Diagonalització, canvi ortogonal de coordenades, rotació, eixos propis d'un tensor.

J. Planelles
Departament de Ciències Experimentals, Universitat Jaume I.

March 20, 2004

En física i química apareixen moltes fórmules com ara les de les energies de rotació, polarització, elàstica, equació d'autovalors d'una matriu hamiltoniana...

$$
\begin{aligned}
E_{rot} &= \frac{1}{2}\omega^{+} I \omega && (1)\\
E_{pol} &= \frac{1}{2}E^{+} \alpha E && (2)\\
E_{elas} &= \frac{1}{2}q^{+} k q && (3)\\
\mathbf{HC} = \mathbf{EC} &\rightarrow E = \mathbf{C}^{+}\mathbf{HC}, && (4)
\end{aligned}
$$

totes elles de la forma $\lambda = \omega^{+}\mathbf{V}\omega$, on $\mathbf{V}_{ij} = \mathbf{V}_{ji}$. És a dir, on la matriu implicada és simètrica (Aquesta matriu representa allò que en matemàtiques s'anomena forma bilineal, atès que fa correspondre un número a un parell de vectors: $\omega_{\mathbf{1}}, \omega_{\mathbf{2}} \xrightarrow{\mathbf{V}} \omega_{\mathbf{1}}^{+}\mathbf{V}\omega_{\mathbf{2}} \in \mathbf{R}$).

Totes les matrius simètriques són diagonalitzables, i.e., reduibles a forma diagonal, cosa que vol dir que existeix una matriu equivalent que presenta tots els elements extradiagonals igual a zero[1]. Com trobem aquesta matriu? Des de $\lambda = \omega^{+}\mathbf{V}\omega$ tenim que $\mathbf{V}\omega = \lambda\omega$, és a dir:

$$
(\mathbf{V} - \lambda\mathbf{1})\omega = 0 \tag{5}
$$

Aquesta darrera equació representa un sistema homogeni d'n equacions amb n incògnites. Aquest, com qualsevol sistema, es pot triangularitzar. Per exemple, si $\mathbf{W} = (\mathbf{V} - \lambda\mathbf{1})$ és una matriu 3x3 que representa el sistema homogeni d'equacions

$$
\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = 0, \tag{6}
$$

la triangularització (que significa trobar una matriu equivalent triangular superior) segueix les següents etapes:

$$
\mathbf{W} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & b_1/a_1 & c_1/a_1 \\ 1 & b_2/a_2 & c_2/a_2 \\ 1 & b_3/a_3 & c_3/a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & \gamma_1 \\ 1 & \beta_2 & \gamma_2 \\ 1 & \beta_3 & \gamma_3 \end{pmatrix} \tag{7}
$$

[1] Recordem la relació d'equivalència entre matrius: $\mathbf{A} \sim \mathbf{B}$ si existeix $\mathbf{C}$ de manera que $\mathbf{A} = \mathbf{C}^{-\mathbf{1}}\mathbf{BC}$. (Podeu comprovar el caràcter reflexiu, simètric i transitiu d'aquesta relació). Diagonalitzar la matriu $\mathbf{A}$ consisteix en trobar la matriu $\mathbf{C}$ que la transforma en la seua matriu diagonal equivalent $\mathbf{B}$.

$$\sim \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & \gamma_1 \\ 0 & \beta_2-\beta_1 & \gamma_2-\gamma_1 \\ 0 & \beta_3-\beta_1 & \gamma_3-\gamma_1 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & \beta_1 & \gamma_1 \\ 0 & \beta_2-\beta_1 & \gamma_2-\gamma_1 \\ 0 & 0 & (\gamma_2-\gamma_1)-\frac{(\beta_2-\beta_1)(\gamma_3-\gamma_1)}{\beta_3-\beta_1} \end{pmatrix} \tag{8}$$

La darrera matriu representa el mateix sistema homogeni d'equacions que l' Eq. 6 però transformat per a determinar fàcilment les variables. Ara bé, la tercera de les equacions del sistema representat per l'Eq. 8, $((\gamma_2-\gamma_1)-\frac{(\beta_2-\beta_1)(\gamma_3-\gamma_1)}{\beta_3-\beta_1})z=0$, evidencia que $(\gamma_2-\gamma_1)-\frac{(\beta_2-\beta_1)(\gamma_3-\gamma_1)}{\beta_3-\beta_1}=0$, amb la qual cosa, el determinant de la matriu $\mathbf{W}$ és zero[2] .

Ara be, el determinant de $\mathbf{W}=(\mathbf{V}-\lambda\mathbf{1})$ és un polinomi de grau n en λ, aleshores tindrà n solucions (reals i/o imaginàries). Si $\mathbf{W}$ i, aleshores $\mathbf{V}$, és simètrica (o complexa i hermítica), aleshores totes les solucions λ hauran de ser reals.

En efecte, escrivim $\mathbf{VC}=\lambda\mathbf{C}$, on $\mathbf{C}$ pot ser imaginari però $\mathbf{C}^+\mathbf{C}=1$. Aleshores,

$$\mathbf{C}^+\mathbf{VC}=\lambda=\sum_{i,j}C_i^*C_jV_{ij} \tag{9}$$

El complex conjugat serà:

$$\lambda^*=\sum_{i,j}C_iC_j^*V_{ij} \tag{10}$$

La matriu $\mathbf{V}$ l'hem suposada real i simètrica, per això no escrivim el seu complex conjugat en l'Eq. 10. I per això, des de les Eqs. 9 i 10 tenim que:

$$\lambda-\lambda^*=\sum_{i,j}(C_i^*C_j-C_iC_j^*)V_{ij}=\sum_{i,j}(C_i^*C_j-C_iC_j^*)V_{ji}=\sum_{i,j}(C_iC_j^*-C_i^*C_j)V_{ij} \tag{11}$$

I aleshores,

$$2(\lambda-\lambda^*)=\sum_{i,j}(C_i^*C_j-C_iC_j^*)V_{ij}+\sum_{i,j}(C_iC_j^*-C_i^*C_j)V_{ij}=0, \tag{12}$$

cosa que vol dir que $\lambda=\lambda^*$, és a dir que λ ha de ser real.

Tanmateix, els autovectors de $\mathbf{V}$, corresponents a valors propis λ diferents, han de ser ortogonals. En efecte, des de $\mathbf{VC_1}=\lambda_1\mathbf{C_1}$, multiplicant a l'esquerra per $\mathbf{C_2^+}$ tenim que $\mathbf{C_2^+VC_1}=\lambda_1\mathbf{C_2^+C_1}$, i calculant transpostes que: $\mathbf{C_1^+VC_2}=\lambda_1\mathbf{C_1^+C_2}$. Independentment, des de $\mathbf{VC_2}=\lambda_2\mathbf{C_2}$ concloem que $\mathbf{C_1^+VC_2}=\lambda_2\mathbf{C_1^+C_2}$. Aleshores, $0=\mathbf{C_1^+C_2}(\lambda_1-\lambda_2)$, cosa que implica que $\mathbf{C_1^+C_2}=\delta_{1,2}$, com volíem demostrar.

Una volta obtinguts els autovectors (columna) de $\mathbf{V}$ podem construir una matriu quadrada $\mathbf{M}$ ficant-los un al costat de l'altre. Aquesta matriu és la transformació que diagonalitza $\mathbf{V}$. En efecte,

$$\mathbf{M^+VM}=\begin{pmatrix}\mathbf{C_1^+}\\ \mathbf{C_2^+}\\ \ldots \\ \mathbf{C_n^+}\end{pmatrix}\mathbf{V}\begin{pmatrix}\mathbf{C_1} & \mathbf{C_2} & \ldots & \mathbf{C_n}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix} & \ldots & \\ \ldots & \mathbf{C_i^+VC_j} & \ldots \\ & \ldots & \end{pmatrix} \tag{13}$$

però $\mathbf{C_i^+VC_j}=\lambda_j\mathbf{C_i^+C_j}=\lambda_j\delta_{i,j}$, com volíem demostrar.

[2] Cal tenir present que $det(\mathbf{C^{-1}})=det(\mathbf{C})^{-1}$ (en efecte, des de $\mathbf{C^{-1}C}=\mathbf{1}$, concloem que $det(\mathbf{C^{-1}})\ det(\mathbf{C})=1$, i.e. $det(\mathbf{C^{-1}})=det(\mathbf{C})^{-1}$). Aleshores escrivim: $det(\mathbf{C^{-1}BC})=det(\mathbf{C^{-1}})\ det(\mathbf{B})\ det(\mathbf{C})=det(\mathbf{C})^{-1}\ det(\mathbf{B})\ det(\mathbf{C})=det(\mathbf{B})$.

La matriu $\mathbf{M} = \left(\begin{array}{cccc} \mathbf{C_1} & \mathbf{C_2} & ... & \mathbf{C_n} \end{array} \right)$ que diagonalitza $\mathbf{V}$ és unitària (ortogonal en el cas de matriu real) cosa que vol dir que $\mathbf{M}^{-1} = \mathbf{M}^{+}$, i.e., $\mathbf{M}$ representa una rotació:

$$\mathbf{M}^{+}\mathbf{M} = \left(\begin{array}{c} \mathbf{C_1^+} \\ \mathbf{C_2^+} \\ \cdots \\ \mathbf{C_n^+} \end{array} \right) \left(\begin{array}{cccc} \mathbf{C_1} & \mathbf{C_2} & ... & \mathbf{C_n} \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \cdots \\ ... \; \mathbf{C_i^+}\mathbf{C_j} \; ... \\ \cdots \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} \cdots \\ ... \; \delta_{i,j} \; ... \\ \cdots \end{array} \right) = \mathbf{1} \qquad (14)$$

En espais bidimensionals reals la matriu $\mathbf{M}$ sempre es pot escriure en la forma $\left(\begin{array}{cc} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{array} \right)$, on θ és l'angle de rotació que permet escriure $\mathbf{V}$ en forma diagonal.

Reconsiderarem tot seguit allò que hem discutit, ara però des del punt de vista de les coordenades. Escrivim $\lambda = \omega^{+}\mathbf{V}\omega$ amb

$$\omega = \left(\begin{array}{c} x \\ y \\ z \end{array} \right), \qquad (15)$$

escrivim també la matriu $\mathbf{M}$ formada a partir dels autovectors de $\mathbf{V}$, la qual té la propietat que $\mathbf{M}^{+}\mathbf{M} = \mathbf{1}$. Tenim que:

$$\lambda = \omega^{+}\mathbf{V}\omega = \underbrace{\omega^{+}\mathbf{M}^{+}}_{w^{+}}\underbrace{\mathbf{M}\mathbf{V}\mathbf{M}^{+}}_{\Lambda}\underbrace{\mathbf{M}\omega}_{w} \qquad (16)$$

on

$$w = \left(\begin{array}{c} \tau \\ \sigma \\ \rho \end{array} \right) = \mathbf{M} \left(\begin{array}{c} x \\ y \\ z \end{array} \right) \qquad (17)$$

i, aleshores

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau = M_{11}\, x + M_{12}\, y + M_{13}\, z \\ \sigma = M_{21}\, x + M_{22}\, y + M_{23}\, z \\ \rho = M_{31}\, x + M_{32}\, y + M_{33}\, z \end{array} \right. \qquad (18)$$

Veiem com la rotació $\mathbf{M}$ que diagonalitza $\mathbf{V}$, transforma a la vegada les coordenades (x, y, z) en unes noves coordenades (τ, σ, ρ). En termes d'aquestes noves coordenades la magnitud tensorial física considerada (moment d'inèrcia, polaritzabilitat, etc) representada per $\mathbf{V}$ en les coordenades (x, y, z), passa a estar representada per una matriu diagonal $\mathbf{\Lambda}$ en les noves coordenades (τ, σ, ρ). Coordenades que han sigut obtingudes a partir de (x, y, z) mitjançant la rotació d'eixos definida per $\mathbf{M}$. Diem que aquesta rotació ens porta als eixos propis del tensor.