end{bmatrix}.$$

Jeżeli wielkość $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C})$ jest objętością, to oczywiście jest ona niezmiennicza przy obrotach układu współrzędnych, a więc jest skalarem. Dokładnie rzecz biorąc, jest on pseudo-skalarem, ponieważ zmienia znak przy inwersji układu współrzędnych. W rzeczywistości fizyczną objętością jest wielkość $|\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C})|$.

To powiązanie wyznacznika z objętością może być wprowadzone w przestrzeniach o większej liczbie wymiarów. W dwóch wymiarach objętość staje się powierzchnią równoległoboku określonego przez dwa wektory w płaszczyźnie. Niech I oznacza macierz, która odpowiada jednostkowemu kwadratowi

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

Wektory wierszowe macierzy I określają wierzchołki jednostkowego kwadratu z jednym wierzchołkiem umieszczonym w początku układu współrzędnych. W wyniku mnożenia macierzy I przez macierz T otrzymujemy macierz T , którą możemy wobec tego uważać za przekształcenie jednostkowego kwadratu w równoległobok określony przez wektory wierszowe macierzy T . Powierzchnia tego równoległoboku jest równa $\det T$.



Rys. 3.3. Równoległościan wyznaczony przez trzy wektory A , B i C

Dowolny równoległobok reprezentowany przez macierz A o powierzchni $\det A$ możemy podzielić na *kwadraty* o dowolnie małej powierzchni s_i , $\sum_i s_i = \det A$. Wtedy macierz T , która przeprowadza dowolną macierz A w macierz TA możemy uważać za operację działającą na każdy kwadrat, z których zbudowany jest równoległobok reprezentowany przez macierz A . Przy przekształceniu każdy kwadrat o powierzchni s_i staje się równoległobokiem o powierzchni $a_i = (\det T)s_i$. Dlatego też nowy równoległobok, któremu odpowiada macierz TA , ma powierzchnię równą

$$\sum_i a_i = \sum_i (\det T)s_i = (\det T) \left(\sum_i s_i \right) = \det T \det A.$$

Lecz powierzchnia równoległoboku reprezentowanego przez macierz TA jest również dana przez $\det(TA)$. Zatem $\det TA = \det T \det A$.

Podstawowe idee tego dowodu dla przestrzeni trzywymiarowej są następujące:

1. Jednostkowy sześcian przeprowadzamy przy pomocy liniowej transformacji T w równoległościan o objętości $\det T$. Wyznacznik transformacji liniowej wyznacza stosunek końcowej objętości do początkowej objętości sześcianu.

2. Wyznacznik macierzy przekształcenia liniowego określa stosunek objętości dwu dowolnych równoległościanów, których macierze są związane przez macierz transformacji liniowej. Wyznacznik jest więc skalarnym czynnikiem mierzącym zmiany objętości.

3. Jeżeli przechodzimy z jednej objętości do innej, a następnie jeszcze do innej, otrzymujemy kolejne czynniki skalarnie i w efekcie czynnik wiążący początkową objętość z końcową jest iloczynem wyznaczników wszystkich macierzy odwzorowań liniowych wiążących różne równoległoboki ze sobą. Z drugiej strony, pierwszy równoległościan jest związany z ostatnim iloczynem wszystkich macierzy; objętość równoległościanu, który powstaje

w wyniku kolejnych odwzorowań jest po prostu wyznacznikiem iloczynu macierzy. A więc iloczyn wyznaczników n macierzy jest równy wyznacznikowi iloczynu n macierzy. Dowód ten jest słuszny dla każdego wymiaru.

Ważnym rezultatem kombinatorycznym, który sprowadza obliczanie wyznacznika macierzy $n \times n$ do obliczania wyznaczników macierzy o wymiarze $n(n-1) \times (n-1)$ jest twierdzenie 3.10.

Twierdzenie 3.10. Dla każdego J , $\det A = \sum_J A_{Jj} D_{Jj}$. Wprowadziliśmy tu sumowanie po j explicite, aby uzmysłowić czytelnikowi, że nie sumujemy po wskaźniku J . Przez D_{Jj} oznaczamy dopełnienie algebraiczne elementu A_{Jj} , które jest równe iloczynowi $(-1)^{J+j}$ razy wyznacznik macierzy $(n-1) \times (n-1)$, otrzymanej z macierzy A przez skreślenie J -go wiersza i j -ej kolumny.

$$\text{Dowód. } \det A = \varepsilon_{abc\dots n} A_{1a} A_{2b} \dots A_{Nn} = \sum_J A_{Jj} [\varepsilon_{a\dots ijk\dots n} A_{1a} \dots A_{Ii} A_{Kk} \dots A_{Nn}], \quad (3.19)$$

gdzie dopełnienie algebraiczne ujęliśmy w nawiasy. Teraz

$$D_{Jj} = (-1)^{J-1} \varepsilon_{ja\dots ik\dots n} A_{1a} \dots A_{Ii} A_{Kk} A_{Nn}, \quad (3.20)$$

gdzie przesunęliśmy wskaźnik j na sam początek, wykonując $J-1$ przestawień. (Pamiętajmy, że j oznacza J -tą literę alfabetu!). Te przestawienia produkują czynnik $(-1)^{J-1}$. Widać, że równanie (3.20) jest bliskie tezie twierdzenia: usunęliśmy J -ty wiersz, tak więc nie ma czynnika A_{Jj} i w sumowaniu po wskaźnikach $a \dots ik \dots n$ żaden wskaźnik nie może przyjąć wartości liczbowej j (pamiętać należy, że w (3.20) j jest ustaloną liczbą całkowitą zawartą między 1 a N), ponieważ wyłączyliśmy j -tą kolumnę. Różni nas od zamierzonego rezultatu jedynie wskaźnik j w symbolu ε . Ale

$$\varepsilon_{ja\dots ik\dots n} = (-1)^{j-1} \tilde{\varepsilon}_{a\dots ik\dots n}. \quad (3.21)$$

Po prawej stronie równania (3.21) wskaźniki a, \dots, i, k, \dots, n przyjmują wszystkie wartości między 1 a N , z wyjątkiem ustalonej wartości przyjmowanej przez j . Normalna kolejność wskaźników w symbolu $\tilde{\varepsilon}$ powinna być równa zwykłej chronologicznej kolejności $1, 2, \dots, j-1, j+1, \dots, N$. Tak więc dostajemy

$$D_{Jj} = (-1)^{J+j} \tilde{\varepsilon}_{a\dots ik\dots n} A_{1a} \dots A_{Ii} A_{Kk} \dots A_{Nn},$$

gdzie w żadnym z $N-1$ sumowań wynikających z umowy Einsteina wskaźniki *nie mogą przyjmować wartości j* . Dlatego dopełnienie algebraiczne jest po prostu równe $(-1)^{J+j}$ razy wyznacznik macierzy o wymiarach $(n-1) \times (n-1)$, otrzymany z macierzy A przez skreślenie J -go wiersza i j -tej kolumny. c.b.d.o.

Analogiczne twierdzenie dla kolumn otrzymuje się dokładnie w ten sam sposób. Ma ono następującą postać

$$\det A = \sum_J A_{jJ} D_{jJ}, \quad (3.22)$$

dla każdej kolumny J (tzn. bez sumowania po J).

Prostym i pożytecznym uogólnieniem tego podstawowego wyniku jest

Twierdzenie 3.11. Dla każdego J i K

$$\delta_{KJ} \det A = \sum_J A_{Kj} D_{Jj}. \quad (3.23a)$$

Dowód. Gdy $J = K$, powyższe twierdzenie sprowadza się do twierdzenia 3.10. Dla $J \neq K$ lewa strona i prawa strona równania znikają, ponieważ rozwinięcie prawej strony jest równoważne wyrażeniu jej przez wyznacznik z dwoma identycznymi wierszami. Aby to zobaczyć, rozpiszemy prawą stronę (3.23a)

$$\begin{aligned} \sum_j A_{Kj} D_{Jj} &= \sum_j A_{Kj} (-1)^{J+j} \tilde{\varepsilon}_{a \dots ik \dots n} A_{1a} \dots A_{Ii} A_{Kk} A_{Nn} = \\ &= \sum_j \varepsilon_{ja \dots ik \dots n} A_{1a} \dots A_{Ii} A_{Kj} A_{Kk} A_{Nn} (-1)^{J-1} = \\ &= \sum_j \varepsilon_{a \dots ijk \dots n} A_{1a} \dots A_{Ii} A_{Kj} A_{Kk} \dots A_{Nn}. \end{aligned}$$

Ostatnie wyrażenie jest po prostu wyznacznikiem macierzy zawierającej dwa jednakowe wiersze (o numerze K) i dlatego znika. c.d.b.o.

Mamy tu dokładnie odwrotne rozumowanie do tego, które w twierdzeniu 3.10 prowadziło do wyrażenia na D_{Jj} . Podobnie dla każdego J i K mamy

$$\delta_{JK} \det A = \sum_j A_{jK} D_{jJ}. \quad (3.23b)$$

Zanim zakończymy nasze rozważania o wyznacznikach, chcielibyśmy powiedzieć kilka słów o symbolu $\tilde{\varepsilon}$, zdefiniowanym w dowodzie twierdzenia 3.10. Każdy symbol typu ε jest po prostu sposobem porządkowania zbioru liczb całkowitych. Symbol ε porządkował pierwsze N liczb, podczas gdy $\tilde{\varepsilon}$ porządkuje pierwsze N liczb pomijając *jedną* z nich, tzn. posiada on jedynie $N-1$ wskaźników. Oczywiście, moglibyśmy zdefiniować symbol $\tilde{\tilde{\varepsilon}}$, który porządkowałby pierwsze N liczb całkowitych opuszczając dwie z nich. We wszystkich tych przypadkach definiowane własności symbolu są całkowicie analogiczne do tych, które podaliśmy dla symbolu ε . Związek (3.21)

$$\varepsilon_{ja \dots ik \dots n} = (-1)^{j-1} \tilde{\varepsilon}_{a \dots ik \dots n}$$

jest oczywisty, gdy przyjmiemy, że należy wykonać taką samą liczbę przestawień przy uporządkowaniu wskaźników $a \dots ik \dots n$ zarówno w ε jak i $\tilde{\varepsilon}$. Ponadto do ustawienia j w poprawnym położeniu w ε potrzeba dodatkowo $j-1$ przestawień. Stąd czynnik $(-1)^{j-1}$ mnożący $\tilde{\varepsilon}$.

Przejdziemy teraz do zastosowania tych wyników w teorii operatorów liniowych.

Definicja 3.11. Macierzą *sprzężoną klasycznie* do macierzy A stopnia n nazywamy macierz \bar{A}_{ij} tego samego stopnia, której elementy są równe: $\bar{A}_{ij} = D_{ji}$. Bezpośrednio z równań (3.23a) i (3.23b) wynika, że

$$A\bar{A} = \bar{A}A = (\det A)I. \quad (3.24)$$

Jest to równanie macierzowe. Macierz $[(\det A)I]$ jest diagonalna i wszystkie jej niezerowe elementy są równe $\det A$. (Uwaga, *sprzężenie klasyczne* różni się od *operatora sprzężonego*, zdefiniowanego w § 4.4). Udowodnimy teraz bardzo ważne twierdzenie.

Twierdzenie 3.12. Dla danej macierzy A istnieje macierz odwrotna A^{-1} wtedy i tylko wtedy, gdy $\det A \neq 0$.

Dowód. Jeżeli $\det A \neq 0$, możemy podzielić równanie (3.24) przez $\det A$ i otrzymamy

$$A \left(\frac{\bar{A}}{\det A} \right) = \left(\frac{\bar{A}}{\det A} \right) A = I.$$

Na mocy twierdzenia 3.6 powyższy wzór implikuje istnienie jednoznacznej macierzy odwrotnej. Z drugiej strony, jeżeli istnieje macierz odwrotna A^{-1} , to

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

Teraz biorąc wyznacznik obu stron dostajemy

$$\det(AA^{-1}) = \det A \cdot \det A^{-1} = \det I = 1, \quad (3.25)$$

skąd wynika, że $\det A \neq 0$. c.b.d.o.

Wniosek. Macierz A jest nieosobliwa wtedy i tylko wtedy, gdy $\det A \neq 0$.

Dowód. Jeżeli macierz A jest nieosobliwa, to z definicji istnieje taka macierz B , że $AB = I$. Stąd wynika, że $\det A \det B = 1$, a więc $\det A \neq 0$. Jeżeli $\det A \neq 0$, to na mocy twierdzenia 3.12 A ma odwrotność ($A^{-1} = \bar{A}/\det A$), a więc istnieje macierz $B = A^{-1}$ taka, że $AB = I$. Tym sposobem, jak już zauważyliśmy poprzednio, w skończonej wymiarowej przestrzeni odwracalność macierzy jest równoważna jej nieosobliwości. Niektórzy autorzy definiują macierz nieosobliwą jako taką, dla której $\det A \neq 0$ (i osobliwą, jeżeli $\det A = 0$), a następnie dochodzą na podstawie trochę innego logicznego rozumowania do tego samego podstawowego stwierdzenia, że nieosobliwa macierz ma jednoznacznie określoną macierz odwrotną, daną przez

$$A^{-1} = \frac{1}{\det A} \bar{A}. \quad (3.26)$$

Z równania (3.25) wynika, że

$$\det(A^{-1}) = \frac{1}{\det A}. \quad (3.27)$$

Wyrażenie $1/A$ jest bez sensu, ponieważ A jest macierzą—wyrażenie „ $1/\text{banan}$ ” jest równie bezsensowne. Ale $1/\det A \equiv [\det A]^{-1}$ jest skalar, ponieważ $\det A$ jest funkcją skalarną macierzy A i oczywiście ten zapis jest poprawny.

Skoro mamy już metodę obliczania macierzy odwrotnej, możemy rozwiązywać układy równań liniowych typu $Ax = y$. W trójwymiarowej przestrzeni ten skrócony zapis (wprowadzony przez równania (3.9) i (3.10)) oznacza

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \eta_3 \end{bmatrix}.$$

Wykonując odpowiednie mnożenia, otrzymujemy układ trzech równań na trzy niewiadome:

$$\begin{aligned} a_{11}\xi_1 + a_{12}\xi_2 + a_{13}\xi_3 &= \eta_1, \\ a_{21}\xi_1 + a_{22}\xi_2 + a_{23}\xi_3 &= \eta_2, \\ a_{31}\xi_1 + a_{32}\xi_2 + a_{33}\xi_3 &= \eta_3. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Jeżeli wyznacznik tego układu jest różny od zera, to istnieje macierz odwrotna dana wzorem

$$A^{-1} = [\det A]^{-1} \bar{A}.$$

W takim razie

$$A^{-1}Ax = Ix = A^{-1}y = [\det A]^{-1} \bar{A}y. \quad (3.29)$$

Powyższy wzór przedstawia rozwiązanie układu równań, wyraża bowiem nieznanne wielkości ξ_i przez znane wielkości η_j . Wypisując (3.29) explicite dostajemy

$$\xi_i = (\det A)^{-1} \sum_{j=1}^n [\bar{A}]_{ij} \eta_j = (\det A)^{-1} \sum_{j=1}^n D_{ji} \eta_j. \quad (3.30)$$

Wielkość

$$\sum_{j=1}^n \eta_j D_{ji}$$

jest po prostu wyznacznikiem macierzy otrzymanej przez zastąpienie i -tej kolumny macierzy A przez wielkości η_j . Równanie (3.30) nosi nazwę *wzorów Cramera*. Powyższa metoda nie jest najbardziej efektywną drogą rozwiązywania dużych układów liniowych, istnieją znacznie wydajniejsze metody numeryczne. Są one omawiane w podręcznikach metod numerycznych.

Z wzorów Cramera wynika, że jednorodny układ równań, dla którego η_i są równe zeru, ma dla $\det A = 0$ jedynie nietrywialne rozwiązania (tzn. nie wszystkie ξ_j są równe zeru). Wynika to bezpośrednio z twierdzenia 3.7, które mówi, że dla nieosobliwej macierzy A równanie $Ax = 0$ pociąga za sobą równość $x = 0$. Oczywiście osobliwość macierzy A jest warunkiem koniecznym na istnienie rozwiązania niezerowego (dla $x \neq 0$). Jak udowadnia się w książkach o równaniach liniowych, jest to również warunek dostateczny na niezerowe rozwiązanie. Jednakże czytelnik nie powinien stąd wyciągać wniosku, że jeżeli $\det A = 0$, to równanie $Ax = y$ nie ma rozwiązania chyba, że $y = 0$. Jest to nieprawdą, co pokaże twierdzenie 3.17.

Przykład. Obliczamy macierz odwrotną do macierzy

$$A = (a_{ij}) = \begin{bmatrix} 1 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 3 \end{bmatrix}.$$

Po pierwsze zauważmy, że $\det A = -3$, a więc A nie jest osobliwa i posiada macierz odwrotną. Z równania (3.26) wynika, że

$$\begin{aligned} [A^{-1}]_{ij} &= \frac{1}{\det A} [\bar{A}]_{ij} = \frac{1}{\det A} D_{ji} = \\ &= -\frac{1}{3} \begin{bmatrix} (-1)^{1+1} \det \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} & (-1)^{2+1} \det \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} & (-1)^{3+1} \det \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \\ (-1)^{1+2} \det \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} & (-1)^{2+2} \det \begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 1 & 3 \end{pmatrix} & (-1)^{3+2} \det \begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} \\ (-1)^{1+3} \det \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} & (-1)^{2+3} \det \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} & (-1)^{3+3} \det \begin{pmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \end{bmatrix} = \\ &= -\frac{1}{3} \begin{bmatrix} 3 & -1 & -4 \\ -6 & -1 & 8 \\ 3 & 1 & -5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & \frac{1}{3} & \frac{4}{3} \\ 2 & \frac{1}{3} & -\frac{8}{3} \\ -1 & -\frac{1}{3} & \frac{5}{3} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Czytelnik może sprawdzić to wykazując, że

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

I znów należy pamiętać, że istnieją metody numeryczne odwracania macierzy, które są z wielu powodów bardziej efektywne.

3.9. PRZEKSZTAŁCENIE PODOBIENSTWA

Pokażemy teraz, jak zmienia się reprezentacja macierzowa odwzorowań liniowych, gdy przechodzimy od jednej bazy do drugiej. Definiujemy w n -wymiarowej przestrzeni wektorowej dwie bazy:

$$X = \{x_1, \dots, x_n\}$$

oraz

$$Y = \{y_1, \dots, y_n\}.$$

Zakładamy, że są one ze sobą związane transformacją liniową A :

$$y_i = Ax_i.$$

Każda transformacja liniowa prowadząca od jednej bazy do drugiej musi być odwracalna, ponieważ dla każdego wektora

$$x = \sum_{i=1}^n \alpha_i x_i,$$

z równania

$$A \sum_i (\alpha_i x_i) = \sum_i \alpha_i Ax_i = \sum_i \alpha_i y_i = 0$$

wynika, że $\alpha_i = 0$, bo wektory y_i są liniowo niezależne. Stąd $x = 0$. Dlatego też, na mocy twierdzenia 3.7 istnieje macierz A^{-1} .

Przypuśćmy, że wyrażamy dany wektor x w dwóch bazach X i Y :

$$x = \sum_i \alpha_i x_i \quad \text{i} \quad x = \sum_i \beta_i y_i.$$

Powstaje teraz pytanie czy α_i i β_i są ze sobą związane. Innymi słowy chodzi o znalezienie odpowiedzi na pytanie, jak przekształcają się współrzędne wektora przy zmianie bazy. Mamy

$$x = \sum_i \beta_i y_i = \sum_i \beta_i Ax_i = \sum_i \beta_i \sum_j a_{ji} x_j = \sum_{i,j} a_{ji} \beta_i x_j.$$

Lecz

$$x = \sum_j \alpha_j x_j;$$

a stąd, zmieniając niemy wskaźnik, otrzymujemy

$$\sum_j \left(\alpha_j - \sum_i a_{ji} \beta_i \right) x_j = 0 \Rightarrow \alpha_i = \sum_j a_{ij} \beta_j.$$

Równanie to mówi nam jak zmieniają się współrzędne wektora, gdy przechodzimy z jednej bazy do drugiej. Ma ono dokładnie tę samą postać co równanie (1.15 b) z tym, że

występująca tam zmienna x_i odgrywa tę samą rolę co w powyższym równaniu α_i . Możemy to zapisać w skrócie

$$\alpha_X = [A]_X \beta_Y,$$

gdzie wskaźniki przypominają, że wektory kolumnowe α i β reprezentują x odpowiednio w bazie X i Y oraz że macierz reprezentująca operator A jest wypisana w bazie X .

Wracamy teraz do analogicznego pytania dla macierzowej reprezentacji przekształcenia liniowego B . Jaki jest związek między macierzową reprezentacją (b_{ij}) operatora B w bazie X a jego reprezentacją (c_{ij}) w bazie Y ? Mamy

$$Bx_j = \sum_i b_{ij} x_i \quad \text{i} \quad By_j = \sum_i b'_{ij} y_i.$$

Wiemy, że

$$By_j = BAx_j = B \sum_k a_{kj} x_k,$$

gdzie (a_{kj}) jest macierzową reprezentacją odwzorowania A w bazie X . Tak więc

$$By_j = \sum_k a_{kj} Bx_k = \sum_k a_{kj} \sum_i b_{ik} x_i = \sum_i \left(\sum_k b_{ik} a_{kj} \right) x_i. \quad (3.31)$$

Ale z drugiej strony

$$By_j = \sum_k b'_{kj} y_k = \sum_k b'_{kj} Ax_k = \sum_k b'_{kj} \sum_i a_{ik} x_i = \sum_i \left(\sum_k a_{ik} b'_{kj} \right) x_i. \quad (3.32)$$

Z powyższych równań oraz z niezależności liniowej wektorów bazy x_i wynika, że

$$\sum_k b_{ik} a_{kj} = \sum_k a_{ik} b'_{kj}, \quad (3.33)$$

lub w zapisie macierzowym

$$[B]_X [A]_X = [A]_X [B]_Y. \quad (3.34)$$

Wskaźniki określają bazę, w której przedstawione zostały macierze. Ponieważ macierz A jest odwracalna, możemy zapisać równanie (3.34) następująco

$$[B]_Y = [A]_X^{-1} [B]_X [A]_X. \quad (3.35)$$

Definicja 3.12. Dwie macierze B i C są *podobne*, gdy istnieje odwracalna macierz A taka, że $C = A^{-1}BA$. Mówimy wtedy, że C jest związane z B *przekształceniem podobieństwa*.

Posługując się tą definicją możemy uzyskany poprzednio wynik sformułować następująco: macierze podobne reprezentują tę samą transformację liniową w różnych bazach.

Udowodnimy teraz dwa ważne twierdzenia o macierzach podobnych.

Twierdzenie 3.13. Jeżeli B i C są macierzami podobnymi, to $\det B = \det C$.

Dowód. Na mocy twierdzenia (3.27)

$$\det C = \det(A^{-1}BA) = \det A^{-1} \det B \det A = \det B, \quad \text{c.b.d.o.}$$

Definicja 3.13. Ślad macierzy A jest równy sumie jej elementów diagonalnych

$$\text{Tr}(A) \equiv \sum_i a_{ii}.$$

Twierdzenie 3.14. Jeżeli B i C są macierzami podobnymi, to $\text{Tr} B = \text{Tr} C$.

Dowód.

$$\begin{aligned} \text{Tr} C &= \sum_i c_{ii} = \sum_i [A^{-1}BA]_{ii} = \sum_{i,j,k} [A^{-1}]_{ij} [B]_{jk} [A]_{ki} = \\ &= \sum_{i,j,k} [A]_{ki} [A^{-1}]_{ij} [B]_{jk} = \sum_{j,k} [AA^{-1}]_{kj} [B]_{jk} = \\ &= \sum_{j,k} \delta_{kj} [B]_{jk} = \sum_k [B]_{kk} = \text{Tr} B. \end{aligned} \quad \text{c.b.d.o.}$$

Stąd wynika, że wyznacznik i ślad są niezmiennicze względem transformacji podobieństwa. Czytelnik może udowodnić, że dla dowolnych macierzy A i B stopnia n $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$. Korzystając z tego można łatwo udowodnić twierdzenie 3.14 bez konieczności posługiwania się wskaźnikami.

3.10. WARTOŚCI I WEKTORY WŁASNE

Definicja 3.14. Skalar λ jest *wartością własną*, a niezerowy wektor x jest *wektorem własnym* odwzorowania liniowego A , jeżeli

$$Ax = \lambda x.$$

Gdy λ i x są wartościami i wektorami własnymi odwzorowania A , działanie operatora A na wektor x ogranicza się do mnożenia go przez stałą. Operator ten może więc zmienić długość tego wektora, ale nie jego kierunek.

W mechanice kwantowej zakłada się, że każda obserwabla* występująca w przyrodzie może być reprezentowana przez operator liniowy A , a wynik każdego fizycznego pomiaru obserwabli musi być jedną z wartości własnych operatora A . Na przykład, dla układu o hamiltonianie H dopuszczalnymi wartościami energii E są te wartości, które spełniają równanie $Hu = Eu$, gdzie u oznacza wektory własne opisujące fizyczne stany związane z odpowiednimi energiami E . Powyższe równanie nosi nazwę niezależnego od czasu równania Schrödingera.

Zajmiemy się teraz znajdowaniem wartości i wektorów własnych danego operatora. Macierzowe równanie $Ax = \lambda x$ można inaczej zapisać w postaci $Ax - \lambda Ix = 0$ lub $(A - \lambda I)x = 0$. Wiemy, że jeżeli macierz $A - \lambda I$ jest nieosobliwa, to równanie ma jedynie trywialne rozwiązanie, $x = 0$. Jeżeli więc x jest niezerowym wektorem własnym, to macierz $A - \lambda I$ musi być macierzą osobliwą, czyli

$$\det(A - \lambda I) = \det \begin{bmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & \cdots & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} - \lambda \end{bmatrix} = 0. \quad (3.36)$$

Równanie (3.36) nazywamy *równaniem charakterystycznym*** macierzy operatora A , zaś wielomian $\det(A - \lambda I)$ — *wielomianem charakterystycznym*. Wartości własne badanej ma-

* W mechanice kwantowej nazwą obserwabli obejmujemy mierzalne wielkości fizyczne (przyp. tłum.).

** Równanie to nosi również nazwę *równania wiekowego* lub *sekularnego* (przyp. tłum.).

cierzy, które oznaczamy zazwyczaj przez λ_i , są pierwiastkami (niekoniecznie różnymi) wielomianu charakterystycznego. Zbiór wartości własnych λ_i nazywamy *widmem* (spektrum) macierzy A . Jeżeli dana wartość własna jest wielokrotnym pierwiastkiem wielomianu charakterystycznego, mówimy, że widmo jest *zdegenerowane*.

Z algebry wiadomo, że każdy wielomian stopnia n ma n (niekoniecznie różnych) pierwiastków zespolonych. Udowodnimy to podstawowe twierdzenie w rozdziale 6. Oczywiście, nie jest prawdą, że każdy wielomian ma pierwiastek rzeczywisty (na przykład wielomian $x^2 + 1$ ma jedynie pierwiastki zespolone $\pm i$). Z tego powodu będziemy odtąd zajmować się ciałem liczb zespolonych, chyba że wyraźnie ograniczymy nasze rozważania do ciała liczb rzeczywistych.

Wstawiając wartości własne z powrotem do równania $Ax_i = \lambda_i x_i$ możemy znaleźć wektory własne x_i , przynależne do każdej wartości λ_i . Zauważmy, że każda liniowa kombinacja wektorów własnych odpowiadających tej samej wartości własnej λ_i jest również wektorem własnym, odpowiadającym tej wartości własnej. Jeżeli x_i i x_j są wektorami własnymi należącymi do tej samej wartości własnej λ , to

$$Ax_i = \lambda x_i \quad \text{i} \quad Ax_j = \lambda x_j$$

oraz

$$A(\alpha x_i + \beta x_j) = \alpha Ax_i + \beta Ax_j = \alpha \lambda x_i + \beta \lambda x_j = \lambda(\alpha x_i + \beta x_j).$$

Definicja 3.15. *Geometryczną krotnością* wartości własnej nazywamy liczbę liniowo niezależnych wektorów własnych należących do tej wartości*.

Innym typem krotności jest *krotność algebraiczna*. Krotność algebraiczna pierwiastka jest to liczba określająca, ile razy dany pierwiastek pojawia się w rozwiązaniu równania algebraicznego. Należy wyraźnie odróżniać te krotności.

Twierdzenie 3.15. Wartości własne macierzy podobnych są takie same i mają tę samą krotność geometryczną.

Dowód. Niech A i B będą macierzami podobnymi, to znaczy $P^{-1}AP = B$. Badamy równanie $Ax_i = \lambda_i x_i$. Wtedy

$$P^{-1}Ax_i = \lambda_i P^{-1}x_i$$

oraz

$$P^{-1}APP^{-1}x_i = \lambda_i P^{-1}x_i,$$

gdzie po lewej stronie równania wstawiliśmy po prostu $I = PP^{-1}$. Tak więc

$$By_i = \lambda_i y_i, \quad \text{gdzie} \quad y_i = P^{-1}x_i$$

i stąd wynika, że B ma takie same wartości własne λ_i jak A .

Wektor własny macierzy B należący do λ_i jest równy $y_i = P^{-1}x_i$. Musimy teraz wykazać, że jeżeli istnieje k liniowo niezależnych wektorów własnych x_i , spełniających równanie $Ax_i = \lambda_i x_i$ (tzn., że geometryczna krotność λ_i jest równa k), to istnieje k liniowo niezależnych wektorów własnych y_i , spełniających równanie $By_i = \lambda_i y_i$. Zbadajmy teraz liniową kombinację wektorów własnych y_i należących do λ_i :

$$\sum_{i=1}^k \alpha_i y_i = \sum_{i=1}^k \alpha_i P^{-1}x_i = P^{-1} \left(\sum_{i=1}^k \alpha_i x_i \right).$$

* Geometryczna krotność wartości własnej nosi również nazwę *krotności zwyrodnienia* (przyp. tłum.).

A więc jeżeli założymy, że

$$\sum_{i=1}^k \alpha_i y_i = 0,$$

to stąd będzie wynikać, że

$$P^{-1} \left(\sum_{i=1}^k \alpha_i x_i \right) = 0.$$

Ponieważ macierz P nie jest macierzą zerową, więc

$$\sum_{i=1}^k \alpha_i x_i = 0.$$

Z liniowej niezależności wektorów własnych x_i ($i = 1, 2, \dots, k$) wynika, że $\alpha_i = 0$. A ponieważ mamy następujące wynikanie

$$\sum_{i=1}^k \alpha_i y_i = 0 \Rightarrow \alpha_i = 0,$$

więc wektory własne y_i ($i = 1, 2, \dots, k$) muszą być liniowo niezależne. c.b.d.o.

Inny, alternatywny dowód powyższego twierdzenia polega na zauważeniu, że

$$(B - \lambda I) = P^{-1}AP - \lambda I = P^{-1}(A - \lambda I)P,$$

a stąd

$$\det(B - \lambda I) = \det(A - \lambda I).$$

Ponieważ dwie podobne macierze A i B mają takie same wielomiany charakterystyczne, muszą mieć również takie same wartości własne o tych samych krotnościach *algebraicznych*. *Nie jest* to jednak równoważne twierdzeniu 3.15. Z tego, że macierze podobne mają takie same wielomiany charakterystyczne wynika, że współczynniki stojące przy każdej potęgę λ są równe: w szczególności współczynnik przy λ^0 (jest to stały wyraz wielomianu) jest równy $\det A$, więc $\det A = \det B$. Współczynnik przy λ^{n-1} jest równy $\text{Tr } A$, co daje $\text{Tr } A = \text{Tr } B$. Jest to alternatywny dowód niezmienniczości wyznacznika i śladu przy przekształceniach podobieństwa; co więcej, wskazuje na istnienie całej klasy tego typu niezmienników, a mianowicie n współczynników stojących przy różnych potęgach λ , ($\lambda^0, \lambda^1, \lambda^2, \dots, \lambda^{n-1}$) w wielomianie charakterystycznym n -tego rzędu. Niebawem przekonamy się, dlaczego spośród wszystkich tych niezmienników specjalne znaczenie przypisujemy wyznacznikowi i śladowi macierzy.

Jeżeli A jest macierzą diagonalną

$$D = \begin{bmatrix} d_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_{22} & 0 & & 0 \\ 0 & 0 & d_{33} & & 0 \\ \cdot & & & \cdot & \\ \cdot & & & \cdot & \\ \cdot & & & \cdot & \\ 0 & 0 & 0 & & d_{nn} \end{bmatrix},$$

wtedy równanie $Dx = \lambda x$ ma zawsze rozwiązanie. W tym przypadku bowiem równanie charakterystyczne

$$\det(D - \lambda I) = \prod_{i=1}^n (d_{ii} - \lambda) = 0$$

na następujące rozwiązanie

$$\lambda_i = d_{ii}, \quad i = 1, 2, \dots, n;$$

wartości własne są tu po prostu równe elementom diagonalnym. Jeżeli więc możemy znaleźć transformację podobieństwa diagonalizującą macierz A (później zobaczymy, że taka transformacja zachowuje wartości własne), możemy jednocześnie znaleźć wartości własne macierzy A .

Twierdzenie 3.16. Niech $X_i = (p_{1i}, \dots, p_{ni})$ będzie wektorem własnym macierzy A (zdefiniowanym w V_n) odpowiadającym wartości własnej λ_i ($i = 1, \dots, n$), $AX_i = \lambda_i X_i$. Jeżeli wektory X_i rozpinają przestrzeń V_n , to macierz $P = (p_{ij})$ diagonalizuje macierz A , czyli

$$P^{-1}AP = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{bmatrix} = D = (\lambda_i \delta_{ij}) = (d_{ij}).$$

I odwrotnie, jeżeli A można zdiagonalizować przy pomocy transformacji podobieństwa, to zbiór wektorów własnych rozpiną przestrzeń V .

Dowód. Wektory kolumnowe macierzy P są wektorami własnymi (X_i) macierzy A . Jeżeli wektory te rozpinają przestrzeń V , to są one liniowo niezależne, czyli $\det P \neq 0$ i istnieje macierz odwrotna P^{-1} .

Mamy więc

$$AX_j = \lambda_j X_j$$

lub

$$\sum_k a_{ik} p_{kj} = \lambda_j p_{ij} = \sum_k p_{ik} \delta_{kj} \lambda_j = \sum_k p_{ik} d_{kj},$$

gdzie $i, j = 1, \dots, n$. Tak więc, z uwagi na to, że macierz P jest odwracalna, mamy

$$AP = PD \Rightarrow D = P^{-1}AP.$$

Dowód twierdzenia odwrotnego polega na zastosowaniu powyższego rozumowania w odwrotnej kolejności. c.b.d.o.

Tak więc, jeżeli zbiór wektorów własnych rozpiną przestrzeń V , to jest to warunek konieczny i dostateczny, by transformacja podobieństwa diagonalizowała macierz. Macierz

$$A = \begin{bmatrix} 1 & a \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

jest przykładem macierzy, której wektory własne nie rozpinają przestrzeni (patrz zadanie 18).

Zauważmy, że zawsze można znaleźć macierz P spełniającą równanie $AP = PD$ nawet wtedy, gdy nie istnieje macierz P , dla której $P^{-1}AP = D$.

Ponieważ każda macierz A ma przynajmniej jedną wartość własną (nazwijmy ją λ) i jeden wektor własny (nazwijmy go p), macierz P zbudowana z n kolumn, z których każda jest wektorem p , spełnia równanie $AP = PD$. Istotnie mamy $AP = \lambda P$, więc $D = \lambda I$. Lecz ta macierz P jest nieodwracalna, ponieważ jej wszystkie kolumny są równe.

W rzeczywistości twierdzenie 3.16 nie jest bardzo pomocne w obliczeniach, ponieważ pozwala ono na konstruowanie macierzy diagonalizującej P jedynie w przypadku, gdy znamy wektory własne, a zwykle można je znaleźć dopiero po znalezieniu wartości własnych. Tak więc, aby znaleźć wektory własne macierzy A poprzez zbudowanie macierzy diagonalizacyjnej P , musimy zwykle znać wartości własne macierzy A . Znaczenie tego twierdzenia polega raczej na tym, że dostarcza ono warunku koniecznego i dostatecznego na diagonalizowalność macierzy.

Przykład 1. Obliczymy wartości własne, wektory własne i macierz diagonalizującą P dla spinowej macierzy Pauliego

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

W mechanice kwantowej operator x -owej składowej spinu jest równy

$$s_x = \frac{\hbar}{2} \sigma_x.$$

Równanie charakterystyczne dla σ_x ma następującą postać:

$$\det(\sigma_x - \lambda I) = [(-\lambda)^2 - 1] = 0 \Rightarrow \lambda = \pm 1;$$

a więc s_x ma dwie wartości własne $\pm \hbar/2$. Aby znaleźć wektory własne odpowiadające tym wartościom własnym, wstawimy je teraz z powrotem do równania $\sigma_x x = \lambda x$. Dla $\lambda = +1$

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{bmatrix} \Rightarrow \xi_1 = \xi_2 = a,$$

a więc wektor własny, odpowiadający wartości $\lambda = +1$, ma postać

$$\begin{bmatrix} a \\ a \end{bmatrix}, \quad a \neq 0.$$

Podobnie wektor własny należący do wartości $\lambda = -1$ jest postaci

$$\begin{bmatrix} b \\ -b \end{bmatrix}, \quad b \neq 0.$$

Zatem

$$P = \begin{bmatrix} a & b \\ a & -b \end{bmatrix} \quad \text{i} \quad \det P = -2ab \neq 0.$$

Dlatego też istnieje macierz odwrotna P^{-1}

$$P^{-1} = \frac{1}{\det P} \bar{P} = \frac{-1}{2ab} \begin{bmatrix} -b & -b \\ -a & a \end{bmatrix}.$$

Stąd

$$P^{-1} \sigma_x P = \frac{1}{2ab} \begin{bmatrix} b & b \\ a & -a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a & b \\ a & -b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}.$$

W tym konkretnym przypadku można łatwo znaleźć wartości własne, jeżeli zauważy się, że kwadrat każdej macierzy Pauliego jest równy macierzy jednostkowej (zadanie 12). W szczególności, dla macierzy σ_x mamy

$$x = Ix = \sigma_x^2 x = \sigma_x \sigma_x x = \sigma_x \lambda x = \lambda \sigma_x x = \lambda^2 x \Rightarrow \lambda^2 = 1.$$

Ponieważ $x \neq 0$, wnioskujemy, że $\lambda = \pm 1$. Obliczenie to pokazuje, że wartości własne macierzy, której kwadrat równa się I , są równe ± 1 .

Równania typu $Ax = 0$ odgrywają tak ważną rolę w fizyce, że często ma się wrażenie, że skoro równanie $Ax = 0$ ma rozwiązanie jedynie wtedy, gdy $\det A = 0$, to jeżeli $\det A = 0$, równanie postaci $Ax = b$ nie ma rozwiązań z wyjątkiem przypadku, gdy $b = 0$. Jest to nieprawda! Oczywiście, równanie $Ax = b$ nie może mieć rozwiązań dla wszystkich wektorów b , istnieje jednak duża klasa wektorów, dla których powyższe równanie posiada rozwiązanie. Jak się okazuje, możemy udowodnić następujące twierdzenie, które będzie szczególnie użyteczne w rozwijaniu rachunku zaburzeń (rozdział 4).

Twierdzenie 3.17. Jeżeli $\det A = 0$ i jeżeli wektory własne operatora A rozpinają przestrzeń V (na którą działa operator A), to równanie $Ax = b$ ma rozwiązanie wtedy i tylko wtedy, gdy b jest liniową kombinacją wektorów własnych operatora A odpowiadających niezerowym wartościom własnym. O takim wektorze będziemy nieraz mówić, że *leży on w podprzestrzeni V rozpiętej na tych wektorach własnych operatora A , które odpowiadają niezerowym wartościom własnym.*

Dowód. Dowód rozpoczniemy uwagą, że wyznacznik macierzy A jest równy iloczynowi wartości własnych tej macierzy (patrz zadanie 3.19). Ponieważ $\det A = 0$, więc macierz A musi mieć przynajmniej jedną wartość własną równą zero. Będziemy oznaczać wartości własne przez $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, a odpowiadające im wektory własne przez x_1, x_2, \dots, x_n . Jeżeli jakaś wartość własna jest zdegenerowana, to wystąpi ona w naszych rachunkach tyle razy, ile wynosi jej krotność; przyjmujemy dodatkową umowę, że zerowe wartości własne będą występować na początku, na przykład, jeżeli mamy m zerowych wartości własnych, to $\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 0, \dots, \lambda_m = 0$. Ponieważ x_i rozpinają przestrzeń, możemy zapisać

$$b = \sum_{i=1}^n \beta_i x_i.$$

Podobnie

$$x = \sum_{i=1}^n \xi_i x_i,$$

więc równanie $Ax = b$ może być przedstawione w postaci

$$A \sum_{i=1}^n \xi_i x_i = \sum_{i=1}^n \beta_i x_i \Rightarrow \sum_{i=1}^n (\lambda_i \xi_i - \beta_i) x_i = 0.$$

Ponieważ x_i rozpinają przestrzeń V , więc dla każdego i $\lambda_i \xi_i - \beta_i = 0$. Zatem, jeżeli rozwiązanie istnieje, to $\beta_i = 0$ dla $i = 1, 2, \dots, m$ (bo $\lambda_i = 0$ dla $i = 1, 2, \dots, m$). Czyli, w tym przypadku, wektor b może być przedstawiony w postaci kombinacji liniowej tych wektorów x_i , które należą do niezerowych wartości własnych. Tym sposobem została udowodniona połowa twierdzenia.

Z drugiej strony, jeżeli $\beta_i = 0$ dla $i = 1, 2, \dots, m$, to zmienne ξ_i dla $i = 1, 2, \dots, m$ są dowolne. Pozostałe ξ_i możemy wyliczyć

$$\xi_i = \beta_i / \lambda_i, \quad i = m+1, \dots, n.$$

Tak więc każdy wektor postaci

$$x = \xi_1 x_1 + \xi_2 x_2 + \dots + \xi_m x_m + \frac{\beta_{m+1}}{\lambda_{m+1}} x_{m+1} + \dots + \frac{\beta_n}{\lambda_n} x_n$$

jest rozwiązaniem równania $Ax = b$. Mamy więc dla każdego b m -płatową nieskończoną rodzinę rozwiązań spełniającą założenia twierdzenia. c.b.d.o.

Ta mnogość rozwiązań nie powinna dziwić. Weźmy bowiem rozwiązanie x ($Ax = b$) i pomnożmy przez dowolną liczbę każde rozwiązanie równania $Ay = 0$, a następnie dodajmy te wektory do siebie. Suma $x + ay$ jest również rozwiązaniem, gdyż

$$A(x+ay) = Ax + aAy = Ax = b.$$

Lecz jeżeli A ma m wartości własnych, równych zeru i m odpowiadających im liniowo niezależnych x_1, x_2, \dots, x_m , to oczywiście

$$Ax_i = 0x_i = 0, \quad i = 1, \dots, m,$$

więc wektory własne x_1, x_2, \dots, x_m są rozwiązaniami jednorodnego równania $Ay = 0$. Zatem ich współczynniki w rozwinięciu x będą dowolne. To wyjaśnia również i fakt, że równanie typu $Ay = 0$ może mieć więcej niż jedno liniowo niezależne rozwiązanie.

Zbiór wszystkich wektorów y_i spełniających równanie $Ay = 0$ nazywamy *jądrem* odwzorowania A lub *przestrzenią zerową* odwzorowania A , wymiar tej przestrzeni nazywamy *zerowością odwzorowania*. *Rzędem* macierzy odwzorowania nazywamy różnicę wymiaru przestrzeni, w której jest ono zdefiniowane, i zerowości odwzorowania.

Przejdziemy teraz do drugiego przykładu ilustrującego metodę rozwiązywania zagadnienia własnego, przykładu, który ma ogromne znaczenie w fizyce współczesnej.

Przykład 2. *Obliczanie wartości i wektorów własnych prostego oscylatora harmonicznego metodą operatorową.* Problem ten w przypadku jednowymiarowego oscylatora harmonicznego sprowadza się do znalezienia dozwolonych energii E_n oraz odpowiadających im stanów własnych dla układu kwantomechanicznego o hamiltonianie

$$H = (p^2/2m) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (3.37)$$

Stała sprężystości k została tu zastąpiona przez zmienną $\omega = (k/m)^{1/2}$. Mamy rozwiązać równanie

$$Hu_n = E_n u_n, \quad (3.38)$$

nazywane równaniem Schrödingera, dla wartości własnych energii E_n i odpowiadających im wektorów własnych u_n .

Jedna z metod rozwiązania tego problemu polega na wykorzystaniu podstawień

$$p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad x \rightarrow x, \quad (3.39)$$

z regułą komutacyjną

$$[p, x] = -i\hbar \quad (3.40)$$

i rozwiązaniu powstałych w ten sposób zwyczajnych równań różniczkowych przy założeniu odpowiedniego zachowania rozwiązań w nieskończoności. Wartości własne mogą być jednak wyznaczone inną, bardziej elegancką metodą, gdy posłużymy się algebrą operatorową lub macierzową. Metoda ta odgrywa ważną rolę w kwantowej teorii pola. Zbadajmy dwa operatory

$$a \equiv (xm\omega + ip) (2m\omega\hbar)^{-1/2}, \quad (3.41)$$

$$a^\dagger \equiv (xm\omega - ip) (2m\omega\hbar)^{-1/2}. \quad (3.42)$$

W literaturze podaje się różne definicje tych operatorów. Wiązą się one z hamiltonianem układu poprzez iloczyn aa^\dagger , istnieje więc pewna dowolność w wyborze czynnika mnożącego i fazy. Iloczyn a i a^\dagger jest równy

$$\begin{aligned} a^\dagger a &= (2m\omega\hbar)^{-1}(xmw - ip)(xmw + ip) = \\ &= (2m\omega\hbar)^{-1}[m^2\omega^2x^2 + p^2 - im\omega(px - xp)] = \\ &= (\hbar\omega)^{-1}(H - (i\omega/2)[p, x]) = (\hbar\omega)^{-1}(H - \hbar\omega/2), \end{aligned}$$

gdzie w ostatnim przekształceniu zastosowaliśmy regułę komutacyjną (3.40). W związku z tym możemy wyrazić za pomocą a i a^\dagger hamiltonian

$$H = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right). \quad (3.43)$$

Analogiczne rachunki pokazują, że

$$aa^\dagger = (\hbar\omega)^{-1}(H + \hbar\omega/2). \quad (3.44)$$

W efekcie

$$[a, a^\dagger] \equiv aa^\dagger - a^\dagger a = I. \quad (3.45)$$

Potrzebna nam będzie również znajomość komutatora H z a^\dagger i a .

$$[H, a^\dagger] = \hbar\omega \left[\left(a^\dagger aa^\dagger + \frac{1}{2} a^\dagger \right) - \left(a^\dagger a^\dagger a + \frac{1}{2} a^\dagger \right) \right] = \hbar\omega a^\dagger [a, a^\dagger] = \hbar\omega a^\dagger. \quad (3.46)$$

Podobnie

$$[H, a] = -\hbar\omega a. \quad (3.47)$$

Z zasad fizycznych wynika, że oscylator harmoniczny może znajdować się tylko w stanach o energii większej od zera. Można to również pokazać przy pomocy rachunku operatorowego. W § 4.4 wykorzystamy fakt, że operatory p i x są hermitowskie i w związku z tym mają rzeczywiste wartości własne, aby wykazać, że ich kwadraty mogą mieć jedynie dodatnie (rzeczywiste) wartości własne. W związku z tym hamiltonian może mieć jedynie dodatnie lub zerowe rzeczywiste wartości własne ($m, \omega > 0$). Niech $E_0 \geq 0$ oznacza najmniejszą energię oscylatora harmonicznego, tzw. *stan podstawowy* i niech u_0 będzie wektorem własnym odpowiadającym E_0^* . Wtedy

$$Hu_0 = E_0 u_0.$$

Teraz działamy operatorem a i dostajemy

$$aHu_0 = E_0 a u_0.$$

Stosując relacje komutacyjne (3.47), otrzymujemy

$$aHu_0 = (Ha + \hbar\omega a)u_0 = E_0 a u_0,$$

lub

$$Hau_0 = (E_0 - \hbar\omega) a u_0.$$

Powyższe równanie ma kształt równania na wartości własne z nową wartością własną $E_0 - \hbar\omega$ i nowym wektorem własnym au_0 . Z uwagi na to, że E_0 jest najniższą dozwoloną

* Zauważmy, że zostało tu założone, że u_0 jest *jedynym* wektorem własnym należącym do E_0 . Dla operatora a to założenie jest słuszne, o czym przekonamy się później. Jednak ten fakt nie wynika z relacji komutacyjnych.

energiją układu, równanie to może mieć jedynie trywialne rozwiązanie, tzn. $au_0 \equiv 0$. Jeżeli na to równanie podziałamy teraz operatorem a^\dagger , to

$$a^\dagger au_0 = (\hbar\omega)^{-1}(H - \hbar\omega/2)u_0 = 0$$

lub

$$Hu_0 = (\hbar\omega/2)u_0.$$

Stąd $E_0 = \hbar\omega/2$ jest najniższą dozwoloną energią, najniższym dozwolonym poziomem energii. Aby otrzymać inny poziom energetyczny, działamy na równanie $Hu_0 = E_0u_0$ operatorem a^\dagger

$$a^\dagger Hu_0 = (Ha^\dagger - \hbar\omega a^\dagger)u_0 = E_0 a^\dagger u_0$$

lub

$$H(a^\dagger u_0) = (E_0 + \hbar\omega)a^\dagger u_0.$$

A więc, $E_0 + \hbar\omega$ jest wartością własną energii hamiltonianu H odpowiadającą wektorowi własnemu $a^\dagger u_0$. Jeżeli znów zadziałamy operatorem a^\dagger na to równanie; otrzymamy

$$a^\dagger Ha^\dagger u_0 = (E_0 + \hbar\omega)(a^\dagger)^2 u_0.$$

Stosując reguły komutacyjne operatorów a^\dagger i H otrzymamy

$$(Ha^\dagger - \hbar\omega a^\dagger)(a^\dagger u_0) = (E_0 + \hbar\omega)(a^\dagger)^2 u_0$$

lub

$$H(a^\dagger)^2 u_0 = (E_0 + 2\hbar\omega)(a^\dagger)^2 u_0.$$

Zatem $E_0 + 2\hbar\omega$ jest wartością własną energii odpowiadającą wektorowi własnemu $(a^\dagger)^2 u_0$. Działając n razy operatorem a^\dagger dostajemy

$$H(a^\dagger)^n u_0 = (E_0 + n\hbar\omega)(a^\dagger)^n u_0.$$

Wielokrotne stosowanie operatora a^\dagger pozwoli otrzymać wszystkie wartości własne i wektory własne (zadanie 23). Operator ten nosi nazwę *operatora kreacji*. Oznaczając n -tą wartość własną przez E_n i n -ty wektor własny przez u_n mamy

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad \text{i} \quad u_n = c_n (a^\dagger)^n u_0, \quad (3.48)$$

gdzie c_n jest dowolną stałą. Zauważmy, że $c_0 = 1$.

Wektor u_0 możemy explicite wypisać wykorzystując równość $au_0 = 0$ i stosując zwykle podstawienie na p i x (3.39). Mamy więc

$$au_0 = (2m\omega\hbar)^{-1/2}[xm\omega + \hbar(d/dx)]u_0 = 0$$

lub

$$\frac{du_0}{dx} + \frac{m\omega}{\hbar}xu_0 = 0.$$

Równanie to można łatwo rozwiązać przez całkowanie. Daje ono

$$u_0 = N_0 e^{-(m\omega/2\hbar)x^2},$$

gdzie stała całkowania N_0 jest wyznaczona przez warunek normalizacyjny

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |u_0|^2 dx = |N_0|^2 (\hbar\pi/m\omega)^{1/2}.$$

Stąd

$$N_0 = (m\omega/\hbar\pi)^{1/4}$$

oraz

$$u_0 = (m\omega/\hbar\pi)^{1/4} e^{-(m\omega/2\hbar)x^2}.$$

Stosując równanie (3.48) możemy teraz obliczyć inne funkcje własne. Przy pomocy prostych algebraicznych przekształceń możemy wyznaczyć nawet stałe c_n . W § 4.4 pokażemy, że

$$c_n = (1/n!)^{1/2}. \quad (3.49)$$

Dla dopełnienia obrazu zauważmy, że funkcje własne generowane przez równanie (3.48) są proporcjonalne do wielomianów Hermite'a $H_n(y)$ mnożonych przez funkcję $\exp(-y^2/2)$. Tak więc

$$u_n(x) = N_n H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2}, \quad (3.50)$$

gdzie

$$\alpha^2 = m\omega/\hbar \quad \text{i} \quad N_n = \left(\frac{\alpha}{\pi^{1/2} 2^n n!} \right)^{1/2}.$$

Podajemy wyrażenia dla pierwszych trzech wielomianów Hermite'a

$$H_0(y) = 1, \quad H_1(y) = 2y, \quad H_2(y) = 4y^2 - 2.$$

Nie przedstawiłmy tu dowodu, że rozwiązanie może być przedstawione przy pomocy wielomianów Hermite'a. Można to łatwo wyprowadzić zapisując równanie (3.38) w postaci równania różniczkowego drugiego rzędu i rozwiązując je metodą rozwinięcia w szereg potęgowy.

Zakończymy ten przykład omówieniem działania operatora a na funkcje własne u_n . Pamiętając, że $au_0 = 0$ i zapisując $(a^\dagger)^n$ jako $a^{\dagger n}$ otrzymujemy

$$\begin{aligned} au_n &= c_n a a^{\dagger n} u_0 = \\ &= c_n \{ [a, a^\dagger] a^{\dagger n-1} u_0 + a^\dagger a a^{\dagger n-1} u_0 \} = \\ &= c_n \{ a^{\dagger n-1} u_0 + a^\dagger a a^{\dagger n-1} u_0 \} = \\ &= c_n \{ a^{\dagger n-1} u_0 + a^\dagger [a, a^\dagger] a^{\dagger n-2} u_0 + a^\dagger (a^\dagger a) a^{\dagger n-2} u_0 \} = \\ &= c_n \{ a^{\dagger n-1} u_0 + a^{\dagger n-1} u_0 + a^{\dagger 2} a a^{\dagger n-2} u_0 \} = \\ &= c_n \{ 2a^{\dagger n-1} + a^{\dagger 2} a a^{\dagger n-2} \} u_0. \end{aligned}$$

Powtarzając ten proces n razy otrzymujemy w końcu

$$au_n = c_n (n a^{\dagger n-1} u_0 + a^{\dagger n} a u_0) = c_n n a^{\dagger n-1} u_0$$

i dalej

$$au_n = n \frac{c_n}{c_{n-1}} (c_{n-1} a^{\dagger n-1} u_0) = n \frac{c_n}{c_{n-1}} u_{n-1} = n^{1/2} u_{n-1}. \quad (3.51)$$

Możemy także opisać działanie operatora a^\dagger na wektor u_n . Stosując równania (3.43) i (3.48) otrzymamy

$$Hu_n = \hbar\omega \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) u_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) u_n.$$

Stąd

$$a^\dagger a u_n = n u_n,$$

stosując następnie równanie (3.51) dostajemy

$$a^\dagger(n^{1/2}u_{n-1}) = nu_n,$$

które przy zamianie $n \rightarrow n+1$ przybiera postać

$$a^\dagger u_n = (n+1)^{1/2} u_{n+1}. \quad (3.52)$$

Z uwagi na równania (3.51) i (3.52) operatory a^\dagger i a są nazywane *operatorami kreacji i anihilacji*.

3.11. ILOCZYN KRONECKERA

W tym paragrafie chcemy omówić składanie operatorów liniowych działających w różnych przestrzeniach wektorowych. Do tej pory widzieliśmy, jak buduje się iloczyn dwu liniowych operatorów B_1 i B_2 działających w tej samej przestrzeni wektorowej U . Załóżmy, że mamy liniowy operator B działający na n -wymiarową przestrzeń U , który odwzorowuje wektory należące do U w wektory należące do U . Innymi słowy B rzutuje U w U lub symbolicznie

$$B: U \rightarrow U.$$

Podobnie, niech A działa w m -wymiarowej przestrzeni V :

$$A: V \rightarrow V.$$

Inną ważną klasę operatorów stanowią operatory liniowe, które odwzorowują U w V zachowując przy tym operacje liniowe. To znaczy, jeżeli C jest takim operatorem żądamy, by

$$C(\alpha x_1 + \beta x_2) = \alpha Cx_1 + \beta Cx_2.$$

Zauważmy, że aby powyższe równanie miało sens, przestrzenie U i V muszą być przestrzeniami wektorowymi nad tym samym ciałem skalarnym.

Tak jak w wypadku operatorów odwzorowujących U w siebie możemy operatory typu C przedstawić w postaci macierzy skalarniej. Niech $\{u_i\}$ będzie bazą przestrzeni U , a $\{v_i\}$ bazą przestrzeni V . Wtedy Cu_j jest wektorem z przestrzeni V i musi być liniową kombinacją wektorów v_i

$$Cu_j = \sum_{k=1}^m c_{kj} v_k, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Zauważmy, że macierz c_{kj} w ogólności jest prostokątna. Załóżmy, że macierz ta ma m wierszy i n kolumn. Wtedy, jeżeli x jest wektorem należącym do U , to

$$x = \sum_{j=1}^n \alpha_j u_j,$$

a jeżeli y jest wektorem należącym do V , to

$$y = \sum_{i=1}^m \beta_i v_i.$$

Czyli, jeżeli $y = Cx$, współczynniki β_i i α_i są związane równaniem

$$\beta_i = \sum_{j=1}^n c_{ij} \alpha_j, \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

Chcemy rozpatrywać zbiór liniowych operatorów odwzorowujących U w V jako przestrzeń wektorową. Wektorami tej nowej przestrzeni wektorowej są operatory. Teraz niech C reprezentuje macierz $m \times n$, o mn elementach. Nasza przestrzeń wektorowa jest mn -wymiarowa, ponieważ każdą macierz $m \times n$ można zapisać w postaci kombinacji liniowej mn macierzy

$$P_{11} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \end{bmatrix}, \quad P_{12} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \end{bmatrix}, \text{ itd.}$$

lub innymi słowy, mn macierzy zdefiniowanych przez

$$(P_{ij})_{kl} = \delta_{ik} \delta_{jl}. \quad (3.53)$$

Są one liniowo niezależne i rozpinają przestrzeń, stanowią więc bazę przestrzeni macierzy $m \times n$. Ponieważ jest ich mn , mamy mn -wymiarową przestrzeń wektorową, którą będziemy oznaczać przez \mathbb{L} . (Tworząc tę przestrzeń wektorową pamiętamy o warunkach liniowości typu $(A+B)x = Ax+Bx$ dla każdego $x \in U$ itd.)

Dla przykładu zbadajmy macierz 2×3 odwzorowującą trójwymiarową przestrzeń wektorową w przestrzeń dwuwymiarową

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix}.$$

W tym przypadku \mathbb{L} jest sześciowymiarowa i jeżeli przyjmiemy powyższą bazę, możemy zapisać C w postaci

$$\{C\} = 1 \times \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + 2 \times \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + 3 \times \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} + \\ + 4 \times \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} + 5 \times \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} + 6 \times \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

gdzie w nawiasach przedstawiliśmy elementy przestrzeni \mathbb{L} . W tym przypadku $\{C\}$ może być reprezentowane w tej szczególnej (lecz bardzo naturalnej) bazie przez kolumnę

$$\{C\} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix}.$$

Po tej wstępnej dyskusji można łatwo wprowadzić definicję *iloczynu Kroneckera* (*iloczynu prostego*). Niech A i B będą operatorami określonymi w V i U , które odpowiednio odwzorowują V i U w siebie i niech C będzie operatorem, który odwzorowuje U w V .

Dla naszych operatorów A i B istnieje inny operator, odwzorowujący U w V , który chcielibyśmy związać w naturalny sposób z C , mianowicie

$$C' = ACB^T.$$

Tak więc B^T przekształca przestrzeń U w siebie, C rzutuje przestrzeń U w przestrzeń V , a na koniec A odwzorowuje V w V . Aby iloczyn Kroneckera miał własności symetrii, musi w powyższym wzorze wystąpić B^T zamiast B .

Zbadajmy teraz $\{C\}$ i $\{C'\}$, traktując je jako elementy przestrzeni \mathbb{L} . Definiujemy iloczyn Kroneckera operatorów A i B , $A \otimes B$, jako operator działający w przestrzeni \mathbb{L} , przeprowadzający $\{C\}$ w $\{C'\}$

$$(A \otimes B) \{C\} = \{C'\} = \{ACB^T\}, \quad (3.54)$$

dla każdego $C \in \mathbb{L}$.

Z równania (3.54) można łatwo wyprowadzić własności iloczynu Kroneckera. Mamy więc

$$I \otimes I = I, \quad (3.55)$$

gdzie I oznacza operator jednostkowy. Z równania (3.54) wynika również, że

$$(A_1 + A_2) \otimes B = A_1 \otimes B + A_2 \otimes B, \quad (3.56)$$

a także

$$A \otimes (B_1 + B_2) = A \otimes B_1 + A \otimes B_2. \quad (3.57)$$

Teraz zbadajmy

$$\begin{aligned} (A_1 \otimes B_1) (A_2 \otimes B_2) \{C\} &= (A_1 \otimes B_1) \{A_2 C B_2^T\} = \\ &= \{A_1 A_2 C B_2^T B_1^T\} = \\ &= \{A_1 A_2 C (B_1 B_2)^T\} = \\ &= (A_1 A_2 \otimes B_1 B_2) \{C\}. \end{aligned}$$

Znaleźliśmy więc ważną własność

$$(A_1 \otimes B_1) (A_2 \otimes B_2) = (A_1 A_2 \otimes B_1 B_2), \quad (3.58)$$

gdzie $A_1, A_2 \in V$ i $B_1, B_2 \in U$. To, że prawa strona równania (3.58) jest równa $A_1 A_2 \otimes B_1 B_2$, a nie $A_1 A_2 \otimes B_2 B_1$, jest spowodowane występowaniem operatora B^T (a nie B) w naszej definicji iloczynu Kroneckera. Pozostawiamy czytelnikowi dowód, że jeżeli istnieją operacje odwrotne A^{-1} i B^{-1} to

$$(A \otimes B)^{-1} = A^{-1} \otimes B^{-1}. \quad (3.59)$$

Na zakończenie zobaczmy, jak wygląda $A \otimes B$ w bazie (3.53). Chcielibyśmy wpiąć uwagę na drugorzędny problem związany z przyjętą notacją. Nasze wektory bazy P_{ij} są indeksowane przez dwa wskaźniki zamiast zwykle stosowanego jednego wskaźnika. Jest to związane z tym, że wektorami bazy są macierze. Będziemy więc mówić o ij -składowej wektora. Podobnie będziemy mówić o (ij) , (kl) -elemente macierzy operatora $(A \otimes B)$.

Iloczyn Kroneckera możemy więc zapisać w następujący sposób

$$(A \otimes B) \{P_{kl}\} = \sum_{i,j} [A \otimes B]_{ij,kl} \{P_{ij}\},$$

gdzie (ij) , (kl) -element operatora $A \otimes B$ oznaczyliśmy przez $[A \otimes B]_{ij,kl}$. Lecz z uwagi na równanie (3.54)

$$(A \otimes B) \{P_{kl}\} = \{A P_{kl} B^T\},$$

dostajemy więc

$$\{AP_{kl}B^T\} = \sum_{i,j} [A \otimes B]_{ij,kl} \{P_{ij}\}.$$

Innymi słowy liczba $[A \otimes B]_{ij,kl}$ jest po prostu ij -tym elementem macierzy $AP_{kl}B^T$, więc

$$[A \otimes B]_{ij,kl} = \sum_{\mu,\nu} A_{i\mu} (P_{kl})_{\mu\nu} B_{\nu j}^T.$$

Lecz z równania (3.53) wynika, że

$$[A \otimes B]_{ij,kl} = \sum_{\mu,\nu} A_{i\mu} \delta_{k\mu} \delta_{l\nu} B_{\nu j}^T = A_{ik} B_{lj}^T.$$

Ponieważ $B_{ij}^T = B_{ji}$, otrzymujemy w końcu, że

$$[A \otimes B]_{ij,kl} = A_{ik} B_{jl}, \quad (3.60)$$

czyli znając elementy A i B można łatwo otrzymać elementy operatora $A \otimes B$.

Zauważmy, że ślad $A \otimes B$ jest równy

$$\text{Tr}(A \otimes B) = \sum_{i,j} [A \otimes B]_{ij,ij} = \sum_{i,j} A_{ii} B_{jj} = (\text{Tr} A) (\text{Tr} B),$$

więc

$$\text{Tr}(A \otimes B) = (\text{Tr} A) (\text{Tr} B). \quad (3.61)$$

Związek ten okaże się bardzo użyteczny w teorii grup.

Warto zobaczyć, jak te wielkości zapisuje się w postaci macierzowej. Aby to zrobić, musimy się umówić co do kolejności wskaźników (ij). Będziemy wypisywać wektor kolumnowy, reprezentujący element z przestrzeni L , w następującym porządku

$$\begin{bmatrix} C_{11} \\ C_{12} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ C_{1n} \\ C_{21} \\ C_{22} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ C_{2n} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ C_{m1} \\ C_{m2} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ C_{mn} \end{bmatrix}$$

Tak więc nasze macierze reprezentujące obiekty typu $A \otimes B$ przybiorą postać

$$\begin{bmatrix} [A \otimes B]_{11,11} & [A \otimes B]_{11,12} & \dots & [A \otimes B]_{11,1n} & [A \otimes B]_{11,21} & \dots & [A \otimes B]_{11,mn} \\ [A \otimes B]_{12,11} & [A \otimes B]_{12,12} & \dots & [A \otimes B]_{12,1n} & [A \otimes B]_{12,21} & \dots & [A \otimes B]_{12,mn} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ [A \otimes B]_{1n,11} & [A \otimes B]_{1n,12} & \dots & [A \otimes B]_{1n,1n} & [A \otimes B]_{1n,21} & \dots & [A \otimes B]_{1n,mn} \\ [A \otimes B]_{21,11} & [A \otimes B]_{21,12} & \dots & [A \otimes B]_{21,1n} & [A \otimes B]_{21,21} & \dots & [A \otimes B]_{21,mn} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ [A \otimes B]_{mn,11} & [A \otimes B]_{mn,12} & \dots & [A \otimes B]_{mn,1n} & [A \otimes B]_{mn,21} & \dots & [A \otimes B]_{mn,mn} \end{bmatrix}$$

Stosując równanie (3.60) dostajemy

$$\begin{bmatrix} A_{11}B_{11} & A_{11}B_{12} & \dots & A_{11}B_{1n} & A_{12}B_{11} & \dots & A_{12}B_{1n} & \dots & A_{1m}B_{1n} \\ A_{11}B_{21} & A_{11}B_{22} & \dots & A_{11}B_{2n} & A_{12}B_{21} & \dots & A_{12}B_{2n} & \dots & A_{1m}B_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ A_{11}B_{n1} & A_{11}B_{n2} & \dots & A_{11}B_{nn} & A_{12}B_{n1} & \dots & A_{12}B_{nn} & \dots & A_{1m}B_{nn} \\ A_{21}B_{11} & A_{21}B_{12} & \dots & A_{21}B_{1n} & A_{22}B_{11} & \dots & A_{22}B_{1n} & \dots & A_{2m}B_{1n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ A_{21}B_{n1} & A_{21}B_{n2} & \dots & A_{21}B_{nn} & A_{22}B_{n1} & \dots & A_{22}B_{nn} & \dots & A_{2m}B_{nn} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ A_{m1}B_{n1} & A_{m1}B_{n2} & \dots & A_{m1}B_{nn} & A_{m2}B_{n1} & \dots & A_{m2}B_{nn} & \dots & A_{mm}B_{nn} \end{bmatrix}$$

Aby sprawdzić ten wynik, zapiszemy macierz reprezentującą $A \otimes B$ w postaci bloków o wymiarach $n \times n$ (jest ich m^2) zaczynając z górnego lewego rogu

$$A \otimes B \rightarrow \begin{bmatrix} A_{11}B & A_{12}B & \dots & A_{1n}B \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{m1}B & A_{m2}B & \dots & A_{mn}B \end{bmatrix}$$

Zastąpiliśmy ij -element macierzy A , A_{ij} , przez macierz $A_{ij}B$ o wymiarach $n \times n$. Zauważmy, że korzystając z tej postaci łatwo wyprowadzić twierdzenie o śladzie (równanie (3.61)).

Zbadajmy teraz dla przykładu macierz 2×3

$$C = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix}$$

Macierz ta, jeżeli będziemy ją uważać za wektor z przestrzeni \mathbb{L} , może być reprezentowana przez

$$\{C\} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix}.$$

Założmy teraz, że

$$B = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 1 \end{bmatrix}, \quad \text{a} \quad B^T = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

i

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Operator B odwzorowuje U w siebie, a operator A odwzorowuje V w siebie. Zatem

$$C' = ACB^T = \begin{bmatrix} 4 & 7 & 10 \\ 24 & 45 & 60 \end{bmatrix},$$

czyli

$$\{C'\} \rightarrow \begin{bmatrix} 4 \\ 7 \\ 10 \\ 24 \\ 45 \\ 60 \end{bmatrix}.$$

Macierz $A \otimes B$ można łatwo wyliczyć, na przykład z równania (3.60). Otrzymamy

$$A \otimes B \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 2 & 0 & 2 \\ 2 & 1 & 1 & 4 & 2 & 2 \\ 1 & 3 & 1 & 2 & 6 & 2 \end{bmatrix}.$$

Pozostawiamy czytelnikowi pokazanie, że rzeczywiście

$$(A \otimes B) \{C\} = \{C'\}.$$

ZADANIA

1. Udowodnić, że n zespolonych pierwiastków n -tego stopnia z jedności tworzy grupę abelową ze względu na mnożenie liczb zespolonych.

Wskazówka: Ze wzoru de Moivre'a wynika, że pierwiastki n -tego stopnia z jedności są równe

$$e_k = \cos \frac{2k\pi}{n} + i \sin \frac{2k\pi}{n} = e^{2ik\pi/n}, \quad k = 0, 1, \dots, n-1,$$

gdzie $i^2 = -1$.

2. Udowodnić, że trzy wektory w przestrzeni trójwymiarowej są liniowo zależne wtedy i tylko wtedy, gdy $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{C}) = 0$.

3. Wykazać, że przestrzeni wektorowej uporządkowanych ciągów n liczb rzeczywistych, wektory

$$\begin{aligned}x_1 &= (1, 1, \dots, 1, 1), \\x_2 &= (0, 1, \dots, 1, 1), \\x_3 &= (0, 0, 1, \dots, 1, 1), \\&\vdots \\&\vdots \\&\vdots \\x_n &= (0, 0, \dots, 0, 1)\end{aligned}$$

są liniowo niezależne.

4. Udowodnić, że w n -wymiarowej przestrzeni wektorowej zbiór każdych $n+1$ wektorów jest liniowo zależny.

5. Udowodnić, że jeżeli zbiór n wektorów $\{x_i\}$ jest bazą przestrzeni V , to zbiór $\{c_i x_i\}$ jest także bazą przestrzeni V , gdy c_i są dowolnymi stałymi różnymi od zera. Podać interpretację geometryczną.

6. Udowodnić, że baza jest największym zbiorem liniowo niezależnych wektorów.

7. a) Udowodnić, że dwie macierze diagonalne stopnia n są zawsze przemienne (komutują), a ich iloczyn jest także macierzą diagonalną.

b) Jeżeli A komutuje ze wszystkimi macierzami diagonalnymi, to macierz A jest diagonalna.

8. Udowodnić, że macierz idempotentna, która nie jest macierzą jednostkową, jest osobliwa.

9. Definiujemy komutator dwóch macierzy $[A, B] = AB - BA$ oraz antykomutator $\{A, B\} = AB + BA$. Pokazać, że zachodzą następujące związki

$$\text{a) } [A, B] = -[B, A], \quad \text{b) } [AB, C] = A[B, C] + [A, C]B,$$

$$\text{c) } [A, B, C] = A\{B, C\} - \{A, C\}B, \quad \text{d) } [A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0.$$

10. Pokazać, że jeżeli odwzorowanie liniowe A posiada lewą odwrotność (to znaczy $BA = I$), to posiada również prawą odwrotność (to znaczy $AB = I$).

Wskazówka: Zbadać odwzorowanie $C = AB - I + B$, które jest równe odwzorowaniu B , jeżeli powyższe twierdzenie jest prawdziwe (należy to udowodnić).

11. Udowodnić, że każda antysymetryczna macierz nieparzystego stopnia jest osobliwa. Macierz spinowa Pauliego

$$\sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}$$

jest macierzą antysymetryczną drugiego stopnia. Ponieważ $\sigma_y^2 = I$, σ_y posiada odwrotność $\sigma_y^{-1} = \sigma_y$.

12. Spinowe macierze Pauliego są zdefiniowane następująco

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix},$$

gdzie $i = \sqrt{-1}$. Udowodnić, że macierze te antykomutują:

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{ij}, \quad \sigma_i \sigma_j - \sigma_j \sigma_i = 2i \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} \sigma_k.$$

13. Udowodnić, że dla dowolnych macierzy $n \times n$ $\text{Tr}(AB) = \text{Tr}(BA)$. Wykorzystać to przy dowodzeniu, że jeżeli macierze C i D są podobne, to $\text{Tr}(C) = \text{Tr}(D)$.

14. Niech A będzie rzeczywistą macierzą n -tego stopnia. Udowodnić, że macierz $A = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $\text{Tr}(A^T A) = 0$.

15. Niech A będzie idempotentną macierzą n -tego stopnia (tzn. $A^2 = A$).

a) Udowodnić, że wartości własne tej macierzy są równe 0 lub 1.

b) Można łatwo pokazać, że macierz idempotentną można zawsze sprowadzić do postaci diagonalnej przy pomocy przekształcenia podobieństwa. Opierając się na tym udowodnić, że $\text{Tr} A$ jest liczbą całkowitą oraz, że $0 \leq \text{Tr} A \leq n$.

16. Pokazać, że wartości własne macierzy

$$M = \begin{bmatrix} 3 & 5 & 8 \\ -6 & -10 & -16 \\ 4 & 7 & 11 \end{bmatrix}$$

są równe $\lambda = 0, 1, 3$, a odpowiednie wektory własne są następujące

$$\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} 4 \\ -8 \\ 5 \end{bmatrix}.$$

Zbudować macierz diagonalizującą P , udowodnić, że istnieje macierz odwrotna P^{-1} , wyliczyć ją i sprawdzić, że macierz $P^{-1}MP$ jest diagonalna i że na diagonalu ma wartości własne. Zauważmy, że $\det M = 0$. Czy jest prawdą, że każda dająca się zdiagonalizować macierz o zerowej wartości własnej jest osobliwa?

17. Zapiszmy dwuwymiarową macierz obrotu dla obrotu osi współrzędnych o kąt θ w postaci

$$A = \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}.$$

Znaleźć wartości i wektory własne tej macierzy. Znaleźć macierz diagonalizującą macierz A , to znaczy macierz P , dla której $P^{-1}AP$ jest macierzą diagonalną. Wykazać, że P jest właściwą macierzą znajdując odwrotność P^{-1} i tworząc iloczyn $P^{-1}AP$.

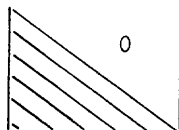
18. Pokazać, że dla macierzy A

$$A = \begin{bmatrix} 1 & a \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

nie istnieje nieosobliwa macierz P stopnia 2-go taka, że $P^{-1}AP = D$, gdzie D jest macierzą diagonalną. Przykład ten ilustruje fakt, że nie każda macierz może być diagonalizowalna przez przekształcenie podobieństwa.

19. Pokazać, że wyznacznik każdej macierzy jest równy iloczynowi jego wartości własnych i, że ślad macierzy jest równy sumie jego wartości własnych. Opierając się na tym wykazać, że macierz, która ma zerową wartość własną, nie jest odwracalna.

20. Pokazać, że przez systematyczne dodawanie i odejmowanie od siebie wierszy każdy wyznacznik może być sprowadzony do wyznacznika przedstawionego na rys. 3.4, w którym nad diagonalą występują same zera. Oczywiście ten sam proces można teraz zastosować do kolumn, co sprowadza problem do trywialnego obliczania wyznacznika macierzy diagonalnej. Jednakże obliczanie staje się trywialne już po pierwszym kroku. Dlaczego?



Rys. 3.4.

21. Wyrazić macierz odwrotną do danej macierzy A przez wartości własne i wektory własne tej macierzy. Założyć, że macierz odwrotna istnieje i że wektory własne macierzy A rozpinają przestrzeń, na którą działa A .

22. Zbadać macierz n -tego stopnia, której elementy są dane przez $Q_{ij} = v_i v_j$, gdzie v jest wektorem w przestrzeni n -wymiarowej. Znaleźć wartości i wektory własne macierzy Q . Czy wszystkie wektory własne są jednostkowe?

23. Pokazać, że wartości własne operatora harmonicznego mają postać $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$.

Wskazówka: Założyć, że istnieje wektor własny y i wartość własna λ związane równaniem $Hy = \lambda y$ i korzystając z komutatora $[a, H] = \hbar\omega a$, wygenerować wartości własne $\lambda - \hbar\omega$, $\lambda - 2\hbar\omega$, itd., a następnie wykazać sprzeczność.

24. Pokazać, że jeżeli istnieją macierze A^{-1} i B^{-1} , to $A^{-1} \otimes B^{-1} = (A \otimes B)^{-1}$.

25. Wykazać, że jeżeli macierze A i B są podobne, to macierze A^n i B^n też są podobne.

26. Pokazać, że $(C+D)^{-1} = C^{-1} - C^{-1}D(C+D)^{-1}$. Jeżeli C jest „małe” to możemy iterować $(C+D)^{-1} = C^{-1} + C^{-1}DC^{-1} + C^{-1}DC^{-1}DC^{-1} \dots$, co jest operatorową analogią znanego rozwinięcia $(x+y)^{-1}$, gdy y jest „małe”.

27. *Macierze Diraca.* Założyć, że dla ustalonego n istnieją cztery macierze n -tego stopnia, spełniające regułę antykomutacyjną $\gamma_i \gamma_j + \gamma_j \gamma_i = 2I\delta_{ij}$, gdzie $i, j = 1, 2, 3, 4$.

a) Udowodnić, że $\gamma_i^2 = I$ (macierz jednostkowa) dla $i = 1, 2, 3, 4$.

b) Udowodnić, że $\det \gamma_i = \pm 1$ dla $i = 1, 2, 3, 4$.

c) Pokazać, że jeżeli λ jest wartością własną którejś z macierzy γ_i , to $\lambda = \pm 1$.

d) Pokazać, że $\text{Tr} \gamma_i = 0$, dla $i = 1, 2, 3, 4$. Ostatnia część tego zadania polega na pokazaniu, że nie istnieje zbiór czterech macierzy stopnia n mniejszego niż 4, spełniających powyższe reguły antykomutacyjne. Można to zrobić na wiele sposobów. Jeden polega na wykonaniu następujących dwu kroków.

e) Pokazać, że nie można znaleźć czterech macierzy stopnia nieparzystego spełniających reguły antykomutacyjne.

f) Pokazać, że każde cztery macierze stopnia 2 nie mogą spełniać reguł antykomutacyjnych.

Wskazówka. Trzy macierze Pauliego stopnia 2 spełniają związki

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2I\delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3$$

i każda macierz 2-go stopnia może być przedstawiona w postaci liniowej kombinacji trzech macierzy Pauliego i macierzy jednostkowej stopnia 2.]

Uwaga: Istnienie czterech niejednostkowych macierzy 4×4 spełniających te reguły dowodzi się przy standardowym wyprowadzeniu równania Diraca. Zadanie to pokazuje, że nie należy się niepokoić, gdy widzi się cztery macierze stopnia niższego niż 4, które spełniają reguły antykomutacyjne.

28. Pokazać, że operator

$$T = I + \frac{x D}{1!} + \frac{(x D)^2}{2!} + \dots + \frac{(x D)^n}{n!},$$

gdzie $D = d/dt$, działa jak operator przesunięcia w przestrzeni wielomianów (w zmiennej t) stopnia $\leq n$, to znaczy, że

$$Tf(t) = f(t+x),$$

gdzie $f(t)$ jest wielomianem stopnia n . Tu kończy się zadanie. Teraz opisemy zastosowanie tego wyniku, typowego dla rozwiązań różnych zagadnień fizyki przy użyciu symbolicznych operatorów (np. metoda Blankenbeclera otrzymywania całek funkcji rozkładu Fermiego-Diraca*). Prezentowane tu zastosowanie zawdzięczamy przede wszystkim L. N. Handowi. Takie same wyniki osiągnął przy zastosowaniu innej metody Jacob Bernoulli (1654–1705).

Zauważmy wprawdzie, że w przestrzeni funkcji ciągłych, nieskończenie razy różniczkowalnych, operator przesunięcia jest dany wzorem

$$T = e^{xD}.$$

Przy pomocy tego wzoru można otrzymać kilka ciekawych wyników. Na przykład, można otrzymać ogólne wyrażenie na $\sum_{k=0}^{k=n} k^m$ dla każdej stałej $n \geq 0$ i $m > 0$. Niech $F_m(n) = \sum_{k=0}^n k^m$. Oczywiście $F_m(n) - F_m(n-1) = n^m$. Ponieważ $F_m(n)$ jest wielomianem**, możemy zapisać $e^{-D} F_m(n) = F_m(n-1)$ oraz

$$F_m(n) - F_m(n-1) = (1 - e^{-D}) F_m(n) = n^m$$

lub symbolicznie

$$F_m(n) = \left(\frac{1}{1 - e^{-D}} \right) n^m.$$

Teraz

$$\frac{1}{1 - e^{-x}} = x^{-1} + \frac{1}{2} + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j B_{j+1}}{[2(j+1)]!} x^{2j+1},$$

gdzie B_i są liczbami Bernoulliego

$$B_1 = \frac{1}{6}, B_2 = \frac{1}{30}, B_3 = \frac{1}{42}, B_4 = \frac{1}{30}, \text{ itd.}$$

(Patrz tablice matematyczne). Jeżeli zastosujemy ten szereg dla $x = D$ (interpretując D^{-1} jako całkowanie) i zauważymy, że $D^p n^m = [m!/(m-p)!] n^{m-p}$, to możemy obliczyć $F_m(n)$.

$$F_m(n) = \frac{n^{m+1}}{m+1} + C_m + \frac{n^m}{2} + \sum_{j=0}^J \frac{(-1)^j B_{j+1} m!}{[2(j+1)]! [m - (2j+1)]!} n^{[m - (2j+1)]},$$

* Patrz Kittel, *Elementary Statistic Physics*, New York, Wiley 1958, § 20.

** Patrz Stewart, *Theory of Numbers* New York Macmillan 1952, p. 19.

gdzie J jest równy liczbie całkowitej $(m-1)/2$ lub $(m-2)/2$. Stała całkowania C_m może być określona z warunku $F_m(0) = 0$. Stąd natychmiast widać, że $C_m = 0$, jeżeli m jest parzyste i $C_m = (-1)^{(m+1)/2} B_{(m+1)/2} / (m+1)$ gdy m jest nieparzyste; innymi słowy wybieramy C_m tak, by w $F_m(n)$ nie występował stały wyraz. Na przykład

$$F_1(n) = \sum_{k=0}^n k = \frac{n^2}{2} + C_1 + \frac{n}{2} + \frac{B_1}{2}.$$

Aby spełnić warunek $F_1(0) = 0$, musimy wybrać stałą równą $-B_1/2$, co prowadzi do następującego wyniku

$$F_1(n) = \frac{1}{2} (n^2 + n).$$

Podobnie znajdujemy wzory

$$F_2(n) \equiv \sum_{k=0}^n k^2 = \frac{n^3}{3} + \frac{n^2}{2} + \frac{n}{6} = \frac{1}{6} n(n+1)(2n+1),$$

$$F_3(n) \equiv \sum_{k=0}^n k^3 = \frac{n^4}{4} + \frac{n^3}{2} + \frac{n^2}{4} = \left[\frac{n(n+1)}{2} \right]^2,$$

$$F_4(n) \equiv \sum_{k=0}^n k^4 = \frac{n^5}{5} + \frac{n^4}{2} + \frac{n^3}{3} - \frac{n}{30},$$

$$F_5(n) \equiv \sum_{k=0}^n k^5 = \frac{n^6}{6} + \frac{n^5}{2} + \frac{5}{12} n^4 - \frac{n^2}{12}.$$

Oczywiście „ściśłość” tego wyprowadzenia pozostawia wiele do życzenia. Jednakże fakt, że udało się to otrzymać w ten sposób, nasuwa przypuszczenie, że te same wyniki można otrzymać stosując poprawniejsze z matematycznego punktu widzenia rozumowanie. Bardzo często nowe osiągnięcia matematyki wynikają z formalizacji tego typu „wypraw w nieznanie”. Teoria dystrybucji, która formalizuje funkcje symboliczne takie jak funkcja delta, była stosowana przez fizyków o 5 lat wcześniej zanim ją sformułowano ściśle. Przedstawiony przykład jest jednakże opisem wyników znanych od dawna i ściśle wyprowadzonych. Prezentujemy go częściowo jako antidotum na bardziej ścisły materiał zawarty w tym i w następnych rozdziałach.

LITERATURA POMOCNICZA

Mostowski, A., M. Stark, *Elementy algebry wyższej*, Warszawa, 1968

Zubarski, G. J., *Teoria grup i jej zastosowanie w fizyce*, Warszawa, 1961

Hamermesh, M., *Teoria grup w zastosowaniu do zagadnień fizycznych*, Warszawa, 1968

PRZESTRZENIE WEKTOROWE W FIZYCE

WSTĘP

W naszej dotychczasowej analizie przestrzeni wektorowych nie występowały pojęcia długości i kąta. Stąd też niewiele można było znaleźć konkretnych zastosowań tego formalizmu w fizyce. W niniejszym rozdziale struktura przestrzeni wektorowych zostanie wzbogacona przez dodanie funkcji skalarnej, tzw. iloczynu *wewnętrznego* (skalarnego), przy pomocy którego można zdefiniować długość wektora i kąt pomiędzy dwoma wektorami. Przestrzenie wektorowe, w których został zdefiniowany iloczyn wewnętrzny, nazywamy *przestrzeniami z iloczynem wewnętrznym*. Badanie przestrzeni z iloczynem wewnętrznym pozwoli nam powiązać nasz formalizm z fizyką, toteż w następnych paragrafach tego rozdziału przedyskutujemy kilka przykładów z fizyki klasycznej i kwantowej.

4.1. ILOCZYN WEWNĘTRZNY

W § 1.3 zdefiniowaliśmy iloczyn skalarny dwóch wektorów w rzeczywistej przestrzeni trójwymiarowej. Zgodnie z używaną tu notacją, zapisywaliśmy iloczyn skalarny wektorów $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ i $\mathbf{y} = (y_1, y_2, y_3)$ jako

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} \equiv \sum_{i=1}^3 x_i y_i.$$

W notacji tej długość wektora \mathbf{x} jest oznaczana przez $|\mathbf{x}|$ i dana równaniem

$$|\mathbf{x}| \equiv (\mathbf{x} \cdot \mathbf{x})^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^3 x_i^2 \right)^{1/2}.$$

Kąt θ pomiędzy dwoma wektorami \mathbf{x} i \mathbf{y} dany jest wzorem

$$\theta = \arccos \left[\frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}}{|\mathbf{x}| |\mathbf{y}|} \right].$$

W abstrakcyjnych przestrzeniach wektorowych będziemy oznaczali długość, czyli wartość bezwzględną wektora \mathbf{x} , symbolem $\|\mathbf{x}\|$, rezerwując pojedyncze kreski pionowe dla oznaczenia wartości bezwzględnej liczby zespolonej. W teorii przestrzeni wektorowych

przyjęto nazywać iloczyn skalarny *iloczynem wewnętrznym* i zapisywać iloczyn wewnętrzny dwóch wektorów x i y jako (x, y) . W notacji tej długość wektora x jest równa

$$\|x\| \equiv (x, x)^{1/2}, \quad (4.1)$$

a kąt θ między dwoma wektorami

$$\theta = \arccos \left[\frac{(x, y)}{\|x\| \|y\|} \right]. \quad (4.2)$$

Dopóki ograniczamy się do rzeczywistych przestrzeni trójwymiarowych, możemy zdefiniować wielkość (x, y) dokładnie tak, jak definiowaliśmy $x \cdot y$. To znaczy, jeżeli $x = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$, a $y = (\eta_1, \eta_2, \eta_3)$, to

$$(x, y) \equiv \sum_{i=1}^3 \xi_i \eta_i. \quad (4.3)$$

Uogólnienie na przypadek rzeczywistych przestrzeni wektorowych n -wymiarowych jest natychmiastowe — musimy tylko rozszerzyć sumę po i do wartości n . Niemniej jednak, jeśli spróbujemy przyjąć tę definicję iloczynu wewnętrznego w przypadku *zespolonej* przestrzeni wektorowej, natychmiast napotkamy na pewne trudności. Rozważmy na przykład „długość” jednowymiarowego wektora ix . Zgodnie z podaną wyżej definicją jest ona równa

$$\|ix\| = (ix, ix)^{1/2} = (-x^2)^{1/2},$$

a więc czysto urojona, jeśli x jest rzeczywiste. Ale funkcja mająca reprezentować odległość musi przyjmować wartości rzeczywiste. Moglibyśmy przezwyciężyć tę trudność, ograniczając się do rzeczywistych przestrzeni wektorowych, ale tylko za cenę straty wielu ważnych zastosowań w fizyce. W szczególności w teorii kwantowej występują przestrzenie rozpięte nad ciałem liczb zespolonych.

Można znaleźć proste, choć pozornie nieco sztuczne wyjście z tej sytuacji. Niech x i y będą wektorami, które w danej bazie mają *zespolone* składowe $(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ i $(\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_n)$. Zdefiniujemy iloczyn wewnętrzny tych wektorów nie przy pomocy (4.3), a poprzez równanie

$$(x, y) \equiv \sum_{i=1}^n \xi_i^* \eta_i. \quad (4.4)$$

Gwiazdka (*) oznacza sprzężenie zespolone liczby ξ_i należącej do ciała liczb zespolonych*. Przy tej definicji iloczynu wewnętrznego długość wektora x jest

$$\|x\| \equiv (x, x)^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^n \xi_i^* \xi_i \right)^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^n |\xi_i|^2 \right)^{1/2}, \quad (4.5)$$

gdzie $|\xi_i|$ jest bezwzględną wartością ξ_i . Ponieważ $|\xi_i|^2 \geq 0$, więc $\|x\|$ jest zawsze wielkością rzeczywistą. Ponadto, jeśli przestrzeń wektorowa jest rzeczywista, $\xi_i = \xi_i^*$ i definicja ta sprowadza się do znanej definicji (4.3).

* Jeśli $z = a + ib$, gdzie $i \equiv \sqrt{-1}$, to $z^* = a - ib$. Wartość bezwzględna z jest $|z| \equiv (zz^*)^{1/2} = (a^2 + b^2)^{1/2}$.

W zespolonej przestrzeni wektorowej iloczyn wewnętrzny nie jest symetryczny tak jak w rzeczywistej. Znaczy to, że

$$(x, y) \neq (y, x),$$

zachodzi natomiast związek

$$(x, y) = (y, x)^*. \quad (4.6)$$

Niemniej, w zastosowaniach definicja ta okazuje się zadowalająca.

Podamy teraz formalną definicję przestrzeni z iloczynem wewnętrznym.

Definicja 4.1. *Iloczynem wewnętrznym* w przestrzeni wektorowej (rzeczywistej lub zespolonej) jest funkcja o wartościach liczbowych, której argumentem jest uporządkowana para wektorów x i y , przy czym

1. $(x, y) = (y, x)^*$;
2. $(\alpha x + \beta y, z) = \alpha^*(x, z) + \beta^*(y, z)$, gdzie α i β są skalarami z ciała, nad którym rozpięta jest przestrzeń wektorowa;
3. $(x, x) \geq 0$ dla każdego x ; $(x, x) = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $x = 0$.

Przestrzeń z iloczynem wewnętrznym jest przestrzenią wektorową, w której został zdefiniowany iloczyn wewnętrzny. Rzeczywistą przestrzeń wektorową z iloczynem wewnętrznym nazywamy przestrzenią *euklidesową*; zespoloną przestrzeń z iloczynem wewnętrznym nazywamy przestrzenią *unitarną*.

W rzeczywistej przestrzeni wektorowej sprzężenie zespolone w (1) i (2) nic nie zmienia i może być opuszczone. W każdym przypadku, czy to rzeczywistym, czy zespolonym, (1) implikuje, że (x, x) jest rzeczywiste, a więc nierówność (3) ma sens. Wielkość $(x, x)^{1/2} \equiv \|x\|$ jest często nazywana *normą* wektora x . Zauważmy, że

$$\|ax\| = (ax, ax)^{1/2} = [a^*a(x, x)]^{1/2} = |a| \cdot \|x\|.$$

Z (1) i (2) wynika, że $(x, \alpha y) = \alpha(x, y)$.

Warunek (3) mówi, że iloczyn wewnętrzny jest formą *dodatnio określoną* — jest dodatni, o ile wektor x nie jest równy wektorowi zerowemu; w przeciwny razie przyjmuje *dokładnie* wartość zero. W dalszym ciągu czytelnik przekona się, że pewne twierdzenia będzie można dowieść bez korzystania z tej własności.

Przykłady iloczynu wewnętrznego

1. Jak widzieliśmy, jeśli

$$x = (\xi_1, \dots, \xi_n) \quad \text{i} \quad y = (\eta_1, \dots, \eta_n),$$

to funkcja

$$(x, y) \equiv \sum_{i=1}^n \xi_i^* \eta_i$$

spełnia wszystkie aksjomaty iloczynu wewnętrznego.

2. Jeśli $x(t)$ i $y(t)$ są wielomianami w zespolonej przestrzeni wektorowej P , zdefiniowanymi na odcinku domkniętym $[0, 1]$, to ich iloczynem wewnętrznym może być

$$(x, y) = \int_0^1 x(t)^* y(t) dt.$$

3. Jeśli $x = \langle \xi_1, \dots, \xi_n \rangle$ i $y = \langle \eta_1, \dots, \eta_n \rangle$ są wektorami kolumnowymi nad ciałem liczb rzeczywistych, a P jest macierzą diagonalną, której elementy diagonalne są liczbami rzeczywistymi dodatnimi, to możemy zdefiniować iloczyn wewnętrzny jako

$$(x, y) \equiv x^T P y = (\xi_1, \dots, \xi_n) \begin{bmatrix} P_{11} & 0 \\ & \ddots \\ 0 & P_{nn} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \vdots \\ \eta_n \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^n \xi_i P_{ii} \eta_i.$$

Jeśli x jest wektorem jednokolumnowym, x^T oznacza jego transpozycję, wektor jednowierszowy.

4. Jeśli $x = \langle \xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4 \rangle$ i $y = \langle \eta_1, \eta_2, \eta_3, \eta_4 \rangle$ są kolumnowymi czterowektorami nad ciałem liczb rzeczywistych oraz

$$M = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{bmatrix},$$

to wielkość $(x, y) \equiv x^T M y = \xi_1 \eta_1 + \xi_2 \eta_2 + \xi_3 \eta_3 - \xi_4 \eta_4$ spełnia warunki (1) i (2), ale nie spełnia warunku (3) — iloczyn wewnętrzny nie jest dodatnio określony. Zatem wielkość $x^T M y$ nie jest iloczynem wewnętrznym. Wielkość ta gra ważną rolę w szczególnej teorii względności; M nazywana jest *metryką Lorentza*.

4.2. ORTOGONALNOŚĆ I ZUPEŁNOŚĆ

Po zdefiniowaniu długości i kąta teoria przestrzeni wektorowych zaczyna się ściślej wiązać z fizyką. Jednym z najbardziej fundamentalnych pojęć matematycznych w fizyce jest pojęcie zupełnych ortogonalnych zbiorów wektorów lub funkcji. W paragrafie tym podajemy podstawy teorii takich zbiorów.

Definicja 4.2. Dwa wektory x i y są *ortogonalne* wtedy i tylko wtedy, gdy $(x, y) = 0$.

Dwa wektory w przestrzeni trójwymiarowej są ortogonalne, jeżeli kąt między nimi wynosi 90° ; nasza definicja jest po prostu uogólnieniem tego pojęcia na przypadek przestrzeni n -wymiarowych lub nawet nieskończenie wymiarowych. Jak można oczekiwać, jeśli $(x, y) = 0$, to również $(x, y) = (y, x)^* = 0$, a więc $(y, x) = 0$. Tak więc, chociaż iloczyn wewnętrzny jest asymetryczny, ortogonalność jest relacją symetryczną. Zauważmy, że wektor zerowy jest ortogonalny do każdego wektora.

Definicja 4.3. Zbiór wektorów $\{x_1, x_2, \dots\}$ jest *ortonormalny*, jeżeli $(x_i, x_j) = \delta_{ij}$ dla każdego i oraz j .

Znaczy to, że zbiór wektorów jest *ortonormalny*, jeżeli każdy wektor jest ortogonalny do każdego innego w tym zbiorze i długość każdego wektora jest *unormowana* do jedności. Wektor x można unormować, dzieląc go przez jego długość i tworząc nowy wektor $x/||x||$. Przykładem ortonormalnego zbioru wektorów jest zbiór trzech wektorów jednostkowych, $\{e_i\}$, wprowadzonych dla przestrzeni kartezjańskiej w § 1.3.

Definicja 4.4. W skończenie wymiarowej przestrzeni wektorowej zbiór ortonormalny jest *zupełny*, jeśli nie jest zawarty w żadnym większym zbiorze ortonormalnym.

Podamy teraz dowody kilku podstawowych twierdzeń dotyczących wprowadzonych pojęć.

Twierdzenie 4.1. Zbiór ortonormalny jest liniowo niezależny. (Stąd dowolny zbiór ortonormalny n wektorów tworzy bazę w n -wymiarowej przestrzeni wektorowej).

Dowód. Jeśli $\{x_1, \dots, x_n\}$ jest dowolnym skończonym zbiorem ortonormalnym, to dla każdego i

$$\sum_i \alpha_i x_i = 0 \Rightarrow 0 = (x_j, \sum_i \alpha_i x_i) = \sum_i \alpha_i (x_j, x_i) = \sum_i \alpha_i \delta_{ij} = \alpha_j. \quad \text{c.b.d.o.}$$

Twierdzenie 4.2. Nierówność Bessela. Jeśli $X = \{x_1, \dots, x_n\}$ jest dowolnym skończonym zbiorem ortonormalnym w przestrzeni z iloczynem wewnętrznym, a x jest dowolnym wektorem, to

$$\|x\|^2 \geq \sum_i |\alpha_i|^2, \quad (4.7)$$

gdzie $\alpha_i = (x_i, x)$. Ponadto wektor $x' \equiv x - \sum_i \alpha_i x_i$ jest ortogonalny do każdego x_j .

Dowód. Dowiedzimy najpierw nierówności

$$\begin{aligned} 0 \leq \|x'\|^2 &= (x', x') = \left(x - \sum_i \alpha_i x_i, x - \sum_j \alpha_j x_j\right) = \\ &= (x, x) - \sum_i \alpha_i^* (x_i, x) - \sum_j \alpha_j (x, x_j) + \sum_{i,j} \alpha_i^* \alpha_j (x_i, x_j) = \\ &= \|x\|^2 - \sum_i |\alpha_i|^2 - \sum_j |\alpha_j|^2 + \sum_j |\alpha_j|^2 = \|x\|^2 - \sum_i |\alpha_i|^2, \end{aligned}$$

gdzie skorzystaliśmy ze związku $(x_i, x_j) = \delta_{ij}$. Stąd

$$\|x\|^2 \geq \sum_i |\alpha_i|^2.$$

Dla dowodu drugiej części twierdzenia wystarczy wykonać proste obliczenie

$$(x', x_j) = (x, x_j) - \sum_i \alpha_i^* (x_i, x_j) = \alpha_j^* - \alpha_j^* = 0. \quad \text{c.b.d.o.}$$

Jest wiele możliwych sposobów scharakteryzowania zupełnego ortonormalnego zbioru. P. R. Halmos zebrał je i podał dowód ich równoważności w formie twierdzenia.

Ponieważ twierdzenie to w sposób obrazowy ilustruje ważną technikę logiczną, podajemy je w sformułowaniu autora, zachowując również jego drogę logiczną dowodzenia*.

Twierdzenie 4.3. Jeśli $X = \{x_i\}$ jest skończonym ortonormalnym zbiorem m wektorów w przestrzeni z iloczynem wewnętrznym, V , to następujące warunki są wzajemnie równoważne:

1. X jest zupełny;
2. jeśli $(x_i, x) = 0$ dla $i = 1, \dots, m$, to $x = 0$;
3. X rozpiną przestrzeń V ;
4. jeśli $x \in V$, to $x = \sum_{i=1}^m (x_i, x) x_i$;

* Patrz Halmos, P. R., *Finite-Dimensional Vector Spaces*, wydanie drugie. Princeton, N. J.: D. Van Nostrand, 1958, s. 124.

5. jeśli $x, y \in V$, to $(y, x) = \sum_{i=1}^m (y, x_i) (x_i, x)$ — równość Parsewala;

6. jeśli $x \in V$, to $\|x\|^2 = \sum_{i=1}^m |(x_i, x)|^2 = \sum_{i=1}^m |\alpha_i|^2$, w notacji używanej w twierdzeniu 4.2; oznacza to, że w nierówności Bessela zachodzi równość.

Dowód. Dowiedzimy, że zachodzą kolejne implikacje

$$(1) \Rightarrow (2) \Rightarrow (3) \Rightarrow (4) \Rightarrow (5) \Rightarrow (6) \Rightarrow (1).$$

Zatem, mając dowolny z sześciu warunków, możemy każdy z pięciu pozostałych otrzymać poprzez łańcuch logiczny zapewniający ich równoważność logiczną. Na początek założymy prawdziwość (1) i wyprowadzimy stąd (2).

(1) \Rightarrow (2). Podamy dowód implikacji równoważnej: nie (2) \Rightarrow nie (1)*. Jeśli $(x_i, x) = 0$ dla każdego i oraz $x \neq 0$, to możemy wektor $x/\|x\|$ dodać do x i w ten sposób otrzymamy zbiór ortonormalny większy niż X . Stąd, w myśl definicji (4.4), zbiór X nie jest zupełny.

(2) \Rightarrow (3). Znow dowodzimy implikacji nie (3) \Rightarrow nie (2). Jeśli X nie rozpiną V , to istnieje element $x \in V$, nie będący kombinacją liniową x_i , a więc nie istnieją dla niego stałe α_i takie, że

$$x = \sum_i \alpha_i x_i.$$

W szczególności zbiór stałych $\alpha_i = (x_i, x)$ będzie taki, że

$$x \neq \sum_i \alpha_i x_i.$$

Stąd

$$x' = x - \sum_i (x_i, x) x_i \neq 0,$$

a jednocześnie, na mocy drugiej części twierdzenia 4.2, x' jest ortogonalny do każdego x_i . Stwierdzenie to jest równoważne „nie (2)”.

(3) \Rightarrow (4). Jeśli każdy wektor x może być zapisany w postaci

$$x = \sum_j \alpha_j x_j,$$

to

$$(x_i, x) = \sum_j \alpha_j (x_i, x_j) = \sum_j \alpha_j \delta_{ij} = \alpha_i,$$

a więc

$$x = \sum_i (x_i, x) x_i.$$

(4) \Rightarrow (5). Jeśli

$$x = \sum_i \alpha_i x_i \quad \text{i} \quad y = \sum_j \beta_j x_j,$$

gdzie $\alpha_i = (x_i, x)$, a $\beta_j = (x_j, y)$, to

$$(y, x) = \left(\sum_j \beta_j x_j, \sum_i \alpha_i x_i \right) = \sum_{i,j} \beta_j^* \alpha_i (x_j, x_i) = \sum_i \beta_i^* \alpha_i = \sum_i (y, x_i) (x_i, x).$$

* Symbolem „nie p ” oznaczać będziemy zdanie powstające przez zaprzeczenie logiczne ze zdania p (przyj. tłum.).

(5) \Rightarrow (6). Wystarczy położyć w (5) $x = y$.

(6) \Rightarrow (1). [W gruncie rzeczy dowodzimy nie (1) \Rightarrow nie (6)]. Załóżmy, że X nie jest zupełny. Jest on wówczas zawarty w większym zbiorze ortogonalnym, tzn. istnieje nie-zeroowy wektor x_0 ortogonalny do każdego x_i w X ; oznacza to, że $(x_i, x_0) = 0$ dla każdego i . Zatem

$$\|x_0\|^2 \neq \sum_1 |x_i, x_0|^2,$$

ponieważ prawa strona znika, a lewa nie. Stwierdzenie to jest dokładnie równoważne „nie (6)”. W ten sposób dowód równoważności podanych sześciu warunków został zakończony.

Twierdzenie 4.4. Nierówność Schwarz. Jeśli x, y są wektorami w przestrzeni z iloczynem wewnętrznym, to

$$|(x, y)| \leq \|x\| \cdot \|y\|. \quad (4.8)$$

Dowód. Jeśli $y = 0$, to obie strony znikają. Jeśli $y \neq 0$, to zbiór składający się z jednego wektora $y/\|y\|$ jest ortonormalny, a więc z nierówności Bessela

$$\left| \left(x, \frac{y}{\|y\|} \right) \right|^2 \leq \|x\|^2 \Rightarrow |(x, y)| \leq \|x\| \cdot \|y\|. \quad \text{c.b.d.o.}$$

Przykłady nierówności Schwarz.

1. W dwuwymiarowej przestrzeni euklidesowej nierówność Schwarz mówi tylko, że $|\cos \Theta| \leq 1$.

2. W n -wymiarowej przestrzeni unitarnej nierówność Schwarz znana jest jako nierówność Cauchy'ego. Mówi ona, że dla dowolnych dwóch ciągów liczb zespolonych $(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ oraz $(\beta_1, \dots, \beta_n)$,

$$\left| \sum_{i=1}^n \alpha_i^* \beta_i \right|^2 \leq \sum_{i=1}^n |\alpha_i|^2 \cdot \sum_{i=1}^n |\beta_i|^2. \quad (4.9)$$

3. W przestrzeni P nierówność Schwarz przechodzi w

$$\left| \int_0^1 x(t)^* y(t) dt \right|^2 \leq \int_0^1 |x(t)|^2 dt \cdot \int_0^1 |y(t)|^2 dt. \quad (4.10)$$

4.3. ZBIORY ORTONORMALNE ZUPEŁNE

Bardzo wygodna jest sytuacja, gdy bazę w przestrzeni wektorowej stanowi zbiór ortonormalny. Pokażemy teraz przez indukcję, jak można z dowolnej bazy skonstruować bazę ortonormalną przy użyciu techniki znanej jako *proces ortogonalizacji Grama-Schmidta*. Z twierdzenia 4.3 [(3) \Rightarrow (1)] wynika, że ta ortonormalna baza będzie zbiorem ortonormalnym zupełnym.

Niech $X = \{x_1, \dots, x_n\}$ będzie pewną bazą w V . Skonstruujemy zbiór ortonormalny zupełny $Y = \{y_1, \dots, y_n\}$ taki, że każdy wektor y_j jest kombinacją liniową x_1, \dots, x_j .

Ponieważ X jest liniowo niezależny, więc $x_1 \neq 0$; dzięki temu można przyjąć $y_1 = x_1/||x_1||$. Połóżmy teraz $y_2 = (x_2 - \alpha_1 y_1)/||x_2 - \alpha_1 y_1||$ i wyznaczmy α_1 z warunku $(y_1, y_2) = 0$:

$$(y_1, y_2) = \frac{(y_1, x_2) - \alpha_1}{||x_2 - \alpha_1 y_1||} = 0 \Rightarrow \alpha_1 = (y_1, x_2).$$

Zatem

$$y_2 = \frac{x_2 - (y_1, x_2)y_1}{||x_2 - (y_1, x_2)y_1||}.$$

Zauważmy, że

$$x_2 - (y_1, x_2)y_1 = x_2 - \frac{(y_1, x_2)}{||x_1||} x_1 \neq 0,$$

ponieważ X jest liniowo niezależny. Otrzymaliśmy więc dwa wektory y_1 i y_2 takie, że $(y_i, y_j) = \delta_{ij}$, $i, j = 1, 2$.

Przedyskutujemy teraz krok indukcyjny: przypuśćmy, że znaleźliśmy takie y_1, \dots, y_m ($m < n$), które tworzą zbiór ortonormalny i każdy y_j ($j = 1, \dots, m$) jest kombinacją liniową wektorów x_1, \dots, x_j . Niech

$$y_{m+1} = \frac{x_{m+1} - (\alpha_1 y_1 + \dots + \alpha_m y_m)}{||x_{m+1} - (\alpha_1 y_1 + \dots + \alpha_m y_m)||}.$$

Wówczas dla $j \leq m$

$$(y_j, y_{m+1}) = \frac{(y_j, x_{m+1}) - \alpha_j}{||x_{m+1} - (\alpha_1 y_1 + \dots + \alpha_m y_m)||} = 0 \Rightarrow \alpha_j = (y_j, x_{m+1}),$$

skąd wynika, że $\alpha_j = (y_j, x_{m+1})$. Zatem

$$y_{m+1} = \frac{x_{m+1} - [(y_1, x_{m+1})y_1 + \dots + (y_m, x_{m+1})y_m]}{||x_{m+1} - [(y_1, x_{m+1})y_1 + \dots + (y_m, x_{m+1})y_m]||}. \quad (4.11)$$

Liniowa niezależność bazy X gwarantuje, że $y_{m+1} \neq 0$. Po powtórzeniu tego procesu n razy wygenerujemy ortonormalny zbiór n wektorów bazy.

Niech macierz A będzie zdefiniowana jako reprezentacja przekształcenia liniowego A w pewnej bazie $X = \{x_1, \dots, x_n\}$. Jeśli baza X jest zbiorem ortonormalnym (lub zortormalizujemy ją metodą Grama-Schmidta), to istnieje prosty związek (często używany w mechanice kwantowej) pomiędzy elementami macierzy i iloczynami wewnętrznymi. Z równania (3.7) mamy

$$Ax_j = \sum_k a_{kj} x_k.$$

Przy założeniu, że x_i tworzą ortonormalną bazę, dostajemy na iloczyn wewnętrzny (x_i, Ax_j) wyrażenie

$$(x_i, Ax_j) = \left(x_i, \sum_k a_{kj} x_k \right) = \sum_k a_{kj} (x_i, x_k) = \sum_k a_{kj} \delta_{ik} = a_{ij}.$$

Stąd elementy macierzowe przekształcenia liniowego w bazie ortonormalnej są dane równaniem

$$a_{ij} = (x_i, Ax_j). \quad (4.12)$$

Cała metoda Grama-Schmidta sprowadza się do tego, że wybieramy pewien wektor x_1 , normalizujemy go, po czym od następnego wektora x_2 odejmujemy jego składową w kie-

runku znormalizowanego x_1 . Po znormalizowaniu tak zmodyfikowanego wektora x_2 wybieramy kolejny wektor x_3 i odejmujemy od niego jego składowe w kierunkach uprzednio znormalizowanych wektorów. Proces ten można powtarzać dowolnie długo, choć oczywiście w przestrzeni skończonej wymiarowej musi się on kiedyś zakończyć. Przy każdym kroku tej operacji zmniejszamy (lub pozostawiamy bez zmiany) normę wektora, ponieważ odejmujemy część jego składowych. Fakt ten jest podstawą prostego zastosowania procesu Grama–Schmidta w teorii wyznaczników. Oznaczmy macierz A symbolem $\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$, gdzie a_1 jest pierwszym wierszem, a_2 — drugim itd. Jeśli teraz wektory a_i tworzą zbiór ortogonalny, to oczywiście $\det(AA^\dagger) = \|a_1\|^2 \|a_2\|^2 \dots \|a_n\|^2$. Ponieważ, zgodnie z (3.17), $\det A^\dagger = (\det A)^*$, wynika stąd, że

$$|\det A| = \|a_1\| \|a_2\| \dots \|a_n\|.$$

Tutaj norma wektora a_i użyta jest w zwykłym sensie, to znaczy

$$\|a_i\| = \left(\sum_{j=1}^n a_{ij}^* a_{ij} \right)^{1/2}$$

[patrz (4.5)].

Rozważmy teraz dowolną macierz $B = \{b_1, b_2, \dots, b_n\}$. Wiemy, że przy dodaniu do któregoś z wierszy macierzy B jakiegokolwiek innego wiersza pomnożonego przez skalar, wartość wyznacznika nie ulegnie zmianie. Zatem metodą Grama–Schmidta możemy z wektorów wierszy macierzy B utworzyć nową macierz C , którą oznaczymy

$$\{\beta_1 c_1, \beta_2 c_2, \dots, \beta_n c_n\},$$

gdzie $\{c_1, c_2, \dots, c_n\}$ jest zbiorem ortonormalnym wektorów, a $\{\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n\}$ jest zbiorem skalarów, z których każdy jest mniejszy lub równy odpowiednio $\|b_1\|, \|b_2\|, \dots, \|b_n\|$ [na mocy równania (4.11)]. Ponieważ dodaliśmy do jednych rzędów kombinacje liniowe innych, więc $\det C = \det B$. Ponadto c_i są unormowane do 1, a więc stwierdzamy (tak jak poprzednio dla $\det A$), że

$$|\det B| = |\det C| = |\beta_1| |\beta_2| \dots |\beta_n|.$$

Dzięki temu, że $|\beta_i| \leq \|b_i\|$, dostajemy

Nierówność Hadamarda. Jeśli b_i oznacza i -ty wiersz macierzy B , to

$$|\det B| \leq \|b_1\| \|b_2\| \dots \|b_n\|.$$

Z wyniku tego korzysta się w teorii równań całkowych.

Zakończymy ten paragraf prostą, ale ważną uwagą, mającą szerokie zastosowanie przy dowodach następujących twierdzeń.

Twierdzenie 4.5. Przekształcenie liniowe A określone w przestrzeni z iloczynem wewnętrznym jest przekształceniem zerowym wtedy i tylko wtedy, gdy $(x, Ay) = 0$ dla każdego x, y .

Dowód. Jeśli $A = 0$, to $(x, Ay) = (x, 0) = 0$ (z własności 2 definicji iloczynu wewnętrznego). Na odwrót, jeśli $(x, Ay) = 0$ dla wszystkich wektorów x i y , możemy przyjąć $x = Ay$. Wówczas $(Ay, Ay) = 0 \Rightarrow Ay = 0$ dla każdego y (dzięki temu, że iloczyn wewnętrzny jest dodatnio określony), a więc $A = 0$. c.b.d.o.

4.4. OPERATORY SAMOSPŁĘŻONE (HERMITOWSKIE I SYMETRYCZNE)

Najważniejszymi operatorami liniowymi w fizyce kwantowej są tzw. *operatory samo-splęzone*, których definicję teraz podamy. Wcześniej jednak musimy zdefiniować operator splęzony.

Definicja 4.5. Niech A będzie operatorem liniowym określonym na przestrzeni wektorowej V . Dla każdego A , operator A^\dagger spełniający równanie

$$(Ax, y) = (x, A^\dagger y) \quad \text{dla każdego } x, y \quad (4.13)$$

nazwiemy operatorem *splęzonym* do A .

Ponieważ

$$(x, Ay) = (Ay, x)^* = (y, A^\dagger x)^* = (A^\dagger x, y),$$

można podać równoważną definicję operatora splęzonego

$$(x, Ay) = (A^\dagger x, y) \quad \text{dla każdego } x, y. \quad (4.14)$$

Dla pełnej ścisłości powinniśmy w tym miejscu dowieść, że zawsze istnieje operator splęzony do danego. Pozostawiamy jednak ten dowód czytelnikowi (zadanie 18), ponieważ nie jest on bardzo istotny dla naszych celów. Zainteresowanych czytelników odsyłamy do dowodów niezależnych od współrzędnych w książkach poświęconych przestrzeniom wektorowym*.

Ponadto operator splęzony A^\dagger jest wyznaczony jednoznacznie przez A . Przypuśćmy, że

$$(x, By) = (Ax, y) = (x, Cy)$$

dla każdego x, y . Wówczas $(x, [B-C]y) = 0$ dla każdego x, y , skąd na podstawie twierdzenia 4.5 wynika równość $B = C$.

Dla pokazania, że A^\dagger jest istotnie operatorem *liniowym*, policzmy

$$\begin{aligned} (x, A^\dagger[\alpha y + \beta z]) &= (Ax, [\alpha y + \beta z]) = (Ax, \alpha y) + (Ax, \beta z) = \alpha(Ax, y) + \beta(Ax, z) = \\ &= \alpha(x, A^\dagger y) + \beta(x, A^\dagger z) = (x, \alpha A^\dagger y) + (x, \beta A^\dagger z). \end{aligned}$$

Zatem

$$(x, A^\dagger[\alpha y + \beta z] - \alpha A^\dagger y - \beta A^\dagger z) = 0 \Rightarrow A^\dagger(\alpha y + \beta z) = \alpha A^\dagger y + \beta A^\dagger z,$$

a więc A^\dagger jest operatorem liniowym. Podamy teraz dowody kilku prostych własności operatora splęzonego.

Twierdzenie 4.6.

1. $(A+B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger$.
2. $(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$.
3. $(\alpha A)^\dagger = \alpha^* A^\dagger$, gdzie α jest skalarem.
4. $(A^\dagger)^\dagger = A$.

Dowód

1. Dla każdego x, y

$$\begin{aligned} (x, [A+B]^\dagger y) &= ([A+B]x, y) = (Ax+Bx, y) = (Ax, y) + (Bx, y) = \\ &= (x, A^\dagger y) + (x, B^\dagger y) = (x, [A^\dagger + B^\dagger]y). \end{aligned}$$

Reszta wynika z twierdzenia 4.5.

* Np. K. Hoffman i R. Kunze, *Linear Algebra*, str. 237.

2. $(x, [AB]^\dagger y) = (ABx, y) = (Bx, A^\dagger y) = (x, B^\dagger A^\dagger y)$ i znowu tezę otrzymujemy w oparciu o twierdzenie 4.5. c.b.d.o.

Pozostawiamy czytelnikowi dowody własności (3) i (4), bardzo podobne do podanych wyżej.

Twierdzenie 4.7. Niech macierz A będzie równa (a_{ij}) w pewnej ortonormalnej bazie X . Wówczas macierz A^\dagger w tej samej bazie X jest $[A^\dagger]_{ij} = a_{ji}^*$, to znaczy $[A^\dagger] = [A^T]^*$.

Dowód. Z (4.12) mamy

$$a_{ij} = (x_i, Ax_j).$$

Stąd

$$a_{ij} = (A^\dagger x_i, x_j) = (x_j, A^\dagger x_i)^* = [A^\dagger]_{ji}^* \Rightarrow [A^\dagger]_{ij} = a_{ji}^*. \quad \text{c.b.d.o.}$$

Tak więc definicja operatora sprzężonego sprowadza się do definicji macierzy sprzężonej, podanej w paragrafie 3.7.

Definicja 4.6. Jeśli $A = A^\dagger$, to operator A jest swoim własnym sprzężeniem i nazywamy go operatorem *samosprężonym*. W rzeczywistych przestrzeniach z iloczynem wewnętrznym operator samosprężony nazywamy operatorem *symetrycznym*, a w zespolonych — operatorem *hermitowskim*.

Operatory odpowiadające obserwowalnym fizycznie wielkościom w mechanice kwantowej są wszystkie operatorami hermitowskimi.

Z twierdzenia 4.6 wynika natychmiast, że jeżeli A i B są samosprężone, to ich suma również. Podobnie, jeśli A jest samosprężony, to operator αA będzie samosprężony wtedy i tylko wtedy, gdy α jest rzeczywiste. Wyprowadzamy również następujący prosty wniosek:

Twierdzenie 4.8. Jeśli A i B są samosprężone, to AB jest samosprężony wtedy i tylko wtedy, gdy A i B komutują (tzn. gdy ich komutator $[A, B]$ znika).

Dowód. Niech $AB = BA$. Wówczas

$$(AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA = AB,$$

a więc AB jest samosprężony. Jeśli $(AB)^\dagger = AB$, to

$$AB = (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger = BA, \quad \text{a więc} \quad [A, B] = 0. \quad \text{c.b.d.o.}$$

Powód, dla którego operator samosprężony w przestrzeni rzeczywistej z iloczynem wewnętrznym nazywany jest operatorem symetrycznym, staje się oczywisty dzięki twierdzeniu 4.7. Gdy $A = A^\dagger$, reprezentacje operatora spełniają związek

$$a_{ij} = [A^\dagger]_{ij} = a_{ji}^* = a_{ji},$$

bowiem elementy macierzowe należą do ciała liczb rzeczywistych. Tak więc $A = A^T$ i A spełnia warunki narzucane przez nas dawniej na macierz symetryczną.

Podamy teraz dowody dwóch twierdzeń typu twierdzenia 4.5, które będą odgrywać ważną rolę, podobną do odgrywanej przez to twierdzenie w wielu dotychczasowych dowodach. W zasadzie podamy silniejszą postać tego samego twierdzenia. Zakres jej stosowalności ogranicza się jedynie do operatorów samosprężonych.

Twierdzenie 4.9. Niech A będzie operatorem samosprężonym w przestrzeni rzeczywistej z iloczynem wewnętrznym. Wówczas $A = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $(x, Ax) = 0$ dla każdego x .

Dowód. Jeśli $A = 0$, to $(x, Ax) = 0$. Zatem dowód konieczności warunku jest trywialny. Inaczej ma się sprawa z dostatecznością. Dla jej dowodu rozpatrzmy wyrażenie

$$(x+y, A[x+y]) = (x, Ax) + (y, Ay) + (x, Ay) + (y, Ax).$$

Dostajemy stąd

$$(x, Ay) + (y, Ax) = (x+y, A[x+y]) - (x, Ax) - (y, Ay)$$

dla każdego x, y . Ponieważ każdy człon po prawej stronie jest postaci (x, Ax) , co jest z założenia zerem, więc

$$(x, Ay) + (y, Ax) = 0.$$

Ale

$$(y, Ax) = (A^\dagger y, x) = (Ay, x) = (x, Ay)^* = (x, Ay),$$

jako że $A^\dagger = A$ i iloczyn wewnętrzny jest liczbą rzeczywistą. Zatem $(x, Ay) = 0$ dla każdego x, y , co na podstawie twierdzenia 4.5 implikuje, że $A = 0$. c.b.d.o.

Jeśli wiemy, że przestrzeń z iloczynem wewnętrznym jest zespolona, jak to jest w większości przypadków w fizyce, możemy sformułować twierdzenie jeszcze ostrzej.

Twierdzenie 4.10. Jeśli A jest operatorem liniowym na przestrzeni unitarnej, to $A = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $(x, Ax) = 0$ dla każdego x .

Dowód. Tak jak w poprzednim twierdzeniu, konieczność jest oczywista. Dowód dostateczności wynika z rezultatów otrzymanych w trakcie dowodu poprzedniego twierdzenia. Pokazaliśmy, że

$$(x, Ay) + (y, Ax) = 0$$

dla każdego x, y , jeśli tylko $(x, Ax) = 0$ dla każdego x . Ponieważ nie narzucaliśmy wówczas żadnych dalszych warunków na A , możemy skorzystać teraz z tego wyniku. Związek ten jest słuszny dla wszystkich y , a więc możemy zastąpić y przez iy , otrzymując

$$(x, Aiy) + (iy, Ax) = i[(x, Ay) - (y, Ax)] = 0.$$

Wynika stąd, że

$$(x, Ay) - (y, Ax) = 0,$$

dla każdego x, y . Dodając to do poprzedniego równania, dostajemy $(x, Ay) = 0$ dla każdego x, y . Stąd, na mocy twierdzenia 4.5, $A = 0$. c.b.d.o.

W konsekwencji twierdzeń 4.9 i 4.10 można wysnuć następujący wniosek.

Wniosek. Jeśli A jest samosprzężonym operatorem liniowym w przestrzeni z iloczynem wewnętrznym (rzeczywistej lub zespolonej), to $A = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $(x, Ax) = 0$, dla każdego x .

Bardzo ważne w mechanice kwantowej jest

Twierdzenie 4.11. Operator liniowy A w przestrzeni unitarnej jest hermitowski wtedy i tylko wtedy, gdy (x, Ax) jest rzeczywiste dla każdego x .

Dowód. Jeśli $A = A^\dagger$, to $(x, Ax) = (A^\dagger x, x) = (x, Ax)^*$, a więc (x, Ax) jest rzeczywiste. Na odwrót, jeśli (x, Ax) jest zawsze rzeczywiste, to

$$(x, Ax) = (x, Ax)^* = (Ax, x) = (x, A^\dagger x).$$

Stąd $(x, [A - A^\dagger]x) = 0$ dla każdego x i z twierdzenia 4.10 wynika, że $A = A^\dagger$. c.b.d.o.

Zauważmy, że twierdzenie to nie jest prawdziwe w przestrzeni rzeczywistej z iloczynem wewnętrznym, tzn. gdy (x, Ax) jest rzeczywiste, A nie musi być symetryczny. Oczywiście

(x, Ax) jest zawsze rzeczywiste w przestrzeni rzeczywistej z iloczynem wewnętrznym, ale dopiero w przestrzeni zespolonej rzeczywistość tego iloczynu dla każdego x nabiera dużej wagi, implikując hermitowskość operatora A .

Wielkość (x, Ax) nazywa się w mechanice kwantowej *wartością oczekiwaną* operatora A . Dla znormalizowanych funkcji falowych ma ona znaczenie wartości średniej wyników wielokrotnych pomiarów obserwabli w układzie znajdującym się w stanie opisywanym przez wektor x . Oczywiście wielkość ta musi być rzeczywista. Dlatego w mechanice kwantowej operatory odpowiadające obserwabliom fizycznym muszą być hermitowskie.

Wiąże się z tym fakt, że wartości własne macierzy hermitowskiej są liczbami rzeczywistymi. Ponieważ w mechanice kwantowej jedynym możliwym wynikiem pomiaru fizycznego może być wartość własna odpowiedniego operatora hermitowskiego rezultat, który teraz podamy, ma dla niej olbrzymie znaczenie.

Twierdzenie 4.12. Wartości własne operatora hermitowskiego są rzeczywiste.

Dowód.

$$Ax = \lambda x \Rightarrow (x, Ax) = \lambda \|x\|^2 \Rightarrow \lambda = \frac{(x, Ax)}{\|x\|^2},$$

co na podstawie twierdzenia 4.11 jest rzeczywiste dla A hermitowskiego. c.b.d.o.

Przykład. Hamiltonian jednowymiarowego oscylatora harmonicznego ma postać

$$H = (p^2/2m) + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

Poprzednio (przykład 2, § 3.10) twierdziliśmy, że wszystkie jego wartości własne są dodatnie. Stwierdzenie to możemy teraz poprzeć obrazowym dowodem. Niech $Hu = Eu$, gdzie wektory własne u są unormowane, to znaczy $\|u\| = 1$. Wówczas

$$\begin{aligned} E = (u, Hu) &= \left(u, \frac{p^2}{2m} u\right) + \left(u, \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 u\right) = \frac{1}{2m} (p^\dagger u, pu) + \frac{1}{2}m\omega^2 (x^\dagger u, xu) = \\ &= \frac{1}{2m} (pu, pu) + \frac{1}{2}m\omega^2 (xu, xu), \end{aligned}$$

bowiem zarówno p , jak x są hermitowskie. Zatem

$$E = (1/2m)\|pu\|^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 \|xu\|^2 \geq 0,$$

ponieważ $m, \omega > 0$.

Widać z tego przykładu, że wartości własne kwadratu *dowolnego* operatora hermitowskiego muszą być dodatnie lub równe zero. Wynika to również z twierdzenia 4.12.

Przykład. W naszych poprzednich rozważaniach wartości i wektorów własnych dla oscylatora harmonicznego stwierdziliśmy, że n -ty unormowany wektor własny ma postać

$$u_n = c_n (a^\dagger)^n u_0, \quad (4.15)$$

gdzie $c_n = (1/n!)^{1/2}$ [wzory (3.48) i (3.49)]. Możemy teraz podać prosty dowód tego faktu przy pomocy tej samej techniki z zakresu algebry operatorów.

Operatory kreacji i anihilacji

$$a^\dagger = (xmw - ip) (2m\omega\hbar)^{-1/2}, \quad a = (xmw + ip) (2m\omega\hbar)^{-1/2}$$

są do siebie sprzężone, jak zresztą sugeruje to notacja; p i x są hermitowskie.

Normalizacja wektorów własnych u_n wymaga, żeby $(u_n, u_n) = 1$. Ponieważ

$$u_n = \frac{c_n}{c_{n-1}} c_{n-1} a^\dagger (a^\dagger)^{n-1} u_0 = \frac{c_n}{c_{n-1}} a^\dagger u_{n-1},$$

możemy ten iloczyn zapisać w postaci

$$\begin{aligned} 1 &= \left(\frac{c_n}{c_{n-1}} a^\dagger u_{n-1}, \frac{c_n}{c_{n-1}} a^\dagger u_{n-1} \right) = \left| \frac{c_n}{c_{n-1}} \right|^2 (a^\dagger u_{n-1}, a^\dagger u_{n-1}) = \\ &= \left| \frac{c_n}{c_{n-1}} \right|^2 (u_{n-1}, a a^\dagger u_{n-1}) = \left| \frac{c_n}{c_{n-1}} \right|^2 (\hbar\omega)^{-1} \left(u_{n-1}, \left(H + \frac{\hbar\omega}{2} \right) u_{n-1} \right), \end{aligned}$$

gdzie skorzystaliśmy z (3.44). Przy użyciu (3.48) dostajemy

$$1 = \left| \frac{c_n}{c_{n-1}} \right|^2 n(u_{n-1}, u_{n-1}) = \left| \frac{c_n}{c_{n-1}} \right|^2 n.$$

Stąd

$$|c_n|^2 = \frac{1}{n} |c_{n-1}|^2.$$

Przez kolejne iteracje tej równości dostajemy

$$|c_n|^2 = \frac{1}{n} \frac{1}{n-1} |c_{n-2}|^2 = \frac{1}{n} \frac{1}{n-1} \frac{1}{n-2} |c_{n-3}|^2 = \dots = \frac{1}{n!} |c_0|^2 = \frac{1}{n!},$$

bowiem $c_0 = 1$. Zatem wybór

$$c_n = \left(\frac{1}{n!} \right)^{1/2}$$

zapewni nam poprawną normalizację funkcji własnych generowanych przez (4.15).

4.5. IZOMETRIE — PRZEKSZTAŁCENIA UNITARNE I ORTOGONALNE

Wprowadzimy teraz inną bardzo ważną klasę przekształceń liniowych.

Definicja 4.7. Jeśli przekształcenie liniowe U zdefiniowane na przestrzeni z iloczynem wewnętrznym spełnia warunek $U^\dagger U = I$, to U nazywamy *izometrią* (lub *przekształceniem izometrycznym*). Jeśli dodatkowo $UU^\dagger = I$, to izometria U jest nazywana *przekształceniem unitarnym*. Przekształcenie liniowe A , spełniające równanie $A^T A = I$, nazywa się *przekształceniem ortogonalnym*.

W przestrzeniach skończenie wymiarowych z istnienia lewostronnej odwrotności, U^\dagger ($U^\dagger U = I$), wynika, że U^\dagger jest również prawostronną odwrotnością ($UU^\dagger = I$). Tak więc w przypadku przestrzeni skończenie wymiarowych niepotrzebne jest rozróżnianie lewostronnej i prawostronnej odwrotności, pojawiające się w naszej definicji. Wynika stąd, że jeżeli U jest izometrią w przestrzeni o skończonym wymiarze, to U jest odwracalne, a więc unitarne. Ponadto w tym przypadku zachodzi

$$(U^{-1})^\dagger = (U^\dagger)^\dagger = U = (U^{-1})^{-1}.$$

Przedyskutujemy teraz kilka alternatywnych sposobów charakteryzowania przekształceń izometrycznych, formułując je w jednym twierdzeniu w taki sposób, aby były poprawne w przypadku przestrzeni zarówno o skończonym, jak i nieskończonym wymiarze.

Twierdzenie 4.13. Następujące trzy warunki na przekształcenie liniowe U w przestrzeni z iloczynem wewnętrznym są sobie wzajemnie równoważne:

1. $U^\dagger U = I$.
2. $(Ux, Uy) = (x, y)$ dla każdego x, y .
3. $\|Ux\| = \|x\|$ dla każdego x .

Dowód. Jeśli $U^\dagger U = I$, to $(Ux, Uy) = (x, U^\dagger U y) = (x, y)$ dla każdego x, y , a w szczególności dla $y = x$, $\|Ux\|^2 = \|x\|^2$ dla każdego x . Dowodzi to, że

$$(1) \Rightarrow (2) \Rightarrow (3).$$

Aby pokazać, że $(3) \Rightarrow (1)$, a tym samym dowieść równoważności trzech warunków, zauważmy, że

$$\|Ux\|^2 = (Ux, Ux) = (U^\dagger U x, x) = (x, x) \Rightarrow ([U^\dagger U - I]x, x) = 0,$$

dla każdego x . Ponieważ operator $[U^\dagger U - I]$ jest samosprężony, możemy skorzystać z wniosku z twierdzenia 4.10 dla otrzymania równości $U^\dagger U = I$, co kończy dowód. Ponieważ

$$[U^\dagger U - I]^\dagger = (U^\dagger U)^\dagger - I^\dagger = U^\dagger (U^\dagger)^\dagger - I = [U^\dagger U - I],$$

więc $[U^\dagger U - I]$ jest samosprężony. c.b.d.o.

Twierdzenie to wyjaśnia genezę nazwy „izometria”. Własność (3) mówi, że przekształcenia te zachowują długość wektora. Pamiętając, że cosinus kąta θ pomiędzy wektorami x i y jest dany wzorem

$$\cos \theta = \frac{(x, y)}{\|x\| \|y\|},$$

widzimy, że izometrie zachowują również kąt pomiędzy wektorami, ponieważ zachowują one iloczyn skalarny (własność 2) i długość (własność 3). Wniosek ten jest prawdziwy także w przestrzeni n -wymiarowej, gdzie definicja „kąta” między wektorami jest formalnie identyczna z powyższą.

Twierdzenie 4.14. Jeśli $\{x_i\}$ jest zbiorem ortonormalnym zupełnym, to tę samą własność ma zbiór $\{Ux_i\}$ dla każdej izometrii U .

Dowód

$$(Ux_i, Ux_j) = (x_i, U^\dagger U x_j) = (x_i, x_j) = \delta_{ij},$$

a więc zbiór $\{Ux_i\}$ jest ortonormalny.

Dla dowodu zupełności $\{Ux_i\}$ pokażemy, że zbiór $\{Ux_i\}$ spełnia równość Parsevala (warunek 5 twierdzenia 4.3). Dzięki zupełności zbioru $\{x_i\}$ zachodzi związek

$$\sum_i (y, Ux_i) (Ux_i, x) = \sum_i (U^\dagger y, x_i) (x_i, U^\dagger x) = (U^\dagger y, U^\dagger x).$$

Ale

$$(U^\dagger y, U^\dagger x) = (y, UU^\dagger x) = (y, x).$$

Zatem równość Parsevala jest spełniona, czyli zbiór $\{Ux_i\}$ musi być zupełny. c.b.d.o.

Izometrie są, jak widać, przekształceniami liniowymi, które przeprowadzają jedną bazę ortonormalną w drugą. Widzieliśmy poprzednio przykład takich przekształceń w § 1.4, gdzie rozważaliśmy obroty wektorów bazy w trójwymiarowej przestrzeni kartezjańskiej.

Zdefiniowaliśmy tam wektor jako trójkę liczb x_i , która pod wpływem obrotu wektorów bazy transformuje się zgodnie z prawem

$$x'_j = \sum_i a_{ij} x_i,$$

gdzie współczynniki a_{ij} spełniają związki

$$\sum_k a_{ik} a_{jk} = \sum_k a_{ki} a_{kj} = \delta_{ij}.$$

[Patrz równania (1.13)]. Niech teraz $[U]_{ij} = u_{ij}$, a więc $[U^\dagger]_{ij} = u_{ji}^*$. Reprezentacja macierzowa równania operatorowego $UU^\dagger = U^\dagger U = I$ ma postać

$$[UU^\dagger]_{ij} = \sum_k u_{ik} u_{jk}^* = [U^\dagger U]_{ij} = \sum_k u_{ki}^* u_{kj} = \delta_{ij}. \quad (4.16)$$

W przestrzeni rzeczywistej z iloczynem wewnętrznym $u_{ij} = u_{ij}^*$ i równanie (4.16) sprowadza się do podanych wyżej związków ortogonalności. W pewnym sensie przewidzieliśmy ten wynik, nazywając obroty wektorów w trzech wymiarach *transformacjami ortogonalnymi*.

Zwróciliśmy również uwagę na fakt, że wszystkie wyznaczniki macierzy obrotów z § 1.4 przyjmowały wartość 1. Uogólnimy teraz ten wniosek.

Twierdzenie 4.15. Jeśli A jest macierzą ortogonalną, to $\det A = \pm 1$.

Dowód. Jeśli A jest macierzą ortogonalną, to z definicji $A^T A = I$. Zatem

$$\det(A^T A) = \det A^T \det A = (\det A)^2 = 1 \Rightarrow \det A = \pm 1,$$

gdzie skorzystaliśmy z (3.17). c.b.d.o.

Wartość $+1$ odpowiada obrotowi, a -1 odpowiada obrotowi połączonemu z *inwersją*, tzn. zamianą układu współrzędnych z lewoskrętnego na prawoskrętny. Jeśli U jest macierzą unitarną, to podobny dowód pokazuje, że $|\det U| = 1$, czyli $\det U = e^{i\phi}$, gdzie ϕ jest dowolną liczbą rzeczywistą (zadanie 1).

4.6. WARTOŚCI I WEKTORY WŁASNE PRZEKSZTAŁCENŃ SAMOSPRĘŻONYCH I IZOMETRYCZNYCH

Znaleźliśmy się teraz w sytuacji dogodnej dla podania dowodów kilku ogólnych twierdzeń dotyczących widm pewnych operatorów liniowych. Twierdzenia te mają zasadnicze znaczenie w mechanice kwantowej, gdzie często szukamy wartości własnych i wektorów własnych operatorów hermitowskich.

Twierdzenie 4.16. Jeśli A jest przekształceniem liniowym samosprężonym, to wszystkie wartości własne A są rzeczywiste.

Dowód. Wartości własne A są liczbami λ spełniającymi $Ax = \lambda x$, gdzie $x \neq 0$. Zatem $(x, Ax) = (x, \lambda x) = \lambda(x, x)$, a ponieważ A jest samosprężone, więc

$$(x, Ax) = (Ax, x) = (\lambda x, x) = \lambda^*(x, x).$$

Ponieważ x jest wektorem własnym, $x \neq 0$, a stąd $(x, x) \neq 0$. Zatem $\lambda = \lambda^*$, co dowodzi rzeczywistości λ . c.b.d.o.

Wynik ten jest trywialnym uogólnieniem twierdzenia 4.12. Podaliśmy oba twierdzenia dla zademonstrowania alternatywnego dowodu, przytaczanego zwykle w mechanice kwantowej i dla zebrania w jednym paragrafie wszystkich najważniejszych wyników dotyczących widm zbadanych operatorów. Przechodzimy teraz do widm izometrii.

Twierdzenie 4.17. Wszystkie wartości własne izometrii mają wartości bezwzględne równe 1.

Dowód. Jeśli U jest izometrią i $Ux = \lambda x$ ($x \neq 0$), to

$$\|x\| = \|Ux\| = |\lambda| \|x\| \Rightarrow |\lambda| = 1,$$

ponieważ $\|x\| \neq 0$. c.b.d.o.

W dowodzie tego twierdzenia przyjęliśmy $\|x\| = (x, x)^{1/2} \neq 0$, bo $x \neq 0$, a iloczyn wewnętrzny ma tę własność, że $(x, x) = 0$ wtedy i tylko wtedy, gdy $x = 0$.

Podamy teraz dowód najważniejszego twierdzenia dotyczącego własności widm rozważanych przekształceń.

Twierdzenie 4.18. Jeśli A jest operatorem samosprzężonym lub izometrycznym, to wektory własne A należące do różnych wartości własnych są ortogonalne.

Dowód. Przypuśćmy, że $Ax_1 = \lambda_1 x_1$ i $Ax_2 = \lambda_2 x_2$, $\lambda_1 \neq \lambda_2$.

a) Jeśli A jest samosprzężony, to

$$(x_1, Ax_2) = \lambda_2 (x_1, x_2)$$

i jednocześnie

$$(x_1, Ax_2) = (Ax_1, x_2) = \lambda_1^* (x_1, x_2) = \lambda_1 (x_1, x_2),$$

bowiem $A = A^\dagger$ i ma wartości własne rzeczywiste (twierdzenie 4.16). Stąd $(\lambda_1 - \lambda_2) (x_1, x_2) = 0$, a więc zważywszy, że $\lambda_1 \neq \lambda_2$, musi zachodzić $(x_1, x_2) = 0$.

b) Jeśli A jest izometrią, to

$$(x_1, x_2) = (Ax_1, Ax_2) = \lambda_1^* \lambda_2 (x_1, x_2) = (\lambda_2 / \lambda_1) (x_1, x_2),$$

ponieważ na mocy twierdzenia 4.17 $|\lambda|^2 = \lambda \lambda^* = 1$ dla izometrii. Zatem, skoro $\lambda_1 \neq 0$, mamy

$$(\lambda_1 - \lambda_2) (x_1, x_2) = 0.$$

Ale $\lambda_1 \neq \lambda_2$, co nam daje równość $(x_1, x_2) = 0$. c.b.d.o.

Rozwiązując równanie charakterystyczne dla przekształcenia samosprzężonego lub izometrycznego $n \times n$, dostajemy n wartości własnych. Jeśli dowolne dwie z nich są różne, odpowiadające im wektory własne są ortogonalne, a jeśli wszystkie są różne, wszystkie wektory własne są ortogonalne i rozpinają przestrzeń, na której zdefiniowany jest operator. Jeśli k ($k \leq n$) spośród nich jest równych ($= \lambda_0$), można pokazać (twierdzenie 4.20), że istnieje wówczas k liniowo niezależnych (choć niekoniecznie ortogonalnych) wektorów własnych należących do λ_0 . Oczywiście wszystkie spośród tych k wektorów własnych są ortogonalne do wszystkich $(n-k)$ -wektorów własnych należących do wartości własnych różnych od λ_0 . Metodą Grama-Schmidta można z tych k liniowo niezależnych wektorów własnych należących do λ_0 utworzyć zbiór ortogonalny. Procedura ta jest często stosowana w mechanice kwantowej w przypadku zdegenerowanych wartości własnych. Podsumowując można powiedzieć, że dla przekształceń liniowych samosprzężonych i izometrycznych *algebraiczna krotność* (liczba wskazująca, ile razy dany pierwiastek powtarza się w roz-

wiązaniu równania charakterystycznego) jest równa *krotności geometrycznej* (ilości liniowo niezależnych wektorów własnych odpowiadających temu pierwiastkowi). Dlatego *wektory własne przekształceń liniowych samosprężonych i izometrycznych rozpinają przestrzeń i można je wybrać w postaci zbioru ortonormalnego zupełnego*. W następnym paragrafie podamy dowód tego podstawowego twierdzenia.

Spójrzmy teraz na przykład zastosowania poprzednich twierdzeń.

Przykład. *Macierz obrotu i macierz Lorentza.* Chcemy zbadać macierz obrotu i macierz Lorentza z punktu widzenia podanych twierdzeń dotyczących wartości i wektorów własnych. Dwuwymiarowa macierz obrotu, którą oznaczamy symbolem R , ma postać

$$R = \begin{bmatrix} \cos\phi & \sin\phi \\ -\sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix}.$$

Jak widzieliśmy w § 1.4, opisuje ona efekt wywołany obrotem bazy w przestrzeni wektorowej. Macierz Lorentza opisuje wpływ transformacji Lorentza. Czytelnik z pewnością dobrze zna równania Lorentza wiążące ze sobą współrzędne czasoprzestrzenne dwóch obserwatorów poruszających się względem siebie ze stałą prędkością wzdłuż wspólnej osi x_3 x'_3 . W tym przypadku mamy

$$\begin{aligned} x'_1 &= x_1, & x'_2 &= x_2, \\ x'_3 &= \gamma(x_3 - vt), & t' &= \gamma(t - vx_3/c^2), \end{aligned} \quad (4.17)$$

gdzie $\gamma \equiv (1 - \beta^2)^{-1/2}$ i $\beta \equiv v/c$.

Transformacja opisywana równaniami (4.17) może być także wyrażona w postaci macierzowej. Wykorzystuje się przy tym podstawienie $x_4 = ict$. Jest ono o tyle uzasadnione, że wówczas

$$\sum_{i=1}^4 x_i^2 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - c^2 t^2, \quad (4.18)$$

a wielkość ta jest niezmiennikiem w szczególnej teorii względności, wyrażającym fakt stałości prędkości światła w różnych układach odniesienia. Współrzędne $(x_1, x_2, x_3, x_4 = ict)$ są nazywane *współrzędnymi w przestrzeni Minkowskiego*. Jeśli teraz zdefiniujemy transformację Lorentza wzorem

$$u' = Lu,$$

gdzie $u = (u_1, u_2, u_3, u_4)$ jest dowolnym czterowektorem w przestrzeni Minkowskiego, a L jest macierzą Lorentza

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \gamma & i\beta\gamma \\ 0 & 0 & -i\beta\gamma & \gamma \end{bmatrix}, \quad (4.19)$$

to czytelnik może łatwo sprawdzić, że wektor Lx jest dokładnie równy przekształconemu wektorowi x' , którego składowe podane są w równaniach (4.17).

Wykonując podstawienie

$$\gamma \equiv \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \equiv \cosh \alpha, \quad (4.20)$$

dostajemy prostą postać parametryczną macierzy Lorentza. Zarówno γ , jak $\cosh \alpha$ przyjmują wartości z przedziału od 1 ($\beta = 0$) do ∞ ($v = c$, $\beta = 1$). Stąd

$$\sinh \alpha = (\cosh^2 \alpha - 1)^{1/2} = \frac{\beta}{\sqrt{1 - \beta^2}}$$

oraz

$$\alpha = \operatorname{artgh} \beta.$$

Macierz L przechodzi przy tym podstawieniu w

$$L = L(\alpha) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cosh \alpha & i \sinh \alpha \\ 0 & 0 & -i \sinh \alpha & \cosh \alpha \end{bmatrix}. \quad (4.21)$$

Zbadajmy teraz ogólne własności R i L . Zauważmy najpierw, że $R^T R = I$ i $L^T L = I$, tzn. macierz odwrotna do każdej z nich jest równa transponowanej. Dla macierzy obrotu własność ta wyraża fakt, że obrót odwrotny do obrotu R o kąt ϕ można otrzymać zastępując ϕ przez $-\phi$, co jest równoważne transponowaniu R . W przypadku transformacji Lorentza z jej sensu fizycznego wynika, że branie odwrotności polega na zastąpieniu v przez $-v$ (tzn. α przez $-\alpha$) w macierzy L , co jest równoważne jej transponowaniu. Podsumowując możemy powiedzieć, że zarówno R , jak L są macierzami ortogonalnymi. Niemniej jednak, wszystkie przytoczone twierdzenia odnoszą się właściwie do macierzy unitarnych, a więc, jeśli chcemy wyciągnąć jakieś ogólniejsze wnioski na temat R i L , musimy sprawdzić, czy R i L mają silniejszą własność unitarności. Ponieważ elementy R są rzeczywiste, $R^T = R^\dagger$, a więc natychmiast dostajemy $R^\dagger R = I$, tzn. R jest istotnie macierzą unitarną. Natomiast $L^T \neq L^\dagger$, ponieważ elementy L są zespolone. Zwykle mnożenie pozwala stwierdzić, że $L^\dagger L \neq I$ i L nie jest macierzą unitarną. Tak więc nasze twierdzenia o transformacjach unitarnych nie dają nam żadnej informacji o L . Mówią nam jednak, jeśli chodzi o obroty, że R musi mieć wartości własne o module równym jedności i wektory własne wzajemnie do siebie ortogonalne (jeśli wartości własne są różne). Proste obliczenie pokazuje, że dwie wartości własne R są $\lambda_+ = e^{i\phi}$ i $\lambda_- = e^{-i\phi}$. Odpowiadające im wektory własne są $x_+ = (1, i)$ oraz $x_- = (1, -i)$. Tak więc

$$|\lambda_{\pm}| = |e^{\pm i\phi}| = 1,$$

zgodnie z tezą twierdzenia 4.17 i

$$(x_+, x_-) = 0,$$

zgodnie z twierdzeniem 4.18.

Chcąc uzyskać podobne informacje na temat L musimy oprzeć się na twierdzeniach nie bazujących na unitarności. Nie trzeba daleko szukać, jako że $L^\dagger = L$, tzn. L jest macierzą samosprężoną. Natychmiast możemy stąd wywnioskować, że wartości własne L są rzeczywiste (twierdzenie 4.12) i że wektory własne odpowiadające różnym wartościom własnym są ortogonalne (twierdzenie 4.18). Bezpośredni rachunek (zadanie 16) wykazuje, że wartości własne L są $\lambda_1 = 1$, $\lambda_2 = 1$, $\lambda_+ = \cosh \alpha + \sinh \alpha$ i $\lambda_- = \cosh \alpha - \sinh \alpha$. Wszystkie one są rzeczywiste, jak można było oczekiwać na podstawie twierdzenia 4.12. Odpowiadające im wektory własne, $x_1 = (1, 0, 0, 0)$, $x_2 = (0, 1, 0, 0)$, $x_+ = (0, 0, 1, i)$ oraz $x_- = (0, 0, 1, -i)$, są ortogonalne, zgodnie z twierdzeniem 4.18. Tak więc, z hermi-

towskości macierzy L wynikają wszystkie jej własności spektralne. Natomiast ortogonalność L nie nam dotychczas nie dała. Jedyne użyteczny związek wynikający z ortogonalności — to $\det L = \pm 1$ (twierdzenie 4.15). Związek ten jest prawdziwy również dla R (tzn. $\det R = \pm 1$), ponieważ R jest nie tylko unitarne, ale i ortogonalne. Zauważmy, że wyznacznik tak macierzy obrotu, jak i macierzy Lorentza równy jest iloczynowi wartości własnych, czego należało oczekiwać zważywszy, że wyznacznik jest niezmiennikiem transformacji podobieństwa (twierdzenie 3.13). Czytelnik może łatwo sprawdzić, że w tym przypadku ślad jest również niezmiennikiem transformacji podobieństwa (twierdzenie 3.14).

Ponieważ wydaje się, że pomiędzy macierzami unitarnymi i ortogonalnymi jest niewielka różnica, niektórzy czytelnicy mogą być zaskoczeni, że tak niewiele ważnych wniosków dało się wyciągnąć z ortogonalności L . Można by myśleć, że kłopoty z zespolonymi macierzami ortogonalnymi w rodzaju L biorą się z używanej przez nas postaci iloczynu wewnętrznego (zawierającego asymetryczną operację sprzężenia zespolonego) i, że gdybyśmy wprowadzili zwykły iloczyn wewnętrzny typu euklidesowskiego, na przykład

$$[x, y] = \sum_{i=1}^n \xi_i \eta_i, \quad (4.22)$$

moglibyśmy zachować niektóre twierdzenia. Przy braku sprzężenia zespolonego rezygnujemy z pewnych własności zwykłego iloczynu wewnętrznego, w szczególności z dodatniej określoności. Jednakże *pseudoiloczyn wewnętrzny* zdefiniowany równaniem (4.22) ma pewne atrakcyjne własności. Jest liniowy

$$[x+y, z] = [x, z] + [y, z], \quad (4.23)$$

jest symetryczny:

$$[x, y] = [y, x] \quad (4.24)$$

i jest jednorodny:

$$[\alpha x, y] = \alpha [x, y]. \quad (4.25)$$

Zauważmy, że w rzeczywistej przestrzeni wektorowej własności te niczym się nie różnią od otrzymanych z aksjomatów (1) i (2) w definicji 4.1. Opierając się na tych ogólnych własnościach, czytelnik może zbadać przestrzenie z *pseudoiloczynem wewnętrznym*, korzystając z naszego schematu postępowania przy przestrzeniach z iloczynem wewnętrznym. W przestrzeniach z pseudoiloczynem wewnętrznym można znaleźć wiele bliskich analogii z wynikami tego i poprzednich paragrafów.

Podstawowym problemem geometrycznym w takich przestrzeniach jest wyjaśnienie roli wektora o *zerowej* długości, tzn. wektora $x \neq 0$ spełniającego $[x, x] = 0$. W teorii operatorów kluczową wagę ma definicja *operatora transponowanego*, A^T , dla którego $[x, Ay] = [A^T x, y]$ dla każdego x, y . W reprezentacji macierzowej A ma dokładnie taką postać, jakiej należałoby oczekiwać i badanie *macierzy symetrycznych* ($S^T = S$) i ortogonalnych ($\mathcal{O}^T \mathcal{O} = I$) przebiega w sposób podobny do zademonstrowanego w tym paragrafie, z wyjątkiem pewnych kłopotów związanych z istnieniem wektorów o zerowej długości. Jednym z wyników jest fakt, że wektory własne macierzy symetrycznej należące do różnych wartości własnych są pseudoortogonalne, tzn. jeśli wektory te oznaczymy przez x_1 i x_2 , to $[x_1, x_2] = 0$. Zauważmy, że wartości własne operatora symetrycznego nie muszą być rzeczywiste w dowolnej (zespolonej) przestrzeni wektorowej. Również, jeśli \mathcal{O} jest macierzą ortogonalną (tak jak macierz Lorentza), to każda jej wartość własna należąca do *nierzero-*

wego wektora własnego jest równa 1 lub -1 . Wyprowadzenie tych i innych wniosków pozostawiamy czytelnikom w formie zadania (zadanie 4.27). Przy jego rozwiązywaniu okazuje się, że twierdzenia otrzymywane dla operatorów ortogonalnych w przestrzeni z pseudoiloczynem wewnętrznym są dużo słabsze niż twierdzenia dotyczące operatorów unitarnych w przestrzeni z prawdziwym iloczynem wewnętrznym.

Zamykamy ten paragraf poświęcony teorii spektralnej ciekawym uogólnieniem, zawierającym poprzednie twierdzenia jako przypadki szczególne. Wykazuje ono, że w gruncie rzeczy wyniki dotychczasowe zależały tylko od tego, czy badane przekształcenie liniowe komutowało z przekształceniem sprzężonym do niego.

Definicja 4.8. Przekształcenie liniowe nazywamy *normalnym* wtedy i tylko wtedy, gdy $AA^\dagger = A^\dagger A$.

Wszystkie przekształcenia liniowe samosprężone (hermitowskie i symetryczne) oraz izometryczne (unitarne i rzeczywiste ortogonalne) są normalne. Ponadto operatory antysamosprężone [antysymetryczne ($A = -A^T$) i antyhermitowskie ($A = -A^\dagger$)] są normalne.

Twierdzenie 4.19. Jeśli A jest normalne, to jego wektory własne należące do różnych wartości własnych są ortogonalne.

Dowód. Pokażemy najpierw, że jeśli A jest normalne, to

$$Ax = \lambda x \Leftrightarrow A^\dagger x = \lambda^* x.$$

Z normalności A wynika, że

$$\|Ax\|^2 = (Ax, Ax) = (A^\dagger Ax, x) = (AA^\dagger x, x) = (A^\dagger x, A^\dagger x) = \|A^\dagger x\|^2.$$

Ponieważ A jest normalne, to i $(A - \lambda)$ jest normalne i zważywszy, że $(A - \lambda)^\dagger = A^\dagger - \lambda^*$, zastępując A przez $(A - \lambda)$ w powyższym związku, dostajemy

$$\|Ax - \lambda x\|^2 = \|A^\dagger x - \lambda^* x\|^2.$$

Wynika stąd natychmiast, że

$$Ax = \lambda x \Leftrightarrow A^\dagger x = \lambda^* x$$

Możemy teraz podać dowód samego twierdzenia. Niech $Ax_1 = \lambda_1 x_1$, $Ax_2 = \lambda_2 x_2$. Wówczas

$$(x_1, Ax_2) = \lambda_2 (x_1, x_2)$$

i

$$(x_1, Ax_2) = (A^\dagger x_1, x_2) = (\lambda_1^* x_1, x_2) = \lambda_1 (x_1, x_2).$$

Zatem

$$(\lambda_1 - \lambda_2) (x_1, x_2) = 0 \Rightarrow (x_1, x_2) = 0,$$

jeżeli $\lambda_1 \neq \lambda_2$. c.b.d.o.

Dowolną macierz A można rozłożyć na sumę macierzy samosprężonej i antysamosprężonej, dzięki tożsamości

$$A \equiv \frac{1}{2}(A + A^\dagger) + \frac{1}{2}(A - A^\dagger):$$

tutaj $\frac{1}{2}(A + A^\dagger)$ jest samosprężone, a $\frac{1}{2}(A - A^\dagger)$ — antysamosprężone. Możemy również rozłożyć A następująco:

$$A \equiv \left[\frac{1}{2}(A + A^\dagger) \right] + i \left[\frac{1}{2}i(A^\dagger - A) \right]. \quad (4.26)$$

Wówczas zarówno $B \equiv \frac{1}{2}(A + A^\dagger)$, jak i $C \equiv \frac{1}{2}i(A^\dagger - A)$ są *hermitowskie*. Zauważmy, że B i C komutują ze sobą wtedy i tylko wtedy, gdy A i A^\dagger komutują, tzn. gdy A jest normalne. Rozkład ten jest operatorowym analogonem rozkładu liczby zespolonej na część rzeczywistą i urojoną.

4.7. DIAGONALIZACJA

Zdiagonalizowanie macierzy jest równoważne znalezieniu jej wartości własnych — są one po prostu elementami diagonalnymi. Tak więc rozwiązanie problemu fizycznego często wymaga diagonalizacji pewnej macierzy. W mechanice klasycznej można diagonalizować tensor momentu bezwładności (1.98), a w mechanice kwantowej po zdiagonalizowaniu reprezentacji macierzowej operatora odpowiadającego jakiejś obserwabli elementy diagonalne odpowiadają możliwym wynikom pomiaru tej obserwabli.

Widzieliśmy, że n wektorów własnych normalnej macierzy A o wymiarach $n \times n$ mającej niezdegenerowane widmo (tzn. n różnych wartości własnych) jest ortogonalnych. Są one zatem liniowo niezależne i rozpinają przestrzeń, a więc na mocy twierdzenia 3.16 można zbudować macierz diagonalizującą P , biorąc i -ty wektor własny jako i -tą kolumnę P . Wówczas

$$(P^{-1}AP)_{ij} = \lambda_i \delta_{ij}.$$

Łatwo zauważyć, że macierz diagonalizująca, P , jest macierzą unitarną. Niech

$$P = \begin{bmatrix} p_{11} & p_{12} & \cdots & p_{1n} \\ p_{21} & p_{22} & & p_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ p_{n1} & p_{n2} & \cdots & p_{nn} \end{bmatrix}.$$

W notacji używanej w twierdzeniu 3.16, $X_i = (p_{1i}, \dots, p_{ni})$ jest i -tym wektorem własnym. Mamy prawo założyć, że jest on unormowany. Ponieważ wektory własne są ortogonalne, więc

$$(X_i, X_j) = \sum_{k=1}^n p_{ki}^* p_{kj} = \delta_{ij},$$

co w zapisie macierzowym ma postać $P^\dagger P = I$, a więc P jest unitarna.

Fakt, że macierz normalna o różnych wartościach własnych może być zdiagonalizowana przez unitarną transformację podobieństwa, stanowi bardzo ważny wynik. Natomiast ograniczenie jedynie do widm niezdegenerowanych jest ograniczeniem silnym, bowiem w większości sytuacji w fizyce mamy do czynienia z widmami zdegenerowanymi. Byłoby zatem korzystne usunąć to ograniczenie, a przy tym są przesłanki, że istotnie można je usunąć, pozostawiając resztę twierdzenia bez zmian.

Rozważmy przypadek macierzy hermitowskich. Jeśli wartości własne macierzy hermitowskiej A nie są różne, można nieco zaburzyć elementy A , dodając macierz hermitowską δA taką, żeby wypadkowa macierz hermitowska $A + \delta A$ miała różne wartości własne. Sytuacja taka jest znana w mechanice kwantowej, gdzie uwzględnienie zaniedbanego początkowo zaburzenia (np. pola magnetycznego) usuwa zdegenerowanie widma. Po usunięciu degeneracji wszystkie wartości własne są różne, stosuje się całe poprzednie

rozumowanie i wiemy, że istnieje transformacja podobieństwa diagonalizująca macierz $A + \delta A$. Dopóki δA jest różne od zera i wartości własne są różne wiemy, że odpowiadające im wektory własne są ortogonalne, ponieważ $A + \delta A$ jest hermitowskie. Skoro wektory własne muszą być ortogonalne dla dowolnie małych, ale niezerowych δA , sensowną rzeczą jest przyjąć, że gdy z δA przejdziemy do zera, nie staną się one nagle liniowo zależne. Dlatego można oczekiwać, że przy $\delta A \rightarrow 0$ mamy nadal pełny zbiór k liniowo niezależnych wektorów własnych dla k -krotnego pierwiastka wielomianu charakterystycznego, a zatem, że istnieje unitarna transformacja podobieństwa diagonalizująca A^* .

Podamy teraz dowód, że unitarna macierz diagonalizująca da się skonstruować dla dowolnej macierzy hermitowskiej niezależnie od tego, czy jej wartości własne powtarzają się, czy nie.

Twierdzenie 4.20. Każda macierz hermitowska A może być sprowadzona do postaci diagonalnej przez unitarną transformację podobieństwa, tzn. istnieje unitarna macierz U taka, że $U^{-1}AU$ jest macierzą diagonalną (o elementach diagonalnych będących wartościami własnymi A).

Dowód. Podamy dowód indukcyjny, zaczynając od przypadku 2×2 , Innymi słowy, dowiedzimy *explicitie* prawdziwości twierdzenia dla macierzy 2×2 , a następnie, zakładając prawdziwość dla przypadku $(n-1) \times (n-1)$, pokażemy, że twierdzenie jest również słuszne dla $n \times n$. Taka procedura gwarantuje słuszność twierdzenia dla każdego n . Moglibyśmy oczywiście rozpocząć dowód indukcyjny od macierzy hermitowskiej 1×1 (tzn. macierzy składającej się z jednego elementu rzeczywistego). Wybraliśmy macierz 2×2 , ponieważ jest najmniejszą macierzą mogącą mieć wartość własną o krotności większej niż 1, a więc przykład ten jest bardziej obrazowy.

Wiemy, że twierdzenie jest słuszne ogólnie, a w szczególności dla macierzy 2×2 , gdy wartości własne są różne. W przypadku zdegenerowanym 2×2 , jeśli wartości własne nie są różne, to muszą być równe sobie. Oczywiście sytuacja taka może zajść jedynie, jeżeli macierz A jest postaci diagonalnej

$$A = \begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & a \end{bmatrix}.$$

(Jeśli czytelnik ma ochotę to sprawdzić, może rozwiązać równanie charakterystyczne najogólniejszej macierzy hermitowskiej 2×2

$$A = \begin{bmatrix} a & b \\ b^* & c \end{bmatrix},$$

gdzie a i c są rzeczywiste). Wówczas dowolny wektor jest wektorem własnym macierzy

$$\begin{bmatrix} a & 0 \\ 0 & a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}.$$

* Z fizyki wiemy, że jeśli zaburzenie δA zostaje wyłączone powoli i ostrożnie, tzn. *adiabaticznie*, to liczby kwantowe nie ulegną zmianie; są one tzw. *niezmiennikami adiabaticznymi*. (W rzeczywistości ten właśnie fakt doprowadził Bohra i Sommerfelda do skwantowania klasycznych całek działania, o których wiadano, że są niezmiennikami adiabaticznymi). Fakt, że liczby kwantowe nie zmieniają się, oznacza stałość wektorów własnych przy adiabaticznym wyłączeniu zaburzenia. Nie ma zatem niebezpieczeństwa, że wektory własne, ortogonalne cały czas przy $\delta A \neq 0$, staną się liniowo zależne przy $\delta A \rightarrow 0$.

Tak więc mamy prawo wybrać dwa ortonormalne wektory, na przykład

$$u_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} \quad \text{i} \quad u_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix},$$

a stąd operator

$$U = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

jest operatorem unitarnym, który „sprowadza” A do postaci diagonalnej przez transformację podobieństwa. (Oczywiście A miało od początku postać diagonalną). Innych możliwości w przypadku 2×2 nie ma. Podamy teraz dowód przez indukcję dla macierzy $n \times n$.

Założmy, że każda macierz hermitowska $(n-1) \times (n-1)$ może być zdiagonalizowana przez unitarną transformację podobieństwa. Niech λ_1 będzie dowolną wartością własną A a odpowiadający jej unormowany wektor własny oznaczmy

$$v_1 = (v_{11}, v_{21}, \dots, v_{n1}).$$

Utwórzmy teraz operator unitarny V , wybierając wektor v_1 jako pierwszą kolumnę V , a jako pozostałe $n-1$ kolumn — zbiór $n-1$ wektorów ortonormalnych, z których wszystkie są ortogonalne do v_1 . Mamy więc

$$V = (v_{i1} | v_{i2} | \dots | v_{in}),$$

gdzie v_{ij} tworzy wektor j -tej kolumny i $Av_1 = \lambda_1 v_1$ (to znaczy $\sum_k a_{k1} v_{k1} = \lambda_1 v_{k1}$) oraz $(v_i, v_j) = \delta_{ij}$.

Obliczmy teraz macierz $V^{-1}AV$. Elementy jej są dane wzorem

$$(V^{-1}AV)_{ji} = (V^\dagger AV)_{ji} = \sum_k v_{ki}^* \sum_l a_{kl} v_{lj}, \quad (4.27)$$

a w szczególności

$$(V^{-1}AV)_{i1} = \sum_k v_{ki}^* \sum_l a_{kl} v_{l1} = \sum_k v_{ki}^* \lambda_1 v_{k1} = \lambda_1 \delta_{i1}.$$

Ponieważ

$$(V^{-1}AV)^\dagger = V^\dagger A^\dagger (V^{-1})^\dagger = V^{-1}AV,$$

więc $V^{-1}AV$ jest hermitowskie i

$$(V^{-1}AV)_{ii} = (\lambda_1 \delta_{i1})^* = \lambda_1 \delta_{i1}$$

dzięki rzeczywistości wartości własnych. W rezultacie macierz $V^{-1}AV$ ma postać

$$V^{-1}AV = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & & \\ 0 & & & & \\ \cdot & & & & \\ \cdot & & & & \\ \cdot & & & & \\ 0 & & & & \end{bmatrix} \equiv B,$$

gdzie A' jest macierzą hermitowską $(n-1) \times (n-1)$ o elementach danych równaniem (4.27). Z założenia indukcyjności A' można zdiagonalizować macierz unitarną V' o wymiarach

$(n-1) \times (n-1)$, tzn. $(V')^{-1}A'V'$ jest diagonalne. Zatem $(n \times n)$ -wymiarowa macierz $B = V^{-1}AV$ może być zdiagonalizowana.

Pozostaje jedynie problem, czy istnieje pojedyncza unitarna macierz diagonalizująca dla A . Dla dopełnienia konstrukcji definiujemy macierz unitarną

$$W = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \begin{array}{|c} \hline V' \\ \hline \end{array} & & \\ \vdots & & & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & \end{bmatrix}.$$

Wówczas, ponieważ $(V')^{-1}A'V'$ jest (z założenia) diagonalne, więc

$$W^{-1}BW = W^\dagger BW$$

będzie diagonalne. Ale

$$W^{-1}BW = W^{-1}V^{-1}AVW = (VW)^{-1}A(VW) = U^{-1}AU,$$

gdzie $U = VW$. Unitarność U wynika z unitarności V i W , bo

$$U^\dagger = (VW)^\dagger = W^\dagger V^\dagger = W^{-1}V^{-1} = (VW)^{-1} = U^{-1}.$$

Podaliśmy zatem explicite konstrukcję unitarnej macierzy U , diagonalizującej dowolną macierz hermitowską przez transformację podobieństwa. Tym samym dowód został zakończony.

Wynika stąd, że zawsze można znaleźć zbiór ortonormalny zupełny wektorów tworzący bazę, w której macierz hermitowska przekształcenia liniowego A jest diagonalna. Dowód nasz wskazuje również na fakt, że dla każdej zdegenerowanej wartości własnej λ_0 o krotności algebraicznej k ($k \leq n$) można znaleźć k liniowo niezależnych wektorów własnych należących do niej. Można się o tym przekonać albo bezpośrednio, badając proces konstrukcji przedstawiony w twierdzeniu, albo też spostrzegając, że wyznacznik macierzy unitarnej ma zawsze wartość bezwzględną równą jeden, a więc nigdy nie jest zerem. Zatem wektory utworzone z kolumn przekształcenia A , które są jego wektorami własnymi, muszą być liniowo niezależne na mocy własności (8) wyznaczników (§ 3.8). Tak więc krotność algebraiczna jest równa geometrycznej dla operatorów hermitowskich; wektory własne operatora hermitowskiego tworzą układ zupełny.

Twierdzenie to sformułowaliśmy dla macierzy hermitowskich i unitarnych transformacji podobieństwa. Niemniej jednak, jak można sprawdzić, dowód da się zmodyfikować (przez ominięcie jedynie sprzężeń zespolonych i zastąpienie krzyży przez symbole transpozycji), dając następujące twierdzenie.

Twierdzenie 4.21. Każdą (rzeczywistą) macierz symetryczną można sprowadzić do postaci diagonalnej poprzez rzeczywistą ortogonalną transformację podobieństwa.

Pokazaliśmy już, że każdą macierz A można zapisać jako sumę dwóch macierzy hermitowskich: $A = B + iC$ (równanie 4.26). Dowiedliśmy teraz, że każda macierz hermitowska może być zdiagonalizowana przez unitarną transformację podobieństwa. Stosując ten wniosek do B i C , chciałoby się zapytać: Dlaczego nie można dowieść, że każda macierz (A), hermitowska lub nie, może być tą drogą zdiagonalizowana? Odpowiedź brzmi, że diagonalizacja B jest dokonywana w specjalnej bazie — bazie wektorów własnych B — a nie ma powodu przypuszczać, że baza, w której B przyjmuje postać diagonalną,

sprowadzi nam równocześnie C do takiej postaci lub, innymi słowy, że wektory własne B będą także wektorami własnymi C . Niemniej jednak, jeśli B i C posiadają wspólny zbiór wektorów własnych, można zdiagonalizować jednocześnie B i C przy pomocy jednej transformacji podobieństwa, a więc A jest diagonalizowalne. Każę nam to poszukać warunków na dwie macierze hermitowskie, gwarantujących ich jednoczesną diagonalizowalność. Następujące twierdzenie, również bardzo ważne w teorii kwantowej, podaje taki warunek.

Twierdzenie 4.22. Dwie macierze hermitowskie B i C komutują wtedy i tylko wtedy, gdy mają wspólny zbiór wektorów własnych i tworzy on układ ortonormalny zupełny.

Dowód.

1. Przypuśćmy, że istnieje wspólny ortonormalny zupełny zbiór wektorów własnych $\{x_i\}$. Wówczas $Bx_i = b_i x_i$ i $Cx_i = c_i x_i$. Zatem $BCx_i = B(c_i x_i) = c_i Bx_i = c_i b_i x_i$ i podobnie $CBx_i = c_i b_i x_i$. Stąd $(BC - CB)x_i = 0$, dla każdego x_i . Ale x_i rozpinają przestrzeń, a więc $(BC - CB)x = 0$ dla każdego x , skąd $BC = CB$.

2. Czeką nas teraz trudniejsza „połowa” twierdzenia: Załóżmy, że $BC = CB$ i $Bx_i = b_i x_i$, gdzie wektory x_i są ortonormalne. Wówczas

$$CBx_i = b_i Cx_i \Rightarrow B(Cx_i) = b_i (Cx_i),$$

skąd wynika, że Cx_i jest wektorem własnym B , odpowiadającym wartości własnej b_i . Są teraz dwie możliwości.

i) Widmo nie jest zdegenerowane, czyli krotność wszystkich b_i jest równa jeden. Wówczas dla każdego i , Cx_i musi być równe stałej pomnożonej przez x_i : $Cx_i = c_i x_i$, tzn. x_i jest wektorem własnym C należącym do wartości własnej c_i , co kończy dowód.

ii) Widmo jest zdegenerowane, tzn. istnieją wartości własne b_i o krotności $m > 1$. Zatem musi istnieć m wektorów własnych, $(Cx_i^{(1)}, Cx_i^{(2)}, \dots, Cx_i^{(k)}, \dots, Cx_i^{(m)})$, należących do wartości własnej b_i , z których każdy jest kombinacją liniową m liniowo niezależnych wektorów własnych $(x_i^{(1)}, \dots, x_i^{(k)}, \dots, x_i^{(m)})$, także należących do b_i . Wybierzemy $x_i^{(k)}$ tak, aby tworzyły zbiór ortonormalny i zapiszemy te kombinacje liniowe w postaci

$$\begin{aligned} Cx_i^{(1)} &= \sum_{j=1}^m \alpha_{j1} x_i^{(j)}, \\ &\vdots \\ Cx_i^{(k)} &= \sum_{j=1}^m \alpha_{jk} x_i^{(j)}, \\ &\vdots \\ Cx_i^{(m)} &= \sum_{j=1}^m \alpha_{jm} x_i^{(j)}. \end{aligned} \tag{4.28}$$

Jak czytelnik może sprawdzić, macierz współczynników (α_{ij}) jest hermitowska.

Gdy brak degeneracji, $m = 1$ dla każdego i . Zatem badanie przypadku zdegenerowanego zawiera już przypadek bez degeneracji. Chcemy teraz znaleźć takie kombinacje liniowe

wektorów własnych B , $x_i^{(k)}$, należących do b_i , które są równocześnie wektorami własnymi C . Gdyby kombinacja liniowa

$$\sum_{k=1}^m \gamma_k x_i^{(k)}$$

miała być wektorem własnym C (tak jak jest nim dla B), byłoby potrzeba, aby wyrażenie

$$C \left(\sum_{k=1}^m \gamma_k x_i^{(k)} \right) \equiv \sum_{j,k=1}^m \gamma_k \alpha_{jk} x_i^{(j)}$$

było postaci

$$c \left(\sum_{j=1}^m \gamma_j x_i^{(j)} \right).$$

Jest to możliwe, o ile istnieją współczynniki γ_k takie, że

$$\sum_{k=1}^m \alpha_{jk} \gamma_k = c \gamma_j. \quad (4.29)$$

Ale jest to dokładnie problem wektorów i wartości własnych macierzy hermitowskiej (α_{jk}) o wymiarach $m \times m$. Wiemy, że istnieje m liniowo niezależnych rozwiązań (wektorów własnych), które można tak wybrać, aby tworzyły zbiór ortonormalny. Znajdujemy więc m wartości własnych, c_μ , spośród których niektóre mogą być równe i m ortonormalnych wektorów własnych, $\gamma^{(\mu)}$, i ostatecznie mamy m kombinacji liniowych

$$y_i^{(\mu)} = \sum_{k=1}^m \gamma_k^{(\mu)} x_i^{(k)},$$

które są ortonormalnymi wektorami własnymi równocześnie macierzy B i C , co czytelnik może łatwo sprawdzić. c.b.d.o.

W mechanice kwantowej twierdzenie to (w rzeczywistości uogólnienie twierdzenia na przypadek nieskończonej wymiarowej przestrzeni) dowodzi na przykład, że operatory H (hamiltonian), L^2 (kwadrat całkowitego momentu pędu) i L_z (zetaowa składowa momentu pędu), komutujące ze sobą parami, posiadają wspólny zbiór wektorów własnych, a więc odpowiadające im obserwable mogą być zmierzone jednocześnie. Wynika z niego również, że p_x i x nie mogą być jednocześnie zmierzone.

Chociaż podaliśmy dowód twierdzenia dla dwóch macierzy hermitowskich ze względu na ich duże znaczenie w teorii kwantowej, jest ono oczywiście słuszne również dla (rzeczywistych) macierzy symetrycznych. Wystarczy tylko opuścić sprzężenia zespolone i słowo „hermitowski” zastępować wszędzie przez „symetryczny”.

Uogólnimy teraz poprzedni wynik dotyczący diagonalizowalności macierzy *hermitowskie*. (twierdzenie 4.20), a jednocześnie scharakteryzujemy ściśle klasę macierzy, które można zdiagonalizować unitarną transformacją podobieństwa.

Twierdzenie 4.23. Macierz A może być sprowadzona do postaci diagonalnej przez unitarną transformację podobieństwa wtedy i tylko wtedy, gdy jest normalna.

Dowód. Każdą macierz A można rozłożyć na sumę dwóch macierzy hermitowskich; zgodnie z (4.26)

$$A = B + iC,$$

gdzie B i C są hermitowskie. A może być zdiagonalizowana przez unitarną transformację podobieństwa wtedy i tylko wtedy, gdy można ją zdiagonalizować jednocześnie macierze B i C , a warunkiem koniecznym i dostatecznym na to jest komutowanie B i C (twierdzenie 4.22). Ale, jak zauważyliśmy w związku z (4.26), B i C komutują wtedy i tylko wtedy, gdy A i A^\dagger komutują, tzn. wtedy i tylko wtedy, gdy A jest normalna. Zatem warunkiem koniecznym i dostatecznym diagonalizowalności macierzy unitarną transformacją podobieństwa jest jej normalność. c.b.d.o.

Twierdzenie to mówi nam, że każda macierz unitarna może być zdiagonalizowana unitarną transformacją podobieństwa. Rzeczywista macierz ortogonalna jest oczywiście macierzą unitarną, a więc powyższe stwierdzenie także ją obejmuje. Zauważmy jednak, że macierz diagonalizująca będzie na ogół macierzą *unitarną*, a nie rzeczywistą ortogonalną. Na przykład macierz obrotu jest rzeczywista i ortogonalna, ale może być zdiagonalizowana tylko przez macierz unitarną.

Sytuacja jest tu przeciwna niż dla macierzy symetrycznych. Macierz symetryczna jako hermitowska może być zdiagonalizowana macierzą unitarną. Ale ponieważ wartości własne macierzy symetrycznej są rzeczywiste, diagonalizująca ją macierz unitarna jest w gruncie rzeczy rzeczywista ortogonalna. Niemniej jednak, wartości własne rzeczywistej macierzy ortogonalnej są na ogół zespolone, a więc diagonalizującej ją macierzy unitarnej nie da się zwykle wybrać w postaci rzeczywistej ortogonalnej.

4.8. O ROZWIĄZALNOŚCI RÓWNAŃ LINIOWYCH*

W kilku ostatnich paragrafach omawialiśmy dość szczegółowo operatory samosprężone. W tym paragrafie chcemy otrzymać związki pomiędzy własnościami operatora liniowego A i sprzężonego do niego operatora A^\dagger . Będziemy z wyników tych korzystać w teorii równań całkowych (rozdział 8). Zaczniemy od prostego spostrzeżenia:

Twierdzenie 4.24. Jeśli A , operator liniowy w skończonej przestrzeni wektorowej, ma wartości własne λ_i , to A^\dagger ma wartości własne λ_i^* .

Dowód. Jeżeli λ należy do widma A , to $\det(A - \lambda I) = 0$. Z ogólnego związku

$$\det[(A - \lambda I)^\dagger] = [\det(A - \lambda I)]^*$$

wynika natychmiast, że

$$\det(A^\dagger - \lambda^* I) = 0,$$

co oznacza, że λ^* należy do widma A^\dagger . c.b.d.o.

Ciekawszy jest wynik dotyczący własności ortogonalności wektorów własnych A i A^\dagger . Następujące bardzo pożyteczne twierdzenie jest uogólnieniem twierdzenia 4.18.

Twierdzenie 4.25. Niech $\{\lambda_i\}$ będzie widmem A (a więc $\{\lambda_i^*\}$ widmem A^\dagger). Wówczas, jeżeli ϕ_j jest dowolną funkcją własną A należącą do λ_j , a ψ_i — dowolną funkcją własną A^\dagger należącą do λ_i^* , to $(\psi_i, \phi_j) = 0$, jeśli tylko $\lambda_i \neq \lambda_j$.

Dowód. Zachodzi równość $A\phi_j = \lambda_j\phi_j$. Mnożymy ją (w sensie iloczynu wewnętrznego) lewostronnie przez ψ_i

$$(\psi_i, A\phi_j) = \lambda_j(\psi_i, \phi_j),$$

* Materiał z tego paragrafu będzie potrzebny dopiero w rozdziale 8.

a stąd

$$(A^\dagger \psi_i, \phi_j) - \lambda_j (\psi_i, \phi_j) = 0.$$

Ale $A^\dagger \psi_i = \lambda_i^* \psi_i$, a więc

$$(\lambda_i - \lambda_j) (\psi_i, \phi_j) = 0.$$

Jeżeli $\lambda_i \neq \lambda_j$, to $(\psi_i, \phi_j) = 0$, zgodnie z tezą twierdzenia. c.b.d.o.

Dla macierzy samosprężonej A potrafiliśmy pokazać, że każda wartość własna z widma A o krotności algebraicznej $m \geq 1$ ma dokładnie m liniowo niezależnych wektorów własnych. Nie jest to prawdą dla dowolnej macierzy, ale zachodzi następujące związane z tym twierdzenie.

Twierdzenie 4.26. Niech A będzie operatorem liniowym w skończenie wymiarowej przestrzeni wektorowej i niech λ będzie wartością własną A , a λ^* odpowiadającą jej wartością własną A^\dagger . Wówczas, jeśli istnieje μ niezależnych liniowo wektorów własnych ϕ_i należących do λ , to istnieje również μ niezależnych liniowo wektorów własnych ψ_i należących do λ^* . Zauważmy, że μ może być mniejsze niż m , algebraiczna krotność λ (i λ^*).

Dowód. Przede wszystkim możemy wybrać zbiór $\{\phi_i\}$ tak, aby był ortonormalny; gdyby wybrany zbiór nie miał tej własności, zastosowalibyśmy metodę Grama-Schmidta w oparciu o fakt, że jeśli ϕ_1 i ϕ_2 są wektorami własnymi należącymi do λ , to $\alpha\phi_1 + \beta\phi_2$ również należy do λ . To samo dotyczy zbioru $\{\psi_i\}$. Zakładamy więc, że mamy do czynienia ze zbiorami ortonormalnymi. Oznaczmy przez μ liczbę elementów $\{\phi_i\}$ i przez ν liczbę elementów $\{\psi_i\}$. Chcemy pokazać, że $\mu = \nu$.

Założmy najpierw, że $\nu > \mu$ i zdefiniujmy operator B wzorem

$$Bx \equiv Ax + \sum_{j=1}^{\mu} \psi_j (\phi_j, x),$$

B jest oczywiście operatorem liniowym. Pokażemy teraz, że λ nie jest wartością własną B . Rozważmy równość

$$Bx = \lambda x,$$

czyli

$$Ax + \sum_{j=1}^{\mu} \psi_j (\phi_j, x) = \lambda x. \quad (4.30)$$

Mnożąc ją lewostronnie (w sensie iloczynu wewnętrznego) przez ψ_k , dostajemy

$$(\psi_k, Ax) + \sum_{j=1}^{\mu} (\psi_k, \psi_j) (\phi_j, x) = \lambda (\psi_k, x).$$

Ale $(\psi_k, \psi_j) = \delta_{kj}$, a więc

$$(\psi_k, Ax) + (\phi_k, x) = \lambda (\psi_k, x), \quad k = 1, 2, \dots, \mu$$

lub

$$(\phi_k, x) = \lambda (\psi_k, x) - (A^\dagger \psi_k, x).$$

Jednakże $A^\dagger \psi_k = \lambda^* \psi_k$, a więc

$$(\phi_k, x) = \lambda (\psi_k, x) - (\lambda^* \psi_k, x) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, \mu. \quad (4.31)$$

Powracając do (4.30), widzimy, że

$$Ax = \lambda x.$$

Ale skoro x jest wektorem własnym A należącym do wartości własnej λ , można go zapisać jako

$$x = \sum_{i=1}^{\mu} c_i \phi_i.$$

Użycie (4.31) wraz z warunkiem ortonormalności ϕ_i daje

$$c_k = (\phi_k, x) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, \mu.$$

Zatem $x = 0$. Ponieważ pokazaliśmy, że z równości $(B - \lambda I)x = 0$ wynika $x = 0$, więc na mocy twierdzenia 3.7 istnieje operator odwrotny do $(B - \lambda I)$, a w szczególności można rozwiązać równanie niejednorodne

$$(B - \lambda I)x = \psi_\nu,$$

które przepisujemy w postaci

$$Ax + \sum_{j=1}^{\mu} \psi_j(\phi_j, x) - \lambda x = \psi_\nu.$$

Po pomnożeniu lewostronnie przez ψ_ν dostajemy

$$(\psi_\nu, Ax) - \lambda(\psi_\nu, x) = 1,$$

gdzie człon zawierający sumowanie znika dzięki założeniu $\nu > \mu$. Ponieważ $A^\dagger \psi_\nu = \lambda^* \psi_\nu$, wnioskujemy, że

$$(\lambda^* \psi_\nu, x) - \lambda(\psi_\nu, x) = 1,$$

czyli $0 = 1$, co jest jawną sprzecznością. Stąd wniosek, że nasze początkowe założenie ($\nu > \mu$) jest fałszywe. Zatem $\mu \geq \nu$. Podobna argumentacja, oparta na operatorze C zdefiniowanym wzorem

$$Cx \equiv A^\dagger x + \sum_{j=1}^{\nu} \phi_j(\psi_j, x),$$

pokazuje, że $\mu > \nu$ nie może być również spełnione, a więc pozostaje nam tylko $\mu = \nu$. c.b.d.o.

Podkreślamy przy tym powtórnie, że choć $\mu = \nu$, to μ może być mniejsze (ale nie większe) od m , algebraicznej krotności λ i λ^* . W oparciu o ten wynik możemy otrzymać ważne uogólnienie twierdzenia 3.17.

Twierdzenie 4.27. W skończonej wymiarowej przestrzeni wektorowej równanie

$$(A - \lambda I)x = y$$

ma rozwiązanie wtedy i tylko wtedy, gdy $(\psi_i, y) = 0$ dla każdego ψ_i spełniającego

$$(A^\dagger - \lambda^* I)\psi_i = 0.$$

Dowód. Twierdzenie to wynika z poprzedniego. Ustaliliśmy tam, że jeżeli

$$A\phi_i = \lambda\phi_i, \quad (i = 1, 2, \dots, \mu)$$

oraz

$$A^\dagger \psi_i = \lambda^* \psi_i, \quad (i = 1, 2, \dots, \mu),$$

to λ nie jest wartością własną B , gdzie B jest zdefiniowane wzorem

$$B \equiv Ax + \sum_{j=1}^{\mu} \psi_j(\phi_j, x).$$

Stąd równanie

$$(B - \lambda I)x = \left[Ax + \sum_{j=1}^{\mu} \psi_j(\phi_j, x) - \lambda x \right] = y \quad (4.32)$$

ma rozwiązanie, ponieważ $\det(B - \lambda I) \neq 0$, a więc $(B - \lambda I)^{-1}$ istnieje. Załóżmy najpierw, że $(\psi_i, y) = 0$ dla każdego i . Wówczas, mnożąc lewostronnie (4.32) przez ψ_i , dostajemy

$$(\psi_i, Ax) + (\phi_i, x) - \lambda(\psi_i, x) = (\psi_i, y), \quad i = 1, 2, \dots, \mu.$$

Ponieważ $(\psi_i, Ax) = (A^T \psi_i, x) = (\lambda^* \psi_i, x) = \lambda(\psi_i, x)$, wynika stąd, że

$$(\phi_i, x) = (\psi_i, y) = 0 \quad \text{dla każdego } i.$$

Zatem (4.32) sprowadza się do

$$(A - \lambda I)x = y. \quad (4.33)$$

Skoro (4.32) ma rozwiązanie, musi je mieć także (4.33), a to właśnie mieliśmy pokazać.

Implikacja przeciwna jest trywialna w dowodzeniu. Jeżeli założymy, że $(A - \lambda I)x = y$ ma rozwiązanie x , to mnożąc lewostronnie przez ψ_i , dostajemy

$$(\psi_i, Ax) - \lambda(\psi_i, x) = (\psi_i, y), \quad i = 1, 2, \dots, \mu.$$

Ponieważ, jak niedawno pokazaliśmy, $(\psi_i, Ax) = \lambda(\psi_i, x)$, więc $(\psi_i, y) = 0$ dla każdego i . c.b.d.o.

Zauważmy, że o ile założymy, że A ma zupełny zbiór wektorów własnych, to twierdzenie powyższe daje wynik zbliżony do twierdzenia 3.17. W przypadku tym, oznaczając przez $\{x_i\}$ wektory własne A , możemy napisać

$$x = \sum_{i=1}^n \xi_i x_i, \quad y = \sum_{i=1}^n \eta_i x_i,$$

skąd

$$(A - \lambda I)x = \sum_{i=1}^n (\lambda_i - \lambda) \xi_i x_i = y = \sum_{i=1}^n \eta_i x_i,$$

gdzie λ_i jest wartością własną odpowiadającą x_i . Zatem

$$\sum_{i=1}^n [(\lambda_i - \lambda) \xi_i - \eta_i] x_i = 0,$$

a ponieważ x_i są liniowo niezależne, więc

$$(\lambda_i - \lambda) \xi_i = \eta_i$$

dla każdego i . Gdy $\lambda_v = \lambda$, rozwiązanie istnieje tylko przy $\eta_v = 0$. Podobnie jeśli rozwiązanie istnieje przy $\lambda_v = \lambda$, to $\eta_v = 0$. Oczywiście jeżeli $\lambda_v = \lambda$ i $\eta_v = 0$, to współczynnik ξ_v jest całkowicie dowolny. Zakładając dla uproszczenia zapisu, że tylko λ_v sprawia kłopot, dostajemy rozwiązanie na x

$$x = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq v}}^n \frac{\eta_i}{\lambda_i - \lambda} x_i + a x_v,$$

gdzie a jest dowolną stałą. Tak więc, przy założeniu zupełności zbioru wektorów własnych A , możemy otrzymać explicite rozwiązanie równań, tak jak w twierdzeniu 3.17, gdzie

dla wygody przyjmowaliśmy $\lambda = 0$. Zauważmy, że związek $\eta_r = 0$ oznacza, że y jest postaci

$$y = \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq r}}^n \eta_i x_i.$$

Ale, oznaczając przez y_r wektor własny A^T należący do λ_r^* , dostajemy z twierdzenia 4.25

$$(y_r, y) = 0,$$

a więc przyjęcie $\eta_r = 0$ jest równoważne $(y_r, y) = 0$. Znowu tutaj zakładamy brak degeneracji widma. Symbolikę można jednak zmienić tak, aby obejmowała przypadek wartości własnej o krotności większej niż jeden.

Tak więc, praktycznie bez żadnych założeń o operatorze A , mogliśmy otrzymać bardzo ogólne warunki rozwiązalności układu równań liniowych. Uzyskane tu wyniki będą bardzo istotne przy dyskusji równań całkowych w rozdziale 8.

4.9. ZASADY MINIMUM

W paragrafie tym chcemy pokazać, jak można do iloczynu wewnętrznego w przestrzeni wektorowej zastosować pojęcia występujące w rachunku wariacyjnym i jak ciekawe wyniki uzyskuje się tą drogą.

W rozdziale 2 rozważaliśmy ogólny problem znalezienia ekstremum całki przy dość gładkiej funkcji podcałkowej. Wyprowadzone wówczas równania Eulera–Lagrange’a są równaniami różniczkowymi drugiego rzędu, na ogół nieliniowymi, a przeto bardzo skomplikowanymi. Rozpatrzmy dla przykładu podstawowy problem fizyki klasycznej — drugie prawo Newtona — dla dowolnego potencjału:

$$m\ddot{\mathbf{r}} = -\nabla V(\mathbf{r}).$$

Jak widzieliśmy w § 2.5, równanie to można wyprowadzić bezpośrednio z równań Eulera–Lagrange’a dla danego układu. Stanowi ono jednak na ogół układ równań nieliniowych, niezwykle trudny do rozwiązania. Trudności tej często nie spostrzegamy ze względu na fakt, że niektóre postacie $V(\mathbf{r})$ prowadzą do istnienia pewnych zachowanych wielkości. Wówczas rozwiązanie układu równań liniowych drugiego rzędu sprowadza się do obliczenia całek pierwszych.

Występuje jednak specjalna, choć ważna, klasa problemów, w których technika wariacyjna jest bardzo użyteczna i może być przedstawiona w sposób znacznie ogólniejszy, niż rozważany dotychczas. Przypuśćmy, że mamy skończenie lub nieskończenie wymiarową przestrzeń V z iloczynem wewnętrznym i niech A będzie pewnym operatorem *liniowym*. przekształcającym V w siebie. Rozważmy wielkość

$$I = (x, Ax).$$

Wektor x zależy w sposób ciągły od pewnego parametru ε tak, że iloczyn wewnętrzny jest funkcją ε . Zapisujemy to jako

$$I(\varepsilon) = (x(\varepsilon), Ax(\varepsilon)).$$

Chcemy obliczyć extrema $I(\varepsilon)$ przy określonych warunkach, toteż potrzebne są nam pochodne $I(\varepsilon)$. Przy założeniu, że A jest operatorem liniowym i że $x(\varepsilon)$ jest różniczkowalną funkcją ε , można łatwo sprawdzić, że

$$\frac{dI}{d\varepsilon} = \left(\frac{dx}{d\varepsilon}, Ax \right) + \left(x, A \frac{dx}{d\varepsilon} \right). \quad (4.34)$$

Dostajemy tak prosty wynik dlatego, że A jest operatorem *liniowym*. Zauważmy, że x jest bardzo ogólnym obiektem. Mógłby to być układ n liczb lub funkcja kilku zmiennych (oprócz ε) w przestrzeni funkcji z iloczynem wewnętrznym określonym np. przez całkę po całej przestrzeni.

Równanie (4.34) sugeruje, że technika z rozdziału 2 może dać się zastosować do ekstremizacji iloczynów wewnętrznych w przestrzeni wektorowej. Sytuacja taka rzeczywiście ma miejsce, gdy A jest *hermitowskie*. Rozważmy szczegółowo ten przypadek. Chcemy znaleźć ekstremum wyrażenia

$$I = (x, Ax),$$

gdzie A jest samosprężone, a x jest elementem V , przestrzeni z iloczynem wewnętrznym. Czytelnik łatwo spostrzeże, że nie postawiliśmy poprawnie tego zagadnienia, bo jeżeli dane x daje ujemną wartość I , możemy dostać dowolnie dużą ujemną wartość I zwiększając po prostu normę x . Podobnie, jeżeli x daje dodatnią wartość I , możemy otrzymać dowolnie dużą wartość dodatnią I zwiększając normę x . Zatem $I = 0$ jest jedyną wartością stacjonarną przy takim postawieniu problemu. Dla uniknięcia takiego sztucznego zwiększania I ograniczmy się do wektorów x o ustalonej normie. Dla wygody przyjmijmy $\|x\| = 1$. Teraz stawiamy ponownie problem jako szukanie ekstremum I w klasie wektorów x spełniających warunek

$$J = (x, x) = 1.$$

Dla zanalizowania tego problemu wprowadzamy dwuparametrową rodzinę wektorów*, $\bar{x}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$, spełniających

- $\bar{x}(\varepsilon_1, \varepsilon_2) \in V$ dla każdego $\varepsilon_1, \varepsilon_2$;
- $\bar{x}(0, 0) = x$ (wektor odpowiadający wartości ekstremalnej);
- $\partial \bar{x} / \partial \varepsilon_1$ i $\partial \bar{x} / \partial \varepsilon_2$ istnieją i należą do V .

Następnie definiujemy

$$I(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = (\bar{x}(\varepsilon_1, \varepsilon_2), A\bar{x}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)), \quad (4.35a)$$

$$J(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = (\bar{x}(\varepsilon_1, \varepsilon_2), \bar{x}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)) = 1 \quad (4.35b)$$

i rozważamy wielkość

$$K(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = I(\varepsilon_1, \varepsilon_2) - \lambda J(\varepsilon_1, \varepsilon_2), \quad (4.35c)$$

gdzie λ jest mnożnikiem Lagrange'a. Zgodnie z warunkiem (b) podanym wyżej

$$\left. \frac{\partial K}{\partial \varepsilon_1} \right|_{\varepsilon_1=\varepsilon_2=0} = 0 = \left. \frac{\partial K}{\partial \varepsilon_2} \right|_{\varepsilon_1=\varepsilon_2=0} \quad (4.36)$$

jest warunkiem na ekstremum. Równania (4.35a, b, c) mówią, że

$$K(\varepsilon_1, \varepsilon_2) = (\bar{x}(\varepsilon_1, \varepsilon_2), [A - \lambda]\bar{x}(\varepsilon_1, \varepsilon_2)).$$

* Zauważmy, że argument nasz nie zależy od liczby parametrów (poza tym, że potrzebne są co najmniej dwa). W praktyce, o ile zachodzi potrzeba, można użyć większej liczby parametrów.

Dla oszczędności miejsca będziemy pisać $(A - \lambda)$ zamiast $(A - \lambda I)$. Ponieważ A jest hermitowskie, więc $I(\varepsilon_1, \varepsilon_2)$ jest rzeczywiste, a więc λ jest rzeczywiste. Skorzystamy teraz z (4.34) dla obliczenia dwóch pierwszych pochodnych cząstkowych K

$$\frac{\partial K}{\partial \varepsilon_1} = \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial \varepsilon_1}, [A - \lambda] \bar{x} \right) + \left(\bar{x}, [A - \lambda] \frac{\partial \bar{x}}{\partial \varepsilon_1} \right),$$

$$\frac{\partial K}{\partial \varepsilon_2} = \left(\frac{\partial \bar{x}}{\partial \varepsilon_2}, [A - \lambda] \bar{x} \right) + \left(\bar{x}, [A - \lambda] \frac{\partial \bar{x}}{\partial \varepsilon_2} \right).$$

Kładąc $\varepsilon_1 = 0 = \varepsilon_2$ i korzystając z (4.34), dostajemy

$$(\eta_1, [A - \lambda]x) + (x, [A - \lambda]\eta_1) = 0, \quad (4.37a)$$

$$(\eta_2, [A - \lambda]x) + (x, [A - \lambda]\eta_2) = 0, \quad (4.37b)$$

gdzie

$$\eta_1 = \left. \frac{\partial \bar{x}}{\partial \varepsilon_1} \right|_{\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0}, \quad \eta_2 = \left. \frac{\partial \bar{x}}{\partial \varepsilon_2} \right|_{\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0}$$

$(A - \lambda)$ jest samosprężone, bo λ jest rzeczywiste. Zatem z (4.37a, b)

$$([A - \lambda]x, \eta_i) + (\eta_i, [A - \lambda]x) = 0, \quad i = 1, 2.$$

Ponieważ dotychczas η_i było dowolne, możemy położyć $\eta_i = (A - \lambda)x$. Stąd wnioskujemy, że

$$2([A - \lambda]x, [A - \lambda]x) = 0, \quad \text{czyli} \quad (A - \lambda)x = 0.$$

Mamy zatem pomiędzy problemem wartości własnych operatorów samosprężonych a rachunkiem wariacyjnym ciekawy związek, który można sformułować następująco:

Twierdzenie 4.28. Jeżeli A jest samosprężonym operatorem liniowym, to $Ax = \lambda x$ wtedy i tylko wtedy, gdy $I = (x, Ax)$ osiąga ekstremum przy warunku $(x, x) = 1$. Wartość ekstremalna I jest równa λ , mnożnikowi Lagrange'a.

Ciekawe byłoby sprawdzić, kiedy I naprawdę przyjmuje wartość minimalną. Przede wszystkim, jeśli λ jest którąkolwiek wartością własną poza najniższą, ekstremum I nie będzie minimum. Toteż tylko najniższa wartość własna i odpowiadający jej wektor własny mogą dawać minimum dla I .

W skończenie wymiarowej przestrzeni wektorowej istnieje zawsze najniższa wartość własna. Wówczas mamy do dyspozycji twierdzenia mówiące o zupełności operatorów samosprężonych (twierdzenia 4.20 i 4.21). Tak więc, każde $x \in V$ można zapisać jako

$$x = \sum_{i=1}^n \alpha_i x_i,$$

gdzie x_i są funkcjami własnymi A i gdzie dla wygody przyjmujemy α_i rzeczywiste. (Czytelnik łatwo przeniesie te rozważania na przypadek zespolonych α_i , traktując część rzeczywistą i urojoną jako niezależne zmienne). Tak więc, oznaczając wartości własne A symbolem λ_i i ustawiając je w kolejności $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$, stwierdzamy, że

$$(x, Ax) = \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 \lambda_i, \quad (x, x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 = 1.$$

Dowiedliśmy już, że w każdej przestrzeni z iloczynem wewnętrznym wartości własne dają nam ekstremum wielkości (x, Ax) . Dlatego też nie musimy ponownie pokazywać

tego w przypadku przestrzeni skończenie wymiarowej. Niemniej, dla zilustrowania analizowanych idei, wyprowadzimy ten wynik jeszcze raz w tym prostym przypadku. Chcąc znaleźć ekstremum (x, Ax) względem α_i przy warunku $(x, x) = 1$, przyrównujemy pierwsze pochodne wyrażenia

$$K(\alpha_i) = \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 (\lambda_i - \lambda)$$

do zera; λ jest tu mnożnikiem Lagrange'a. Mamy

$$\frac{dK}{d\alpha_i} = 2\alpha_i(\lambda_i - \lambda), \quad i = 1, \dots, n.$$

Zatem extrema określone są przez związek

$$\alpha_i(\lambda_i - \lambda) = 0, \quad i = 1, \dots, n.$$

Jeżeli λ nie jest równe żadnemu λ_i , to jedynym możliwym rozwiązaniem jest $\alpha_i = 0$ dla każdego i . Nie jest ono do przyjęcia, ponieważ wówczas

$$\sum_{i=1}^n \alpha_i^2 \neq 1.$$

Zatem dla pewnego j , $1 \leq j \leq n$, $\lambda = \lambda_j$; jednocześnie $\alpha_j = 1$ i $\alpha_i = 0$ dla $i \neq j$.

Jeśli teraz $\lambda = \lambda_1$, to $\alpha_1 = 1$ i $\alpha_i = 0$ dla $i \geq 2$. Wówczas wszystkie drugie pochodne K względem α_i dla $i \geq 2$ są dodatnie i I osiąga minimum w tym przypadku. Wartość I w minimum jest dokładnie λ_1 . Dla ekstremum przy $\lambda = \lambda_k$, $1 < k < n$, $\alpha_k = 1$ i $\alpha_i = 0$ dla $i \neq k$. Tym razem niektóre drugie pochodne cząstkowe będą dodatnie a niektóre ujemne, a więc mamy rodzaj punktu siodłowego. W przypadku $\lambda = \lambda_n$ wszystkie drugie pochodne są ujemne i mamy maximum; maksymalna wartość I jest właśnie $I = \lambda_n$. Stąd otrzymujemy

Twierdzenie 4.29. Niech A będzie operatorem samosprężonym w n -wymiarowej przestrzeni z iloczynem wewnętrznym. Jeśli λ_1 jest najmniejszą wartością własną A , a λ_n — największą, to wartość minimalna i maksymalna (x, Ax) , dla wszystkich wektorów $x \in V$ takich, że $(x, x) = 1$, jest odpowiednio λ_1 i λ_n .

W dalszych rozdziałach powrócimy jeszcze do uogólnienia tego twierdzenia na przypadek nieskończenie wymiarowy. Jak czytelnik zapewne zauważył, zrobiliśmy powyżej milczące założenie o braku degeneracji widma A . Kosztem niewielkiego wysiłku można pokazać, że założenie to jest niepotrzebne.

Rozważmy teraz λ_2 , najmniejszą po λ_1 wartość własną A . W klasie wektorów x takich, że $(x, x) = 1$, λ_2 jest punktem siodłowym, a nie rzeczywistym minimum funkcji (x, Ax) . Wszelako jeżeli ograniczymy się do mniejszej klasy wektorów, spełniających równocześnie warunki $(x, x) = 1$ i $(x, x_1) = 0$, gdzie x_1 jest wektorem własnym należącym do λ_1 , to (x, Ax) przyjmuje swą najmniejszą wartość dla $x = x_2$ i tą najmniejszą wartością jest λ_2 . Jeżeli na rozważane unormowane wektory x narzucimy dodatkowe ograniczenie, że mają one należeć do podprzestrzeni V rozpiętej na wektorach $\{x_2, x_3, \dots, x_n\}$, czy też raczej leżeć na zewnątrz podprzestrzeni V rozpiętej na x_1 , to (x, Ax) przyjmuje wartość minimalną dla $x = x_2$ i tą wartością minimalną jest właśnie λ_2 .

Przy formułowaniu ostatecznej postaci uogólnienia tych rozważań potrzebna będzie pewna definicja.

Definicja 4.9. Niech V będzie przestrzenią wektorową, a U podprzestrzenią V . Zbiór wszystkich wektorów nie łączących w U nazywamy *dopełnieniem U w przestrzeni V* ; oznaczamy ten zbiór symbolem U_d . Zachodzi wówczas

Twierdzenie 4.30. Niech A będzie operatorem samosprzężonym w n -wymiarowej przestrzeni V z iloczynem wewnętrznym o wartościach własnych uporządkowanych zgodnie z nierównościami $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$. Ponadto niech V_i będzie podprzestrzenią V rozpiętą na wektorach własnych A należących do pierwszych i wartości własnych. Wówczas w obrębie klasy wektorów $\{x\}$, unormowanych do jedności i leżących w dopełnieniu V_i , wartość minimalna (x, Ax) jest przyjmowana dla $x = x_{i+1}$ i wynosi λ_{i+1} .

Dowód. Teza wynika natychmiast z faktu, że każdy wektor x w rozważanej klasie da się zapisać w postaci

$$x = \sum_{j=i+1}^n \alpha_j x_j,$$

a więc

$$(x, Ax) = \sum_{j=i+1}^n \alpha_j^2 \lambda_j \quad \text{i} \quad (x, x) = \sum_{j=i+1}^n \alpha_j^2 = 1.$$

Od tego punktu dowód przebiega identycznie jak dowód twierdzenia poprzedniego. c.b.d.o.

W udowodnionej przez nas formie twierdzenia 4.29 i 4.30 są prawdziwe tylko dla skończenia wymiarowych przestrzeni. Jednakże twierdzenie 4.28 jest słuszne dla przestrzeni o dowolnym wymiarze, dzięki czemu można się spodziewać, że skoro funkcje własne A dają extrema (x, Ax) , da się również znaleźć twierdzenia podobne do 4.29 i 4.30 dla przestrzeni nieskończenie wymiarowych. W rozdziale 9 przekonamy się, że tak jest istotnie.

W przestrzeniach nieskończenie wymiarowych musimy walczyć z trudnościami dwójakiego rodzaju:

1. liczba wektorów własnych może być nieskończona,
2. widmo może być ciągłe.

Rzut oka na dowody twierdzeń 4.29 i 4.30 pozwala przypuszczać, że trudność (1) nie jest poważna. Natomiast trudność (2) jest rzeczywiście bardzo istotna. W rzeczywistości zmusi nas ona do zrewidowania naszego pojęcia zupełności, na którym opierają się dowody twierdzeń 4.29 i 4.30.

Okazuje się, że dla większości operatorów występujących w problemach fizycznych (x, Ax) przyjmuje wartość minimalną równą najmniejszej wartości własnej A , gdy x jest równe odpowiedniemu wektorowi własnemu. W większości zagadnień fizycznych jest intuicyjnie jasne, że najmniejsza wartość własna musi istnieć. Na przykład przy rozwiązywaniu nierelatywistycznego równania Schrödingera dla potencjału o określonej wartości jest rzeczą oczywistą, że pochodząca od potencjału energia wiązania nie może być dowolnie dużą liczbą ujemną. Dlatego spodziewamy się istnienia dolnej granicy na wartości własnej energii. Jednakże wszystkie te rozważania na temat zasad minimum staną się nieistotne, jeśli taka najmniejsza wartość własna nie istnieje.

Z drugiej strony, jeśli cząstka nie jest w stanie związanym, może mieć dowolnie dużą energię dodatnią, a więc można oczekiwać w tym przypadku, że widmo otrzymane z rów-

kania Schrödingera nie będzie ograniczone z góry. Ponadto z fizyki wiemy, że tzw. *stany rozproszeniowe* mogą mieć dowolną energię w przeciwieństwie do ograniczających się do dyskretnych poziomów energetycznych stanów związanych, np. w atomie wodoru. Dlatego ta część widma odpowiada stanom leżącym dowolnie blisko siebie, co z grubsza oddaje sens tego, co określamy mianem *widma ciągłego*.

Poprawniejsza matematycznie metoda określenia widma ciągłego polega na powiązaniu go z funkcjami, które są „rozwiązaniami” danego równania operatorowego, ale nie leżą w przestrzeni wektorowej. Bardziej szczegółowo rozważymy te problemy w dalszych rozdziałach, ale możemy tu wspomnieć o pewnych trudnościach związanych z badaniem przestrzeni nieskończenie wymiarowych. Rozważmy kwantowomechaniczny operator energii kinetycznej

$$\frac{p^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \quad (4.38)$$

w działaniu na przestrzeń wektorową funkcji f spełniających warunek

$$(f, f) = \int_{-\infty}^{\infty} |f|^2 dx < \infty.$$

O funkcjach takich mówimy, że są *całkowalne z kwadratem*; w przyszłości pokażemy, że istotnie tworzą one przestrzeń wektorową.

Rozważmy teraz zagadnienie własne

$$\frac{p^2}{2m} \phi = E\phi. \quad (4.39)$$

Oczywiście $\phi = e^{ikx}$, $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ są dla dowolnego k rozwiązaniami równania różniczkowego wynikającego z (4.38) i (4.39) i są przy tym jedynymi rozwiązaniami, gdy E jest dodatnie. Jednakże

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\phi|^2 dx = \infty$$

dla każdego k , a więc ϕ nie leżą w rozważanej przestrzeni wektorowej. Niemniej jednak okazuje się, że każda funkcja z przestrzeni może być przedstawiona w postaci kombinacji liniowej ϕ w tym sensie, że jeśli $f(x)$ należy do przestrzeni funkcji całkowalnych z kwadratem, to istnieje funkcja $\tilde{f}(k)$ taka, że

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk.$$

Jest to znane twierdzenie całkowe Fouriera. Gwarantuje ono, że każdy wektor w przestrzeni funkcji całkowalnych z kwadratem da się zapisać jako *ciągła* kombinacja liniowa „wektorów własnych” z równania (4.39).

Tak więc postać wektorów własnych dla ciągłego widma wartości własnych pozwala przypuszczać, że można z nimi postępować tak, jak z wektorami w przestrzeni skończenie wymiarowej — o ile pojęcie zupełności da się odpowiednio uogólnić. Badanie takich problemów stanowi centrum zainteresowania teorii nieskończenie wymiarowych przestrzeni wektorowych.

Niektóre ciekawe i ważne zastosowania twierdzeń z tego paragrafu pojawiają się przy rozwiązywaniu zagadnień własnych w nieskończone wymiarowych przestrzeniach wektorowych. Rozważmy pewne przykłady z mechaniki kwantowej, nie przejmując się na razie tym, że wyniki nasze nie zostały ściśle udowodnione dla takich przestrzeni.

Niech A będzie danym operatorem liniowym. Jedną z możliwych metod znalezienia jego najmniejszej wartości własnej polega na wzięciu próbnego wektora x zależnego od pewnej liczby parametrów wariacyjnych, policzeniu (x, Ax) , a następnie zminimalizowaniu iloczynu wewnętrznego względem parametrów wariacyjnych. Dodając coraz więcej parametrów, możemy wciąż zmniejszać wartość (x, Ax) ; nigdy jednak nie opadnie ona poniżej λ_1 , najmniejszej wartości własnej A . Oczywiście w takim postępowaniu musimy się kierować zdrowym rozsądkiem; na przykład, gdybyśmy wybrali wektor próbny w taki sposób, żeby był zawsze ortogonalny do wektora własnego należącego do najmniejszej wartości własnej, to, na mocy twierdzenia 4.30, moglibyśmy z wartością (x, Ax) zejść w najlepszym razie do λ_2 przy zwiększaniu liczby parametrów. Analiza fizycznych podstaw zagadnienia umożliwia zwykle uniknięcie takich błędów.

Przykłady. Hamiltonian kwantowego oscylatora harmonicznego ma postać

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

Jeżeli wybierzemy p i x jak w (3.39), dostaniemy

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

Oznaczmy przez ϕ wektor próbny i rozważmy wielkość

$$I = (\phi, H\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \phi^*(x) H\phi(x) dx.$$

Ze względów fizycznych oczekujemy, że rzeczywista funkcja własna będzie malała dość szybko z odległością, zważywszy silne przyciąganie w ruchu harmonicznym. Stąd rozsądne może być założenie na ϕ

$$\phi = Ce^{-\alpha|x|/2}, \quad \alpha > 0.$$

Warunek $(\phi, \phi) = 1 = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\alpha|x|} dx$ można spełnić automatycznie, wybierając $C = (\alpha/2)^{1/2}$. Zatem

$$\phi(x) = (\alpha/2)^{1/2} e^{-\alpha|x|/2}, \quad \alpha > 0$$

i podstawiając to wyrażenie do wzoru na I , otrzymujemy

$$I = (\hbar^2 \alpha^2 / 8m) + (m\omega^2 / \alpha^2).$$

Jest rzeczą jasną, że ekstremum dla I jest minimum; również, dzięki unormowaniu ϕ do 1, nie jest potrzebny mnożnik Lagrange'a. Tak więc, kładąc $dI/d\alpha = 0$, stwierdzamy, że minimum pojawia się w punkcie

$$\alpha = \alpha_0 = \left(\frac{8m^2 \omega^2}{\hbar^2} \right)^{1/4}.$$

Wartość przyjmowana przez I w minimum jest $I(\alpha_0) = (1/\sqrt{2})\hbar\omega$, co przekracza wartość własną $\lambda_1 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ o około 40%. Widzieliśmy w § 3.10, że poprawny wektor własny ma postać

$$u_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-(m\omega/2\hbar)x^2},$$

co nie przypomina zbyt blisko naszego wyniku

$$\phi = \left(\frac{m^2\omega^2}{2\hbar^2}\right)^{1/8} \exp\left[-\left(\frac{m^2\omega^2}{2\hbar^2}\right)^{1/4}|x|\right].$$

Niemniej jednak, znaleziona wartość energii jest tylko o 40% większa od najmniejszej wartości własnej. Ciekawym problemem byłoby założenie funkcji próbnej w postaci

$$\phi' = Ce^{-\alpha x^2/2}$$

i pokazanie, że na drodze minimalizacji (ϕ' , $H\phi'$) otrzymuje się prawdziwą wartość własną i wektor własny.

Jako drugi przykład rozważmy obliczanie energii stanu podstawowego atomu helu. Mamy hamiltonian

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - 2e^2\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|},$$

gdzie 1 i 2 są wskaźnikami numerującymi dwa elektrony krążące wokół jądra o ładunku $Z = +2e$. Dzięki ostatniemu członowi hamiltonianu reprezentującemu kulombowskie odpychanie elektronów rozwiązanie ściśle problemu jest niemożliwe. Przy zaniedbaniu tego członu zagadnienie można rozwiązać, otrzymując na funkcję własną stanu podstawowego iloczyn dwóch funkcji własnych stanu podstawowego atomu wodoru:

$$\phi_0 = \left(\frac{Z^3}{\pi a^3}\right) \exp\left(-\frac{Z(r_1 + r_2)}{a}\right),$$

gdzie $a = \hbar^2/me^2$ = promieniowi Bohra. Odpowiada temu energia $-54,4$ eV, co nie zgadza się zbyt dobrze z wartością doświadczalną $-78,60$ eV. Jeśli jednak użyjemy funkcji próbnej takiej postaci i zastąpimy Z przez $Z_{\text{eff}} = Z - \sigma$, możemy otrzymać znacznie lepszy wynik. Fizycznie postępowanie takie ma sens, ponieważ każdy elektron jest częściowo zasłonięty przez drugi elektron od wpływu całkowitego ładunku jądra. Chcemy zatem zminimalizować

$$I = (\phi_0, H\phi_0),$$

gdzie H jest pełnym hamiltonianem atomu helu, zawierającym oddziaływanie elektronów ze sobą i

$$\phi_0 = \left[\frac{(Z-\sigma)^3}{\pi a^3}\right] \exp\left[-\frac{(Z-\sigma)(r_1 + r_2)}{a}\right],$$

Wiemy, że $I(\sigma) \geq E_0$, energii stanu podstawowego atomu helu. Bezpośrednie scałkowanie pozwala stwierdzić, że

$$I(\sigma) = -(e^2/a) \left(\frac{11}{4} + \frac{5}{8}\sigma - \sigma^2\right),$$

$I(\sigma)$ osiąga minimum dla $\sigma = \frac{5}{16}$. Stąd najlepsze oszacowanie E_0 przy pomocy takiej funkcji próbnej jest

$$E_0 = I\left(\frac{5}{16}\right) = -\frac{729}{256}(e^2/a) = -77,46 \text{ eV},$$

ponieważ $e^2/a = 27,20 \text{ eV}$. Liczba ta jest dość bliska zmierzonej wartości $-78,60 \text{ eV}$.

Można używać funkcji próbnych zawierających wiele parametrów. Prowadzą one do dobrej fenomenologicznej zgodności teorii z doświadczeniem*.

4.10. DRGANIA NORMALNE

Teraz, gdy już znamy drogę sprowadzania operatora do postaci diagonalnej, jest sprawą prostą zdefiniować operację potęgowania dla operatorów tworzących szeroką dość klasę wśród operatorów liniowych. Niech A będzie operatorem liniowym w n -wymiarowej przestrzeni wektorowej i przypuśćmy, że można go zdiagonalizować transformacją podobieństwa

$$S^{-1}AS = D,$$

gdzie

$$D_{ij} = \lambda_i \delta_{ij},$$

a $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ są wartościami własnymi A . Wówczas A^α , gdzie α jest dowolną liczbą rzeczywistą, można zdefiniować wzorem

$$A^\alpha = SD^\alpha S^{-1}, \quad \text{gdzie} \quad [D^\alpha]_{ij} = \lambda_i^\alpha \delta_{ij}.$$

Zauważmy, że gdy α jest ujemne, a A ma zerową wartość własną, to A^α nie jest dobrze określone. Ponieważ $SS^{-1} = I$, widać łatwo, że $A^\alpha A^\beta = A^{\alpha+\beta}$.

Operatory samosprężone można zawsze zdiagonalizować, skupimy więc na nich uwagę. Szczególną klasę operatorów samosprężonych, dla których zawsze istnieją ujemne potęgi, stanowią operatory dodatnio określone.

Definicja 4.10. O operatorze H w przestrzeni wektorowej V mówimy, że jest *istotnie dodatnio określony* wtedy i tylko wtedy, gdy $(x, Hx) > 0$ dla wszystkich niezerowych x w V . Jeśli zachodzi tylko nierówność $(x, Hx) \geq 0$, operator H nazywamy *dodatnim*.

Oczywiście H jest samosprężony, ponieważ (x, Hx) jest rzeczywiste dla każdego x . Jednocześnie operator istotnie dodatnio określony musi mieć wszystkie wartości własne dodatnie, ponieważ z równania

$$Hx = \lambda x$$

wynika, że

$$\lambda = \frac{(x, Hx)}{(x, x)},$$

a więc jeśli $(x, Hx) > 0$ dla wszystkich niezerowych x , to $\lambda > 0$, jako że $x = 0$ nie może być wektorem własnym.

* Patrz C. L. Pekeris, *Phys. Rev.* **115**, 1216 (1959).

Dla istotnie dodatnio określonych H , $H^{1/2}$ jest hermitowskie, co widać z następujących rozważań:

$$H^{1/2} = UD^{1/2}U^{-1} = UD^{1/2}U^\dagger,$$

gdzie U jest operatorem *unitarym*, który na mocy twierdzenia 4.20, diagonalizuje H . Skoro wartości własne H są dodatnie, $D^{1/2}$ jest macierzą rzeczywistą diagonalną, a więc $D^{1/2}$ jest hermitowskie. Zatem

$$(H^{1/2})^\dagger = (UD^{1/2}U^\dagger)^\dagger = (U^\dagger)^\dagger (D^{1/2})^\dagger U^\dagger = UD^{1/2}U^\dagger = H^{1/2},$$

czyli $H^{1/2}$ jest samosprężone, podobnie zresztą jak $H^{-1/2}$. W analogiczny sposób można pokazać, że jeżeli H jest (rzeczywiste) symetryczne, to podobną własność mają $H^{1/2}$ i $H^{-1/2}$.

Wyjątkowo ciekawy przykład operatora istotnie dodatnio określonego pojawia się w mechanice klasycznej. Przypuśćmy, że (x_1, \dots, x_n) tworzą układ uogólnionych współrzędnych — niekoniecznie ortogonalny — który można uważać za składowe pewnego wektora x^* . W wielu przypadkach energia kinetyczna układu ma postać

$$K = \frac{1}{2} \sum_{i,j} T_{ij} \dot{x}_i \dot{x}_j,$$

gdzie (T_{ij}) jest macierzą stałych rzeczywistych, np. mas, które nie zależą od współrzędnych i od czasu. Można je na ogół wybrać tak, żeby $T_{ij} = T_{ji}$. Energię kinetyczną K można w naszej notacji zapisać w sposób zwarty jako

$$K = \frac{1}{2} (\dot{x}, T\dot{x}),$$

gdzie składowe wektora \dot{x} są $\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dots, \dot{x}_n$. K jako energia kinetyczna musi być dodatnia dla każdego niezerowego wektora x ; zatem T jest istotnie dodatnio określone i (rzeczywiste) symetryczne.

Energia potencjalna jest na ogół skomplikowaną funkcją współrzędnych. Jeśli jednak ograniczymy się do rozważania małych ograniczonych drgań wokół punktu równowagi, który nie tracąc na ogólności można przyjąć w punkcie $x = 0$, możemy zapisać

$$V(x) = [V]_{x=0} + \sum_i \left[\frac{\partial V}{\partial x_i} \right]_{x=0} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left[\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right]_{x=0} x_i x_j + \dots$$

Indeks przy każdym nawiasie wskazuje, że wielkość w nawiasie jest obliczana dla $x = 0$. Punkt równowagi odpowiada ekstremum energii potencjalnej, a więc

$$\left[\frac{\partial V}{\partial x_i} \right]_{x=0} = 0, \quad \text{dla każdego } i.$$

Ponieważ wyraz stały może przesunąć jedynie zero na skali energii, możemy go opuścić; zanedbujemy również człony proporcjonalne do x_i^3 i wyższych potęg, jako że interesuje nas ruch o małej amplitudzie drgań. Zatem

$$V(x) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} U_{ij} x_i x_j, \quad \text{gdzie} \quad U_{ij} = \left[\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right]_{x=0} = U_{ji},$$

* Dla wygody nie będziemy korzystać w całym tym paragrafie z konwencji zapisu wektorów i ich składowych.

czyli U jest (rzeczywiste) symetryczne. W zwartej postaci

$$V = \frac{1}{2}(x, Ux).$$

Macierz U ma elementy będące stałymi tak jak macierz T w wyrażeniu na energię kinetyczną. Przy ruchu ograniczonym chcemy, żeby lokalne minimum energii potencjalnej miało tę własność, że odchylenie od punktu równowagi w dowolnym kierunku wywoływało wzrost energii potencjalnej. Matematycznie można to zapisać następująco

$$\sum_{i,j} \left[\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right]_{x=0} \varepsilon_i \varepsilon_j > 0$$

dla wszystkich możliwych wyborów wektora ε . Przy zastosowaniu w fizyce wygodnie jest osłabić nieco ten warunek

$$\sum_{i,j} \left[\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right]_{x=0} \varepsilon_i \varepsilon_j \geq 0,$$

dla wszystkich możliwych ε . Tak więc U jest operatorem *dodatnim*, czyli

$$(x, Ux) \geq 0.$$

Korzystając teraz z potężnego aparatu matematycznego zbudowanego w tym rozdziale, zbadamy ogólne rozwiązania dynamiczne dla ruchu takiego układu. Uzyskamy tą drogą podstawowe wyniki teorii układów sprzężonych bez pomocy kłopotliwej nieco algebry, do której uciekano się w tradycyjnych metodach badań.

Dla naszego układu lagrangian można zapisać w postaci

$$L = K - V = \frac{1}{2}(\dot{x}, T\dot{x}) - \frac{1}{2}(x, Ux).$$

Z równań Lagrange'a

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i} \right) = 0, \quad \text{dla każdego } i,$$

dostajemy układ równań

$$\sum_j T_{ij} \ddot{x}_j + \sum_j U_{ij} x_j = 0, \quad \text{dla każdego } i.$$

Można to zapisać

$$T\ddot{x} + Ux = 0. \tag{4.40}$$

W oparciu o analogię z zagadnieniem prostego oscylatora harmonicznego poszukajmy rozwiązania w postaci

$$x = \xi e^{\pm i\omega t},$$

gdzie skalar ω i wektor ξ musimy dopiero wyznaczyć. Z podstawienia tego do (4.40) dostajemy

$$U\xi - \omega^2 T\xi = 0, \tag{4.41}$$

co jest zagadnieniem własnym wybiegającym poza ramy typów omawianych dotychczas. Notacja nasza sugeruje z góry, że ω^2 nie powinno być ujemne i tak jest rzeczywiście, ponieważ

$$\omega^2 = \frac{(\xi, U\xi)}{(\xi, T\xi)}$$

i $(\xi, U\xi) \geq 0$, $(\xi, T\xi) > 0$.

Własności rozwiązania równania (4.41) można łatwo zbadać, korzystając z istnienia operatorów $T^{1/2}$ i $T^{-1/2}$, choć przy rozwiązywaniu tego problemu nie będzie konieczne ich obliczanie. Z (4.41) wynika, że

$$T^{-1/2}U\xi = \omega^2 T^{1/2}\xi$$

lub też, ponieważ $T^{-1/2}T^{1/2} = I$, więc

$$T^{-1/2}UT^{-1/2}T^{1/2}\xi = \omega^2 T^{1/2}\xi.$$

Jeśli oznaczymy

$$\eta = T^{1/2}\xi \tag{4.42}$$

i

$$W = T^{-1/2}UT^{-1/2},$$

dostaniemy

$$W\eta = \omega^2\eta, \tag{4.43}$$

co jest już zagadnieniem własnym w znanej nam postaci. Oczywiście $T^{-1/2}$ będzie (rzeczywiste) symetryczne, gdy T jest rzeczywiste i istotnie dodatnio określone, a przy tym symetryczne. Zatem, skoro U jest (rzeczywiste) symetryczne, więc

$$W^T = (T^{-1/2}UT^{-1/2})^T = (T^{-1/2})^T U^T (T^{-1/2})^T = T^{-1/2}UT^{-1/2} = W$$

i W jest też (rzeczywiste) symetryczne.

Zatem, na mocy twierdzenia 4.21, W ma n wartości własnych ω_i^2 , z których niektóre mogą mieć krotność większą od jedynki i n rzeczywistych ortonormalnych wektorów własnych $\eta^{(i)}$, gdzie

$$(\eta^{(i)}, \eta^{(j)}) = \delta_{ij}.$$

Znając $\eta^{(i)}$ obliczamy odpowiadające im $\xi^{(i)}$, będące rozwiązaniami równania (4.41). Równanie (4.42) daje natychmiast

$$\xi^{(i)} = T^{-1/2}\eta^{(i)}.$$

Dla $\xi^{(i)}$ równanie (4.42) daje

$$(\eta^{(i)}, \eta^{(j)}) = (T^{1/2}\xi^{(i)}, T^{1/2}\xi^{(j)}) = (\xi^{(i)}, T\xi^{(j)}),$$

a więc

$$(\xi^{(i)}, T\xi^{(j)}) = \delta_{ij}. \tag{4.44}$$

Ponieważ $\eta^{(i)}$ są rzeczywiste, tę samą własność mają $\xi^{(i)}$. Mając $\xi^{(i)}$, dostajemy jako rozwiązanie równania (4.40) wektory $x_{\pm}^{(i)}(t)$:

$$x_{\pm}^{(i)}(t) = \xi^{(i)} e^{\pm i\omega_i t}.$$

Wielkość tych wektorów nie jest na razie określona. W problemach fizycznych mogłyby nam służyć do jej wyznaczenia zbiór warunków granicznych, np. $x_i(0) = \alpha_i$ i $\dot{x}_i(0) = \beta_i$

dla każdego i , co w naszej notacji ma postać $x(0) = \alpha$, $\dot{x}(0) = \beta$. Nasze rozwiązanie ogólne można zapisać w postaci kombinacji liniowej $x_{\pm}^{(i)}(t)$. Zatem

$$x(t) = \sum_k [C_k x_+^{(k)}(t) + D_k x_-^{(k)}(t)] = \sum_k \xi^{(k)} [C_k e^{i\omega_k t} + D_k e^{-i\omega_k t}].$$

Dla zaznaczenia, że $x(t)$ jest rzeczywiste, można użyć zamiast $e^{+i\omega_k t}$ i $e^{-i\omega_k t}$ kombinacji liniowej $\sin \omega_k t$ oraz $\cos \omega_k t$. Mamy wówczas

$$x(t) = \sum_k \xi^{(k)} [A_k \cos \omega_k t + B_k \sin \omega_k t]. \quad (4.45)$$

Narzucając warunki graniczne, otrzymujemy

$$\alpha = \sum_k \xi^{(k)} A_k, \quad \beta = \sum_k \omega_k \xi^{(k)} B_k.$$

Stąd

$$(\xi^{(j)}, T\alpha) = \sum_k (\xi^{(j)}, T\xi^{(k)}) A_k,$$

$$(\xi^{(j)}, T\beta) = \sum_k \omega_k (\xi^{(j)}, T\xi^{(k)}) B_k$$

i, korzystając ze związku ortogonalności (4.44), dostajemy

$$A_j = (\xi^{(j)}, T\alpha), \quad B_j = (\xi^{(j)}, T\beta)/\omega_j. \quad (4.46)$$

Jeśli warunki graniczne są takie, że wszystkie A_j, B_j znikają z wyjątkiem jednej wartości j , to mamy do czynienia z prostym ruchem harmonicznym o jednej tylko częstotliwości ω_j . Względne amplitudy, z jakimi zmieniają się współrzędne, są wówczas dane przez różne składowe $\xi^{(j)}$. Nazywamy to j -tym *drżaniem normalnym* (modem normalnym), a ω_j nazywana jest *częstotliwością normalną j -tego modu*. Każdy ruch złożony jest liniową superpozycją drgań normalnych.

Znaczenie drgań normalnych staje się jaśniejsze po przeanalizowaniu ponownie lagranżianu:

$$L = \frac{1}{2}(\dot{x}, T\dot{x}) - \frac{1}{2}(x, Ux).$$

Wprowadzając analogicznie jak w (4.42) oznaczenia

$$y = T^{1/2}x, \quad x = T^{-1/2}y,$$

dostajemy

$$L = \frac{1}{2}(\dot{y}, \dot{y}) - \frac{1}{2}(y, T^{-1/2}UT^{-1/2}y),$$

gdzie skorzystaliśmy z faktu, że $T^{-1/2}$ jest samosprężone. Przy użyciu definicji W z (4.42) dostajemy

$$L = \frac{1}{2}(\dot{y}, \dot{y}) - \frac{1}{2}(y, Wy).$$

Z poprzednich rozważań wiemy, że W jest rzeczywiste, symetryczne i tym samym może być zdiagonalizowane przez ortogonalną transformację O . Przez działanie transformacją podobieństwa O na W dostajemy diagonalną macierz Ω , mającą wzdłuż przekątnej kwadraty

częstości normalnych; O jest po prostu macierzą ortogonalną, której kolumnami są $\eta^{(j)}$. Ponieważ $O^T O = I$, dostajemy

$$L = \frac{1}{2}(\dot{y}, OO^T \dot{y}) - \frac{1}{2}(y, OO^T WOO^T y) = \frac{1}{2}(O^T \dot{y}, O^T \dot{y}) - \frac{1}{2}(O^T y, \Omega O^T y).$$

Oznaczamy $z = O^T y$ i stąd

$$L = \frac{1}{2}(\dot{z}, \dot{z}) - \frac{1}{2}(z, \Omega z). \quad (4.47)$$

Tak więc, przy użyciu specjalnie skonstruowanego wektora z , lagrangian przyjmuje prostą postać, co widać najlepiej po rozpisaniu na składowe:

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (\dot{z}_i^2 - \omega_i^2 z_i^2),$$

przy czym równania ruchu są

$$\ddot{z}_i + \omega_i^2 z_i = 0, \quad \text{dla każdego } i.$$

Po przejściu do układu współrzędnych zmiennej z widzimy, że złożony ruch drgający rozkłada się na proste drgania harmoniczne

$$z_i = A_i \cos \omega_i t + B_i \sin \omega_i t, \quad \text{dla każdego } i.$$

Zmienne z_i odpowiadają drganiom normalnym wprowadzonym wyżej. Wynika to z następujących rozważań. Znając z możemy odwrócić definicję otrzymując $x = T^{-1/2} O z$. Pozostawiamy czytelnikowi dowód, że kolumny macierzy O' zdefiniowanej wzorem $O' = T^{-1/2} O$ są po prostu wektorami $\xi^{(j)}$:

$$O'_{ik} = \xi_i^{(k)}. \quad (4.48)$$

O' nie jest macierzą ortogonalną, choć łatwo pokazać, że $O'^T T O' = I$. Mamy zatem $x = O' z$ i rozpisujemy to na składowe

$$x_i = \sum_k O'_{ik} z_k, \quad \text{dla każdego } i.$$

Korzystając z (4.48), dostajemy

$$x_i = \sum_k \xi_i^{(k)} (A_k \cos \omega_k t + B_k \sin \omega_k t),$$

gdzie skorzystaliśmy z ogólnej postaci rozwiązania dla z_k . W zapisie wektorowym

$$x = \sum_k \xi^{(k)} (A_k \cos \omega_k t + B_k \sin \omega_k t),$$

co pokrywa się z wynikiem (4.45). Widzimy więc, że nasza definicja drgań normalnych odpowiada dokładnie rozwiązaniu przekształconego lagrangianu (4.47), czyli prostemu ruchowi harmonicznemu wzdłuż jednej ze współrzędnych w szczególnym układzie odniesienia!

Jak stwierdziliśmy poprzednio, nigdy nie potrzebujemy naprawdę obliczać operatorów $T^{\pm 1/2}$; używaliśmy ich tylko do zbadania ogólnych własności rozwiązań. Procedura

obejmująca wyznaczenie $T^{\pm 1/2}$ nie jest algorytmem praktycznym. W praktyce opieramy się bezpośrednio na (4.41) i rozwiązujemy równanie

$$\det(U - \omega^2 T) = 0$$

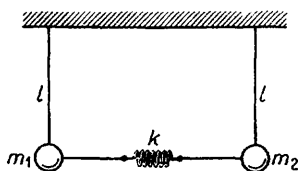
dla wyznaczenia dopuszczalnych wartości ω^2 . Wówczas wektory własne $\xi^{(i)}$ można znaleźć z (4.41). Warunki graniczne narzuca się poprzez (4.46).

Rozważmy dla przykładu układ pokazany na rys. 4.1. Energia kinetyczna wynosi

$$K = \frac{1}{2} m_1 l^2 \dot{\Theta}_1^2 + \frac{1}{2} m_2 l^2 \dot{\Theta}_2^2,$$

gdzie Θ_1 i Θ_2 są odchyleniami kątowymi ciężarków m_1 i m_2 od pionu. Zatem

$$T = \begin{bmatrix} m_1 l^2 & 0 \\ 0 & m_2 l^2 \end{bmatrix}.$$



Rys. 4.1. Dwa wahadła o długości l połączone sprężyną o stałej sprężystości k , m_1 i m_2 są masami dwóch ciężarków stanowiących ich zakończenie

Przy małych drganiach

$$V = \frac{1}{2} m_1 g l \Theta_1^2 + \frac{1}{2} m_2 g l \Theta_2^2 + \frac{1}{2} k l^2 (\Theta_1 - \Theta_2)^2,$$

skąd

$$U = \begin{bmatrix} m_1 g l + k l^2 & -k l^2 \\ -k l^2 & m_2 g l + k l^2 \end{bmatrix}.$$

Z równania

$$\det(U - \lambda T) = 0$$

wynika, że

$$\det \begin{bmatrix} m_1 g l + k l^2 - m_1 l^2 \lambda & -k l^2 \\ -k l^2 & m_2 g l + k l^2 - m_2 l^2 \lambda \end{bmatrix} = 0,$$

co prowadzi do równania wiekowego (sekularnego)

$$[m_1 l^2 (\lambda - g/l) - k l^2] [m_2 l^2 (\lambda - g/l) - k l^2] - k^2 l^4 = 0.$$

Rozwiązaniami równania są

$$\lambda_1 = \frac{g}{l}, \quad \lambda_2 = \frac{g}{l} + \frac{k}{\mu},$$

gdzie $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$. Zatem

$$\omega_1 = \left(\frac{g}{l} \right)^{1/2}, \quad \omega_2 = \left(\frac{g}{l} + \frac{k}{\mu} \right)^{1/2}.$$

Odpowiadają temu wektory własne

$$\xi^{(1)} = N \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \xi^{(2)} = M \begin{bmatrix} -m_2 \\ m_1 \end{bmatrix},$$

gdzie N i M trzeba wyznaczyć z warunku normalizacji $\xi^{(1)}$ i $\xi^{(2)}$. Pierwszy mod ma dokładnie taką częstość, jaką miałoby pojedyncze wahadło i odpowiada drganiu wahałki zgodnie w fazie bez ściskania sprężyny. Drugi mod odpowiada uderzaniu wahałki o siebie, a więc ściskaniu sprężyny. Z (4.44) dostajemy normalizację

$$\xi^{(1)} = \frac{1}{l(m_1 + m_2)^{1/2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix},$$

$$\xi^{(2)} = \frac{1}{l(m_1 + m_2)^{1/2}} \begin{bmatrix} -(m_2/m_1)^{1/2} \\ + (m_1/m_2)^{1/2} \end{bmatrix}.$$

Łatwo sprawdzić, że $(\xi^{(1)}, T\xi^{(2)}) = 0$, jak tego żądaliśmy.

Dla znalezienia pełnego rozwiązania musimy znać warunki początkowe. Przypuśćmy, że w chwili $t = 0$, $\Theta_1 = \alpha_1$ i $\Theta_2 = \alpha_2$ określają położenie m_1 i m_2 . Wówczas w notacji (4.46)

$$\Theta(0) = \begin{bmatrix} \Theta_1(0) \\ \Theta_2(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \alpha, \quad \dot{\Theta}(0) = \begin{bmatrix} \dot{\Theta}_1(0) \\ \dot{\Theta}_2(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \beta.$$

Zatem (4.45) mówi nam, że $B_1 = B_2 = 0$ oraz

$$A_1 = (\xi^{(1)}, T\alpha) = \frac{1}{l(m_1 + m_2)^{1/2}} (1, 1) \begin{bmatrix} m_1 l^2 & 0 \\ 0 & m_2 l^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} = \frac{\alpha_1 m_1 + \alpha_2 m_2}{(m_1 + m_2)^{1/2}} l;$$

$$A_2 = (\xi^{(2)}, T\alpha) = \frac{1}{l(m_1 + m_2)^{1/2}} \left[-\left(\frac{m_2}{m_1}\right)^{1/2}, \left(\frac{m_1}{m_2}\right)^{1/2} \right] \begin{bmatrix} m_1 l^2 & 0 \\ 0 & m_2 l^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{bmatrix} =$$

$$= \mu^{1/2} (\alpha_2 - \alpha_1) l.$$

Równanie (4.45) przyjmuje w tym przypadku postać

$$\Theta(t) = \sum_{k=1}^2 \xi^{(k)} A_k \cos \omega_k t,$$

a więc, po rozpisaniu $\Theta(t)$ na składowe, dostajemy

$$\Theta_1(t) = \frac{\alpha_1 m_1 + \alpha_2 m_2}{m_1 + m_2} \cos \omega_1 t + \frac{m_2 (\alpha_1 - \alpha_2)}{m_1 + m_2} \cos \omega_2 t,$$

$$\Theta_2(t) = \frac{\alpha_1 m_1 + \alpha_2 m_2}{m_1 + m_2} \cos \omega_1 t - \frac{m_1 (\alpha_1 - \alpha_2)}{m_1 + m_2} \cos \omega_2 t.$$

Zauważmy, że jeżeli $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha$, to wystąpi we wzorze tylko ω_1 ; jeżeli $\alpha_1 = (\mu/m_1)\alpha$, $\alpha_2 = -(\mu/m_2)\alpha$, to wystąpi tylko ω_2 . Są to więc właśnie te dwa zbiory warunków początkowych, którym odpowiadają dwa możliwe drgania normalne.

4.11. RACHUNEK ZABURZEŃ — PRZYPADEK BEZ DEGENERACJI

Rachunek zaburzeń jest bardzo pożytecznym formalizmem, stwarzającym możliwości uzyskania przybliżonych rozwiązań tych zagadnień własnych, które są zbyt skomplikowane, aby mogły być rozwiązane ściśle. Często pojawia się następująca sytuacja. Chcemy zna-

leż wartości własne i wektory własne pewnego operatora samosprężonego A , który da się rozłożyć na sumę dwóch samosprężonych operatorów:

$$A = A_0 + \varepsilon A_1. \quad (4.49)$$

Przypuśćmy, że mamy pewne informacje o A_0 . Na przykład możemy znać jedną z jego wartości własnych i skojarzony z nią wektor własny. Wiedząc, że wpływ A_0 jest dominujący w tej sumie, chcielibyśmy znaleźć odpowiadającą jej wartość własną i wektor własny A . W pewnym sensie zasugerowaliśmy już taką sytuację, pisząc operator „zaburzający” w postaci εA_1 , gdzie ε jest pewnym małym parametrem.

Zakładamy zatem, że równanie

$$A_0 x_n^{(0)} = \lambda_n^{(0)} x_n^{(0)} \quad (4.50)$$

zostało rozwiązane przynajmniej dla jednego n . Szukamy odpowiadającego temu rozwiązania pierwotnego problemu własnego

$$Ax_n = \lambda_n x_n, \quad (4.51)$$

który można zapisać w postaci

$$\begin{aligned} \lambda_n &= \lambda_n^{(0)} + \varepsilon \lambda_n^{(1)} + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i \lambda_n^{(i)}, \\ x_n &= x_n^{(0)} + \varepsilon x_n^{(1)} + \dots = \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i x_n^{(i)}. \end{aligned} \quad (4.52)$$

Nie będziemy na razie dyskutować zbieżności tego rozwinięcia na szereg potęgowy względem ε . Zauważmy jedynie, że byłoby dość zaskakujące, gdyby szereg był zbieżny dla każdego ε .

Podstawiając oba rozwinięcia do (4.51) i opuszczając wskaźnik n przy wartościach i wektorach własnych, dostajemy

$$(A_0 + \varepsilon A_1) \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i x^{(i)} = \left(\sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i \lambda^{(i)} \right) \left(\sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^j x^{(j)} \right),$$

czyli

$$\sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^i A_0 x^{(i)} + \sum_{i=0}^{\infty} \varepsilon^{i+1} A_1 x^{(i)} = \sum_{i,j=0}^{\infty} \varepsilon^{i+j} \lambda^{(i)} x^{(j)}. \quad (4.53)$$

Porównujemy teraz współczynniki przy jednakowych potęgach ε po lewej i prawej stronie (4.53). Prawa strona nie jest jeszcze w formie nadającej się do porównania, ale po pewnym przegrupowaniu składników otrzymujemy

$$\sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \varepsilon^{i+j} \lambda^{(i)} x^{(j)} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\mu=0}^{\nu} \varepsilon^{\nu} \lambda^{(\mu)} x^{(\nu-\mu)}.$$

Przyjmując $x^{(\alpha)} \equiv 0$ dla $\alpha \leq -1$, możemy przepisać (4.53) w postaci

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \varepsilon^{\nu} A_0 x^{(\nu)} + \sum_{\nu=0}^{\infty} \varepsilon^{\nu} A_1 x^{(\nu-1)} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \sum_{\mu=0}^{\nu} \varepsilon^{\nu} \lambda^{(\mu)} x^{(\nu-\mu)}.$$

Porównanie współczynników przy ε^{ν} daje

$$A_0 x^{(\nu)} + A_1 x^{(\nu-1)} = \sum_{\mu=0}^{\nu} \lambda^{(\mu)} x^{(\nu-\mu)}$$

lub

$$[A_0 - \lambda^{(0)}]x^{(\nu)} = \sum_{\mu=1}^{\nu} \lambda^{(\mu)}x^{(\nu-\mu)} - A_1x^{(\nu-1)},$$

$$\nu = 0, 1, \dots \quad (4.54)$$

Dla skrócenia zapisu piszemy tutaj $[A - \lambda^{(0)}]$ zamiast $[A - \lambda^{(0)}I]$. Mamy więc równanie na $x^{(\nu)}$ wyrażone przy pomocy $x^{(0)}, x^{(1)}, \dots, x^{(\nu-1)}$, funkcji niższego rzędu. Pewną komplikacją może się wydawać fakt, że prawa strona równania na $x^{(\nu)}$ zawiera również $\lambda^{(\nu)}$, a $x^{(\nu)}$ nie może być znalezione bez znajomości $\lambda^{(\nu)}$. Jeżeli jednak obliczymy iloczyn wewnętrzny obu stron (4.54) z $x^{(0)}$, dostaniemy

$$(x^{(0)}, [A_0 - \lambda^{(0)}]x^{(\nu)}) = \sum_{\mu=1}^{\nu} \lambda^{(\mu)}(x^{(0)}, x^{(\nu-\mu)}) - (x^{(0)}, A_1x^{(\nu-1)}).$$

Korzystając z (4.50) oraz hermitowskości A_0 , stwierdzamy, że lewa strona znika, a więc

$$\lambda^{(\nu)} = (x^{(0)}, A_1x^{(\nu-1)}) - \sum_{\mu=1}^{\nu-1} \lambda^{(\mu)}(x^{(0)}, x^{(\nu-\mu)})$$

dla $\nu = 1, 2, \dots$. Zatem $\lambda^{(\nu)}$ można wyznaczyć przy pomocy $\lambda^{(i)}$ oraz $x^{(i)}$ rzędów niższych niż ν .

W zasadzie więc powinniśmy umieć rozwiązać ciąg równań danych w (4.54), gdzie pierwsze $(n-1)$ równań określa prawą stronę n -tego równania. Podajemy kilka pierwszych równań w tym ciągu.

$$[A_0 - \lambda^{(0)}]x^{(0)} = 0,$$

$$[A_0 - \lambda^{(0)}]x^{(1)} = -[A_1 - \lambda^{(1)}]x^{(0)}, \quad (4.55a)$$

$$[A_0 - \lambda^{(0)}]x^{(2)} = -[A_1 - \lambda^{(1)}]x^{(1)} + \lambda^{(2)}x^{(0)}, \quad (4.55b)$$

$$[A_0 - \lambda^{(0)}]x^{(3)} = -[A_1 - \lambda^{(1)}]x^{(2)} + \lambda^{(2)}x^{(1)} + \lambda^{(3)}x^{(0)}. \quad (4.55c)$$

Pierwsze równanie pokrywa się z (4.50) i stanowi punkt wyjścia dla rozwiązania kolejno wszystkich następnych.

Wszystkie równania (4.55) poza pierwszym są typu $Hx = h$, którego to typu dotyczy twierdzenie 3.17. Skoro $\lambda^{(0)}$ jest wartością własną A_0 , więc $\det H = 0$. Stąd h musi należeć całkowicie do podprzestrzeni rozpiętej na wektorach własnych H należących do niezerowych wartości własnych, tzn. h musi być ortogonalne do wszystkich wektorów własnych należących do zerowej wartości własnej. Dlatego h musi być ortogonalne do wszystkich wektorów własnych A_0 należących do $\lambda^{(0)}$.

W tym momencie właśnie widzimy po raz pierwszy praktyczną różnicę pomiędzy przypadkiem zdegenerowanych i niezdegenerowanych wartości własnych. Jeżeli rozważamy tylko niezdegenerowane wartości własne, to istnieje dokładnie jeden wektor własny, do którego h musi być ortogonalne. Przedyskutujemy najpierw szczegółowo ten przypadek, ponieważ cały formalizm jest tu znacznie prostszy.

Załóżmy wobec tego, że widmo A_0 nie jest zdegenerowane i wyobraźmy sobie, że wyznaczyliśmy z (4.50) pewne konkretne $x^{(0)}$. Rozważania z poprzedniego paragrafu mówią nam, że (4.55a) daje rozwiązanie na $x^{(1)}$ tylko wtedy, gdy

$$(x^{(0)}, [A_1 - \lambda^{(1)}]x^{(0)}) = 0.$$

Ponieważ $x^{(0)}$ można zawsze wybrać w postaci unormowanej do 1, prowadzi to do wzoru

$$\lambda^{(1)} = (x^{(0)}, A_1 x^{(0)}). \quad (4.56a)$$

Jeżeli podobny warunek postawimy dla (4.55b), dostaniemy

$$\lambda^{(2)} = (x^{(0)}, [A_1 - \lambda^{(1)}]x^{(1)}). \quad (4.56b)$$

Otrzymaliśmy $\lambda^{(2)}$ wyrażone przy pomocy wielkości, które są nam w zasadzie znane. Podobnie (4.55c) ma rozwiązanie dobrze określone, o ile

$$\lambda^{(3)} = (x^{(0)}, [A_1 - \lambda^{(1)}]x^{(2)}) - \lambda^{(2)}(x^{(0)}, x^{(1)}).$$

Równanie to jest podobne do równań na $\lambda^{(1)}$ i $\lambda^{(2)}$, ale tu możemy pójść dalej. Korzystając z hermitowskości A_1 , możemy napisać

$$(x^{(0)}, [A_1 - \lambda^{(1)}]x^{(2)}) = ([A_1 - \lambda^{(1)}]x^{(0)}, x^{(2)}).$$

Dzięki (4.55a) dostajemy

$$(x^{(0)}, [A_1 - \lambda^{(1)}]x^{(2)}) = -([A_0 - \lambda^{(0)}]x^{(1)}, x^{(2)}) = -(x^{(1)}, [A_0 - \lambda^{(0)}]x^{(2)}),$$

gdzie skorzystaliśmy tym razem z hermitowskości A_0 . Wreszcie (4.55b) prowadzi do równania

$$(x^{(0)}, [A_1 - \lambda^{(1)}]x^{(2)}) = (x^{(1)}, [A_1 - \lambda^{(1)}]x^{(1)}) - \lambda^{(2)}(x^{(1)}, x^{(0)}).$$

Wstawiając to do równania na $\lambda^{(3)}$, otrzymujemy

$$\lambda^{(3)} = (x^{(1)}, [A_1 - \lambda^{(1)}]x^{(1)}) - \lambda^{(2)}[(x^{(0)}, x^{(1)}) + (x^{(1)}, x^{(0)})]. \quad (4.56c)$$

Tak więc $\lambda^{(3)}$ jest wyznaczona tylko przez $x^{(0)}$ i $x^{(1)}$, bez udziału $x^{(2)}$. Jest to ogólna cecha rachunku zaburzeń. W istocie każde nowe $x^{(i)}$ określa dwa wyrazy rozwinięcia λ . Widzieliśmy już, że $\lambda^{(0)}$ i $\lambda^{(1)}$ są wyznaczone przez $x^{(0)}$, a $\lambda^{(2)}$ i $\lambda^{(3)}$ przez $x^{(0)}$ i $x^{(1)}$. Pokazanie, że $\lambda^{(4)}$ i $\lambda^{(5)}$ dają się otrzymać z $x^{(0)}$, $x^{(1)}$ i $x^{(2)}$, a następnie uogólnienie tej własności na człony wyższych rzędów, sprowadza się do prostego dość ćwiczenia.

Możemy nieco uprościć (4.56), jeżeli zauważymy, że można tak dobrać wektory własne, żeby $(x^{(0)}, x^{(i)}) = 0$ dla $i > 0$. Stwierdzenie to jest prawdziwe, jeśli bowiem którekolwiek z równań na $x^{(i)}$, (4.55), ma jakieś rozwiązanie $y^{(i)}$, to $y^{(i)} + ax^{(0)}$ jest również rozwiązaniem, ponieważ $(A_0 - \lambda^{(0)})x^{(0)} = 0$. Możemy więc zawsze zapewnić spełnienie warunku

$$(x^{(0)}, x^{(i)}) = (x^{(0)}, y^{(i)} + ax^{(0)}) = (x^{(0)}, y^{(i)}) + a = 0,$$

przyjmując jako rozwiązanie wektory $y^{(i)} + ax^{(0)}$, gdzie $a = -(x^{(0)}, y^{(i)})$. Wówczas (4.56) przechodzi w

$$\lambda^{(1)} = (x^{(0)}, A_1 x^{(0)}), \quad (4.57a)$$

$$\lambda^{(2)} = (x^{(0)}, A_1 x^{(1)}), \quad (4.57b)$$

$$\lambda^{(3)} = (x^{(1)}, [A_1 - \lambda^{(1)}]x^{(1)}). \quad (4.57c)$$

Trzeba podkreślić, że te wartości $\lambda^{(1)}$, $\lambda^{(2)}$ i $\lambda^{(3)}$ zostały otrzymane z warunku istnienia dobrze określonych rozwiązań równań (4.55). Mając teraz te wartości λ opisane równaniami (4.57), dostajemy gwarancję, że rozwiązania takie rzeczywiście istnieją. Pozostaje jedynie znaleźć rozwiązania (4.55) i tutaj mamy do dyspozycji kilka metod.

Najbardziej oczywista metoda polegałaby na rozwiązaniu bezpośrednio równań macierzowych. Ponieważ jednak najczęściej stosujemy rachunek zaburzeń do operatorów w przestrzeniach nieskończenie wymiarowych, gdzie nie ma prostej reprezentacji macie-

rzowej, nie będziemy więcej mówili o tej metodzie poza tym, że można ją zastosować i jest w zasadzie dość prosta w użyciu dla przestrzeni skończonego wymiaru.

Gdyby sytuacja była na tyle korzystna, że znalazłbyśmy zupełny zbiór funkcji własnych i wartości własnych operatora hermitowskiego A_0 , istniałaby dodatkowa możliwość: moglibyśmy rozwinąć $x_n^{(i)}$ ($i = 1, 2, \dots$) na funkcje własne A_0 tj. $x_m^{(0)}$. Wprowadziliśmy tu ponownie wskaźnik n dla odróżnienia różnych wartości i wektorów własnych. Dla przykładu obliczymy $x_n^{(1)}$ przy pomocy $x_m^{(0)}$; rozszerzenie tej metody na $x_n^{(i)}$ dla $i \geq 2$ jest już sprawą prostą.

Założmy najpierw, że $m \neq n$ i weźmy lewostronnie iloczyn wewnętrzny obu stron (4.55a) z $x_m^{(0)}$. Dostajemy

$$(x_m^{(0)}, [A_0 - \lambda_n^{(0)}]x_n^{(1)}) = -(x_m^{(0)}, [A_1 - \lambda_n^{(1)}]x_n^{(0)}). \quad (4.58)$$

Ponieważ funkcje własne A_0 tworzą zbiór ortonormalny, prawa strona (4.58) jest po prostu równa

$$-(x_m^{(0)}, A_1 x_n^{(0)}).$$

Lewą stronę (4.58), w oparciu o hermitowskość A_0 i fakt, że $x_m^{(0)}$ jest funkcją własną A_0 o wartości własnej $\lambda_m^{(0)}$, możemy zapisać jako

$$(\lambda_m^{(0)} - \lambda_n^{(0)}) (x_m^{(0)}, x_n^{(1)}).$$

Wówczas (4.58) przechodzi w

$$(\lambda_m^{(0)} - \lambda_n^{(0)}) (x_m^{(0)}, x_n^{(1)}) = (x_m^{(0)}, A_1 x_n^{(0)}), \quad m \neq n.$$

W braku degeneracji $\lambda_n^{(0)} \neq \lambda_m^{(0)}$ dla $n \neq m$. Zatem

$$(x_m^{(0)}, x_n^{(1)}) = \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_n^{(0)})}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)}} \quad (4.59)$$

dla $m \neq n$. Dla $m = n$ postanowiliśmy już poprzednio przyjmować $(x_n^{(0)}, x_n^{(1)}) = 0$. Korzystamy teraz z zupełności funkcji własnych A_0 , pisząc

$$x_n^{(1)} = \sum_m (x_m^{(0)}, x_n^{(1)}) x_m^{(0)}.$$

W naszym konkretnym wypadku

$$x_n^{(1)} = \sum_{m \neq n} \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_n^{(0)})}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)}} x_m^{(0)}. \quad (4.60)$$

To nam daje funkcję $x_n^{(1)}$; ta sama metoda, zastosowana do równań (4.55b) i (4.55c) dałaby $x_n^{(2)}$ i $x_n^{(3)}$. Zauważmy, że zgodnie z (4.57b) i (4.57c) znając $x_n^{(0)}$ i $x_n^{(1)}$, możemy znaleźć $\lambda_n^{(2)}$ i $\lambda_n^{(3)}$.

Wszystkie te operacje możemy zilustrować następującym prostym przykładem. Pokazaliśmy w przykładzie 1 z § 3.10, że hermitowska macierz Pauliego

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

ma wartości własne $\lambda_1^{(0)} = +1$, $\lambda_2^{(0)} = -1$ i unormowane wektory własne

$$x_1^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad x_2^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

Korzystając z rachunku zaburzeń dla przypadku niezdegenerowanego, możemy obliczyć wektory własne macierzy

$$\sigma = \begin{bmatrix} \varepsilon & 1-\varepsilon \\ 1-\varepsilon & 3\varepsilon \end{bmatrix} = \sigma_x + \varepsilon \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 3 \end{bmatrix}$$

z dokładnością do rzędu pierwszego, a stąd otrzymać wartości własne aż do rzędu trzeciego w ε .

Ponieważ

$$A_1 = \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 3 \end{bmatrix},$$

więc $\lambda^{(1)}$ jest dane wzorem

$$\lambda_1^{(1)} = (x_1^{(0)}, A_1 x_1^{(0)}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 \ 1] \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2} [1 \ 1] \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} = 1,$$

$$\lambda_2^{(1)} = (x_2^{(0)}, A_1 x_2^{(0)}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 \ -1] \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} = \frac{1}{2} [1 \ -1] \begin{bmatrix} 2 \\ -4 \end{bmatrix} = 3.$$

Zatem, z dokładnością do rzędu pierwszego,

$$\lambda_1 = 1 + \varepsilon, \quad \lambda_2 = -1 + 3\varepsilon.$$

Żeby obliczyć teraz poprawkę rzędu pierwszego do wektora własnego, korzystamy z (4.60):

$$\begin{aligned} x_1^{(1)} &= \sum_{m \neq 1} \frac{(x_m^{(0)}, A_1 x_1^{(0)})}{\lambda_1^{(0)} - \lambda_m^{(0)}} x_m^{(0)} = \frac{(x_2^{(0)}, A_1 x_1^{(0)})}{\lambda_1^{(0)} - \lambda_2^{(0)}} x_2^{(0)} = \\ &= \frac{1}{1 - (-1)} \frac{1}{\sqrt{2}} [1 \ -1] \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} x_2^{(0)} = -\frac{1}{2} x_2^{(0)} = -\frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Podobnie

$$x_2^{(1)} = +\frac{1}{2} x_1^{(0)} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Wówczas, z dokładnością do pierwszego rzędu w ε ,

$$x_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 - \varepsilon/2 \\ 1 + \varepsilon/2 \end{bmatrix}, \quad x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 + \varepsilon/2 \\ -1 + \varepsilon/2 \end{bmatrix}. \quad (4.61)$$

Mając $x_1^{(1)}$ i $x_2^{(1)}$, możemy teraz obliczyć poprawki drugiego i trzeciego rzędu do λ_1 i λ_2 . Korzystając z (4.57b), dostajemy

$$\lambda_1^{(2)} = (x_1^{(0)}, A_1 x_1^{(1)}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 \ 1] \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \frac{(-1)}{2\sqrt{2}} = -\frac{1}{4} [1 \ 1] \begin{bmatrix} 2 \\ -4 \end{bmatrix} = +\frac{1}{2},$$

$$\lambda_2^{(2)} = (x_2^{(0)}, A_1 x_2^{(1)}) = \frac{1}{\sqrt{2}} [1 \ -1] \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} \frac{1}{2\sqrt{2}} = \frac{1}{4} [1 \ -1] \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \end{bmatrix} = -\frac{1}{2}.$$

Podobnie, korzystając z (4.57c), otrzymujemy

$$\begin{aligned} \lambda_1^{(3)} = (x_1^{(1)}, A_1 x_1^{(1)}) - \lambda_1^{(1)}(x_1^{(1)}, x_1^{(1)}) &= -\frac{1}{2\sqrt{2}} [1 \ -1] \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \frac{(-1)}{2\sqrt{2}} - \\ &- 1 \frac{(-1)}{2\sqrt{2}} [1 \ -1] \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix} \frac{(-1)}{2\sqrt{2}} = \frac{3}{4} - \frac{1}{4} = \frac{1}{2} \end{aligned}$$

Analogicznie $\lambda_2^{(3)} = -\frac{1}{2}$. Uwzględniając wszystkie te wyniki, stwierdzamy, że z dokładnością do trzeciego rzędu w ε

$$\begin{aligned}\lambda_1 &= 1 + \varepsilon + \frac{1}{2}\varepsilon^2 + \frac{1}{2}\varepsilon^3 \dots, \\ \lambda_2 &= -1 + 3\varepsilon - \frac{1}{2}\varepsilon^2 - \frac{1}{2}\varepsilon^3 + \dots\end{aligned}\quad (4.62)$$

Nasze wyniki końcowe (4.61) i (4.62) można łatwo sprawdzić, diagonalizując bezpośrednio macierz A , tzn. rozwiązując równanie

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & 1 - \varepsilon \\ 1 - \varepsilon & 3\varepsilon \end{bmatrix} x_n = \lambda_n x_n.$$

Rozwiązanie równania charakterystycznego daje

$$\lambda_1 = 2\varepsilon + \sqrt{1 - 2(\varepsilon - \varepsilon^2)}, \quad \lambda_2 = 2\varepsilon - \sqrt{1 - 2(\varepsilon - \varepsilon^2)},$$

co, po rozwinięciu na szereg potęgowy w ε , odtwarza (4.62) aż do trzeciego rzędu. Jako ćwiczenie pozostawiamy czytelnikom dowód, że wektory własne A , które dzięki znajomości λ_1 i λ_2 można wyliczyć dokładnie, zgadzają się z (4.61) z dokładnością do pierwszego rzędu.

Widzimy, że w tym przypadku promień zbieżności rachunku zaburzeń dany jest jako promień zbieżności rozwinięcia wyrażenia $\sqrt{1 - 2(\varepsilon - \varepsilon^2)}$. Na ogół jednak jest bardzo trudno podać dokładną dyskusję tego typu rachunku zaburzeń, zwanego często teorią perturbacyjną Rayleigha-Schrödingera od nazwisk autorów tej idei.

4.12. RACHUNEK ZABURZEŃ — PRZYPADEK ZDEGENEROWANY

W poprzednim paragrafie stwierdziliśmy, że jeżeli operator rzędu zerowego, A_0 , ma widmo niezdegenerowane, to podstawowe rezultaty rachunku zaburzeń wynikają bezpośrednio z zupełności funkcji własnych A_0 i z twierdzenia 3.17. Pokażemy teraz, że podobna sytuacja ma miejsce również, gdy A_0 ma zdegenerowane wartości własne. Jedyne komplikacje, pojawiające się w tym przypadku, są związane z zapisem.

Chciałoby się tutaj zastąpić natychmiast (4.50) równaniem

$$[A_0 - \lambda_n^{(0)}] x_{n,i}^{(0)} = 0,$$

gdzie $i = 1, 2, \dots, \mu_n$, a μ_n jest krotnością n -tej wartości własnej, po czym przepisać (4.51a) w postaci

$$[A_0 - \lambda_n^{(0)}] x_{n,i}^{(1)} = -[A_1 - \lambda_{n,i}^{(1)}] x_{n,i}^{(0)}.$$

W tym momencie jednak pojawiają się kłopoty, bowiem, na mocy twierdzenia 3.17, warunkiem istnienia rozwiązania jest nie tylko związek

$$(x_{n,i}^{(0)}, [A_1 - \lambda_{n,i}^{(1)}] x_{n,i}^{(0)}) = 0,$$

ale również, gdy $\lambda_n^{(0)}$ ma krotność μ_n , związek

$$(x_{n,j}^{(0)}, [A_1 - \lambda_{n,i}^{(1)}] x_{n,i}^{(0)}) = 0 \quad \text{dla każdego } j.$$

Przy $j \neq i$ to ostatnie równanie przechodzi w

$$(x_{n,i}^{(0)}, A_1 x_{n,j}^{(0)}) = 0,$$

co wygląda na zbiór ograniczeń na nasz operator zaburzający A_1 . Oczywiście jest to sytuacja nie do przyjęcia. W tym jednak momencie przychodzi nam z pomocą degeneracja. Zapomnieliśmy mianowicie, że stwierdzenie „ $x_{n,i}^{(0)}$ ($i = 1, 2, \dots, \mu_n$) są wektorami własnymi A_0 odpowiadającymi wartości własnej $\lambda_n^{(0)}$ ” nie jest w pełni precyzyjne, ponieważ w gruncie rzeczy, każda kombinacja liniowa $x_{n,i}^{(0)}$ ($i = 1, 2, \dots, \mu_n$) jest także poprawnym rozwiązaniem rzędu zerowego.

Przyjmijmy więc jako rozwiązania rzędu zerowego zbiór $y_{n,i}^{(0)}$ ($i = 1, 2, \dots, \mu_n$), gdzie

$$y_{n,i}^{(0)} = \sum_{j=1}^{\mu_n} a_j^{(i)} x_{n,j}^{(0)}. \quad (4.63)$$

Zobaczmy dalej, że $a_j^{(i)}$ można wyznaczyć w taki sposób, żeby uniknąć trudności przy obliczaniu poprawek do $\lambda_n^{(0)}$.

Jeśli zażądamy, żeby $(y_{n,j}^{(0)}, y_{n,k}^{(0)}) = \delta_{jk}$, to

$$\sum_i a_i^{(j)*} a_i^{(k)} = \delta_{jk}. \quad (4.64)$$

Tak więc zamiast (4.50) piszemy

$$[A_0 - \lambda_n^{(0)}] y_{n,i}^{(0)} = 0 \quad (4.50')$$

i zastępujemy (4.52) przez

$$\begin{aligned} \lambda_{n,i} &= \lambda_n^{(0)} + \varepsilon \lambda_{n,i}^{(1)} + \varepsilon^2 \lambda_{n,i}^{(2)} + \dots, \\ v_{n,i} &= y_{n,i}^{(0)} + \varepsilon y_{n,i}^{(1)} + \varepsilon^2 y_{n,i}^{(2)} + \dots, \end{aligned} \quad (4.52')$$

gdzie $y_{n,i}^{(0)}$ dane jest równaniem (4.63). Twierdzimy, że rozwiązując (4.50) mogliśmy łatwo znaleźć zbiór funkcji własnych $x_{n,i}^{(0)}$ do przyjęcia jako rozwiązania (4.50), ale niezbyt dobrych z punktu widzenia obliczania poprawek wyższego rzędu. Chcemy znaleźć kombinacje liniowe $x_{n,i}^{(0)}$ nadające się do tego celu. Jednocześnie przy oznaczaniu wartości własnych dodaliśmy dodatkowy wskaźnik degeneracyjny wszystkim wyrazom poza $\lambda_n^{(0)}$, ponieważ oczekujemy, że dowolne zaburzenie rozszczepi w pewnym stopniu degenerację. Opierając się na (4.52') dostajemy, tak jak w poprzednim paragrafie, analogony równań (4.55):

$$[A_0 - \lambda_n^{(0)}] y_{n,i}^{(1)} = -[A_1 - \lambda_{n,i}^{(1)}] y_{n,i}^{(0)}, \quad (4.55a')$$

$$[A_0 - \lambda_n^{(0)}] y_{n,i}^{(2)} = -[A_1 - \lambda_{n,i}^{(1)}] y_{n,i}^{(1)} + \lambda_{n,i}^{(2)} y_{n,i}^{(0)}, \quad (4.55b')$$

$$[A_0 - \lambda_n^{(0)}] y_{n,i}^{(3)} = -[A_1 - \lambda_{n,i}^{(1)}] y_{n,i}^{(2)} + \lambda_{n,i}^{(2)} y_{n,i}^{(1)} + \lambda_{n,i}^{(3)} y_{n,i}^{(0)}. \quad (4.55c')$$

Teraz widać korzyści wynikające z nowego sformułowania problemu. Żeby istniało rozwiązanie równania (4.55a') żądamy, aby wektor po prawej stronie (4.55a') nie miał składowej należącej do podprzestrzeni rozpiętej na zbiorze $\{x_{n,i}^{(0)}\}$ (pokrywającej się oczywiście z podprzestrzenią rozpiętą na $\{y_{n,i}^{(0)}\}$). Innymi słowy, narzucamy warunek

$$(x_{n,j}^{(0)}, [A_1 - \lambda_{n,i}^{(1)}] y_{n,i}^{(0)}) = 0 \quad \text{dla każdego } i, j.$$

Ale, dzięki (4.63) sprowadza się on do równania

$$\sum_k (x_{n,j}^{(0)}, [A_1 - \lambda_n^{(1)}] x_{n,k}^{(0)}) a_k^{(i)} = 0$$

lub też

$$\sum_k [(x_{n,j}^{(0)}, A_1 x_{n,k}^{(0)}) - \lambda_n^{(1)} \delta_{jk}] a_k^{(i)} = 0, \quad (4.65a)$$

co już ma postać prostego zagadnienia własnego, omawianego w tym rozdziale. Łatwiej to zauważyć po wprowadzeniu macierzy M , której element jk dany jest równaniem

$$M_{jk} = (x_{n,j}^{(0)}, A_1 x_{n,k}^{(0)})$$

i wektora $a^{(i)}$, którego k -ty element jest $a_k^{(i)}$. Przy tych oznaczeniach (4.65a) można przepisać jako

$$(M - \lambda_n^{(1)}) a^{(i)} = 0. \quad (4.65b)$$

Ponieważ A_1 jest hermitowskie, podobną własność ma M , a więc (4.65b) jest zagadnieniem własnym hermitowskim. Zatem $\lambda_n^{(i)}$ będzie rzeczywiste i $a^{(i)}$ można wybrać tak, żeby

$$(a^{(i)}, a^{(j)}) = \delta_{ij},$$

zgodnie z warunkiem (4.64). W ten sposób jednocześnie: (1) znaleźliśmy pierwsze poprawki do $\lambda_n^{(0)}$, (2) wyznaczyliśmy odpowiednie kombinacje liniowe $x_{n,i}^{(0)}$ oraz (3) zapewniliśmy istnienie rozwiązania równania (4.55a').

Podsumowując, postępowanie nasze jest następujące: obliczamy reprezentację macierzy A_1 w podprzestrzeni rozpiętej na zbiorze $\{x_{n,i}^{(0)}, i = 1, 2, \dots, \mu_n\}$. Następnie znajdujemy wartości własne i ortonormalne wektory własne tej macierzy (jej rozmiar jest $\mu_n \times \mu_n$). Wartości własne są poprawkami pierwszego rzędu do $\lambda_n^{(0)}$, a wektory własne dają poprawne kombinacje liniowe $y_{n,i}^{(0)}$ zadane w (4.63).

W tym momencie możemy (4.55a') rozwiązać względem $y_{n,i}^{(1)}$. Jeśli na przykład znamy *wszystkie* wektory własne i wartości własne A_0 , to, poprzez rozwinięcie omawiane w § 4.11, dostajemy dla $m \neq n$

$$(x_{m,i}^{(0)}, y_{n,j}^{(1)}) = \frac{(x_{m,i}^{(0)}, A_1 y_{n,j}^{(0)})}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)}}. \quad (4.66)$$

Zauważmy jednak, że nie mamy tutaj jeszcze μ_n składowych wektorów $y_{n,j}^{(1)}$ wzdłuż $x_{n,i}^{(0)}$ ($i = 1, 2, \dots, \mu_n$), tzn. nie znamy $(x_{n,i}^{(0)}, y_{n,j}^{(1)})$. Dlatego nie możemy jeszcze skorzystać z odpowiedniego rozwinięcia.

W przypadku bez degeneracji, gdy brakowało nam tylko jednej składowej wektora własnego pierwszego rzędu, stwierdziliśmy, że moglibyśmy bez ryzyka przyjąć brakującą składową za równą zero. Postępowanie takie jest uzasadnione, bowiem mamy dodatkowy stopień swobody związany z normalizacją wektora własnego (który w problemach fizycznych jest zazwyczaj unormowany do jedności). Natomiast w przypadku zdegenerowanym brakuje nam μ_n składowych i oczywiście nie możemy wszystkich ich przyrównać do zera.

Okazuje się jednak, że uratuje nas ten sam fakt, który umożliwił nam uniknięcie dwuznaczności w wyborze funkcji falowej rzędu zerowego. Przechodząc do (4.55b'), w trakcie wyznaczania $\lambda_n^{(2)}$ znajdziemy brakujące składowe $y_{n,i}^{(1)}$.

Żeby równanie (4.55b') miało rozwiązanie, wektory po prawej stronie nie mogą mieć składowych leżących w podprzestrzeni rozpiętej na $\{x_{n,j}^{(0)}, j = 1, 2, \dots, \mu_n\}$, to znaczy

$$(x_{n,j}^{(0)}, [A_1 - \lambda_{n,i}^{(1)}]y_{n,i}^{(1)}) - \lambda_{n,i}^{(2)}(x_{n,j}^{(0)}, x_{n,i}^{(0)}) = 0$$

dla każdego i, j . Przy użyciu (4.63) otrzymujemy

$$a_j^{(i)} \lambda_{n,i}^{(2)} = (x_{n,j}^{(0)}, [A_1 - \lambda_{n,i}^{(1)}]y_{n,i}^{(1)}). \quad (4.67)$$

Rozkładamy teraz $y_{n,i}^{(1)}$, na dwie części

$$y_{n,i}^{(1)} = f_{n,i} + g_{n,i},$$

gdzie $f_{n,i}$ jest nieznaną częścią $y_{n,i}^{(1)}$ leżącą w podprzestrzeni rozpiętej na $\{x_{n,j}^{(0)}, j = 1, 2, \dots, \mu_n\}$, a $g_{n,i}$ jest resztą, którą znamy już zgodnie z (4.66). W ten sposób (4.67) można zapisać jako

$$(x_{n,j}^{(0)}, [A_1 - \lambda_{n,i}^{(1)}]f_{n,i}) = -(x_{n,j}^{(0)}, A_1 g_{n,i}) + a_j^{(i)} \lambda_{n,i}^{(2)}. \quad (4.68)$$

Na koniec wreszcie piszemy $f_{n,i}$ w postaci

$$f_{n,i} = \sum_k b_k^{(i)} x_{n,k}^{(0)} \quad (4.69)$$

i podstawiając do (4.68), dostajemy

$$\sum_k (x_{n,j}^{(0)}, [A_1 - \lambda_{n,i}^{(1)}]x_{n,k}^{(0)}) b_k^{(i)} = \lambda_{n,i}^{(2)} a_j^{(i)} - (x_{n,j}^{(0)}, A_1 g_{n,i}) \quad \text{dla każdego } i, j. \quad (4.70a)$$

Po dokładnym przyjrzeniu się równaniu (4.70a) czytelnik zauważy mimo natłoku wskaźników, że jest to proste równanie macierzowe. Istotnie, jeżeli zdefiniujemy wektor $b^{(i)}$, którego składowymi jest μ_n skalarów $b_k^{(i)}$ oraz wektor $a^{(i)}$ o składowych $a_k^{(i)}$, to równanie (4.70) przyjmie postać

$$(M - \lambda_{n,i}^{(1)})b^{(i)} = \lambda_{n,i}^{(2)}a^{(i)} - c^{(i)} \quad (4.70b)$$

dla każdego i , gdzie macierz M zdefiniowana poprzednio ma element o wskaźnikach jk równy $(x_{n,j}^{(0)}, A_1 x_{n,k}^{(0)})$, a $c^{(i)}$ jest wektorem o j -tej składowej równej $(x_{n,j}^{(0)}, A_1 g_{n,i})$. Zatem wektory $b^{(i)}$ można wyznaczyć z prostego równania typu $Hx = h$. Znowu, zgodnie z (4.70b), H jest osobliwe, ponieważ właśnie poprzez diagonalizację macierzy po lewej stronie (4.70b) wyznaczyliśmy z (4.65b) $\lambda_{n,i}^{(1)}$. W takim przypadku nasze niezwykle pożyteczne twierdzenie 3.17 mówi, że dla istnienia rozwiązania potrzeba, aby prawa strona (4.70b) była ortogonalna do wszystkich wektorów własnych z (4.65b) należących do wartości własnej $\lambda_{n,i}^{(1)}$. Przypuśćmy, że zaburzenie usunęło całkowicie degenerację w pierwszym rzędzie, czyli żadne z liczb $\lambda_{n,i}^{(1)}$ ($i = 1, 2, \dots, \mu_n$) nie są sobie równe. Wówczas jedynym wektorem własnym należącym do $\lambda_{n,i}^{(1)}$ jest $a^{(i)}$; na mocy podanych wyżej uwag, rozwiązanie równania (4.70b) istnieje, jeżeli

$$\lambda_{n,i}^{(2)}(a^{(i)}, a^{(i)}) - (a^{(i)}, c^{(i)}) = 0.$$

lub, po rozbiciu na składowe,

$$\sum_j a_j^{(i)*} [a_j^{(i)} \lambda_{n,i}^{(2)} - (x_{n,j}^{(0)}, A_1 g_{n,i})] = 0.$$

Po skorzystaniu z (4.63) i (4.64) sprowadza się to do postaci

$$\lambda_{n,i}^{(2)} = (y_{n,i}^{(0)}, A_1 g_{n,i}). \quad (4.71)$$

Jeśli znamy wszystkie wektory własne A_0 i odpowiadające im wartości własne, to z (4.66)

$$g_{n,j} = \sum_{m \neq n} \sum_{i=1}^{\mu_n} \frac{(x_{m,i}^{(0)}, A_1 y_{n,i}^{(0)})}{\lambda_n^{(0)} - \lambda_m^{(0)}} x_{m,i}^{(0)}, \quad (4.66')$$

a więc można wyznaczyć $\lambda_n^{(2)}$. Należy podkreślić, że (4.71) jest bardzo podobne do równania (4.57b) z poprzedniego paragrafu.

Tutaj ponownie równanie określające $\lambda_n^{(2)}$ gwarantuje istnienie rozwiązań (4.70b) na $b^{(i)}$ ($i = 1, 2, \dots, \mu_n$), a więc brakujące składowe $y_{n,i}^{(1)}$ zostały znalezione, choć składowa $b^{(i)}$ w kierunku $a^{(i)}$ nie została wyznaczona. (Łatwo pokazać, że odpowiada to nieznanoci $(y_{n,i}^{(0)}, y_{n,i}^{(1)})$). Często wygodnie jest przyjąć ten iloczyn wewnętrzny za równy zero, co jest równoważne wybraniu $b^{(i)}$ ortogonalnego do $a^{(i)}$. Na koniec, po wyznaczeniu tą drogą $\lambda_n^{(2)}$ i $b^{(i)}$ dla każdego i , twierdzenie 3.17 zapewnia nam istnienie rozwiązania równania (4.55b'), a więc $y_{n,i}^{(2)}$ jest już znane, choć nadal z nieoznaczonością wzdłuż kierunków $\{x_{n,i}^{(0)}, i = 1, 2, \dots, \mu_n\}$. Jest możliwe, choć bardzo pracochłonne, przejść dalej do równania (4.51c'), usunąć nieoznaczoność w $y_{n,i}^{(2)}$ i jednocześnie obliczyć $\lambda_n^{(3)}$.

Przy przejściu do drugiego rzędu założyliśmy, że degeneracja w pierwszym rzędzie została całkowicie usunięta. Załóżenie to *nie jest konieczne* i pozostawiamy w formie ćwiczenia (w notacji) dla zainteresowanych czytelników pokazanie, że jeżeli częściowa degeneracja występuje nadal w pierwszym rzędzie, musimy rozwiązać zagadnienie własne dla tych spośród $\lambda^{(2)}$, które odpowiadają zdegenerowanym $\lambda^{(1)}$ i nie mamy już do czynienia z prostym równaniem na $\lambda_n^{(2)}$. Podkreślamy, że cały problem sprowadza się jedynie do odpowiedniego zapisu, podobnie jak przy przejściu od niezdegenerowanego do zdegenerowanego rachunku zaburzeń. W zasadzie cała teoria perturbacyjna Rayleigha–Schrödingera wywodzi się z istnienia rozwinięcia typu danego w równaniu (4.52) z następującym po nim wielokrotnym stosowaniem twierdzenia 3.17.

Przykład. Jako zastosowanie rachunku zaburzeń w przypadku degeneracji rozważmy operator liniowy

$$A_0 = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 y^2. \quad (4.72)$$

Jest on sumą dwóch niezależnych operatorów liniowych typu omawianego w § 3.10. Narzucamy związki komutacyjne

$$[x, p_x] = i\hbar I, \quad [y, p_y] = i\hbar I,$$

a wszystkie pozostałe komutatory (np. $[x, p_y]$) znikają. Podobnie jak w § 3.10 definiujemy

$$\begin{aligned} a_x &= (xm\omega_0 + ip_x)(2m\omega_0\hbar)^{-1/2}, & a_y &= (ym\omega_0 + ip_y)(2m\omega_0\hbar)^{-1/2}, \\ a_x^\dagger &= (xm\omega_0 - ip_x)(2m\omega_0\hbar)^{-1/2}, & a_y^\dagger &= (ym\omega_0 - ip_y)(2m\omega_0\hbar)^{-1/2}. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Prosty rachunek, podobny do tego, który prowadził do wzoru (3.47), pokazuje, że

$$A_0 = \hbar\omega_0(a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + I) \quad (4.74)$$

i

$$[a_x, a_x^\dagger] = I = [a_y, a_y^\dagger],$$

$$[a_x, a_y] = [a_x^\dagger, a_y^\dagger] = [a_x, a_y^\dagger] = [a_x^\dagger, a_y] = 0.$$

Wynika stąd, że

$$[a_x^\dagger, A_0] = -\hbar\omega_0 a_x^\dagger, \quad [a_i, A_0] = \hbar\omega_0 a_i$$

dla $i = x, y$. Przy pomocy metod identycznych do użytych w § 3.10 stwierdzamy, że funkcje własne A_0 są dane jako

$$\phi_{n,m} = (a_x^\dagger)^n (a_y^\dagger)^m \phi_{0,0} / \sqrt{n!m!},$$

a odpowiadające im wartości własne

$$\lambda_N^{(0)} = \hbar\omega_0(n+m+1) = \hbar\omega_0(N+1). \quad (4.75b)$$

Jeżeli zażądamy normalizacji $(\phi_{0,0}, \phi_{0,0}) = 1$, to

$$(\phi_{n,m}, \phi_{\nu,\mu}) = \delta_{n\nu} \delta_{m\mu}.$$

Przy tych definicjach mamy również

$$\begin{aligned} a_x^\dagger \phi_{n,m} &= (n+1)^{1/2} \phi_{n+1,m}, & a_y^\dagger \phi_{n,m} &= (m+1)^{1/2} \phi_{n,m+1}, \\ a_x \phi_{n,m} &= (n)^{1/2} \phi_{n-1,m}, & a_y \phi_{n,m} &= (m)^{1/2} \phi_{n,m-1}. \end{aligned} \quad (4.76)$$

Przypuśćmy teraz, że A_0 zostaje zaburzone przez dodanie wyrazu postaci

$$\varepsilon A_1 = \varepsilon m \omega_0^2 xy.$$

Po wyrażeniu przez operatory kreacji i anihilacji

$$\varepsilon A_1 = \frac{1}{2} \varepsilon \hbar \omega_0 (a_x^\dagger a_y + a_x a_y^\dagger - a_x^\dagger a_x^\dagger - a_x a_y). \quad (4.77)$$

Najniższa wartość A_0 odpowiada $n = m = 0$; $\lambda_{0,0} = \hbar\omega_0$; nie jest ona zdegenerowana. Zatem teoria zawarta w § 4.11 da się tu zastosować i czytelnikowi pozostawiamy dowód, że po wyliczeniu wszystkich wyrazów aż do ε^2 dostajemy

$$\begin{aligned} \lambda_{0,0} &= \lambda_{0,0}^{(0)} + \varepsilon \lambda_{0,0}^{(1)} + \varepsilon^2 \lambda_{0,0}^{(2)} + \dots, \\ \lambda_{0,0} &= \hbar\omega_0 (1 - \varepsilon^2/8 + \dots). \end{aligned} \quad (4.78)$$

Następna wartość własna jest dwukrotnie zdegenerowana, ponieważ zgodnie z (4.75) wartości własnej $2\hbar\omega_0$ odpowiadają dwa wektory własne, a mianowicie

$$\phi_{1,0} = a_x^\dagger \phi_{0,0}, \quad \phi_{0,1} = a_y^\dagger \phi_{0,0}.$$

Skoro tak, to dla otrzymania poprawek do tej wartości własnej potrzebny jest nam rachunek zaburzeń z degeneracją. Utrzymując wprowadzony wcześniej w tym paragrafie zapis, piszemy

$$x_{1,1}^{(0)} = \phi_{1,0}, \quad x_{1,2}^{(0)} = \phi_{0,1}. \quad (4.79)$$

Zgodnie z (4.65) musimy znaleźć reprezentację macierzową A_1 w podprzestrzeni rozpiętej na $x_{1,1}^{(0)}$ i $x_{1,2}^{(0)}$. Korzystając z (4.76), (4.77) i (4.79), dostajemy szukaną macierz

$$\frac{1}{2} \hbar \omega_0 \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Postępując tak jak w (4.65b), diagonalizujemy tę macierz i dostajemy $\lambda_{1,1}^{(1)} = \frac{1}{2} \hbar \omega_0$,

$\lambda_{1,2}^{(1)} = -\frac{1}{2} \hbar \omega_0$ oraz wektory własne

$$a^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad a^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}.$$

Równanie (4.63) daje wówczas poprawne rozwiązania rzędu zerowego:

$$y_{1,1}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_{1,1}^{(0)} + x_{1,2}^{(0)}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{1,0} + \phi_{0,1}),$$

$$y_{1,2}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (x_{1,1}^{(0)} - x_{1,2}^{(0)}) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_{1,0} - \phi_{0,1}).$$

To nam daje z dokładnością do pierwszego rzędu w ε :

$$\lambda_{1,1} = 2\hbar\omega_0 + \frac{1}{2} \varepsilon \hbar\omega_0, \quad \lambda_{1,2} = 2\hbar\omega_0 - \frac{1}{2} \varepsilon \hbar\omega_0.$$

Po uzyskaniu tych wyników możemy rozwiązać (4.55a') względem $y_{1,1}^{(1)}$ i $y_{1,2}^{(1)}$. Ponieważ znamy wszystkie wektory i wartości własne A_0 , korzystamy z (4.66) dla wyznaczenia $g_{1,1}$ i $g_{1,2}$ — składowych $y_{1,1}^{(1)}$ i $y_{1,2}^{(1)}$, nie leżących w podprzestrzeni rozpiętej na $y_{1,1}^{(0)}$ i $y_{1,2}^{(0)}$. Zgodnie z (4.71) znajomość g pozwoli obliczyć $\lambda_{1,1}^{(2)}$ i $\lambda_{1,2}^{(2)}$. Korzystając z (4.66'), (4.75), (4.76), (4.77) i (4.79), dostajemy

$$g_{1,1} = \frac{1}{4} (\phi_{2,1} + \phi_{1,2}), \quad g_{1,2} = \frac{1}{4} (\phi_{2,1} - \phi_{1,2}).$$

Tak więc, zgodnie z (4.71),

$$\begin{aligned} \lambda_{1,1}^{(2)} = (y_{1,1}^{(0)}, A_1 g_{1,1}) &= \frac{1}{8\sqrt{2}} \hbar\omega_0 ([\phi_{1,0} + \phi_{0,1}], [a_x^\dagger a_y + a_x a_y^\dagger - \\ &- a_x^\dagger a_y^\dagger - a_x a_y] [\phi_{2,1} + \phi_{1,2}]) = -\frac{1}{4} \hbar\omega_0^2 = \lambda_{1,2}^{(2)}. \end{aligned}$$

W drugim rzędzie w ε mamy

$$\begin{aligned} \lambda_{1,1} &= \hbar\omega_0 \left(2 + \frac{1}{2} \varepsilon - \frac{1}{4} \varepsilon^2 + \dots \right), \\ \lambda_{1,2} &= \hbar\omega_0 \left(2 - \frac{1}{2} \varepsilon - \frac{1}{4} \varepsilon^2 + \dots \right). \end{aligned} \tag{4.80}$$

Dzięki szczególnej postaci oddziaływania, można ten problem rozwiązać dokładnie, przy użyciu metod podobnych do przedstawionych przy rozwiązywaniu zagadnień drgań normalnych. Łatwo pokazać, że dokładne wartości własne $A_0 + \varepsilon A_1$ są

$$\lambda_{v,\mu} = \hbar\omega_+ \left(v + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_- \left(\mu + \frac{1}{2} \right),$$

gdzie $\omega_{\pm} = \omega_0 \sqrt{1 \pm \varepsilon}$. W szczególności dostajemy

$$\begin{aligned} \lambda_{0,0} &= \frac{\hbar}{2} (\omega_+ + \omega_-) = \hbar\omega_0 (1 - \varepsilon^2/8 + \dots), \\ \lambda_{1,0} &= \frac{3}{2} \hbar\omega_+ + \frac{1}{2} \hbar\omega_- = \hbar\omega_0 \left(2 + \frac{1}{2} \varepsilon - \frac{1}{4} \varepsilon^2 + \dots \right), \\ \lambda_{0,1} &= \frac{1}{2} \hbar\omega_+ + \frac{3}{2} \hbar\omega_- = \hbar\omega_0 \left(2 - \frac{1}{2} \varepsilon - \frac{1}{4} \varepsilon^2 + \dots \right), \end{aligned}$$

co po dokonaniu małej zmiany w notacji, odpowiada dokładnie równaniom (4.78) i (4.80).

Podobne wyliczenia można zastosować do wyższych poziomów. Czytelnik może zbadać stany trzykrotnie zdegenerowane $\phi_{2,0}$, $\phi_{1,1}$ i $\phi_{0,2}$, o wspólnej wartości własnej $\lambda^{(0)} = 3\hbar\omega_0$ (zadanie 23). Rozwiązania typu podanego powyżej dają się łatwo otrzymać również w tym przypadku.

ZADANIA

1. Dowieść, że jeśli A jest macierzą samosprężoną, to $\det A$ jest rzeczywiste. (Jest to jedyna własność, jaką można dowieść dla wyznacznika macierzy samosprężonej, podczas gdy dla B unitarnej $|\det B| = 1$. Dowieść również to ostatnie stwierdzenie).

2. Dowieść, że jeżeli macierze A i B wiąże transformacja podobieństwa, $A = P^{-1}BP$, oraz P jest unitarne, to transformacja podobieństwa zachowuje hermitowskość.

3. Dowieść, że macierz $(I - iA)$ o wymiarach $n \times n$ posiada macierz odwrotną, o ile A jest hermitowskie.

4. Niech B będzie macierzą $n \times n$. Zdefiniujmy macierz $A = e^{iB}$ o wymiarach $n \times n$ poprzez jej rozwinięcie potęgowe, to znaczy

$$A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(iB)^n}{n!} = I + iB + \frac{(iB)^2}{2!} + \dots$$

Zakładając zbieżność szeregu dowieść, że A jest izometryczne, o ile B jest samosprężone. Pokazać również, że każda izometria U może być zapisana jako $U = \exp(iH)$, gdzie H jest hermitowskie. Wyrazić H przy pomocy wielkości związanych z U .

Wskazówk 1: można skorzystać z własności wektorów własnych i wartości własnych operatorów.

5. Dowieść, że wartości własne dowolnej antysamosprężonej macierzy są urojone.

6. Dowieść lub znaleźć kontrprzykład dla następujących stwierdzeń:

a) Jeżeli A i B są macierzami $n \times n$, to $AB = 0$ implikuje, że albo $A = 0$, albo $B = 0$.

b) Macierz hermitowska $n \times n$ całkowicie zdegenerowana (o wszystkich wartościach własnych równych) musi być diagonalna.

c) Jeżeli macierz $n \times n$ jest hermitowska, to wszystkie jej potęgi są hermitowskie.

d) $\det(A+B) = \det A + \det B$.

e) Jeżeli A i B są macierzami hermitowskimi $n \times n$, to AB jest hermitowskie.

f) $\text{Tr} AB = \text{Tr} A \text{Tr} B$ w przestrzeni skończenie wymiarowej.

7. a) Dowieść, że dwa wektory x i y w przestrzeni zespolonej z iloczynem wewnętrznym są ortogonalne wtedy i tylko wtedy, gdy $\|\alpha x + \beta y\|^2 = \|\alpha x\|^2 + \|\beta y\|^2$ dla każdego α, β . Czy twierdzenie będzie prawdziwe, jeżeli warunek osłabimy do postaci $\|x+y\|^2 = \|x\|^2 + \|y\|^2$?

b) Dowieść, że w dowolnej przestrzeni z iloczynem wewnętrznym

$$\|x-y\| \geq \left| \|x\| - \|y\| \right|.$$

c) Dowieść nierówność trójkąta

$$\|x+y\| \leq \|x\| + \|y\|.$$

8. W mechanice klasycznej twierdzenie o wiriale mówi, że średnia wartość energii potencjalnej prostego oscylatora harmonicznego jest równa średniej wartości jego energii

kinetycznej. Niech $(\phi, A\phi)$ oznacza wartość średnią obserwabli A w stanie ϕ (przy założeniu, że ϕ jest unormowane do jedności). Pokazać, że podobne twierdzenie jest słuszne również dla kwantowomechanicznego oscylatora harmonicznego. Pokazać, że polaryzowalność elektronu związanego siłą harmoniczną jest równa klasycznej, tzn. e^2/k , gdzie e jest ładunkiem elektrycznym, a k stałą sprężystości. Oznacza to, że stała dielektryczna układu takich obiektów (gęstość = n na jednostkę objętości) przy zerowej częstotliwości wynosi $4\pi ne^2/k$.

9. Zdefiniujmy $\exp(A)$, gdzie A jest dowolną macierzą, przez szereg potęgowy $\exp(x) = 1 + x + \dots$. Pokazać, że jeżeli istnieje macierz P sprowadzająca A do postaci diagonalnej przez transformację podobieństwa, to zachodzi równość

$$\det \exp(A) = \exp \operatorname{Tr}(A).$$

10. Przy jakich założeniach można dowieść, że AB i BA mają te same wartości własne? Jeżeli zaś mają te same wartości własne, to jaki jest związek pomiędzy odpowiadającymi im wektorami własnymi?

11. Zbiór przekształceń liniowych pewnej przestrzeni wektorowej może być sam uważany za przestrzeń wektorową. Pokazać, że iloczyn wewnętrzny w tej przestrzeni może być określony wzorem $(A, B) = \operatorname{Tr}(A^\dagger B)$, gdzie A i B są dwoma operatorami liniowymi w rozważanej przestrzeni, tzn. pokazać, że tak zdefiniowany twór spełnia wszystkie aksjomaty przestrzeni z iloczynem wewnętrznym.

12. *Grupa Lorentza.* a) Obliczyć wyznacznik macierzy Lorentza. Skomentować wynik.

b) Dowieść, że zbiór transformacji Lorentza o tym samym kierunku prędkości tworzy grupę.

13. *Prawo relatywistycznego dodawania prędkości.* Niech układ K' porusza się z jednostajną prędkością v równoległą do K i niech K'' porusza się z jednostajną prędkością v' względem K' . Jaka jest prędkość v'' układu K'' względem K ? Dowieść, że $v'' \leq c$, jeżeli v i v' są $\leq c$. *Sugerowana metoda:* Przy dowodzie zamkniętości operacji składania w zadaniu 12 okazuje się, że iloczyn jednej transformacji Lorentza (zespolony ortogonalny obrót o „kąt” $\Theta = \operatorname{artgh} \beta$) przez inną transformację Lorentza (zespolony obrót o kąt $\Theta' = \operatorname{artgh} \beta'$) jest znów transformacją Lorentza (obrotem o $\Theta + \Theta' = \Theta'' = \operatorname{artgh} \beta''$). Można zatem obliczyć β'' (tzn. v'') przy pomocy v i v' .

14. Wyprowadzić macierz A ogólnej transformacji Lorentza odpowiadającej względnej prędkości $v/c = \operatorname{tgh} \alpha$ w kierunku danym przez kąty sferyczne ϕ, Θ , stosując transformację podobieństwa $R^{-1}LR$, gdzie R jest uogólnieniem macierzy obrotu $R(\phi, \Theta)$ z (1.23) na przypadek macierzy 4×4 , działającym jedynie na trzy zmienne przestrzenne. Zwrócić uwagę na to, że $R^{-1} = R^T$. Założyć, że osie K i K' pozostają równoległe podczas jednostajnego ruchu względnego. Sprawdzić odpowiedź badając, czy zredukuje się do odpowiedniej postaci w trzech szczególnych przypadkach: $\phi = \phi, \Theta = 0$; $\phi = 0, \Theta = \pi/2$; $\alpha = 0$.

15. Pokazać, że zbadana w zadaniu 14 ogólna transformacja Lorentza daje się w zapisie wektorowym wyrazić następująco:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \frac{(\mathbf{v} \cdot \mathbf{r})\mathbf{v}}{v^2} (\gamma - 1) - vt\gamma, \quad t' = \left(t - \frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}}{c^2} \right) \gamma,$$

gdzie $\gamma = 1/\sqrt{1-\beta^2}$, $\beta = v/c$, a \mathbf{v} jest względną prędkością obu układów. Wzory te dają zwartą i wygodną metodę zapisu transformacji Lorentza pomiędzy układami o osiach

równoległych, poruszającymi się z dowolnie skierowaną jednostajną prędkością względną v .

16. a) Znaleźć wartości własne i wektory własne transformacji Lorentza. Sprawdzić, że wektory własne są wektorami o normie zero.

b) Obliczyć wyznacznik właściwej macierzy Lorentza.

c) Każda inna reprezentacja macierzowa transformacji Lorentza może być znaleziona przez podziałanie transformacją podobieństwa na macierz A (zadanie 14). Jaka jest wartość wyznacznika *dowolnej* reprezentacji macierzowej transformacji Lorentza?

17. Operator rzutowy P_i zdefiniowany jest następująco:

$$x' = P_i x \equiv x_i(x_i, x),$$

gdzie x_i jest wektorem jednostkowym. Operator ten nazywany jest rzutowym, ponieważ wszystkie x' mają kierunek zgodny z x_i , a długość x' jest równa składowej x w kierunku x_i , mianowicie (x_i, x) . Niech x_i będzie ortonormalnym zbiorem wektorów, rozpinającym n -wymiarową przestrzeń wektorową V . Dowieść, że

a) P_i jest idempotentny.

b) $P_i P_j = 0$ dla $i \neq j$. Podać interpretację geometryczną.

c) P_i nie posiada operatora odwrotnego.

d) $\sum_{i=1}^n P_i = I$.

e) P_i jest hermitowski.

f) Niech A będzie samosprzężonym operatorem liniowym, określonym w n -wymiarowej przestrzeni wektorowej V , mającym n wartości własnych ε_i oraz n wektorów własnych x_i . Dowieść, że A można zapisać w postaci

$$A = \sum_{i=1}^n \varepsilon_i P_i,$$

gdzie operator P_i został zdefiniowany wyżej. Fakt ten znany jest jako twierdzenie spektralne dla samosprzężonych operatorów liniowych. (Można również łatwo podać dowód analogicznego twierdzenia dla operatorów normalnych). Zwrócić uwagę na zgodność tego wyniku z punktami (d) i (e) zadania.

18. Dla dowolnego przekształcenia liniowego A w skończenie wymiarowej przestrzeni wektorowej dowieść, że w danym układzie współrzędnych zawsze istnieje macierz do niego sprzężona.

Wskazówka: Zmodyfikować rozumowanie zawarte w twierdzeniu 4.7.

19. Obliczyć górną granicę na najniższą wartość własną kwantowego oscylatora harmonicznego, przyjmując jako funkcję próbną

$$\phi = c \exp(-\alpha x^2/2).$$

Zwrócić uwagę na fakt, że jest to dokładnie wynik otrzymany w § 3.10.

20. W tekście rozdziału obliczyliśmy poprawkę pierwszego rzędu do funkcji własnych operatora liniowego o niezdegenerowanym widmie. Korzystając z tych samych metod, otrzymać poprawkę drugiego rzędu. Można założyć, że poprawka drugiego rzędu jest ortogonalna do wyjściowego stanu rzędu zerowego.

21. Przypuśćmy, że hamiltonian oscylatora harmonicznego

$$A_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2, \quad [x, p] = i\hbar$$

został zaburzony małym wyrazem $A_1 = \varepsilon x$. Znaleźć poprawki pierwszego i drugiego rzędu do wartości własnych A_0 wywołane istnieniem A_1 . Ponieważ problem ten da się rozwiązać ściśle, odpowiedź można sprawdzić.

22. Obliczyć kilka pierwszych poprawek w rachunku zaburzeń do najniższej wartości własnej i odpowiadającego jej wektora własnego dla sprzężonego oscylatora harmonicznego omówionego w § 4.12.

23. W oparciu o rachunek zaburzeń z degeneracją znaleźć poprawki do wartości własnych i wektorów własnych sprzężonego oscylatora harmonicznego, odpowiadających niezaburzonym wartościom własnym $\lambda^{(0)} = 3\hbar\omega_0$.

24. Zdefiniujemy operator P_n wzorem

$$P_n x = \sum_{i=1}^{\mu_n} x_{n,i}^{(0)}(x_{n,i}^{(0)}, x),$$

gdzie $i = 1, \dots, \mu_n$ jest stopniem degeneracji n -tej wartości własnej pewnego operatora A_0 , a $x_{n,i}^{(0)}$ są odpowiednimi wektorami własnymi. Niech εA_1 będzie zaburzeniem. Pokazać, że jeżeli zdefiniujemy

$$A'_0 \equiv A_0 + \varepsilon \sum_n P_n^\dagger A_1 P_n, \quad A'_1 \equiv A_1 - \sum_n P_n^\dagger A_1 P_n,$$

to można obliczyć wartości i wektory własne A'_0 przy pomocy wartości i wektorów własnych A_0 . Pokazać, że jeżeli degeneracja A_0 jest całkowicie usunięta w pierwszym rzędzie przez A_1 , to możemy do A'_1 zastosować zwykły rachunek zaburzeń bez degeneracji. Pokazać, że poprawki pierwszego rzędu do wektorów własnych A'_0 są wszystkie równe zero. Podać wszystkie nasuwające się ważne wnioski na temat względnej wielkości wyrazów dla kilku pierwszych rzędów rachunku zaburzeń.

25. Rozważmy czterowymiarową rzeczywistą przestrzeń wektorową o wektorach bazy $\{e_0, e_1, e_2, e_3\}$ i zdefiniujemy operację mnożenia wektorów bazy następująco:

$$\begin{aligned} e_0 e_i &= e_i e_0 = e_i & (i = 1, 2, 3), \\ e_0 e_0 &= e_0, \quad e_i e_i = -e_0 & (i = 1, 2, 3), \\ e_i e_j &= \sum_{k=1}^3 \varepsilon_{ijk} e_k & (i \neq j; \quad i, j = 1, 2, 3). \end{aligned}$$

Ze względu na to ostatnie równanie, piszemy zazwyczaj $e_1 = \mathbf{i}$, $e_2 = \mathbf{j}$ i $e_3 = \mathbf{k}$ i wówczas dowolny wektor w tej przestrzeni ma postać

$$q = q_0 e_0 + q_1 e_1 + q_2 e_2 + q_3 e_3 = q_0 e_0 + q_1 \mathbf{i} + q_2 \mathbf{j} + q_3 \mathbf{k} = q_0 e_0 + \mathbf{q}.$$

(a) Rozszerzyć definicję mnożenia wektorów na wszystkie wektory z tej przestrzeni, opierając się na liniowości. (Zgodnie z nomenklaturą wprowadzoną przez W. R. Hamiltona, elementy tej przestrzeni nazywamy *kwaternionami*). Niech $q = q_0 e_0 + \mathbf{q}$ i $p = p_0 e_0 + \mathbf{p}$ będą dwoma dowolnymi kwaternionami. Pokazać, że $pq = (p_0 q_0 - \mathbf{p} \cdot \mathbf{q})e_0 + (\mathbf{p}_0 \mathbf{q} + q_0 \mathbf{p} + \mathbf{p} \times \mathbf{q})$.

(b) Kiedy $pq = qp$?

- (c) Pokazać, że kwaternion jednostkowy jest równy e_0 , to znaczy $e_0 q = q = q e_0$.
 (d) Dowieść, że jeżeli $pq = 0$, to albo $p = 0$, albo $q = 0$.
 (e) Pokazać, że $(pq)r = p(qr)$, czyli że zbiór kwaternionów tworzy tzw. *algebrę*.
 (f) Niech $q = q_0 e_0 + \mathbf{q}$ będzie kwaternionem; zdefiniujemy kwaternion *sprzężony* wzorem $q^* = q_0 e_0 - \mathbf{q}$. Pokazać w oparciu o tę definicję, że jeżeli $q \neq 0$, to istnieje jeden i tylko jeden kwaternion odwrotny q^{-1} , dla którego $qq^{-1} = e_0 = q^{-1}q$. Fakt ten dowodzi, że kwaterniony tworzą ciało nieprzemienne.

(g) Pokazać, że przykład ciała kwaternionów można otrzymać przyjmując

$$e_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad e_1 = -i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad e_2 = -i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad e_3 = -i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

gdzie $i = \sqrt{-1}$.

26. Kwantowomechaniczny hamiltonian cząstki naładowanej w polu magnetycznym jest równy $H = (\mathbf{p} - (e/c)\mathbf{A})^2/2m$, gdzie \mathbf{A} jest potencjałem wektorowym. Zakładamy, że pole magnetyczne jest stałe co do wielkości i kierunku.

(a) Pokazać, że potencjał wektorowy dla takiego pola jest $\mathbf{A} = \mathbf{B} \times \mathbf{r}/2$, gdzie \mathbf{B} jest stałym polem, tzn. pokazać, że $\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}$. Pokazać także, że $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$.

(b) Zakładając dla uproszczenia, że pole magnetyczne jest skierowane wzdłuż osi z i że pęd cząstki w kierunku z jest zerem, to znaczy $p_z = 0$, pokazać, że jeżeli przyjmiemy $p_x = (\hbar/i)d/dx$ i $p_y = (\hbar/i)d/dy$, to hamiltonian można zapisać w postaci

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 y^2 - \omega L_z,$$

gdzie $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$ i $\omega = eB/2mc$.

(c) Korzystając z faktu, że p_x, p_y, x i y są operatorami samosprzężonymi, zdefiniujemy operatory anihilacji a_x i a_y wzorem

$$a_x = (2m\hbar\omega)^{-1/2}(xm\omega + ip_x) \quad \text{i} \quad a_y = (2m\hbar\omega)^{-1/2}(ym\omega + ip_y),$$

co zapewnia związki $[a_x, a_x^\dagger] = [a_y, a_y^\dagger] = I$ i $[a_x, a_y] = [a_x, a_y^\dagger] = 0$.

Pokazać, że H przyjmuje postać

$$H = \hbar\omega [a_x^\dagger a_x + a_y^\dagger a_y + 1 + i(a_x^\dagger a_y - a_y^\dagger a_x)].$$

(d) Zdefiniujemy operator $b = (a_x + ia_y)/\sqrt{2}$. Pokazać, że

$$(i) \quad H = 2\hbar\omega(b^\dagger b + 1/2),$$

$$(ii) \quad [b, b^\dagger] = I,$$

$$(iii) \quad [b, H] = 2\hbar\omega b, \quad [b^\dagger, H] = -2\hbar\omega b^\dagger.$$

(e) Rozwiązać zagadnienie własne $H\phi = E\phi$. Zakładając, że istnieje najniższa wartość własna pokazać, że jest ona równa $\hbar\omega$ i że odpowiadający jej wektor własny (czy wektory własne) spełnia równanie $b\phi_0 = 0$. Pokazać, że pozostałe (unormowane) wektory własne i wartości własne są dane wzorami

$$\phi_n = (b^\dagger)^n \phi_0 / \sqrt{n!},$$

$$E_n = 2\hbar\omega(n + 1/2)$$

lub też, w wygodniejszym zapisie, $E_n = \hbar\omega_L(n+1/2)$, gdzie $\omega_L = 2\omega = eB\hbar/mc$ jest częstością Larmora.

(f) Niech u_0 będzie jednoznacznym rozwiązaniem równania $a_x u_0 = 0$ i niech v_0 będzie jednoznacznym rozwiązaniem równania $a_y v_0 = 0$. (Patrz § 3.10; u_0 i v_0 są po prostu znormalizowanymi funkcjami gaussowskimi odpowiednio zmiennej x i y). Wówczas oczywiście funkcja $\phi_0^{(0)} = u_0 v_0$ spełnia $b\phi_0^{(0)} = 0$, a więc łatwo znaleźliśmy rozwiązanie dla stanu podstawowego. Nie jest to jednak *jedynym* rozwiązaniem. Zdefiniujmy operator d wzorem $d = (a_x - ia_y)/\sqrt{2}$. Pokazać, że $[b, d] = 0$ i $[b, d^\dagger] = 0$, a stąd, że przy definicji $\phi_0^{(0)}$ jak wyżej $\phi_0^{(m)}$ określone wzorem

$$\phi_0^{(m)} = (d^\dagger)^m \phi_0^{(0)} / \sqrt{m!}$$

spełnia również związek $b\phi_0^{(m)} = 0$ dla każdego m i $(\phi_0^{(m)}, \phi_0^{(m')}) = \delta_{mm'}$. Zatem krotność degeneracji stanu podstawowego jest nieskończona i podobną własność ma każdy stan wzbudzony. W gruncie rzeczy

$$\phi_n^{(m)} = (b^\dagger)^n \phi_0^{(m)} / \sqrt{n!} = (d^\dagger)^m \phi_n^{(0)} / \sqrt{m!}.$$

27. W przestrzeni wektorowej V z pseudoiloczynem wewnętrznym zdefiniowanym wzorami (4.23), (4.24) i (4.25) wprowadzamy następujące definicje: Dla każdego operatora A definiujemy operator transponowany A^T wzorem $[x, Ay] = [A^T x, y]$ dla każdego x, y . O operatorze S mówimy, że jest symetryczny, jeżeli $S^T = S$. O jest ortogonalny, jeżeli $O^T O = I$. Dwa wektory $x \neq y$ nazwiemy *pseudoortogonalnymi*, jeżeli $[x, y] = 0$ i wreszcie zbiór *niezerowych* wektorów x_i będziemy nazywać zbiorem zupełnym pseudoortonormalnym, jeżeli x_i rozpinają przestrzeń i $[x_i, x_j] = \delta_{ij}$.

(a) Dowieść, że jeżeli $X = \{x_i\}$ jest zbiorem zupełnym pseudoortonormalnym, to dla każdego $x \in V$

$$(i) \quad x = \sum_{i=1}^n [x_i, x] x_i,$$

$$(ii) \quad [x, y] = \sum_{i=1}^n [x, x_i] [x_i, y].$$

(b) Pokazać, że macierz operatora symetrycznego w zupełnej pseudoortonormalnej bazie spełnia związek $S_{ij} = S_{ji}$. Pokazać, że elementy macierzowe operatora ortogonalnego O spełniają

$$\sum_{k=1}^n O_{ik} O_{kj} = \delta_{ij}.$$

(c) Pokazać, że jeżeli S jest operatorem symetrycznym i $Sx_1 = \lambda_1 x_1$ oraz $Sx_2 = \lambda_2 x_2$, to $[x_1, x_2] = 0$ dla $\lambda_1 \neq \lambda_2$. Pokazać, że jeżeli wszystkie wartości własne S są różne, to wektory własne S tworzą zbiór zupełny pseudoortonormalny.

Wskazówka: należy wykluczyć możliwość wektora własnego o normie zero.

(d) Podać przykład macierzy symetrycznej 2×2 , której wartości własne *nie* są rzeczywiste, a mimo to wektory własne są pseudoortogonalne.

(e) Pokazać, że każda wartość własna operatora ortogonalnego związana z wektorem własnym o *niezerowej* normie jest równa albo 1, albo -1 .

(f) Dowieść, że jeżeli O jest transformacją ortogonalną i $Ox_1 = \lambda_1 x_1$ oraz $Ox_2 = \lambda_2 x_2$, to $[x_1, x_2] = 0$, gdy $\lambda_1 \neq \lambda_2^{-1}$. Pokazać ponadto, że jeżeli x_1 lub x_2 ma niezerową normę, to $[x_1, x_2] = 0$, gdy $\lambda_1 \neq \lambda_2$.

LITERATURA POMOCNICZA

- Dawydow, A. S., *Mechanika kwantowa*, wydanie II, Warszawa 1969
- Halmos, P. R., *Finite-Dimensional Vector Space*, wydanie drugie. Princeton, N. J.: D. Van Nostrand, 1958
- Herstein, I. N., *Topics in Algebra*, Waltham, Mass.: Blaisdell, 1964
- Hoffman, K. i Kunze R., *Linear Algebra*, Englewood Cliffs, N. J.: Prentice Hall, 1961
- Lang, S., *Linear Algebra*, Reading, Mass.: Addison-Wesley, 1965
- Landau, L., Lifszyc E., *Mechanika teoretyczna*, Warszawa 1966
- Maurin, K., *Analiza część I*, Warszawa 1971

PRZESTRZEŃ HILBERTA — ZUPEŁNE ORTONORMALNE ZBIORY FUNKCJI

WSTĘP

Analiza funkcji jako wektorów w pewnej przestrzeni wektorowej łączy w sobie elementy wszystkich podstawowych gałęzi matematyki — algebry, geometrii i analizy. Takie właśnie ujednoczenie opisu stanowić będzie treść niniejszego rozdziału; pod względem znaczenia w fizyce współczesnej może z nim konkurować mało który formalizm matematyczny.

W rozdziale tym będziemy używać pojęć, terminologii i twierdzeń z rozdziałów 3 i 4. Konkretnie mówiąc, podamy uogólnienie na przypadek nieskończenie wymiarowy niektórych otrzymanych poprzednio wyników. Jednakże fakt, że wektory są tutaj funkcjami, oznacza istnienie dodatkowych możliwości, powstających głównie przy próbie przedstawienia funkcji w postaci kombinacji liniowej danego zbioru funkcji, tzn. przy rozwinięciu na szereg. Stają się wówczas ważne wszystkie charakterystyczne dla analizy problemy, takie jak np. problem zbieżności.

W szczególności wszystkie popularne w fizyce tzw. „funkcje specjalne”, jak funkcje kuliste, wielomiany Legendre’a, Hermite’a czy Laguerre’a, wygodnie jest analizować w formalizmie przestrzeni Hilberta. Zajmując się różnymi funkcjami specjalnymi będziemy badać równania różniczkowe, których rozwiązania te funkcje stanowią. Cały aparat matematyczny nie będzie jednak bazował na równaniach różniczkowych. Formalizm przestrzeni Hilberta jest bardziej zrozumiały i przedstawia w sposób jednolity to, co bez niego stanowiłoby jedynie nieuporządkowany zbiór szczególnych przypadków i dziwnych własności.

Dyskusja tych funkcji podzielona będzie na trzy etapy. W pierwszym wprowadzimy podstawowe pojęcia z przestrzeni Hilberta i to w sposób dość abstrakcyjny; o funkcjach specjalnych pojawiają się tam tylko wzmianki. Następnie rozważymy jedną po drugiej funkcje specjalne indywidualnie, nie zważając na ich wspólne pochodzenie czy zbliżone cechy. Na koniec powrócimy do sformułowania abstrakcyjnego i usystematyzujemy własności tych funkcji przy pomocy jednej, łatwo zrozumiałej klasyfikacji.

Przestrzeń Hilberta stanowi matematyczną bazę fizyki kwantowej. Obserwable fizyczne są reprezentowane jako operatory, a stany fizyczne jako wektory (funkcje) w przestrzeni Hilberta. Najważniejszą własność funkcji opisujących możliwe stany układu fizycznego stanowi fakt, że tworzą one zbiór *zupełny*. Oparta jest na niej cała teoria kwantowa. Nic więc dziwnego, że większość paragrafów z tego rozdziału będzie w taki czy inny sposób związana z zupełnością układów funkcji.

Na końcu rozdziału podamy ponownie zestaw najważniejszych wyników teorii przestrzeni Hilberta i naświetlimy ich rolę w sformułowaniu mechaniki kwantowej.

5.1. PRZESTRZEŃ FUNKCYJNA I PRZESTRZEŃ HILBERTA

Przy badaniu skończenie wymiarowych przestrzeni wektorowych powoływaliśmy się kilkakrotnie na P_n , przestrzeń wielomianów stopnia $\leq n$. Wektory w tej przestrzeni stanowią szczególnie prostą klasę funkcji — są wielomianami.

Zdefiniujemy teraz inną przestrzeń wektorową o elementach będących funkcjami. Elementy tej przestrzeni są całkowalnymi z kwadratem* zespolonymi funkcjami zmiennej rzeczywistej x , określonymi na przedziale domkniętym $[a, b]**$. Pokażemy, że zbiór funkcji całkowalnych z kwadratem tworzy przestrzeń wektorową. Przestrzeń tę matematycy oznaczają symbolem L_2 ; my nazwiemy ją przestrzenią funkcyjną. Jak się dalej okaże, jest ona przestrzenią nieskończenie wymiarową.

Sama intuicja sugerowałaby, że przestrzeń funkcyjna jest dużo „większa” niż skończenie wymiarowa przestrzeń P_n i, w pewnym sensie, tak jest rzeczywiście. Przypuśćmy jednak, że funkcje stanowiące bazę w P_n — zbiór $\{x^m, m = 0, 1, \dots, n\}$ rozszerzymy na wszystkie możliwe potęgi x , przechodząc z n do nieskończoności. Twierdzenie Weierstrassa, najważniejszy rezultat tego rozdziału, dowodzi, że taki nieskończony zbiór funkcji ma w przestrzeni funkcyjnej większe znaczenie niżby się to mogło na pozór wydawać. Podamy dalej dokładny przegląd jego ważnych własności. Najpierw jednak powrócimy do definicji przestrzeni funkcyjnej.

Dodawanie wektorów f_1 i f_2 w przestrzeni funkcyjnej definiujemy w naturalny sposób wzorem:

$$(f_1 + f_2)(x) \equiv f_1(x) + f_2(x),$$

a mnożenie przez zespolony skalar α — wzorem

$$\alpha f \equiv \alpha f(x).$$

Jedyna trudność przy dowodzie, ta, że operacje te spełniają aksjomaty przestrzeni wektorowej, wiąże się z zamkniętością. Chcemy zbadać, czy sumy i iloczyny przez skalar funkcji całkowalnych z kwadratem są również całkowalne z kwadratem. Odpowiedź brzmi: tak, a więc przestrzeń ta jest przestrzenią wektorową. Dowiedzimy, że przestrzeń jest zamknięta ze względu na dodawanie.

$$\begin{aligned} |f_1 + f_2|^2 &= |f_1|^2 + |f_2|^2 + f_1^* f_2 + f_1 f_2^* = |f_1|^2 + |f_2|^2 + 2\operatorname{Re}(f_1^* f_2) \leq \\ &\leq |f_1|^2 + |f_2|^2 + 2|f_1^* f_2| \leq |f_1|^2 + |f_2|^2 + 2|f_1| |f_2|. \end{aligned} \quad (5.1)$$

Równocześnie

$$0 \leq (|f_1| - |f_2|)^2 = |f_1|^2 + |f_2|^2 - 2|f_1| |f_2|,$$

* Mówimy, że funkcja jest *całkowalna z kwadratem* na przedziale $[a, b]$, jeżeli $\int_a^b |f(x)|^2 dx$ istnieje i jest skończona.

** *Przedział domknięty* oznaczany symbolem $[a, b]$, jest zbiorem wszystkich punktów $\{x\}$ takich, że $a \leq x \leq b$. *Przedział otwarty* (a, b) jest zbiorem wszystkich punktów $\{x\}$ takich, że $a < x < b$. *Przedział domknięty* jest zawsze skończony; jeżeli przynajmniej jeden z końców przedziału, a lub b , znajduje się w nieskończoności, to przedział jest otwarty na tym końcu. W dalszym ciągu rozdziału, przechodząc do przedziałów nieskończonych, zwrócimy czytelnikowi na to przejście specjalną uwagę.

a więc

$$|f_1|^2 + |f_2|^2 \geq 2|f_1||f_2|.$$

Korzystamy z tej ostatniej nierówności, zastępując wyrażenie $2|f_1||f_2|$ w (5.1) czymś większym i zachowując tym samym zwrot nierówności. Zatem nierówność

$$|f_1 + f_2|^2 \leq 2|f_1|^2 + 2|f_2|^2 \quad (5.2)$$

jest słuszna w każdym punkcie przedziału $[a, b]$. Po scałkowaniu stronami widzimy, że jeżeli składniki są całkowalne z kwadratem, to tę samą własność ma ich suma.

Wprowadzimy teraz w przestrzeni funkcyjnej iloczyn wewnętrzny.

Definicja 5.1. Iloczyn wewnętrzny dwóch funkcji f_1 i f_2 należących do przestrzeni funkcyjnej zdefiniowany jest wzorem

$$(f_1, f_2) \equiv \int_a^b f_1^*(x) f_2(x) dx. \quad (5.3)$$

Zauważmy, że z całkowalności z kwadratem wynika, że $(f, f) \equiv \|f\|^2 = \int_a^b |f|^2 dx < \infty$.

Wielkość $\|f\|$ nazywa się normą f . Ponadto dla każdej pary funkcji całkowalnych z kwadratem określony jest ich iloczyn wewnętrzny, bowiem z nierówności

$$|f_1^* f_2| = |f_1| |f_2| \leq \frac{1}{2} (|f_1|^2 + |f_2|^2),$$

wynika

$$\int_a^b |f_1^* f_2| dx \leq \frac{1}{2} (\|f_1\|^2 + \|f_2\|^2) < \infty,$$

a z istnienia całki z bezwzględnej wartości funkcji wynika istnienie całki z samej funkcji.

Sprawdzenie, że (f_1, f_2) zdefiniowane równaniem (5.3) posiada wszystkie cechy iloczynu wewnętrznego, przebiega gładko aż do momentu, gdy dochodzimy do dodatniej określoności. Oczywiście

$$(f, f) \equiv \|f\|^2 = \int_a^b |f|^2 dx \geq 0.$$

Ale czy $(f, f) = 0$ implikuje $f(x) = 0$ dla każdego $x \in [a, b]$? Nie całkiem, bowiem funkcja $f(x)$ może przyjmować wartości różne od zera w dowolnej skończonej ilości punktów i całka tego nie „zauważa”, czyli nie ma żadnego wkładu do wartości całki, mimo że funkcja podcałkowa nie jest równa tożsamościowo zeru na całym przedziale $[a, b]$.

Dyskusję tego typu przypadków ułatwia wprowadzenie nieco ogólniejszego pojęcia całkowania. Całka Riemanna ma szereg wad; rozważmy jako przykład krańcowy dwuczynną funkcję $f(x)$ równą 1 dla każdej liczby wymiernej, a 0 dla każdej liczby niewymiernej w przedziale $[0, 1]$. Ponieważ wymiernych liczb jest „niewiele”, zbiór ich jest przeliczalny, podejrzewamy, że całka z takiej funkcji jest równa zeru. Dzieliąc jednak przedział $[0, 1]$ na drobne części Δx_i i tworząc w zwykły sposób górną i dolną sumę Riemanna

$$\bar{\int} f(x) dx = \sum_i \Delta x_i \max[f(x)], \quad x_i \leq x \leq x_i + \Delta x_i,$$

$$\underline{\int} f(x) dx = \sum_i \Delta x_i \min[f(x)], \quad x_i \leq x \leq x_i + \Delta x_i,$$

widzimy, że bez względu na wielkość podprzedziałów Δx_i , wartość maksymalna $f(x)$ jest w nim zawsze 1, a minimalna 0. Stąd

$$\int_0^1 f(x) dx = 1 \quad \text{i} \quad \int_0^1 f(x) dx = 0,$$

a więc całka Riemanna nie istnieje.

W teorii całki Lebesgue'a, całka ta istnieje i jest równa zero. Mówimy, że $f(x) = 0$ wszędzie z wyjątkiem zbioru *miary zero*, lub też $f(x) = 0$ *prawie wszędzie*. Intuicyjny sens tego zdania jest prosty. Jeżeli mamy przeliczalną liczbę punktów na osi rzeczywistej oraz pasek papieru o długości ε , to możemy na każdy punkt nakleić maleńki kawałek tego paska, dzieląc go na przeliczalną liczbę kawałków o szerokości $\varepsilon/2^n$. Ponieważ $\sum_{n=1}^{\infty} \varepsilon/2^n = \varepsilon$,

w całym procesie korzystamy jedynie z naszego początkowego paska. Ale skoro jego początkowa wielkość może być dowolnie mała, zbiór punktów, dla których $f(x) \neq 0$, jest zaniedbywalny w porównaniu ze zbiorem, na którym funkcja jest zerem, mimo że każda liczba rzeczywista leży dowolnie blisko pewnej liczby wymiernej. Tak więc liczby wymierne stanowią na osi rzeczywistej zbiór miary zero.

Nie będziemy poświęcać więcej miejsca pojęciu całki Lebesgue'a, ponieważ wszystkie funkcje pojawiające się w naszej książce są całkowne w sensie Riemanna. Np. całka Riemanna istnieje zawsze dla klasy funkcji odcinkami ciągłych określonych na przedziałach domkniętych. W każdym razie, jeżeli całka Riemanna istnieje, to jest równa całce Lebesgue'a.

Podsumowując powiemy, że jeżeli f jest funkcją w przestrzeni funkcyjnej i $(f, f) = 0$, to $f(x)$ nie musi być tożsamościowo zerem dla każdego x ; ale może się różnić od zera co najwyżej na zbiorze miary zero. Mówimy, że z równości $(f, f) = 0$ wynika, że $f(x) = 0$ prawie wszędzie. Każdą funkcję równą zeru prawie wszędzie będziemy nazywać funkcją zerową. Przy tak rozszerzonym pojęciu funkcji zerowej, aksjomat 3 dla iloczynu wewnętrznego jest spełniony, a więc definicja 5.1 iloczynu wewnętrznego jest poprawna.

Mamy zatem zespolony iloczyn wewnętrzny w przestrzeni funkcyjnej, która sama jest zespoloną przestrzenią wektorową całkownych z kwadratem zespolonych funkcji zmiennej rzeczywistej należącej do przedziału domkniętego $[a, b]$.

Aby znaleźć zastosowanie w fizyce, przestrzeń z iloczynem wewnętrznym musi być również zupełna. Przestrzeń zupełna jest to taka przestrzeń, w której nie istnieje ciąg Cauchy'ego elementów przestrzeni zbieżny do granicy nie należącej do przestrzeni*. Elementarnym przykładem przestrzeni niezupełnej jest zbiór liczb wymiernych. Ciąg sum częściowych $S_n = \sum_{n=0}^N 1/n!$ jest ciągiem liczb wymiernych, ale zbieżnym do niewymiernej liczby e . Natomiast podstawowe twierdzenie analizy mówi, że zbiór liczb rzeczywistych

* Ciągiem Cauchy'ego nazywamy ciąg $\{S_n\}$ obdarzony taką własnością, że dla każdej liczby $\varepsilon > 0$ istnieje wskaźnik $N(\varepsilon)$ taki, że jeżeli tylko m i n są większe niż $N(\varepsilon)$, to

$$\|S_n - S_m\| < \varepsilon.$$

Jeżeli rozważany ciąg jest ciągiem liczbowym, to normę interpretuje się jako wartość bezwzględną. Jeżeli natomiast, tak jak w naszym przypadku, ciąg jest ciągiem funkcji, to norma dana jest wzorem

$$\|f\| = \left[\int_a^b |f|^2 dx \right]^{1/2}.$$

jest zupełny; biorąc granice ciągów Cauchy'ego złożonych z liczb rzeczywistych, nie można wyjść poza ten zbiór.

Podobnie chcielibyśmy znaleźć klasę funkcji o tej własności, że nie istnieje ciąg Cauchy-ego funkcji należących do tej klasy zbieżny do funkcji do niej nie należącej. Taka klasa funkcji jest *zupełna*. Ten z pewnością najbardziej podstawowy problem analizy został rozwiązany przez twierdzenie Riesz–Fischera mówiące, że przestrzeń funkcji całkowalnych z kwadratem, tzn. funkcji o skończonej normie, jest zupełna. Dowód można znaleźć w dowolnym podręczniku analizy funkcjonalnej (np. Riesz i Nagy, Rudin). Twierdzenie można sformułować następująco:

Twierdzenie Riesz–Fischera. Niech funkcje $f_1(x), f_2(x), \dots$ będą elementami przestrzeni funkcyjnej. Jeżeli

$$\lim_{n, m \rightarrow \infty} \|f_n - f_m\|^2 \equiv \lim_{n, m \rightarrow \infty} \int_a^b |f_n(x) - f_m(x)|^2 dx = 0,$$

to istnieje całkowalna z kwadratem (w sensie Lebesgue'a) funkcja $f(x)$, do której ciąg $f_n(x)$ jest zbieżny „w sensie wartości średniej”, tzn. istnieje funkcja f taka, że

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b |f(x) - f_n(x)|^2 dx = 0.$$

Dokładniej omówimy zbieżność w sensie wartości średniej w następnym paragrafie. Trzeba podkreślić, że twierdzenie to nie jest prawdziwe, jeżeli używana całka nie jest całką Lebesgue'a.

Tak więc zdefiniowana przez nas przestrzeń funkcyjna jest zupełna. Od tego momentu będziemy tę zupełną przestrzeń z iloczynem wewnętrznym nazywać *przestrzenią Hilberta*, choć przestrzeń funkcyjna jest tylko szczególnym przypadkiem przestrzeni Hilberta.

Pojęcia ortogonalności, normalizacji i ortonormalnych zbiorów funkcji są zdefiniowane dokładnie tak jak dla wektorów. I tak np. zbiór funkcji $\{f_i\}$ nazywamy *ortonormalnym*, jeżeli

$$(f_i, f_j) \equiv \int_a^b f_i^*(x) f_j(x) dx = \delta_{ij}.$$

Przykład. Funkcje Fouriera. Niech $f_n(x) = e^{inx}/\sqrt{2\pi}$, gdzie $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Zbiór $\{f_n\}$ jest ortonormalny na przedziale $[-\pi, \pi]$.

Dowód.

$$(f_m, f_n) = \int_{-\pi}^{\pi} f_m^* f_n dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} e^{i(m-n)x} dx = \left[\frac{1}{2\pi(m-n)i} e^{i(m-n)x} \right]_{-\pi}^{\pi} = 0 \quad \text{dla } m \neq n;$$

$$(f_n, f_n) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} 1 dx = 1 \quad \text{dla } m = n.$$

Zatem

$$(f_n, f_m) = \delta_{nm}.$$

Często używamy następującego uogólnienia pojęcia ortonormalności:

Definicja 5.2. Zbiór funkcji $\{f_n\}$ jest ortonormalny z nieujemną wagą $w(x)$ na przedziale $[a, b]$, jeżeli

$$(f_n, f_m) \equiv \int_a^b f_n^*(x) f_m(x) w(x) dx = \delta_{nm}.$$

Będziemy niemal wyłącznie zajmować się ortonormalnymi zbiorami funkcji, ponieważ, tak jak w skończone wymiarowych przestrzeniach wektorowych, upraszczają one bardzo obliczenia.

5.2. ZUPEŁNE ORTONORMALNE ZBIORY FUNKCJI

W teorii skończone wymiarowych przestrzeni wektorowych poznaliśmy sporo równoważnych sposobów charakteryzacji zupełnego zbioru wektorów bazy (twierdzenie 4.3). Analogiczny problem w przestrzeni Hilberta polega na przedstawieniu danej funkcji w postaci kombinacji liniowej funkcji z pewnego określonego zbioru czyli, mówiąc inaczej, na rozwinięciu na szereg o wyrazach będących funkcjami z tego zbioru. Prototypem wszystkich takich rozwinięć na szeregi jest szereg Fouriera. Formalizm nasz będzie jednak bardziej ogólny, jako że musi obejmować wiele spośród funkcji występujących w fizyce; szeregi Fouriera pojawiają się w nim jako przypadek szczególny.

Pierwszy problem, jaki musimy rozstrzygnąć, to problem definicji *zupełności ortonormalnego zbioru funkcji* w przestrzeni Hilberta. (Zupełność zbioru funkcji nie pokrywa się ze wspomnianą niedawno zupełnością *przestrzeni*, choć jak zobaczymy, są one blisko ze sobą związane). Moglibyśmy powiedzieć, że ortonormalny zbiór funkcji $\{f_i(x)\}$ jest zupełny, jeżeli każda funkcja $f(x)$ w przestrzeni Hilberta da się wyrazić jako kombinacja liniowa $f_i(x)$:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i f_i(x),$$

przy czym szereg jest zbieżny w każdym punkcie x . Miałoby to sens zbliżony do pojęcia zupełności zbioru wektorów bazy w przestrzeniach skończone wymiarowych. Takie jednak kryterium zbieżności okazuje się w wielu przypadkach zbyt silne. Jak zobaczymy, przy takim kryterium nie istniałby żaden zupełny ortonormalny zbiór funkcji w przestrzeni Hilberta. Toteż, zamiast żądać zbieżności w punkcie, osłabimy kryterium zbieżności zapewniając sobie w ten sposób istnienie zupełnego zbioru funkcji.

Odpowiednie osłabienie kryterium zbieżności punktowej sugerowane jest przez pewną trudność, na jaką natrafiliśmy przy badaniu dodatniej określoności iloczynu wewnętrznego. Stwierdziliśmy tam, że

$$(f, f) = \int_a^b |f|^2 dx = 0$$

wymaga, nie żeby $f(x)$ zniknęło w każdym punkcie $x \in [a, b]$, a jedynie prawie wszędzie w $[a, b]$, czyli wszędzie poza zbiorem miary zero. Podobnie powiemy, że $\sum_i c_i f_i(x)$ jest zbieżna „w sensie wartości średniej” do $f(x)$, jeżeli

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b \left| f(x) - \sum_{i=1}^n c_i f_i(x) \right|^2 dx = 0,$$

co również może być spełnione, gdy szereg różni się od $f(x)$ na zbiorze miary zero.

Dla dalszego rozwijania pojęć zupełności i ortonormalności zbioru funkcji musimy zdefiniować trzy różne rodzaje zbieżności:

1. Zbieżność punktowa;
2. Zbieżność jednostajna;
3. Zbieżność w sensie wartości średniej.

Definicja 5.3. Ciąg funkcji $h_n(x)$ jest zbieżny punktowo do $h(x)$ na przedziale $[a, b]$, jeżeli dla każdego x w $[a, b]$ i każdego $\varepsilon > 0$ istnieje taka liczba całkowita $N(x, \varepsilon)$, że dla $n > N$

$$|h(x) - h_n(x)| < \varepsilon.$$

Funkcje $h_n(x)$ mogą być same sumami częściowymi pewnego szeregu, to znaczy

$$h_n(x) = \sum_{i=1}^n k_i(x).$$

Definicję zbieżności punktowej i dalszych typów zbieżności można sformułować w sposób równoważny przy pomocy nieskończonego szeregu $\sum_{i=1}^{\infty} k_i(x)$ będącego granicą ciągu sum częściowych $h_n(x)$. Mówimy, że szereg ten jest *zbieżny punktowo* do $h(x)$ w $[a, b]$, jeżeli dla każdego x w $[a, b]$ i każdego $\varepsilon > 0$ istnieje liczba całkowita $N(x, \varepsilon)$ taka, że dla $n > N$

$$|h(x) - h_n(x)| = \left| h(x) - \sum_{i=1}^n k_i(x) \right| < \varepsilon.$$

Jeżeli istnieje takie N , które spełnia powyższe warunki dla każdego x w $[a, b]$, to mówimy o *zbieżności jednostajnej*. Formalna definicja brzmi:

Definicja 5.4. Ciąg funkcji $h_n(x)$ jest zbieżny *jednostajnie* do $h(x)$ na $[a, b]$, jeżeli dla każdego $\varepsilon > 0$ istnieje liczba całkowita $N(\varepsilon)$ *niezależna od x* i taka, że dla $n > N$, $|h(x) - h_n(x)| < \varepsilon$ dla każdego x w $[a, b]$. Oczywiście z jednostajnej zbieżności wynika punktowa.

Zauważmy, że w tej definicji mówi się *explicito* o granicy $h(x)$ ciągu funkcyjnego $h_n(x)$. *Kryterium Cauchy'ego* jednostajnej zbieżności daje nam alternatywną możliwość definicji, w której niepotrzebna jest znajomość granicy funkcji. Dowód kryterium Cauchy'ego można znaleźć w podręcznikach analizy; podamy tu tylko jego sformułowanie.

Twierdzenie 5.1. Ciąg funkcji $h_n(x)$ jest zbieżny jednostajnie na przedziale $[a, b]$, jeżeli dla każdego $\varepsilon > 0$ istnieje takie $N(\varepsilon)$, że dla każdego $r > N$, $s > N$ i x należącego do $[a, b]$ zachodzi $|h_r(x) - h_s(x)| < \varepsilon$.

Po wyrażeniu tego przez sumy częściowe, $h_n(x) \equiv \sum_{i=1}^n k_i(x)$, dostajemy

$$|h_r(x) - h_s(x)| = \left| \sum_{i=1}^r k_i - \sum_{i=1}^s k_i \right| = \left| \sum_{i=r+1}^s k_i(x) \right| < \varepsilon.$$

Przy zbieżności jednostajnej lub punktowej zachodzi równość

$$h(x) = \lim_{n \rightarrow \infty} h_n(x) = \sum_{i=1}^{\infty} k_i(x).$$

Możemy teraz podać precyzyjne sformułowanie wspomnianej poprzednio słabszej zbieżności.

Definicja 5.5. Ciąg funkcji $h_n(x)$ jest zbieżny w sensie wartości średniej do $h(x)$ na przedziale $[a, b]$, jeżeli

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b |h(x) - h_n(x)|^2 dx = 0,$$

tzn. jeżeli dla każdego ε istnieje $N(\varepsilon)$ takie, że dla $n > N$,

$$\int_a^b |h(x) - h_n(x)|^2 dx < \varepsilon.$$

Szereg $\sum_{i=1}^{\infty} k_i(x)$ jest zbieżny do $h(x)$ w sensie wartości średniej, jeżeli

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b \left| h(x) - \sum_{i=1}^n k_i(x) \right|^2 dx = 0.$$

Łatwo zauważyć, że ze zbieżności jednostajnej wynika zbieżność w sensie wartości średniej. Jeżeli bowiem zbieżność jest jednostajna, to dla każdego ε istnieje takie N , że dla $n > N$, $|h - h_n| < \varepsilon$ dla każdego x w $[a, b]$. Zatem

$$\int_a^b |h - h_n|^2 dx < \int_a^b \varepsilon^2 dx = \varepsilon^2(b-a),$$

a więc całkę można uczynić dowolnie małą przez wybór dostatecznie małego ε . Odpowiada to twierdzeniu, że

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b |h - h_n|^2 dx = 0,$$

a więc ciąg jest zbieżny w sensie wartości średniej. Zauważmy jednak, że ze zbieżności punktowej nie wynika jeszcze zbieżność w sensie wartości średniej (zadanie 19).

Przy pomocy właśnie zbieżności w sensie wartości średniej definiujemy zupełność ortonormalnego zbioru funkcji.

Definicja 5.6. Niech $g(x)$ będzie dowolną funkcją w przestrzeni Hilberta (tzn. dowolną funkcją całkowalną z kwadratem) i niech $\{f_i(x)\}$ będzie zbiorem ortonormalnym funkcji w przestrzeni Hilberta. Jeżeli istnieją współczynniki $\{a_i\}$ takie, że ciąg sum częściowych $g_n(x) \equiv \sum_{i=1}^n a_i f_i(x)$ jest zbieżny w sensie wartości średniej do $g(x)$, to zbiór funkcji $\{f_i\}$ jest *zbiorem ortonormalnym zupełnym*. W równoważnym sformułowaniu, jeżeli błąd średni kwadratowy można uczynić dowolnie małym,

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b |g - g_n|^2 dx = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b \left| g - \sum_{i=1}^n a_i f_i \right|^2 dx = 0,$$

to zbiór $\{f_i\}$ jest *zupełnym ortonormalnym zbiorem funkcji*. Warto zauważyć, że współczynniki $\{a_i\}$ są niezależne od n . Jeśli więc n rośnie i dodajemy coraz więcej wyrazów do sumy częściowej aproksymującej g , poprzednie współczynniki nie ulegają zmianie. Możemy powiedzieć, że po rozciągnięciu sumy do nieskończoności *szereg*

$$\sum_{i=1}^{\infty} a_i f_i$$

stanowi pełne przybliżenie dowolnej funkcji w sensie wartości średniej. Będziemy to zapisywać symbolem

$$g(x) \doteq \sum_{i=1}^{\infty} a_i f_i(x).$$

Kropka nad znakiem równości służy do odróżnienia zbieżności w sensie wartości średniej od zbieżności punktowej.

Ponieważ zbieżność w sensie wartości średniej nie implikuje zbieżności punktowej czy jednostajnej, trzeba pamiętać, że z zupełności ortonormalnego zbioru funkcji $\{f_i\}$ wyrażonej związkami

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b \left| f - \sum_{i=1}^n a_i f_i \right|^2 dx = 0$$

lub, symbolicznie

$$f(x) \doteq \sum_{i=1}^{\infty} a_i f_i(x),$$

nie wynika, że

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} a_i f_i(x). \quad (5.4)$$

Możemy *przyprowadzić* funkcję $f(x)$ do jej rozwinięcia na szereg, o ile szereg ten jest zbieżny punktowo lub jednostajnie do $f(x)$.

Niech $f(x)$ będzie dowolną funkcją w przestrzeni Hilberta i założmy na razie, że mamy ortonormalny zbiór funkcji $\{f_i(x)\}$ taki, że szereg $\sum_{i=1}^{\infty} c_i f_i(x)$ jest zbieżny jednostajnie do $f(x)$:

$$f(x) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i f_i(x).$$

Współczynniki c_i nazywamy *uogólnionymi współczynnikami Fouriera lub współczynnikami rozwinięcia*. Wyrażają się one prostym wzorem dzięki ortonormalności zbioru $\{f_i\}$:

$$(f_n, f) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i (f_n, f_i) = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \delta_{ni} = c_n. \quad (5.5)$$

Ponieważ zbieżność jest jednostajna, wynika z niej również zbieżność w sensie wartości średniej. Zatem

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b \left| f - \sum_{i=1}^n c_i f_i \right|^2 dx = 0$$

[gdzie c_i są dane równaniem (5.5)] i w rezultacie zbiór funkcji $\{f_i\}$ jest zupełny.

Rozważmy teraz nieujemną wielkość

$$M_n = \int_a^b \left| f(x) - \sum_{i=1}^n a_i f_i(x) \right|^2 dx \geq 0, \quad (5.6)$$

gdzie $\{f_i\}$ jest zbiorem ortonormalnym, a f dowolną funkcją z przestrzeni Hilberta. Chcielibyśmy wiedzieć: Jakie wartości współczynników a_i odpowiadają minimum M_n ? Lub

też, w języku fizyków: Jakie wartości a_i dadzą najlepszy fit (dopasowanie) metodą najmniejszych kwadratów do dowolnej funkcji $f(x)$? Dla uzyskania odpowiedzi rozwijamy (5.6)

$$\begin{aligned} M_n &= \int_a^b \left(f^*f - \sum_{i=1}^n a_i f^*f_i - \sum_{i=1}^n a_i^* f f_i^* + \sum_{i,j=1}^n a_i^* a_j f_i^* f_j \right) dx = \\ &= (f, f) - \sum_{i=1}^n a_i c_i^* - \sum_{i=1}^n a_i^* c_i + \sum_{i,j=1}^n a_i^* a_j \delta_{ij}, \end{aligned}$$

gdzie $c_i \equiv (f_i, f)$. Dodając i odejmując $\sum_{i=1}^n |c_i|^2$, dostajemy

$$M_n = (f, f) + \sum_{i=1}^n |a_i - c_i|^2 - \sum_{i=1}^n |c_i|^2 \geq 0.$$

Jest sprawą oczywistą, że zminimalizowanie M_n odpowiada wyborowi $a_i = c_i$. Mamy wówczas

$$M_n = \int_a^b \left| f(x) - \sum_{i=1}^n c_i f_i(x) \right|^2 dx = (f, f) - \sum_{i=1}^n |c_i|^2 \geq 0, \quad (5.7)$$

co można przepisać w postaci

$$(f, f) \geq \sum_{i=1}^n |c_i|^2 = \sum_{i=1}^n |(f_i, f)|^2. \quad (5.8)$$

Oznaczając $S_n = \sum_{i=1}^n |c_i|^2$ widzimy, że ciąg $S_1, S_2, \dots, S_n, \dots$ jest monotonicznie rosnący i ograniczony z góry przez (f, f) . Zatem przy n dążącym do nieskończoności S_n jest zbieżne i

$$(f, f) \geq \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2, \quad (5.9)$$

czyli nieskończony szereg $\sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2$ jest zbieżny. Równanie (5.9) jest po prostu nierównością Bessela (por. twierdzenie 4.2) w przestrzeni nieskończenie wymiarowej.

Zbiór ortonormalny $\{f_i\}$ jest zupełny wtedy i tylko wtedy, gdy istnieje zbiór $\{a_i\}$ taki, że $\lim_{n \rightarrow \infty} M_n = 0$. Jeżeli zbiór $\{f_i\}$ jest zupełny, to $a_i = c_i$ i w nieostrej nierówności Bessela wybrany zostaje znak równości:

$$(f, f) = \sum_{i=1}^{\infty} |c_i|^2 = \sum_{i=1}^{\infty} |(f_i, f)|^2 \quad (5.10)$$

dla każdego f . Analogiczna sytuacja występowała w przypadku skończenie wymiarowym (patrz twierdzenie 4.3). Równanie (5.10) nazywa się *warunkiem zupełności*. Podobnie jak w przypadku skończenie wymiarowym można je wyrazić w formie równania Parsewala:

$$(f, g) = \sum_{i=1}^{\infty} (f, f_i) (f_i, g). \quad (5.11)$$

Dowód pozostawiamy czytelnikowi (zadanie 14).

Inna ważna własność zupełnego zbioru n wektorów polega na tym, że nie istnieje wektor niezerowy ortogonalny do każdego z wektorów z tego zbioru. Podobną własność ma zupełny ortonormalny zbiór funkcji. Fakt ten sformułujemy w postaci twierdzenia, które w przyszłości okaże się bardzo pożyteczne. Przedtem jednak wprowadźmy pomocniczo nową definicję.

Definicja 5.7. Zbiór funkcji ortonormalnych nazywamy *domkniętym*, jeżeli nie istnieje funkcja niezerowa ortogonalna do każdej funkcji z tego zbioru.

Twierdzenie 5.2. Zbiór funkcji ortonormalnych w przestrzeni Hilberta jest zupełny wtedy i tylko wtedy, gdy jest domknięty.

Dowód. Dowiedzimy najpierw, że z zupełności zbioru wynika jego domkniętość. Przypuśćmy, że istnieje niezerowa funkcja $f(x)$ (dla ułatwienia można założyć, że jest unormowana) taka, że

$$(f_i, f) \equiv c_i = \int_a^b f_i^*(x) f_i(x) dx = 0$$

dla każdego i . Wówczas

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_a^b \left| f - \sum_{i=1}^n c_i f_i \right|^2 dx = \int_a^b |f|^2 dx = 1 \neq 0$$

(bo f jest unormowana), a więc zbiór $\{f_i\}$ nie byłby zupełny. Zatem z zupełności ortonormalnego zbioru funkcji wynika, że nie istnieje funkcja ortogonalna do wszystkich elementów tego zbioru.

Podamy teraz dowód implikacji w przeciwnym kierunku: jeżeli zbiór ortonormalny jest domknięty, to jest zupełny. Gdyby nie był zupełny, to nie byłby spełniony związek (5.10), a więc istniałaby funkcja $f(x)$ taka, że

$$\|f\|^2 > \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2,$$

gdzie $c_n = (f_n, f)$. Ale ponieważ powyższy szereg jest zbieżny, ciąg $\{g_m(x)\}$ określony wzorem

$$g_m(x) = \sum_{n=1}^m c_n f_n(x)$$

byłby ciągiem Cauchy'ego w przestrzeni Hilberta i dzięki *zupełności przestrzeni* musiałby być zbieżny w sensie wartości średniej do pewnej granicy $g(x)$ należącej do tej przestrzeni i takiej, że $c_n = (f_n, g)$. Zatem $(f_n, g) = (f_n, f)$, czyli $(f_n, f - g) = 0$. Funkcja $f(x) - g(x)$ byłaby więc ortogonalna do $f_n(x)$ dla każdego n . Pokażemy teraz, że norma $f(x) - g(x)$ jest różna od zera, a więc zbiór $\{f_n(x)\}$ nie byłby domknięty, wbrew założeniu. Stąd zaś wynika już, że zbiór $\{f_n(x)\}$ jest zupełny i dowód twierdzenia będzie zakończony.

Korzystając z nierówności

$$\|x - y\| \geq \left| \|x\| - \|y\| \right|$$

(patrz zadanie 4.7b), dostajemy

$$\|f - g\| = \|f - g_m - (g - g_m)\| \geq \left| \|f - g_m\| - \|g - g_m\| \right|$$

dla każdego m . Wiemy jednak, że gdy $m \rightarrow \infty$, to $\|g - g_m\| \rightarrow 0$, podczas gdy z założenia

$$\|f - g_m\| = \left\| f - \sum_{n=1}^m c_n f_n \right\| = \|f\| - \sum_{n=1}^m |c_n|^2 > 0$$

dla każdego m . Zatem $\|f - g\| > 0$, co kończy dowód.

Twierdzenie to gra zasadniczą rolę przy badaniu zupełności różnych ortonormalnych zbiorów funkcji, którymi będziemy się zajmować w tym rozdziale. Warto zwrócić uwagę, że w najważniejszym momencie dowodu skorzystaliśmy z zupełności przestrzeni Hilberta.

Zakończymy ten paragraf rozważaniami na temat jednoznaczności przedstawień funkcji w postaci szeregów. Dowiedzimy najpierw, że funkcja w przestrzeni Hilberta jest jednoznacznie określona prawie wszędzie przez współczynniki rozwinięcia względem danego zupełnego ortonormalnego zbioru funkcji $\{f_i\}$. Przypuśćmy, że pewne dwie funkcje f i g mają te same współczynniki rozwinięcia, to znaczy

$$c_i = (f_i, f) = (f_i, g).$$

Wówczas $(f_i, f - g) = 0$, a więc na podstawie twierdzenia 5.2, $f - g = 0$, czyli $f = g$.

Rozważmy teraz zagadnienie odwrotne. Czy dana funkcja posiada jednoznaczny zbiór współczynników rozwinięcia? Załóżmy, że

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \left\| f - \sum_{i=1}^n c_i f_i \right\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \left\| f - \sum_{i=1}^n d_i f_i \right\| = 0,$$

ozn. załóżmy, że istnieją dwie sumy częściowe o różnych współczynnikach rozwinięcia, zbieżne w sensie wartości średniej do tej samej funkcji f . Jeżeli współczynniki rozwinięcia są wyznaczone przez funkcje jednoznacznie, to musiałyby zachodzić równość $c_i = d_i$, dla każdego i . Ażeby to pokazać, zauważmy, że

$$\left\| \sum_{i=1}^n c_i f_i - \sum_{i=1}^n d_i f_i \right\| = \left\| \sum_i c_i f_i - f + f - \sum_i d_i f_i \right\| \leq \left\| f - \sum_i c_i f_i \right\| + \left\| f - \sum_i d_i f_i \right\|,$$

co wynika z nierówności trójkąta (patrz zadanie 4.7c). Możemy teraz dla każdego ε wybrać n dostatecznie duże, aby te dwie normy były mniejsze niż $\varepsilon/2$. Wobec tego dla takiego n

$$\left\| \sum_i c_i f_i - \sum_i d_i f_i \right\| = \left\| \sum_i (c_i - d_i) f_i \right\| = \left[\sum_i (c_i - d_i)^2 \right]^{1/2} < \varepsilon.$$

Warunek ten może być spełniony tylko dla $c_i = d_i$. Zatem współczynniki rozwinięcia danej funkcji są określone jednoznacznie. Ponieważ zbiór $\{f_i\}$ jest zupełnym ortonormalnym zbiorem funkcji, z naszych poprzednich uwag wynika, że c_i i d_i są równe współczynnikom Fouriera, $c_i = d_i = (f_i, f)$.

5.3. FUNKCJA δ DIRACA

Wprowadzimy teraz w sposób nieco nieformalny pojęcie funkcji δ Diraca. Będzie ona grała bardzo istotną rolę w dalszej części tej książki, co jest po prostu wynikiem jej dużego znaczenia dla większości działów fizyki.

Pierwszą cechą funkcji δ , z której musimy sobie dobrze zdawać sprawę jest to, że nie jest ona bynajmniej funkcją. Funkcja jest odwzorowaniem przypisującym każdej liczbie

z określonego zbioru jakąś liczbę. Natomiast funkcja δ używana w fizyce jest symbolem oznaczającym dość skomplikowany, ale bardzo upraszczający obliczenia proces przejścia granicznego. Symbol ten nabiera sensu dopiero, gdy pojawia się pod znakiem całki i wówczas efekt jego działania jest następujący:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta(x) dx = f(0). \quad (5.12)$$

W szczególności, gdy $f(x) = 1$,

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (5.13)$$

Jeżeli punkt osobliwy położony jest w dowolnym punkcie x , to

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x') \delta(x' - x) dx' = f(x). \quad (5.14)$$

Poza tym wszędzie oprócz punktu osobliwego $x = 0$ zachodzi

$$\delta(x) = 0. \quad (5.15)$$

Tak więc $\delta(x)$ zachowuje się prawie wszędzie jak normalna funkcja. Znika we wszystkich punktach, w których argument się nie zeruje, a w tym jednym punkcie jest nieokreślona. Niemniej jednak, właśnie zachowanie jej w otoczeniu tego tylko punktu ma istotne znaczenie.

Wiadomo, że całka z dowolnej funkcji rzeczywistej znikającej wszędzie poza jednym punktem musi być równa zero, bez względu na wartość funkcji w punkcie osobliwym. Nie istnieje więc funkcja, która mogłaby spełniać jednocześnie (5.15) i (5.12) lub (5.13). Równania te należy interpretować jako symboliczny zapis następującego procesu.

Niech $\delta_\alpha(x)$ będzie zbiorem funkcji numerowanych ciąglem indeksem α , o własnościach

$$\begin{aligned} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \delta_\alpha(x) &= 0 \quad \text{dla każdego } x \neq 0, \\ \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta_\alpha(x) dx &= f(0). \end{aligned} \quad (5.16)$$

Podane poprzednio równania otrzymamy, jeżeli „ $\lim_{\alpha \rightarrow 0} \delta_\alpha(x)$ ” oznaczmy symbolem $\delta(x)$ i zamienimy porządek całkowania oraz przechodzenia do granicy (procedura taka nie zawsze jest poprawna). Równania definiujące funkcję δ należy interpretować tak, jakby zawierały proces przechodzenia do granicy opisany równaniami (5.16).

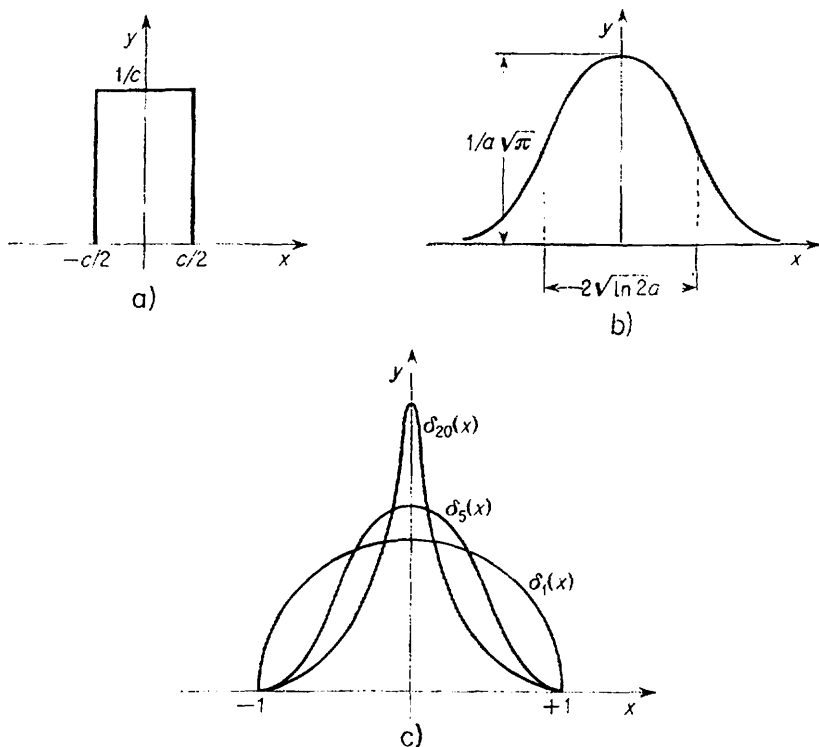
Rozważmy kilka przykładów zbiorów funkcji spełniających (5.16).

1. Najprostszy możliwy zbiór funkcji o poprawnym zachowaniu przy przejściu granicznym jest pokazany na rys. 5.1(a). Funkcja $\delta_c(x)$ jest zdefiniowana (dla $c > 0$) wzorem

$$\delta_c(x) = \begin{cases} \frac{1}{c} & \text{dla } |x| \leq \frac{c}{2}, \\ 0 & \text{dla } |x| > \frac{c}{2}. \end{cases} \quad (5.17)$$

Oczywiście $\lim_{c \rightarrow 0} \delta_c(x) = 0$ dla każdego $x \neq 0$. Również $\int_{-\infty}^{\infty} \delta_c(x) dx = 1$, niezależnie od wartości c . Funkcja $\delta_c(x)$ (a *jest* to rzeczywiście funkcja) jest zdefiniowana dla każdego $c \neq 0$, przy czym granica

$$\lim_{c \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \delta_c(x) dx \quad (5.18)$$



Rys. 5.1. Reprezentacja funkcji δ Diraca

jest określona i równa 1. Jednocześnie

$$\lim_{c \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta_c(x) dx = f(0), \quad (5.19)$$

co dla funkcji ciągłych $f(x)$ można formalnie pokazać następująco:

$$\lim_{c \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta_c(x) dx = \lim_{c \rightarrow 0} \int_{-c/2}^{c/2} f(x) \delta_c(x) dx = \lim_{c \rightarrow 0} \frac{1}{c} \int_{-c/2}^{c/2} f(x) dx.$$

Na mocy twierdzenia o wartości średniej dla całek

$$\int_{-c/2}^{c/2} f(x) dx = f(\xi c) \int_{-c/2}^{c/2} dx = cf(\xi c),$$

gdzie $-1/2 < \xi < 1/2$. Przechodząc z c do zera, dostajemy

$$\lim_{c \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta_c(x) dx = f(0).$$

2. Następnym przykładem może być rodzina funkcji reprezentujących rozkład Gaussa

$$\delta_a(x) \equiv \frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{-x^2/a^2}$$

(patrz rys. 5.1 b). Zauważmy, że

$$\lim_{a \rightarrow 0} \delta_a(x) = 0 \quad \text{dla każdego } x \neq 0,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta_a(x) dx = 1 \quad (\text{niezależnie od wartości } a), \text{ oraz}$$

$$\lim_{a \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta_a(x) dx = f(0).$$

Cały wkład do całki przy $a \rightarrow 0$ pochodzi z otoczenia punktu $x = 0$. Możemy zatem symbolicznie zapisać

$$\delta(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \delta_a(x) = \lim_{a \rightarrow 0} \frac{1}{a\sqrt{\pi}} e^{-x^2/a^2}. \quad (5.20)$$

3. Inną ważną reprezentacją funkcji δ jest

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \delta_\varepsilon(x) \equiv \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{x^2 + \varepsilon^2}, \quad (5.21)$$

co czytelnik może sprawdzić, opierając się na poprzednim przykładzie.

4. Ostatnia wreszcie reprezentacja funkcji δ jest nieco inna niż trzy poprzednie. Będzie ona grać ważną rolę w dowodzie twierdzenia Weierstrassa, najważniejszego twierdzenia w tym rozdziale. Można ją zdefiniować wzorem

$$\delta_n(x) = \begin{cases} c_n(1-x^2)^n & \text{dla } 0 \leq |x| \leq 1, \\ 0 & \text{dla } |x| > 1, \end{cases} \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (5.22)$$

gdzie stałe c_n dają się wyznaczyć z warunku

$$\int_{-1}^1 \delta_n(x) dx = 1. \quad (5.23)$$

Funkcje $\delta_n(x)$ tworzą ciąg, którego granicą jest funkcja δ (patrz rys. 5.1c). Pokażemy teraz, początkowo nieformalnie, a dalej już ściśle w dowodzie twierdzenia Weierstrassa, że

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-1}^1 f(x) \delta_n(x) dx = f(0), \quad (5.24)$$

czyli

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n(x) = \delta(x). \quad (5.25)$$

Zasadnicza różnica pomiędzy tą reprezentacją i poprzednimi polega na tym, że parametr n przyjmuje tylko wartości całkowite i rośnie do nieskończoności zamiast maleć w sposób ciągły do zera.

Wyznamy najpierw stałą normalizacyjną c_n . Z równania

$$1/c_n = \int_{-1}^1 (1-x^2)^n dx = 2 \int_0^1 (1-x^2)^n dx, \quad (5.26)$$

poprzez zamianę zmiennych $x = \sin \theta$, dostajemy

$$\frac{1}{c_n} = 2 \int_0^{\pi/2} \cos^{2n+1} \theta d\theta = \frac{2^{n+1} n!}{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n+1)}. \quad (5.27)$$

Z (5.27) wynika, że

$$c_n = (2n+1)! / 2^{2n+1} (n!)^2. \quad (5.28)$$

Ze wzoru na c_n nie widać jak stałe te zachowują się dla $n \rightarrow \infty$. Możemy zachowanie to oszacować, korzystając ze wzoru (5.26):

$$1/c_n = 2 \int_0^1 (1-x^2)^n dx \geq 2 \int_0^{1/\sqrt{n}} (1-x^2)^n dx, \quad (5.29)$$

ponieważ $1/\sqrt{n} \leq 1$ dla $n = 1, 2, \dots$, a funkcja podcałkowa jest dodatnia w całym przedziale $[0, 1]$. Pokażemy teraz, że dla każdego n i dla każdego x przedziału $[0, 1]$ funkcja podcałkowa spełnia nierówność

$$(1-x^2)^n \geq 1-nx^2.$$

Rozważmy funkcję $g(x) \equiv (1-x^2)^n - (1-nx^2)$. Ponieważ $g(0) = 0$ i

$$g'(x) = 2nx[1 - (1-x^2)^{n-1}] > 0 \quad \text{dla} \quad 0 < x \leq 1,$$

więc $g(x)$ musi monotonicznie rosnąć w przedziale $[0, 1]$. Zatem $g(x) \geq 0$, czyli $(1-x^2)^n \geq (1-nx^2)$ dla każdego x z przedziału $[0, 1]$. Przy użyciu tej nierówności w (5.29) dostajemy

$$1/c_n \geq 2 \int_0^{1/\sqrt{n}} (1-nx^2) dx = 4/3n^{1/2} > 1/n^{1/2}.$$

Stąd

$$c_n < n^{1/2}. \quad (5.30)$$

Podobny wynik można otrzymać w oparciu o wzór Stirlinga.

Gdy $n \rightarrow \infty$, wkład do całki $\int_{-1}^1 \delta_n(x) dx$ pochodzący z otoczenia zera wzrasta. Aby to pokazać, zauważmy, że dla $0 < \delta < 1$,

$$\int_{-1}^{-\delta} \delta_n(x) dx = \int_{\delta}^1 \delta_n(x) dx, \quad (5.31)$$

co wynika z parzystości $\delta_n(x)$. Ponadto

$$\int_{\delta}^1 \delta_n(x) dx < n^{1/2} (1-\delta^2)^n (1-\delta) < n^{1/2} (1-\delta^2)^n, \quad (5.32)$$

jako że $c_n < n^{1/2}$, a $(1-x^2)^n$ przyjmuje wartość maksymalną gdy $x = \delta$ i stąd $\int_1^{\delta} (1-x^2)^n dx$ jest ograniczona z górną przez pole prostokąta o wysokości $(1-\delta^2)^n$ i podstawie $(1-\delta)$, gdy $0 < \delta < 1$. Dobrze znać jest fakt, że spadek jakiegokolwiek liczby mniejszej od jedności,

podniesionej do potęgi n -tej, jest szybszy niż wzrost n w dowolnej potędze. W szczególności przy $n \rightarrow \infty$ zachowanie czynnika $(1 - \delta^2)^n$ dominuje nad $n^{1/2}$, a więc

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\delta}^1 \delta_n(x) dx = 0.$$

Ponieważ $\delta_n(x)$ jest funkcją ciągłą i nieujemną, więc wynika stąd, że $\lim_{n \rightarrow \infty} \delta_n(x) = 0$ dla $0 < x \leq 1$. A zważywszy, że przez wybór c_n (5.28) zapewniliśmy już, że $\int_{-1}^1 \delta_n(x) dx = 1$, dostajemy ostateczny wynik

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-1}^1 f(x) \delta_n(x) dx = f(0). \quad (5.33)$$

5.4. TWIERDZENIE WEIERSTRASSA — APROKSYMACJA WIELOMIANAMI

Słynne twierdzenie aproksymacyjne Weierstrassa mówi, że ze zbioru, którego elementami są potęgi x , można dla dowolnej funkcji ciągłej na skończonym przedziale domkniętym $[a, b]$ skonstruować ciąg wielomianów zbieżny *jednostajnie* do tej funkcji. Na tej podstawie można pokazać, że dla każdego przedziału $[a, b]$ istnieje zupełny ortonormalny zbiór wielomianów. Twierdzenie Weierstrassa jest punktem wyjścia przy dowodzeniu własności zupełności dla wielu funkcji używanych w fizyce, jak wielomiany Legendre'a, funkcje trygonometryczne (szeregi Fouriera), czy funkcje kuliste.

Twierdzenie Weierstrassa. Jeżeli funkcja $f(x)$ jest ciągła na przedziale domkniętym $[a, b]$, to istnieje ciąg wielomianów $P_n(x)$ taki, że

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P_n(x) = f(x),$$

przy czym zbieżność ta jest jednostajna na $[a, b]$.

Dowód. Nie zmniejszając ogólności rozważań, możemy założyć, że $f(x)$ jest określona na $[0, 1]$. Przypuśćmy bowiem, że $f(x)$ jest określona na $[a, b]$. Wówczas można badać funkcję h zdefiniowaną wzorem

$$h\left(\frac{x-a}{b-a}\right) \equiv f(x).$$

Oczywiście $f(a) = h(0)$, $f(b) = h(1)$ i każda wartość x z przedziału $[a, b]$ odpowiada pewnemu z z $[0, 1]$. Jeśli więc $h(z)$ można aproksymować wielomianami w zmiennej z , to zważywszy, że każdy wielomian w zmiennej $z = (x-a)/(b-a)$ jest jednocześnie wielomianem w zmiennej x , możemy łatwo przejść od wielomianu aproksymującego h do wielomianu aproksymującego f . Możemy dalej założyć, że $h(z)$ znika w $z = 0$ i $z = 1$, ponieważ w przeciwnym razie zamiast h moglibyśmy badać funkcję

$$g(z) = h(z) - h(0) - z[h(1) - h(0)]$$

dla z z przedziału $[0, 1]$. Oczywiście $g(0) = 0$ i $g(1) = 0$. Ponieważ $g(z)$ i $h(z)$ różnią się o wielomian, jeżeli możemy $g(z)$ aproksymować pewnym wielomianem, to $h(z)$ możemy aproksymować tym samym wielomianem plus wielomian $h(0) + [h(1) - h(0)]z$.

Zakładamy zatem, że funkcja wyjściowa $f(x)$ jest określona na $[0, 1]$ i znika w punktach $x = 0$ i $x = 1$. Poza tym odcinkiem możemy zdefiniować $f(x)$ dowolnie i przyjmiemy, że jest ona tam tożsamościowo równa zero.

Wprowadzamy teraz

$$P_n(x) = \int_{-1}^1 f(x+t) \delta_n(t) dt, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (5.34)$$

gdzie $\delta_n(t)$ jest ciągiem funkcji zdefiniowanych wzorem (5.22), o których twierdziliśmy, że reprezentują funkcję δ :

$$\delta_n(t) = \begin{cases} c_n(1-t^2)^n & \text{dla } 0 \leq |t| \leq 1, \\ 0 & \text{dla } |t| > 1. \end{cases}$$

Gdyby twierdzenie to było prawdziwe, to

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P_n(x) = f(x)$$

i dowód byłby zakończony. Wspominamy o tym, żeby uzasadnić potrzebę ścisłego dowodu, który teraz przytoczymy. Dowód ten pokaże także, że ciąg $\delta_n(t)$ przy $n \rightarrow \infty$ ma rzeczywiście własności charakterystyczne dla funkcji δ .

Zakładamy, że $f(x)$ znika na zewnątrz przedziału $[0, 1]$, a więc $f(x+t) \equiv 0$ dla $t \leq -x$ lub $t \geq 1-x$. Stąd (5.34) można przepisać w postaci

$$P_n(x) = \int_{-x}^{1-x} f(x+t) \delta_n(t) dt.$$

Przez prostą zamianę zmiennych ($t \rightarrow t-x$) dostajemy

$$P_n(x) = \int_0^1 f(t) \delta_n(t-x) dt = \int_0^1 f(t) c_n [1-(t-x)^2]^n dt.$$

Postać tej ostatniej całki dowodzi, że $P_n(x)$ jest wielomianem (stopnia $2n$) w zmiennej x . Współczynniki przy kolejnych potęgach x są określonymi całkami po t . Zatem $P_n(x)$ jest ciągiem wielomianów. Podamy dowód, że ciąg ten jest zbieżny jednostajnie do $f(x)$.

W analizie istnieje twierdzenie, że funkcja ciągła w przedziale domkniętym jest jednostajnie ciągła. Tym spośród czytelników, którzy nie znają dobrze powyższych pojęć, powinien nieco wyjaśnić sprawę następujący przykład. Funkcja $q(x) = x^{-1}$ jest ciągła na przedziale otwartym $(0, 1)$, ale nie jest tam jednostajnie ciągła, ponieważ

$$|q(x+\delta) - q(x)| = \frac{\delta}{x(x+\delta)}$$

i różnicy tej nie można jedynie przez odpowiedni dobór δ uczynić dowolnie małą dla każdego x . W rzeczywistości wybierając x dostatecznie bliskie zera — choć ciągle w przedziale $(0, 1)$ — można tę różnicę uczynić dowolnie dużą dla danego $\delta > 0$. Zatem nie istnieje $\delta > 0$ niezależnie od x , takie żeby $|q(x+\delta) - q(x)|$ było dowolnie małe, a więc ciągłość nie jest jednostajna.

Ponieważ $f(x)$ jest ciągła na przedziale domkniętym $[0, 1]$, jest tam również jednostajnie ciągła. Jak zobaczymy dalej, ciągłość jednostajna ma zasadnicze znaczenie dla naszego dowodu. Wiemy zatem, że dla każdego $\varepsilon > 0$ istnieje δ takie, że

$$|f(x+\delta) - f(x)| < \varepsilon$$

dla każdego x z $[0, 1]$.

Korzystając teraz z (5.34), badamy wielkość

$$|P_n(x) - f(x)| = \left| \int_{-1}^1 [f(x+t) - f(x)] \delta_n(t) dt \right| \leq \int_{-1}^1 |f(x+t) - f(x)| \delta_n(t) dt,$$

ponieważ $\delta_n(t) \geq 0$ dla każdego $t \in [-1, 1]$. Dzielimy teraz przedział całkowania na trzy części:

$$\int_{-1}^1 |f(x+t) - f(x)| \delta_n(t) dt = \int_{-1}^{-\delta} + \int_{-\delta}^{\delta} + \int_{\delta}^1.$$

Skoro $f(x)$ jest ciągła na przedziale domkniętym, to jest tam również ograniczona. Niech maksymalna wartość funkcji $|f(x)| = M$. Wówczas całki $\int_{-1}^{-\delta}$ i \int_{δ}^1 są ograniczone przez $2Mn^{1/2}(1 - \delta^2)^n$, co widać z następujących rozważań:

$$\begin{aligned} \int_{\delta}^1 |f(x+t) - f(x)| \delta_n(t) dt &\leq \int_{\delta}^1 |f(x+t)| \delta_n(t) dt + \\ &+ \int_{\delta}^1 |f(x)| \delta_n(t) dt \leq 2M \int_{\delta}^1 \delta_n(t) dt < 2Mn^{1/2}(1 - \delta^2)^n. \end{aligned}$$

Skorzystaliśmy tutaj z nierówności $|f| \leq M$ oraz ze wzorów (5.31) i (5.32).

Trzecią całkę, $\int_{-\delta}^{\delta}$, możemy oszacować w oparciu o jednostajną ciągłość $f(x)$, interpretując granice całkowania jako właśnie tę wartość δ , dla której $|t| < \delta \Rightarrow |f(x+t) - f(x)| < \varepsilon/2$. Dostajemy stąd

$$\int_{-\delta}^{\delta} |f(x+t) - f(x)| \delta_n(t) dt < \varepsilon/2 \int_{-\delta}^{\delta} \delta_n(t) dt < \varepsilon/2,$$

ponieważ $\int_{-\delta}^{\delta} \delta_n(t) dt < 1$.

W wyniku tych oszacowań otrzymujemy nierówność

$$|P_n(x) - f(x)| < 4Mn^{1/2}(1 - \delta^2)^n + \varepsilon/2.$$

Wielkość $n^{1/2}(1 - \delta^2)^n$ dla $0 < \delta < 1$ można dla dostatecznie dużego n uczynić dowolnie małą, w szczególności mniejszą niż $\varepsilon/2$. Istnieje zatem takie N , że dla $n > N$

$$|P_n(x) - f(x)| < \varepsilon.$$

Rozumowanie to jest słuszne dla dowolnie małego ε , a więc

$$\lim_{n \rightarrow \infty} |P_n(x) - f(x)| = 0.$$

Oznacza to, że ciąg wielomianów $P_n(x)$ jest jednostajnie zbieżny do funkcji $f(x)$ ciągłej na $[0, 1]$ i tym samym dowód nasz został zakończony. W rzeczywistości, jak pokazaliśmy uprzednio, stwierdzenie to jest słuszne dla dowolnej funkcji ciągłej na skończonym domkniętym przedziale $[a, b]$. c.b.d.o.

Tak więc twierdzenie Weierstrassa mówi nam, że istnieje zbiór współczynników a_{nm} ($n = 0, \dots, \infty$; $m = 0, \dots, n$) o tej własności, że $\sum_{m=0}^{m=n} a_{nm} x^m$ jest jednostajnie zbieżne do $f(x)$

dla $n \rightarrow \infty$. Nie gwarantuje ono istnienia jednostajnie zbieżnego szeregu potęgowego o współczynnikach a_m ($m = 0, \dots, \infty$) takich, że $\sum_{m=0}^{m=n} a_m x^m$ jest jednostajnie zbieżne do $f(x)$ dla $n \rightarrow \infty$. Przyczyną jest fakt, że współczynniki Weierstrassa a_{nm} nie są niezależne od n dla ustalonego m . W trakcie przechodzenia do wielomianów coraz wyższego stopnia aproksymacja staje się coraz lepsza, ale poprzednie współczynniki ulegają zmianie. Twierdzenie byłoby fałszywe, gdyby mówiło o istnieniu jednostajnie zbieżnego szeregu potęgowego dla dowolnej funkcji. Na przykład nie istnieje szereg *potęgowy* zbieżny jednostajnie do funkcji ciągłej \sqrt{x} na przedziale $[0, 1]$.

Twierdzenie Weierstrassa o aproksymacji ciągiem wielomianów jest w pewnym sensie dużo silniejsze niż twierdzenie Taylora o rozwijaniu na szereg potęgowy. Aby było możliwe rozwinięcie funkcji na szereg Taylora, muszą istnieć jej pochodne wszystkich rzędów — musi być ona „analityczna”. W twierdzeniu Weierstrassa potrzebna jest tylko ciągłość. Ponadto twierdzenie Weierstrassa zapewnia możliwość aproksymacji wielomianami poza promieniem zbieżności szeregu Taylora. Na ogół jednak nie da się tak przemieszczać jednostajnie zbieżnego ciągu *wielomianów* aproksymujących funkcję ciągłą, aby otrzymać z nich zbieżny szereg *potęgowy* (rozwinięcie Taylora).

W rozwinięciu Taylora musimy znać funkcję i jej pochodne lokalnie, w pewnym punkcie; promień zbieżności rozwinięcia może być skończony lub nieskończony. Twierdzenie Weierstrassa stosuje się tylko do przedziałów skończonych i wymaga od nas znajomości funkcji (choć bez pochodnych) *globalnie*, na całym przedziale.

Przy okazji dowodu tego twierdzenia pokazaliśmy ściśle, że reprezentacja funkcji δ Diraca zdefiniowana wzorem (5.22) ma żądane własności (równanie (5.24)). Tak więc Weierstrass, który dowiódł to twierdzenie w roku 1885 przy użyciu właśnie tej metody, wyprzedził Diraca dość poważnie. Nie był on zresztą jedynym. Również Heaviside używał przed Diracem podobnej funkcji symbolicznej. Jednak dopiero Dirac wprowadzając funkcje symboliczne w swojej klasycznej książce „*Principles of Quantum Mechanics*” wydanej po raz pierwszy w 1930 r., przyczynił się do ich szerokiej popularyzacji. Stosunkowo niedawno dopiero została opracowana przez Schwartza w jego teorii dystrybucji ściśła matematycznie teoria funkcji δ i innych związanych z nią funkcji symbolicznych.

Twierdzenie Weierstrassa można rozszerzyć na przypadek funkcji wielu zmiennych. Przez proste uogólnienie dowodu można pokazać, że jeżeli funkcja $f(x_1, x_2, \dots, x_m)$ jest ciągła w każdej zmiennej x_i dla $x_i \in [a_i, b_i]$ ($i = 1, 2, \dots, m$), to f można aproksymować jednostajnie wielomianami

$$P_n(x_1, x_2, \dots, x_m) = \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \dots \int_{a_m}^{b_m} f(t_1, t_2, \dots, t_m) \delta_n(t_1 - x_1) \times \\ \times \delta_n(t_2 - x_2) \dots \delta_n(t_m - x_m) dt_1 dt_2 \dots dt_m. \quad (5.35)$$

Zupełność funkcji trygonometrycznych wynika ze szczególnego przypadku $m = 2$, jak zobaczymy w § 5.6.

Zakończymy ten paragraf uwagą na temat innej ważnej konsekwencji naszego wyniku. Z § 5.2 wynika, że jeżeli ciąg P_n zdefiniowany w dowodzie twierdzenia Weierstrassa aproksymuje jednostajnie dowolną funkcję ciągłą f , to może także dowolną funkcję ciągłą aproksymować w *sensie wartości średniej*, tzn. dla danego ε istnieje n takie, że $\|f - P_n\| < \varepsilon$.

Można zarazem pokazać, że każda funkcja w przestrzeni Hilberta funkcji całkowalnych z kwadratem daje się dowolnie blisko aproksymować w sensie wartości średniej pewną funkcją ciągłą. Omawiamy to szerzej w § 8.7. Wynika stąd, że *każdą* funkcję w tej przestrzeni Hilberta można aproksymować w *sensie wartości średniej* przez P_n . Dowodzi tego następujące rozumowanie. Niech ϕ będzie funkcją w przestrzeni Hilberta. Wówczas różnicę $\phi - P_n$ można zapisać jako

$$\phi - P_n = (\phi - f) + (f - P_n),$$

gdzie f jest pewną funkcją ciągłą. Z nierówności trójkąta dostajemy

$$\|\phi - P_n\| \leq \|\phi - f\| + \|f - P_n\|.$$

Można teraz f wybrać tak, aby $\|\phi - f\|$ było dowolnie małe, a na mocy twierdzenia Weierstrassa n można wybrać tak, aby $\|f - P_n\|$ było dowolnie małe. Zatem P_n aproksymuje ϕ , dowolną funkcję w przestrzeni Hilberta, dowolnie blisko w sensie wartości średniej. Z faktu tego będziemy jeszcze korzystać w przyszłości. Pełny dowód można znaleźć w większości podręczników analizy, np. Riesz i Nagy (§ 46) lub Rudin (twierdzenie 10.38).

5.5. WIELOMIANY LEGENDRE'A

Obecnie jesteśmy już w stanie pokazać, że na skończonym domkniętym przedziale $[a, b]$ istnieje *pełny* ortonormalny zbiór wielomianów. Dowód zupełności wynika z twierdzenia Weierstrassa. Po przeprowadzeniu dowodu ogólnego zajmiemy się dokładniej szczególnym przypadkiem — pełnym ortonormalnym zbiorem wielomianów na przedziale $[-1, 1]$, którym z dokładnością do stałej normalizacyjnej jest zbiór wielomianów Legendre'a. Podamy przy tym explicite sposób konstruowania trzech pierwszych funkcji z tego zbioru, a następnie wzór pozwalający wyliczyć wszystkie następne.

Twierdzenie Weierstrassa zapewnia, że każda funkcja ciągła f na $[a, b]$ może być jednostajnie aproksymowana ciągiem wielomianów:

$$P_n(x) = \sum_{m=0}^{2n} a_{nm} x^m.$$

Ponieważ zbiór $\{x^n, n = 0, 1, \dots\}$ jest liniowo niezależny, możemy metodą ortogonalizacji Grama-Schmidta skonstruować z niego ortonormalną bazę $\{Q_n(x)\}$, gdzie $Q_n(x)$ jest wielomianem stopnia n . Następnie możemy wyrazić funkcje początkowe w postaci skończonych kombinacji liniowych elementów tego ortonormalnego zbioru:

$$x^m = \sum_{i=0}^m c_{mi} Q_i(x).$$

Wynika stąd, że wielomiany P_n aproksymujące jednostajnie funkcję f dają się wyrazić w postaci

$$P_n(x) = \sum_{m=0}^{2n} a_{nm} \sum_{i=0}^m c_{mi} Q_i(x).$$

Dla dowodu zupełności ortonormalnego zbioru $\{Q_n\}$ wystarczy teraz pokazać, że jest on domknięty (twierdzenie 5.2). Zbiór ortonormalny $\{Q_n\}$ jest domknięty, jeżeli jedyną

funkcją ortogonalną do wszystkich Q_n jest funkcja zerowa. Załóżmy, że istnieje w przestrzeni Hilberta funkcja o tej własności, że $(f, Q_n) = 0$ dla każdego n . Z podanego wyżej równania wynika natychmiast, że $(f, P_n) = 0$ dla każdego n , ponieważ P_n są kombinacjami liniowymi Q_n . Wiemy jednak z twierdzenia Weierstrassa, że f można aproksymować w sensie wartości średniej przez P_n . Zatem dla każdego ε istnieje takie n , że $\|f - P_n\| < \varepsilon$. Ale ponieważ $(f, P_n) = 0$, więc

$$\|f - P_n\| \equiv (f - P_n, f - P_n)^{1/2} = [\|f\|^2 + \|P_n\|^2]^{1/2}.$$

Zatem

$$\|f\|^2 + \|P_n\|^2 < \varepsilon^2.$$

Wynika stąd jednak, że $\|f\|$ jest dowolnie mała, a więc f jest równa zeru (prawie wszędzie). Zatem zbiór ortonormalny $\{Q_n\}$ jest domknięty i na mocy twierdzenia 5.2 jest zupełnym ortonormalnym zbiorem wielomianów na przedziale $[a, b]$.

Zupełność zbioru Q_i oznacza (zgodnie z definicją 5.6), że dla każdej funkcji g w przestrzeni Hilberta istnieje zbiór stałych $\{a_i\}$ taki, że ciąg sum częściowych

$$g_n = \sum_{i=0}^n a_i Q_i(x)$$

aproksymuje funkcję g w sensie wartości średniej. Przy powiększaniu górnej granicy sumowania aż do nieskończoności, aproksymacja staje się coraz lepsza, a wszystkie początkowe a_i nie ulegają zmianie. Możemy zatem powiedzieć, że istnieje szereg nieskończony

$$\sum_{i=0}^{\infty} a_i Q_i,$$

który aproksymuje g w sensie wartości średniej. Stąd zapis symboliczny

$$g(x) \doteq \sum_{i=0}^{\infty} a_i Q_i(x).$$

Pokazaliśmy poprzednio, że jeżeli mamy zupełny ortonormalny zbiór funkcji, to współczynniki zapewniające najlepszą aproksymację w sensie wartości średniej są współczynnikami Fouriera. Tak więc współczynniki rozwinięcia na szereg nieskończony dane są wzorem

$$a_i = (Q_i, g).$$

Zastosujemy teraz te rozważania do konkretnego przypadku. Użyjemy metody ortogonalizacji Grama-Schmidta w zastosowaniu do bazy $\{1, x, x^2, \dots\}$ dla zbudowania zbioru ortonormalnych wielomianów na przedziale $[-1, 1]$. Z naszych poprzednich rezultatów wynika, że zbiór ten będzie zupełny.

Pierwszym elementem ortonormalnego zbioru jest $\bar{P}_0(x) = \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2}$. Widać, że wielomian ten jest unormowany dla x z przedziału $[-1, 1]$. W oparciu o przepis z § 4.3 dostajemy

$$\bar{P}_0(x) = \left(\frac{1}{2}\right)^{1/2},$$

$$\bar{P}_1 = \frac{x - 1/2^{1/2} \int_{-1}^1 1/2^{1/2} x dx}{\left\| x - 1/2^{1/2} \int_{-1}^1 1/2^{1/2} x dx \right\|} = \left(\frac{3}{2} \right)^{1/2} x, \quad (5.36)$$

$$\bar{P}_2 = \frac{x^2 - 1/2^{1/2} \int_{-1}^1 1/2^{1/2} x^2 dx - \left(\frac{3}{2} \right)^{1/2} x \int_{-1}^1 \left(\frac{3}{2} \right)^{1/2} x^3 dx}{\left\| x^2 - 1/2^{1/2} \int_{-1}^1 1/2^{1/2} x^2 dx - \left(\frac{3}{2} \right)^{1/2} x \int_{-1}^1 \left(\frac{3}{2} \right)^{1/2} x^3 dx \right\|} = \left(\frac{5}{2} \right)^{1/2} \left(\frac{3}{2} x^2 - \frac{1}{2} \right).$$

Procedura ta jest dość żmudna. Skorzystaliśmy z niej jedynie dla zademonstrowania, że ortonormalne funkcje dają się konstruować bezpośrednio z niezależnych funkcji. Chciałoby się jednak mieć nadzieję, że istnieje prostsza metoda obliczania ortonormalnych wielomianów wyższego rzędu i rzeczywiście, metoda taka istnieje.

Twierdzimy, że wzór ogólny na zupełny ortogonalny zbiór wielomianów w przedziale $[-1, 1]$ ma postać

$$\bar{P}_n(x) = \left(\frac{2n+1}{2} \right)^{1/2} \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2-1)^n. \quad (5.37)$$

Ortogonalne, choć nieunormowane wielomiany

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2-1)^n \quad (5.38)$$

znane są pod nazwą *wielomianów Legendre'a*. Równanie (5.38) nazywa się *wzorem Rodrigesa*.

Tak więc wielomiany Legendre'a różnią się od zbioru ortonormalnego $\{\bar{P}_n(x)\}$ jedynie czynnikami stałymi. Zadaniem naszym będzie teraz pokazać, że wzór Rodrigesa definiuje *te same* ortonormalne wielomiany, co proces ortogonalizacji Grama-Schmidta. Zgodność aż do wielomianów drugiego stopnia wykazuje już bezpośredni rachunek. Aby jednak dowieść poprawności wzoru Rodrigesa dla wszystkich rzędów, musimy pokazać, że:

1. W każdym ustalonym przedziale jest tylko jeden zupełny ortonormalny zbiór wielomianów, w którym n -ty wielomian jest stopnia n .

2. $\bar{P}_n(x)$ dane wzorem Rodrigesa istotnie tworzą zupełny ortonormalny zbiór na przedziale $[-1, 1]$.

Jednoznaczność zupełnego ortonormalnego zbioru wielomianów jest gwarantowana przez sam proces Grama-Schmidta, w którym czy to na $[-1, 1]$, czy na dowolnym ustalonym przedziale można wygenerować jeden i tylko jeden zupełny ortonormalny zbiór wielomianów (z dokładnością do czynnika fazowego). Innymi słowy, warunek (1) został już w zasadzie dowiedziony.

Dla dowodu warunku (2) pokażemy teraz, że zbiór wielomianów generowany przez wzór Rodrigesa dla przedziału $[-1, 1]$ jest ortonormalny i że funkcja $\bar{P}_n(x)$ jest wielomianem stopnia n . Zupełność wynika wówczas z naszego poprzedniego dowodu. Z samej postaci $\bar{P}_n(x)$ widać natychmiast, że funkcja ta jest wielomianem stopnia n . Ortonormalność pokażemy przy pomocy następującego twierdzenia.

Twierdzenie 5.3.

$$(\bar{P}_n, \bar{P}_m) = \int_{-1}^1 \bar{P}_n(x) \bar{P}_m(x) dx = \delta_{nm}. \quad (5.39)$$

Dowód. Dowiedzimy najpierw ortogonalności. Oznaczmy d^n/dx^n symbolem d^n i założmy, że $n > m$. Opuszczając stałe czynniki, po przeliczkowaniu przez części dostajemy

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 \bar{P}_n \bar{P}_m dx &= \int_{-1}^1 [d^n(x^2-1)^n] [d^m(x^2-1)^m] dx = \\ &= [d^{n-1}(x^2-1)^n] [d^m(x^2-1)^m] \Big|_{-1}^1 - \\ &\quad - \int_{-1}^1 [d^{n-1}(x^2-1)^n] [d^{m+1}(x^2-1)^m] dx. \end{aligned}$$

Ponieważ

$$d^{n-1}(x^2-1)^n = (\text{pewien wielomian}) \cdot (x^2-1),$$

więc pierwszy składnik znika po podstawieniu granic ± 1 i pozostaje jedynie drugi. Zatem po wykonaniu n takich kroków dostajemy

$$\int_{-1}^1 (-1)^n (x^2-1)^n d^{m+n}(x^2-1)^m dx,$$

ponieważ składnik wyznaczany w granicach ± 1 znika zawsze jako proporcjonalny do jakiejś potęgi (x^2-1) . Skoro jednak $n > m$, więc $n+m > 2m$ i $d^{n+m}(x^2-1)^m = 0$. Podobny dowód można przeprowadzić dla $n < m$. Zatem

$$\int_{-1}^1 P_n \bar{P}_m dx = 0 \quad \text{dla} \quad m \neq n.$$

Jeżeli $m = n$, to dostajemy tak jak poprzednio (z uwzględnieniem stałych czynników)

$$\int_{-1}^1 \bar{P}_n \bar{P}_n dx = \frac{(2n+1)(-1)^n}{2^{2n+1}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n d^{2n}(x^2-1)^n dx.$$

Ale $(x^2-1)^n$ jest wielomianem stopnia $2n$, a więc $(2n)$ -ta pochodna jest po prostu równa $(2n)!$. Wobec tego naszą całką przyjmuje postać

$$\frac{(-1)^n(2n+1)!}{2^{2n+1}(n!)^2} \int_{-1}^1 (x^2-1)^n dx = 1,$$

gdzie skorzystaliśmy ze wzorów (5.26) i (5.28).

Zatem funkcje $\bar{P}_n(x) = [(2n+1)^{1/2}/2] P_n(x)$ tworzą zbiór ortonormalny zupełny na przedziale $[-1, 1]$ i są jedynym takim zbiorem.

Przejdziemy teraz do badania dalszych własności wielomianów Legendre'a $P_n(x)$. Będziemy przy tym używali metod będących kontynuacją techniki wykorzystanej w dowodzie ortonormalności. Jest wiele bardziej eleganckich metod i będziemy z nich korzystali w przyszłości do badania zarówno wielomianów Legendre'a, jak i innych zupełnych zbiorów funkcji. Na razie jednak wystarczy nam prostsze choć mniej ścisłe podejście.

Zacniemy od wyprowadzenia ze wzoru Rodriguesa wyrażenia explicite na $P_n(x)$ w postaci wielomianu. Stosując wzór na dwumian Newtona do czynnika $(x^2 - 1)^n$, dostajemy

$$(x^2 - 1)^n = \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} x^{2m} (-1)^{n-m},$$

gdzie $\binom{n}{m}$ są współczynnikami Newtona:

$$\binom{n}{m} \equiv \frac{n!}{m!(n-m)!}. \quad (5.40)$$

Biorąc n -tą pochodną, otrzymujemy

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} d^n (x^2 - 1)^n = \frac{1}{2^n n!} \sum_{m \geq p} (-1)^{n-m} \binom{n}{m} \frac{2m!}{(2m-n)!} x^{2m-n}, \quad (5.41)$$

gdzie $p = n/2$ dla n parzystych i $p = (n+1)/2$ dla n nieparzystych.

Pokażemy teraz, że $P_n(1) = 1$ dla każdego n . Nie jest to bardzo ważna własność, niemniej jednak dość interesująca. Dowód jej przeprowadzimy dla zademonstrowania przytecznej techniki. (W przyszłości poznamy prostszą metodę). Zapisujemy wielomian w postaci

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} d^n [(x-1)^n (x+1)^n]$$

i wyznaczamy n -tą pochodną przy pomocy wzoru Leibnitza („rozwiniecie dwumienne” dla n -tej pochodnej iloczynu):

$$\begin{aligned} d^n(uv) &= \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} d^m u d^{n-m} v = u d^n v + n d u d^{n-1} v + \frac{n(n-1)}{2!} d^2 u d^{n-2} v + \dots + \\ &+ \frac{n!}{k!(n-k)!} d^k u d^{n-k} v + \dots + v d^n u. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Podstawiamy teraz $u = (x-1)^n$ i $v = (x+1)^n$. Widać, że jedynym nieznikającym w punkcie $x = 1$ członem w rozwinięciu Leibnitza jest składnik odpowiadający $m = n$, w którym czynnik $u = (x-1)^n$ przechodzi w wyniku różniczkowania w stałą $n!$, a więc jest różny od zera w punkcie $x = 1$. Zatem

$$d^n [(x-1)^n (x+1)^n]_{x=1} = d^n (x-1)^n d^0 (x+1)^n_{x=1} = n! 2^n$$

i w konsekwencji

$$P_n(1) = 1 \quad \text{dla każdego } n. \quad (5.43)$$

Wielomiany Legendre’a były początkowo wprowadzone w literaturze jako rozwiązanie równania różniczkowego zwanego obecnie równaniem Legendre’a:

$$(1-x^2)P_n''(x) - 2xP_n'(x) + n(n+1)P_n(x) = 0. \quad (5.44)$$

Aby dowiedzieć, że elementy zupełnego ortonormalnego zbioru wielomianów na przedziale $[-1, 1]$ spełniają to równanie, rozważmy tożsamość

$$(x^2 - 1) \frac{d}{dx} (x^2 - 1)^n = 2nx(x^2 - 1)^n.$$

Zróźniczkujemy obie strony $n+1$ razy. Przy pomocy wzoru Leibnitza (5.42) dostajemy dla lewej strony

$$\begin{aligned} & d^{n+1}[(x^2-1)d(x^2-1)^n] = \\ & = (x^2-1)d^{n+2}(x^2-1)^n + 2(n+1)xd^{n+1}(x^2-1)^n + n(n+1)d^n(x^2-1)^n, \end{aligned}$$

a dla prawej strony

$$d^{n+1}[2nx(x^2-1)^n] = 2nxd^{n+1}(x^2-1)^n + 2n(n+1)d^n(x^2-1)^n.$$

Różnica tych dwóch równań musi znikać. Zatem

$$(x^2-1)d^{n+2}(x^2-1)^n + 2xd^{n+1}(x^2-1)^n - n(n+1)d^n(x^2-1)^n = 0.$$

Korzystając ze wzoru Rodriguesa na $P_n(x)$, dostajemy

$$(x^2-1)P_n'' + 2xP_n' - n(n+1)P_n = 0, \quad (5.45)$$

co jest równoważne równaniu Legendre'a (5.44). Można je również przepisać w postaci

$$[(1-x^2)P_n'(x)]' + n(n+1)P_n(x) = 0. \quad (5.46)$$

Tak więc $P_n(x)$ są rozwiązaniami równania Legendre'a. Nie są one jednak jedynymi rozwiązaniami. Istnieje inny niezależny liniowo zbiór tak zwanych *funkcji Legendre'a* drugiego rodzaju, oznaczanych symbolem $Q_n(x)$. Funkcje te jednak nie są skończone w punktach $x = \pm 1$ tak jak $P_n(x)$ i tym samym nie mogą być rozwiązaniami w przypadku wielu problemów fizycznych. Poza tym nie są one wielomianami.

Można podać inny dowód ortogonalności wielomianów Legendre'a, opierając się bezpośrednio na równaniu różniczkowym (5.46) dla $P_n(x)$. Wiemy, że P_n i P_m ($n \neq m$) spełniają równania

$$\frac{d}{dx} [(1-x^2)P_n'] + n(n+1)P_n = 0,$$

$$\frac{d}{dx} [(1-x^2)P_m'] + m(m+1)P_m = 0.$$

Mnożąc te równania odpowiednio przez P_m i P_n , a następnie odejmując stronami i całkując od -1 do $+1$, otrzymujemy

$$\begin{aligned} (n-m)(n+m+1) \int_{-1}^1 P_n P_m dx &= \int_{-1}^1 \left[P_n \frac{d}{dx} ((1-x^2)P_m') - P_m \frac{d}{dx} ((1-x^2)P_n') \right] dx = \\ &= \left\{ [P_n(1-x^2)P_m']_{-1}^1 - \int_{-1}^1 dx (1-x^2)P_m'P_n' - [P_m(1-x^2)P_n']_{-1}^1 + \int_{-1}^1 dx (1-x^2)P_n'P_m' \right\} = 0, \end{aligned}$$

ponieważ obie całki się redukują, a dwa pozostałe wyrazy znikają. Dla $n \neq m$ wynika stąd

$$(P_n, P_m) \equiv \int_{-1}^1 P_n P_m dx = 0.$$

Jest to w gruncie rzeczy szczególnie przypadek dowodu słusznego dla szerokiej klasy funkcji będących rozwiązaniem zagadnienia Sturm-Liouville'a (zagadnienie to omówimy w § 5.10). Opiera się on na spostrzeżeniu, że równania różniczkowe spełniane przez funkcje ortogonalne mają dość specyficzną postać.

Omówiliśmy przykładowo kilka spośród własności zupełnego ortogonalnego zbioru wielomianów na przedziale $[-1, 1]$. Będziemy się z nim wielokrotnie spotykać w tej książce (już raz poprzednio natknęliśmy się na ten zbiór w rozwinięciu multipolowym (1.100, 1.101, 1.102)) i dyskutować bardziej szczegółowo jego własności. Ale najważniejsza dla nas na razie jest *zupełność* tego zbioru czy innych zbiorów funkcji. Inne ich cechy mają znaczenie drugorzędne.

Przejdziemy teraz do najważniejszego zupełnego zbioru funkcji, a przy tym najdawniej zbadanego — zbioru funkcji trygonometrycznych i do szeregów Fouriera.

5.6. SZEREGI FOURIERA

Fakt, że zbiór funkcji trygonometrycznych $\{\sin n\theta, \cos n\theta, n = 0, 1, 2, \dots, \infty\}$ jest zbiorem zupełnym, można wywnioskować z twierdzenia Weierstrassa dla dwóch zmiennych. Równanie (5.35) mówi, że każda funkcja $g(x, y)$ ciągła w obu swoich zmiennych w określonych skończonych przedziałach domkniętych daje się aproksymować jednostajnie ciągiem funkcji

$$g_N(x, y) = \sum_{n, m=0}^N A_{nm}^{(N)} x^n y^m,$$

to znaczy $\lim_{N \rightarrow \infty} g_N(x, y) = g(x, y)$, przy czym zbieżność ta jest jednostajna w obu zmiennych. Współczynniki $A_{nm}^{(N)}$ są zależne od N dla ustalonego n i m , a więc nie jest to rozwinięcie na szereg potęgowy.

Jeżeli przejdziemy do zmiennych biegunowych i dziedzinę funkcji ograniczymy do okręgu koła jednostkowego, to $x = \cos \theta$ i $y = \sin \theta$, a szereg przybiera postać

$$g(\cos \theta, \sin \theta) = f(\theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n, m=0}^N A_{nm}^{(N)} \cos^n \theta \sin^m \theta. \quad (5.47)$$

Oczywiście jedynymi funkcjami $f(\theta)$, które mogą spełniać to równanie, są funkcje okresowe o okresie 2π ; ograniczenie to jest konsekwencją wyboru okręgu koła jako dziedziny. W przyszłości uogólnimy nasze rozważania na funkcje o okresach różnych od 2π .

Przy użyciu wzoru Eulera

$$e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta,$$

otrzymujemy wyrażenia na n -tą potęgę $\sin \theta$ i $\cos \theta$:

$$\cos^n \theta = \left[\frac{1}{2} (e^{i\theta} + e^{-i\theta}) \right]^n,$$

$$\sin^n \theta = \left[\frac{1}{2i} (e^{i\theta} - e^{-i\theta}) \right]^n.$$

Wówczas równość (5.47) przechodzi w

$$f(x) = \lim_{M \rightarrow \infty} f_M(x) \equiv \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{n=-M}^M \frac{c_n^{(M)}}{(2\pi)^{1/2}} e^{inx}, \quad (5.48a)$$

gdzie dodaliśmy czynnik $(2\pi)^{1/2}$, który w przyszłości okaże się bardzo wygodny i zastąpimy zmienną θ przez x , dla podkreślenia ogólności wzoru. Oczywiście (5.48a) można też zapisać w innej, równoważnej postaci

$$f(x) = \lim_{M \rightarrow \infty} f_M(x) = \lim_{M \rightarrow \infty} \left[\frac{a_0^{(M)}}{2} + \sum_{n=1}^M (a_n^{(M)} \cos nx + b_n^{(M)} \sin nx) \right]. \quad (5.48b)$$

Współczynniki rozwinięcia zespolonego wykładniczego oraz trygonometrycznego wiążą się ze sobą następująco:

$$\begin{aligned} a_0^{(M)} &= \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/2} c_0^{(M)}, & c_0^{(M)} &= \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} a_0^{(M)}, \\ a_n^{(M)} &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} (c_n^{(M)} + c_{-n}^{(M)}), & \text{lub} & & c_n^{(M)} &= \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} (a_n^{(M)} - ib_n^{(M)}), \\ b_n^{(M)} &= \frac{i}{(2\pi)^{1/2}} (c_n^{(M)} - c_{-n}^{(M)}), & c_{-n}^{(M)} &= \left(\frac{\pi}{2} \right)^{1/2} (a_n^{(M)} + ib_n^{(M)}). \end{aligned} \quad (5.49)$$

Indeks M ma nam stale przypominać, że współczynniki w tym ciągu nie są niezależne od M , współczynniki wyrazów wcześniejszych ciągu mogą się zmieniać ze wzrostem M .

Tak więc jakakolwiek funkcja $f(x)$, dla której $f(x) = f(x+2\pi)$, może być jednostajnie aproksymowana ciągiem wielomianów trygonometrycznych:

$$f_M(x) = \sum_{n=-M}^M \frac{c_n^{(M)}}{(2\pi)^{1/2}} e^{inx} = \frac{a_0^{(M)}}{2} + \sum_{n=1}^M (a_n^{(M)} \cos nx + b_n^{(M)} \sin nx).$$

Przypuśćmy teraz, że $f(x)$ jest dowolną funkcją ciągłą na przedziale domkniętym $[a, a+2\pi]$ nie spełniającą warunku okresowości $f(a) = f(a+2\pi)$ w punktach końcowych przedziału. Jasne, że dla każdej takiej funkcji f możemy znaleźć ciągłą funkcję $g(x)$, która spełnia warunek okresowości, a zarazem dla której wielkość

$$\int_a^{a+2\pi} |f(x) - g(x)|^2 dx$$

jest dowolnie mała. (Dla dowodu patrz Courant, Hilbert). Zatem ciąg trygonometryczny zbieżny jednostajnie do $g(x)$ będzie jednocześnie zbieżny w sensie wartości średniej do $f(x)$ na przedziale $[a, a+2\pi]$. W gruncie rzeczy, ponieważ każda funkcja w przestrzeni Hilberta daje się aproksymować w sensie wartości średniej z dowolną dokładnością przez pewną funkcję ciągłą (patrz § 5.4), wynik ten odnosi się do dowolnej funkcji w przestrzeni Hilberta.

W § 5.1 stwierdziliśmy, że zbiór funkcji

$$\left\{ \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} e^{inx}, \quad n = 0, \pm 1, \dots \right\}$$

jest ortonormalny w przedziale $[-\pi, \pi]$. Oznaczmy ten zbiór symbolem $\{T_n\}$. Pokażemy teraz, że zbiór ten jest również *zupełny*. Zrobimy to dokładnie tak, jak dla ortonormalnego zbioru wielomianów $\{Q_n\}$ w poprzednim paragrafie, a mianowicie dowodząc, że zbiór ten jest domknięty. Tak więc chcemy dowieść, że z założenia $(f, T_n) = 0$ dla każdego n , wynika $f = 0$. Ale z (5.48a) wynika, że $(f, f_M) = 0$ dla każdego M , ponieważ f_M jest

kombinacją liniową ortonormalnych funkcji T_n . Wiemy jednak, że każda funkcja f daje się aproksymować w sensie wartości średniej przez ciąg f_M , to znaczy

$$\|f - f_M\| = [\|f\|^2 + \|f_M\|^2]^{1/2} < \varepsilon.$$

Zatem $f = 0$ (prawie wszędzie) i zbiór ortonormalny $\{T_n\}$ jest domknięty, zaś na mocy twierdzenia 5.2 jest zupełnym ortonormalnym zbiorem na przedziale $[-\pi, \pi]$. Oczywiście zbiór funkcji trygonometrycznych ortonormalny na $[-\pi, \pi]$,

$$\left\{ \frac{1}{(2\pi)^{1/2}}, \frac{1}{\pi^{1/2}} \sin nx, \frac{1}{\pi^{1/2}} \cos nx, \quad n = 1, 2, \dots \right\},$$

jest także zupełny.

Z zupełności ortonormalnego zbioru $\{T_n\}$ wynika, że dowolną funkcję f można aproksymować w sensie wartości średniej nieskończonym szeregiem funkcji T_n . Zapisujemy to symbolicznie

$$f(x) \doteq \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n T_n(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{c_n}{(2\pi)^{1/2}} e^{inx} = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n \cos nx + b_n \sin nx). \quad (5.50)$$

Współczynniki rozwinięcia, które są tutaj stałymi niezależnymi od M (por. (5.48a)), są dane wzorem

$$c_n = (T_n, f) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) e^{-inx} dx. \quad (5.51)$$

Współczynniki a_n i b_n szeregu trygonometrycznego można obliczyć w oparciu o (5.49):

$$\begin{aligned} a_n &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} (c_n + c_{-n}) = \left(\frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \right)^2 \int_{-\pi}^{\pi} f(x) (e^{-inx} + e^{inx}) dx \\ a_n &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx dx \quad \text{dla } n = 0, 1, \dots \\ b_n &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin nx dx \quad \text{dla } n = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (5.52)$$

Szereg (5.50) ze współczynnikami (5.52) znany jest pod nazwą *szeregu Fouriera*.

Ponieważ funkcje

$$T_n(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} e^{inx}, \quad n = 0, \pm 1, \dots$$

tworzą zbiór ortonormalny zupełny, słuszny jest dla nich związek zupełności (5.10). Dostajemy stąd

$$(f, f) = \int_{-\pi}^{\pi} |f|^2 dx = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |c_n|^2 = \pi \left[\frac{a_0^2}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n^2 + b_n^2) \right], \quad (5.53)$$

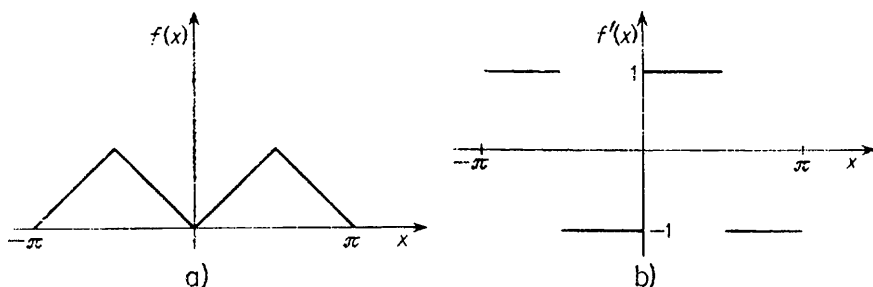
gdzie skorzystaliśmy ze związków (5.49).

Podsumujmy teraz sytuację. Pokazaliśmy, że szereg Fouriera jest zbieżny w sensie wartości średniej w przedziale $[-\pi, \pi]$ do każdej funkcji $f(x)$ należącej do przestrzeni Hilberta. Wiemy również, że dla dowolnej funkcji ciągłej $f(x)$ na przedziale $[-\pi, \pi]$,

dla której $f(-\pi) = f(\pi)$, istnieje ciąg trygonometryczny jednostajnie zbieżny do niej. Wobec tego być może szereg Fouriera jako szczególny przypadek szeregu trygonometrycznego ma również tę silniejszą własność. Niestety, nie ma absolutnie żadnej gwarancji, że ten szczególny dobór współczynników zapewniający zbieżność w sensie wartości średniej, da również zbieżność jednostajną. Twierdzenie odwrotne daje się jednak łatwo dowieść. Mianowicie, jeżeli szereg trygonometryczny jest jednostajnie zbieżny, to jego współczynniki są współczynnikami Fouriera. Można to pokazać, mnożąc (5.50) przez $\cos mx$ lub $\sin mx$ i całkując jednostajnie zbieżny szereg wyraz po wyrazie. Natomiast ustalenie warunków jednostajnej zbieżności stanowi poważny problem. Nasze badania nad tym centralnym zagadnieniem teorii szeregów Fouriera zaczniemy od dowodu następującego twierdzenia.

Twierdzenie 5.4. Jeżeli funkcja $f(x)$ jest ciągła w przedziale domkniętym $[-\pi, \pi]$, a jej pochodna jest w tym przedziale odcinkami ciągła oraz $f(-\pi) = f(\pi)$, to szereg Fouriera tej funkcji jest do niej zbieżny jednostajnie w tym przedziale. Jeżeli dodatkowo $f(x + 2\pi) = f(x)$, to szereg ten jest zbieżny jednostajnie wszędzie.

Przykład funkcji mającej pochodną odcinkami ciągłą podany jest na rys. 5.2. Funkcje tego typu nazywa się często *funkcjami odcinkami gładkimi*.



Rys. 5.2. Funkcja zygzakowata i jej pochodna

Dowód. Oznaczmy współczynniki Fouriera $f'(x)$ przez a'_n i b'_n . Całkując przez części, dostajemy

$$a'_n \equiv \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f'(x) \cos nx dx = -\frac{n}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \sin nx dx = nb_n,$$

$$b'_n \equiv \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f'(x) \sin nx dx = -\frac{n}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) \cos nx dx = -na_n, \quad (5.54)$$

$$a'_0 \equiv \int_{-\pi}^{\pi} f'(x) dx = f(\pi) - f(-\pi) = 0.$$

Skorzystalismy tu kilkakrotnie z równości $f(\pi) = f(-\pi)$; współczynniki Fouriera funkcji $f(x)$ są jak poprzednio oznaczone symbolami a_n i b_n .

Ponieważ $f'(x)$ jest odcinkami ciągła na $[-\pi, \pi]$, a więc tym samym całkowna z kwadratem, musi spełniać nierówność Bessela (5.9):

$$(f', f') \geq \pi \left[\frac{a_0'^2}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} (a_n'^2 + b_n'^2) \right] = \pi \sum_{n=1}^{\infty} n^2 (b_n^2 + a_n^2), \quad (5.55)$$

gdzie skorzystaliśmy z (5.54). (W rzeczywistości wiemy nawet na podstawie relacji zupełności (5.10), że zachodzi tu równość).

Wszystko to są jedynie wstępne wyniki. Korzystamy teraz z kryterium Cauchy'ego dla zbadania jednostajnej zbieżności szeregu Fouriera. Niech

$$S_n = \frac{a_0}{2} + \sum_{p=1}^n a_p \cos px + \sum_{p=1}^n b_p \sin px.$$

Na mocy twierdzenia 5.1, jeżeli tylko uda nam się pokazać, że $|S_n - S_m| < \varepsilon$ dla każdego x w $[-\pi, \pi]$ i dla każdego n, m większych od pewnego $N(\varepsilon)$, to tym samym dowiedziemy jednostajnej zbieżności. Zachodzą następujące oszacowania

$$\begin{aligned} |S_n - S_m| &= \left| \sum_{p=m+1}^n (a_p \cos px + b_p \sin px) \right| = \left| \sum_{p=m+1}^n \frac{1}{p} (pa_p \cos px + pb_p \sin px) \right| \leq \\ &\leq \sqrt{\sum_{p=m+1}^n \left| \frac{1}{p} \right|^2} \sqrt{\sum_{p=m+1}^n |pa_p \cos px + pb_p \sin px|^2}, \end{aligned}$$

gdzie skorzystaliśmy z nierówności Schwarz'a (4.8). To ostatnie wyrażenie można przedstawić w postaci

$$\begin{aligned} |S_n - S_m| &\leq \sqrt{\sum_{p=m+1}^n \frac{1}{p^2}} \cdot \sqrt{\sum_{p=m+1}^n p^2 |a_p \cos px + b_p \sin px|^2} \leq \\ &\geq \sqrt{\sum_{p=m+1}^n \frac{1}{p^2}} \cdot \sqrt{\sum_{p=m+1}^n p^2 (a_p^2 + b_p^2)}, \end{aligned}$$

jako że $|a_p \cos px + b_p \sin px|$ można zapisać w formie

$$|\sqrt{a_p^2 + b_p^2} \cos(px - \theta)| \leq |\sqrt{a_p^2 + b_p^2}|,$$

gdzie $\theta = \arctg b_p/a_p$. Zatem

$$|S_n - S_m| \leq \sqrt{\sum_{p=m+1}^n \frac{1}{p^2}} \cdot \sqrt{\frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} |f'(x)|^2 dx},$$

gdzie wyraz $\sqrt{\sum_{p=m+1}^n p^2 (a_p^2 + b_p^2)}$ został zastąpiony na mocy (5.55) równym mu lub większym wyrazem

$$\sqrt{\sum_{p=1}^{\infty} p^2 (a_p^2 + b_p^2)} \leq \sqrt{(1/\pi) \int_{-\pi}^{\pi} |f'|^2 dx}. \quad (5.56)$$

Szereg $\sum_{p=1}^{\infty} \left(\frac{1}{p^2}\right)$ jest zbieżny (jak pokażemy w § 6.9, jest on równy funkcji zeta Riemanna w punkcie 2 i jest zbieżny do $\pi^2/6$). Oznaczmy

$$M = \sqrt{(1/\pi) \int_{-\pi}^{\pi} |f'(x)|^2 dx}.$$

Wiemy, że M jest skończone, ponieważ $f'(x)$ jest odcinkami ciągła i zawsze skończona.

Szereg $\sum_{p=1}^{\infty} (1/p^2)$ jest zbieżny, a więc musi spełniać kryterium Cauchy'ego. Wobec tego dla każdej liczby dodatniej, a w szczególności dla ε^2/M^2 , istnieje takie N , że $\sum_{p=m+1}^n (1/p^2) < \varepsilon^2/M^2$, jeżeli tylko $n, m > N$. Biorąc n i m występujące w oszacowaniu $|S_n - S_m|$ większe od tego N , dostajemy

$$|S_n - S_m| < (\varepsilon^2/M^2)^{1/2} M = \varepsilon$$

i tym samym dowód jednostajnej zbieżności został zakończony. Wiemy, że szereg jest zbieżny właśnie do funkcji $f(x)$, ponieważ poprzednio już upewniliśmy się co do jego zbieżności w sensie wartości średniej do $f(x)$.

Warto zauważyć, że relacja zupełności mogła być wykorzystana wcześniej w tym dowodzie; wówczas zamiast nierówności w (5.56) byłaby równość. Mogliśmy to zrobić, ponieważ zupełność została pokazana już wcześniej. Jednakże dla zademonstrowania, że zupełność nie jest konieczna dla dowodu jednostajnej zbieżności, skorzystaliśmy zamiast tego z nierówności Bessela. Z faktu, że $f'(x)$ jest odcinkami ciągła wynika, że M jest skończona i jest to jedyna informacja potrzebna do dowodu jednostajnej zbieżności. Żeby jednak pokazać, że szereg jest jednostajnie zbieżny do $f(x)$ (ponieważ kryterium Cauchy'ego nic nie mówi na temat funkcji stanowiącej granicę), skorzystaliśmy na samym końcu dowodu ze zbieżności w sensie wartości średniej do $f(x)$ (zupełności). Można wszelako dowieść niezależnie, że szereg jest zbieżny jednostajnie do $f(x)$ i jest to automatycznie inny niezależny dowód zupełności.

Twierdzenie 5.4 można rozszerzyć na przypadek funkcji odcinkami ciągłych, takich jak funkcja schodkowa, które mogą mieć skończoną ilość skończonych nieciągłości w przedziale $[-\pi, \pi]$.

Twierdzenie 5.5. Jeżeli funkcja $f(x)$ jest odcinkami ciągła na $[-\pi, \pi]$ i ma tam odcinkami ciągłą pochodną, to jej szereg Fouriera jest do niej jednostajnie zbieżny na każdym domkniętym podprzedziale $[-\pi, \pi]$, na którym $f(x)$ jest ciągła. W punktach nieciągłości $f(x)$ jej szereg Fouriera jest zbieżny do średniej arytmetycznej lewostronnej i prawostronnej granicy funkcji. Jeżeli $f(x+2\pi) = f(x)$, to stwierdzenia powyższe są słuszne na całej prostej rzeczywistej.

Ciekawą jest rzeczą, że chociaż dla każdej funkcji ciągłej wiemy o istnieniu pewnego ciągu trygonometrycznego zbieżnego jednostajnie do niej w przedziale domkniętym, to sama ciągłość $f(x)$ nie wystarcza do dowodu zbieżności jej szeregu Fouriera. Istnieją funkcje ciągłe, które nie są różniczkowalne i ich szeregi Fouriera nie muszą być zbieżne. Jednakże dodatkowy warunek ciągłości $f'(x)$ zapewnia jej zbieżność. Również założenie, że przedział jest domknięty, odgrywa zasadniczą rolę w dowodzie jednostajnej zbieżności. Zbieżność szeregów Fouriera dla funkcji odcinkami ciągłych — takich jak funkcje schodkowe — nie będzie z pewnością jednostajna w przedziałach otwartych (a, b) , gdzie jeden z końców jest punktem nieciągłości. W rzeczywistości można pokazać, że szereg Fouriera tuż przed przejściem przez punkt nieciągłości różni się od funkcji o skończoną wielkość. Efekt ten nazywa się zjawiskiem Gibbsa (patrz zadanie 4c).

Gładkość funkcji jest właściwie odpowiedzialna za wielkość współczynników Fouriera — im bardziej gładka funkcja, tym szybciej maleją te współczynniki i tym szybsza jest zbieżność. Teoria szeregów Fouriera jest czymś w rodzaju badania współdziałania założeń o gładkości z wnioskami na temat zbieżności.

Fejer zbudował teorię szeregów Fouriera opartą na szczególnym typie sumowania szeregów (zwanym sumowaniem w sensie Cesaro), w którym bada się ciąg *średnich arytmetycznych* sum częściowych. Jeżeli szereg jest zbieżny w zwykłym sensie, to można go wysumować w sensie Cesaro i wynik będzie taki sam. Wiele natomiast rozbieżnych szeregów daje się wysumować w sensie Cesaro; jest to więc naturalne uogólnienie, zachowujące zwykle sumowanie jako szczególny przypadek. Fejer pokazał, że szereg Fouriera dowolnej funkcji ciągłej $f(x)$ jest jednostajnie zbieżny w sensie Cesaro do $f(x)$ (patrz Rudin lub Apostol). Niepotrzebne są żadne założenia na temat gładkości. Wynik ten kontrastuje z faktem, że istnieją funkcje ciągłe, których szereg Fouriera jest rozbieżny w jakimś punkcie.

Aż dotychczas ograniczaliśmy nasze rozważania do funkcji określonych na przedziale $[-\pi, \pi]$. Jeżeli funkcje te są okresowe z okresem 2π , to ich rozwinięcia są równie dobre na zewnątrz tego przedziału. Łatwo jest uogólnić dotychczasowe wyniki na przypadek przedziału $[-l, l]$ i funkcji o okresie $2l$. Jednakże z warunku okresowości nie można zrezygnować, jeżeli szereg ma być zbieżny na zewnątrz podstawowego przedziału.

Oczywiście zbiór funkcji

$$\left\{ \frac{e^{in\pi x/l}}{(2l)^{1/2}} \right\}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

jest zbiorem ortonormalnym zupełnym na przedziale $[-l, l]$. Wszystkie poprzednie rezultaty można teraz otrzymać w analogiczny sposób. Dla zespolonego wykładniczego szeregu otrzymujemy

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \frac{e^{in\pi x/l}}{(2l)^{1/2}}, \quad (5.57)$$

$$c_n = \frac{1}{(2l)^{1/2}} \int_{-l}^l f(x) e^{-in\pi x/l} dx.$$

Podobnie dla szeregu trygonometrycznego

$$f(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \cos \frac{n\pi}{l} x + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin \frac{n\pi}{l} x,$$

$$a_n = \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \cos \frac{n\pi}{l} x dx \quad \text{dla } n = 0, 1, \dots, \quad (5.58)$$

$$b_n = \frac{1}{l} \int_{-l}^l f(x) \sin \frac{n\pi}{l} x dx \quad \text{dla } n = 1, 2, \dots$$

Wzory te obowiązują w przedziale $[-l, l]$, o ile spełnione są założenia twierdzenia, natomiast na zewnątrz tego przedziału tylko jeżeli $f(x+2l) = f(x)$.

Dla każdego l (włącznie z $l = \pi$), jeżeli $f(x)$ jest funkcją parzystą, to $b_n = 0$ dla każdego n i dostajemy szereg Fouriera cosinusów, a jeżeli $f(x)$ jest funkcją nieparzystą, to $a_n = 0$ dla każdego n i mamy szereg Fouriera sinusów.

Zakończymy ten paragraf prostą, ale ważną uwagą. Przypomnijmy, że wielomiany Legendre'a, które jak pokazaliśmy, tworzą zbiór ortonormalny zupełny, spełniają równanie różniczkowe drugiego rzędu (5.44). W tym paragrafie omawialiśmy bardziej znane funkcje

trygonometryczne i stwierdziliśmy, że one także tworzą zupełny ortonormalny zbiór funkcji. W przyszłości przy badaniu zbiorów funkcji będziemy zawsze zwracać uwagę na fakt, że funkcje te są rozwiązaniami określonych równań różniczkowych. Z równań tych nie będziemy wyciągać żadnych wniosków, a raczej będziemy je podawać na samym końcu jako produkt uboczny naszych rozważań. Na koniec wreszcie w paragrafie 5.10 podamy w formie podsumowania przegląd wszystkich wielomianów specjalnych jako rozwiązań równań różniczkowych drugiego rzędu.

Funkcje trygonometryczne nie pojawią się oczywiście w tym podsumowaniu, jako że nie są wielomianami. Dla uzupełnienia podamy dobrze znane równanie różniczkowe spełniane przez sinus i cosinus:

$$-\frac{d^2}{dx^2}u + \omega^2 u = 0. \quad (5.59)$$

Równanie to, jako równanie różniczkowe drugiego rzędu, ma dwa liniowo niezależne rozwiązania

$$u_1 = \sin \omega x, \quad u_2 = \cos \omega x. \quad (5.60)$$

Jeżeli $\omega^2 = n^2$, gdzie n jest liczbą całkowitą, to rozwiązania te reprezentują funkcje Fouriera dla n zmieniającego się od 0 do ∞ . W celach szkoleniowych można przeprowadzić dowód ortogonalności tych funkcji jedynie na podstawie kształtu równania, tak jak to uczyniliśmy dla wielomianów Legendre'a.

5.7. TRANSFORMATY FOURIERA

Ograniczenie stosowalności rozwinięć na szereg Fouriera do przedziału podstawowego $[-l, l]$ dla funkcji nieokresowych jest dość przykre, ponieważ wiele ważnych funkcji należy do tej klasy. Można zasugerować sposób obejścia tej trudności poprzez uogólnienie wprowadzone w poprzednim paragrafie: Jeżeli chcemy rozwijać funkcję nieperiodyczną w określonym skończonym przedziale, wystarczy ją rozwijać w przedziale $[-l, l]$ tak dużym, aby obejmował potrzebną nam dziedzinę. Co jednak robić w przypadku, gdy potrzebne jest rozwinięcie funkcji nieokresowej na całej osi rzeczywistej? Rczygnując z matematycznej ścisłości, wyprowadzimy tutaj heurystycznie wzory dające odpowiedź na to pytanie. (Gdy fizyk mówi o wyprowadzeniu „heurystycznym”, przeprasza zazwyczaj z góry, mając na myśli wyprowadzenie nieporządne i matematycznie nieściśle; w rzeczywistości przymiotnik „heurystyczny” oznacza „mający pomóc w odkryciu”). Wrócimy do tych spraw ponownie przy użyciu poprawniejszych matematycznie metod w rozdziale 9 (wniosek z twierdzenia 9.11).

Rozsądnym sposobem uniknięcia kłopotów z okresowością wydaje się przejście graniczne $l \rightarrow \infty$ w (5.57). Aby je zrealizować, położmy $(\pi/l)^{1/2}x = y$, $n(\pi/l)^{1/2} = k_n$ oraz $\Delta k_n \equiv k_{n+1} - k_n = (\pi/l)^{1/2}$. Wówczas $(n\pi/l)x = k_n y$, $1/(2l)^{1/2} = \Delta k_n / (2\pi)^{1/2}$ i po zastąpieniu c_n symbolem g_{k_n} równanie (5.57) przechodzi w

$$f(y) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \sum_{k_n=-\infty}^{\infty} g_{k_n} e^{ik_n y} \Delta k_n,$$

gdzie

$$g_{k_n} = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\sqrt{\pi}l}^{\sqrt{\pi}l} f(y) e^{-ik_n y} dy,$$

a k_n zmienia się w każdym kroku o $\Delta k_n = (\pi/l)^{1/2}$, co odpowiada $\Delta n = 1$ w sumie wyjściowej. Jeśli teraz $l \rightarrow \infty$, to $\Delta k_n \rightarrow 0$ i k_n przyjmuje wszystkie wartości rzeczywiste. Zatem suma po k_n staje się całką po zmiennej ciągłej (oznaczamy ją k) i po zastąpieniu y przez x dostajemy

$$f(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k) e^{ikx} dx, \tag{5.61}$$

$$g(k) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx.$$

Funkcja $g(k)$ nazywa się *transformatą Fouriera* funkcji $f(x)$ i vice versa. Dwie funkcje spełniające (5.61) nazywają się parą transformat Fouriera. Jeżeli jedno z równań (5.61) będziemy rozpatrywać jako szczególny przypadek równania całkowego, to drugie podaje explicite rozwiązanie tego równania.

Przez proste uogólnienie powyższych wyników dostajemy trójwymiarowe całki Fouriera:

$$F(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} G(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{k}, \tag{5.62}$$

$$G(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} F(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}.$$

Tutaj symbol \mathbf{r} oznacza wektorowy zapis trzech zmiennych x, y, z , a $d\mathbf{r} = dx dy dz$; podobnie \mathbf{k} oznacza k_x, k_y, k_z , a $d\mathbf{k} = dk_x dk_y dk_z$. Stąd $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = k_x x + k_y y + k_z z$. Tej właśnie pary trójwymiarowych transformat Fouriera będziemy używać w rozdziale 7 do rozwiązywania popularnych w fizyce równań różniczkowych cząstkowych.

Można podać ścisły dowód związków (5.61), o ile założy się, że $f(x)$ jest odcinkami gładka i że $\int_{-\infty}^{\infty} |f(x)| dx$ istnieje (patrz Courant, Hilbert), ale my pozostawimy na razie tę kwestię (patrz § 9.6). Zajmiemy się natomiast zastosowaniem transformat Fouriera w fizyce.

Przykład. Ciekawy wynik można otrzymać, sprowadzając parę równań (5.61) do jednego równania

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_{-\infty}^{\infty} f(x') e^{-ikx'} dx' \right] e^{ikx} dk,$$

a następnie zamieniając kolejność całkowania

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x') \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')} dk \right] dx'.$$

Aby równanie to mogło być spełnione, wyrażenie w nawiasach kwadratowych musi być funkcją δ . W ten sposób wyprowadziliśmy reprezentację całkową funkcji δ :

$$\delta(x-x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x-x')} dk. \quad (5.63)$$

Powyższą równość należy rozumieć w ten sposób, że każda z jej stron po wycalkowaniu z dowolną funkcją da ten sam wynik. To „wyprowadzenie” wskazuje, że funkcje δ (pojmowane i używane w sposób naiwny) są konsekwencją niedozwolonej procedury polegającej na zamianie kolejności całkowania. Za jej użycie musimy pokutować i wprowadzać nowe dziwne obiekty matematyczne zwane funkcjami δ . Wszelako ich symboliczne użycie jest tak proste, że w sumie sprawa wydaje się opłacalna. I w pewnym sensie rzeczywiście jest; w matematyce i fizyce często potrzebne jest pogwałcenie starych reguł dla otrzymania nowych, które zawierają poprzednie jako przypadek szczególny.

Funkcja δ w trzech wymiarach ma postać

$$\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) \equiv \delta(x-x_0) \delta(y-y_0) \delta(z-z_0) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)} dk. \quad (5.64)$$

Z reprezentacji całkowej funkcji δ można skorzystać dla dowodu relacji zupełności (nazywanej niekiedy twierdzeniem Parsewała) całek Fouriera:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2 dx &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} g^*(k) e^{-ikx} dk \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} g(k') e^{ik'x} dk' = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk g^*(k) \int_{-\infty}^{\infty} dk' g(k') \left[\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(k'-k)x} dx \right] = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dk g^*(k) \int_{-\infty}^{\infty} dk' g(k') \delta(k'-k) = \int_{-\infty}^{\infty} g^*(k) g(k) dk = \int_{-\infty}^{\infty} |g(k)|^2 dk. \end{aligned}$$

Jeżeli na przykład x jest czasem t , a k częstotliwością ν , to twierdzenie Parsewała ma prostą interpretację fizyczną. Wygląda wówczas następująco

$$\int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|^2 dt = \int_{-\infty}^{\infty} |g(\nu)|^2 d\nu.$$

Jeżeli $f(t)$ oznacza natężenie emitowanego pola elektrycznego, to $|f(t)|^2$ jest proporcjonalne do całkowitej emitowanej mocy i całka jest miarą pełnej emitowanej energii. Prawa strona natomiast jest całką po wszystkich częstotliwościach z kwadratu amplitudy widma, $|g(\nu)|^2$, proporcjonalnego do energii wypromieniowanej na jednostkowy przedział częstotliwości. Zatem twierdzenie Parsewała wyraża w tym przypadku prawo zachowania energii.

Zanim przejdziemy do dalszych przykładów zastosowań, sformułujemy i udowodnimy twierdzenie o splocie dla transformat Fouriera. Będziemy z niego korzystać w rozdziale 7. Niech $f_1(x)$ i $f_2(x)$ będą dwiema funkcjami, których transformaty Fouriera, $g_1(k)$ i $g_2(k)$, dane są wzorem (5.61).

Wielkość

$$F(x) \equiv \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(t)f_2(x-t) dt$$

nazywa się *splotem* (konwolucją) funkcji f_1 i f_2 . Twierdzenie o splotcie mówi, że

$$F(x) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} g_1(k)g_2(k)e^{ikx} dk. \quad (5.65)$$

Po obliczeniu transformaty Fouriera tego równania, czyli rozwiązaniu go ze względu na iloczyn $g_1(k)g_2(k)$ widać, że twierdzenie o splotcie można wyrazić następująco: Transformata Fouriera splotu dwóch funkcji jest iloczynem transformat tych funkcji. Oznaczając transformatę Fouriera funkcji $F(x)$ przez $G(k)$, możemy to zapisać równaniem

$$G(k) = g_1(k)g_2(k).$$

Dowód wynika natychmiast z własności pary transformat Fouriera.

$$\begin{aligned} F(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(t)f_2(x-t) dt = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(t) \left[\frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} g_2(k)e^{+ik(x-t)} dk \right] dt = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(t)e^{-ikt} dt \right] g_2(k)e^{ikx} dk = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int_{-\infty}^{\infty} g_1(k)g_2(k)e^{ikx} dk, \end{aligned}$$

co kończy dowód.

Zbadamy teraz bardziej szczegółowo przykład użycia transformat Fouriera, a przy okazji policzymy kilka konkretnych transformat.

Rozważmy niethermiony jednowymiarowy oscylator harmoniczny, na który działa zmienna w czasie, ale przestrzennie jednorodna (niezależna od x) siła zewnętrzna $F(t)$. Mogłaby to być na przykład sprężyna zawieszona w windzie poruszającej się pionowo. Chcemy obliczyć energię przekazaną oscylatorowi przez taką siłę. Ograniczymy się przy tym do rozważania takich funkcji $F(t)$, dla których istnieją transformaty Fouriera.

Równanie ruchu ma postać

$$\ddot{x} + \omega^2 x = (1/m)F(t), \quad (5.66)$$

gdzie m jest masą, a ω częstością własną oscylatora. Po przekształceniu dostajemy

$$\dot{z} - i\omega z = (1/m)F(t), \quad (5.67)$$

gdzie $\dot{z} = \dot{x} + i\omega x$. Energia oscylatora w chwili t jest dana wzorem

$$E(t) = m\dot{x}^2/2 + m\omega^2 x^2/2 = (m/2)|z(t)|^2.$$

Załóżmy, że oscylator znajduje się początkowo w stanie spoczynku ($x = \dot{x} = z = 0$ dla $t \leq T_1$). Ponieważ ma on na początku energię zerową, wartość ΔE energii przekazanej oscylatorowi przez $F(t)$ jest $E(\infty)$. Obliczymy teraz tę wielkość, przy czym okaże się, że zależy ona w prosty sposób od transformaty Fouriera funkcji $F(t)$.

Mnożąc obie strony (5.67) przez $(-i\omega t)$ i całkując od T_1 do T_2 (dowolnie wybrane chwile czasu), dostajemy

$$\int_{T_1}^{T_2} (\dot{z} - i\omega z)e^{-i\omega t} dt = (1/m) \int_{T_1}^{T_2} F(t)e^{-i\omega t} dt.$$

Scałkowanie lewej strony przez części daje

$$z(T_2)e^{-i\omega T_2} = (1/m) \int_{T_1}^{T_2} F(t)e^{-i\omega t} dt,$$

gdzie skorzystaliśmy z warunku, że z znika dla $t \leq T_1$. Ponieważ $F(t)$ również znika dla $t \leq T_1$, możemy dolną granicę całkowania przesunąć do $-\infty$. Wówczas przekaz energii wyraża się wzorem

$$\begin{aligned} \Delta E &= \lim_{T_2 \rightarrow \infty} \frac{m}{2} |z(T_2)|^2 = \lim_{T_2 \rightarrow \infty} \frac{m}{2} \left| e^{i\omega T_2} \frac{1}{m} \int_{-\infty}^{T_2} F(t)e^{-i\omega t} dt \right|^2 = \\ &= \frac{1}{2m} \left| \int_{-\infty}^{\infty} F(t)e^{-i\omega t} dt \right|^2 \equiv \frac{1}{2m} |f(\omega)|^2, \end{aligned} \quad (5.68)$$

gdzie $f(\omega)$ jest transformatą Fouriera funkcji $F(t)$ braną w punkcie odpowiadającym częstotliwości własnej oscylatora:

$$f(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} F(t)e^{-i\omega t} dt.$$

Zatem $F(t)$ wyraża się przez $f(\omega)$ następująco

$$F(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(\omega)e^{i\omega t} d\omega.$$

Oba czynniki typu $(2\pi)^{-1/2}$ zebraliśmy tu w jeden i stąd ta para transformat różni się nieco wyglądem od symetrycznej postaci (5.61). Tak więc przekaz energii jest proporcjonalny do kwadratu modułu transformaty Fouriera siły w punkcie odpowiadającym częstotliwości własnej oscylatora. Przekaz energii następuje tylko przy częstotliwości rezonansowej ω , ponieważ tylko odpowiadająca jej składowa transformaty wchodzi do wzoru na ΔE .

Żeby rozwiązać to zadanie dla konkretnej postaci funkcji siły, musimy znaleźć jej transformatę Fouriera. Wyprowadzimy teraz kilka wzorów, które ułatwiają wyznaczanie transformat Fouriera. Niech

$$F_n(t) \equiv \frac{d^{n-1}F(t)}{dt^{n-1}}, \quad F_1(t) \equiv F(t),$$

$$f_n(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} F_n(t)e^{-i\omega t} dt.$$

Całkowanie przez części prowadzi do związku

$$f_n(\omega) = \left[\left(\frac{1}{i\omega} \right) f_{n+1}(\omega) - \frac{1}{i\omega} F_n(t)e^{-i\omega t} \right]_{-\infty}^{\infty}.$$

Oczywiście wzór ten niewiele daje, o ile nie jest spełniona równość $F_n(-\infty) = F_n(+\infty) = 0$. Wobec tego będziemy rozważać tylko przypadki, gdzie równość ta jest spełniona. Wówczas całkując wielokrotnie przez części możemy wyrazić $f_1(\omega)$, szukaną transformatę Fouriera, przez transformatę Fouriera którejś z wyższych pochodnych $F(t)$. Może to ułatwić wyzna-

czenie $f_1(\omega)$, o ile transformatę jednej z pochodnych jest łatwiej znaleźć niż samej funkcji. Dla $f_1(\omega) \equiv f(\omega)$ dostajemy

$$f(\omega) = \left(\frac{1}{i\omega}\right)^{n-1} f_n(\omega). \quad (5.69)$$

Indeks n jest tutaj dowolny, ale oczywiście przy korzystaniu z tego wzoru należy wybierać najmniejsze n , dla którego $f_n(\omega)$ jest znane.

Policzymy dla kilku przypadków siły danej różnymi funkcjami czasu jej transformatę Fouriera oraz przekaz energii do oscylatora, na który ta siła działa.

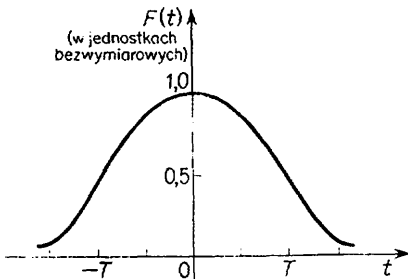
Przykład 1. *Impuls siły:* $F(t) = P_0 \delta(t)$.

$$\Delta E = \frac{1}{2m} \left| \int_{-\infty}^{\infty} P_0 \delta(t) e^{-i\omega t} dt \right|^2 = P_0^2 / 2m.$$

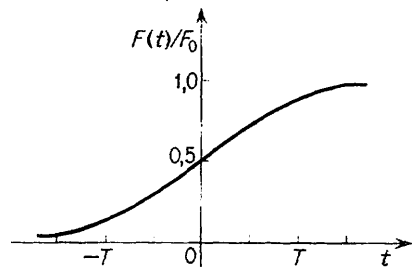
Ten sam wynik można otrzymać przez opuszczenie wyrazu $\omega^2 x$ w równaniu ruchu (5.66). Jest to tzw. przybliżenie impulsowe.

Przykład 2. *Siła gaussowska:* $F(t) = (P_0 / \sqrt{\pi\tau}) e^{-t^2/\tau^2}$ (rys. 5.3). Szerokość połówkowa rozkładu gaussowskiego jest tutaj $2\sqrt{\ln 2}\tau$. Transformatę Fouriera można policzyć przez uzupełnienie wykładnika do pełnego kwadratu:

$$\begin{aligned} f(\omega) &= \frac{P_0}{\sqrt{\pi\tau}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2/\tau^2} e^{-i\omega t} dt = \frac{P_0}{\sqrt{\pi\tau}} e^{-\omega^2\tau^2/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(t+i\omega\tau^2/2)^2/\tau^2} dt = \\ &= \frac{P_0}{\pi^{1/2}} e^{-\omega^2\tau^2/4} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} dx = P_0 e^{-\omega^2\tau^2/4}. \end{aligned}$$



Rys. 5.3.



Rys. 5.4.

Przy użyciu techniki, którą opiszemy w § 6.9, można pokazać, że taka formalna metoda obliczania całki jest poprawna. Warto zwrócić uwagę na fakt, że transformata Fouriera funkcji gaussowskiej jest funkcją gaussowską. Wartość energii przekazanej oscylatorowi jest

$$\Delta E = (P_0^2/2m) e^{-\omega^2\tau^2/2}.$$

W granicy krótkiego impulsu ($\tau \ll \omega^{-1}$), $\Delta E = (P_0^2/2m)$ jak w przykładzie 1. Należało tego oczekiwać, bowiem w granicy $\tau \rightarrow 0$ funkcja gaussowska przechodzi w funkcję δ (patrz przykład 2, § 5.3). W granicy adiabaticznej ($\tau \gg \omega^{-1}$) energia nie jest w ogóle przekazywana oscylatorowi, co także jest sensowne z fizycznego punktu widzenia.

Przykład 3. Całka prawdopodobieństwa:

$$F(t) = (F_0/\sqrt{\pi\tau}) \int_{-\infty}^t e^{-t'^2/\tau^2} dt'$$

(rys. 5.4). W tym przypadku całka Fouriera nie istnieje, ponieważ funkcja przyjmuje różną od zera wartość (F_0) dla $t \rightarrow \infty$. Możemy nadal korzystać z (5.68) i (5.69) dla obliczenia przekazu energii, jeżeli założymy, że stała siła zostaje adiabaticznie wyłączona dla bardzo dużych czasów. Nie wprowadzi to zmiany do naszego przekazu energii, a spowoduje zbieżność całki Fouriera. Wyznaczyliśmy już transformatę Fouriera funkcji

$$dF(t)/dt \equiv F_2(t) = (F_0/\sqrt{\pi\tau})e^{-t^2/\tau^2}$$

w przykładzie 2. Korzystając z (5.69) dla $n = 2$ oraz (5.68), otrzymujemy przekaz energii

$$\Delta E = \frac{1}{2m} |f(\omega)|^2 = \frac{1}{2m} \left| \left(\frac{1}{i\omega} \right) f_2(\omega) \right|^2 = \frac{1}{2m} (F_0/\omega)^2 e^{-\omega^2\tau^2/2}.$$

Znowu w granicy adiabaticznej $\Delta E \rightarrow 0$, a w granicy krótkiego impulsu $\Delta E \rightarrow 1/2m(F_0/\omega)^2$. W tym ostatnim przypadku masa zostaje nagle przesunięta na odległość $l_0 = (F_0/m\omega^2)$ od położenia równowagi, a więc uzyskuje energię $\left(\frac{1}{2}m\omega^2 l_0^2\right)$ odpowiadającą maksymalnemu wychyleniu. Ze względu na swoją bezwładność nie nadaża ona w tej granicy za poruszającym się błyskawicznie położeniem równowagi. Tego typu zachowanie graniczne przekazu energii w granicy krótkiego impulsu powinno wystąpić również w zadaniach 7 i 8.

5.8. FUNKCJE KULISTE I STOWARZYSZONE FUNKCJE LEGENDRE'A

Opierając się na twierdzeniu Weierstrassa dla jednej zmiennej, udowodniliśmy zupełność wielomianów Legendre'a. Z uogólnienia tegoż twierdzenia na przypadek dwóch zmiennych otrzymaliśmy zupełność funkcji trygonometrycznych. Zajmiemy się teraz twierdzeniem Weierstrassa dla trzech zmiennych i pokażemy, że wynika z niego zupełność funkcji kulistych. Twierdzenie mówi, że każda funkcja F trzech zmiennych x, y, z (czyli jednej zmiennej wektorowej \mathbf{r}) daje się aproksymować jednostajnie ciągiem sum częściowych następującej postaci:

$$F(\mathbf{r}) = \lim_{M \rightarrow \infty} F_M(\mathbf{r}) = \lim_{M \rightarrow \infty} \sum_{m,n,p=0}^M c_{mnp}^{(M)} x_1^m x_2^n x_3^p. \quad (5.70)$$

Możemy także wyrazić $F_M(\mathbf{r})$ przy pomocy trzech innych zmiennych:

$$\begin{aligned} z_1 &\equiv x_1 + ix_2 = r \sin\Theta e^{i\phi}, \\ z_2 &\equiv x_1 - ix_2 = r \sin\Theta e^{-i\phi}, \\ z_3 &\equiv x_3 = r \cos\Theta, \end{aligned}$$

stanowiących kombinacje liniowe x_1, x_2, x_3 .

$$F_M(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha,\beta,\gamma=0}^M A_{\alpha\beta\gamma}^{(M)} z_1^\alpha z_2^\beta z_3^\gamma = \sum_{l=0}^{3M} r^l \sum_{\substack{\alpha,\beta,\gamma=0 \\ (\alpha+\beta+\gamma=l)}}^M A_{\alpha\beta\gamma}^{(M)} e^{i(\alpha-\beta)\phi} \sin^{(\alpha+\beta)}\Theta \cos^\gamma\Theta. \quad (5.71)$$

W wyrażeniu tym zamieniliśmy ogólną sumę po trzech wskaźnikach na sumę z warunkiem ubocznym, zgodnie z którym wybieramy tylko kombinacje wskaźników dające w sumie liczbę całkowitą l . Dzięki temu jednak, że następnie sumujemy po wszystkich możliwych wartościach l , efekt ograniczenia zostaje skompensowany i wynik nie ulega zmianie.

Ograniczmy teraz dziedzinę $F(\mathbf{r})$ do powierzchni kuli jednostkowej ($r = 1$) i położmy $(\alpha - \beta) = m$. Ponieważ α , β i γ są wszystkie dodatnie lub równe zero, więc

$$\alpha + \beta = m + 2\beta \geq 0.$$

Również

$$\alpha + \beta \geq |\alpha - \beta| = |m| \Rightarrow \alpha + \beta - |m| = m - |m| + 2\beta \geq 0.$$

Ponadto $(\alpha + \beta - |m|)$ jest zawsze parzyste, bo 2β jest parzyste, a $m - |m|$ jest albo równe zero (dla $m \geq 0$), albo $-2m$ (dla $m < 0$). Przepiszmy teraz (5.71) w postaci

$$F_M(\Theta, \phi) = \sum_{l=0}^{3M} \sum_{\substack{\alpha, \beta, \gamma=0 \\ (\alpha+\beta+\gamma=l)}}^M A_{\alpha\beta\gamma}^{(M)} e^{im\phi} \sin^{(\alpha+\beta-|m|)}\Theta \cos^\gamma\Theta \sin^{|m|}\Theta.$$

Oczywiście

$$\sin^{(\alpha+\beta-|m|)}\Theta \cos^\gamma\Theta = (1 - \cos^2\Theta)^{(\alpha+\beta-|m|)/2} \cos^\gamma\Theta,$$

co jest wielomianem w $\cos\Theta$ stopnia $\alpha + \beta + \gamma - |m| = l - |m|$ (dzięki parzystości $(\alpha + \beta - |m|)$). Oznaczając ten wielomian przez $f_{lm}(\cos\Theta)$, dostajemy

$$F_M(\Theta, \phi) = \sum_{l=0}^{3M} \sum_m B_{lm}^{(M)} e^{im\phi} \sin^{|m|}\Theta f_{lm}(\cos\Theta).$$

Nie został tu jeszcze określony zakres sumowania po m . Ponieważ $m = \alpha - \beta$, więc $m \leq l$. Z faktu, że wskaźniki α , β , γ są nieujemne, wynika dodatkowo nierówność $\alpha + \beta + \gamma - |m| = l - |m| \geq 0$. Zatem m pod znakiem sumy musi przyjmować wartości ograniczone nierównością $|m| \leq l$. Pełny zapis ostatniego równania jest

$$F_M(\Theta, \phi) = \sum_{l=0}^{3M} \sum_{m=-l}^{m=l} B_{lm}^{(M)} e^{im\phi} \sin^{|m|}\Theta f_{lm}(\cos\Theta). \quad (5.72)$$

Zatem ciąg funkcji

$$\bar{Y}_{lm}(\Theta, \phi) \equiv e^{im\phi} \sin^{|m|}\Theta f_{lm}(\cos\Theta),$$

gdzie $f_{lm}(\cos\Theta)$ jest wielomianem stopnia $(l - |m|)$ w $\cos\Theta$, aproksymuje jednostajnie dowolną funkcję ciągłą określoną na powierzchni kuli jednostkowej, tzn. dla $0 \leq \Theta \leq \pi$ i $0 \leq \phi \leq 2\pi$. Jeżeli potrafimy teraz skonstruować z tego zbioru ortonormalny zbiór funkcji, to przez rozumowanie analogiczne jak w przypadku wielomianów Legendre'a i funkcji trygonometrycznych dojdziemy do wniosku, że zbiór ten jest zupełny. Jest to po prostu nowy przykład zastosowania naszych podstawowych wyników dotyczących zupełności: jeżeli potrafimy dowolną funkcję w przestrzeni Hilberta aproksymować jednostajnie ciągiem sum częściowych utworzonych z kombinacji liniowych pewnego ortonormalnego zbioru funkcji, to zbiór ten jest zupełny w przestrzeni Hilberta.

Tak więc celem naszym jest teraz znalezienie funkcji Y_{lm} spełniających związek

$$\int_{\Omega} Y_{l'm'}^* Y_{lm} d\Omega \equiv \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\Theta d\Theta Y_{l'm'}^* Y_{lm} = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (5.73)$$

Tak jak w przypadku wielomianów Legendre'a \bar{P}_l , warunek ten wyznacza jednoznacznie funkcje Y_{lm} z dokładnością do czynnika fazowego. Zatem może istnieć tylko jeden zupełny zbiór funkcji ortonormalnych określonych na powierzchni kuli jednostkowej. Kilka spośród funkcji Y_{lm} obliczymy explicite.

Dla $l = m = 0$ dostajemy $Y_{00} = (1/4\pi)^{1/2}$. Dla $l = 1$ m może być równe $-1, 0$ lub $+1$. Zważywszy, że $f_{lm}(\cos \Theta)$ jest wielomianem stopnia $l - |m|$ w $\cos \Theta$, dostajemy

$$\begin{aligned} Y_{10} &= a_1 \cos \Theta + a_2, \\ Y_{11} &= a_3 e^{i\phi} \sin \Theta, \\ Y_{1,-1} &= a_4 e^{-i\phi} \sin \Theta. \end{aligned}$$

Stałe a_1, a_2, a_3, a_4 wyznaczamy z warunku ortonormalności:

$$0 = \delta_{01} \delta_{00} = \int Y_{00}^* Y_{10} d\Omega = \frac{1}{(4\pi)^{1/2}} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\Theta \sin \Theta (a_1 \cos \Theta + a_2) \Rightarrow a_2 = 0,$$

$$1 = \delta_{11} \delta_{00} = \int |Y_{10}|^2 d\Omega \Rightarrow a_1 = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2}.$$

Podobnie $a_3 = a_4 = -(3/8\pi)^{1/2}$. Wybieramy znak minus zgodnie z przyjmowaną dalej konwencją w (5.75). Zatem pierwsze elementy zupełnego ortonormalnego zbioru funkcji na powierzchni kuli jednostkowej są

$$\begin{aligned} Y_{00} &= \left(\frac{1}{4\pi}\right)^{1/2}, & Y_{11} &= -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} e^{i\phi} \sin \Theta, \\ Y_{10} &= \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \Theta, & Y_{1,-1} &= -\left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} e^{-i\phi} \sin \Theta. \end{aligned} \quad (5.74)$$

Dla danego l liczba funkcji Y_{lm} wynosi $2l + 1$. Funkcje te nazywane są *funkcjami kulistymi*. Są one czymś w rodzaju dwuwymiarowego uogólnienia i zarazem kombinacji funkcji Fouriera z wielomianami Legendre'a, bowiem dla *powierzchni kuli* rola ich jest taka, jak funkcji Fouriera i wielomianów Legendre'a dla odpowiednich przedziałów liniowych.

Podamy teraz ogólny wzór na Y_{lm} . Ponieważ wiemy, że Y_{lm} wyznaczone są jednoznacznie, dla dowodu prawdziwości wzoru wystarczy pokazać, że spełniony jest związek ortonormalności (tak jak w przypadku wielomianów Legendre'a). Wzór ma postać

$$\begin{aligned} Y_{lm}(\Theta, \phi) &= (-1)^m \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\cos \Theta) e^{im\phi}, \quad m \geq 0, \\ Y_{l,-m} &= (-1)^m Y_{lm}^*, \quad m \geq 0. \end{aligned} \quad (5.75)$$

Występujące tutaj funkcje

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x), \quad m \geq 0, \quad (5.76)$$

nazywamy *stowarzyszonymi funkcjami Legendre'a*. W szczególności funkcje

$$Y_{l0}(\Theta, \phi) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{2l+1}{2}\right)^{1/2} P_l(\cos \Theta)$$

tworzą zbiór ortonormalny na powierzchni kuli jednostkowej.

Pokażemy najpierw, że jeżeli u jest rozwiązaniem równania różniczkowego Legendre'a co oznacza, że

$$(1-x^2)u'' - 2xu' + l(l+1)u = 0, \quad (5.77)$$

to $v \equiv (1-x^2)^{m/2} (d^m/dx^m)u$ dla m całkowitych nieujemnych jest rozwiązaniem równania

$$(1-x^2)v'' - 2xv' + [l(l+1) - m^2/(1-x^2)]v = 0, \quad (5.78)$$

znanego jako *stowarzyszone równanie Legendre'a*. Niech $d^m u/dx^m \equiv d^m u \equiv w$. Wówczas

$$v = (1-x^2)^{m/2} w, \quad v' = (1-x^2)^{m/2} w' - mx(1-x^2)^{(m/2)-1} w,$$

$$v'' = (1-x^2)^{m/2} w'' - 2mx(1-x^2)^{(m/2)-1} w' - m(1-x^2)^{(m/2)-1} w + mx^2(m-2)(1-x^2)^{(m/2)-2} w.$$

Po podstawieniu tego do (5.78) lewa strona przechodzi w wyrażenie

$$(1-x^2)d^{m+2}u - 2(m+1)xd^{m+1}u + [l(l+1) - m(m+1)]d^m u. \quad (5.79)$$

Pokażemy, że można to też zapisać w postaci

$$d^m [(1-x^2)u'' - 2xu' + l(l+1)u], \quad (5.80)$$

co jest równe zeru na mocy równania (5.77). Dowodziłoby to, że istotnie $v = (1-x^2)^{m/2} \times (d^m u/dx^m)$ jest rozwiązaniem stowarzyszonego równania Legendre'a. Korzystając ze wzoru Leibniza (5.42), dostajemy

$$d^m [(1-x^2)u''] = \sum_{n=0}^m \binom{m}{n} d^n (1-x^2) d^{m-n+2} u = (1-x^2) d^{m+2} u - 2xm d^{m+1} u - m(m-1) d^m u$$

oraz

$$\frac{d^m}{dx^m} [-2xu'] = -2xd^{m+1}u - 2md^m u.$$

Wzory te po wstawieniu do (5.80) wykazują równoważność (5.80) i (5.79) i tym samym został zakończony dowód, że funkcje

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} (1-x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l \quad (5.81)$$

są rozwiązaniami stowarzyszonego równania Legendre'a (5.78). Zauważmy, że $P_l^0(x) = P_l(x)$.

Przy pomocy tej samej procedury, która poprzednio doprowadziła nas do relacji ortonormalności dla wielomianów Legendre'a, możemy pokazać, że

$$\int_{-1}^1 P_l^m(x) P_l^m(x) dx = \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \frac{2}{2l+1} \delta_{ll}. \quad (5.82)$$

Wynika stąd natychmiast wartość stałej normalizacyjnej dla Y_{lm} (równanie 5.75), ponieważ całkowanie po ϕ dodaje jedynie czynnik 2π . Oczywiście pozostaje wybór czynnika fazowego; podany przez nas jest zazwyczaj przyjmowany w literaturze fizycznej. Trzeba jednak bardzo uważać, bo różni autorzy przyjmują często różne czynniki fazowe w funkcjach kulistych. $P_l^m(x)$ nie są konkurencyjnym ortonormalnym zbiorem wielomianów na przedziale $[-1, 1]$, podważającym wiarę w jednoznaczność wielomianów Legendre'a, z tej prostej przyczyny, że nie są to w ogóle wielomiany! Widać to natychmiast z (5.81).

Funkcje $P_l^m(x)$ nie są jedynymi rozwiązaniami stowarzyszonego równania Legendre'a. Tak jak w równaniu Legendre'a (5.77), tak i tutaj istnieje drugi zbiór rozwiązań. Tutaj zresztą również nie są one skończone dla $x = \pm 1$.

Podamy teraz pożyteczne twierdzenie o dodawaniu funkcji kulistych. Jeżeli dwa wektory $\mathbf{x}(r, \Theta, \phi)$ i $\mathbf{x}'(r', \Theta', \phi')$ tworzą ze sobą kąt γ , to

$$P_l(\cos \gamma) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\Theta', \phi') Y_{lm}(\Theta, \phi), \quad (5.83)$$

gdzie

$$\cos \gamma = \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}'}{|\mathbf{x}| |\mathbf{x}'|} = \cos \Theta \cos \Theta' + \sin \Theta \sin \Theta' \cos(\phi - \phi'). \quad (5.84)$$

Wzór ten pozwala wyrazić wielomian Legendre'a stopnia l w zmiennej $\cos \Theta$ przy pomocy sumy iloczynów funkcji kulistych o argumentach Θ, ϕ i Θ', ϕ' . Nie będziemy podawać dowodu tego twierdzenia. Zauważmy jednak, że w przypadku $l = 1$ równanie (5.83) przechodzi w dobrze znany związek (5.84).

Jest wiele innych własności funkcji kulistych i stowarzyszonych funkcji Legendre'a, które otrzymuje się jako bezpośrednie, choć matematycznie skomplikowane, uogólnienie tożsamości spełnianych przez wielomiany Legendre'a. Nie będziemy się jednak już nimi zajmować.

Resztę tego paragrafu poświęcimy badaniu funkcji kulistych jako rozwiązań części kątowej równania Laplace'a we współrzędnych sferycznych. Ponieważ część kątowa laplasjanu prawie pokrywa się z kwantowomechanicznym operatorem kwadratu momentu pędu, więc funkcje kuliste odgrywają bardzo ważną rolę w mechanice kwantowej. Dokładnie biorąc, operator reprezentujący kwadrat całkowitego momentu pędu ma postać

$$L^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right). \quad (5.85)$$

Sprawdźmy najpierw, dlaczego jest to operator momentu pędu. Klasycznie $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Jeżeli wykonamy tutaj normalne podstawienie Schrödingera dla \mathbf{p} : $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla$, dostaniemy

$$\begin{aligned} L_x &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ L_y &= -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ L_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (5.86)$$

Przechodzimy teraz do współrzędnych sferycznych. Równania transformacji współrzędnych są następujące:

$$\begin{aligned} x &= r \sin \Theta \cos \phi, & r &= (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}, \\ y &= r \sin \Theta \sin \phi, & \phi &= \arctg y/x, \\ z &= r \cos \Theta, & \Theta &= \arctg \frac{(x^2 + y^2)^{1/2}}{z}. \end{aligned}$$

Zatem

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \Theta} \frac{\partial \Theta}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \phi} \frac{\partial \phi}{\partial x} = \sin \Theta \cos \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \Theta \cos \phi}{r} \frac{\partial}{\partial \Theta} - \frac{1}{r} \frac{\sin \phi}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

i podobnie

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} &= \sin \Theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \Theta \sin \phi \frac{\partial}{\partial \Theta} + \frac{1}{r} \frac{\cos \phi}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \phi}, \\ \frac{\partial}{\partial z} &= \cos \Theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \Theta}{r} \frac{\partial}{\partial \Theta}. \end{aligned}$$

Wstawiając te związki do (5.86) po pewnych przekształceniach dostajemy

$$\begin{aligned} L_x &= +i\hbar \left(\sin \phi \frac{\partial}{\partial \Theta} + \cos \phi \operatorname{ctg} \Theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ L_y &= -i\hbar \left(\cos \phi \frac{\partial}{\partial \Theta} - \sin \phi \operatorname{ctg} \Theta \frac{\partial}{\partial \phi} \right), \\ L_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}. \end{aligned} \quad (5.87)$$

Tworzymy z tych wielkości operator L^2 :

$$\begin{aligned} L^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 = -\hbar^2 \left[\frac{\partial^2}{\partial \Theta^2} + \operatorname{ctg} \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} + (1 + \operatorname{ctg}^2 \Theta) \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] = \\ &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \end{aligned} \quad (5.88)$$

Widać stąd (patrz równanie 1.68), że operator L^2 jest proporcjonalny do części kątowej laplasjanu we współrzędnych sferycznych:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2}. \quad (5.89)$$

Wobec tego możemy równanie Laplace'a zapisać w postaci

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) - \frac{L^2 \psi}{\hbar^2 r^2} = 0 \quad (5.90)$$

lub też

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = \frac{1}{\hbar^2} L^2 \psi.$$

Dla rozwiązania tego równania założymy, że $\psi(r, \Theta, \phi)$ jest iloczynem dwóch funkcji, z których jedna zależy tylko od r , a druga od Θ i ϕ :

$$\psi(r, \Theta, \phi) = R(r)Y(\Theta, \phi).$$

Podstawiając taką postać rozwiązania do (5.90) i dzieląc obie strony przez $\psi = RY$, otrzymujemy

$$\frac{1}{R(r)} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R(r)}{\partial r} \right) = \frac{1}{\hbar^2 Y(\Theta, \phi)} L^2 Y(\Theta, \phi).$$

Lewa strona tego równania jest funkcją tylko zmiennej r , a prawa — funkcją tylko θ i ϕ . Sytuacja taka jest możliwa tylko wtedy, gdy każda ze stron jest równa tej samej stałej (w przeciwnym bowiem wypadku moglibyśmy np. zmieniając r zmieniać lewą stronę, a prawa pozostawałaby bez zmiany jako niezależna od r). Nazwijmy tę stałą λ . Równanie wyjściowe można teraz rozbić na dwa niezależne równania

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) = \lambda R(r), \quad (5.91)$$

$$L^2 Y(\theta, \phi) = \hbar^2 \lambda Y(\theta, \phi). \quad (5.92)$$

Pokażemy dalej, że rozwiązaniem (5.92) są właśnie Y_{lm} i $\lambda = l(l+1)$. Innymi słowy, funkcje kuliste są wektorami własnymi operatora L^2 , odpowiadającymi wartościom własnym $\hbar^2 l(l+1)$. Dla $\lambda = l(l+1)$ równanie radialne (5.91) można rozwiązać przy pomocy podstawienia $R(r) = U(r)/r$. Przechodzi ono wówczas w równanie

$$\frac{d^2}{dr^2} U(r) - l(l+1) \frac{U(r)}{r^2} = 0, \quad (5.93)$$

którego rozwiązaniem jest funkcja

$$U(r) = rR(r) = Ar^{l+1} + Br^{-l}, \quad (5.94)$$

gdzie A i B są stałymi. W połączeniu z funkcjami kulistymi funkcje te tworzą rozwiązanie równania Laplace'a we współrzędnych sferycznych. Każda funkcja spełniająca równanie Laplace'a nosi nazwę funkcji harmonicznej. Stąd też często funkcje kuliste nazywa się „harmonikami sferycznymi”: funkcje te są harmoniczne, ponieważ spełniają część kątową równania Laplace'a, a przy tym są określone na *jednostkowej sferze* (powierzchni kuli).

Najogólniejsze rozwiązanie równania Laplace'a jest kombinacją liniową rozwiązań odpowiadających konkretnym wartościom l i m :

$$\psi(r, \theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l [A_{lm} r^l + B_{lm} r^{-l-1}] Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (5.95)$$

Do ciekawych wyników prowadzi dalsze rozseparowanie zmiennych w (5.92). Niech $Y_{lm} = \Phi(\phi)P(\theta)$. Podstawiając to do równania i dzieląc przez $Y = \Phi P$, dostajemy

$$-\frac{\sin^2 \theta}{P} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP}{d\theta} \right) - l(l+1) \sin^2 \theta = \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\phi^2}.$$

Znowu obie strony równania muszą być równe stałej. Nazwijmy ją $-m^2$. Dostajemy wówczas dwa równania

$$\frac{d^2 \Phi}{d\phi^2} = -m^2 \Phi, \quad (5.96)$$

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP}{d\theta} \right) + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] P = 0. \quad (5.97)$$

Równanie azymutalne (zależne od ϕ) (5.96) można natychmiast rozwiązać:

$$\Phi(\phi) = A e^{\pm i m \phi}. \quad (5.98)$$

Aby $\Phi(\phi)$ było jednoznaczną funkcją w przedziale $[0, 2\pi]$, m musi być liczbą całkowitą. Wynik ten zresztą przewidzieliśmy, dobierając odpowiednią postać stałej. Równanie

w zmiennej θ , (5.97), po prostej zamianie zmiennych przybierze znaną nam formę. Podstawiając $\cos \theta = x$, skąd $dx = d(\cos \theta)$ i $\sin \theta = (1 - x^2)^{1/2}$, dostajemy

$$(1 - x^2)P'' - 2xP' + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2} \right] P = 0, \quad (5.99)$$

co, dzięki naszemu poprzedniemu wyborowi $\lambda = l(l+1)$, jest po prostu stowarzyszonym równaniem Legendre'a (5.78). Rozwiązaniami jego są stowarzyszone funkcje Legendre'a $P(x) = P_l^m(x)$, dane wzorem (5.81). Potwierdza to ostatecznie nasze poprzednie słowa, że funkcje kuliste są wektorami własnymi L^2 odpowiadającymi wartościom własnym $\hbar^2 l(l+1)$.

Trzeba tu dodać, że w gruncie rzeczy znaleźliśmy dwa rozwiązania równania różniczkowego rzędu drugiego (5.91), a mianowicie $R(r) = r^l$ i $R(r) = r^{-l-1}$. Podobna sytuacja miała miejsce dla równania (5.96), gdzie oba rozwiązania dane są wzorem (5.98). Natomiast dla (5.99), które także jest równaniem różniczkowym drugiego rzędu, podaliśmy tylko jedno rozwiązanie, $P_l^m(x)$. Otóż oczywiście i tutaj istnieje drugie rozwiązanie tak jak w poprzednich przypadkach. Jest ono jednak rzadko używane w zagadnieniach fizycznych ze względu na swoje osobliwości w punktach $x = \pm 1$ ($\theta = 0, \pi$) i zazwyczaj musi być odrzucone dla spełnienia warunków brzegowych.

Na ogół w podręcznikach wprowadza się wszystkie te funkcje przy okazji rozwiązywania równań różniczkowych spotykanych w fizyce. Podejście nasze było zupełnie inne. Główny nacisk kładliśmy cały czas na własność zupełności tych zbiorów funkcji, traktując fakt, że są one rozwiązaniami pewnych równań różniczkowych, jako ich własność drugorzędą.

5.9. WIELOMIANY HERMITE'A

W następnym paragrafie będziemy badać własności różnych zbiorów ortogonalnych wielomianów, rozważając je jako przypadki szczególne pewnej ogólnej teorii. Aby jednak teorię tę uczynić bardziej przejrzystą, zajmiemy się najpierw wyprowadzeniem w sposób indukcyjny kilku własności wielomianów Hermite'a. Po raz pierwszy spotkaliśmy te wielomiany przy analizie zagadnienia własnego kwantowomechanicznego oscylatora harmonicznego (patrz § 3.10).

Wielomiany Hermite'a $H_n(x)$ są wielomianami ortogonalnymi w nieskończonym przedziale $(-\infty, \infty)$ z wagą e^{-x^2} . Zatem dla $m \neq n$

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(x) H_m(x) e^{-x^2} dx = 0. \quad (5.100)$$

Tym samym różnią się one dwiema ważnymi własnościami od rozważanych dotychczas ortonormalnych zbiorów funkcji. Po pierwsze, są określone od $-\infty$ do $+\infty$, a więc nie stosuje się do nich twierdzenie Weierstrassa, które jest słuszne tylko dla przedziałów skończonych. Po drugie, są ortogonalne z pewną wagą (patrz definicja 5.2). Najwygodniej jest zdefiniować wielomiany Hermite'a przy pomocy funkcji tworzącej $\psi(x, t)$:

$$\psi(x, t) \equiv e^{-t^2 + 2tx} = e^{x^2} e^{-(t-x)^2} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \frac{H_n(x)}{n!} t^n. \quad (5.101)$$

Z tak podanej implicite definicji można wyprowadzić explicite wzór na $H_n(x)$:

$$\begin{aligned} H_n(x) &= \left[\frac{\partial^n \psi(x, t)}{\partial t^n} \right]_{t=0} = \left[e^{x^2} \frac{\partial^n}{\partial t^n} e^{-(t-x)^2} \right]_{t=0} = \\ &= \left[e^{x^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2} \right]_{y=-x} = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}. \end{aligned} \quad (5.102)$$

Jest to wzór Rodriguesa dla wielomianów Hermite'a. Widać z niego, że istotnie są to wielomiany stopnia n .

Wyprowadzimy teraz kilka związków rekurencyjnych dla wielomianów Hermite'a. Ze wzoru spełnianego przez funkcję tworzącą

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} = 2t\psi(x, t)$$

wynika, że

$$\sum_n \frac{H'_n(x) t^n}{n!} = \sum_n \frac{2H_n(x) t^{n+1}}{n!}.$$

Porównując współczynniki przy jednakowych potęgach t , dostajemy

$$H'_n(x) = 2nH_{n-1}(x), \quad n \geq 1. \quad (5.103)$$

Podobnie z równości

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} + 2(t-x)\psi(x, t) = 0$$

wynika związek

$$H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0, \quad n \geq 1. \quad (5.104)$$

Czytelnik może sam pokazać, że poprzez różniczkowanie związków rekurencyjnych i branie ich odpowiedniej kombinacji otrzymuje się następujące równanie różniczkowe:

$$H''_n(x) - 2xH'_n(x) + 2nH_n(x) = 0, \quad n \geq 0. \quad (5.105)$$

Wiele jest możliwych sposobów udowodnienia ortogonalności $H_n(x)$ z wagą e^{-x^2} . Metody, z których korzystaliśmy w przypadku wielomianów Legendre'a — wielokrotne całkowanie przez części i dowód oparty na postaci równania różniczkowego — dadzą się i tutaj zastosować. Aby jednak zademonstrować nową technikę, wybierzemy metodę bazującą na własnościach funkcji tworzącej. Rozważmy całkę

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2 + 2tx} e^{-s^2 + 2sx} e^{-x^2} dx = \sum_{n, m=0}^{\infty} \frac{t^n s^m}{n! m!} \int_{-\infty}^{\infty} H_n H_m e^{-x^2} dx.$$

Chcemy dowieść, że całka po prawej stronie jest zerem dla $m \neq n$. Całka po lewej stronie jest równa

$$I = e^{-(t^2 + s^2)} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2 + 2(s+t)x} dx = e^{-(t^2 + s^2)} \pi^{1/2} e^{(s+t)^2} = \pi^{1/2} e^{2st}$$

(tutaj całkę obliczyliśmy, dopełniając wykładnik do pełnego kwadratu). Rozwijając I na szereg Taylora, dostajemy

$$I = \pi^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2st)^n}{n!} = \sum_{n, m=0}^{\infty} \frac{t^n s^m}{n! m!} \int_{-\infty}^{\infty} H_n H_m e^{-x^2} dx.$$

Z porównania współczynników przy równych potęgach s i t otrzymujemy

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n H_m e^{-x^2} dx = \pi^{1/2} 2^n n! \delta_{nm}. \quad (5.106)$$

Tak więc funkcje $u_n(x) = N_n H_n(x) e^{-x^2/2}$, gdzie $N_n = (1/\pi^{1/2} 2^n n!)^{1/2}$, są ortonormalne w przedziale $(-\infty, \infty)$. (Funkcje $u_n(x)$ są funkcjami własnymi oscylatora kwantowego). Równoważne temu jest stwierdzenie, że zbiór wielomianów Hermite'a $H_n(x)$ jest ortonormalny w przedziale $(-\infty, \infty)$ z wagą $N_n^2 e^{-x^2}$.

Inny ważny zbiór stanowią wielomiany Laguerre'a, $L_n(x)$. Są one ortogonalne w przedziale $[0, \infty)$ z wagą e^{-x} , to znaczy

$$\int_0^{\infty} L_n(x) L_m(x) e^{-x} dx = 0, \quad \text{dla } n \neq m. \quad (5.107)$$

Wszystkie rozważania, które przeprowadziliśmy dla wielomianów Hermite'a, można powtórzyć dla wielomianów Laguerre'a (patrz zadanie 6.36).

5.10. UKŁADY STURMA-LIOUVILLE'A — WIELOMIANY ORTOGONALNE

Wszystkie badane przez nas dotychczas funkcje specjalne są rozwiązaniami równań różniczkowych. Choć równania te, tak jak i ich rozwiązania, pozornie bardzo się różnią, mają w rzeczywistości wiele cech wspólnych. W tym paragrafie będziemy je rozważać jako przypadki szczególne pewnej ogólniejszej teorii.

Wszystkie badane równania są liniowymi równaniami różniczkowymi drugiego rzędu dającymi się zapisać w postaci

$$Lu = \lambda u, \quad (5.108)$$

gdzie

$$L = \alpha(x) \frac{d^2}{dx^2} + \beta(x) \frac{d}{dx} + \gamma(x). \quad (5.109)$$

Tutaj λ jest stałą, a α , β i γ — funkcjami rzeczywistymi zmiennej x . Operatory L mają pewną ważną własność, o której dotychczas nie wspomnieliśmy. Są one mianowicie *hermitowskie*, jeżeli (1) zdefiniujemy iloczyn wewnętrzny wzorem

$$(f, g) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) g(x) w(x) dx \quad (5.110)$$

(gdzie waga $w(x) \geq 0$) i (2) funkcje u spełniają odpowiednie warunki graniczne. Nie sprecyzowaliśmy na razie wyboru $w(x)$ i jak się okaże, dzięki tej właśnie swobodzie wyboru teoria nasza będzie dostatecznie ogólna, aby obejmować wszystkie poprzednio rozpatrywane przypadki.

W mechanice kwantowej wszystkie operatory odpowiadające obserwabdom fizycznym są hermitowskie. Przypomnijmy, że operator hermitowski H spełnia równanie

$$(Hx, y) = (x, Hy),$$

gdzie x i y są wektorami*.

* Matematycy nazywają operatory H , spełniające związek $(Hx, y) = (x, Hy)$ w nieskończenie wymiarowej przestrzeni wektorowej, *operatorami symetrycznymi*. My będziemy je określać mianem operatorów hermitowskich. Zgodnie z wynikami rozdziału 4, mają one rzeczywiste wartości własne i ortonormalne funkcje własne.

Przypuśćmy teraz, że f i g są dwoma wektorami (funkcjami) w przestrzeni Hilberta. Przy zdefiniowanym wyżej iloczynie wewnętrznym warunek hermitowskości L ma postać

$$(Lf, g) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} (Lf(x))^* g(x) w(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (f(x))^* (Lg(x)) w(x) dx \equiv (f, Lg). \quad (5.111)$$

Będziemy się odtąd zajmować tylko takimi operatorami.

W celu sprawdzenia hermitowskości L obliczamy niezależnie (f, Lg) i (Lf, g) , a następnie odejmujemy. Operator L jest hermitowski wtedy i tylko wtedy, gdy różnica jest równa zeru. W naszym przypadku

$$(f, Lg) = \int_{-\infty}^{\infty} w f^* \alpha g' dx + \int_{-\infty}^{\infty} w f^* \beta g' dx + \int_{-\infty}^{\infty} w f^* \gamma g dx.$$

Z całkowania przez części dostajemy

$$(f, Lg) = [w\alpha f^* g']_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} [(w\alpha)' f^* g' + (w\alpha) f^* g''] dx + \\ + [w\beta f^* g']_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} [(w\beta)' f^* g' + (w\beta) f^* g''] dx + \int_{-\infty}^{\infty} w f^* \gamma g dx.$$

Odejmujemy od tego wyrażenie na (Lf, g) , które można otrzymać zamieniając f^* i g w powyższym wzorze i otrzymujemy równość

$$(f, Lg) - (Lf, g) = [w\alpha(f^* g' - g f'^*)]_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} [(w\alpha)' - (w\beta)](f^* g' - g f'^*) dx.$$

Ażeby L był hermitowski, wyrażenie to musi zniknąć dla każdego f i g . Zatem warunkiem koniecznym i dostatecznym hermitowskości L jest

$$1. \quad [w\alpha(f^* g' - g f'^*)]_{-\infty}^{\infty} = 0, \quad (5.112)$$

$$2. \quad (w\alpha)' = w\beta. \quad (5.113)$$

Widać, że waga $w(x)$ gra zasadniczą rolę w warunku hermitowskości. Istotnie, drugie z tych równań wyznacza $w(x)$ z dokładnością do stałego czynnika, ponieważ $\alpha(x)$ i $\beta(x)$ są znanymi funkcjami. Pierwsze równanie natomiast ilustruje znaczenie warunków brzegowych przy badaniu hermitowskości. Jeśli np. funkcje, na które działa operator L , znikają dostatecznie szybko w nieskończoności, to pierwszy warunek jest spełniony. Czytelnik może sam łatwo pokazać, że jest wiele słabszych ograniczeń na te funkcje, zapewniających spełnienie warunku pierwszego. Z drugiej strony, jeżeli $w\alpha$ znika dostatecznie szybko na końcach przedziału, to funkcje, na które działa operator L , nie muszą spełniać żadnych warunków granicznych, a mimo to warunek (1) będzie spełniony. Żądanie, żeby $w\alpha$ znikało dostatecznie szybko na końcach przedziału, można zrealizować albo kładąc $w\alpha$ równe tożsamościowo zeru na zewnątrz skończonego przedziału $[a, b]$, albo też żądając dostatecznie szybkiego znikania $w\alpha$ dla dużych wartości argumentu. W przyszłości będziemy korzystać z obu tych możliwości.

Ponieważ $w(x)$ nic zostało dotychczas ustalone, możemy uważać warunek (2) za równanie ze względu na $w(x)$. Przepiszemy je w postaci

$$(w\alpha)' = \frac{\beta}{\alpha} w\alpha. \quad (5.114)$$

Z prostego całkowania otrzymujemy

$$w\alpha = C \cdot \exp \left[\int \frac{\beta}{\alpha} dx \right] \quad (5.115)$$

w dowolnym obszarze, w którym $(w\alpha)'$ jest ciągle. Występująca tutaj całka jest całką nieoznaczoną, a C — stałą dowolną. Zauważmy, że szczególnym przypadkiem rozwiązania jest $C = 0$ ($w\alpha \equiv 0$). W przyszłości przyda nam się fakt, że rozwiązanie $w\alpha \neq 0$ można zżyć z rozwiązaniem $w\alpha \equiv 0$ w pewnym punkcie $x = a$, o ile tylko $w\alpha$ jest ciągle w tym punkcie, to znaczy $w\alpha = 0$ po prawej i po lewej stronie, tuż koło punktu $x = a$ na osi rzeczywistej. Wynika to stąd, że pochodna funkcji ciągłej jest ograniczona.

W obszarze, gdzie $w\alpha \neq 0$, $\alpha(x)$ musi być albo nieujemne, albo niedodatnie, ponieważ żądaliśmy $w(x) > 0$. W pierwszym przypadku musimy wybrać C dodatnie, a w drugim ujemne. Nie zmniejszając ogólności rozumowania można przyjąć $\alpha(x) \geq 0$ i $C > 0$. Podsumowując, dla każdego $\alpha(x)$ i $\beta(x)$ istnieje waga $w(x)$ dana w każdym obszarze, gdzie $w\alpha \neq 0$ równaniem (5.115). Gwarantuje nam to spełnienie warunku (2).

Każde równanie badanej przez nas postaci

$$Lu = \alpha(x)u'' + \beta(x)u' + \gamma(x)u = \lambda u, \quad (5.116)$$

można zapisać w postaci równoważnej

$$\frac{d}{dx} \left[w\alpha \frac{du}{dx} \right] + (\gamma - \lambda)wu = 0, \quad (5.117)$$

wybierając wagę $w(x)$ zgodnie z (5.113). Równanie (5.117) wraz z warunkiem granicznym (5.112) nazywa się *układem Sturm-Liouville'a*. W (5.46) równanie różniczkowe Legendre'a pojawia się w postaci Sturm-Liouville'a. Użyliśmy wówczas tej postaci równania Legendre'a do dowodu ortogonalności funkcji własnych należących do różnych wartości własnych. Obecnie podamy ogólniejszy dowód tej własności, słuszny dla dowolnego układu Sturm-Liouville'a.

Niech λ_m i λ_n ($\lambda_m \neq \lambda_n$) będą dwiema wartościami własnymi równania (5.117). Wówczas

$$\frac{d}{dx} \left[(w\alpha) \frac{du_m}{dx} \right] + (\gamma - \lambda_m)wu_m = 0$$

oraz

$$\frac{d}{dx} \left[(w\alpha) \frac{du_n^*}{dx} \right] + (\gamma - \lambda_n)wu_n^* = 0.$$

Mnożąc pierwsze z tych równań przez u_n^* , a drugie przez u_m i odejmując stronami, dostajemy

$$u_n^* \frac{d}{dx} [(w\alpha)u_m'] - u_m \frac{d}{dx} [(w\alpha)u_n^*] = -(\lambda_n - \lambda_m)wu_n^*u_m.$$

Lewa strona tego wyrażenia jest pełną pochodną. Całkując stronami, otrzymujemy

$$[w\alpha(u_n^*u_m' - u_mu_n^*)]_{-\infty}^{\infty} = -(\lambda_n - \lambda_m) \int_{-\infty}^{\infty} wu_n^*u_m dx.$$

Z założenia (5.112) lewa strona znika tożsamościowo, a ponieważ $\lambda_n \neq \lambda_m$, wynika stąd równość

$$(u_m, u_n) = \int_{-\infty}^{\infty} u_m^*(x) u_n(x) w(x) dx = 0.$$

Zatem funkcje własne należące do różnych wartości własnych są ortogonalne z wagą $w(x)$. Otrzymany wynik jest po prostu powtórzeniem w języku funkcji rezultatu dotyczącego ortogonalności wektorów własnych operatorów hermitowskich, należących do różnych wartości własnych (twierdzenie 4.18).

Zajmijmy się teraz przypadkiem wielomianowych układów Sturm-Liouville'a, tzn. założymy, że funkcje $u_n(x)$ są wielomianami stopnia n . Oznaczmy je symbolem $Q_n(x)$. Wówczas

$$LQ_n = \lambda_n Q_n, \quad (5.118)$$

gdzie tak jak poprzednio

$$L = \alpha(x) \frac{d^2}{dx^2} + \beta(x) \frac{d}{dx} + \gamma(x) \quad (5.119)$$

oraz

$$\int_{-\infty}^{\infty} Q_n^*(x) Q_m(x) w(x) dx = 0 \quad (5.120)$$

dla $m \neq n$, zgodnie z przytoczonymi wyżej rozważaniami o ortogonalności.

W przypadku, gdy $Q_n(x)$ jest wielomianem stopnia n , funkcje rzeczywiste $\alpha(x)$, $\beta(x)$ i $\gamma(x)$ muszą mieć postać

$$\alpha(x) = \alpha_0 x^2 + \alpha_1 x + \alpha_2, \quad (5.121)$$

$$\beta(x) = \beta_0 x + \beta_1, \quad (5.122)$$

$$\gamma(x) = \gamma_0. \quad (5.123)$$

To, że jest to najogólniejsza możliwa postać, wynika z faktu, że równanie różniczkowe jest drugiego rzędu i że rozważamy tylko rozwiązania będące wielomianami. Dla dowodu wystarczy położyć $n = 0, 1$ i 2 w (5.118). Wówczas

$$\gamma Q_0 = \lambda_0 Q_0 \Rightarrow \gamma = \lambda_0 = \gamma_0,$$

$$\beta Q_1' + \gamma Q_1 = \lambda_1 Q_1 \Rightarrow \beta = \frac{\lambda_1 - \lambda_0}{Q_1'} Q_1 = \beta_0 x + \beta_1,$$

$$\alpha Q_2'' + \beta Q_2' + \gamma Q_2 = \lambda_2 Q_2 \Rightarrow \alpha = \frac{\lambda_2 - \lambda_0}{Q_2''} Q_2 - \frac{\lambda_1 - \lambda_0}{Q_1' Q_2'} Q_1 Q_2' = \alpha_0 x^2 + \alpha_1 x + \alpha_2.$$

Zauważmy, że β nie może być tożsamościowo równe zero, mielibyśmy bowiem wówczas z (5.113), że $w\alpha = \text{const}$, co uniemożliwiłoby spełnienie drugiego warunku hermitowskości (5.112) (ponieważ wielomiany nie znikają w nieskończoności).

Tak więc nie istnieją rozwiązania zagadnienia Sturm-Liouville'a (dla hermitowskiego L) będące wielomianami, o ile $\beta(x) \equiv 0$. Jeżeli zrezygnujemy z hermitowskości L , to pojawiają się rozwiązania będące wielomianami dowolnego stopnia, o wartościach własnych $n(n-1)\alpha_0$. Wektory własne ich nie będą jednak ortogonalne. Podany wyżej ogólny wzór na $\beta(x)$ wskazuje, że $\lambda_1 = \lambda_0$ dla $\beta(x) \equiv 0$. Na odwrót, jeżeli $\beta(x) \not\equiv 0$, to $\lambda_1 \neq \lambda_0$ i $\beta_0 \neq 0$, ponieważ człon wiodący w Q_1 jest proporcjonalny do x .

Ograniczenie rozważań jedynie do rozwiązań typu wielomianów prowadzi tylko do kilku możliwych układów Sturm–Liouville’a. Na przykład znane szeroko funkcje Bessela nie należą do tej kategorii. Żeby zapewnić sobie hermitowskość L , będziemy spełniać (5.112) poprzez wybór $w\alpha$ znikającego przy $|x| \rightarrow \infty$. W rzeczywistości $w\alpha$ musi dążyć do zera szybciej niż dowolna ujemna potęga x przy $|x|$ dążącym do nieskończoności, bowiem w (5.112) $w\alpha$ jest mnożone przez f^*g' i gf'^* , będące z założenia wielomianami. Wynika to zresztą również z żądania $(f, f) < \infty$ dla każdego f w naszej przestrzeni.

Przy tych założeniach wszystkie własności układu Sturm–Liouville’a są określone przez sześć parametrów $\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \beta_0, \beta_1$ i γ_0 , z dokładnością do czterech nieistotnych zmian L :

1. L można pomnożyć przez stałą C_1 . Nie powoduje to zmiany Q_n , a wartości własne zostają pomnożone przez C_1 .

2. Zmienną niezależną x można przesunąć o pewną stałą C_2 . Wówczas $Q_n(x)$ zostaje zastąpione przez $Q_n(x+C_2)$ i wartości własne pozostają bez zmiany.

3. Zmienną niezależną x można pomnożyć przez stałą C_3 : $x \rightarrow C_3x$. Wówczas $Q_n(x)$ przechodzi w $Q_n(C_3x)$ i wartości własne się nie zmieniają.

4. Do L , a dokładniej do γ_0 , można dodać stałą. Nie zmienia to Q_n , a λ_n zostaje zastąpione przez $\lambda_n + C_4$. W paragrafie tym będziemy dla prostoty zakładać taki wybór C_4 , żeby $\gamma_0 \equiv 0$.

Przy ustalonym γ_0 (równym zeru) już tylko pięć parametrów ($\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2, \beta_0, \beta_1$) charakteryzuje układ Sturm–Liouville’a. Pozostają jednak nadal trzy stopnie swobody spośród czterech wymienionych wyżej. Zatem w rzeczywistości układ Sturm–Liouville’a jest całkowicie określony przez $5-3=2$ parametry. Rozważmy teraz następujące trzy przypadki:

1. $\alpha(x)$ jest funkcją kwadratową;
2. $\alpha(x)$ jest funkcją liniową ($\alpha_0 = 0$);
3. $\alpha(x)$ jest stałą ($\alpha_0 = 0 = \alpha_1$).

Jak się okaże, dyskusja nasza całkowicie wyczerpie możliwe wielomienne rozwiązania równania różniczkowego drugiego rzędu typu Sturm–Liouville’a. Nie ma co liczyć na to, że któremuś z czytelników uda się odkryć nowy układ wielomianów Sturm–Liouville’a i obdarzyć go własną nazwą!

Przypadek 1. $\alpha(x)$ jest funkcją kwadratową. W tym przypadku (5.115) przechodzi w równanie

$$w\alpha = C \cdot \exp \left[\int \frac{\beta_0 x + \beta_1}{\alpha_0 x^2 + \alpha_1 x + \alpha_2} dx \right], \quad (5.124)$$

gdzie $\alpha_0 \neq 0$: Można tu niezależnie rozpatrzyć dwie możliwości, w zależności od tego, czy $\alpha(x)$ ma pierwiastki rzeczywiste, czy zespolone. Rozważmy najpierw przypadek pierwiastków zespolonych i dla wygody wybierzmy C_1 tak, żeby $\alpha_0 = 1$. Wówczas $\alpha(x) = (x-\kappa)(x-\kappa^*)$, gdzie κ i κ^* są dwoma zespolonymi pierwiastkami $\alpha(x)$ (tutaj, jak zwykle, gwiazdka oznacza sprzężenie zespolone). Całka w (5.124) po obliczeniu daje

$$w\alpha = C[\alpha(x)]^{\beta_0/2} \exp \left[\frac{\beta_1 + \beta_0 \operatorname{Re} \kappa}{|\operatorname{Im} \kappa|} \operatorname{arctg} \left(\frac{x - \operatorname{Re} \kappa}{|\operatorname{Im} \kappa|} \right) \right],$$

gdzie $\operatorname{Re} \kappa$ i $\operatorname{Im} \kappa$ oznaczają odpowiednio część rzeczywistą i urojoną κ . Ponieważ $\alpha(x)$ jest wielomianem od x , $w\alpha$ nie może przy x dążącym do nieskończoności zniknąć szybciej niż

pewna ujemna potęga x (wykładnik tej potęgi określony jest przez β_0), a więc nie jest spełniony wyprowadzony przez nas poprzednio warunek brzegowy (5.112). Ponadto $w\alpha$ jest wszędzie różne od zera, a więc nie da się zsyć z rozwiązaniem $w\alpha \equiv 0$. Pozostaje zatem tylko nadzieja, że przypadek dwóch pierwiastków rzeczywistych okaże się lepszy. Dla wygody wybierzmy parametry C_1, C_2 i C_3 tak, żeby $\alpha_0 = -1$, a pierwiastki $\alpha(x)$ były w punktach $x = 1$ i $x = -1$, czyli $\alpha(x) = 1 - x^2$. Ponadto przyjmijmy oznaczenia $\beta_1 = q - p$ oraz $\beta_0 = -(p + q + 2)$ (to ostatnie podstawienie pozwala przedstawić $w(x)$ w wyjątkowo prostej postaci); p i q są rzeczywiste, ale nie muszą być liczbami całkowitymi. Tak więc

$$\frac{\beta}{x} = \frac{-(p+q+2)x + q - p}{1 - x^2} = \frac{q+1}{1+x} - \frac{p+1}{1-x}$$

i po wykonaniu całkowania w (5.115) dostajemy

$$w\alpha = C(1+x)^{q+1}(1-x)^{p+1} \quad \text{lub} \quad w(x) = C(1+x)^q(1-x)^p.$$

Ponownie okazuje się, że na dużych odległościach od początku układu $w\alpha$ może dążyć do zera co najwyżej tak szybko, jak odwrotność pewnej ustalonej potęgi x (zależnej od konkretnych wartości p i q), a więc dla tej postaci nasze warunki brzegowe nie mogą być spełnione. Jeśli jednak $q > -1$ i $p > -1$, to $w\alpha$ znika dla $x = 1$ i $x = -1$, a więc możemy zsyć tak określone $w(x)$ na przedziale $[-1, 1]$ z rozwiązaniem $w(x)$ równym tożsamościowo zeru na zewnątrz $[-1, 1]$. (Zauważmy, że α_0 i β_0 mają zgodne znaki; będziemy z tego w przyszłości korzystać). Zatem usunęliśmy obiekcje powstające w przypadku zespolonych pierwiastków, otrzymując rozsądną wagę $w(x)$ dla przedziału $[-1, 1]$:

$$w(x) = (1+x)^q(1-x)^p,$$

gdzie przyjęliśmy $C = 1$.

$Q_n(x)$ odpowiadające takiemu wyborowi głównych parametrów w przypadku $\alpha(x)$ będącego funkcją kwadratową nazywają się *wielomianami Jacobiego* o wskaźnikach p, q i są oznaczane symbolem $J_n^{(p,q)}(x)$. (Górne wskaźniki odróżniają je od funkcji Bessela). Poprzez liniową zamianę zmiennych można je sprowadzić do innej postaci. Przez przejście $x \rightarrow 1 - 2x$ w równaniu różniczkowym (5.119) otrzymujemy

$$\alpha(x) = x(1-x) \geq 0 \quad \text{w} \quad [0, 1], \quad \beta(x) = -(p+q+2)x + (p+1).$$

W ten sposób lewym końcem przedziału jest teraz $x = 0$, $\beta_1 = \beta(0) = p+1$ i

$$\beta_0 = \beta(1) - \beta(0) = -(p+q+2)$$

nie ulega zmianie. Wynika stąd, że $xw = x^{p+1}(1-x)^{q+1}$, a więc $p, q > -1$, tak jak poprzednio. Waga ma więc teraz postać

$$w(x) = x^p(1-x)^q.$$

Zbiór wielomianów ortogonalnych na przedziale $[-1, 1]$ z wagą $w(x) = (1-x)^p(1+x)^q$ różni się tylko liniową zamianą zmiennych od zbioru wielomianów ortogonalnych na $[0, 1]$ z wagą $w(x) = x^p(1-x)^q$. W stosunku do obu zbiorów używamy nazwy wielomiany Jacobiego o wskaźnikach p, q .

Zajmiemy się teraz kilkoma szczególnymi przypadkami wielomianów Jacobiego określonych na przedziale $[-1, 1]$. Dla $p = q = m(m > -1)$, $w(x) = (1-x^2)^m$. Odpo-

wiadające tej wadze wielomiany nazywa się *ultrakulistymi* lub *wielomianami Gegenbauera* o wskaźniku całkowitym m . Oznaczamy je symbolem

$$G_n^m(x) = J_n^{(m,m)}(x).$$

Zauważmy, że z $p = q$ wynika $\beta_1 = 0$, co oznacza, że zamiana $x \rightarrow -x$ nie ma wpływu na operator L . Jeżeli przez P oznaczymy operator zamiany x na $-x$, to niezmienniczość L względem tej operacji można w języku operatorów zapisać jako $PLf(x) = LPf(x)$ dla każdego $f(x)$, a więc

$$PL = LP$$

i na podstawie twierdzenia (4.22) wiemy, że każdą funkcję własną L można wybrać tak, aby była jednocześnie funkcją własną P . Ponieważ $P^2f(x) = f(x)$ dla każdego $f(x)$, więc $P^2 = I$ (I oznacza operator jednostkowy). Nakłada to silne ograniczenia na wartości własne P . Rozważmy równanie $Pf(x) = \lambda f(x)$. Wynika z niego

$$P^2f(x) = \lambda Pf(x) = \lambda^2 f(x) = f(x),$$

bo $P^2 = I$. Zatem $\lambda^2 = 1$, a więc $\lambda = \pm 1$. Oznacza to, że każdy wielomian Gegenbauera można charakteryzować wskaźnikiem $+$ lub $-$, w zależności od tego, czy jest funkcją własną P odpowiadającą wartości własnej $+1$ czy -1 (patrz zadanie 5.15).

P nazywamy *operatorem parzystości*. W wielu gałęziach fizyki odgrywa on zasadniczą rolę. O jego wektorach własnych mówimy, że mają dodatnią lub ujemną parzystość. Ponieważ wyraz wiodący w $G_n^m(x)$ jest proporcjonalny do x^n , a $Px^n = (-1)^n x^n$, widać, że parzystość wielomianów Gegenbauera zależy od tego, czy n jest parzyste, czy nieparzyste. Jeżeli n jest parzyste — $G_n^m(x)$ zawiera wyłącznie parzyste potęgi x , podczas gdy dla nieparzystego n $G_n^m(x)$ zawiera wyłącznie nieparzyste potęgi x . Wielomiany Gegenbauera pojawiają się w rozwiązaniach pewnych relatywistycznie niezmienniczych równań w kwantowej teorii cząstek elementarnych.

Dla wielomianów Jacobiego z $p = q = -\frac{1}{2}$, $w(x) = (1-x^2)^{-1/2}$. Wielomiany te oznaczamy

$$T_n(x) \equiv J_n^{(-1/2, -1/2)}(x).$$

Relacja ortogonalności ma dla nich postać

$$(T_{n_1}, T_{n_2}) = \int_{-1}^1 T_{n_1}^*(x) T_{n_2}(x) (1-x^2)^{-1/2} dx = 0, \quad (n_1 \neq n_2).$$

Kładąc $x = \cos\theta$ dostajemy alternatywne wyrażenie

$$(T_{n_1}, T_{n_2}) = \int_{-\pi}^{\pi} T_{n_1}^*(\cos\theta) T_{n_2}(\cos\theta) d\theta = 0.$$

Jedynym zbiorem wielomianów w $\cos\theta$ spełniającym ten związek na $[-\pi, \pi]$ jest

$$T_n(\cos\theta) \sim \cos n\theta.$$

Zatem w zmiennej x na przedziale $[-1, 1]$

$$T_n(x) \sim \cos(n \arccos x),$$

a więc zbiór ten jest explicite wyznaczony, z dokładnością do stałego czynnika. Wielomiany te są znane pod nazwą *wielomianów Czebyszewa*.

Możemy być z góry pewni, że wśród tej plejady szczególnych przypadków pojawią się także najlepiej nam znane wielomiany Legendre'a. Istotnie, odpowiadają one przypadkowi $p = q = m = 0$. Wówczas $w(x) = 1$. Zatem $J_n^{(0,0)}(x) = P_n(x)$ z dokładnością do stałego współczynnika.

Istnieje twierdzenie (zadanie 20), że jeżeli $\{Q_n(x)\}$ jest ortonormalnym układem wielomianów Sturma-Liouville'a, to zbiór ich pochodnych $\{Q'_n, n > 1\}$ jest ortonormalnym układem wielomianów z wagą $w\alpha$. W przypadku wielomianów Legendre'a, gdzie $w = 1$ na przedziale $[-1, 1]$ i $\alpha = (1-x^2)$, μ -krotne skorzystanie z tego faktu prowadzi do wniosku, że zbiór wielomianów $(d^\mu/dx^\mu)P_n$ jest ortogonalny na $[-1, 1]$ z wagą $\alpha^\mu = (1-x^2)^\mu$. Jednoznaczność zbiorów ortogonalnych wielomianów w konkretnych przedziałach oznacza, że wielomiany te są dokładnie wielomianami Gegenbauera:

$$G_{n-\mu}^\mu = \frac{d^\mu}{dx^\mu} P_n,$$

tworzącymi jedyny ortonormalny zbiór wielomianów z wagą $w = (1-x^2)^\mu$ na $[-1, 1]$.

Wynika stąd również, że zbiór *funkcji*

$$P_n^\mu(x) = (1-x^2)^{\mu/2} \frac{d^\mu}{dx^\mu} P_n(x)$$

jest ortogonalny na $[-1, 1]$ z wagą 1. Funkcje te są stowarzyszonymi funkcjami Legendre'a.

Przypadek 2. $\alpha(x)$ jest funkcją liniową. Tutaj $\alpha(x) = x + \alpha_2$, gdzie wybraliśmy C_1 tak, aby $\alpha_1 = 1$. Ponadto $\alpha(x)$ ma jeden pierwiastek rzeczywisty w $x = -\alpha_2$; dobierając C_2 możemy pierwiastek ten przesunąć do zera, czyli ostatecznie $\alpha(x) = x$. Stąd

$$w\alpha = C \cdot \exp \left[\int \frac{\beta_0 x + \beta_1}{x} dx \right] = C \cdot \exp(\beta_0 x + \beta_1 \ln x) = C x^{\beta_1} e^{\beta_0 x}$$

Jeżeli wybierzemy $\beta_0 < 0$, to $w\alpha \rightarrow 0$ dla $x \rightarrow +\infty$, ale $w\alpha$ rośnie wykładniczo dla $x \rightarrow -\infty$. Zatem dla spełnienia warunków granicznych musimy zażądać znikania $w(x)$ dla $x < a$, przy czym wartość a nie jest na razie określona. Jeżeli wybierzemy $\beta_1 > 0$, to $w\alpha = 0$ dla $x = 0$ i całka z $w\beta$ po przedziale o długości ε wokół $x = 0$ dąży do zera wraz z ε , a więc możemy odpowiednio zszyć w tym punkcie to rozwiązanie z rozwiązaniem równym tożsamościowo zero (dla $x < 0$). Przez dobór C_3 kładziemy dla wygody $\beta_0 = -1$. (Zauważmy, że przy wyborze $\beta_0 > 0$ mielibyśmy sytuację odwrotną i $w\alpha$ musiałoby znikać po dodatniej stronie osi x . Wybór $\beta_0 < 0$ jest rzeczą konwencji). Wprowadzając oznaczenie $\beta_1 = s + 1$, $s > -1$, mamy

$$w(x) = x^s e^{-x}$$

dla x dodatnich i $w(x) = 0$ dla x ujemnych. Odpowiadające temu Q_n są *stowarzyszonymi wielomianami Laguerre'a* rzędu s . Oznaczane są symbolem $L_n^s(x)$. Dla $s = 0$ funkcje $L_n^0(x) \equiv L(x)$ nazywane są *wielomianami Laguerre'a*. Fakt występowania jednego tylko swobodnego parametru (s) jest odbiciem liniowości $\alpha(x)$: $\alpha_0 = 0$, a więc trzy spośród czterech pozostałych współczynników w $\alpha(x)$ i $\beta(x)$ można wybrać dowolnie i pozostaje tylko jeden parametr swobodny.

Przypadek 3. $\alpha(x)$ jest stałą. Tutaj $\alpha_0=0=\alpha_1$ i przez dobór C_1 możemy uzyskać $\alpha_2=1$. Zatem

$$wx = C \cdot \exp \left[\int (\beta_0 x + \beta_1) dx \right] = C \cdot \exp \left(\frac{\beta_0}{2} x^2 + \beta_1 x \right) = C' \cdot \exp \left[\frac{\beta_0}{2} \left(x + \frac{\beta_1}{\beta_0} \right)^2 \right].$$

Jeżeli wybierzemy $\beta_0 < 0$, to $wx = w$ maleje wykładniczo dla $|x| \rightarrow \infty$, a więc to wyrażenie na $w(x)$ można przyjąć bez żadnych zmian. Dobierając odpowiednio C_2 i C_3 możemy uzyskać $\beta_0 = -2$ oraz $\beta_1 = 0$ i kładąc $C' = 1$ dostajemy

$$w(x) = e^{-x^2}.$$

Odpowiadające temu $Q_n(x)$ są wielomianami Hermite'a. Wraz z nimi nasz przegląd różnych możliwości został zakończony. Jest to pełny przegląd: nie istnieją inne wielomiany Sturm–Liouville'a będące rozwiązaniami równań różniczkowych drugiego rzędu. W tabeli 5.1 podajemy podsumowanie dotychczasowych wyników.

Przeanalizujemy teraz wartości własne w każdym z trzech podstawowych przypadków. Z porównania współczynników przy x^n w równaniu różniczkowym dostajemy

$$\lambda_n = \alpha_0 n(n-1) + \beta_0 n = n(\alpha_0 n + \beta_0 - \alpha_0). \quad (5.125)$$

Wynika stąd natychmiast, że wartości własne zmieniają się liniowo dla równań Hermite'a i Laguerre'a (dla których $\alpha_0 = 0$) i kwadratowo dla wielomianów Jacobiego i wszystkich ich przypadków szczególnych.

W szczególności dla równania Hermite'a $\lambda_n = -2n$, a Laguerre'a $\lambda_n = -n$. Wartości własne równania Jacobiego są $\lambda_n = -n(n+p+q+1)$ niezależnie od tego, czy rozważamy rozwiąznia ortogonalne na $[0, 1]$, czy na $[-1, 1]$. Przypadek Gegenbauera ($p = q = m$) ma wartości własne $\lambda_n = -n(n+2m+1)$. Dwa dalsze przypadki szczególne, Czebyszewa ($m = -\frac{1}{2}$) i Legendre'a ($m = 0$), odpowiadają wartościom własnym $\lambda_n = -n^2$ i $\lambda_n = -n(n+1)$. Oczywiście znak wartości własnych jest uzależniony tylko od przyjętych przez nas konwencji.

Dyskusję wielomiennych układów Sturm–Liouville'a zakończymy dowodem ogólnego wzoru Rodriguesa, określającego explicite wszystkie wielomiany z dokładnością do stałego czynnika. Wzór ten ma postać

$$Q_n(x) = K_n \frac{1}{w} \frac{d^n}{dx^n} (\alpha^n w), \quad (5.126)$$

gdzie wybór stałej K_n zależy od konkretnego zastosowania fizycznego. Przytoczymy dowód będący ogólniejszą wersją dowodu dla wielomianów Legendre'a w § 5.5. Dowolny zbiór wielomianów jest jednoznacznie określony przez żądanie, żeby $Q_n(x)$ było wielomianem stopnia n spełniającym związek ortogonalności

$$\int_a^b Q_m^* Q_n w dx = 0, \quad \text{dla } n \neq m. \quad (5.127)$$

Zatem dla dowodu (5.126) wystarczy pokazać, że $Q_n(x)$ dane uogólnionym wzorem Rodriguesa (5.126) są wielomianami stopnia n i spełniają równanie (5.127).

Tabela 5.1. Układy wielomianów ortogonalnych Sturma-Liouville'a

Nazwa wielomianów	Równanie różniczkowe	$\alpha_0 \alpha_1 \alpha_2$	β_0	β_1	$w\alpha$	w	$[a, b]$
(I) α kwadratowe Jacobięgo	$(1-x^2)u'' + [-(p+q+2)x + (q-p)]u' + n(n+p+q+1)u = 0$	-1 0 1	$-(p+q+2)$	$q-p$	$(1-x)^{p+1} \cdot (1+x)^{q+1}$	$(1-x)^p \cdot (1+x)^q$	$[-1, 1]$
Jacobięgo	$x(1-x)u'' + [-(p+q+2)x + (p+1)]u' + n(n+p+q+1)u = 0$	-1 1 0	$-(p+q+2)$	$p+1$	$x^{p+1}(1-x)^{q+1}$	$x^p(1-x)^q$	$[0, 1]$
Gegenbauera	$(1-x^2)u'' - 2(m+1)xu' + n(n+2m+1)u = 0$	-1 0 1	$-2(m+1)$	0	$(1-x^2)^{m+1}$	$(1-x^2)^m$	$[-1, 1]$
Czebyszewa	$(1-x^2)u'' - xu' + n^2u = 0$	-1 0 1	-1	0	$(1-x^2)^{1/2}$	$(1-x^2)^{-1/2}$	$[-1, 1]$
Legendre'a	$(1-x^2)u'' - 2xu' + n(n+1)u = 0$	-1 0 1	-2	0	$1-x^2$	1	$[-1, 1]$
(II) α liniowe Laguerre'a	$xu'' - [x - (s+1)]u' + nu = 0$	0 1 0	-1	$s+1$	$x^{s+1}e^{-x}$	$x^s e^{-x}$	$[0, \infty]$
(III) α stałe Hermite'a	$u'' - 2xu' + 2nu = 0$	0 0 1	-2	0	e^{-x^2}	e^{-x^2}	$[-\infty, \infty]$

Dowodziemy najpierw pomocniczo, że jeżeli $f(x) = \alpha^k w r(x)$, gdzie $r(x)$ jest wielomianem stopnia l , to $f'(x) = \alpha^{k-1} w s_{l+1}(x)$, gdzie $s_{l+1}(x)$ jest wielomianem stopnia $l+1$. W tym celu po prostu różniczkujemy $f(x)$:

$$\begin{aligned} f'(x) &= (\alpha^{k-1})' (\alpha w) r + \alpha^{k-1} (\alpha w)' r + \alpha^{k-1} (\alpha w) r' = \\ &= (k-1) \alpha^{k-2} \alpha' (\alpha w) r + \alpha^{k-1} (\beta w) r + \alpha^{k-1} (\alpha w) r' = \\ &= \alpha^{k-1} w [\beta r + (k-1) \alpha' r + \alpha r'] = \\ &= \alpha^{k-1} w [r_0 (\beta_0 + (2k+l-2) \alpha_0) x^{l+1} + \dots] = \alpha^{k-1} w s_{l+1}(x). \end{aligned}$$

Tutaj $r(x) = r_0 x^l + \dots$. Ponieważ $\beta_0 \neq 0$ i dla $\alpha_0 \neq 0$, α_0 , i β_0 mają zgodne znaki, wyrażenie w nawiasie kwadratowym jest wielomianem stopnia $l+1$ dla $k \geq 1$. Stosując ten rezultat n razy do funkcji $\alpha^n w$ (dla $r = 1$) stwierdzamy, że

$$\frac{d^n}{dx^n} (\alpha^n w) = \alpha^0 w t_n(x) = w t_n(x),$$

gdzie $t_n(x)$ jest wielomianem stopnia n . Z (5.126) wynika, że $Q_n(x)$ jest rzeczywiście wielomianem stopnia n .

Możemy teraz podać dowód ortogonalności $Q_n(x)$ z wagą $w(x)$. Całkując n -krotnie przez części, dostajemy

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} Q_m^*(x) Q_n(x) w(x) dx &= \int_{-\infty}^{\infty} Q_m^*(x) \frac{d^n}{dx^n} (\alpha^n w) dx = \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} \left[(-1)^k \left(\frac{d^k}{dx^k} Q_m^* \right) \frac{d^{n-1-k}}{dx^{n-1-k}} (\alpha^n w) \right]_{-\infty}^{\infty} + (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{d^n}{dx^n} Q_m^* \right) \alpha^n w dx. \end{aligned} \quad (5.128)$$

Jeżeli $n > m$, to całka znika i ortogonalność będzie spełniona, o ile tylko potrafimy pokazać, że wyrazy $d^l/dx^l (\alpha^n w)$, $0 \leq l \leq n-1$, znikają w nieskończoności szybciej niż dowolna ujemna potęga x . To jednak wynika z pomocniczego twierdzenia, że

$$\frac{d^l}{dx^l} (\alpha^n w) = \alpha^{n-l} w v_l(x),$$

gdzie $v_l(x)$ jest wielomianem stopnia l . Ponieważ z założenia αw znika w nieskończoności szybciej niż potęgowo, tę samą własność musi mieć $\alpha^{n-l} w v_l(x)$ dla $0 \leq l \leq n-1$, co kończy dowód równania (5.126).

W trakcie tego dowodu pokazaliśmy, że w ogólności

$$\int_{-\infty}^{\infty} R(x) Q_n(x) w(x) dx = (-1)^n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d^n R}{dx^n} \alpha^n w dx. \quad (5.129)$$

Związek ten może być pożyteczny przy obliczaniu całek. W szczególności, jeżeli podstawimy tu $R(x) \equiv Q_n(x)$, całka przyjmie postać

$$\int_{-\infty}^{\infty} Q_n^2(x) w(x) dx = (-1)^n n! q_n \int_{-\infty}^{\infty} \alpha^n w dx,$$

gdzie q_n jest współczynnikiem przy wyrazie wiodącym w $Q_n(x)$ danym wzorem (5.126).

Możemy teraz w oparciu o uogólniony wzór Rodriguesa wyprowadzić wzory na rozważane poprzednio wielomiany. Musimy jednak pamiętać, że formuła Rodriguesa wyznacza wielomiany z dokładnością do stałych czynników, które można następnie wybrać na wiele różnych sposobów. W niektórych podręcznikach dobór czynników jest taki, że współczynnik przy najwyższej potędze w $Q_n(x)$ jest równy jedynce dla każdego n . Niekiedy znów ustala się je z warunku unormowania wielomianów względem odpowiadających im wag, niekiedy jeszcze inaczej. Na przykład wielomiany Legendre'a określone równaniem (5.38) nie są unormowane na $[-1, 1]$. Unormowane wielomiany Legendre'a mają postać $(n + \frac{1}{2})^{1/2} P_n(x)$. Warto sobie stale zdawać sprawę z niekonsystencji pojawiających się w literaturze przy definiowaniu różnych zbiorów ortogonalnych wielomianów. W przeglądzie wielomianów, który teraz podamy, nie będziemy explicite określać stałych czynników, z wyjątkiem przeanalizowanych już przypadków wielomianów Legendre'a i Hermite'a.

Korzystając z uogólnionego wzoru Rodriguesa (5.126) dostajemy dla wielomianów Jacobiego

$$J_n^{(p,q)}(x) = A_n^{(p,q)}(1-x)^{-p}(1+x)^{-q} \frac{d^n}{dx^n} [(1-x^2)^n(1-x)^p(1+x)^q], \quad (5.130)$$

gdzie $A_n^{(p,q)}$ jest stałym współczynnikiem zależnym od p , q i n .

Dla wielomianów Gegenbauera $p = q = m$, a więc wzór ten przechodzi w

$$G_n^m(x) = B_n^m(1-x^2)^{-m} \frac{d^n}{dx^n} (1-x^2)^{n+m}, \quad (5.131)$$

gdzie B_n^m jest stałym współczynnikiem zależnym od m i n .

Dla wielomianów Czebyszewa ($m = -\frac{1}{2}$) i Legendre'a ($m = 0$) dostajemy

$$T_n(x) = C_n(1-x^2)^{1/2} \frac{d^n}{dx^n} (1-x^2)^{n-1/2}, \quad (5.132)$$

gdzie C_n jest stałym współczynnikiem zależnym od n ,

$$P_n(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (1-x^2)^n. \quad (5.133)$$

W przypadku stowarzyszonych wielomianów Laguerre'a otrzymujemy

$$L_n^s(x) = D_n^s x^{-s} e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^{n+s} e^{-x}), \quad (5.134)$$

gdzie D_n^s jest stałym współczynnikiem zależnym od s i n (konwencje co do jego wyboru różnią się bardzo poważnie). Wielomiany Laguerre'a odpowiadają $s = 0$:

$$L_n(x) = D_n e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}), \quad (5.135)$$

tutaj D_n zależy tylko od n .

Na koniec wreszcie wielomiany Hermite'a są dane wzorem

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}. \quad (5.136)$$

Na zakończenie tego paragrafu pokażemy, że wszystkie wielomiany Sturma–Liouville’a tworzą zbiory zupełne w przestrzeni Hilberta przy definicji iloczynu wewnętrznego

$$(f, g) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x)g(x)w(x)dx$$

($w(x)$ dla różnych wielomianów podane jest w tabeli 5.1). W rozważaniach tych weźmiemy również pod uwagę wielomiany Hermite’a i Laguerre’a, które są określone na przedziale nieskończonym i jako takie nie podlegają twierdzeniu Weierstrassa. Dowód nasz opiera się na twierdzeniu 5.2 mówiącym, że jeżeli zbiór funkcji ortonormalnych jest domknięty, to jest zupełny.

Twierdzenie o zupełności. Ortonormalny zbiór wielomianów Sturma–Liouville’a $\{Q_n(x)\}$ jest zupełny w przestrzeni Hilberta.

Dowód. Pokażemy, że zbiór $\{Q_n(x)\}$ jest domknięty. Przypuśćmy, że istnieje funkcja $f(x)$ ortogonalna do wszystkich $Q_n(x)$, to znaczy $(f, Q_n) = 0$ dla każdego n . Ponieważ x^m można zapisać jako skończoną kombinację liniową $Q_n(x)$ (a dokładniej pierwszych $m+1$ spośród $Q_n(x)$), widać natychmiast, że $(x^m, f) = 0$ dla każdego m . Rozważmy teraz funkcję

$$g(k) \equiv (e^{ikx}, f) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)w(x)e^{-ikx}dx$$

dla k rzeczywistych. Dzięki występowaniu $w(x)$ w iloczynie wewnętrznym, e^{-ikx} będzie należało do przestrzeni Hilberta dla każdego $w(x)$ dobrego dla wielomianów Sturma–Liouville’a. Podobnie i x^m . Rozwijając e^{-ikx} na szereg

$$e^{-ikx} = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-ik)^m}{m!} x^m$$

i korzystając z warunku $(x^m, f) = 0$, dostajemy $g(k) = 0$ dla każdego k . Ale $g(k)$ jest dokładnie transformatą Fouriera dla $f(x)w(x)$. Zatem, na mocy rozważań z § 5.7, $f(x)w(x) = 0$ prawie wszędzie. Przy tym $f(x)$ interesuje nas tylko tam, gdzie $w(x) \neq 0$, ponieważ w obszarze, gdzie $w(x) = 0$, można $f(x)$ zdefiniować dowolnie. Inaczej mówiąc, przestrzeń Hilberta jest w gruncie rzeczy określona tylko na przedziale $w(x) \neq 0$, ponieważ iloczyn wewnętrzny nie mówi nic na temat struktury funkcji tam, gdzie $w(x) = 0$.

Wnioskujemy zatem, że $f(x) = 0$ prawie wszędzie, zbiór $\{Q_n(x)\}$ jest domknięty, a więc jest zbiorem ortonormalnym zupełnym. c.b.d.o.

Wśród ortogonalnych zbiorów wielomianów występuje wiele innych wielomianów. Na przykład przy użyciu uogólnionego wzoru Rodriguesa można wyprowadzić związki rekurencyjne dla różnych zbiorów wielomianów. Można także do pewnego stopnia charakteryzować zera wielomianów. Zainteresowanych czytelników odsyłamy do podręczników Lusternika i Wilfa. W § 6.10 pokażemy równoważność jawnej reprezentacji Rodriguesa niektórych spośród tych wielomianów z ich reprezentacją implicate, przy pomocy funkcji tworzącej.

Wszystkie zbadane zbiory funkcji są rozwiązaniami równań różniczkowych, tak jak zwykle funkcje trygonometryczne. Wszystkie powiązane są różnymi tożsamościami, tak jak sinus i cosinus. Wprawdzie funkcje trygonometryczne pojawiają się wcześniej we wszystkich kursach matematyki, ale nie różnią się zasadniczo od wielomianów Legendre’a,

Hermite'a, czy jakichkolwiek innych funkcji specjalnych. Są nam lepiej znane jedynie dlatego, że stosujemy je przy pomiarach odległości i że pojawiają się w prostym makroskopowym ruchu harmonicznym. Wyobraźmy sobie jednak bardzo małe istoty rozumne, które nie mierzą dużych odległości, a zamiast tego badają efekty kwantowe. Wydaje się sensowne przypuszczać, że odkryją one dość wcześnie wielomiany Hermite'a w trakcie badań oscylatora kwantowego. Po całych stuleciach pracy i wydaniu połowy swego dochodu narodowego na budowę makroskopowego oscylatora (w naszym sensie tego słowa, dla nich byłby to absolutnie gigantyczny twór) odkrywają w trakcie eksperymentów funkcje trygonometryczne. Dla nich sinus i cosinus będą miały postać skomplikowaną i kłopotliwą w porównaniu ze starymi, dobrze znanymi wielomianami Hermite'a.

5.11. MATEMATYCZNE SFORMUŁOWANIE MECHANIKI KWANTOWEJ

W całym tym rozdziale i w rozdziałach poprzednich omówiliśmy wiele spośród idei matematycznych używanych przy sformułowaniu mechaniki kwantowej, przede wszystkim pojęcie przestrzeni wektorowej, a w szczególności przestrzeni Hilberta. Wypiszemy teraz aksjomaty mechaniki kwantowej i podamy ich interpretację przy pomocy tego aparatu matematycznego. Cała ta część nie będzie ścisłą matematycznie aksjomatyzacją i powinna służyć jedynie jako wstęp do tego pięknego i bardzo podstawowego przedmiotu. Dokładniejsze omówienie czytelnik może znaleźć w podręczniku J. M. Jaucha „*Foundations of Quantum Mechanics*”, czy klasycznej pracy J. Von Neumanna „*Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*”.

Matematyczną podstawę mechaniki kwantowej stanowi przestrzeń Hilberta, tzn. zupełna zespolona przestrzeń z iloczynem wewnętrznym. Jak widzieliśmy, elementy tej przestrzeni są funkcjami. Dla pełnego sformułowania mechaniki kwantowej musimy korzystać z operatorów w przestrzeni Hilberta. Przy dyskusji własności tych operatorów będziemy często korzystać z wyników rozdziału 3 i 4. Zauważyliśmy już, że wiele spośród twierdzeń zamieszczonych w tych rozdziałach obejmuje również przypadek przestrzeni nieskończenie wymiarowych i te będą dla nas szczególnie interesujące. Niekiedy zaś będziemy w sposób intuicyjny wprowadzać pewne ważne uogólnienia wyników uzyskanych dla przestrzeni skończenie wymiarowych, o ile uogólnienia takie okażą się niezbędne w naszym schemacie.

Zacznijmy od omówienia pojęcia operatora rzutowego (zadanie 4.17), które okaże się bardzo pożyteczne w mechanice kwantowej. Rozważania będziemy prowadzić w kontekście znanych już wyników skończenie wymiarowych. Rozważmy operator hermitowski A , którego wartości własne i wektory własne są odpowiednio $\{\lambda_n\}$ i $\{\phi_n\}$ ($n = 1, 2, \dots, N$). Załóżmy dla prostoty zapisu, że λ_n jest niezdegenerowane. Definiujemy operator I wzorem

$$I\psi \equiv \sum_{n=1}^N \phi_n(\phi_n, \psi),$$

dla każdego ψ w rozważanej przestrzeni skończenie wymiarowej. Zgodnie z twierdzeniem o zupełności (twierdzenie 4.20), suma ta jest równa ψ , a więc operator tak zdefiniowany jest operatorem jednostkowym, jak to już sam symbol sugerował. Jeżeli zdefiniujemy P_n wzorem

$$P_n\psi \equiv \phi_n(\phi_n, \psi), \quad (5.137)$$

to I można zapisać jako

$$I = \sum_{n=1}^N P_n.$$

Czytelnik może łatwo sprawdzić, że $P_n^2 = P_n$, $P_n^\dagger = P_n$ i $P_n P_m = 0$ dla $m \neq n$. P_n jest operatorem rzutowym, nazwanym tak dlatego, że rzutuje dowolny wektor na jednowymiarową podprzestrzeń V rozpiętą na ϕ_n .

Co można powiedzieć o operatorze B danym związkiem

$$B \equiv \sum_{n=1}^N \lambda_n P_n?$$

Ponieważ

$$B\psi = \sum_{n=1}^N \lambda_n \phi_n(\phi_n, \psi),$$

widać od razu, że B ma wartości własne $\{\lambda_n\}$ i odpowiadające im wektory własne $\{\phi_n\}$. Musi zatem być równy A (warto dla treningu przeprowadzić ścisły dowód tego). Podsumowując mamy

$$I = \sum_{n=1}^N P_n, \quad A = \sum_{n=1}^N \lambda_n P_n. \quad (5.138)$$

Tak więc twierdzenie o zupełności można alternatywnie sformułować następująco: Dla każdego samosprężonego operatora A istnieje zbiór ortogonalnych rzutów $\{P_n\}$ taki, że (5.138) jest spełnione. Przez *ortogonalne rzuty* rozumiemy rzuty spełniające warunek $P_n P_m = 0$ dla $m \neq n$. W tym właśnie sformułowaniu można uogólnić twierdzenie o zupełności na przypadek przestrzeni nieskończenie wymiarowych. Okazuje się jednak, że tylko dla szczególnego typu nieskończenie wymiarowego operatora (typ operatorów całkowicie ciągłych, który przedyskutujemy w rozdziale 8 i 9) można równania (5.138) uogólnić w sposób bezpośredni.

W przestrzeni nieskończenie wymiarowej powstaje możliwość wystąpienia wartości własnych położonych nieskończenie blisko siebie, stąd też powyższe sformułowanie wymaga pewnych zmian. Żeby dobrze zrozumieć sens tych zmian, musimy zapoznać się z ważnym uogólnieniem całki Riemanna — całką Stieltjesa. Definiujemy

$$\int_a^b f(x) dg(x) \equiv \lim \sum_{i=1}^N f(\bar{x}_i) [g(x_{i+1}) - g(x_i)], \quad (5.139)$$

gdzie punkty x_1, x_2, \dots, x_{n+1} wyznaczają pewien podział przedziału $[a, b]$, a \bar{x}_i jest dowolnym punktem w i -tym przedziale. „Lim” oznacza przejście do bardzo małych przedziałów w tym podziale. Oczywiście, o ile $g(x)$ jest funkcją różniczkowalną, możemy napisać

$$\int_a^b f(x) dg(x) = \int_a^b f(x) \frac{dg}{dx} dx$$

i powracamy z powrotem do całki Riemanna $g(x)$ nie musi być jednak różniczkowalna, ani nawet ciągła. Rozważmy funkcję

$$g(x) = \begin{cases} 1 & \text{dla } x \geq 0, \\ 0 & \text{dla } x < 0. \end{cases}$$

Zgodnie z definicją (5.139) mamy

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x) dg(x) = f(0),$$

bowiem tylko dowolnie mały odcinek wokół $x = 0$ daje wkład do sumy w (5.139). Jest to wynik typu funkcji δ , co nas jednak nie dziwi, ponieważ używaliśmy już nieprecyzyjnego zapisu

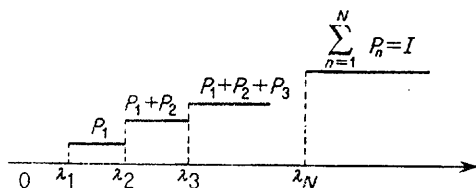
$$\frac{d}{dx} g(x) = \delta(x).$$

Wszelako w podejściu Stieltjesa nigdy nie wychodzimy poza obszar matematyki tradycyjnej. Zdefiniujmy teraz funkcję o wartościach operatorowych $E(\lambda)$ wzorem

$$E(\lambda) = \begin{cases} 0 & \text{dla } \lambda < \lambda_1, \\ \sum_{n=1}^{\nu} P_n & \text{dla } \lambda_{\nu} \leq \lambda < \lambda_{\nu+1}, \quad \nu = 1, \dots, N-1, \\ \sum_{n=1}^N P_n & \text{dla } \lambda \geq \lambda_N \end{cases}$$

z P_n i λ_n zdefiniowanymi poprzednio. Funkcja ta jest przedstawiona schematycznie na rys. 5.5. Zauważmy, że

$$E(-\infty) = 0 \quad \text{i} \quad E(+\infty) = I.$$



Rys. 5.5. Schematyczny wykres $E(\lambda)$ dla przypadku skończonego wymiarowego operatora samosprzężonego o wartościach własnych $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_N$

Czytelnik może łatwo sprawdzić, że

$$E(\lambda_1)E(\lambda_2) = E(\bar{\lambda}),$$

gdzie $\bar{\lambda}$ jest mniejszą z liczb λ_1 i λ_2 (wynika to stąd, że P_n są ortogonalnymi rzutami) i że

$$[E(\lambda)]^2 = E(\lambda).$$

Opierając się na definicji całki Stieltjesa (5.139), dostajemy

$$\int_{-\infty}^{\lambda} dE(\lambda) = \sum_{n=1}^{\nu} P_n$$

dla λ leżącego pomiędzy λ_{ν} i $\lambda_{\nu+1}$. Jedyne wkłady do tej całki pochodzą od punktów, w których $E(\lambda)$ zmienia się skokowo; w każdym takim punkcie λ_i (który na mocy naszej konstrukcji jest wartością własną A) dodajemy operator rzutujący na jednowymiarową

podprzestrzeń przestrzeni V , rozpiętą na ϕ_i . W tym nowym zapisie pierwsze z równań (5.138) przybiera postać

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dE(\lambda),$$

a drugie

$$A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda).$$

Tak to udało nam się zapisać proste twierdzenie o zupełności w sposób szalenie skomplikowany.

Spójrzmy teraz na zalety tej skomplikowanej notacji. Rozważmy znane zagadnienie własne

$$\frac{d^2\phi_n(x)}{dx^2} = \lambda_n\phi_n(x).$$

Wiemy, że przy periodycznych warunkach granicznych w przedziale $[-L, L]$

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{2L}} e^{i(n\pi/L)x}, \quad \lambda_n = \frac{n^2\pi^2}{L^2}, \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Gdy L staje się bardzo duże, wartości własne skupiają się i przedziały stałości $E(\lambda)$ na rys. 5.5 stają się coraz mniejsze. Możemy sobie wyobrazić, że w granicy $E(\lambda)$ dąży do funkcji ciągłej o wartościach operatorowych. To właśnie zjawisko nosi nazwę „widma ciągłego” i jest bardzo popularne w mechanice kwantowej, a nawet można zaryzykować twierdzenie, że leży u jej podstaw.

Po wprowadzeniu funkcji $E(\lambda)$ w przestrzeni skończenie wymiarowej podamy już bez dowodu jej uogólnienie na przypadek nieskończenie wymiarowy. Następujące twierdzenie jest jednym z najważniejszych wyników uzyskanych w matematyce, a zarazem gra kluczową rolę w ścisłym matematycznie sformułowaniu mechaniki kwantowej.

Twierdzenie spektralne. Każdemu samosprężonemu operatorowi A w przestrzeni Hilberta H odpowiada (jednoznacznie) funkcja o wartościach operatorowych $E(\lambda)$ taka, że

$$1. E(\lambda_1)E(\lambda_2) = E(\bar{\lambda}); \quad \bar{\lambda} = \min(\lambda_1, \lambda_2),$$

$$2. \lim_{\lambda \rightarrow -\infty} E(\lambda) = 0, \quad \lim_{\lambda \rightarrow \infty} E(\lambda) = I,$$

$$3. I = \int_{-\infty}^{\infty} dE(\lambda),$$

$$4. A = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda).$$

$E(\lambda)$ nazywa się *rozkładem jedności* (lub *rodziną spektralną*) operatora A . Zbiór punktów, w których $E(\lambda)$ nie jest stałe, nazywamy *widmem* operatora A . Dla każdego λ , $E(\lambda)$ komutuje z A i z każdym operatorem komutującym z A .

Oczywiście w przestrzeni skończenie wymiarowej twierdzenie spektralne sprowadza się do znanego nam twierdzenia o zupełności. W tym miejscu powinniśmy dodać kilka komentarzy. Po pierwsze zauważmy, że nie określiliśmy precyzyjnie, co rozumiemy przez granicę ciągu operatorów (patrz punkt 2 powyższego twierdzenia). Zajmiemy się szerzej tym problemem w rozdziale 8 i 9, ale chyba już teraz warto dodać, że w nierelatywistycznej mechanice kwantowej widmo jest zawsze ograniczone z dołu (tzn. nie mogą występować

stany związane o dowolnie dużej ujemnej energii), a więc granica $\lambda \rightarrow -\infty$ jest jednoznacznie określona. Po drugie, jeżeli A jest operatorem *nieograniczonym* (tzn. jeżeli istnieją elementy H , na których A nie jest określony), to samosprężoność nie oznacza po prostu $(Af, g) = (f, Ag)$ wszędzie tam, gdzie Af i Ag są określone. Nie będziemy dalej rozwijać tego punktu; wystarczy dodać, że wszystkie interesujące nas operatory w nierelatywistycznej mechanice kwantowej są samosprężone.

Mając za sobą ten wstęp matematyczny, przechodzimy teraz do dyskusji aksjomatów mechaniki kwantowej.

Aksjomat I. Każdy układ fizyczny jest całkowicie opisywany przez unormowany wektor ψ (wektor stanu lub funkcję falową) w przestrzeni Hilberta. Każdą informację dotyczącą układu można otrzymać z tego wektora stanu przy pomocy reguł danych przez następne aksjomaty.

Aksjomat II. Każdej obserwabli fizycznej odpowiada samosprężony operator w przestrzeni Hilberta.

Przykładami obserwabli są: położenie, pęd, energia, moment pędu, spin itd. Aksjomat ten umożliwia korzystanie z potężnego aparatu matematycznego, jaki stanowi twierdzenie spektralne. Zauważmy, że Aksjomat II nie podaje metody znalezienia operatora samosprężonego odpowiadającego danej obserwabli. Mówi jedynie, że taki na pewno istnieje. W praktyce opieranie się na analogiach z klasycznymi wyrażeniami typu $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, $E = p^2/2m + V(\mathbf{r})$ itp. wraz z podstawieniami $\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar\nabla$ i $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}$ przynosiło zadowalające rezultaty. W przypadku jednak spinu elektronu trzeba było wyjść poza granice analogii klasycznej, aby znaleźć potrzebny operator.

Aksjomat III. Jedynymi możliwymi wynikami pomiarów fizycznych dokonywanych na obserwabli A są elementy widma odpowiadającego jej operatora.

Omawialiśmy już kilka przykładów widma dyskretnego. Na przykład operator L^2 z § 5.8, odpowiadający kwadratowi całkowitego momentu pędu cząstki, spełnia równanie

$$L^2 Y_{lm} = \hbar^2 l(l+1) Y_{lm}.$$

Tutaj każdej wartości własnej $\hbar^2 l(l+1)$ odpowiada $2l+1$ wektorów własnych. Innym układem o wyjątkowo prostym widmie jest kwantowy oscylator harmoniczny. Klasyczny hamiltonian tego układu ma postać

$$\mathcal{H} = p^2/2m + \frac{1}{2} kx^2$$

i po odpowiednich podstawieniach operatorowych dostajemy operator H odpowiadający energii

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} kx^2.$$

W § 3.10 i § 4.4 widzieliśmy, że operator ten ma wartości własne $\lambda_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2}\right)$, gdzie $\omega_0 = (k/m)^{1/2}$ oraz unormowane wektory własne

$$\phi_n(x) = (\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-1/2} H_n(\alpha x) e^{-\alpha^2 x^2/2},$$

gdzie

$$\alpha = (m\omega_0/\hbar)^{1/2},$$

a H_n jest n -tym wielomianem Hermite'a. Pokazaliśmy już w tym rozdziale, że zbiór ϕ_n jest zupełnym ortonormalnym zbiorem w przestrzeni Hilberta.

Rozważmy teraz przypadek bardzo prostego układu kwantowomechanicznego o widmie ciągłym. Operator odpowiadający pędowi cząstki jest $p_x = -i\hbar d/dx$ (ograniczamy się tylko do składowej x). W przestrzeni funkcji całkownych z kwadratem (funkcje takie muszą dążyć do zera w nieskończoności) p_x jest samosprężony, a więc na mocy twierdzenia spektralnego powinniśmy umieć znaleźć jego rozkład jedności. Gdybyśmy chcieli potraktować ten problem powierzchownie, powiedzielibyśmy po prostu, że p_x ma „funkcje własne” $\phi_k = (2\pi)^{-1/2} e^{ikx}$ i „wartości własne” $\hbar k$ dla każdego k . Czynniki $(2\pi)^{-1/2}$ został tu tak dobrany, aby „unormować e^{ikx} do funkcji δ ”, to znaczy

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_k^*(x) \phi_{k'}(x) dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(k'-k)x} dx = \delta(k-k').$$

Jednocześnie zachodzi związek

$$\int_{-\infty}^{\infty} \phi_k^*(x) \phi_k(x') dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ik(x'-x)} dk = \delta(x-x'),$$

któremu często przypisuje się analogię do związku

$$\sum_{n=1}^N P_n = I$$

w przestrzeniach skończenie wymiarowych. Oczywiście dla pełnej analogii konieczna jest definicja P_k

$$P_k f = \phi_k(\phi_k, f),$$

gdzie k jest zmienną ciągłą ($-\infty < k < \infty$). Zauważmy jednak, że P_k nie jest konwencjonalnym operatorem, wyprowadza bowiem wektory poza przestrzeń Hilberta. Przyczyną tego jest fakt, że ϕ_k nie jest elementem przestrzeni Hilberta i dlatego nie jest wektorem własnym p_x w zwykłym sensie tego słowa. Rozważania te sugerują jednak poprawne rozwiązanie zaistniałego problemu. W oparciu o dotychczasowe wyniki oczekujemy, że chcąc otrzymać rozkład jedności $E(k)$, możemy go skonstruować jako sumę operatorów $P_{k'}$, z $k' < k$. Spróbujmy policzyć

$$E(k)f = \int_{-\infty}^k \phi_{k'}(\phi_{k'}, f) dk'.$$

Po szczegółowym rozpisaniu funkcji dostajemy

$$E(k)f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^k e^{ik'x} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik'y} \hat{f}(y) dy \right] dk'$$

lub

$$E(k)f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^k e^{ik'x} \hat{f}(k') dk', \quad (5.140)$$

gdzie $\hat{f}(k')$ jest transformata Fouriera funkcji $f(x)$. Wspominaliśmy już, że dla każdego elementu przestrzeni funkcji całkownych z kwadratem transformata Fouriera istnieje

i jest całkowalna z kwadratem (ściśły dowód tego podamy w rozdziale 9). Ponieważ $\hat{f}(k')$ jest całkowalna z kwadratem, całka w (5.140) oczywiście istnieje. Pokazanie, że wektor $E(k)f(x)$ należy do przestrzeni Hilberta jest już tylko prostym ćwiczeniem.

Można sprawdzić przez podstawienie, że $E(\infty) = I$ (na mocy naszych wyników dotyczących odwracania transformat Fouriera), oraz że $E(-\infty) = 0$ (bo $\hat{f}(k')$ jest całkowalna z kwadratem). Musimy jeszcze pokazać, że $E(k_1)E(k_2) = E(k_1)$ (gdzie dodaliśmy założenie $k_1 < k_2$, nie zmniejszające ogólności rozważań). Rozumujemy następująco:

$$E(k_1)E(k_2)f = E(k_1) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{k_2} e^{ik'x} \hat{f}(k') dk' = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{k_1} e^{ikx} F(k) dk,$$

gdzie $F(k)$ oznacza transformatę Fouriera dla wielkości

$$\int_{-\infty}^{k_2} e^{ik'x} \hat{f}(k') dk'$$

rozważanej jako funkcja x . Transformatę tę można łatwo obliczyć:

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikx} \int_{-\infty}^{k_2} e^{ik'x} \hat{f}(k') dk' dx = \begin{cases} \sqrt{2\pi} \hat{f}(k) & \text{dla } k_2 > k, \\ 0 & \text{dla } k_2 < k. \end{cases}$$

Wynik ten można najprościej otrzymać w oparciu o (5.63). Tak więc, zważywszy, że $k_1 < k_2$,

$$E(k_1)E(k_2)f = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{k_1} e^{ikx} \hat{f}(k) dk = E(k_1)f,$$

co zgadza się z naszym żądaniem. Czytelnik może sam sprawdzić, że

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE(k) = I,$$

a tym samym, że istotnie znaleźliśmy rozkład jedności.

Na koniec musimy jeszcze pokazać, że jest to właśnie rozkład jedności p_x , tzn. że

$$p_x = \hbar \int_{-\infty}^{\infty} k dE(k).$$

Można to łatwo uczynić. Widać, że

$$\begin{aligned} \left[\hbar \int_{-\infty}^{\infty} k dE(k) \right] f &= \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} k d \left[\int_{-\infty}^k e^{ik'x} \hat{f}(k') dk' \right] = \\ &= \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} k \frac{d}{dk} \left[\int_{-\infty}^k e^{ik'x} \hat{f}(k') dk' \right] dk = \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} k e^{ikx} \hat{f}(k) dk = \\ &= \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d}{dx} e^{ikx} \hat{f}(k) dk = \frac{-i\hbar}{\sqrt{2\pi}} \frac{d}{dx} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} \hat{f}(k) dk = -i\hbar \frac{df}{dx} = p_x f \end{aligned}$$

dla każdego f , dla którego df/dx należy do przestrzeni Hilberta (pod takim warunkiem dopuszczalna jest przeprowadzona tu zamiana kolejności całkowania i różniczkowania). Zatem istotnie znaleźliśmy rozkład jedności operatora p_x . Oczywiście twierdzenie spektralne

mówi nam, że taki rozkład musi istnieć, my jedynie podaliśmy explicite jego konstrukcję. Tak jak oczekiwaliśmy, widmo p_x jest widmem ciągłym, składającym się ze wszystkich liczb rzeczywistych. W oparciu o przytoczone wyżej nieformalne rozważania czytelnik może pokazać, że rozkład jedności operatora położenia X , zdefiniowanego wzorem $Xf(x) \equiv \equiv x f(x)$, jest funkcją $E(\xi)$ o postaci

$$E(\xi)f(x) = \begin{cases} f(x) & \text{dla } x \leq \xi, \\ 0 & \text{dla } x > \xi. \end{cases}$$

Dla bardziej skomplikowanych operatorów samosprzężonych trudniej jest znaleźć explicite ich rozkłady jedności, ale jest to w zasadzie zawsze możliwe.

Możemy teraz sformułować podstawowy aksjomat mechaniki kwantowej.

Aksjomat IV: Jeżeli w układzie pozostającym w stanie ψ dokonamy pomiaru obserwabli A , to prawdopodobieństwo, że otrzymana w wyniku pomiaru wartość λ będzie leżała pomiędzy λ_1 i λ_2 ($\lambda_2 > \lambda_1$), dane jest wzorem

$$P(\lambda_1, \lambda_2) = \|[E(\lambda_2) - E(\lambda_1)]\psi\|^2,$$

gdzie $E(\lambda)$ jest rozkładem jedności obserwabli A (istnienie jego zapewnia nam aksjomat II i twierdzenie spektralne).

Dzięki unormowaniu $\|\psi\| = 1$ widać, że prawdopodobieństwo otrzymania λ pomiędzy $-\infty$ i $+\infty$ jest 1, tak jak tego wymaga fizyczny sens teorii. Jeżeli $E(\lambda)$ jest stałe pomiędzy λ_1 i λ_2 (tzn. jeżeli pomiędzy λ_1 i λ_2 nie ma punktów należących do widma A), to $E(\lambda_2) - E(\lambda_1) = 0$, a więc żadna z liczb tego przedziału nie może być otrzymana w wyniku pomiaru. Dostaliśmy pełną zgodność z aksjomatem III, co więcej, widać, że aksjomat III zawiera się w aksjomacie IV. Aksjomat III podaliśmy niezależnie ze względów niejako historycznych — stanowił on zwykle centralną część sformułowań elementarnej mechaniki kwantowej. Gdyby nam zależało na maksymalnej zwięzłości, aksjomatu III nie wprowadzilibyśmy w ogóle.

Szczególnie ważny jest przypadek, gdy $E(\lambda)$ jest stałe w przedziale od λ_1 do λ_2 , z wyjątkiem jednego punktu nieciągłości, w którym wartość funkcji zmienia się skokowo. Rozważmy go bardziej szczegółowo zarówno ze względu na jego istotną rolę dla fizyki, jak i dlatego, że ilustruje on świetnie, jak widmo dyskretne powstaje w formalizmie operatorów rzutowych. Intuicyjnie powinniśmy się spodziewać, że nieciągłość $E(\lambda)$ w punkcie $\bar{\lambda}$, po obu stronach którego występują obszary stałości $E(\lambda)$, powinna się wiązać z funkcją własną A . Łatwo pokazać, że tak jest istotnie. Niech λ_+ będzie dowolnym punktem przedziału stałości na prawo od $\bar{\lambda}$ i niech λ_- będzie podobnym punktem na lewo od $\bar{\lambda}$. Przez analogię z przestrzeniami skończenie wymiarowymi spodziewamy się, że jeżeli ψ jest dowolnym elementem przestrzeni Hilberta takim, że $\phi_{\bar{\lambda}} \equiv [E(\lambda_+) - E(\lambda_-)]\psi \neq 0$, to $\phi_{\bar{\lambda}}$ jest funkcją własną A . Rozumujemy następująco:

$$\begin{aligned} A[E(\lambda_+) - E(\lambda_-)]\psi &= \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d\{E(\lambda)[E(\lambda_+) - E(\lambda_-)]\psi\} = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d[E(\lambda)E(\lambda_+)\psi] - \\ &- \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d[E(\lambda)E(\lambda_-)\psi] = \int_{-\infty}^{\lambda_+} \lambda d[E(\lambda)\psi] - \int_{-\infty}^{\lambda_-} \lambda d[E(\lambda)\psi] = \\ &= \int_{\lambda_-}^{\lambda_+} \lambda d[E(\lambda)\psi]. \end{aligned}$$

Jednakże z założenia o stałości funkcji po obu stronach $\bar{\lambda}$ mamy

$$\int_{\lambda_-}^{\lambda_+} \lambda d[E(\lambda)\psi] = \bar{\lambda}[E(\lambda_+) - E(\lambda_-)]\psi = \bar{\lambda}\phi_{\bar{\lambda}}.$$

Zatem

$$A\phi_{\bar{\lambda}} = \bar{\lambda}\phi_{\bar{\lambda}},$$

a więc $\bar{\lambda}$ jest wartością własną A , a $\phi_{\bar{\lambda}}$ wektorem własnym należącym do tej wartości własnej.

Oczywiście $\phi_{\bar{\lambda}}$ nie musi być jedynym wektorem własnym należącym do $\bar{\lambda}$. Gdybyśmy na początku wybrali inne ψ (zauważmy, że zawsze można znaleźć takie ψ , że $[E(\lambda_+) - E(\lambda_-)]\psi \neq 0$), moglibyśmy otrzymać wektor $\tilde{\phi}_{\bar{\lambda}}$ należący do $\bar{\lambda}$, ale różniący się od $\phi_{\bar{\lambda}}$ nie tylko stałym czynnikiem. W takim przypadku mówimy, że $\bar{\lambda}$ ma krotność $\mu > 1$. Pozostawiamy czytelnikowi jako ćwiczenie pokazanie, że jeżeli $\Phi_{\bar{\lambda}}$ jest jedynym unormowanym wektorem własnym należącym do $\bar{\lambda}$ (tzn. jeżeli $\bar{\lambda}$ ma krotność 1), to dla każdego $\psi \in H$

$$[E(\lambda_+) - E(\lambda_-)]\psi = \Phi_{\bar{\lambda}}(\Phi_{\bar{\lambda}}, \psi), \quad (5.141)$$

z λ_+ i λ_- wybranymi jak wyżej. Zatem, tak jak należałoby oczekiwać na podstawie analogii do przypadku skończenie wymiarowego, nieciągłość w $E(\lambda)$ (a ściślej mówiąc skok w punkcie nieciągłości) w punkcie odpowiadającym wartości własnej $\bar{\lambda}$ jest dokładnie operatorem rzutującym na jednowymiarową podprzestrzeń przestrzeni H , rozpiętą na $\Phi_{\bar{\lambda}}$. Jeżeli $\bar{\lambda}$ ma krotność μ większą niż jeden, to nieciągłość ta jest operatorem rzutowym, rzutującym na μ -wymiarową podprzestrzeń H rozpiętą na μ wektorach własnych należących do $\bar{\lambda}$. W ogólności możemy zatem napisać

$$[E(\lambda_+) - E(\lambda_-)]\psi = \sum_{\nu=1}^{\mu} \Phi_{\bar{\lambda}}^{(\nu)}(\Phi_{\bar{\lambda}}^{(\nu)}, \psi), \quad (5.142)$$

gdzie μ jest krotnością $\bar{\lambda}$ (patrz zadanie 5.25).

Powróćmy teraz do naszej interpretacji aksjomatu IV. Widać, że w przypadku skoku w $E(\lambda)$ gdzieś pomiędzy λ_1 i λ_2 prawdopodobieństwo otrzymania w wyniku pomiaru A wartości pomiędzy λ_1 i λ_2 jest, zgodnie z (5.141), po prostu

$$P(\lambda_1, \lambda_2) = |(\Phi_{\bar{\lambda}}, \psi)|^2,$$

gdzie $\bar{\lambda}$ jest punktem nieciągłości; założyliśmy tutaj, że $\bar{\lambda}$ ma krotność 1. Tak więc $P(\lambda_1, \lambda_2)$ jest po prostu kwadratem modułu składowej ψ w „kierunku” określonym w przestrzeni Hilberta przez wektor własny $\Phi_{\bar{\lambda}}$ należący do $\bar{\lambda}$. Bardziej ogólnie, gdy $\bar{\lambda}$ ma krotność μ , mamy

$$P(\lambda_1, \lambda_2) = \sum_{\nu=1}^{\mu} |(\Phi_{\bar{\lambda}}^{(\nu)}, \psi)|^2. \quad (5.143)$$

Okazuje się, że równania (5.141) i (5.142) prowadzą do bardzo prostych wzorów na prawdopodobieństwo znalezienia się A w stanie należącym do widma dyskretnego.

Podobna sytuacja ma miejsce dla obserwabli o widmie ciągłym. Rozważmy jedną ze składowych pędu, p_x . Na podstawie dotychczasowych wyników wiemy, że prawdopodobieństwo znalezienia p_x pomiędzy $\hbar k_1$ i $\hbar k_2$ jest

$$P(k_1, k_2) = \|[E(\hbar k_2) - E(\hbar k_1)]\psi\|^2 = \left\| \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{k_1}^{k_2} e^{ikx} \hat{\psi}(k) dk \right\|^2 = \int_{k_1}^{k_2} |\hat{\psi}(k)|^2 dk,$$

gdzie ponownie skorzystaliśmy z (5.63). W języku bardziej konwencjonalnym $P(k_1, k_2)$ jest po prostu ciągłą superpozycją amplitud prawdopodobieństwa typu „fal płaskich”.

Zdefiniujemy teraz *wartość oczekiwaną* operatora A .

Definicja. $\langle A \rangle \equiv \lim \sum_i \bar{\lambda}_i \| [E(\lambda_i + \Delta) - E(\lambda_i)] \psi \|^2$ jest *wartością oczekiwaną* obserwabli A w układzie opisywanym wektorem stanu ψ . Podzieliliśmy tutaj widmo na przedziały o długości Δ i $\bar{\lambda}_i$ jest dowolnym punktem w i -tym przedziale. Przez symbol \lim rozumiemy granicę, w której długość przedziału dąży do zera.

Fizyczny sens wartości oczekiwanej jest bardzo prosty. Jest to wartość, jaką otrzymalibyśmy, biorąc średnią z dużej ilości pomiarów A w układach fizycznych znajdujących się w stanie ψ . Każdy możliwy wynik pomiaru, $\bar{\lambda}_i$, jest obdarzony w tym wzorze pewną wagą, równą prawdopodobieństwu znalezienia wyniku w otoczeniu $\bar{\lambda}_i$. Zauważmy, że $\langle A \rangle$ jest liczbą, a nie operatorem.

Twierdzenie. $\langle A \rangle = (\psi, A\psi)$.

Dowód. Zgodnie z definicją całki Stieltjesa (5.139)

$$(\psi, A\psi) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda d[(\psi, E(\lambda)\psi)] = \lim \sum_i \bar{\lambda}_i (\psi, [E(\lambda_i + \Delta) - E(\lambda_i)]\psi).$$

Z drugiej strony, $[E(\lambda_i + \Delta) - E(\lambda_i)]^2 = [E(\lambda_i + \Delta) - E(\lambda_i)]$, a więc korzystając z samo-sprężoności E , dostajemy

$$\begin{aligned} (\psi, A\psi) &= \lim \sum_i \bar{\lambda}_i ([E(\lambda_i + \Delta) - E(\lambda_i)]\psi, [E(\lambda_i + \Delta) - E(\lambda_i)]\psi) = \\ &= \lim \sum_i \bar{\lambda}_i \| [E(\lambda_i + \Delta) - E(\lambda_i)]\psi \|^2 = \langle A \rangle. \end{aligned}$$

Przy pomocy wartości oczekiwanej operatora A definiujemy średnie odchylenie kwadratowe $(\Delta A)^2$, które jest miarą dyspersji rozkładu wokół wartości średniej $\langle A \rangle$.

Definicja. $(\Delta A)^2$ jest wartością oczekiwaną operatora $[A - \langle A \rangle]^2$ w stanie ψ , w którym obliczamy $\langle A \rangle$.

Twierdzenie. $(\Delta A)^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$.

$$\begin{aligned} \text{Dowód. } (\Delta A)^2 &= \langle [A - \langle A \rangle]^2 \rangle = (\psi, [A - \langle A \rangle]^2 \psi) = (\psi, [A^2 - 2A\langle A \rangle + \langle A \rangle^2] \psi) = \\ &= (\psi, A^2 \psi) - 2(\psi, A\psi)\langle A \rangle + \langle A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2. \end{aligned} \quad \text{c.b.d.o.}$$

Przy otrzymaniu tego wyniku skorzystaliśmy kilkakrotnie z poprzedniego twierdzenia.

Zauważmy, że zgodnie z naszą definicją,

$$(\Delta A)^2 = (\psi, [A - \langle A \rangle]^2 \psi) = ([A - \langle A \rangle]\psi, [A - \langle A \rangle]\psi),$$

ponieważ A jest operatorem samosprężonym i $\langle A \rangle$ jest rzeczywiste. Zatem

$$(\Delta A)^2 = \| [A - \langle A \rangle]\psi \|^2,$$

a więc, jeżeli $\Delta A = 0$ dla jakiegoś ψ , to musi zachodzić $[A - \langle A \rangle]\psi = 0$, czyli ψ musi być wektorem własnym A o wartości własnej $\langle A \rangle$. Wynika stąd bardzo ważny fakt, a mianowicie, że o ile ψ nie jest stanem własnym A , nie można dokonać idealnie dokładnego pomiaru A w tym stanie. Zatem tylko wartości A należące do widma dyskretnego można wyznaczyć z idealną dokładnością. Dla innych wartości zawsze mamy pewną dyspersję ΔA związaną z wynikami pomiarów.

Można sprawdzić, że jeżeli ψ jest równe Φ_n , unormowanemu wektorowi własnemu A należącemu do wartości własnej λ_n , to rzeczywiście $\Delta A = 0$. Istotnie, z dwóch równości

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= (\Phi_n, A\Phi_n) = \lambda_n, \\ \langle A^2 \rangle &= (\Phi_n, A^2\Phi_n) = (A\Phi_n, A\Phi_n) = \lambda_n^2,\end{aligned}$$

wynika

$$\langle \Delta A \rangle^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 = \lambda_n^2 - \lambda_n^2 = 0.$$

Ponadto, jeżeli $\psi = \Phi_n$, to prawdopodobieństwo otrzymania w wyniku pomiaru A wartości λ z przedziału pomiędzy λ_1 i λ_2 jest zero, gdy $[\lambda_1, \lambda_2]$ nie zawiera λ_n i jeden, gdy $[\lambda_1, \lambda_2]$ zawiera λ_n . Dla dowodu wystarczy pokazać, że prawdopodobieństwo znalezienia λ w małym przedziale wokół λ_n jest równe 1. Zgodnie z aksjomatem IV mamy

$$P(\lambda_n - \varepsilon, \lambda_n + \varepsilon) = |[E(\lambda_n + \varepsilon) - E(\lambda_n - \varepsilon)]\Phi_n|^2 = |(\Phi_n, \Phi_n)|^2 = 1,$$

gdzie skorzystaliśmy z (5.142). Tak więc prawdopodobieństwo, że w wyniku pomiaru A otrzymamy wartość λ_n jest równe 1. Innymi słowy, jeżeli układ znajduje się akurat w stanie własnym A w tym sensie, że wektor stanu jest wektorem własnym A , a nie superpozycją różnych wektorów własnych, to z całą pewnością wynik pomiaru A będzie wartością własną odpowiadającą temu wektorowi własnemu.

Po tej szczegółowej analizie przypadku pojedynczego pomiaru wspomnimy krótko o ważnym uogólnieniu aksjomatu IV, dopuszczającym jednoczesny pomiar różnych obserwabli.

Aksjomat IV'. Niech A , B i C będą obserwabliami takimi, że odpowiadające im liniowe operatory komutują, to znaczy $[A, B] = [A, C] = [B, C] = 0$. Wówczas prawdopodobieństwo, że jednoczesny pomiar A , B i C w układzie opisywanym wektorem stanu ψ da wartość A pomiędzy a_1 i a_2 , B pomiędzy b_1 i b_2 , a C pomiędzy c_1 i c_2 , wyraża się wzorem

$$P(a_1, a_2; b_1, b_2; c_1, c_2) = |[E_A(a_2) - E_A(a_1)] [E_B(b_2) - E_B(b_1)] [E_C(c_2) - E_C(c_1)]\Psi|^2,$$

gdzie $E_A(a)$, $E_B(b)$ i $E_C(c)$ są rozkładami jedności odpowiednio A , B i C .

W przypadku pojedynczego pomiaru aksjomat IV' jest oczywiście równoważny aksjomatowi IV.

Zauważmy, że dzięki komutowaniu A , B i C komutują również $E_A(a)$, $E_B(b)$ i $E_C(c)$, a zatem kolejność występowania operatorów rzutowych po prawej stronie tego wzoru nie jest istotna. Oczywiście gdyby kolejność odgrywała jakąś rolę, pojęcie jednoczesnego pomiaru straciłoby sens. Mechanika kwantowa zaprzecza możliwości jednoczesnego pomiaru niekomutujących obserwabli, stąd też p_x i x , dla których $[x, p_x] = i\hbar$, nie mogą być zmierzone jednocześnie. Więcej światła na znaczenie jednoczesnego pomiaru obserwabli rzuci dyskusja aksjomatu VI omawianego dalej.

Wszystko, o czym mówiliśmy dotychczas, dotyczyło własności układu fizycznego w ustalonym momencie czasu. Musimy teraz określić, co dzieje się z układem, gdy czas się zmienia.

Aksjomat V. Dla każdego układu fizycznego istnieje operator hermitowski H (zwany hamiltonianem lub operatorem energii), określający rozwój w czasie wektora stanu układu, Ψ , poprzez tzw. zależne od czasu równanie Schrödingera:

$$H\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t}, \quad (5.144)$$

przy założeniu, że układ nie podlega zakłóceniom z zewnątrz (np. związanym z pomiarem). Tutaj \hbar jest stałą równą $1,054 \cdot 10^{-27}$ erg · s.

Aksjomat I mówi, że wektor stanu Ψ jest unormowany. Dla uzyskania pewności, że nasz układ aksjomatów nie jest sprzeczny, musimy pokazać, że opisywana równaniem (5.144) zmiana wektora stanu nie ma wpływu na jego normalizację. Innymi słowy, musimy dowieść następujące twierdzenie:

Twierdzenie.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Psi, \Psi) = 0.$$

Dowód.

$$\frac{\partial}{\partial t} (\Psi, \Psi) = \left(\frac{\partial \Psi}{\partial t}, \Psi \right) + \left(\Psi, \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right).$$

Ale

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} H\Psi,$$

a więc

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\Psi, \Psi) &= \left(\frac{1}{i\hbar} H\Psi, \Psi \right) + \left(\Psi, \frac{1}{i\hbar} H\Psi \right) = -\frac{1}{i\hbar} (H\Psi, \Psi) + (\Psi, H\Psi) \frac{1}{i\hbar} = \\ &= -\frac{1}{i\hbar} (\Psi, H\Psi) + (\Psi, H\Psi) \frac{1}{i\hbar} = 0, \end{aligned}$$

ponieważ H jest samosprzężony. Tak więc aksjomat I jest zgodny z aksjomatem V.

Na ogół rozwiązanie zależnego od czasu równania Schrödingera dla hamiltonianu będącego skomplikowaną funkcją czasu jest sprawą trudną. Jeżeli jednak hamiltonian nie zależy od czasu, problem poważnie się upraszcza. W takim przypadku przy pomocy elementarnych przeliczeń można sprawdzić, że rozwiązanie równania (5.144), które dla $t = 0$ sprowadza się do $\Psi(x, 0)$, jest po prostu

$$\Psi(x, t) = e^{-iHt/\hbar} \Psi(x, 0). \quad (5.145)$$

Ponieważ operator H jest samosprzężony, dysponujemy jego rozkładem jedności i (5.145) przybiera postać

$$\Psi(x, t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\varepsilon t/\hbar} d[E(\varepsilon)\Psi(x, 0)]. \quad (5.146)$$

Znowu można w sposób elementarny sprawdzić, że tak określone $\Psi(x, t)$ spełnia równanie (5.144). Zauważmy, że jeżeli widmo H jest czysto dyskretne, to zgodnie z (5.143) równanie (5.146) przechodzi w

$$\Psi(x, t) = \sum_n e^{-i\varepsilon_n t/\hbar} (\phi_n, \Psi(t=0)) \phi_n(x), \quad (5.147)'$$

gdzie ϕ_n są wektorami własnymi H , a ε_n odpowiadającymi im wartościami własnymi. Zgodnie z aksjomatem IV, prawdopodobieństwo otrzymania wartości ε_n przy pomiarze energii układu o wektorze stanu $\Psi(x, 0)$ jest po prostu

$$P(\varepsilon_n; t=0) = |(\phi_n, \Psi(t=0))|^2.$$

Z (5.147) widać, że w chwili czasu t prawdopodobieństwo otrzymania wartości ε_n przy pomiarze H jest

$$P(\varepsilon_n; t) = |e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}(\phi_n, \Psi(t=0))|^2 = |(\phi_n, \Psi(t=0))|^2 = P(\varepsilon_n; t=0),$$

tzn. prawdopodobieństwo uzyskania dowolnej konkretnej wartości energii nie zależy od czasu.

Rozważmy teraz przypadek bardziej ogólny. Przypuśćmy, że A jest dowolną obserwabłą o rozkładzie jedności $E_A(\lambda)$. Zgodnie z aksjomatem IV, prawdopodobieństwo otrzymania wartości A pomiędzy λ_1 i λ_2 jest

$$P(\lambda_1, \lambda_2; t) = \|[E_A(\lambda_2) - E_A(\lambda_1)]e^{-iHt/\hbar}\Psi(x, 0)\|^2,$$

gdzie skorzystaliśmy z (5.145) zakładając nadal, że H nie zależy od czasu. Oczywiście na ogół $P(\lambda_1, \lambda_2; t)$ zależy od czasu, są jednak dwie ważne sytuacje, gdy tak nie jest.

1. $\Psi(x, 0) = \phi_n(x)$, gdzie $\phi_n(x)$ jest wektorem własnym H .

W tym przypadku

$$P(\lambda_1, \lambda_2; t) = \|[E_A(\lambda_2) - E_A(\lambda_1)]e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}\phi_n(x)\|^2,$$

ale $e^{-i\varepsilon_n t/\hbar}$ jest liczbą zespoloną o module 1 i nie może mieć wpływu na wartość normy, a więc

$$P(\lambda_1, \lambda_2; t) = \|[E_A(\lambda_2) - E_A(\lambda_1)]\phi_n\|^2 = P(\lambda_1, \lambda_2; t=0).$$

2. H komutuje z A .

W tym przypadku H komutuje także z $E_A(\lambda)$, a więc

$$P(\lambda_1, \lambda_2; t) = \|e^{-iHt/\hbar}[E_A(\lambda_2) - E_A(\lambda_1)]\Psi(x, 0)\|^2.$$

Ale na mocy twierdzenia 4.13 dostajemy

$$P(\lambda_1, \lambda_2; t) = \|[E_A(\lambda_2) - E_A(\lambda_1)]\Psi(x, 0)\|^2 = P(\lambda_1, \lambda_2; t=0),$$

ponieważ $\exp[-iHt/\hbar]$ jest operatorem unitarnym. Wynika stąd, że wyniki pomiarów obserwabli, które komutują z hamiltonianem, nie zależą od tego, w jakim momencie czasu pomiar został przeprowadzony.

Przeanalizujmy teraz przykładowo sytuację dla pewnej szczególnej obserwabli, a mianowicie dla operatora położenia cząstki. Wprowadziliśmy już poprzednio operator X zdefiniowany wzorem $Xf(x) \equiv xf(x)$ i stwierdziliśmy (patrz zadanie 5.26), że jego rozkład jedności dany jest wzorem

$$E_X(\xi)f(x) = \begin{cases} f(x) & \text{dla } x \leq \xi, \\ 0 & \text{dla } x > \xi. \end{cases}$$

Pytamy teraz, jakie jest prawdopodobieństwo, że cząstka w stanie Ψ znajdzie się pomiędzy ξ_1 i ξ_2 ? Zgodnie z aksjomatem IV,

$$P(\xi_1, \xi_2; t) = \|[E_X(\xi_2) - E_X(\xi_1)]\Psi(x, t)\|^2.$$

Z definicji $E_X(\xi)$ wynika, że wektor, którego normę mamy obliczyć, jest po prostu funkcją równą zeru na zewnątrz przedziału $[\xi_1, \xi_2]$ i równą $\Psi(x, t)$ wewnątrz tego przedziału. Zatem

$$P(\xi_1, \xi_2; t) = \int_{\xi_1}^{\xi_2} |\Psi(x, t)|^2 dx.$$

Zauważmy, że prawdopodobieństwo znalezienia cząstki gdziekolwiek jest jedynką dzięki unormowaniu Ψ . Jeżeli położymy $\xi_1 = \xi - \Delta/2$ i $\xi_2 = \xi + \Delta/2$, to dla małych Δ widać, że prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w małym przedziale o długości Δ wokół punktu ξ jest równe $P = |\Psi(\xi, t)|^2 \Delta$; stąd $|\Psi(x, t)|^2$ nazywa się *gęstością prawdopodobieństwa*, $\varrho(x, t)$. Wynik ten podaje się często na początku kursu mechaniki kwantowej. Historycznie został on odkryty w trakcie pionierskich prac Borna nad probabilistyczną interpretacją mechaniki kwantowej. Tutaj podaliśmy ten rezultat jako przypadek szczególny aksjomatu IV. Zauważmy, że w ogólności prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w określonym obszarze zależy od czasu, jeżeli jednak $\Psi(x, t)$ jest stanem własnym hamiltonianu, to $\Psi(x, t)$ wiąże się z $\Psi(x, 0)$ jedynie przez czynnik fazowy i $|\Psi(x, t)|^2 = |\Psi(x, 0)|^2$, a więc prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w dowolnym obszarze jest stałe w czasie. Dlatego właśnie stany własne hamiltonianu są często nazywane *stanami stacjonarnymi*.

Na koniec obliczymy w oparciu o aksjomat V prawdopodobieństwo $P(\xi_1, \xi_2; t)$ dla konkretnego stanu początkowego $\Psi(x, t = 0)$. Dla prostoty założymy, że $\Psi(x, 0)$ dane jest wzorem

$$\Psi(x, 0) = (1/\sqrt[4]{\pi a^2}) e^{-x^2/2a^2}.$$

Stąd początkowa gęstość prawdopodobieństwa jest równa $(1/\pi^{1/2} a) e^{-x^2/a^2}$ i prawdopodobieństwo znalezienia cząstki w odległości większej niż a od początku układu jest bardzo małe w porównaniu z prawdopodobieństwem znalezienia cząstki w przedziale od $-a$ do a . Załóżmy, że mamy do czynienia z cząstką swobodną (i ograniczmy się do zbadania występującej w tym problemie zależności od x). Hamiltonian jest równy po prostu $H = p_x^2/2m$, gdzie m jest masą cząstki, a więc zgodnie z aksjomatem V i (5.145),

$$\Psi(x, t) = e^{-i p_x^2 t / 2m \hbar} \frac{1}{\sqrt[4]{\pi a^2}} e^{-x^2/2a^2}.$$

Korzystając z (5.146) i przedstawienia spektralnego, które dla p_x już wyznaczyliśmy, otrzymujemy

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi a^2}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i \hbar k^2 t / 2m} d[E(k) e^{-x^2/2a^2}].$$

Ale, zgodnie z poprzednimi rozważaniami,

$$E(k)f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^k e^{i k' x} \hat{f}(k') dk',$$

gdzie \hat{f} oznacza transformatę Fouriera funkcji f . Transformatę Fouriera funkcji $\Psi(x, 0)$ łatwo obliczyć, jest ona równa

$$\hat{\Psi}(k, 0) = \sqrt[4]{\frac{a^2}{\pi}} e^{-a^2 k^2 / 2}.$$

Zatem

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= \sqrt[4]{\frac{a^2}{4\pi^3}} e^{-i \hbar k^2 t / 2m} d \left[\int_{-\infty}^k e^{i k' x} e^{-a^2 k'^2 / 2} dk' \right] = \\ &= \sqrt[4]{\frac{a^2}{4\pi^3}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i \hbar k^2 t / 2m} e^{-a^2 k^2 / 2} e^{i k x} dk. \end{aligned}$$

Po obliczeniu tej ostatniej całki dostajemy

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{a + i \frac{\hbar t}{ma}}} \exp \left[-\frac{x^2}{2a(a + i\hbar t/ma)} \right],$$

a zatem gęstość prawdopodobieństwa dana jest wzorem

$$\rho(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = (1/\sqrt{\pi\Delta^2})e^{-x^2/\Delta^2},$$

gdzie $\Delta^2 = a^2 + (\hbar t/ma)^2$. Widać, że szerokość rozkładu prawdopodobieństwa rośnie z czasem. Zjawisko to znane jest pod nazwą „rozpływania się paczek falowych”. Szerokość początkowa była równa $2a$; szerokość po czasie t jest $2\sqrt{a^2 + (\hbar t/ma)^2}$. Żeby zdobyć pojęcie o tym, jakie wartości liczbowe wchodzi tu w grę, rozważmy konkretny przypadek. Niech cząstki nasze będą elektronami, a $a \equiv 1$ mm. Odpowiada to sytuacji, gdy dysponujemy wiązką elektronów skolimowaną przez szczelinę o szerokości równej w przybliżeniu 1 mm. Jeżeli wstawimy do wzoru $m = 9 \cdot 10^{-28}$ g i $\hbar = 10^{-27}$ erg · s, to stwierdzimy, że szerokość podwaja się po około 15 milisekundach. Jest to okres bardzo krótki w skali makroskopowej, ale dla elektronów bardzo długi. Na przykład często spotyka się prędkości elektronów rzędu 10^8 cm/s. Taki elektron w ciągu 15 ms przebyłby drogę $1,5 \cdot 10^6$ cm czyli 15 km! Zatem wiązka elektronów mająca szerokość początkową 1 mm i poruszająca się z prędkością 10^8 cm/sek przebyłaby 15 km zanim szerokość jej uległaby podwojeniu. Rachunek taki zakłada oczywiście, że elektrony są istotnie swobodne; zanedbujemy zderzenia, siły elektromagnetyczne, siły grawitacyjne itp.

Do pełnego układu aksjomatów brakuje nam jeszcze metody zdobywania informacji na temat wektora stanu Ψ , podstawowej wielkości z poprzedniego aksjomatu. Klucz do tego zagadnienia stanowi następujący aksjomat.

Aksjomat VI. Jeżeli w chwili $t = 0$ zmierzmy jednocześnie komutujące ze sobą obserwabli A , B i C i stwierdzimy na pewno, że wartości tych obserwabli leżą odpowiednio w przedziałach pomiędzy a_1 i a_2 , b_1 i b_2 oraz c_1 i c_2 , to bezpośrednio po pomiarze wektor stanu spełnia równanie

$$[E_A(a_2) - E_A(a_1)] [E_B(b_2) - E_B(b_1)] [E_C(c_2) - E_C(c_1)] \Psi = \Psi. \quad (5.148)$$

Można powiedzieć, że pomiar powoduje zrzutowanie początkowej funkcji falowej na podprzestrzeń przestrzeni Hilberta związaną z operatorem rzutowym

$$[E_A(a_2) - E_A(a_1)] [E_B(b_2) - E_B(b_1)] [E_C(c_2) - E_C(c_1)].$$

Zauważmy, że dzięki aksjomatowi IV z równania (5.148) wynika że jeżeli ponownie zmierzmy A (czy B lub C) bezpośrednio po pierwszym pomiarze, to otrzymamy wartość pomiędzy a_1 i a_2 (czy też b_1 i b_2 lub c_1 i c_2) z prawdopodobieństwem jeden.

Rozważmy najpierw pomiar jednej obserwabli, powiedzmy A . Jeżeli pomiędzy a_1 i a_2 jest tylko jeden punkt a należący do widma operatora A , to, zgodnie z (5.141),

$$\Psi = e^{iz}\phi_a,$$

o ile a nie jest zdegenerowane. Tutaj ϕ_a jest unormowanym wektorem własnym A należącym do a , a e^{iz} jest czynnikiem fazowym, którego nie można wyznaczyć. Oczywiście, zgodnie z poprzednimi aksjomatami, czynnik ten nie ma wpływu na wyniki pomiarów. W takim przypadku pomiar A w pewnym sensie „wtrąca” układ w stan własny operatora A . Za-

uważmy, że nie wynika stąd, że układ był w stanie ϕ_a przed pomiarem, a jedynie, że jest w stanie ϕ_a po pomiarze. Myśmy niejako „przygotowali” układ w stanie ϕ_a . Gdyby wartość własna a miała krotność $\mu_a > 1$, to, zgodnie z (5.142), po pomiarze A możemy powiedzieć jedynie, że wektor stanu znajduje się w podprzestrzeni przestrzeni Hilberta rozpiętej na μ_a ortonormalnych wektorach własnych A należących do a , to znaczy

$$\Psi = \sum_{\nu=1}^{\mu_a} c_{\nu} \phi_a^{(\nu)},$$

gdzie

$$\sum_{\nu=1}^{\mu_a} |c_{\nu}|^2 = 1.$$

Zatem w tym przypadku nie da się przez pomiar A wtrącić układu w jeden określony stan.

Aksjomat VI pozostawia nam jednak dalsze możliwości. Możemy wybrać teraz *inną* obserwabę B , której operator komutuje z A , a następnie zmierzyć A i B jednocześnie. Przypuśćmy, że stwierdzimy, iż wartość A leży na pewno pomiędzy a_1 i a_2 , a wartość B leży na pewno pomiędzy b_1 i b_2 . Ponownie zakładamy, że a jest jedynym punktem widma A w przedziale pomiędzy a_1 i a_2 i że a ma krotność μ_a . Wówczas

$$[E_A(a_2) - E_A(a_1)]\Psi = \sum_{\nu=1}^{\mu_a} c_{\nu} \phi_a^{(\nu)} \quad (5.149)$$

Zakładamy również, że pomiędzy b_1 i b_2 jest tylko jeden punkt b należący do widma B i że ma on krotność μ_b . Z (5.142) i (5.149) dostajemy

$$[E_B(b_2) - E_B(b_1)] [E_A(a_2) - E_A(a_1)]\Psi = \sum_{\nu=1}^{\mu_a} \sum_{\lambda=1}^{\mu_b} c_{\nu} (\phi_b^{(\lambda)}, \phi_a^{(\nu)}) \phi_b^{(\lambda)}.$$

Wiemy z twierdzenia 4.22, że każdy wektor własny A musi być wektorem własnym B i vice versa, a więc $(\phi_b^{(\lambda)}, \phi_a^{(\nu)}) = 1$ dla $\phi_b^{(\lambda)} = \phi_a^{(\nu)}$ i znika w przeciwnym przypadku. Może się zdarzyć, że jest tylko jedna para $(\bar{\lambda}, \bar{\nu})$, dla której $(\phi_b^{(\bar{\lambda})}, \phi_a^{(\bar{\nu})}) = 1$. W takim przypadku aksjomat VI mówi, że

$$\Psi = e^{i\theta} \phi_b^{(\bar{\lambda})} = e^{i\theta} \phi_a^{(\bar{\nu})},$$

a więc wektor stanu układu został jednoznacznie wyznaczony.

Jeżeli występuje więcej niż jedna taka para, dla której nie znika $(\phi_b^{(\lambda)}, \phi_a^{(\nu)})$, to zbierając wszystkie takie pary, dostajemy

$$\Psi = \sum_i c_{\nu_i} \phi_b^{(\lambda_i)} = \sum_i c_{\nu_i} \phi_a^{(\nu_i)},$$

tzn. Ψ leży w podprzestrzeni przestrzeni Hilberta rozpiętej na wspólnych wektorach własnych operatorów A i B należących do a i b . W tym ostatnim przypadku wektor stanu nie jest wyznaczony jednoznacznie, a więc musimy znaleźć nową obserwabę C komutującą z A i B i powtórzyć cały proces. W ten sposób kiedyś wreszcie uda nam się wyznaczyć jednoznacznie stan układu.

Zbiór komutujących obserwabli o tej własności, że ich jednoczesny pomiar określa jednoznacznie wektor stanu układu, nazywa się *zupelnym zbiorem* komutujących obser-

wabli. Na przykład, dla elektronu w polu kulombowskim przy zaniedbaniu spinu zbiór taki tworzą H , L^2 i L_z (gdzie $H = p^2/2m - e^2/r$, a L jest orbitalnym momentem pędu elektronu). Samo H i L^2 nie tworzą zupełnego zbioru obserwabli, ponieważ po pomiarze energii i całkowitego momentu pędu pozostaje jeszcze degeneracja odpowiadająca możliwym wartościom z -towej składowej momentu pędu. Jeżeli uwzględnimy spin elektronu, to H , L^2 , S^2 , J^2 i J_z tworzą zupełny zbiór. Tutaj S jest spinowym momentem pędu elektronu, a $J = L + S$ jest całkowitym momentem pędu elektronu. Zbiór ten nie jest jednoznaczny. Podobną własność ma H , L^2 , L_z , S^2 i S_z . Który ze zbiorów jest bardziej pożyteczny — to zależy od konkretnej sytuacji. Gdybyśmy chcieli uwzględnić efekty relatywistyczne, włączając oddziaływania magnetyczne poprzez dodanie do hamiltonianu wyrazu $A\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}/r^3$, to drugi z podanych wyżej zbiorów przestaje być zbiorem zupełnym, podczas gdy pierwszy nadal ma tę własność, bo

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} = (J^2 - L^2 - S^2)/2.$$

Tak więc aksjomat VI umożliwia nam bardzo ważne w praktyce kontrolowanie warunków początkowych eksperymentu poprzez przygotowywanie stanów kwantowych. Bez tego aksjomatu aksjomat IV byłby pozbawiony sensu, bowiem gdybyśmy nigdy nie znali wektora stanu układu, nie moglibyśmy mieć nadziei na wyliczenie prawdopodobieństwa otrzymania pewnego konkretnego wyniku przy pomiarze.

Zadania

1. Dowieść na dwa sposoby, że $\int_{-1}^1 P_n(x) dx = 0$ dla $n \neq 0$.

2. Metalową wydrążoną kulę o promieniu R i środku w punkcie $x = y = z = 0$ przecięto na dwie połowy wzdłuż płaszczyzny $z = 0$. Następnie obie połówki rozsunęto na nieskończenie małą odległość i górną naładowano do potencjału $+V$, a dolną do potencjału $-V$. Pokazać, że potencjał wewnątrz kuli wyraża się wzorem

$$\psi(r, \Theta) = V \sum_{l=0}^{\infty} (-1)^l \left(\frac{r}{R}\right)^{2l+1} \frac{(2l)!}{(2^l l!)^2} \frac{4l+3}{2l+2} P_{2l+1}(\cos\Theta),$$

gdzie Θ jest kątem pomiędzy kierunkiem na dany punkt i osią z .

Wskazówka: $\nabla^2 \psi = 0$ wewnątrz i na powierzchni wydrążonej kuli. Oczywiście ψ nie zależy od ϕ (kąta azymutalnego). Poprzez zwykły proces separacji zmiennych stwierdzamy, że rozwiązanie jest postaci

$$\psi(r, \Theta) = \sum_{l=0}^{\infty} [A_l r^l + B_l r^{-l-1}] [C_l P_l(\cos\Theta) + D_l Q_l(\cos\Theta)].$$

Warunek skończoności $\psi(0, \Theta)$ implikuje znikanie wszystkich B_l , a dla $\psi(r, 0)$ oraz $\psi(r, \pi)$ — znikanie wszystkich D_l . Pozostaje problem matematyczny — wyznaczyć stałe $A_l C_l \equiv \alpha_l$ z warunku granicznego:

$$\psi(R, \Theta) = \begin{cases} +V & \text{dla } 0 \leq \Theta < \pi/2, \\ -V & \text{dla } \pi/2 < \Theta \leq \pi. \end{cases}$$

3. Kula z przewodnika o promieniu d znajduje się w nienaładowanym obszarze pola elektrycznego. Rozkład potencjału na jej powierzchni dany jest funkcją $V = F(\Theta)$, gdzie (r, ϕ, Θ) są współrzędnymi sferycznymi z początkiem układu w środku kuli. Wyznaczyć potencjał w każdym punkcie przestrzeni wewnątrz i na zewnątrz kuli, tzn. rozwiązać równanie Laplace'a $\nabla^2 V = 0$ przy założeniu następujących warunków brzegowych:

$$1. \lim_{r \rightarrow d} V(r, \Theta) = F(\Theta), \quad 0 < \Theta < \pi,$$

$$2. \lim_{r \rightarrow \infty} V(r, \Theta) = 0$$

(potencjał znika w punktach położonych daleko od kuli).

Wskazówka: Skorzystać z metody separacji zmiennych. Równanie radialne rozwiązać przez podstawienie $r = e^t$. Po rozwiązaniu położyć wykładnik równy $-\frac{1}{2} + \left(\lambda + \frac{1}{4}\right)^{1/2} = n$ po to, żeby $\lambda = n(n+1)$ (λ jest stałą separacji). Równanie na Θ rozwiązać przez odpowiednią zamianę zmiennych.

Odpowiedź:

$$\text{Wewnątrz kuli: } V(r, \Theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} \frac{r^n}{d^n} P_n(\cos\Theta) \int_{-1}^1 f(x) P_n(x) dx,$$

$$r \leq d, \quad F(\Theta) = f(\cos\Theta).$$

$$\text{Na zewnątrz kuli: } V(r, \Theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2n+1}{2} \frac{d^{n+1}}{r^{n+1}} P_n(\cos\Theta) \int_{-1}^1 f(x) P_n(x) dx.$$

4. a) Pokazać, że dla funkcji

$$f(x) = \begin{cases} -1, & -\pi < x < 0, \\ +1, & 0 < x < \pi, \end{cases}$$

przedstawienie przy pomocy szeregu Fouriera o okresie 2π ma postać

$$f(x) = \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2n-1} \sin(2n-1)x.$$

Porównać ten wynik z rozwinięciem tej samej funkcji na wielomiany Legendre'a — patrz Jackson, *Classical Electrodynamics*, str. 58–59.

b) Wyprowadzić z szeregu Fouriera otrzymanego w (a) przedstawienie π przy pomocy nieskończonego szeregu, w miarę możliwości szybko zbieżnego. Pouczające byłoby zrobienie wykresu kolejnych przybliżeń $f(x)$, tzn. funkcji

$$S_m(x) = \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^m \frac{1}{2n-1} \sin(2n-1)x$$

dla kilku wartości m , aby zobaczyć, jak ze wzrostem m $S_m(x) \rightarrow f(x)$.

c) *Zjawisko Gibbsa:* Pokazać, że szereg Fouriera przekracza tę funkcję o około 18% po lewej i prawej stronie bardzo blisko początku układu współrzędnych. Zadanie to nie jest łatwe. Wskazówki można znaleźć w książce Sommerfelda *Partial Differential Equations in Physics*, str. 7–12, lub u Morse'a i Feshbacha, str. 747.

5. Dowieść, że jeżeli $f(x)$ jest rzeczywiste, to

$$f(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} du \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \cos u(t-x) dt.$$

6. Rozwiązać równanie całkowe

$$\int_0^{\infty} g(t) \cos xt dt = \begin{cases} e^{-\alpha x} & \text{dla } x > 0 \\ e^{\alpha x} & \text{dla } x < 0 \end{cases} \quad (\alpha > 0)$$

Odpowiedź:

$$g(t) = \frac{2}{\pi} \frac{\alpha}{\alpha^2 + t^2}.$$

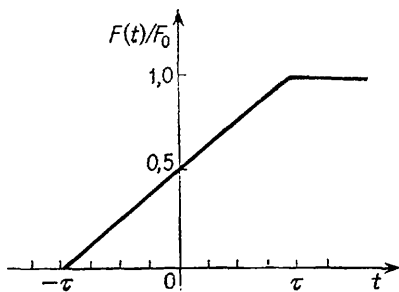
7. a) Pokazać, że energia przekazana sprężynie przez zależną od czasu siłę $F(t)$ określoną wzorem (patrz rys. 5.6)

$$F(t) = \begin{cases} 0, & t < -\tau, \\ F_0(t/2\tau + 1/2), & |t| \leq \tau, \\ F_0, & t > \tau, \end{cases}$$

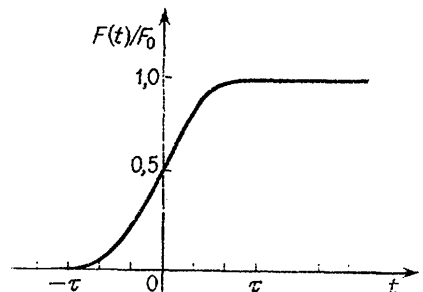
jest

$$\Delta E = \frac{1}{2m} (F_0/\omega)^2 \left(\frac{\sin \omega \tau}{\omega \tau} \right)^2.$$

Wskazówka: Obliczać kolejne pochodne $F(t)$ aż do uzyskania funkcji o znanej transformacji Fouriera.



Rys. 5.6.



Rys. 5.7.

b) Pokazać, że przekazy energii w granicy adiabaticznej i w granicy krótkiego impulsu są zgodne z analogicznymi granicami obliczonymi dla funkcji siły typu całki prawdopodobieństwa (przykład 3, § 5.7).

c) Dla pewnych skończonych wartości $\omega\tau$ nie będzie przekazu energii do sprężyny. Wyznaczyć te wartości i wyjaśnić fizyczny sens tego zjawiska.

Rozwiązać zadanie 7 dla funkcji siły (rys. 5.7)

$$F(t) = \begin{cases} 0, & t < -\tau, \\ F_0 \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{4} \left(\left(\frac{3t}{\tau} \right) - \left(\frac{t}{\tau} \right)^3 \right) \right], & |t| \leq \tau, \\ F_0, & t > \tau. \end{cases}$$

Odpowiedź:

$$\Delta E = \frac{1}{2m} (F_0/\omega)^2 \frac{9}{(\omega_0 \tau)^6} (\sin \omega_0 \tau - \omega_0 \tau \cos \omega_0 \tau)^2.$$

Granice adiabaticzna i krótkiego impulsu powinny się zgadzać i rzeczywiście zgadzają się (dowieść tego) z granicami z zadania 7. Analogicznie do punktu (c) wyznaczyć położenie pierwszego zera w ΔE . Wynik powinien być

$$\omega \tau \cong 4,49.$$

9. Obliczyć trójwymiarowe transformaty Fouriera następujących funkcji:

a) $H(\mathbf{r}) = \frac{e^{-\lambda|\mathbf{r}|}}{|\mathbf{r}|},$

b) $F(\mathbf{r}) = \frac{1}{|\mathbf{r}|}$ (Dla prostoty rozważyc $F(\mathbf{r})$ jako szczególny przypadek $H(\mathbf{r})$).

(c) $Y(\mathbf{r}) = e^{-\lambda|\mathbf{r}|}$ (Transformata Fouriera tej funkcji może być także otrzymana z transformaty $H(\mathbf{r})$).

10. Równania Maxwella w próżni w jednostkach układu Gaussa mają postać:

$$\text{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}, \quad \text{div} \mathbf{H} = 0, \quad \text{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad \text{div} \mathbf{E} = 0.$$

W dowolnej chwili czasu można przeprowadzić analizę fourierowską pola elektrycznego (i magnetycznego):

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{E}(\mathbf{k}, t) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{k}, \text{ itd.}$$

(Tutaj transformata fourierowska funkcji $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$ została oznaczona przez $\mathbf{E}(\mathbf{k}, t)$, a więc pierwszy argument odróżnia samą funkcję od jej transformaty. Jeżeli ktoś uważa tę notację za mylącą, może przyjąć inną).

a) Dowieść, że transformaty Fouriera pola elektrycznego i magnetycznego spełniają następujące równania:

1) $\dot{\mathbf{H}}(\mathbf{k}, t) = -ic(\mathbf{k} \times \mathbf{E}(\mathbf{k}, t)),$

2) $\mathbf{k} \cdot \mathbf{E}(\mathbf{k}, t) = 0,$

3) $\dot{\mathbf{E}}(\mathbf{k}, t) = ic(\mathbf{k} \times \mathbf{H}(\mathbf{k}, t)),$

4) $\mathbf{k} \cdot \mathbf{H}(\mathbf{k}, t) = 0.$

Te cztery równania są równoważne równaniom Maxwella. Przejście od równań Maxwella do nich jest dobrym punktem wyjścia dla kwantowomechanicznej analizy pola elektromagnetycznego.

b) Korzystając z wyników punktu (a) dowieść, że transformata Fouriera pola elektrycznego spełnia jednorodne równanie falowe, to znaczy

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} + c^2 k^2 \right] \mathbf{E}(\mathbf{k}, t) = 0.$$

11. Pokazać w sposób nieformalny, że

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \frac{\sin gx}{\pi x}, \quad g > 0$$

jest reprezentacją funkcji δ Diraca.

12. Dowieść, że

$$\delta(x) = \begin{cases} \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{1}{|a|} c_n \left| 1 - \left(\frac{x}{a} \right)^2 \right|^n \right) & \text{dla } 0 \leq |x| \leq a, \\ 0 & \text{w pozostałych przypadkach,} \end{cases}$$

jest również reprezentacją funkcji δ , o ile c_n są dane wzorem (5.28). Pokazać stąd, że $\delta(ax) = (1/|a|)\delta(x)$.

13. Pokazać, że jeżeli $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$, to

$$\nabla^2 \left(\frac{1}{r} \right) = -4\pi \delta^3(\mathbf{r}).$$

Wskazówka: Skorzystać z twierdzenia Greena.

14. Dowieść równość Parsewala (5.11) w przestrzeni Hilberta, stosując relację zupełności Bessela (5.10) do funkcji $f+g$, a następnie odejmując analogiczne relacje dla f i dla g .

15. Operator parzystości P odgrywa zasadniczą rolę w wielu gałęziach fizyki. Pokazać, że wielomiany Gegenbauera są funkcjami własnymi P , tzn. jeżeli wiodąca potęga x w $G_n^m(x)$ jest parzysta, to $G_n^m(x)$ zawiera wyłącznie parzyste potęgi x . Jedną z możliwych metod dowodu polega na sprowadzeniu do niedorzeczności. Niech $G_n^m(x) = g_n^m(x) + u_n^m(x)$, gdzie $g_n^m(x)$ zawiera tylko parzyste, a $u_n^m(x)$ — nieparzyste potęgi x . Wnioskujemy stąd, że $(L - \lambda_n)g_n^m = 0$ i $(L - \lambda_n)u_n^m = 0$, gdzie L jest operatorem Sturm-Liouville'a, którego funkcjami własnymi są wielomiany Gegenbauera. Zatem $g_n^m(x)$ i $u_n^m(x)$ są liniowo niezależnymi (ponieważ należą do różnych wartości własnych P) rozwiązaniami równania Gegenbauera i do tego rozwiązaniami typu wielomianów. Można stąd wywnioskować, że $u_n^m(x) = 0$. (*Wskazówka:* wiemy, że dla wielomianów Gegenbauera $\lambda_n = -n(n+2m+1)$). Zatem $G_n^m(x)$ zawiera tylko parzyste potęgi x i ma parzystość $+1$.

16. Dowieść, że z dokładnością do czynnika fazowego istnieje jeden i tylko jeden zupełny zbiór funkcji ortonormalnych na powierzchni kuli jednostkowej, Y_{lm} . Skorzystać z indukcji względem l przy ustalonym $m = m'$.

17. Pokazać, że jeżeli $[x_i, p_j] = i\hbar \delta_{ij}$ ($i, j = 1, 2, 3$) oraz $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$, to

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k.$$

Definiując $L_+ = L_x + iL_y$ i $L_- = L_x - iL_y$, pokazać, że $[L_+, L_-] = 2\hbar L_z$. Pokazać także, że jeżeli określimy

$$\phi_m = L_+^m \phi_{-l}, \quad L_- \phi_{-l} = 0,$$

gdzie l jest liczbą całkowitą, to

$$L_- \phi_m = \hbar(l+m)(l-m+1)\phi_{m-1}.$$

18. $H_n(x)$ są wielomianami Hermite'a. Dowieść, że dla każdego n :

a) $H_{2n}(0) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!}$, b) $H'_{2n}(0) = 0$,

c) $H_{2n+1}(0) = 0$, d) $H'_{2n+1}(0) = (-1)^n 2 \frac{(2n+1)!}{n!}$.

19. Z definicji wynika jasno, że zbieżność punktowa nie implikuje zbieżności stajnej. Powstaje wobec tego pytanie, czy ze zbieżności punktowej wynika zbieżność w sensie wartości średniej? Pokazać, że ciąg funkcji

$$f_n(x) = \frac{2n^{1/2}}{(\pi/2)^{1/4}} nxe^{(-nx)^2}$$

jest zbieżny punktowo dla każdego x do funkcji zerowej, to znaczy

$$\lim_{n \rightarrow \infty} f_n(x) = 0,$$

ale nie jest do niej zbieżny w sensie wartości średniej, to znaczy

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \int_{-\infty}^{\infty} |0 - f_n|^2 dx = 1 \neq 0.$$

20. Niech $\{Q_n\}$ będzie ortonormalnym układem wielomianów Sturma–Liouville’a. Dowieść, że funkcje Q'_1, Q'_2, \dots tworzą ortogonalny układ wielomianów z wagą wx (notacja jest tutaj taka jak w § 5.10).

21. Pokazać, że zbiór funkcji $\{x^m, x^{m+1}, \dots\}$ jest zbiorem zupełnym w sensie wartości średniej na przedziale $[-1, +1]$ dla $m \geq 1$. (Oczywiście dla $m = 0$ wynika to natychmiast z twierdzenia Weierstrassa).

22. Wyprowadzić pierwsze cztery ortonormalne wielomiany dla zupełnego zbioru $\{x, x^2, x^3, \dots\}$ na przedziale $[-1, +1]$ i napisać kilka pierwszych członów rozwinięcia funkcji $f(x) = 1$ przy pomocy tego zbioru. Jak wyglądają graficznie dwa pierwsze przybliżenia?

23. Rozważmy równanie Bessela $Bf_n = n^2 f_n$ na przedziale $[0, \infty)$, gdzie

$$B = x^2 \frac{d^2}{dx^2} + x \frac{d}{dx} + x^2.$$

a) Przy użyciu metod omówionych w § 5.10 znaleźć wagę odpowiadającą równaniu Bessela.

b) Pokazać, że jeżeli $n \neq m$ i $w(x)$ jest wagą z punktu (a), to

$$\int_0^{\infty} J_{2n}(x) J_{2m}(x) w(x) dx = \int_0^{\infty} J_{2n+1}(x) J_{2m+1}(x) w(x) dx = 0.$$

Można skorzystać z faktu, że dla małych x

$$J_n(x) = \left(\frac{x}{2}\right)^n \left[1 - \frac{x^2}{2(2n+2)} + \dots\right],$$

a dla dużych x

$$J_n(x) = \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \left[\cos\left(x - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) (1 + O(x^{-2})) - \frac{4n^2 - 1}{8} \frac{1}{x} \sin\left(x - \frac{n\pi}{2} - \frac{\pi}{4}\right) (1 + O(x^{-2})) \right].$$

Oba te wyniki można łatwo otrzymać techniką z zakresu zmiennej zespolonej, opisywaną w rozdziale 6.

c) W oparciu o podane w punkcie (b) związki asymptotyczne obliczyć

$$\int_0^{\infty} J_{2n+1}(x) J_{2m}(x) w(x) dx.$$

d) Czy operator B z równania Bessela jest operatorem hermitowskim względem przestrzeni funkcji spełniających

$$\int_0^{\infty} |f(x)|^2 w(x) dx < \infty,$$

gdzie $w(x)$ jest dane w punkcie (a)? (Rozumiemy tutaj oczywiście, że B może działać tylko na funkcje o tej własności, że jeżeli f należy do przestrzeni Hilberta, to Bf także).

24. Pokazaliśmy, że wielomiany Legendre'a, $P_l(x)$, są rozwiązaniami równania

$$(1-x^2)f''(x) - 2xf'(x) + l(l+1)f(x) = 0, \quad l = 0, 1, 2, \dots,$$

ortogonalnymi na przedziale $[-1, 1]$. Nie są to jednak wszystkie rozwiązania, są one tylko jedynymi rozwiązaniami typu wielomianów.

a) Aby się upewnić co do słuszności powyższego stwierdzenia, pokazać, że funkcja

$$\operatorname{artgh} x = \frac{1}{2} \log \left(\frac{1+x}{1-x} \right)$$

spełnia równanie Legendre'a dla $l = 0$. Zwrócić uwagę na to, że funkcja ta jest osobiwa w punktach $x = \pm 1$.

b) Pokazać, że jeżeli szukamy rozwiązania równania Legendre'a w postaci

$$Q_l(x) = P_l(x) \operatorname{artgh} x + \Pi_l(x),$$

gdzie $\Pi_l(x)$ jest wielomianem stopnia $l-1$, to rozwiązanie takie zawsze istnieje. Znaleźć niejednorodne równanie różniczkowe, które musi spełnić $\Pi_l(x)$ i pokazać, że równanie to ma zawsze rozwiązanie. Jaki typ warunku brzegowego został użyty przy żądaniu, aby $\Pi_l(x)$ było wielomianem stopnia $l-1$?

c) Ponieważ $\Pi_l(x)$ jest wielomianem stopnia $l-1$ na przedziale $[-1, 1]$, może być zapisane w postaci kombinacji liniowej wielomianów Legendre'a. Znaleźć współczynniki tej kombinacji liniowej. Dokładnie mówiąc, pokazać, że

$$\Pi_l(x) = 2 \sum_{n=0,1}^{l-1} \frac{2n+1}{(n-l)(n+l+1)} P_n(x),$$

gdzie suma zaczyna się od $n = 0$ dla l nieparzystych i od $n = 1$ dla l parzystych. Przymi przy znaku sumy wskazuje, że wskaźnik sumowania w każdym kroku zmienia się o dwa.

d) Pokazać, że $(Q_l, P_l) = 0$.

Wskazówka: Nie liczyć żadnych całek.

e) Z postaci $Q_l(x)$ widać, że należą one do przestrzeni Hilberta funkcji całkowalnych z kwadratem na $[-1, 1]$. Czy tworzą one ortogonalny zbiór funkcji na $[-1, 1]$? Uzasadnić odpowiedź.

25. Określmy funkcję $E(\lambda)$ o wartościach operatorowych tak jak w § 5.11. Oznaczmy symbolami λ_n i ϕ_n ($n = 1, 2, \dots, N$) niezdegenerowane wartości własne i odpowiadające

im wektory własne operatora hermitowskiego A , a symbolem P_n operator rzutowy związany z ϕ_n . Następnie zdefiniujemy

$$E(\lambda) = \begin{cases} 0 & \text{dla } \lambda < \lambda_1, \\ \sum_{n=1}^{\nu} P_n & \text{dla } \lambda_{\nu} \leq \lambda < \lambda_{\nu+1}, \quad \nu = 1, 2, \dots, N-1, \\ \sum_{n=1}^N P_n = I & \text{dla } \lambda \geq \lambda_N. \end{cases}$$

Pokazać, że

- 1) $E(\lambda_1)E(\lambda_2) = E(\lambda_{\min})$, gdzie $\lambda_{\min} = \min(\lambda_1, \lambda_2)$,
- 2) $E(\lambda)^2 = E(\lambda)$.

26. Niech X będzie samosprzężonym operatorem określonym na przestrzeni Hilberta funkcji całkowalnych z kwadratem wzorem $Xf(x) \equiv xf(x)$.

1) Czy X jest dobrze określony na wszystkich elementach przestrzeni? Jeżeli nie, to scharakteryzować elementy, na których nie jest określony.

2) Dowieść, że $E_X(\xi)$ zdefiniowane wzorem

$$E_X(\xi)f(x) = \begin{cases} f(x) & \text{dla } x \leq \xi, \\ 0 & \text{dla } x > \xi \end{cases}$$

jest rozkładem jedności operatora X .

27. Pokazać, że jeżeli $E_A(\lambda)$ ma skok w punkcie nieciągłości odpowiadającym wartości $\bar{\lambda}$ operatora A , to

$$[E_A(\lambda_+) - E_A(\lambda_-)]\psi = \sum_{\nu=0}^{\mu} \phi_{\bar{\lambda}}^{(\nu)}(\phi_{\bar{\lambda}}^{(\nu)}, \psi),$$

gdzie μ jest krotnością $\bar{\lambda}$, $\{\phi_{\bar{\lambda}}^{(\nu)} : \nu = 1, 2, \dots, \mu\}$ jest zbiorem μ ortonormalnych wektorów własnych A należących do $\bar{\lambda}$, a λ_+ i λ_- są punktami po obu stronach $\bar{\lambda}$ w przedziałach stałości $E(\lambda)$, tzn. $E(\lambda)$ jest stałe w przedziałach $[\bar{\lambda}, \lambda_+]$ i $[\lambda_-, \bar{\lambda}]$. A jest dowolnym samosprzężonym operatorem.

28. Wiedząc, że $E_A(\lambda)$ jest rozkładem jedności operatora A , pokazać, że

$$[E_A(\lambda_2) - E_A(\lambda_1)]^2 = [E_A(\lambda_2) - E_A(\lambda_1)]$$

dla $\lambda_2 > \lambda_1$.

29. 1) Czemu jest równa wartość oczekiwana operatora X z zadania 5.26 w stanie

$$\Psi(x) = (1/\sqrt{\pi a^2})e^{-x^2/2a^2}$$

2) Jaka jest dyspersja ΔX wokół wartości średniej X ?

3) Czemu jest równa wartość oczekiwana operatora $p_x = -i\hbar d/dx$ w powyższym stanie?

4) Jaka jest dyspersja Δp_x wokół wartości średniej p_x ? Zwrócić uwagę na fakt, że wraz ze zmniejszaniem się dyspersji X (tzn. ze zmniejszaniem a oznaczającym, że funkcja Ψ jest coraz silniej wypikowana w otoczeniu punktu $x = 0$) dyspersja p_x rośnie. Iloczyn obu dyspersji, $\Delta X \Delta p_x$, jest stały i równy $\hbar/2$. Można pokazać, że dla dowolnego stanu Ψ zachodzi nierówność $\Delta X \Delta p_x \geq \hbar/2$.

30. Sprawdzić, że dla każdego z , nie należącego do widma A ,

$$(A - zI)^{-1} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\lambda - z} dE_A(\lambda),$$

gdzie A jest operatorem samosprzężonym o rozkładzie jedności $E_A(\lambda)$.

31. Przypuśćmy, że chcemy znaleźć wektor własny i wartość własną samosprzężonego operatora $A = A_0 + \varepsilon A_1$. Wyobraźmy sobie przy tym, że znamy rozkład jedności operatora A_0 , $E_{A_0}(\lambda)$ i załóżmy, że dla dostatecznie małego ε każda wartość własna A może być zapisana w postaci

$$\lambda_n = \lambda_n^{(0)} + \varepsilon \lambda_n^{(1)} + \varepsilon^2 \lambda_n^{(2)} + \dots,$$

a odpowiadający jej wektor własny

$$\psi_n = \phi_n^{(0)} + \varepsilon \phi_n^{(1)} + \varepsilon^2 \phi_n^{(2)} + \dots,$$

gdzie $A_0 \phi_n^{(0)} = \lambda_n^{(0)} \phi_n^{(0)}$. Pokazać metodą taką jak w § 4.11, że można znaleźć niejednorodne równanie na $\phi_n^{(1)}$ i że rozwiązaniem tego równania, spełniającym warunek $(\phi_n^{(0)}, \phi_n^{(1)}) = 0$, jest

$$\phi_n^{(1)} = - \int_{S_0} \frac{1}{\lambda - \lambda_n^{(0)}} d[E_{A_0}(\lambda) (A_1 - \lambda_n^{(1)}) \phi_n^{(0)}], \quad (1)$$

gdzie $\lambda_n^{(1)} = (\phi_n^{(0)}, A_1 \phi_n^{(0)})$, a S_0 oznacza całe widmo A_0 z wyjątkiem dowolnie małego przedziału domkniętego wokół punktu $\lambda_n^{(0)}$. Zakładamy, że widma A i A_0 nie są zdegenerowane. Pokazać, że w przypadku skończenia wymiarowej przestrzeni wektorowej wyniki z § 4.11 można otrzymać z równania (1).

32. 1) Niech A będzie samosprzężonym operatorem w przestrzeni Hilberta H . Załóżmy, że widmo A składa się ze skończonego układu punktów $\{\lambda_i < 0: i = 1, 2, \dots, N\}$ oraz całej dodatniej części osi rzeczywistej. Pokazać, że jeżeli najmniejsza (tzn. największa ujemna) wartość własna A , λ_1 , jest niezdegenerowana, to $\lambda_1 = \min_{\psi \in H} (\psi, A\psi)$, gdzie ψ spełnia warunek $\|\psi\| = 1$.

(Wskazówka: Każdy wektor w przestrzeni H można zapisać jako

$$\psi = c_0 \phi_0 + \sum_{i=1}^N c_i \phi_i,$$

gdzie ϕ_i są wektorami własnymi A , a ϕ_0 jest wektorem ortogonalnym do wszystkich ϕ_i ($i = 1, 2, \dots$). Można pokazać, że

$$(\psi, A\psi) = \sum_{i=0}^N |c_i|^2 \lambda_i,$$

gdzie $\{\lambda_i: i = 1, 2, \dots\}$ jest zbiorem wartości własnych A , a λ_0 jest liczbą dodatnią. Dalej można prowadzić rozważania tak jak w § 4.9).

2) Napisać i dowieść dla λ_2 równanie analogiczne do równania (1). Jak uogólnić ten wynik dla dowolnego λ_n ?

33. Rozważmy kwantowomechaniczne obserwabla L_x, L_y i L_z w następującej reprezentacji macierzowej:

$$L_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad L_y = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \quad L_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

Hamiltonian układu ma postać $H = H_0 + \alpha L_z$, gdzie H_0 komutuje z L_x , L_y i L_z .

a) Przypuśćmy, że w chwili $t = 0$ przygotowaliśmy układ w stanie własnym L_z , a mianowicie w stanie należącym do wartości własnej $m = +1$ operatora L_z . Jeżeli zmierzmy L_x w chwili późniejszej $t = T$, to jakie jest prawdopodobieństwo otrzymania wartości $+1$? Jakie otrzymania 0 ? Jakie otrzymania -1 ?

b) Przypuśćmy, że zamiast mierzyć L_z w chwili $t = T$, mierzymy L_x . Jakie wartości L_x możemy otrzymać w wyniku pomiaru? Jakie jest prawdopodobieństwo otrzymania każdej z tych wartości?

c) Przypuśćmy, że w chwili $t = T$ mierzymy L_x i otrzymujemy z prawdopodobieństwem równym jedności jeden wynik -1 . Po upływie czasu τ (tzn. w chwili $t = T + \tau$) zmierzmy ponownie L_x . Jakie jest prawdopodobieństwo otrzymania różnych możliwych wartości L_x ?

LITERATURA UZUPEŁNIAJĄCA

- Churchill, R. V., *Fourier Series and Boundary Value Problems*. New York: McGraw-Hill, 1944. Wyjątkowo przystępnie napisana książka. Dobra dla samouków
- Courant, R. i D. Hilbert, *Methods of Mathematical Physics*, t. I, New York: Wiley-Interscience, 1961
- Davis, P. J., *Interpolation and Approximation*. Waltham, Mass: Blaisdell 1963. Badania różnych typów zbieżności i ich roli w aproksymacji funkcji; dla zaawansowanych
- Dirac, P. A. M. *The Principles of Quantum Mechanics*, czwarte wydanie. New York: Oxford University Press, 1958
- Dunford, N. i J. T. Schwartz, *Linear Operators*, t. II: *Spectral Theory*. New York: Wiley-Interscience, 1967. Pełny przegląd operatorów samosprzężonych w przestrzeni Hilberta
- Hochstadt, H., *Special Functions of Mathematical Physics*. New York: Holt, Rinehart i Winston, 1961. Krótkie, bardzo przystępne omówienie wielomianów ortogonalnych, funkcji Legendre'a, Bessela i Mathieu. Na str. 20 podano bardzo intuicyjny dowód twierdzenia Weierstrassa przy pomocy wielomianów Bernsteina
- Jackson, J. D., *Mathematics for Quantum Mechanics*. New York: W. A. Benjamin, 1962
- Jauch, J. M., *Foundations of Quantum Mechanics*. Reading, Mass: Addison-Wesley, 1968
- Maurin, K., *Analiza część II*, Warszawa 1971
- Maurin, K., *Metody przestrzeni Hilberta*, Warszawa 1959
- Виленькин Н. Я., *Специальные функции и теория групп*, Москва 1965

SKOROWIDZ DO TOMU PIERWSZEGO

- Antykomutator 132
atom helu 175-176
— wodoru 175
- Baza 9, 10, 20, 87, 91, 92, 93, 95, 100, 101, 114,
115, 126, 127, 128, 132
— kartezjańska 9-11
— lewoskrętna 9
— prawoskrętna 9
- Bernoulli Jakub 52
Bernoulli Johann 46
Bernoulliego liczby 135
Bessela funkcje 255-256, 285
— nierówność 141, 143, 212, 232
— równanie 285-286
- Bohra promień 175
Bohr Niels 8
Born Max 277
brachistochrona 46, 51, 81
- Całka prawdopodobieństwa 242
Cauchy'ego ciąg 206
— kryterium zbieżności 209
— nierówność 143
ciało 84, 87, 93
Cramera wzory 113
Czebyszewa równanie 259-260
— wielomiany 257-258, 260, 262
częstość normalna 180
- De Moivre'a wzór 131
diagonalizacja 158-164
Diraca funkcja delta 135, 214-219, 222, 238, 241,
283, 284
— macierze 134
Dirac, P. A. M. 222
dopełnienie zbioru 172
drgania normalne 176-183
- dyspersja 273
dywergencja 26-28, 34, 40
- Einsteina umowa sumacyjna 11, 81, 88, 110
Eulera kąty 13, 16
Eulera-Lagrange'a równanie 47, 49-50, 55-56, 67,
69-70, 75, 77, 82, 168
- Fermata zasada 80
Fermiego-Diraca funkcja rozkładu 135
Fouriera funkcje 207
— szereg 229-235, 281
— transformata 236-242, 269, 282, 283
— twierdzenie całkowite 173
— — o splocie 239
funkcja analityczna 33
— delta *patrz* Diraca funkcja delta
— falowa 268
— harmoniczna 33, 248
— odcinkami gładka 232
— tworząca 249, 263
— własna *patrz* wektor własny
funkcje całkowalne z kwadratem 173
— kuliste 242-246
— trygonometryczne 219, 229-236
- Gaussa funkcja rozkładu 217, 241
— twierdzenie 27, 42
- Gegenbauera równanie 259, 260
— wielomiany 257, 259, 260, 262, 284
gęstość lagrangianu 68
— prawdopodobieństwa 277
Gibbsa zjawisko 234, 281-282
gradient 25-26, 34
Grama-Schmidta proces ortogonalizacji 143-145,
153, 165, 224-255
Greena twierdzenie 42, 284

- grupa 84
 — abelowa 85, 86, 131
 — ciągła 85
- Hadamarda nierówność 145
 Hamiltona zasada 62, 68, 70, 72, 79
 hamiltonian *patrz* operator Hamiltona
 Helmholtza równanie 32, 33, 43
 Heremite'a równanie 259-260
 — wielomiany 125, 249-251, 259, 262, 284
 Hilberta przestrzeń 202, 207
- Iloczyn skalarny 10, 17, 28, 38, 139-140, 156, 196, 204-205
 — wektorowy 19
 — wewnętrzny *patrz* iloczyn skalarny
 inwersja 21, 152
 izoareometryczny problem 80
 izometria 150-153
 izomorfizm 93-95, 104
 izoperymetryczny problem 54-61, 70
- Jacobiego równanie 259-260
 — wielomiany 256, 262
 jądro odwzorowania *patrz* przestrzeń zerowa
 odwzorowania
- Keplera prawa 22-24
 Kleina-Gordona równania 82
 komutacja macierzy 104-105, 132, 158, 162, 164
 — operatorów 147, 274, 276
 komutacyjne reguły 122-123, 193
 komutator 97, 103, 123, 132, 147, 193
 konwulcja *patrz* splot funkcji
 Kroneckera delta 10, 20, 37
 — iloczyn 126-131, 134
 krotność algebraiczna 117
 — geometryczna 117
 krzywa łańcuchowa 52-53
 kwaterniony 199
- Lagrange'a mnożnik 55-58, 65, 71, 80, 169-171, 174
 — równania 62, 82, 178
 lagrangian 61-65, 68, 70, 75, 78-79, 178, 180
 Laguerre'a równanie 259
 — wielomiany 258, 262
 — — stowarzyszone 258, 262
 Laplace'a równanie 32-33, 69, 246, 281
 laplasjan 32-34, 248
 Legendre'a funkcje drugiego rodzaju 228
 — — stowarzyszone 244-246
 — równanie 227-228, 245, 260, 286
 — — stowarzyszone 245-246
- Legendre'a wielomiany 40, 219, 223-228, 245, 258, 262, 280, 281, 286
 Leibniza wzór 227-228, 245
 Lebesgue'a całka 206
 liniowa niezależność wektorów 88-92
 Lorentza grupa 197
 — macierz 154-157
 — metryka 140
 — transformacja 19, 154-156, 197
- Macierz 12, 99-106
 — antysamosprężona 157, 196
 — antysymetryczna 106, 132, 133, 198
 — diagonalna 105, 118, 132, 133, 134, 140, 159-161, 176
 — idempotentna 105, 132
 — izometryczna 196
 — kwadratowa 101
 — nieosobliwa 106, 133
 — obrotu 12, 14, 15, 96, 133, 154
 — odwrotna 111-113, 132, 133, 134, 196
 — ortogonalna 152, 155, 164
 — osobliwa 106, 132, 133
 — samosprężona 155, 157, 196
 — sprzężona hermitowsko 105
 — — klasycznie 111
 — symetryczna 106, 156
 — transponowana 14, 105
 — unitarna 155, 158, 160-161, 196
 Maxwella równania 35-36, 42-43, 82-83, 283
 mimośród krzywej 23
 Minkowskiego przestrzeń 34, 154
- Newtona prawa 18, 22, 168
 niezmienniki adiabaticzne 159
 Noether twierdzenie 72
 norma wektora 139, 145, 205
- Operator anihilacji 126, 149, 194, 200
 — antyhermitowski 157
 — antysymetryczny 157
 — d'Alemberta 34
 — Hamiltona 116, 122-123, 149, 163, 174-175, 199, 200, 268, 274, 275, 280, 289
 — hermitowski 123, 147, 148-149, 169, 177, 251-252, 274, 285, 286
 — kreacji 126, 149, 194, 200
 — momentu pędu 246, 269, 279-280
 — parzystości 257
 — przesunięcia 135
 — rzutowy 265
 — samosprężony 146-174, 164, 267
 — symetryczny 147
 — transponowany 156

- operator unitarny 177
 operatory różniczkowe 24-36
 ortogonalności warunek 12
 ortonormalny zbiór 9, 140, 141, 144, 151, 203-263,
 285, 286
 oscylator harmoniczny 122-126, 134, 149, 174-175,
 197, 198, 199, 251, 268

 Parsevala równość 142, 151, 212, 284
 — twierdzenie 238
 Pauliego macierze spinowe 120, 132, 134
 pęd uogólniony 63
 Poissona równanie 32, 33
 pole 24
 — skalarne 24, 28, 32, 33, 34, 35, 42
 — wektorowe 24, 28, 32, 33, 34, 35, 42
 potencjał wektorowy 83, 200
 prawo relatywistycznego doświadczenia prędkości
 197
 przekształcenie izometryczne 150, 153, 154
 — liniowe 96-97, 104, 114-115
 — — normalne 157
 — — odwrotne 98, 106, 114, 132
 — ortogonalne 12, 17, 36, 150, 152
 — podobieństwa 114-115, 161, 164
 — symetryczne 146-148, 157
 — unitarne 150, 161, 164
 przestrzeń euklidesowa 139, 143
 — funkcyjna 204
 — unitarna 139, 148
 — wektorowa 87
 — — czterowymiarowa 199
 — zerowa odwzorowania 122
 — z iloczynem wewnętrznym 137
 pseudoskalar 22, 108
 pseudowektor 22, 38
 punkt siodłowy 33

 Rachunek wariacyjny 45
 — zaburzeń 183-195
 rekurencyjne związki 250
 reprezentacja grupy 94
 Riemanna całka 205
 — funkcja zeta 233
 Riesz-Fischera twierdzenie 207
 Rodriguesa wzór 225
 rotacja 29-31, 35
 rozkład jedności 267
 równanie charakterystyczne 116, 118, 120
 — dyfuzji 32
 — falowe 33, 34, 69, 283
 — przewodnictwa cieplnego 32
 rząd macierzy 122
 rzut wektora 11

 Schrödingera równanie 71, 81, 116, 122, 274
 Schwarza nierówność 143
 skalar 7-9, 84
 Sneliusa prawo 80
 spłot funkcji 239
 sprzężenie zespolone 71
 stany stacjonarne 277
 Stieltjesa całka 265
 Stirlinga wzór 218
 Sturm-Liouville'a układ 228, 251-263, 285
 ślad macierzy 115-116, 118, 133
 — tensora 41

 Taylora szereg 222
 tensor 33-41
 — antysymetryczny 38
 — elektromagnetyczny energii-pędu 44
 — kartezjański 17, 33-41
 — kowariantny 19
 — momentu bezwładności 39
 — — kwadrupolowego 41
 — — multipolowego 40
 — pola elektromagnetycznego 43
 — polaryzacji elektrycznej 39
 — symetryczny 38
 tensora kontrakcja 33
 — składowe 33
 twierdzenie o wirale 196
 — o zupełności *patrz* zupełność
 — spektralne 267

 Ultrakuliste wielomiany *patrz* Gegenbauera wielomiany
 uogólnione współczynniki Fouriera 211

 Wartość oczekiwana 149, 273, 287
 — własna 71, 116-117, 119-125, 133, 134, 149,
 152-161, 163-168, 170-175, 189-196, 198, 199,
 200, 248, 254-255, 257, 259, 264-280, 287, 288
 Weierstrassa twierdzenie 219-223, 229, 242, 249,
 263
 wektor 7-8, 16-17
 — aksjalny *patrz* pseudowektor
 — polarny 21
 — stanu 268
 — własny 116-117, 119-125, 133, 134, 149,
 152-157, 158-159, 162-168, 170-175, 189-196,
 199, 200, 248, 254-255, 268-269, 272, 287,
 288
 wielomian charakterystyczny 116, 118, 158-159
 więzy 54-61
 widmo 117, 162, 172, 173, 267, 288
 — ciągłe 173, 267, 272
 — zdegenerowane 117, 162, 189-195, 199

współczynniki rozwinięcia *patrz* uogólnione współ-
czynniki Fouriera
współrzędne krzywoliniowe 24-25, 27, 32, 34
— uogólnione 177
wymiar przestrzeni wektorowej 91-92
wyznacznik 106-113, 115, 121, 133, 140, 145, 152

Zasada zachowania momentu pędu 79
zbieżność 207, 209-212, 222, 285
zbiór ortonormalny zupełny 141, 143-145, 151,
162, 210, 212, 223, 225, 231, 243-244, 263,
285
zupełności warunek 212, 238
zupełność 140, 207-214, 219, 223, 262, 285