

Neke primjene linearne algebre u prirodnim znanostima i tehnici

Bešlić, Marie-Claire

Master's thesis / Diplomski rad

2019

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/um:nbn:hr:217:115011>

Rights / Prava: [In copyright/Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-04-25**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



**SVEUČILIŠTE U ZAGREBU
PRIRODOSLOVNO–MATEMATIČKI FAKULTET
MATEMATIČKI ODSJEK**

Marie-Claire Bešlić

**NEKE PRIMJENE LINEARNE
ALGEBRE U PRIRODNIM
ZNANOSTIMA I TEHNICI**

Diplomski rad

Voditelj rada:
prof. dr. sc. Dijana Ilišević

Zagreb, studeni 2019.

Ovaj diplomski rad obranjen je dana _____ pred ispitnim povjerenstvom u sastavu:

1. _____, predsjednik
2. _____, član
3. _____, član

Povjerenstvo je rad ocijenilo ocjenom _____.

Potpisi članova povjerenstva:

1. _____
2. _____
3. _____

*Hvala dragim profesorima, kolegama i kolegicama koje su postale prijateljice, a posebno
velika hvala obitelji koja je izdržala do kraja*

Sadržaj

Sadržaj	iv
Uvod	1
1 Linearne jednadžbe i sustavi linearnih jednadžbi u primjeni	2
1.1 Matematički uvod	2
1.2 Linearne jednadžbe u kemiji	5
1.3 Linearne jednadžbe u geologiji	6
1.4 Linearne jednadžbe u građevini	16
2 Baza vektorskog prostora u primjeni	28
2.1 Matematički uvod	28
2.2 Baza vektorskog prostora u kemiji i kristalografskoj teoriji	28
3 Linearni operatori u primjeni	35
3.1 Matematički uvod	35
3.2 Linearni operatori u kristalografskoj teoriji	36
3.3 Linearni operatori u mehanici i specijalnoj teoriji relativnosti	39
Bibliografija	45

Uvod

Ne postoje prirodne niti inženjerske znanosti u kojima se neće pojaviti potreba za primjedom linearne algebre. U ovom radu dani su samo neki primjeri iz nekih prirodnih znanosti (kemija, fizika i geologija), a od tehničkih znanosti dani su primjeri iz građevinarstva. Kroz tri poglavlja, odnosno teme linearne algebre, nakon kratkog matematičkog uvoda daje se uvid u praktičnu primjenu. U prvom poglavlju pokazuje se formiranje linearne jednadžbe i sustava linearnih jednadžbi u praktičnim zadatcima pojedinih struka. Naglasak je na postavljanju samih jednadžbi u tim zadatcima, ovisno o konvencijama unutar pojedinih struka. Također su dani razni primjeri praktične upotrebe matrica u različitim zadatcima iz inženjerske geologije i građevine. U drugom poglavlju pokazana je primjena baze vektor-skog prostora u kemiji, dok je u trećem poglavlju pokazana primjena linearnih operatora u kristalografskoj teoriji relativnosti. Rad je zamišljen da ga mogu s razumijevanjem pročitati studenti koji su odslušali Linearnu algebru 1 i 2, te posjeduju potrebna teorijska predznanja.

Poglavlje 1

Linearne jednadžbe i sustavi linearnih jednadžbi u primjeni

Potreba za postavljanjem linearne jednadžbe, kao i rješavanjem sustava linearnih jednadžbi javlja se u raznim područjima važnim za funkciranje svijeta oko nas. Stoga sustavi linearnih jednadžbi zauzimaju jedno od središnjih mesta u linearnoj algebri.

1.1 Matematički uvod

Definicija 1.1.1. *Linearna jednadžba s n nepoznanica x_1, x_2, \dots, x_n je jednadžba koja se može zapisati u obliku:*

$$a_1x_1 + a_2x_2 + \cdots + a_nx_n = b, \quad (1.1)$$

gdje su a_1, a_2, \dots, a_n zadani brojevi koje nazivamo koeficijentima jednadžbe, a broj b nazivamo slobodnim članom. Rješenje jednadžbe je svaka uređena n-torka brojeva (x_1, x_2, \dots, x_n) , čije uvrštanje u gornju jednadžbu na mjesto nepoznanica x_i daje točnu numeričku vrijednost.

U kontekstu linearne algebre govorimo o elementima vektorskog prostora, odnosno vektorima: a_1, a_2, \dots, a_n , te linearnej kombinaciji tih vektora pomoću skalara x_1, x_2, \dots, x_n iz polja \mathbb{F} . Slobodni član predstavlja vektor koji je dobiven kao linearna kombinacija vektora.

Prema danom zapisu linearne jednadžbe možemo dati sljedeće definicije:

Definicija 1.1.2. *Neka je V neprazan skup na kojem su zadane binarna operacija zbrajanja $+: V \times V \rightarrow V$ i operacija množenja skalarima iz polja \mathbb{F} , $\cdot: \mathbb{F} \times V \rightarrow V$. Kažemo da je uređena trojka $(V, +, \cdot)$ vektorski prostor nad poljem \mathbb{F} ako vrijedi:*

(1) $a + (b + c) = (a + b) + c;$

- (2) postoji $a \in V$ sa svojstvom $a + 0 = 0 + a = a, \forall a \in V$;
- (3) za svaki $a \in V$ postoji $-a \in V$ tako da je $a + (-a) = -a + a = 0$;
- (4) $a + b = b + a, \forall a, b \in V$;
- (5) $\alpha(\beta a) = (\alpha\beta)a, \forall \alpha, \beta \in \mathbb{F}, \forall a \in V$;
- (6) $(\alpha + \beta)a = \alpha a + \beta a, \forall \alpha, \beta \in \mathbb{F}, \forall a \in V$;
- (7) $\alpha(a + b) = \alpha a + \alpha b, \forall \alpha \in \mathbb{F}, \forall a, b \in V$;
- (8) $1 \cdot a = a, \forall a \in V$.

Definicija 1.1.3. Neka je V vektorski prostor nad poljem \mathbb{F} , neka je $k \in \mathbb{N}$, te a_1, \dots, a_n vektori iz V i x_1, \dots, x_n skalarci iz \mathbb{F} . Tada se vektor

$$a_1x_1 + a_2x_2 + \cdots + a_nx_n$$

naziva linearna kombinacija vektora a_1, \dots, a_n s koeficijentima x_1, \dots, x_n .

Linearna kombinacija vektora iz V je opet vektor iz V . U jednadžbi (1.1) taj je vektor označen sa b .

Neka su a_1, \dots, a_n elementi iz skupa S . Tada je $S \subseteq V$. Ako napravimo sve moguće linearne kombinacije vektora iz S sa skalarima iz \mathbb{F} dobit ćemo linearnu ljudsku.

Definicija 1.1.4. Neka je V vektorski prostor nad poljem \mathbb{F} i $S \subseteq V, S \neq \{\theta\}$. Linearna ljudska skupa S , u oznaci $[S]$, definira se kao

$$[S] = \{\sum_{i=1}^k x_i a_i : x_i \in \mathbb{F}, a_i \in S, k \in \mathbb{N}\}.$$

Ukoliko je S konačan skup, tada je $S = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}$, pa se prethodna definicija svodi na: $[S] = \{\sum_{i=1}^n x_i a_i\}$.

Naravno, i sam skup S sadržan je u vlastitoj linearnej ljudsci. Ako vrijedi da linearna ljudska skupa S „napravi” čitav vektorski prostor V , odnosno vrijedi $[S] = V$, tada kažemo da je skup S razapeo vektorski prostor V , odnosno elementi skupa S predstavljaju sustav izvodnica za V . Linearna ljudska je sama po sebi vektorski prostor.

Definicija 1.1.5. Neka je V vektorski prostor i $S \subseteq V$. Kažemo da je S sustav izvodnica za V (ili da S generira V) ako vrijedi $[S] = V$.

Dakle, skup S je sustav izvodnica za V ako se svaki vektor iz V nalazi u $[S]$, tj. ako se svaki vektor iz V može prikazati kao linearna kombinacija elemenata skupa S . Ovaj prikaz ne mora biti jedinstven. Važno je da postoji, odnosno barem jedan x_i iz \mathbb{F} mora biti različit od nule.

Definicija 1.1.6. Neka je V vektorski prostor nad \mathbb{F} i $S = \{a_1, a_2, \dots, a_n\}, n \in \mathbb{N}$, konačan skup vektora iz V . Kažemo da je skup S linearne neovisan ako vrijedi

$$x_1, x_2, \dots, x_n \in \mathbb{F}, \quad \sum_{i=1}^n x_i a_i = 0 \implies x_1 = x_2 = \dots = x_n = 0.$$

U suprotnom kažemo da je skup S linearne ovisan.

Da je slobodni član jednak nuli u kontekstu linearne algebre znači da je linearna kombinacija vektora

$$a_1 x_1 + a_2 x_2 + \dots + a_n x_n$$

jednaka nul vektoru, što povezujemo s definicijom linearne neovisnosti vektora.

Definicija 1.1.7. Sustav linearnih jednadžbi je skup od konačno mnogo linearnih jednadžbi s istim nepoznanicama za koje tražimo zajedničko rješenje. Rješenje sustava je svaka uređena n -torka brojeva koja zadovoljava sve jednadžbe sustava.

Ako sustav ima m jednadžbi s n nepoznanica, zovemo ga $m \times n$ sustavom:

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

pri čemu su a_{ij}, b_i iz \mathbb{F} ($i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, n$).

Kao pomoć u rješavanju sustava linearnih jednadžbi koristimo matrice i determinante. Skup svih matrica tipa $m \times n$ nad poljem \mathbb{F} označavamo sa $M_{mn}(\mathbb{F})$. Taj skup ima strukturu vektorskog prostora dimenzije $m \cdot n$, a matrice su njegovi vektori. Sustav s m jednadžbi i n nepoznanica, uz prethodne oznake, u matričnom obliku zapisujemo: $AX = B$, gdje je

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

X stupčana matrica nepoznanica:

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{pmatrix},$$

a B je stupčana matrica slobodnih koeficijenata:

$$B = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}.$$

1.2 Linearne jednadžbe u kemiji

U kemiji se javlja potreba za upotrebotom sustava linearnih jednadžbi kod uravnoteženja kemijskih reakcija.

U kontekstu kemije a_1, \dots, a_n su tvari (jedinke) koje sudjeluju u kemijskoj reakciji i zovemo ih reaktanti. Svaka tvar ima svoju kemijsku oznaku/formulu. Reaktanti međusobno djeluju i, ovisno o reakcijskim uvjetima, dobiva se jedan ili više različitih spojeva (tvari, jedinice) kao produkt. U jednadžbi (1.1) b je tvar koja predstavlja rezultat kemijske reakcije. Stoga se naziva produkt. Nepoznanice x_1, \dots, x_n su stehiometrijski koeficijenti, odnosno skalari koji predstavljaju molove tvari. Zato se ova metoda ujedno naziva i molna metoda. Kemijske reakcije zapisujemo kemijskim jednadžbama u obliku $R \rightarrow P$, gdje su R i P sudionici reakcije.

Dobivamo sustave linearnih jednadžbi u kojima su nam poznati sudionici kemijske reakcije (tj. R -reaktant i P -produkt), a potrebno je pronaći, odnosno odrediti stehiometrijske koeficijente x_1, \dots, x_n . Problem određivanja tih koeficijenata svodimo na rješavanje homogenog sustava linearnih kemijskih jednadžbi.

Cilj kemijskog uravnoteženja je odrediti točno jedno netrivialno pozitivno cjelobrojno rješenje takvo da x_i poprimaju najmanju moguću vrijednost.

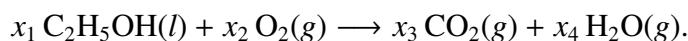
Početni zapis kemijske reakcije $R \rightarrow P$, kao i završni zapis, daje se u obliku:

$$\sum_{i=1}^n x_i a_i = \sum_{i=n+1}^m x_i b_j \quad (j = 1, 2, \dots, m).$$

U kemijskim jednadžbama dodatno uvodimo oznake koje označavaju stanje sudionika u reakciji: (*s*) za čvrsto, (*l*) za tekuće, (*g*) za plinovito, te (*aq*) za otopljeno u vodi.

Primjer 1.2.1. (Uravnoteženje kemijske reakcije)

Promotrimo kemijsku reakciju etanola $C_2H_5OH(l)$ s kisikom $O_2(g)$. Poznato je da u toj reakciji nastaju ugljikov dioksid $CO_2(g)$ i voda $H_2O(g)$:



Sustav linearnih jednadžbi postavljamo tako da se za svaki od elemenata u reakciji postavlja po jedna jednadžba tako da koeficijent uz nepoznanicu predstavlja broj atoma promatrano elementa kako s lijeve strane, tako i s desne strane znaka jednakosti:

$$\begin{aligned} \text{C : } & 2x_1 = x_3 \\ \text{H : } & 6x_1 = 2x_4 \\ \text{O : } & x_1 + 2x_2 = 2x_3 + x_4. \end{aligned}$$

Dakle, imamo sustav:

$$\begin{aligned} 2x_1 - x_3 &= 0, \\ 6x_1 - 2x_4 &= 0, \\ 1x_1 + 2x_2 - 2x_3 - x_4 &= 0. \end{aligned}$$

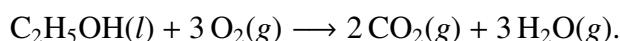
Problem se svodi na rješavanje homogenog sustava linearnih jednadžbi. Matematički gledano, za homogene sustave znamo da postoji bar jedno rješenje: svi $x_i = 0$, odnosno svaku reakciju moguće je uravnotežiti na trivijalan način tj. tako da nema niti jednog sudionika (što „kemijski” gledano nema smisla). Postavljeni sustav ima tri jednadžbe s četiri nepoznanice. Rješenje tog sustava je: $x_1 = t/3$, $x_2 = t$, $x_3 = 2t/3$, $t \in \mathbb{R}$.

Međutim, cilj kemijskog uravnoteženja je odrediti točno jedno netrivialno pozitivno cjelobrojno rješenje takvo da x_i poprimaju najmanju moguću vrijednost.

Uz dane uvjete rješenje postavljenog sustava jednadžbi je za $t = 3$:

$$x_1 = 1, \quad x_2 = 3, \quad x_3 = 2, \quad x_4 = 3.$$

Dakle, jednadžba uravnoteženja zadane kemijske reakcije glasi:



1.3 Linearne jednadžbe u geologiji

Geologija opisuje stjenovite dijelove Zemljine kore (litosfere) i njihov povijesni razvoj, kao i njihovu interakciju sa slojevima ispod litosfere (astenosferom i jezgrom). Geologija se dijeli na dvije grane: 1. geologija i paleontologija, te 2. mineralogija i petrologija.

Sastavni dio zemljine kore je stijena koja ima određeni način geološkog pojavljivanja, strukturu i teksturu, te mineralni sastav. Minerali su, dakle, sastojci stijena. To su prirodna anorganska homogena tijela s pravilnim rasporedom atoma ili iona u prostornoj kristalnoj rešetki, stavnoga su kemijskog sastava (stoga imaju svoju formulu) i određenih fizikalnih svojstava. U prirodi rijetko nailazimo na minerale koji su samorodni (ugljik kao grafit, šungit i dijamant), već su to redovito kemijski spojevi. Stijene u prirodi mogu biti agregat

POGLAVLJE 1. LINEARNE JEDNADŽBE I SUSTAVI LINEARNIH JEDNADŽBI U PRIMJENI

7

samo jedne vrste minerala (monomineralne), npr. vapnenac ili agregat više vrsta minerala (polimineralne), što je češće (npr. granit).

Petrologija je grana geologije koja se bavi proučavanjem stijena i uvjetima pod kojima stijene nastaju. Moderni petrolozi, između ostalog, uključuju principe geokemije za bolje razumijevanje porijekla stijena. Ponašanje minerala prema određenim reagensima (najčešće su to kiseline) je različito, što pomaže relativno brzo odrediti o kojem mineralu se radi. Dakle, za određivanje nekog nepoznatog minerala često se primjenjuju kemijske metode.

U geologiji, preciznije petrologiji i mineralogiji, javlja se potreba za upotrebom sustava linearnih jednadžbi kod uravnoteženja metamorfnih reakcija. Proces u kojem, bez otapanja ili taljenja, iz magmatske ili sedimentne stijene nastaju metamorfne stijene naziva se metamorfoza ili preobrazba. Metamorfoza je preraspodjela mineralne tvari u skladu s fizikalno-kemijskim uvjetima koji su različiti od uvjeta postanka minerala koji se metamorfizira. Do metamorfne reakcije dolazi pod utjecajem visoke temperature i tlaka, te djelovanjem mineralnih otopina – kemijski aktivnih fluida (razne kiseline koje se nalaze u prirodi, najčešće otopljene u vodi) i plinova. Dakle, pri metamorfnoj reakciji nastaju novi minerali.

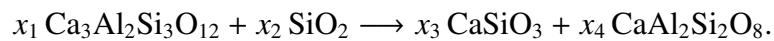
U kontekstu jednadžbe metamorfne reakcije a_1, \dots, a_n su minerali (jedinke) koje sudjeluju u kemijskoj reakciji i zovemo ih reaktanti. Svaki mineral ima svoju kemijsku oznaku/formulu. Reaktanti međusobno djeluju i, ovisno o reakcijskim uvjetima, dobiva se jedan ili više različitih spojeva, odnosno novih minerala (tvari, jedinika) kao produkt. U jednadžbi (1.1) b je tvar koja predstavlja rezultat metamorfne reakcije. Stoga se naziva produkt. Prilikom metamorfne reakcije obično dobivamo više produkata.

Koeficijenti x_1, x_2, \dots, x_n , predstavljaju broj molekula pojedinačnih minerala, tako da je jednadžba metamorfne reakcije uravnotežena.

Problem određivanja tih koeficijenata svodimo na rješavanje homogenog sustava linearnih metamorfnih jednadžbi.

Primjer 1.3.1. (*Uravnoteženje metamorfne reakcije*)

Razmotrimo metamorfnu reakciju minerala grosulara $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$ i kvarca SiO_2 u kojoj kao reaktanti nastaju volastonit CaSiO_3 i anortit $\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$:



Jednadžba je napisana u smislu reaktanata i produkta. Prije svega označimo sa x_1, x_2, x_3 i x_4 broj molekula. Problem je odrediti broj molekula pojedinih minerala koji će uravnotežiti jednadžbu.

Sustav linearnih jednadžbi postavljamo tako da se za svaki od elemenata u reakciji postavlja po jedna jednadžba tako da koeficijent uz nepoznanicu predstavlja broj atoma promatrano elementa kako s lijeve strane, tako i s desne strane znaka jednakosti:

$$\text{Ca : } 3x_1 = x_3 + x_4$$

$$\text{Al : } 2x_1 = 2x_4$$

$$\text{Si : } 3x_1 + x_2 = x_3 + 2x_4$$

$$\text{O : } 12x_1 + 2x_2 = 3x_3 + 8x_4.$$

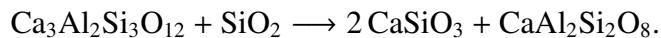
Dakle, imamo sustav:

$$\begin{aligned} 3x_1 & - x_3 - x_4 = 0, \\ 2x_1 & - 2x_4 = 0, \\ 3x_1 + x_2 - x_3 - 2x_4 & = 0, \\ 12x_1 + 2x_2 - 3x_3 - 8x_4 & = 0. \end{aligned}$$

Uz dane uvjete rješenje postavljenog sustava jednadžbi je:

$$x_1 = x_2 = x_4 = 1, \quad x_3 = 2.$$

Dakle, jednadžba uravnoteženja zadane kemijske reakcije glasi:



Primjer 1.3.2. (*Vrijednosti Gibbsove slobodne energije*)

U ovom primjeru zadani sustav jednadžbi opisuje stvaranje tri minerala: talka, krizotila i sepiolita. Za svaki od tih minerala navedeni su podaci Gibbsove slobodne energije (GFE) za formiranje minerala. Zadatak je pronaći vrijednosti za GFE od triju spojeva koji su uključeni u reakciju. To su magnezijev hidroksid, magnezijev oksid i silicijev dioksid. Jednadžbe su:



Dakle, u ovom primjeru svaka od jednadžbi u sustavu je ujednačena, a cilj je pronaći potrebne Gibsove slobodne energije za svaki od tri spoja koji je uključen u reakciju.

Prvi korak je prepisivanje podataka u sustav linearnih jednadžbi tako da su nepoznanice x_1, x_2, x_3 potrebni GFE :

$$\begin{array}{rccccc} & \text{Mg(OH)}_2 & \text{MgO} & \text{SiO}_2 & = & \text{GFE} \\ \text{talk} & 1x_1 & + 2x_2 & + 4x_3 & = & -5523, \\ \text{krizolit} & 2x_1 & + 1x_2 & + 2x_3 & = & -4038, \\ \text{sepiolit} & 2x_1 & & + 3x_3 & = & -4269.8. \end{array}$$

Rješenje zadanog sustava linearnih jednadžbi je

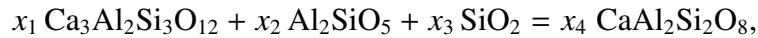
$$x_1 = -851, \quad x_2 = -624.13, \quad x_3 = -855.93,$$

pa zaključujemo da je za svaki od promatranog spoja potrebna slijedeća GFE:

$$\begin{array}{llll} G^o & \text{Mg(OH)}_2 & = & -851 \text{ kJmol}^{-1}, \\ G^o & \text{MgO} & = & -624.13 \text{ kJmol}^{-1}, \\ G^o & \text{SiO}_2 & = & -855.93 \text{ kJmol}^{-1}. \end{array}$$

Primjer 1.3.3. (Stehiometrijske proporcije reaktanata i produkta)

Razmotrimo reakciju minerala grosulara $\text{Ca}_3\text{Al}_2\text{Si}_3\text{O}_{12}$, kianita Al_2SiO_5 i kvarca SiO_2 u kojoj kao reaktant nastaje anortit $\text{CaAl}_2\text{Si}_2\text{O}_8$ napisano kemijskom jednadžbom :



te možemo zapisati preko oksida:

$$\begin{array}{rrrr} & x_1 & x_2 & x_3 & x_4 \\ \text{Al}_2\text{O}_3 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ \text{CaO} & 3 & 0 & 0 & 1 \\ \text{SiO}_2 & 3 & 1 & 1 & 2. \end{array}$$

U ovom sustavu linearnih jednadžbi imat ćemo četiri nepoznanice i samo tri jednadžbe. Možemo pretpostaviti $x_4 = 1$, pa sustav izgleda ovako:

$$\begin{array}{rcl} 1x_1 & + 1x_2 & = 1, \\ 3x_1 & & = 1, \\ 3x_1 & + 1x_2 & + 1x_3 = 2. \end{array}$$

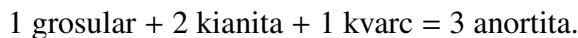
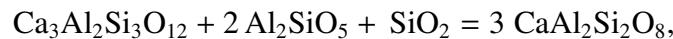
Rješenje postavljenog sustava jednadžbi je:

$$x_1 = x_3 = \frac{1}{3}, \quad x_2 = \frac{2}{3}, \quad x_4 = 1.$$

POGLAVLJE 1. LINEARNE JEDNADŽBE I SUSTAVI LINEARNIH JEDNADŽBI U PRIMJENI

10

Sada, budući da su po dogovoru stehiometrijske proporcije reaktanata i produkta u kemijskim jednadžbama određene cjelobrojnim vrijednostima, množimo s najmanjim zajedničkim nazivnikom (u ovom slučaju je to 3), te jednadžba mineralne reakcije glasi:

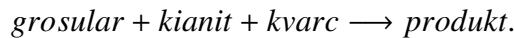


Primjer 1.3.4. (*Matrica metamorfne reakcije minerala*)

Potrebno je napisati matricu metamorfne reakcije minerala



tako da koeficijent matrice a_{ij} predstavlja broj molova oksida i u molarnom članu j . Molarni članovi su minerali reaktanti. Retci predstavljaju okside koji se javljaju u tim mineralima.



Podimo od kemijskih formula minerala reaktanata. U retke ćemo, ovisno o promatranom mineralu, upisivati broj molova oksida:

	grossular $\text{Al}_2\text{CaSiO}_6$	kianit Al_2SiO_5	kvarc SiO_2
Al_2O_3	1	1	0
CaO	3	0	0
SiO_2	3	1	1.

Matrica metamorfne reakcije minerala izgleda ovako:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Primjerice, koeficijent matrice (3, 2) čitamo: u mineralu kianitu je 1 mol kvarca (silicijevog dioksida).

Primjer 1.3.5. (*Množenje vektora skalarom*)

U stupčanoj matrici dani su podaci o broju iona pojedinih elemenata koji sačinjavaju mineral klorita, a dobiveni su temeljem analize koju su proveli Deer, Howie i Zusmann 1962. godine. Pokraj matričnog prikaza vektora upisan je kemijski element čiji broj iona dobiven u spomenutoj analizi predstavlja komponentu vektora \mathbf{w} .

$$\mathbf{w} = \begin{pmatrix} 0.44 \\ 0.494 \\ 0.121 \\ 0.669 \\ 0.649 \\ 3.068 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{Si} \\ \text{Al} \\ \text{Fe}^{++} \\ \text{Mg} \\ \text{H}_2 \\ \text{O} \end{array}$$

Dani vektor \mathbf{w} potrebno je „preoblikovati” tako da bude 14 atoma kisika, te potom iskazati formulu za klorit.

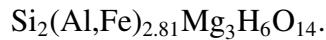
Vektor \mathbf{w} se može pomnožiti skalarom tako da zadnji element vektora, obično kisik kako je dano i u ovom primjeru, sadrži broj atoma kisika koji odgovara silikatnoj skupini kojoj mineral pripada. Tako za mineral klorit želimo da zadnja komponenta vektora bude 14, odnosno da imamo O_{14} . Iz tog razloga pomnožimo zadani vektor \mathbf{w} skalarom $\frac{14}{3.068}$. Množenjem vektora \mathbf{w} zadanim skalrom dobivamo vektor:

$$\begin{pmatrix} 0.44 \\ 0.494 \\ 0.121 \\ 0.669 \\ 0.649 \\ 3.068 \end{pmatrix} \cdot \frac{14}{3.068} = \begin{pmatrix} 2.026 \\ 2.254 \\ 0.552 \\ 3.053 \\ 2.962 \\ 14 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{Si} \\ \text{Al} \\ \text{Fe}^{++} \\ \text{Mg} \\ \text{H}_2 \\ \text{O} \end{array}$$

Uzimamo da neke komponente dobivenog vektora imaju cijelobrojne vrijednosti, odnosno imamo vektor:

$$\begin{pmatrix} 2 \\ 2.254 \\ 0.552 \\ 3 \\ 3 \\ 14 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{Si} \\ \text{Al} \\ \text{Fe}^{++} \\ \text{Mg} \\ \text{H}_2 \\ \text{O} \end{array}$$

Dobili smo vektor čije komponente predstavljaju atome svakog od elementa u mineralnoj formuli na temelju 14 atoma kisika. Sada možemo dati formulu analiziranog klorita:



Primjer 1.3.6. (*Množenje matrica*)

U prethodnom primjeru vektor \mathbf{w} koji je sadržavao broj iona u uzorku analiziranog minerala klorita, korišten je bez objašnjenja u vezi s izdvajanjem pojedinog kemijskog

elementa. Kako bismo dobili taj vektor polazimo od udjela pojedinog oksida u mineralu (dano u postotcima), iz čega dobijemo vektor \mathbf{b} čije su komponente molovi tih oksida.

Tablica podataka koji proizlaze iz analize:

<i>oksid</i>	<i>udio</i>	<i>količina</i>
	<i>postotak</i>	<i>mol</i>
<chem>SiO2</chem>	26.68	0.444
<chem>Al2O3</chem>	25.20	0.247
<chem>FeO</chem>	8.70	0.121
<chem>MgO</chem>	26.96	0.669
<chem>H2O</chem>	11.70	0.649.

Dakle, vektor \mathbf{b} sadrži analizu u smislu udjela oksida (mol) i njegov matrični prikaz je:

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0.444 \\ 0.247 \\ 0.121 \\ 0.669 \\ 0.649 \end{pmatrix} \begin{matrix} \text{SiO}_2 \\ \text{Al}_2\text{O}_3 \\ \text{FeO} \\ \text{MgO} \\ \text{H}_2\text{O} \end{matrix} .$$

Možemo iskazati matricu \mathbf{D} čiji koeficijenti predstavljaju broj atoma elementa i u oksidu j . Tu matricu zapisujemo ovako:

$$\begin{array}{ccccc} & \text{SiO}_2 & \text{Al}_2\text{O}_3 & \text{FeO} & \text{MgO} & \text{H}_2\text{O} \\ \text{Si} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \text{Al} & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ \text{Fe}^{++} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \text{Mg} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \text{H}_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ \text{O} & 2 & 3 & 1 & 1 & 1 \end{array}$$

Primjerice, koeficijent matrice na mjestu (6,2) iznosi 3, a čitamo: u aluminij oksidu Al2O3 sadržano je 3 atoma kisika.

Matricu \mathbf{D} množimo stupčanom matricom \mathbf{b} koja predstavlja vektor udjela oksida iz analize klorita, te dobivamo vektor \mathbf{w} iz prethodnog primjera:

$$\mathbf{D}_{(i,j)} \cdot \mathbf{b}_{(j)} = \mathbf{w}_{(i)}.$$

$$\begin{array}{l}
 \begin{array}{ccccc} & \text{SiO}_2 & \text{Al}_2\text{O}_3 & \text{FeO} & \text{MgO} & \text{H}_2\text{O} \\
 \text{Si} & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
 \text{Al} & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\
 \text{Fe}^{++} & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
 \text{Mg} & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
 \text{H}_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\
 \text{O} & 2 & 3 & 1 & 1 & 1 \end{array} \cdot \begin{pmatrix} 0.444 \\ 0.247 \\ 0.121 \\ 0.669 \\ 0.649 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.444 \\ 0.494 \\ 0.121 \\ 0.669 \\ 0.649 \\ 3.068 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{Si} \\ \text{Al} \\ \text{Fe}^{++} \\ \text{Mg} \\ \text{H}_2 \\ \text{O} \end{array}
 \end{array}$$

Primjer 1.3.7. (Pravac regresije)

Analizom uzorka sedimenta iz trijaznih glinastih sedimenata iz blizine Buraydaha u Saudijskoj Arabiji dobiveni su podaci koji se odnose na količinu olova i cinka u sedimentu: (42.7, 14.9); (85.8, 23.2); (57.0, 23.3); (43.0, 16.6); (10.0, 8.0); (11.0, 8.0). Vrijednosti su dane u ppm/g sedimenta.

Iz zadanih podataka možemo pretpostaviti linearnu vezu između količine olova i cinka u promatranom sedimentu. Želimo naći jednadžbu pravca regresije, a to ćemo učiniti *metodom najmanjih kvadrata*. Uzmimo da je ovo ovisna varijabla. Tada je jednadžba pravca regresije:

$$\text{Pb} = a \text{Zn} + c.$$

Ideja *metode najmanjih kvadrata* je minimizirati sumu kvadratnih odstupanja teoretskih od eksperimentalnih vrijednosti. Ako označimo $x_2 = \text{Pb}$, te $x_1 = \text{Zn}$, tada gornja jednadžba izgleda ovako:

$$x_2 = ax_1 + c.$$

Iz metode najmanjih kvadrata proizlaze jednadžbe:

$$a \sum x_1^2 + cx_1 = \sum x_1 x_2,$$

$$a \sum x_1 + nc = \sum x_2,$$

gdje su a i c regresijski parametri, a n broj uzorka. U ovom primjeru je $n = 6$, a parametri a i c predstavljaju koeficijente u jednadžbi regresijskog pravca i zadatak se svodi na pronađenje tih parametara. U prvom koraku u matricu \mathbf{A} zapišimo podatke koji proizlaze iz analize.

$$\begin{array}{cc} & \text{Pb} \quad \text{Zn} \\ \begin{matrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \\ 5 \\ 6 \end{matrix} & \begin{pmatrix} 42.7 & 14.9 \\ 85.8 & 23.2 \\ 57.0 & 23.3 \\ 43.0 & 16.6 \\ 10.0 & 8.0 \\ 11.0 & 8.0 \end{pmatrix} = \mathbf{A}. \end{array}$$

U drugom koraku napišimo njenu transponiranu matricu

$$\mathbf{A}^T = \begin{pmatrix} 42.7 & 85.8 & 57.0 & 43.0 & 10.0 & 11.0 \\ 14.9 & 23.2 & 23.3 & 16.6 & 8.0 & 8.0 \end{pmatrix} \text{ Pb} \quad \text{Zn}.$$

U trećem koraku pomnožimo matricu \mathbf{A} s njoj transponiranim matricom \mathbf{A}^T . Time smo dobili matricu \mathbf{S} čije su komponente:

$$\begin{array}{cc} & \text{Pb} \quad \text{Zn} \\ \mathbf{S} = & \begin{pmatrix} \sum x_1^2 & \sum x_1 x_2 \\ \sum x_1 x_2 & \sum x_2^2 \end{pmatrix} \text{ Pb} \quad \text{Zn}, \end{array}$$

a upravo koeficijenti te matrice su nam potrebni za formiranje jednadžbi koje proizlaze iz *metode najmanjih kvadrata*. Dakle dobivamo:

$$\mathbf{A}_{(2,6)}^T \cdot \mathbf{A}_{(6,2)} = \mathbf{S}_{(2,2)},$$

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} 14503.931 & 4836.69 \\ 4836.69 & 1706.70 \end{pmatrix}.$$

Sad dobivene podatke možemo uvrstiti u jednadžbe *metode najmanjih kvadrata*. Dobivamo sustav od dvije jednadžbe s dvije nepoznanice:

$$14503.931a + 249.5c = 4836.69,$$

$$249.5a + 6c = 94.0,$$

čije je rješenje:

$$a = 0.191,$$

$$c = 8.313.$$

Stoga je jednadžba koja opisuje promatrani odnos u skupu podataka (jednadžba pravca regresije):

$$Pb = 0.191 Zn + 8.313.$$

Primjer 1.3.8. (*Disperzijska i korelacijska matrica*)

U nekoj skupini uzoraka fluorita analiziran je sadržaj laktih ugljikovodičnih plinova. Dobiveni podatci dani su matricom:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 314 & 333 & 305 & 1471 & 702 & 1002 & 824 & 738 & 349 & 406 \\ 3.9 & 1.2 & 1.5 & 12.5 & 7.2 & 7.7 & 12.6 & 9.5 & 2.3 & 3.1 \\ 0.9 & 1.2 & 0.4 & 2.3 & 2.7 & 0.8 & 3.7 & 3.8 & 0.9 & 0.8 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \text{metan} \\ \text{etan} \\ \text{propan} \end{array}$$

Vrijednosti su dane u vppm/cc. Potrebno je izračunati disperzijsku matricu \mathbf{D} i korelacijsku matricu \mathbf{R} .

Uočimo da se format kojim su zadani podatci razlikuje od formata u prethodnom primjeru. Iz dobivenih podataka vidimo da su srednje vrijednosti:

$$\begin{array}{ll} \text{metan} & 644.4 \text{ vppm/cc} \\ \text{etan} & 6.15 \text{ vppm/cc} \\ \text{propan} & 1.75 \text{ vppm/cc.} \end{array}$$

Kako bismo dobili matricu \mathbf{B} , od svake vrijednosti u matrici \mathbf{A} oduzet ćemo srednju vrijednost (za promatrani plin). Tada matrica \mathbf{B} izgleda ovako:

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} -330.4 & -311.4 & -339.4 & 826.6 & 57.6 & 357.6 & 179.6 & 93.6 & -295.4 & -238.4 \\ -2.25 & -4.95 & -4.65 & 6.35 & 1.05 & 1.55 & 6.45 & 3.35 & -3.85 & -3.05 \\ -0.85 & -0.55 & -1.35 & 0.55 & 0.95 & -0.95 & 1.95 & 2.05 & -0.85 & -0.95 \end{pmatrix}.$$

Podatke dane u ovom obliku upotrijebit ćemo tako da pronađemo transponiranu matricu matrici \mathbf{B} :

$$\mathbf{B}^T = \begin{pmatrix} -330.4 & -2.25 & -0.85 \\ -311.4 & -4.95 & -0.55 \\ -339.4 & -4.65 & -1.35 \\ 826.6 & 6.35 & 0.55 \\ 57.6 & 1.05 & 0.95 \\ 357.6 & 1.55 & -0.95 \\ 179.6 & 6.45 & 1.95 \\ 93.6 & 3.35 & 2.05 \\ -295.4 & -3.85 & -0.85 \\ -238.4 & -3.05 & -0.95 \end{pmatrix}.$$

Kako bismo dobili disperzijsku matricu \mathbf{D} pomnožimo matrice:

$$\mathbf{B}_{(3,10)} \cdot \mathbf{B}_{(10,3)}^T = \mathbf{D}_{(3,3)},$$

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} 1320902.375 & 13063.101 & 2099.6 \\ 13063.101 & 171.965 & 39.545 \\ 2099.6 & 39.545 & 14.585 \end{pmatrix}.$$

Sada za svaki od tri plina izračunajmo standardnu devijaciju:

$$\begin{aligned} \sigma_{v1} (\text{metan}) &= \sqrt{\frac{d_{1,1}}{n}} = \sqrt{\frac{1320902.375}{10}} = 363.442 \\ \sigma_{v2} (\text{etan}) &= \sqrt{\frac{d_{2,2}}{n}} = \sqrt{\frac{171.965}{10}} = 4.147 \\ \sigma_{v3} (\text{propan}) &= \sqrt{\frac{d_{3,3}}{n}} = \sqrt{\frac{14.585}{10}} = 1.208. \end{aligned}$$

Matricu \mathbf{C} dobijemo tako da podijelimo svaki element matrice \mathbf{B} standardnom devijacijom.

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} -0.909 & -0.857 & -0.934 & 2.274 & 0.158 & 0.984 & 0.494 & 0.258 & -0.813 & -0.656 \\ -0.543 & -1.194 & -1.121 & 1.531 & 0.253 & 0.374 & 1.555 & 0.808 & -0.928 & -0.735 \\ -0.704 & -0.455 & -1.118 & 0.455 & 0.787 & -0.787 & 1.615 & 1.697 & -0.704 & -0.787 \end{pmatrix}.$$

Od matrice \mathbf{C} napravimo transponiranu \mathbf{C}^T . Kako bismo dobili korelacijsku matricu \mathbf{R} , množimo matrice:

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{(3,10)} \cdot \mathbf{C}_{(10,3)}^T &= \mathbf{R}_{(3,3)} \cdot n \\ \mathbf{R} \cdot n &= \begin{pmatrix} 10.000 & 8.667 & 4.784 \\ 8.667 & 10.000 & 7.896 \\ 4.784 & 7.896 & 10.000 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Dakle, korelacijska matrica \mathbf{R} je:

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} 1.00000 & 0.8667 & 0.4784 \\ 0.8667 & 1.0000 & 0.7896 \\ 0.4784 & 0.7896 & 0.10000 \end{pmatrix}.$$

1.4 Linearne jednadžbe u građevini

U projektiranju građevinskih konstrukcija upotreba linearne algebre je neizostavan dio u rješenju projektantskog zadatka i donošenju odluke. Premda su svi inženjerski problemi vezani uz realan svijet zapravo nelinearne prirode, njihovi matematički modeli koji proizlaze iz niza pretpostavki i aproksimacija u konačnici mogu biti linearni. Ne postoje

stogo definirana pravila kako konstrukciju modelirati i proračunati, već postoje određena načela temeljena na ranijim iskustvima i teorijskim istraživanjima, te odgovarajući postupci i metode. Inženjeri, projektanti konstrukcija, kako bi dimenzionirali konstrukciju realne građevine, moraju postaviti dobar matematički model. Taj model podrazumijeva niz pojednostavljenja (idealizacija) stvarnog sustava, počevši od idealizacije statičkim sustavom. Idealizacija statičkim sustavom uključuje geometrijsku idealizaciju, često geometrijsku linearizaciju, zatim materijalnu linearizaciju kojom se pretpostavljaju vrlo mali pomaci i deformacije u odnosu na nosivi element koji promatramo. Uslijed djelovanja opterećenja na konstrukciju dolazi do unutarnjih naprezanja u njoj, te određenih deformacija (pomaci, zaokreti). Za mala naprezanja i deformacije pretpostavlja se da vrijedi Hookeov zakon. Pretpostavkom da je svaki nosivi dio konstrukcije tijelo koje je homogeno i izotropno, te da vrijedi teorija elastičnosti, omogućeno je napraviti matematički model konstrukcije. Nadalje, unutar idealiziranog modela mogu se dodatno aproksimirati opterećenja, rubni uvjeti, pa i pojedini dio modela. Cilj modeliranja konstrukcije u svrhu proračuna je postaviti takav model koji će najbolje aproksimirati stvarno stanje realne konstrukcije. Cilj proračuna je dimenzionirati sve elemente konstrukcijskog sklopa (od materijala, njegove kvalitete, do dimenzija pojedinih elemenata konstrukcije) kako bi realna konstrukcija bila statički i kinematički stabilna pod svim utjecajima u vremenu u kojem je u upotrebi.

Primjer 1.4.1. (*Interpretacija Gaussovog postupka kod progiba grede*)

Jednostavna greda je jednoelementni nosač oslonjen na nepomični oslonac i vodoravno pokretni zglobni oslonac (ležaj). Opterećenje na gredu prenosi se na oslonce. Aproksimiramo gredu štapom i promotrimo što se događa pod opterećenjem. Možemo zamisliti da je greda opterećena nekim kontinuiranim opterećenjem (npr. vlastitom težinom).

Pod djelovanjem opterećenja štap doživi progib. Iz poznatog progiba želimo pronaći sile koje su uzrokovale taj progib.

Prepostavit ćemo da je masa štapa koncentrirana u konačnom broju točaka n , $n \in \mathbb{N}$. Nadalje, pretpostavimo da sile koje djeluju na štap djeluju upravo u tim točkama koje nazivamo čvorovi. Promatrati ćemo pomake u zadanim čvorovima. Polazimo od dviju pretpostavki linearnosti: 1. kod istovremenog djelovanja dviju sila progibi se zbrajaju i 2. koliko puta povećamo силу, toliko puta se poveća progib. Navedeno svojstvo linearnosti građevinski inženjeri, kao i fizičari, nazivaju *načelo superpozicije sila*.

Označimo sa $\delta_{i,j}$ progib u čvoru i uslijed djelovanja jedinične sile u čvoru j . Pod djelovanjem te sile doći će do pomaka štapa, odnosno dobit ćemo progibnu liniju (slika 1.1).

Sad pretpostavimo da u svakom od n čvorova djeluje sila. Te sile mogu biti različite.

Na slici 1.2 je prikazana progibna linija. Sa y_i označen je pomak u čvoru i , $i = 1, \dots, n$.



Slika 1.1: Pomak štapa pod djelovanjem jedinične sile u čvoru k



Slika 1.2: Pomak štapa pod djelovanjem različitih sila u čvorovima

Tada vrijede sljedeće jednadžbe:

$$\begin{aligned} \delta_{11}F_1 + \delta_{12}F_2 + \dots + \delta_{1n}F_n &= y_1, \\ \delta_{21}F_1 + \delta_{22}F_2 + \dots + \delta_{2n}F_n &= y_2, \\ &\vdots \\ \delta_{n1}F_1 + \delta_{n2}F_2 + \dots + \delta_{nn}F_n &= y_n, \end{aligned}$$

pri čemu su δ_{ij}, y_i iz \mathbb{R} ($i = 1, \dots, n, j = 1, \dots, n$), $n \in \mathbb{N}$.

Dakle, problem nalaženja sila iz zadanih progiba vodi na rješavanje sustava linearnih algebarskih jednadžbi.

Sada ćemo interpretirati Gaussov postupak u smislu poništavanja utjecaja sila u pojedinom čvoru. Pretpostavimo da u čvoru 1 djeluje sila $R_{1,j}$ koja je takva da poništava utjecaj jedinične sile u čvoru j na čvor 1, odnosno progib u čvoru 1 je nula.



Slika 1.3: Pomak štapa pod djelovanjem jedinične sile u čvoru j, nakon uravnoteženja u čvoru 1

Pomak čvora i uslijed djelovanja u čvoru j jedinične sile F_j označili smo sa $\delta_{ij}^{(1)}$, $i = 1, \dots, n$, odnosno u čvoru i vrijedi:

$$\delta_{i1}R_{1j} + \delta_{ij}F_j = \delta_{ij}^{(1)}.$$

Sukladno dogovorenoj oznaci, pomak čvora 1 označili smo sa $\delta_{1j}^{(1)}$. Taj pomak uslijed djelovanja jedinične sile u čvoru j je nula jer imamo uravnoteženje silom R_{1j} , odnosno u čvoru 1 vrijedi:

$$\delta_{11}R_{1j} + \delta_{1j} \cdot 1 = 0.$$

Iz tog slijedi:

$$R_{1j} = -\frac{\delta_{1j}}{\delta_{11}},$$

pa je

$$\delta_{ij}^{(1)} = \delta_{ij} - \delta_{i1} \frac{\delta_{1j}}{\delta_{11}},$$

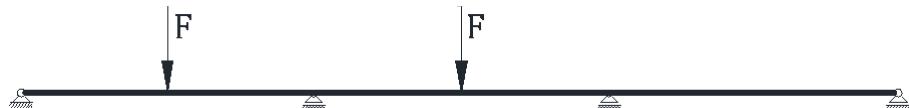
za $i = 2, \dots, n$.

Na isti način nastavimo za svaki $j = 2, \dots, n$. Tako dobijemo koeficijente nakon prvog koraka u Gaussovoj metodi. U drugom koraku polazimo od toga da u prva dva čvora djeluju sile koje poništavaju progibe uslijed djelovanja jediničnih sila u preostalim čvorovima. Na taj način dobijemo koeficijente nakon drugog koraka, itd. Općenito, dobiveni koeficijenti predstavljaju progibe uslijed djelovanja vanjskih sila i sila koje poništavaju njihov utjecaj. Naravno, kod nelinearnih problema ne vrijedi načelo superpozicije sila.

Primjer 1.4.2. (*Metoda sila*)

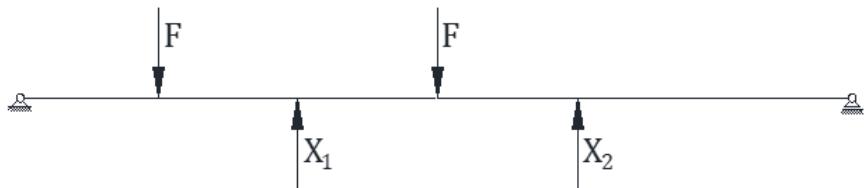
Kod modeliranja sustavom koji je statički neodređen, što znači da ima veći broj veza u osloncima ili među elementima (vanjske veze) nego je potrebno za ravnotežu sustava pod djelovanjem opterećenja, jedna od metoda koja se koristi je *metoda sila*. U ovoj metodi prelazimo sa statički neodređenog sustava na statički određeni sustav tako da prekobrojne veze raskinemo, a kako bi osnovni sustav ostao u ravnotežnom stanju i geometrijski ne-promjenjiv pod utjecajem opterećenja, na mjestu raskinutih veza stavljamo poopćene sile koje su te veze prenose ili pak par uravnoteženih sila odnosno momenata ako se radi o raskinutoj unutarnjoj vezi. Ovako dobiveni statički određeni sustav nazivamo *osnovni sustav*. Nema strogog pravila za postaviti osnovni statički sustav već se to može učiniti na više načina, od kojih biramo onaj koji je jednostavniji za proračun unutarnjih sila.

Zadan je ravni nosač preko tri otvora s osloncima kao na slici 1.4 (Gerberov nosač), opterećen s dvije koncentrirane sile F koje su poznate (vanjsko opterećenje).



Slika 1.4: Gerberov nosač

Ovaj nosač ima dvije prekobrojne veze, odnosno dva je puta statički neodređen. Za osnovni sustav želimo imati jednostavnu gredu. Stoga ćemo prekobrojne oslonce: drugi i treći ležaj, zamijeniti silama X_1 i X_2 , kao što je prikazano na slici 1.5. (Napomena: to je jedan od mogućih osnovnih sustava koji nije najprikladniji, ali je zoran za razumijevanje *metode sile*).



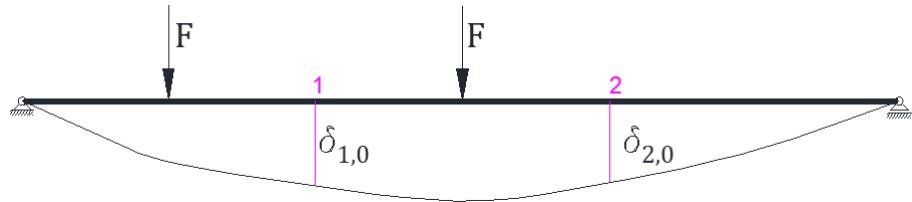
Slika 1.5: Sile u prekobrojnim vezama

Na početku proračuna nisu poznati iznosi sile u prekobrojnim vezama. Kako bismo ih odredili koristimo se jednadžbama neprekinutosti (kontinuiteta), te načelom superpozicije pomaka i načelom jedinične sile kako je pokazano u prethodnom primjeru.

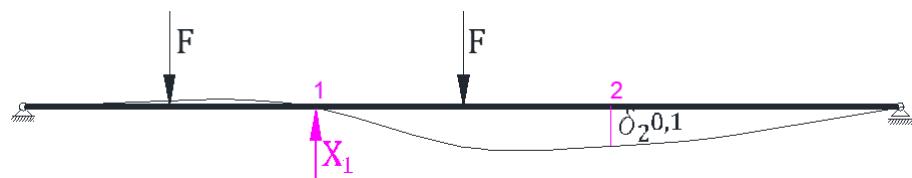
Uvjet neprekidnosti proizlazi iz zahtjeva da se progibna linija početnog sustava podudara s progibnom linijom osnovnog sustava nakon uklanjanja oslonaca i s dodatkom sile X_1 i X_2 na mjestu uklonjenih oslonaca.

Na slici 1.6 je pokazano kako bi se progibao nosač pod djelovanjem koncentriranih sile F , ukoliko ne bi postojali oslonci u čvorovima 1 i 2. Ako uz zadane sile F uzmemmo da djeluje sila X_1 tako da se u čvoru 1 poništi utjecaj progiba, tada linija progiba izgleda kao na slici 1.7.

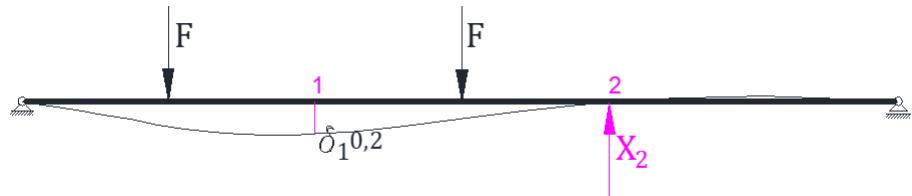
Ukoliko uz zadane koncentrirane sile uzmemmo da djeluje sila X_2 tako da se u čvoru 2 poništi utjecaj progiba, tada linija progiba izgleda kao na slici 1.8.



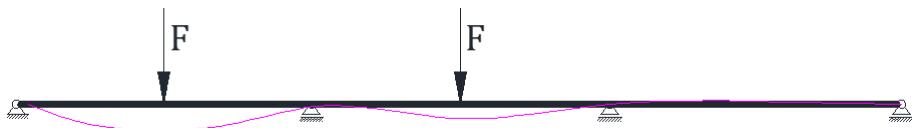
Slika 1.6: Progibna linija osnovnog sustava za vanjsko opterećenje



Slika 1.7: Progibna linija osnovnog sustava za slučaj kada X_1 poništi progib u čvoru 1



Slika 1.8: Progibna linija osnovnog sustava za slučaj kada X_2 poništi progib u čvoru 1



Slika 1.9: Progibna linija zadanog sustava

Polazimo od načela superpozicije i načela jedinične sile (o čemu smo govorili u prethodnom primjeru): u čvoru 1 pod utjecajem dvije vanjske sile F , te sila raskinutih veza X_1 i X_2 za pomak vrijedi:

$$\delta_{1,1}X_1 + \delta_{1,2}X_2 + \delta_{1,0} = \delta_1.$$

U čvoru 2 pod utjecajem dvije vanjske sile F , te sila raskinutih veza X_1 i X_2 za pomak vrijedi:

$$\delta_{2,1}X_1 + \delta_{2,2}X_2 + \delta_{2,0} = \delta_2.$$

Budući da u čvorovima 1 i 2 ne dolazi do pomaka nosača jer je u stvarnosti oslonjen na ležajeve, progibna linija nosača izgleda kao na slici 1.9, pa trebamo zadovoljiti uvjete neprekinutosti: $\delta_1 = 0$ i $\delta_2 = 0$. Stoga dobivamo sustav koji nazivamo sustav jednadžbi neprekidnosti ili kompatibilnosti:

$$\begin{aligned}\delta_{1,1}X_1 + \delta_{1,2}X_2 + \delta_{1,0} &= 0, \\ \delta_{2,1}X_1 + \delta_{2,2}X_2 + \delta_{2,0} &= 0.\end{aligned}$$

Rješenje ovog sustava jednadžbi su sile X_1 i X_2 u raskinutim vezama. Prethodno je potrebno izračunati $\delta_{1,0}$ i $\delta_{2,0}$, odnosno vrijednosti pomaka čvorova 1 i 2 zbog sila F, odnosno njima kolinearnih jediničnih sila, te odgovarajuće vrijednosti pomaka tih točaka zbog pojedinačnih djelovanja jediničnih sila u smjeru X_1 i X_2 , što rade projektanti - inženjeri građevine, a mi se ovdje nećemo baviti time. Matrični zapis gornjeg sustava jednadžbi kompatibilnosti je:

$$\begin{pmatrix} \delta_{1,1} & \delta_{1,2} \\ \delta_{2,1} & \delta_{2,2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta_{1,0} \\ \delta_{2,0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Općenito, sustav jednadžbi kompatibilnosti u *metodi sila* za n puta statički neodređen sustav u matričnom obliku pišemo:

$$\begin{pmatrix} \delta_{1,1} & \delta_{1,2} & \dots & \delta_{1,n} \\ \delta_{2,1} & \delta_{2,2} & \dots & \delta_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \delta_{n,1} & \delta_{n,2} & \dots & \delta_{n,n} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ \vdots \\ X_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta_{1,0} \\ \delta_{2,0} \\ \vdots \\ \delta_{n,0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix},$$

odnosno, matričnim zapisom:

$$\mathbf{Dx} = \Delta.$$

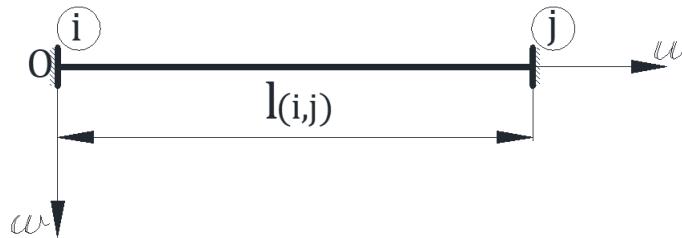
Matricu sustava D u *metodi sila* nazivamo matricom *popustljivosti* ili *matricom fleksibilnosti*. Koeficijenti u matrici D predstavljaju, kinematički gledano, vrijednosti pomaka hrvatišta sila X_i (u pravcu djelovanja tih sila) uslijed zajedničkog djelovanja svih ostalih prekobrojnih sila i svih zadanih vanjskih sila. Pod pojmom sila u ovoj metodi podrazumijevamo koncentrirane sile i koncentrirane momente, a pod pojmom pomaka podrazumijevamo translacijske pomake i zaokrete. Dodatno napomenimo da je matrica \mathbf{D} uvijek simetrična i pozitivno definitna.

Zamjena statički neodređenog sustava osnovnim sustavom omogućava izračunavanje vrijednosti pomaka odabranog čvora metodom jedinične sile, čime je izbjegнутa potreba za rješavanjem diferencijalne jednadžbe progibne linije. Primjena načela superpozicije bitno pojednostavljuje postupak i čini ga zornijim.

Primjer 1.4.3. (Metoda pomaka)

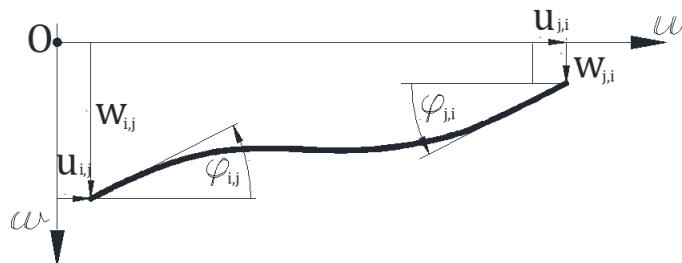
Metoda pomaka se koristi kod proračuna štapnih sustava. U ovoj metodi prelazimo sa statički neodređenog sustava na statički određeni sustav - osnovni sustav, dodavanjem veza koje sprečavaju „slobodne“ pomake i zaokrete čvorova. Stoga će se u dodanim vezama pojaviti reaktivne sile i momenti kojih nema u polaznom sustavu. Nepozanice su pomaci, odnosno vrijednosti translacijskih pomaka i kutovi zaokreta odabranih točaka sustava koje nazivamo čvorovima. Postoji inačica metode koja se naziva *inženjerska metoda pomaka*, te tzv. *opća metoda pomaka* na kojoj je utemeljena i *metoda konačnih elemenata*.

Obostrano upetu gredu promatrat ćemo kao jedan element ravninskog štapnog sustava, odnosno štap, te objasniti metodu pomaka. Promatrani štapni element je na oba kraja kruto vezan. Krajeve štapa nazovimo čvor i i čvor j . Postavit ćemo lokalni koordinatni sustav kao na slici 1.10:



Slika 1.10: Obostrano upeti štap u lokalnom koordinatnom sustavu

Čvorovi štapa (oslonci nosača), kada ne bi bili upeti, pod utjecajem opterećenja imali bi pomake (definiramo ih u smjeru osi lokalnog koordinatnog sustava), te zaokrete kako je prikazano na slici 1.11.



Slika 1.11: Obostrano upeti štap u lokalnom koordinatnom sustavu

POGLAVLJE 1. LINEARNE JEDNADŽBE I SUSTAVI LINEARNIH JEDNADŽBI U PRIMJENI

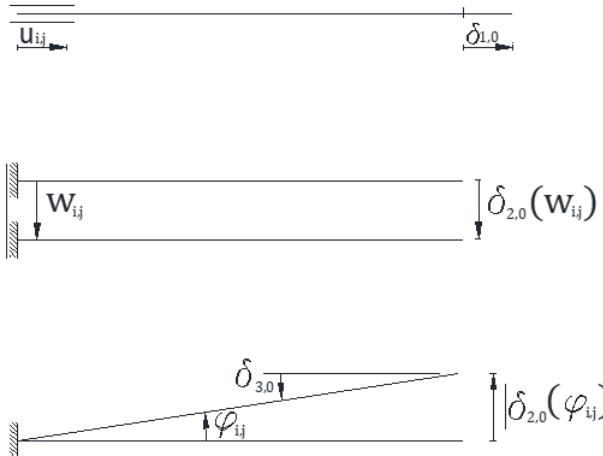
24

Za osnovni sustav odabrat ćemo konzolu, kako je prikazano na slici 1.12. Izraze za vrijednosti sila X_1, X_2 i X_3 u čvoru j dobit ćemo po *metodi sila*.



Slika 1.12: Konzola kao osnovni sustav

Potrebito je odrediti vrijednosti poopćenih pomaka hvatišta $\delta_{1,0}, \delta_{2,0}$ i $\delta_{3,0}$ od prekobrojnih sila X_1, X_2 i X_3 pomoću dijagrama pomaka kako je prikazano na slici 1.13. Ti pomaci prouzročeni su pomacima ležaja i .



Slika 1.13: Pomaci čvora i

Dobivamo sustav jednadžbi neprekinutosti, zapisan u matričnom obliku:

$$\begin{pmatrix} \frac{l_{(i,j)}}{E_{(i,j)}A_{(i,j)}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{l^3_{(i,j)}}{3E_{(i,j)}I_{(i,j)}} & -\frac{l^2_{(i,j)}}{2E_{(i,j)}I_{(i,j)}} \\ 0 & -\frac{l^2_{(i,j)}}{2E_{(i,j)}I_{(i,j)}} & \frac{l_{(i,j)}}{E_{(i,j)}I_{(i,j)}} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} u_{j,i} \\ w_{i,j} - \varphi_{i,j}l \\ \delta_{i,j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{j,i} \\ w_{j,i} \\ \varphi_{j,i} \end{pmatrix},$$

gdje je

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \frac{l_{(i,j)}}{E_{(i,j)}A_{(i,j)}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{l_{(i,j)}^3}{3E_{(i,j)}I_{(i,j)}} & -\frac{l_{(i,j)}^2}{2E_{(i,j)}I_{(i,j)}} \\ 0 & -\frac{l_{(i,j)}^2}{2E_{(i,j)}I_{(i,j)}} & \frac{l_{(i,j)}}{E_{(i,j)}I_{(i,j)}} \end{pmatrix}$$

matrica fleksibilnosti. Ovdje se nećemo baviti time kako su dobiveni koeficijenti matrice, već to prepuštamo građevinskim inženjerima. Istaknimo samo da smo matricu fleksibilnosti dobili uz pretpostavku da je štapni element konstantnog poprečnog presjeka (površina poprečnog presjeka A je konstantna i modul inercije I je konstantan), te da je modul elastičnosti E konstantan po cijeloj duljini štapa. Uočimo da je ta matrica simetrična. Inverz matrice fleksibilnosti je:

$$\mathbf{D}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{E_{(i,j)}A_{(i,j)}}{l_{(i,j)}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{12E_{(i,j)}I_{(i,j)}}{l_{(i,j)}^3} & \frac{6E_{(i,j)}I_{(i,j)}}{l_{(i,j)}^2} \\ 0 & \frac{6E_{(i,j)}I_{(i,j)}}{l_{(i,j)}^2} & \frac{4E_{(i,j)}I_{(i,j)}}{l_{(i,j)}} \end{pmatrix},$$

pa je rješenje sustava:

$$\begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \\ X_3 \end{pmatrix} = \mathbf{D}^{-1} \begin{pmatrix} u_{j,i} - u_{i,j} \\ w_{j,i} - w_{i,j} + \varphi_{i,j}l \\ \varphi_{j,i} - \varphi_{i,j} \end{pmatrix}.$$

Budući da smo osnovni sustav odabrali tako da su sile X_1, X_2 i X_3 sile na kraju j štapnog elementa, uobičajeno se pišu označke: $n_{j,i} = X_1, t_{j,i} = X_2, m_{j,i} = X_3$. pa je vektor vrijednosti sila u čvoru j u označi $f_{(i,j)_j}$:

$$f_{(i,j)_j} = (n_{j,i} \quad t_{j,i} \quad m_{j,i})^T,$$

a vektor vrijednosti sila u čvoru i u označi $f_{(i,j)_i}$ je:

$$f_{(i,j)_i} = (n_{i,j} \quad t_{i,j} \quad m_{i,j})^T.$$

Izraze za vrijednosti sila na kraju i izvodimo iz jednadžbi ravnoteže cijelog štapa i one su:

$$\begin{aligned} n_{i,j} &= -n_{j,i}, \\ t_{i,j} &= -t_{j,i}, \\ m_{i,j} &= -m_{j,i} + l_{(i,j)} \cdot t_{j,i}. \end{aligned}$$

Vektor vrijednosti (poopćenih) pomaka u čvoru i u oznaci $u_{(i,j)_i}$ je:

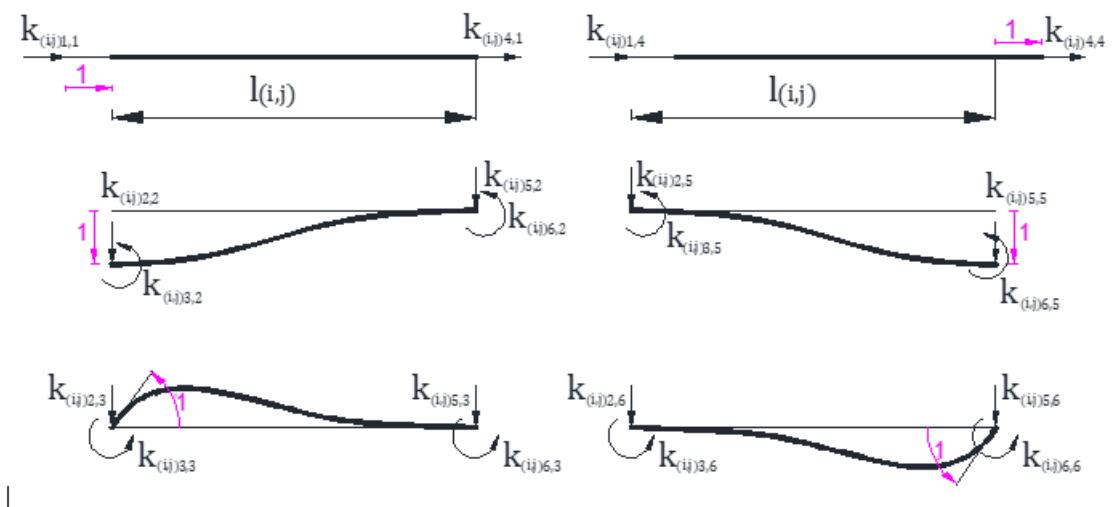
$$u_{(i,j)_i} = (u_{i,j} \quad w_{i,j} \quad \varphi_{i,j})^T,$$

a vektor vrijednosti (poopćenih) pomaka u čvoru j u oznaci $u_{(i,j)_j}$ je:

$$u_{(i,j)_j} = (u_{j,i} \quad w_{j,i} \quad \varphi_{j,i})^T.$$

Vektor vrijednosti sila na krajevima promatranog štapnog elementa (zbog pomaka njegovih krajeva) prema postavljenom lokalnom koordinatnom sustavu označimo sa $\mathbf{f}_{(i,j)}$, a vektor vrijednosti poopćenih pomaka krajeva elementa sa $\mathbf{u}_{(i,j)}$.

$$\mathbf{f}_{(i,j)} = \begin{pmatrix} n_{i,j} \\ t_{i,j} \\ m_{i,j} \\ n_{j,i} \\ t_{j,i} \\ m_{j,i} \end{pmatrix}, \mathbf{u}_{(i,j)} = \begin{pmatrix} u_{i,j} \\ w_{i,j} \\ \varphi_{i,j} \\ u_{j,i} \\ w_{j,i} \\ \varphi_{j,i} \end{pmatrix}.$$



Slika 1.14: Koeficijenti matrice krutosti

Prema slici 1.14 dobit ćemo koeficijente u matrici krutosti. U matrici 6×6 imat ćemo koeficijente aksijalne i fleksijske krutosti elementa. Komponente matrice krutosti su vrijednosti poopćene sile izazvane jediničnim poopćenim pomakom. Tu matricu označavamo sa $\mathbf{K}_{(i,j)}$ i nazivamo *matrica krutosti elementa* i ona je izražena u lokalnom koordinatnom sustavu. Ovdje nećemo navoditi njene koeficijente, već smo ilustrirali slikom 1.14 kako te komponente dobivamo. Matrica krutosti elementa je simetrična i singularna. Matrični zapis ravnoteže cijelog štapa je:

$$\mathbf{f}_{(i,j)} = \mathbf{K}_{(i,j)} \mathbf{u}_{(i,j)}.$$

Kako bismo postavili jednadžbe ravnoteže čvorova, pogodno je koristiti zapis oblika:

$$\begin{pmatrix} f_{(i,j)i} \\ f_{(i,j)j} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k_{(i,j)i,i} & k_{(i,j)i,j} \\ k_{(i,j)j,i} & k_{(i,j)j,j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{(i,j)i} \\ u_{(i,j)j} \end{pmatrix},$$

gdje su:

- $f_{(i,j)i}$ vektor vrijednosti sile u čvoru i ,
- $f_{(i,j)j}$ vektor vrijednosti sile u čvoru j ,
- $u_{(i,j)i}$ vektor vrijednosti (poopćenih) pomaka u čvoru i ,
- $u_{(i,j)j}$ vektor vrijednosti (poopćenih) pomaka u čvoru j .

Matricu $\mathbf{K}_{(i,j)}$ možemo na odgovarajući način rastaviti u blokove 3×3 . Tada, na primjer, za vrijednost sile na kraju i možemo pisati:

$$f_{(i,j)i} = \begin{pmatrix} k_{(i,j)i,i} & k_{(i,j)i,j} \\ k_{(i,j)j,i} & k_{(i,j)j,j} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{(i,j)i} \\ u_{(i,j)j} \end{pmatrix},$$

pri čemu matrica $k_{(i,j)i,i}$ izražava utjecaj pomaka kraja i na vrijednost sile na kraju i , a matrica $k_{(i,j)i,j}$ izražava utjecaj pomaka kraja j na vrijednost sile na kraju i .

Poglavlje 2

Baza vektorskog prostora u primjeni

2.1 Matematički uvod

U prvom poglavlju smo rekli da je skup S sustav izvodnica za vektorski prostor V ako vrijedi $[S] = V$. Nas zanima najmanji sustav izvodnica koji određuje vektorski prostor V koji je konačne dimenzije, odnosno baza vektorskog prostora. Baza je konačan skup vektora. Inače, sustav izvodnica može biti beskonačan (npr. linearna ljudska beskonačnog niza polinoma čini čitav vektorski prostor polinoma). Međutim, za praktične potrebe u inženjerstvu uglavnom se koristi konačan sustav izvodnica koji daje konačno generirani vektorski prostor, odnosno vektorski prostor koji je konačnodimenzionalan.

Definicija 2.1.1. *Kažemo da je vektorski prostor konačnodimenzionalan ili konačno generiran ako postoji neki konačan sustav izvodnica za V .*

Definicija 2.1.2. *Konačan skup $B = \{b_1, b_2, \dots, b_n\}$, $n \in \mathbb{N}$, u vektorskom prostoru V naziva se baza za V ako je B linearno neovisan sustav izvodnica za V .*

2.2 Baza vektorskog prostora u kemiji i kristalografskoj teoriji

U kemiji je korištenje vektorskog prostora jako bitno. Najčešće se koriste klasični V^3 vektorski prostori, opći konačnodimenzionalni prostori \mathbf{R}^n , te razni prostori funkcija (najčešće C^2 prostori). Također su česti i kompleksni prostori, osobito u kvantnoj teoriji. U nastavku ćemo pokazati primjenu linearne algebre u zadatcima iz kristalografske teorije. Prema Hrvatskom strukovnom nazivlju (struna) definiramo:

Definicija 2.2.1. *Kristalografska teorija je grana fizike čvrstoga stanja koja se bavi istraživanjem svojstava kristala te njihove kristalne strukture i mikrostrukture.*

Definicija 2.2.2. *Kristal je tijelo strukturiranog unutarnjeg rasporeda čestica koji se očituje u geometrijskoj pravilnosti.* (Definicija u kemiji)

Definicija 2.2.3. *Kristal je čvrsto stanje tvari koje se u svojoj mikroskopskoj strukturi odlikuje pravilnim periodičnim i diskretnim prostornim rasporedom atoma.* (Definicija u fizici)

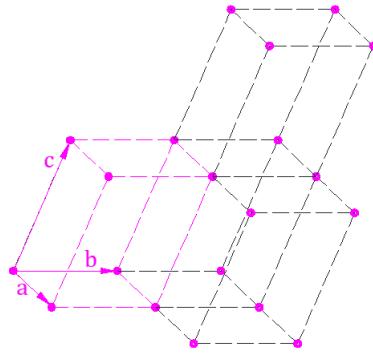
Kristal je fizikalno tijelo (skup čestica tvari koje su povezane tako da se zajedno gibaju) u čvrstom agregatnom stanju koje je građeno od pravilno trodimenzijskih periodički raspoređenih čestica (atoma, iona ili molekula). Kristalna rešetka opisuje zakonitosti po kojima se raspored istovrsnih čestica ponavlja u prostoru. Razmatrat ćemo idealnu kristalnu strukturu koja podrazumijeva pravilan raspored čestica u kristalnoj rešetki i koja pokazuje translacijsku invarijantnost. Kristali imaju određeni geometrijski oblik, a kutovi između odgovarajućih ploha kristala su isti i karakteristični za tu mineralnu vrstu, neovisno o nalazištu kristala, uz uvjet da se mijere uz stalni tlak i temperaturu. Kristalne plohe se pri rastu pomiču uвijek paralelno svom prvotnom položaju. Jedinična (elementarna) ćelija je najmanji dio prostorne rešetke koji ponavljan u tri dimenzije daje cijelu kristalnu rešetku. Za kristalne rešetke oblik jedinične ćelije određuje kojem kristalnom sustavu pripadaju. Razlikujemo sedam kristalnih sustava: kubični, tetragonski, rompski, heksagonski, trigonski, monoklinski i triklinski, a o kojem sustavu se radi ovisi o kutu među vektorima baze. Stvarni razlog podjele je u simetrijskim svojstvima pripadnih rešetki.

Važna svojstva kristala su gustoća, tvrdoća, vodljivost topline, boja, lom svjetlosti... Ona ovise o kemijskom sastavu i kristalnoj strukturi. Neka svojstva su stalna, a neka su različita u odnosu na promatrane kristalografske osi. Informacije o prostornom uređenju atoma u kristalnoj rešetki dobivamo tehnikama difrakcije rentgenskim zrakama, neutrionima i elektronima. Rentgenska difrakcija je metoda za analiziranje kristalne strukture koja nam daje informaciju o položaju atoma unutar kristala, a poslijedično dobivamo informaciju o kristalnoj fazi, parametrima jedinične ćelije, te se metoda koristi i za samu identifikaciju materijala kojeg želimo proučiti.

U dalnjem tekstu dat ćemo matematičku formulaciju problema. Čestice kristalne rešetke nazvat ćemo točkama. Te točke ćemo smatrati vektorima u konačnodimenzijsnalm vektorskom prostoru dimenzije 3. Bazu biramo tako da vektori baze $\{a, b, c\}$ definiraju paralelepiped koji predstavlja jediničnu ćeliju, a duljine tih vektora označavat ćemo sa a, b, c . Ako uzmemo bilo koju točku jedinične ćelije i povežemo je s najbližim točkama susjednih jediničnih ćelija u tri različita smjera, dobijemo tri pravca koja se poklapaju s kristalografskim osima kristala (bridovi paralelepippeda su na kristalografskim osima). Volumen jedinične ćelije ovisi o kristalnom sustavu (koji, kako je rečeno, ovisi o kutovima među vektorima baze). Dakle,

$$V = (a, b, c) = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c}.$$

Teoretski, kristal možemo zamišljati kao beskonačno fizikalno tijelo nastalo kao skup svih translacija jedinične čelije za cjelobrojne linearne kombinacije vektora baze (pogodno odabранe prema promatranom kristalu). Invarijantnost s obzirom na translaciju za cjelobrojne linearne kombinacije vektora baze daje periodičnost kristalne strukture. Periodičnost kristalne strukture ilustrirana je slikom 2.1.



Slika 2.1: Periodičnost kristalne strukture

Definicija 2.2.4. *Rešetka u afinom prostoru A s koordinatnim sustavom $(O; a_1, a_2, \dots, a_n)$ je skup svih točaka prostora sa cjelobrojnim koordinatama u tom koordinatnom sustavu. Vektorska rešetka je skup svih cjelobrojnih linearnih kombinacija vektora a_1, \dots, a_n . Ako je L vektorska rešetka i O ishodište, pripadna točkovna rešetka je*

$$\left\{ T \in A : \exists v \in L; \overrightarrow{OT} = v \right\}.$$

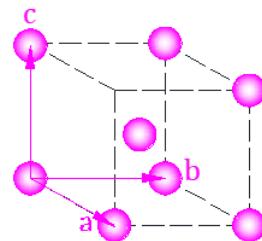
Definicija 2.2.5. *Baza (a, b, c) je kristalografska baza za vektorskiju rešetku L ako su sve njene cjelobrojne linearne kombinacije u L ; ta je baza primitivna baza ako vrijedi i obrnuto: svaki element od L je cjelobrojna linearna kombinacija vektora baze.*

Kristalografska baza u pravilu nije normirana i postoji beskonačno mnogo primitivnih baza za svaku vektorskiju rešetku, međutim, iz praktičnih razloga se često biraju baze koje nisu primitivne, odnosno koriste se neki konvencionalni koordinatni sustavi.

Rešetke kod kojih su jedine točke rešetke vrhovi jedinične čelije i njihovi (za cjelobrojne linearne kombinacije vektora baze) translatirani položaji, imaju kristalografsku bazu koja je primitivna baza, pa takve rešetke nazivamo primitivne rešetke. *Primitivna jedinična čelija* je čelija najmanjeg volumena i maksimalne moguće simetrije.

Primjer 2.2.1. (Kristalografska baza)

Zadana je volumno centrirana rešetka koja ima kubični kristalni sustav kako je prikazano na slici 2.2. Treba provjeriti je li kristalografska baza primitivna.



Slika 2.2: Volumno centrirana rešetka s kubičnim kristalnim sastavom

U kubičnom kristalnom sustavu bazni su vektori međusobno okomiti i jednakih duljina, odnosno pripadna baza kristalne rešetke je ortonormirana, te je kristalna rešetka kocka. Koordinate središta jedinične čelije u danoj bazi su $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right)$. Dakle, ova baza nije primitivna.

Primjer primitivne baze je $\left(a, b, \frac{1}{2}(a + b + c)\right)$.

Millerovi indeksi

Neka su a, b i c vektori koji razapinju jediničnu čeliju (primitivne) kristalne rešetke. Tada kristalnu rešetku L čine sve točke prostora koje imaju cijelobrojne koordinate u bazi (a, b, c) . $L = \{(x, y, z) : x, y, z \in \mathbb{Z}\} = \mathbb{Z}^3$. Baza (a, b, c) općenito nije ortonormirana, pa čak ni ortogonalna.

Stensenov 1. kristalografski zakon o stalnosti kutova kaže da su kutovi između odgovarajućih ploha na svim kristalima neke mineralne vrste jednaki, bez obzira na nalazište kristala. U kristalografskoj su od zanimanja *mrežne ravnine*. To su ravnine koje prolaze kroz relativno bliske točke rešetke. Kristalne plohe se pri rastu pomiču uvijek paralelno svom prvom položaju i uvijek su paralelne s mrežnim ravninama. Međusobno paralelne mrežne ravnine smatraju se ekvivalentnim (jer jesu ekvivalentne u smislu rasta kristala). Od tuda je proizašla ideja Millerovih indeksa. Kad bismo neku točku rešetke prozvali ishodištem, tada odabrani smjer ravnina u kojima „leže“ krstalne plohe opisujemo jednadžbom segmentnog oblika:

$$\frac{x}{\lambda m} + \frac{y}{\lambda n} + \frac{z}{\lambda p} = 1; \quad m, n, p, \lambda \in \mathbb{Z},$$

gdje su m, n, p odsječci promatrane ravnine na koordinatnim osima, odnosno $\lambda m, \lambda n, \lambda p$ odsječci svih ekvivalentnih ravnina. Dakle, ta trojka karakterizira sve međusobno paralelne mrežne ravnine jednog smjera. Nadalje, $\lambda m, \lambda n, \lambda p$ nisu stvarne udaljenosti od ishodišta do sjecišta koordinatnih ravnina, nego samo relativne. Stvarne udaljenosti se dobiju kao $\lambda m a, \lambda n b, \lambda p c$. Načelno se uređena trojka (m, n, p) može odabrati proizvoljno, ali bira se po konvenciji da su m, n i p relativno prosti. Tada se ti brojevi nazivaju *Weissovi parametri plohe* na kristalu, točnije smjera njenih mrežnih ravnina. Ploha ima Weissove parametre

$$ma : nb : pc.$$

Vektor normale za promatrani smjer je

$$\left[\frac{1}{m}, \frac{1}{n}, \frac{1}{p} \right].$$

U slučaju kada je ravnina paralelna nekoj od koordinatnih osi, dogovorno se pripadni Weissov parametar označava sa ∞ (i ignorira u uvjetu da Weissovi parametri trebaju biti relativno prosti). Budući da se rijetko kada točno znaju duljine od a, b, c , obično se kao prva, tzv. *jedinična ploha*, odabire najveća ploha kristala koja siječe sve tri kristalografske osi. Millerovi indeksi (h, k, l) uspoređuju osni odnos jedinične plohe s osnim odnosom promatrane plohe. Ako su Weissovi parametri plohe $ma : nb : pc$, a v najmanji zajednički višekratnik od m, n i p , onda su Millerovi indeksi:

$$h = \frac{v}{m}, \quad k = \frac{v}{n}, \quad l = \frac{v}{p}.$$

Ako je neki od Weissovih parametara ∞ , on se ne uzima u obzir za računanje v , a odgovarajući Millerov indeks je tada jednak 0. Prema Hrvatskom strukovnom nazivlju (struna) definiramo:

Definicija 2.2.6. *Millerovi indeksi su tri cijela broja koji određuju orijentaciju skupa međusobno usporednih i jednak razmaknutih mrežnih ravnina prema kristalnim osima i koji su razmjerni recipročnim duljinama odrezaka na kristalnim osima između susjednih ravnina skupa.*

Geometrijski, Millerovi indeksi predstavljaju koordinate vektora normale na dani smjer ravnina. Te ravnine nisu proizvoljno odabrane. Prema Haüyjevom 2. kristalografskom zakonu (zakon o racionalnom odnosu parametara) na kristalu su moguće samo one plohe čiji osni odnosi u usporedbi s osnim odnosom jedinične plohe daju male cijele brojeve ili razlomke, preciznije, kojima su odsječci ishodištu najbliže mrežne ravnine tog smjera po apsolutnoj vrijednosti mali cijeli ili racionalni brojevi.

Primjer 2.2.2. (*Vektor normale kristalne plohe*)

Pomoću Millerovih indeksa opišimo smjer ravnine $\frac{x}{15} + \frac{y}{10} + \frac{z}{20} = 1$.

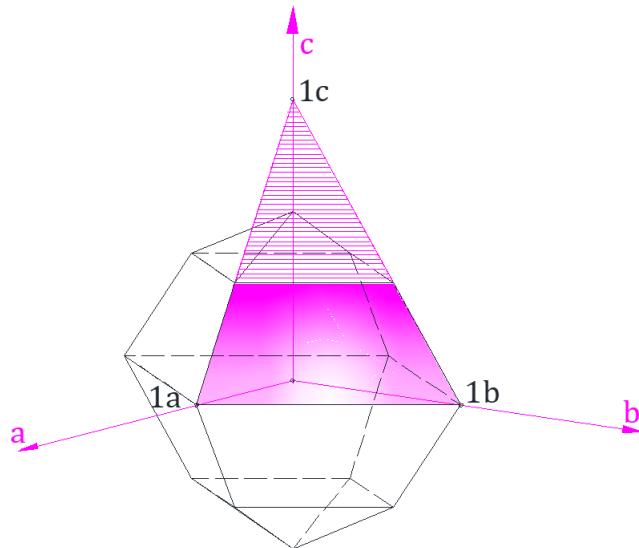
Odsječci zadane ravnine na kristalografskim osima su: $15a, 10b, 20c$. Weisovi parametri isti su za sve ravnine paralelne zadanoj i trebaju biti maksimalno skraćeni, pa su: $3a, 2b, 4c$. Najmanji zajednički višekratnik Weisovih parametara je 12. Sada možemo izračunati Millerove indekse:

$$h = \frac{12}{3} = 4, \quad k = \frac{12}{2} = 6, \quad l = \frac{12}{4} = 3.$$

Dakle, smjer zadane ravnine opisan je Millerovim indeksom (463). Geometrijski, to znači da je vektor normale zadane ravnine, kao i svih njoj paralelnih ravnina [4, 6, 3] ili njemu proporcionalan (kolinearan) vektor.

Primjer 2.2.3. (*Millerovi indeksi*)

Promotrimo kristal rompskog sastava (jedinična čelija je kvadar). Potrebno je pronaći Millerove indekse za istaknute ravnine na slikama 2.3 i 2.4.

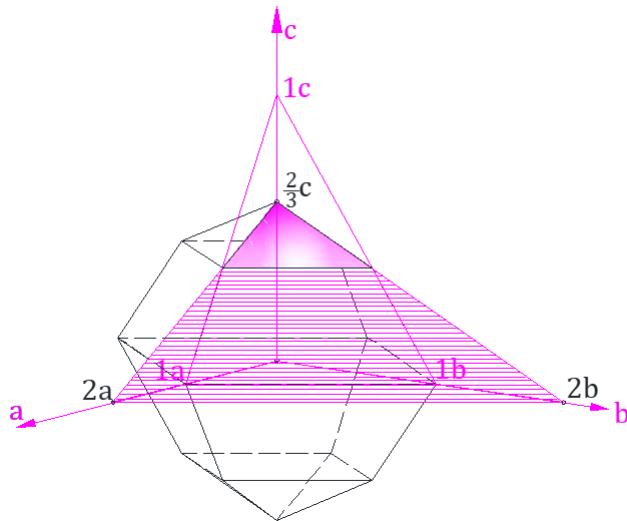


Slika 2.3: Najveća ploha na pozitivnoj strani koordinatnog sustava

Najprije odaberemo koordinatne osi. Time je definirana baza (a, b, c) . Uočimo koja je najveća strana čija ravnina siječe sve tri osi na pozitivnoj strani. Na slici 2.3 ta strana je prikladno osjenčana, te su istaknute točke presjeka ravnine s koordinatnim osima. Millerov

indeks te ravnine je $(1, 1, 1)$, kao i Millerovi indeksi svih toj ravnini paralelnih ravnina (po definiciji).

Želimo odrediti Millerove indekse ravnine koja je prikladno osjenčana na slici 2.4, gdje se vidi kako ravnina te plohe siječe koordinatne osi. Uočimo kako je na a -osi sjecište



Slika 2.4: Ploha kojoj određujemo Millerove indekse

dvaput udaljenije od ishodišta, na b -osi također, dok je na c -osi sjecište udaljeno na $\frac{2}{3}$ udaljenosti na kojoj $(1, 1, 1)$ ravnina sijeće c -os. Stoga je segmentni oblik jednadžbe te ravnine:

$$\frac{x}{2} + \frac{y}{2} + \frac{z}{\frac{2}{3}} = 1.$$

Množenjem segmentnog oblika jednadžbe s 2 dobivamo oblik:

$$x + y + 3z = 2,$$

s relativno prostim cjelobrojnim koordinatama vektora normale. Stoga su Millerovi indeksi promatrane ravnine, kao i svih njoj paralelnih ravnina $(1, 1, 3)$.

Poglavlje 3

Linearni operatori u primjeni

3.1 Matematički uvod

Definicija 3.1.1. Neka su V i W vektorski prostori nad istim poljem \mathbb{F} . Preslikavanje $A: V \rightarrow W$ naziva se linearan operator ako vrijedi:

$$A(\alpha x + \beta y) = \alpha Ax + \beta Ay, \quad \forall x, y \in V, \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{F}.$$

Skup svih linearnih operatora s V u W , nad istim poljem, označavamo sa $\mathcal{L}(V, W)$. Taj skup je uvijek neprazan, sadrži barem nulvektor. Skup $\mathcal{L}(V, W)$ je ujedno i vektorski prostor, uz uobičajen način zbrajanja i množenja skalarom, dimenzije $\dim(V) \cdot \dim(W)$.

Za inženjerske potrebe u primjeni iz realnog svijeta tehnike dovoljno je proučavati linearne operatore na prostorima konačne dimenzije.

Univerzalno svojstvo svakog linearog operatora je da je potpuno određen svojim djelovanjem na bazu vektorskog prostora V . Stoga je i matrični prikaz linearog operatora potpuno zadan djelovanjem na bazi.

Definicija 3.1.2. Linearni operator $A: V \rightarrow W$ naziva se:

- (i) monomorfizam ako je A injekcija;
- (ii) epimorfizam ako je A surjekcija;
- (iii) izomorfizam ako je A bijekcija.

Definicija 3.1.3. Neka su V i W vektorski prostori nad istim poljem. Kažemo da je V izomorfan s W (i pišemo $V \simeq W$) ako postoji izomorfizam $A: V \rightarrow W$.

Napomenimo da je termin *izomorfizam* rezerviran za operatore između različitih prostora. Ako je operator $A: V \rightarrow V$ linearan i bijektivan, češće se kaže da je A regularan ili

invertibilan operator. Također, napomenimo da je kemijskoj literaturi uobičajeno istaknuti oznaku linearnog operatora sa znakom „ $\hat{\cdot}$ ”, kao npr. \hat{H} .

3.2 Linearni operatori u kristalografskoj transformaciji

Bitne su dvije vrste operatora u kristalografskoj transformaciji: transformacije koordinatnog sustava i operatori simetrije. Transformaciju koordinatnog sustava koristimo kada, na primjer, želimo na lakši način nešto izračunati, poput razmaka susjednih ravnina u rešetki. Operatori simetrije (također se nazivaju i simetrijske operacije) preslikaju kristalnu rešetku u samu sebe. Napomenimo da transformacija koordinatnog sustava, kao i simetrijske operacije ne moraju biti linearni operatori, već su to općenito afina preslikavanja koja mogu imati translacijsku komponentu, a translacija nije linearni operator.

Transformacija koordinatnog sustava je kompozicija linearnog operatora A s translacijom za neki vektor r_0 :

$$f: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3, \quad f(r) = Ar + r_0, \quad A \in M_3, \quad r_0 \in \mathbb{R}^3.$$

Umjesto oznake f za ovako definirano preslikavanje često se koristi i oznaka $(A | r_0)$. Vektor r_0 predstavlja ishodište novog koordinatnog sustava (nakon transformacije). Zahtijeva se da linearni operator A bude regularan, odnosno da imamo izomorfizam vektorskih prostora. Ova preslikavanja su korisna kod, na primjer, promatrivanja faznih prijelaza, usporedbe različitih struktura ili pak odabira elementarne celije u rompskom, trigonskom ili monoklinskom kristalnom sustavu.

Primjer 3.2.1. (*Transformacija koordinatnog sustava*)

Zadano je preslikavanje $(A | r_0)$, gdje je $r_0 = (3, 2, 0)^t$. Zanima nas koje su koordinate „starog“ ishodišta u novom koordinatnom sustavu, a nakon djelovanja $(A | r_0)$.

Koordinate novog ishodišta su $(3, 2, 0)$, a polazno ishodište u novom koordinatnom sustavu ima koordinate $(-3, -2, 0)$.

Postoje razne veličine kojima se opisuje kristal, kao na primjer, koordinate, Milleovi indeksi,... Razlikujemo kovarijantne veličine i kontravarijantne veličine. Promatrana veličina je kovarijantna ako se ta veličina, pri danoj transformaciji, transformira na isti način kao i bazni vektori.

Navedimo konvencije u oznakama, kakve su uobičajene u kristalografskoj:

- 1.) Neka je baza domene (a_1, a_2, a_3) . Koordinate vektora r u bazi domene pišemo (x^1, x^2, x^3) (polazne koordinate). Dakle, zapis vektora r u bazi domene je: $r = x^1 a_1 + x^2 a_2 + x^3 a_3$.
- 2.) Kovarijantne veličine uobičajeno pišemo kao redak pa je matrični zapis

$$(a', b', c') = (a, b, c) \cdot A.$$

- 3.) Kontravarijantne veličine pišemo u stupac, pa je matrični zapis

$$\begin{pmatrix} a^{*'} \\ b^{*'} \\ c^{*'} \end{pmatrix} = A^{-1} \begin{pmatrix} a^* \\ b^* \\ c^* \end{pmatrix}.$$

Primjer 3.2.2. (*Millerovi indeksi pri transformaciji koordinatnog sustava*)

Millerovi indeksi promatrane ravnine prije djelovanja transformacije $(A | r_0)$, u krajoj oznaci A , su: (h, k, l) , a nakon djelovanja A su (h', k', l') . Budući da transformacija koordinatnog sustava ne mijenja osni odnos jedinične i promatrane plohe, veličina koja se promatra („novi” Millerovi indeksi), je kovarijantna Millerovim indeksima prije transformacije koordinatnog sustava. Stoga je matrični zapis: $(h', k', l') = (h, k, l) \cdot A$.

Afne transformacije koordinatnog sustava mogu se na jednostavan način reprezentirati kao linearni operatori prijelazom na prostor \mathbb{R}^4 .

Definirajmo matricu kao proširenu matricu afinog preslikavanja $(A | r_0)$:

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} A & r \\ 0^t & 1 \end{pmatrix}.$$

Na taj smo način dobili matrični prikaz jednog (regularnog) linearnog operatora na \mathbb{R}^4 . Vezu „starih” i „novih” koordinata dobijemo tako da pri djelovanju \mathcal{A} promatramo samo prve tri koordinate:

$$\begin{pmatrix} r' \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & r \\ 0^t & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} r \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Ar + r_0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Uočimo da kompoziciji dva afna preslikavanja također odgovara produkt njihovih proširenih matrica.

Operator simetrije također može imati i translacijsku komponentu. U obzir dolaze samo vektori s cjelobrojnim koordinatama, jer se slika mora preklopiti s originalom (kristalna rešetka se preslika sama na sebe). Kako bismo razlikovali kristalnu rešetku prije

i poslije djelovanja operatora simetrije dogovorno se uvode oznake. Zanima nas samo operatorski dio tog preslikavanja. Prema dogovoru, termin simetrijska operacija koristi se za opće afino preslikavanje koje „ne mijenja” kristalnu rešetku. Kao što je navedeno kod operatora transformacije koordinatnog sustava, tako i ovdje, povećanjem dimenzije za 1 i korištenjem matrice simetrije sve simetrijske operacije postaju linearni operatori. Operatorski dio simetrijske operacije mora biti regularan (preslikavanje *na* znači zahtjev bijektivnosti) i mora biti ortogonalan. Operatori simetrije su: identiteta, u oznaci I ili \hat{E} , operator centralne simetrije (operator inverzije) u oznaci \hat{i} , operator rotacije oko jedne koordinatne osi x_i za kut $\frac{2\pi}{n}$ u oznaci $\hat{C}_n(x_i)$, operator zrcalne simetrije s obzirom na ravninu u oznaci σ_h s obzirom na ravninu xy ili σ_v s obzirom na ravninu koja sadrži os z .

Primjer 3.2.3. (*Matrica simetrije nakon transformacije koordinatnog sustava*)

Napisati matrični prikaz kompozicije transformacije koordinatnog sustava \mathcal{A} sa simetrijskom operacijom S .

Nakon promjene koordinata matrica S postaje matrica S' . Matrični zapis je:

$$S' = \mathcal{A}^{-1} S \mathcal{A}.$$

Primjer 3.2.4. (*Kompozicija transformacije koordinatnog sustava i simetrijske operacije*)

Zadana je prostorna grupa simetrija $P4/n$ (grupa koja sadrži sve simetrijske operacije kristala, dakle grupa svih izometrija prostora za koje je kristal invarijantan) s dva odabrana ishodišta (iz tablice). Znamo da je vektor translacije tih ishodišta

$$r_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \\ -\frac{1}{4} \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Proširena matrica jedne od simetrijskih operacija u prvom sustavu je:

$$S = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Potrebno je napisati matrični prikaz kompozicije translacije \mathcal{A} koordinatnog sustava sa simetrijskom operacijom S , odnosno matricu simetrije nakon promjena koordinata uslijed transformacije \mathcal{A} .

Pripadna matrica afinog preslikavanja za čistu translaciju koordinatnog sustava je:

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & 1 & 0 & -\frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Inverz te matrice opisuje povratak iz drugog u prvi odabir koordinatnog sustava:

$$\mathcal{A}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -\frac{1}{4} \\ 0 & 1 & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Simetrija S u drugom sustavu opisana je matricom S' :

$$S' = \mathcal{A}^{-1} S \mathcal{A} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & -\frac{1}{2} \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

3.3 Linearni operatori u mehanici i specijalnoj teoriji relativnosti

U fizici se razmatra teorija relativnosti u dvije općenitosti. U manjoj općenitosti govorimo o takozvanoj specijalnoj relativnosti koja je potvrđena fizikalna teorija o odnosu prostora i vremena. Efekti te teorije u odnosu na tzv. nerelativističku fiziku osjete se na velikim

brzinama. Opća teorija relativnosti je van okvira ovog pregleda i bavi se vezom gravitacije i zakrivljenosti prostora, za što su indikacije mnogo slabije, a uključuju nedavno otkriće tzv. gravitacijskih valova.

Da bismo razumjeli specijalnu teoriju relativnosti, moramo najprije promotriti neke elemente klasične nerelativističke (Newtonove) mehanike idealizacije u kojoj promatrani objekt/tijelo nazivamo materijalnom točkom u praznom prostoru. Mehanika opisuje promjene položaja tijela u prostoru tijekom vremena. Položaj materijalne točke je opisan s tri koordinate u prostoru, recimo x, y, z i mijenja se u vremenu t , dakle vektorom položaja $\vec{r}(t)$, u ovisnosti o vremenu t . Brzina je promjena položaja $\Delta\vec{r} = \vec{r}(t + \Delta t) - \vec{r}(t)$ u jedinici vremena (tj. podijeljena s Δt). Razlikujemo srednju brzinu u nekom intervalu i trenutnu brzinu u vremenu $t = t_0$ koja je granična vrijednost vektora srednje brzine u intervalu Δt oko t_0 , koji teži k nuli, dakle derivacija $\vec{v} = \frac{d\vec{r}}{dt}$.

Prema Newtonovoj mehanici, tijelo koje nije u međudjelovanju s drugim tijelima giba se po pravcu, stalnom (konstantnom) brzinom (1. Newtonov zakon). Ako je tijelo u međudjelovanju s drugim tijelima, tada se po drugom Newtonovom zakonu rezultat tog međudjelovanja može opisati vektorom koji nazivamo sila, \vec{F} , a samo tijelo ima svojstvo koje називамо masom; drugi Newtonov zakon kaže da je

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{F}.$$

Primijetimo da drugi Newtonov zakon nije definicija sile. Sila je određena svojstvima i položajima tijela u međudjelovanju i ako više tijela djeluje na neko tijelo, ti vektori se zaista zbrajamaju kao vektori i vektorski zbroj dovodi do proporcionalne promjene brzine. Konačno, treći Newtonov zakon kaže da je vektor sile kojim prvo tijelo djeluje na drugo suprotan vektoru (tj. minus isti) sile kojom drugo tijelo djeluje na prvo (zakon akcije i reakcije). Dakle, ako mi guramo nešto prema naprijed, taj predmet će nas gurati prema natrag.

U gornjem opisu ostao je jedan detalj nedorečen. Naime, što je vektor položaja? To je radius-vektor položaja tijela u odnosu na neku točku koja je uzeta za ishodište. Prazan prostor je svuda isti, pa ako sve gledamo iz neke druge točke, zakoni klasične mehanike su isti. Štoviše, ako zakenemo (rotiramo) koordinatni sustav, vektori se jednakom ponašaju u novoj bazi jediničnih vektora $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ i zakoni fizike ostaju isti. Međutim, možemo gibanje gledati i iz vlaka koji se giba; u klasičnoj mehanici i tada će sve izgledati isto. To je Galilejev princip (klasične) relativnosti: ako se promatrač, a njegov položaj ćemo uzeti za ishodište, giba konstantnom brzinom, u njegovom sustavu su zakoni fizike isti, a iste su i sile. Jako je bitno da je brzina konstantna kao vektor (ne samo po iznosu). Takve sustave promatranja zovemo inercijalnim sustavima. Ne možemo odrediti koji je sustav sustav mirovanja jer u svakom sustavu svijet izgleda jednak. Ako se svi zajedno gibamo nekom brzinom u odnosu na stari sustav, sve će biti isto. Ali ako se gibamo nejednolikom brzinom,

izaći ćemo u neinercijalni sustav i tamo ćemo morati ulagati napor da se ostanemo gibati u istom smjeru, jer prvi Newtonov zakon (da ćemo se sami od sebe nastaviti gibati u istom smjeru) vrijedi samo u inercijalnim sustavima. U neinercijalnom sustavu nam se čini kao da nas nešto sputava, to su tzv. neinercijalne sile koje su zapravo samo efekt da sustav gledamo iz neinercijalnog koordinatnog sustava.

Galilejeva transformacija je promjena iz jednog u drugi inercijalni sustav, koja dakle ne mijenja fizikalne zakone. Prema gornjem opisu, to je linearни operator $G: \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ koji se može dobiti kao kompozicija trenutne (vječne promjene) izometrijom prostora (afina transformacija) i jednolikog gibanja po pravcu brzinom \vec{v} . Dakle, ako je položaj materijalne točke u jednom Galilejevom inercijalnom sustavu $\vec{r}(t)$ tada je u nekom drugom obliku

$$\vec{r}'(t) = A\vec{r}(t) + \vec{r}_0 - \vec{v}t,$$

gdje je A neka matrica rotacije u 3-dimenzionalnom prostoru, a konstantan vektor \vec{r}_0 je vektor razmaka između ishodišta dva koordinatna sustava u $t = 0$, s vremenom se taj vektor razmaka mijenja za $\vec{v}t$. Primijetimo minus predznak $-\vec{v}t$: ako se promatrač giba prema naprijed, on će biti sve bliže točkama koje su u njegovom smjeru, pa su njihove koordinate u tom smjeru umanjene za prijeđeni pomak promatrača $\vec{v} \cdot t$.

Galilejeva i Newtonova slika dobre su kad je brzina promatrača malena prema brzini svjetlosti koja je konačna: nešto manje od 300 tisuća kilometara u sekundi. Za usporedbu, opseg naše planete je oko 40 tisuća kilometara. Specijalna teorija relativnosti zasnovana je na dva postulata. Prije toga treba reći da i u specijalnoj teoriji relativnosti razlikujemo neke posebne sustave koje zovemo inercijalnima. Promatrajmo dva inercijalna sustava koja se gibaju pravocrtno jedan u odnosu na drugog. Gledajući iz prvog sustava, brzina drugog je \vec{v} , a iz drugog je brzina prvog $-\vec{v}$. Vidjet ćemo da čak i njihova relativna brzina nije ista ako se gleda iz nekog trećeg koordinatnog sustava. Postulati specijalne teorije relativnosti su: brzina svjetlosti je ista u svim inercijalnim sustavima i fizikalni zakoni su jednaki u svim koordinatnim sustavima. Sve ostalo, uključujući kako se mijenjaju druge veličine (brzina, masa, sile itd.) iz jednog u drugi inercijalni sustav određuje se na jedinstveni način polazeći od tih postulata.

Promotrimo na prvi pogled neintuitivnu sliku da je brzina svjetlosti u svim sustavima jednaka. Dakle, ako se promatrač giba brzinom v u smjeru zrake svjetlosti koja se giba ispred njega brzinom c , umjesto $c - v$, on će opet izmjeriti brzinu c . Kako percepcija vremena nema veze s tim na što smo usredotočili pažnju, ista će promjena vremena biti i ako se gibamo suprotno od brzine svjetlosti, pa ćemo umjesto $c + v$ izmjeriti opet brzinu c . Kako je brzina promjena položaja u jedinici vremena, to znači da se u sustavu koji se giba brzinom v mijenjaju ili udaljenosti u prostoru ili vrijeme, ili oboje. Neka je $\Delta(t)$ neki interval između dva događaja (kad svjetlost sretne dva objekta A i B na svom putu) u jednom sustavu, i neka se prema svjetlosti giba drugi promatrač brzinom v i on percipira da je prošao interval vremena $\Delta(t')$. Neka se udaljenosti u drugom sustavu mijenjaju za

neki faktor β . Tada je

$$\frac{\beta(c - v)\Delta(t)}{\Delta(t')} = c.$$

Sa stanovišta drugog sustava prvi se promatrač giba prema svjetlosti, a njihova su vremena zamijenjena (a relativna brzina je ista pa je isti efekt β na promjeni udaljenosti), dakle

$$\frac{\beta(c + v)\Delta(t')}{\Delta(t)} = c.$$

Ako pomnožimo ove dvije jednadžbe, dobijemo $\beta(c + v)\beta(c - v) = c^2$, tj. $\beta = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$.

Dakle, Einsteinovi postulati specijalne teorije relativnosti povlače da se udaljenosti u sustavu koji se giba brzinom v smanjuju, množeći faktorom β . Iz prve jednadžbe dobijemo i efekt na vrijeme. Dakle, udaljenosti nisu iste, pa ne možemo koristiti Galilejeve transformacije koje čuvaju udaljenosti (uz jednolik pravocrtan pomak ishodišta). U specijalnoj relativnosti, čuva se veličina koja je kombinacija vremenskih i prostornih razmaka! Preciznije, prelaskom iz jednog u drugi inercijalni sustav, čuva se veličina

$$(ds)^2 = c^2(dt)^2 - (dx)^2 - (dy)^2 - (dz)^2,$$

gdje su dt, dx, dy, dz male (trenutne) promjene vremena i koordinata x, y, z . To indicira da se prostor i vrijeme miješaju, a da su x, y, z, ct koordinate vektora u 4 dimenzije (ct je četvrta dimenzija). Ono što je u jednim koordinatama vrijeme, u drugim koordinatama je kombinacija vremenskih i prostornih koordinata tog vektora u 4 dimenzije. Takve vektore zovemo 4-vektori, a promjene iz jednog inercijalnog sustava u drugi inercijalni sustav s jednakim međusobnim položajem u vremenu $t = 0$ zovemo Lorentzovim transformacijama. To su linearni operatori koji čuvaju izraz $c^2t^2 - x^2 - y^2 - z^2$ za 4-vektor (x, y, z, ct) . Ako je β za inercijalni sustav koji se giba u smjeru x brzinom v kao gore, tada su nove koordinate u tom sustavu

$$\begin{aligned} ct' &= \beta \left(ct - \frac{vx}{c} \right) = \frac{ct - (v/c)x}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \\ x' &= \beta(x - (v/c)ct) = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \\ y' &= y, \\ z' &= z. \end{aligned}$$

Kako se koordinate y, z transverzalne u odnosu na smjer brzine ne mijenjaju, usredotočimo pažnju na koordinate x, ct . Tada je

$$\begin{pmatrix} x' \\ ct' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta & -\beta v/c \\ -\beta v/c & \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ ct \end{pmatrix}.$$

Primijetimo da je $\beta^2 - (-\beta v/c)^2 = 1$. To nas podsjeća na jednakost $\operatorname{ch}^2 \zeta - \operatorname{sh}^2 \zeta = 1$ za hiperbolni kosinu i sinus, koja je analogon jednakosti $\cos^2 \alpha + \sin^2 \alpha = 1$ za običan kosinus i običan sinus. Zapravo, možemo naći parametar ζ tako da vrijedi $\operatorname{ch} \zeta = \beta$ i $\operatorname{sh} \zeta = -\beta v/c$. Tada imamo

$$\begin{pmatrix} x' \\ ct' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \operatorname{ch} \zeta & \operatorname{sh} \zeta \\ \operatorname{sh} \zeta & \operatorname{ch} \zeta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ ct \end{pmatrix}.$$

Matrica ove relativističke Lorentzove transformacije vezane uz potisak koordinatnog sustava stalnom brzinom (engl. *Lorentz boost*) podsjeća na matricu rotacije u dvije dimenzije

$$\begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix},$$

samo su hiperbolne funkcije zamijenjene trigonometrijskim, uz jednu razliku u predznaku. Rotacije čuvaju jediničnu kružnicu koja služi za definiciju trigonometrijskih funkcija, dok hiperbolne funkcije čuvaju jediničnu hiperbolu (preko koje se geometrijski mogu definirati hiperbolne funkcije).

Kao što se kod Galilejevih transformacija može gledati rotacija u ma kojem smjeru, tako se kod Lorentzovih relativističkih transformacija može gledati potisak u raznim smjerovima, a okomito na smjer gibanja možemo i rotirati. Fizičari gledaju općenite matrice Λ^μ_ν gdje grčki indeksi označavaju 4 koordinate prostora i vremena, tako da te matrice čuvaju stožac (konus)

$$(ct)^2 - x^2 - y^2 - z^2 = 0,$$

koji se često razmatra u teoriji relativnosti. Dakle,

$$\begin{pmatrix} a^{0'} \\ a^{1'} \\ a^{2'} \\ a^{3'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \Lambda_0^0 & \Lambda_1^0 & \Lambda_2^0 & \Lambda_3^0 \\ \Lambda_0^1 & \Lambda_1^1 & \Lambda_2^1 & \Lambda_3^1 \\ \Lambda_0^2 & \Lambda_1^2 & \Lambda_2^2 & \Lambda_3^2 \\ \Lambda_0^3 & \Lambda_1^3 & \Lambda_2^3 & \Lambda_3^3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^0 \\ a^1 \\ a^2 \\ a^3 \end{pmatrix},$$

gdje 0, 1, 2, 3 odgovaraju koordinatama ct, x, y, z prostor-vremena. Kao što kod Galilejevih koordinata možemo pomaknuti i ishodište na početku, možemo gledati i takve transformacije. Kombinacije pomaka ishodišta, rotacija i relativističkih potisaka čine Poincaréove transformacije koje su u komponentama oblika

$$a^{\mu'} = \sum_{\rho} \Lambda_{\rho}^{\mu'} a^{\rho} + r_0^{\mu'},$$

u kojima su $r_0^{\mu'}$ komponente nekog konstantnog 4-vektora (pomak ishodišta u prostor-vremenu). Sve Poincaréove transformacije opisuju transformacije koordinata relativističkih 4-vektora iz jednog u drugi inercijalni sustav. Koliko inercijalnih sustava u relativističkoj teoriji, toliko i Poincaréovih transformacija.

Kad govorimo o 4-vektorima u relativističkoj teoriji, matrice Lorentzovih transformacija se ne odnose samo na miješanje prostornih i vremenskih koordinata, nego i na 4-vektor koji mijesha vektor impulsa i energiju čestice i druge 4-vektore. Za transformacije električnog i magnetskog polja koriste se dvije kopije Lorentzovih matrica. Naime, električno i magnetsko polje \vec{E}, \vec{B} (gdje su komponente od \vec{E}, E_x, E_y, E_z) se na velikim relativističkim brzinama ponašaju ne kao vektori, nego zajedno čine antisimetričnu matricu

$$F = (F_{\mu\nu})_{\mu,\nu=0,1,2,3} = \begin{pmatrix} 0 & E_x/c & E_y/c & E_z/c \\ -E_x/c & 0 & -B_y & B_y \\ -E_y/c & B_z & 0 & -B_x \\ -E_z/c & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix}$$

koju nazivamo (kovarijantnim) Faradayevim tenzorom.

Kad magnetno i električno polje gledamo u sustavu promatrača kojem odgovara Lorentzova matrica Λ^μ_ν , tada se Faradayev tenzor mijenja ovako (za svaki par indeksa, σ, ρ).

$$F'_{\sigma\rho} = \sum_{\mu,\nu} \Lambda^\mu_\sigma \Lambda^\nu_\rho F_{\mu\nu},$$

gdje je sumacija po svim vrijednostima Lorentzovih indeksa μ, ν .

Dakle, magnetsko i električno polje nisu obični vektori, a novo magnetsko i električno polje koje čitamo iz $F'_{\sigma\rho}$ miješaju stara polja. Drugim riječima, magnetsko polje u jednom sustavu dobijemo kao linearu kombinaciju električnog i magnetskog polja u drugom inercijalnom sustavu. Takve veličine koje pri promjeni sustava trebaju dvije Lorentzove matrice zovemo Lorentzovi tenzori.

Naravno, u specijalnoj teoriji relativnosti se gledaju i mnoge druge veličine i efekti, u tom istom formalizmu u kojem su 4-vektori, matrice Lorentzovih transformacija i tenzori glavne veličine s kojima se radi. Kako su Galilejeve, Lorentzove i Poincaréove transformacije zatvorene s obzirom na kompoziciju i inverz, one su elementi grupa transformacija koje zovemo Galilejeva, Lorentzova i Poincaréova grupa.

Bibliografija

- [1] Ž. Antunović, *Specijalna teorija relativnosti*, Prirodoslovno-matematički fakultet Split, Sveučilište u Splitu, <http://mapmf.pmfst.unist.hr/~zeljko/STR.pdf> (studeni 2019.)
- [2] D. Bakić, *Linearna algebra*, Školska knjiga, Zagreb, 2008.
- [3] I. Batistić, *Kristalna struktura; Fizika čvrstog stanja*, Fizički odsjek, Prirodoslovno-matematički fakultet Zagreb, Sveučilište u Zagrebu, 2019./2020. http://grdelin.phy.hr/~ivo/Nastava/Fizika_Cvrstog_Stanja/predavanja/02_pred.pdf (studeni 2019.)
- [4] F. M. Brückler, *Primjene klasične algebre vektora i analitičke geometrije prostora u kristalografskoj*, prelog.chem.pmf, <http://prelog.chem.pmf.hr/~fmbruckler/mat1-tjedan15.pdf> (studeni 2019.)
- [5] F. M. Brückler, *Matematičke metode u kemiji, Primjene linearne algebre*, online skripta, <https://web.math.pmf.unizg.hr/~bruckler/pdf/mmk05.pdf> (studeni 2019.)
- [6] J. Dvornik, D. Lazarević, N. Bićanić, *O načelima i postupcima proračuna građevinskih konstrukcija*, Građevinski fakultet, Sveučilište u Zagrebu, 2019.
- [7] J. Ferguson, *Introduction to Linear Algebra in Geology*, Chapman and Hall, London, 1994.
- [8] K. Horvatić, *Linearna algebra*, Golden Marketing–Tehnička knjiga, Zagreb, 2004.
- [9] M. Lapaine, T. Malvić, *Geomatematika-Matematika ili geoznanost?*, Vijesti Hrvatskoga geološkoga društva https://bib.irb.hr/datoteka/479881.Vijesti_47_1.PDF (studeni 2019.)
- [10] S. Mihalić, *Uvod u inženjersku geologiju*, skripta s predavanja, https://rudar.rgn.hr/~smihalic/nids_snjezanamihalic/01-01_uvod.pdf (studeni 2019.)

- [11] *Electromagnetism*, Wikipedia https://en.wikipedia.org/wiki/Electromagnetic_ (studeni 2019.)
- [12] *GS 2. - Bilješke s predavanja*, online skripte, <http://grad.hr/nastava/gs/bilj2/bilj2.html> (studeni 2019.)
- [13] *Kristal*, Wikipedia, <https://hr.wikipedia.org/wiki/Kristal> (studeni 2019.)
- [14] *Lorentz transformation*, Wikipedia https://en.wikipedia.org/wiki/Lorentz_transformation (studeni 2019.)
- [15] *Newton's laws of motion*, Wikipedia https://en.wikipedia.org/wiki/Newton%27s_laws_of_motion (studeni 2019.)
- [16] *Newtonovi zakoni*, Wikipedia https://hr.wikipedia.org/wiki/Newtonovi_zakoni_ (studeni 2019.)
- [17] *Matematika III, Gaussov postupak eliminacije*, online skripte, https://master.grad.hr/nastava/matematika/mat3_99_00/node7.html(studeni 2019.)
- [18] *Millerovi indeksi*, Struna, <http://struna.ihjj.hr/naziv/millerovi-indeksi/19901/> (studeni 2019.)
- [19] *Mineralogija i petrologija*, online skripta, https://www.pmf.unizg.hr/_download/repository/uvod_mineralogija.pdf (studeni 2019.)
- [20] *Osnove kristalne strukture*, online skripta, <http://www.phy.pmf.unizg.hr/~atonejc/20struktureNANO.pdf> (studeni 2019.)
- [21] *Progib*, Wikipedia, <https://hr.wikipedia.org/wiki/Progib> (studeni 2019.)
- [22] *Sedimentne stijene*, pmf.unizg.hr, https://www.pmf.unizg.hr/_download/repository/sedimenti5B5D.pdf (studeni 2019.)
- [23] *Statika građevnih konstrukcija*, tehnika.lzmk.hr, http://tehnika.lzmk.hr/tehnickaenciklopedija/statika_gradevnih_konstrukcija_metoda_pomaka.pdf (studeni 2019.)
- [24] *Stehiometrija*, Repozitorij kemija, <https://www.ss-adamic.com/wp-content/uploads/repozitorij/12-13/Kemija/4stehiometrija.pdf> (studeni 2019.)

Sažetak

Različiti problemi u prirodnim znanostima i tehnički rješavaju se primjenom linearne algebre. Zadatak ovog diplomskog rada je pokazati neke takve primjere, povezujući ih s osnovama teorije linearne algebre, pritom ne ulazeći u detaljniju teoriju, već stavljajući naglasak na matematički aparat potreban za njihovo rješavanje. U ovom radu naglasak je na primjerima iz prirodnih znanosti: kemije, fizike i geologije, a od tehničkih znanosti navode se primjeri iz građevinarstva. Dakle, dani primjeri nisu matematičko-teorijskog tipa kakvi se obrađuju u okviru nastave linearne algebre, već konkretni praktični problemi u kojima student matematike može upoznati primjenu.

Summary

Various problems in science and technology are solved by applying linear algebra. The purpose of this thesis is to present some of such examples, connecting them to the basics of linear algebra, without going into detailed theory but emphasizing the mathematical tools needed to solve them. In this thesis the emphasis is on examples from the science (chemistry, physics and geology) as well from construction. Thus, the given examples are not of the mathematical-theoretical type as dealt in linear algebra courses, but rather practical problems in which a student of mathematics may become familiar with the applications.

Životopis

Rođena sam 12. srpnja 1968. u gradu Liege, u Kraljevini Belgiji. Osnovnu školu završila sam u Zadru, a potom upisala srednju školu MIOC u Zadru i završila ju 1987. godine. Građevinski fakultet u Zagrebu završila sam 1995. godine. Nakon završetka fakulteta radila sam u struci na raznim poslovima građevinskog inženjera, poput projektiranja, vođenja gradilišta, rukovođenja odjelom i izrade investicijskih studija. Trenutno radim u srednjoj Tehničkoj školi Zadar kao nastavnica stručne skupine predmeta graditeljske struke. Pred-diplomski studij Matematika, smjer nastavnički na Prirodoslovno-matematičkom fakultetu u Zagrebu završila sam 2017. godine, te iste godine upisala diplomski studij Matematika, smjer nastavnički na istom fakultetu. Udana sam, majka jednog sina. Živimo u Preku na otoku Ugljanu.