

# Matematyczne Metody FIZYKI I

Wykład 12

# Relacje rekurencyjne

**Definicja:** Niech  $(x_n) = (x_0, x_1, x_2, \dots)$  będzie następująco zdefiniowanym ciągiem:

- (1)  $x_0 = r_0, x_1 = r_1, \dots, x_{k-1} = r_{k-1}$ , gdzie  $r_0, r_1, \dots, r_{k-1}$  są skalarami,
- (2) dla  $n \geq k$ ,  $x_n = a_1 x_{n-1} + a_2 x_{n-2} + \dots + a_k x_{n-k}$ , gdzie  $a_1, a_2, \dots, a_k$  są skalarami.

Jeśli  $c_k \neq 0$  to równanie (2) nazywamy **liniową relacją rekurencyjną rzędu  $k$** , natomiast równania (1) nazywamy **warunkami początkowymi** rekurencji.

**Przykład:** Znajdź 100-ty wyraz ciągu zdefiniowanego dla  $n \geq 3$  relacją rekurencyjną  $x_n = 5x_{n-1} - 6x_{n-2}$  z warunkami początkowymi  $x_1 = 1, x_2 = 5$ .

Można liczyć po kolei wszystkie potrzebne 98 wyrazy ciągu ... albo zauważyć, że

$$\vec{x}_n = \begin{pmatrix} x_n \\ x_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & -6 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{n-1} \\ x_{n-2} \end{pmatrix} = \mathbf{A} \vec{x}_{n-1} = \mathbf{A}^2 \vec{x}_{n-2} = \dots = \mathbf{A}^{n-2} \vec{x}_2 = \begin{pmatrix} 5 & -6 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^{n-2} \begin{pmatrix} x_2 \\ x_1 \end{pmatrix}$$

Diagonalizujemy macierz  $\mathbf{A}$ :  $\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = \lambda^2 - 5\lambda + 6 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = 3, \lambda_2 = 2$

$$\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \end{pmatrix}, \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{S} = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S} = \mathbf{D} = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Teraz już łatwo znajdujemy dowolną potęgę macierzy  $\mathbf{A}$ :

$$\mathbf{A}^k = (\mathbf{S} \mathbf{D} \mathbf{S}^{-1})^k = \mathbf{S} \mathbf{D}^k \mathbf{S}^{-1} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} 3^k & 0 \\ 0 & 2^k \end{pmatrix} \mathbf{S}^{-1} = \begin{pmatrix} 3^{k+1} - 2^{k+1} & -2 \cdot 3^{k+1} + 3 \cdot 2^{k+1} \\ 3^k - 2^k & -2 \cdot 3^k + 3 \cdot 2^k \end{pmatrix}$$

# Relacje rekurencyjne

A więc:

$$\begin{pmatrix} x_n \\ x_{n-1} \end{pmatrix} = \mathbf{A}^{n-2} \begin{pmatrix} x_2 \\ x_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3^{n-1} - 2^{n-1} & -2 \cdot 3^{n-1} + 3 \cdot 2^{n-1} \\ 3^{n-2} - 2^{n-2} & -2 \cdot 3^{n-2} + 3 \cdot 2^{n-2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3^n - 2^n \\ 3^{n-1} - 2^{n-1} \end{pmatrix}$$

czyli ostatecznie mamy:  $x_n = 3^n - 2^n$

**Twierdzenie:** Niech będzie zadana relacja rekurencyjna  $x_n = ax_{n-1} + bx_{n-2}$  oraz niech  $\lambda_1$  i  $\lambda_2$  będą wartościami własnymi wynikającymi z równania charakterystycznego  $\lambda^2 - a\lambda - b = 0$ . Wówczas:

(a) Jeśli  $\lambda_1 \neq \lambda_2 \Rightarrow x_n = c_1 \lambda_1^n + c_2 \lambda_2^n$  dla pewnych stałych  $c_1, c_2$ .

(b) Jeśli  $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda \Rightarrow x_n = c_1 \lambda^n + c_2 n \lambda^n$  dla pewnych stałych  $c_1, c_2$ .

**Dowód:**

$$\begin{aligned} \text{a) } x_n - ax_{n-1} - bx_{n-2} &= (c_1 \lambda_1^n + c_2 \lambda_2^n) - a(c_1 \lambda_1^{n-1} + c_2 \lambda_2^{n-1}) - b(c_1 \lambda_1^{n-2} + c_2 \lambda_2^{n-2}) = \\ &= c_1 \lambda_1^{n-2} (\lambda_1^2 - a\lambda_1 - b) + c_2 \lambda_2^{n-2} (\lambda_2^2 - a\lambda_2 - b) = \left\| \lambda_{1,2}^2 - a\lambda_{1,2} - b = 0 \right\| = 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{b) } x_n - ax_{n-1} - bx_{n-2} &= (c_1 \lambda^n + c_2 n \lambda^n) - a(c_1 \lambda^{n-1} + c_2 (n-1) \lambda^{n-1}) - b(c_1 \lambda^{n-2} + c_2 (n-2) \lambda^{n-2}) = \\ &= c_2 \lambda^{n-2} (a\lambda + 2b) = \left\| \begin{array}{l} \lambda^2 - a\lambda - b = 0 \\ \Delta = a^2 + 4b = 0 \Rightarrow \lambda = a/2 \end{array} \right\| = c_2 \lambda^{n-2} \left( \frac{a^2}{2} + 2b \right) = 0 \end{aligned}$$

# Relacje rekurencyjne

**Przykład (cd):** Znajdź 100-ty wyraz ciągu zdefiniowanego dla  $n \geq 3$  relacją rekurencyjną  $x_n = 5x_{n-1} - 6x_{n-2}$  z warunkami początkowymi  $x_1 = 1$ ,  $x_2 = 5$ .

Wiemy, że wartościami własnymi w tym problemie są:  $\lambda_1 = 3$ ,  $\lambda_2 = 2$

Szukamy rozwiązania w postaci:  $x_n = c_1 \lambda_1^n + c_2 \lambda_2^n = c_1 \cdot 3^n + c_2 \cdot 2^n$

$$\begin{cases} 1 = x_1 = c_1 \cdot 3^1 + c_2 \cdot 2^1 \\ 5 = x_2 = c_1 \cdot 3^2 + c_2 \cdot 2^2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 3c_1 + 2c_2 = 1 \\ 9c_1 + 4c_2 = 5 \end{cases} \Rightarrow \begin{matrix} c_1 = 1 \\ c_2 = -1 \end{matrix} \Rightarrow x_n = 3^n - 2^n$$

W przypadku zależności rekurencyjnej rzędu  $k$  mamy:

$$\begin{pmatrix} x_n \\ x_{n-1} \\ x_{n-2} \\ \vdots \\ x_{n-k+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_{k-1} & a_k \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ 0 & 0 & & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{n-1} \\ x_{n-2} \\ x_{n-3} \\ \vdots \\ x_{n-k} \end{pmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} a_1 - \lambda & a_2 & a_3 & \cdots & a_{k-1} & a_k \\ 1 & -\lambda & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -\lambda & & & \\ 0 & 0 & 1 & & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & & 1 & -\lambda \end{vmatrix} = \pm (-\lambda^k + a_1 \lambda^{k-1} + a_2 \lambda^{k-2} + \dots + a_{k-1} \lambda + a_k)$$

# Relacje rekurencyjne

**Twierdzenie:** Niech będzie zadana relacja rekurencyjna  $x_n = a_1 x_{n-1} + a_2 x_{n-2} + \dots + a_k x_{n-k}$  rzędu  $k$ . Załóżmy, że stowarzyszony z nią wielomian charakterystyczny:

$$\lambda^m - a_1 \lambda^{m-1} - \dots - a_{k-1} \lambda - a_k = 0$$

faktoryzuje się do postaci  $(\lambda - \lambda_1)^{m_1} (\lambda - \lambda_2)^{m_2} \dots (\lambda - \lambda_k)^{m_k}$  gdzie  $\sum_{i=1}^k m_i = m$

Wówczas  $x_n$  ma ogólną postać:

$$x_n = (c_{11} \lambda_1^n + c_{12} n \lambda_1^n + \dots + c_{1m_1} n^{m_1-1} \lambda_1^n) + \dots + (c_{k1} \lambda_k^n + c_{k2} n \lambda_k^n + \dots + c_{km_k} n^{m_k-1} \lambda_k^n)$$

**Przykład:** Znajdź  $n$ -ty wyraz ciągu zdefiniowanego dla  $n \geq 2$  relacją rekurencyjną

$$x_n = 6x_{n-1} - 9x_{n-2} \quad \text{z warunkami początkowymi } x_0 = 1, x_1 = 6.$$

Znajdujemy wartości własne:  $\det(A - \lambda I) = \lambda^2 - 6\lambda + 9 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = 3, \lambda_2 = 3$

Szukamy rozwiązania w postaci:  $x_n = c_1 \lambda^n + c_2 n \lambda^n = c_1 \cdot 3^n + c_2 \cdot n \cdot 3^n$

$$\begin{cases} 1 = x_0 = c_1 \cdot 3^0 \\ 6 = x_1 = c_1 \cdot 3^1 + c_2 \cdot 3^1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c_1 = 1 \\ 3c_1 + 3c_2 = 6 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} c_1 = 1 \\ c_2 = 1 \end{cases} \Rightarrow x_n = (1+n)3^n$$

# Macierze hermitowskie i symetryczne

- macierz (anty)hermitowska:  $\mathbf{A}^\dagger = \pm \mathbf{A} \Rightarrow a_{ij} = \pm a_{ji}^*$
- macierz (anty)symetryczna:  $\mathbf{A}^T = \pm \mathbf{A} \Rightarrow a_{ij} = \pm a_{ji}$
- wartości własne macierzy hermitowskiej (lub rz. symetrycznej) są rzeczywiste:

$$\begin{array}{l}
 \text{D: } \mathbf{A} \vec{x} = \lambda \vec{x} \quad \Rightarrow \quad \vec{x}^\dagger \mathbf{A} \vec{x} = \lambda \vec{x}^\dagger \vec{x} \\
 \vec{x}^\dagger \mathbf{A}^\dagger = \lambda^* \vec{x}^\dagger \quad \Rightarrow \quad \vec{x}^\dagger \mathbf{A}^\dagger \vec{x} = \lambda^* \vec{x}^\dagger \vec{x}
 \end{array}
 \left. \vphantom{\begin{array}{l} \text{D: } \mathbf{A} \vec{x} = \lambda \vec{x} \\ \vec{x}^\dagger \mathbf{A}^\dagger = \lambda^* \vec{x}^\dagger \end{array}} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l}
 \vec{x}^\dagger (\mathbf{A} - \mathbf{A}^\dagger) \vec{x} = (\lambda - \lambda^*) \vec{x}^\dagger \vec{x} \\
 \mathbf{A} = \mathbf{A}^\dagger \Rightarrow (\lambda - \lambda^*) \vec{x}^\dagger \vec{x} = 0 \\
 \vec{x}^\dagger \vec{x} \neq 0 \Rightarrow \lambda = \lambda^*
 \end{array}$$

- wektory własne odpowiadające różnym wartościom własnym macierzy hermitowskiej (lub rz. symetrycznej) są wzajemnie ortogonalne:

$$\begin{array}{l}
 \text{D: } \mathbf{A} \vec{x}_1 = \lambda_1 \vec{x}_1 \quad \Rightarrow \quad \vec{x}_2^\dagger \mathbf{A} \vec{x}_1 = \lambda_1 \vec{x}_2^\dagger \vec{x}_1 \\
 \mathbf{A} \vec{x}_2 = \lambda_2 \vec{x}_2 \quad \Rightarrow \quad \vec{x}_2^\dagger \mathbf{A} \vec{x}_1 = \lambda_2 \vec{x}_2^\dagger \vec{x}_1
 \end{array}
 \left. \vphantom{\begin{array}{l} \text{D: } \mathbf{A} \vec{x}_1 = \lambda_1 \vec{x}_1 \\ \mathbf{A} \vec{x}_2 = \lambda_2 \vec{x}_2 \end{array}} \right\} \Rightarrow \begin{array}{l}
 \mathbf{0} = (\lambda_1 - \lambda_2) \vec{x}_2^\dagger \vec{x}_1 \\
 \lambda_1 \neq \lambda_2 \Rightarrow \vec{x}_2^\dagger \vec{x}_1 = \mathbf{0}
 \end{array}$$

**Definicja:** Macierz kwadratową  $\mathbf{A}$  nazywamy normalną wtedy i tylko wtedy gdy komutuje ona ze swoim sprzężeniem hermitowskim, tzn.  $\mathbf{A}\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}^\dagger\mathbf{A}$ .

**Wniosek:** Wszystkie macierze (anty) hermitowskie (rz. (anty) symetryczne), unitarne (rz. ortogonalne) są macierzami normalnymi.

# Diagonalizacja macierzy hermitowskiej

**Twierdzenie:** Macierz hermitowską (lub rz. symetryczną) można zdiagonalizować za pomocą macierzy unitarnej (lub ortogonalnej).

**D:** W przypadku wszystkich różnych wartości własnych macierz można zdiagonalizować za pomocą transformacji podobieństwa  $S^{-1}AS = \Lambda$

Pokażemy, że macierz hermitowską można zdiagonalizować również w przypadku zdegenerowanych wartości własnych.

Niech  $\lambda_1$  będzie zdegenerowaną wartością własną macierzy hermitowskiej  $H_{n \times n}$  a  $\vec{x}_1$  wektorem własnym do tej wartości własnej.

Konstruujemy układ  $n$  ortonormalnych wektorów  $\vec{x}_i$  tak aby pierwszym z nich był  $\vec{x}_1$

Z wektorów tych budujemy unitarną macierz  $U_1 = (\vec{x}_1 \ \vec{x}_2 \ \dots \ \vec{x}_n)$

Transformacja unitarna  $U^\dagger H U$  ma dokładnie ten sam zestaw wartości własnych co macierz  $H$ :

$$\begin{aligned} 0 &= \det(U^\dagger H U - \lambda I) = \det(U^{-1} (H - \lambda I) U) = \det U^{-1} \det(H - \lambda I) \det U = \\ &= \det(U^{-1} U) \det(H - \lambda I) = \det(H - \lambda I) \end{aligned}$$

Macierz  $U^\dagger H U$  jest hermitowska:

$$(U^\dagger H U)^\dagger = U^\dagger H^\dagger U = U^\dagger H U$$

# Diagonalizacja macierzy hermitowskiej

Mamy:

$$U_1^\dagger H U_1 = \begin{pmatrix} \leftarrow & \vec{x}_1^* & \rightarrow \\ \leftarrow & \vec{x}_2^* & \rightarrow \\ & \vdots & \\ \leftarrow & \vec{x}_n^* & \rightarrow \end{pmatrix} H \begin{pmatrix} \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \vec{x}_1 & \vec{x}_2 & \vec{x}_n \\ \downarrow & \downarrow & \dots & \downarrow \end{pmatrix} =$$

$$\begin{aligned} H \vec{x}_1 &= \lambda_1 \vec{x}_1 \\ \text{ozn} \\ H \vec{x}_i &= \vec{h}_i, \quad i \neq 1 \\ \langle \vec{x}_i | \vec{x}_1 \rangle &= \delta_{i1} \end{aligned}$$

$$= \begin{pmatrix} \leftarrow & \vec{x}_1^* & \rightarrow \\ \leftarrow & \vec{x}_2^* & \rightarrow \\ & \vdots & \\ \leftarrow & \vec{x}_n^* & \rightarrow \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \uparrow & \uparrow & \uparrow \\ \lambda_1 \vec{x}_1 & \vec{h}_2 & \vec{h}_n \\ \downarrow & \downarrow & \dots & \downarrow \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ 0 & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \alpha_{n2} & \dots & \alpha_{nn} \end{pmatrix}$$

bo jest  $U_1^\dagger H U_1$   
hermitowska

$$\det(H - \lambda I) = \det(U_1^\dagger H U_1 - \lambda I) =$$

$$\begin{vmatrix} \lambda_1 - \lambda & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \alpha_{22} - \lambda & \alpha_{23} & \dots & \alpha_{2n} \\ \mathbf{0} & \alpha_{32} & \alpha_{33} - \lambda & \dots & \alpha_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \alpha_{n2} & \alpha_{n3} & \dots & \alpha_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = (\lambda_1 - \lambda) \begin{vmatrix} \alpha_{22} - \lambda & \alpha_{23} & \dots & \alpha_{2n} \\ \alpha_{32} & \alpha_{33} - \lambda & \dots & \alpha_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{n2} & \alpha_{n3} & \dots & \alpha_{nn} - \lambda \end{vmatrix}$$



# Diagonalizacja macierzy hermitowskiej

Definiujemy macierz  $\mathbf{H}_1$  stopnia  $n-1$ :

$$\mathbf{H}_1 = \begin{pmatrix} \alpha_{22} & \alpha_{23} & \cdots & \alpha_{2n} \\ \alpha_{32} & \alpha_{33} & \cdots & \alpha_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{n2} & \alpha_{n3} & \cdots & \alpha_{nn} \end{pmatrix} \quad \mathbf{U}_1^\dagger \mathbf{H} \mathbf{U}_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boxed{\begin{matrix} \ddots & \cdots & \ddots \\ \vdots & \mathbf{H}_1 & \vdots \\ \ddots & \cdots & \ddots \end{matrix}} & \cdots & \ddots \\ \mathbf{0} & \cdots & \cdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Wśród wartości własnych  $\mathbf{H}_1$  musi pojawić się  $\lambda_1$ . Konstruujemy układ  $n-1$  ortonormalnych wektorów z których pierwszy jest wektorem własnym macierzy  $\mathbf{H}_1$  do wartości własnej  $\lambda_1$ :

$$\vec{y}_1 = \begin{pmatrix} y_{22} \\ y_{32} \\ \vdots \\ y_{n2} \end{pmatrix}, \quad \vec{y}_2 = \begin{pmatrix} y_{23} \\ y_{33} \\ \vdots \\ y_{n3} \end{pmatrix}, \quad \dots, \quad \vec{y}_{n-1} = \begin{pmatrix} y_{2n} \\ y_{3n} \\ \vdots \\ y_{nn} \end{pmatrix} \quad \mathbf{H}_1 \vec{y}_1 = \lambda_1 \vec{y}_1$$

Definiujemy unitarną macierz  $\mathbf{U}_2$  stopnia  $n$ :

$$\mathbf{U}_2 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & y_{22} & \cdots & y_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & y_{n2} & \cdots & y_{nn} \end{pmatrix}$$

# Diagonalizacja macierzy hermitowskiej

Wówczas unitarna transformacja podobieństwa za pomocą  $U_2$  daje:

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_1 \vec{y}_1 &= \lambda_1 \vec{y}_1 \\ \langle \vec{y}_i | \vec{y}_1 \rangle &= \delta_{i1} \end{aligned}$$

$$U_2^\dagger (U_1^\dagger \mathbf{H} U_1) U_2 =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & y_{22}^* & \cdots & y_{n2}^* \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & y_{2n}^* & \cdots & y_{nn}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \ddots & \cdots & \ddots \\ \vdots & \vdots & \mathbf{H}_1 & \vdots \\ \mathbf{0} & \ddots & \cdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & y_{22} & \cdots & y_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & y_{n2} & \cdots & y_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \lambda_1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \beta_{33} & \cdots & \beta_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \beta_{n3} & \cdots & \beta_{nn} \end{pmatrix}$$

Jeśli  $\lambda_1$  jest  $m$ -krotnie zdegenerowaną wartością własną to powyższy schemat powtarzamy  $m$  razy. Pozostała część macierzy może być zdiagonalizowana przez wektory własne odpowiadające różnym wartościom własnym.

Do zdiagonalizowania macierzy stopnia  $n$  potrzeba  $n-1$  transformacji unitarnych:

$$U^\dagger \mathbf{H} U = \Lambda \quad U = U_1 U_2 \cdots U_{n-1}$$

**Wniosek:** Każda macierz hermitowska (lub rz. symetryczna) stopnia  $n$  posiada  $n$  ortogonalnych wektorów własnych bez względu na degeneracje wartości własnych.

$$U^\dagger \mathbf{H} U = \Lambda \Rightarrow U (U^\dagger \mathbf{H} U) = U \Lambda \Rightarrow \mathbf{H} U = U \Lambda$$

# Diagonalizacja macierzy hermitowskiej

Przykład: Znajdź unitarną macierz  $U$  diagonalizującą poprzez transformację podobieństwa macierz hermitowską

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} 2 & i & 1 \\ -i & 2 & i \\ 1 & -i & 2 \end{pmatrix}$$

Wartości własne macierzy  $\mathbf{H}$  są pierwiastkami jej równania charakterystycznego

$$\det(\mathbf{H} - \lambda \mathbf{I}) = \begin{vmatrix} 2 - \lambda & i & 1 \\ -i & 2 - \lambda & i \\ 1 & -i & 2 - \lambda \end{vmatrix} = -\lambda^3 + 6\lambda^2 - 9\lambda = -\lambda(\lambda - 3)^2 = 0$$

Mamy trzy wartości własne  $\lambda_1 = 3$   $\lambda_2 = 3$   $\lambda_3 = 0$

Niech  $\vec{v}_1 = (v_1 \ v_2 \ v_3)^T$  będzie jednym z wektorów własnych do wartości własnej  $\lambda_1$ :

$$\begin{pmatrix} -1 & i & 1 \\ -i & -1 & i \\ 1 & -i & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \end{pmatrix} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad v_1 - iv_2 - v_3 = 0 \quad \Rightarrow \quad \vec{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Wybieramy trzy liniowo niezależne wektory

$$\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{v}_3 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

# Diagonalizacja macierzy hermitowskiej

Korzystając z metody Grama-Schmidta znajdujemy układ wektorów ortonormalnych:

$$\vec{x}_1 = \frac{\vec{v}_1}{|\vec{v}_1|} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{x}_2 = \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{x}'_3 = \vec{v}_3 - \langle \vec{x}_1 | \vec{v}_3 \rangle \vec{x}_1 - \langle \vec{x}_2 | \vec{v}_3 \rangle \vec{x}_2 =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \left[ (1 \ 0 \ 0) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right] \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} - \left[ (1 \ 0 \ 0) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$\vec{x}_3 = \frac{\vec{x}'_3}{|\vec{x}'_3|} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Unitarna transformacja podobieństwa za pomocą macierzy  $U_1 = (\vec{x}_1 \ \vec{x}_2 \ \vec{x}_3)$

$$U_1^\dagger H U_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & i & 1 \\ -i & 2 & i \\ 1 & -i & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -i\sqrt{2} \\ 0 & i\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}$$

# Diagonalizacja macierzy hermitowskiej

Ponieważ  $\mathbf{H}$  i  $\mathbf{U}_1^\dagger \mathbf{H} \mathbf{U}_1$  mają te same wartości własne, więc  $\lambda = 3$  i  $\lambda = 0$  muszą być wartościami własnymi podmacierzy

$$\mathbf{H}_1 = \begin{pmatrix} 2 & -i\sqrt{2} \\ i\sqrt{2} & 1 \end{pmatrix}$$

Znormalizowane wektory własne macierzy  $\mathbf{H}_1$  do wartości własnych  $\lambda = 3$  i  $\lambda = 0$  to

$$\vec{y}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} -i\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{y}_2 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} i \\ \sqrt{2} \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{U}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -i\sqrt{\frac{2}{3}} & i\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & \sqrt{\frac{2}{3}} \end{pmatrix}$$

A więc macierz diagonalizująca  $\mathbf{U}$  ma postać

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}_1 \mathbf{U}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -i\sqrt{\frac{2}{3}} & i\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & \sqrt{\frac{2}{3}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & -i\sqrt{\frac{2}{3}} & i\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

# Diagonalizacja macierzy hermitowskiej

Rzeczywiście mamy:

$$U^\dagger H U = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & i\sqrt{\frac{2}{3}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -i\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & i & 1 \\ -i & 2 & i \\ 1 & -i & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 & -i\sqrt{\frac{2}{3}} & i\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Kolumny macierzy  $U$  są ortonormalnymi wektorami własnymi macierzy  $H$ :

$$H\vec{u}_1 = \lambda_1\vec{u}_1 : \begin{pmatrix} 2 & i & 1 \\ -i & 2 & i \\ 1 & -i & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = 3 \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} \\ 0 \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$H\vec{u}_2 = \lambda_2\vec{u}_2 : \begin{pmatrix} 2 & i & 1 \\ -i & 2 & i \\ 1 & -i & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ -i\sqrt{2}/\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{6} \end{pmatrix} = 3 \begin{pmatrix} 1/\sqrt{6} \\ -i\sqrt{2}/\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{6} \end{pmatrix}$$

$$H\vec{u}_3 = \lambda_3\vec{u}_3 : \begin{pmatrix} 2 & i & 1 \\ -i & 2 & i \\ 1 & -i & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ i/\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{3} \end{pmatrix} = 0 \begin{pmatrix} 1/\sqrt{3} \\ i/\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{3} \end{pmatrix}$$

# Diagonalizacja macierzy hermitowskiej

W praktyce korzystamy z udowodnionego twierdzenia i konstruujemy macierz  $U$  ze zortonormalizowanych wektorów własnych. Wektory własne do niezdegenerowanych wartości własnych znajdujemy w zwykły sposób.

Wektory własne do zdegenerowanej wartości własnej  $\lambda = 3$  muszą spełniać warunek

$$x_1 - ix_2 - x_3 = 0 \Rightarrow x_1 = ix_2 + x_3$$

W ogólności wektory własne dane są więc przez

$$\vec{u} = \begin{pmatrix} ix_2 + x_3 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = x_2 \begin{pmatrix} i \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} + x_3 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Jeden z wektorów własnych znajdujemy wybierając np.  $x_2 = 0$ :

$$\vec{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Drugi wektor wybieramy jako ortogonalny do  $\vec{u}_1$ :

$$\langle \vec{u}_1 | \vec{u} \rangle = (1 \quad 0 \quad 1) \begin{pmatrix} ix_2 + x_3 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = ix_2 + 2x_3 = 0 \Rightarrow x_2 = 2ix_3$$

Drugi wektor własny do wartości własnej  $\lambda = 3$  to  $\vec{u}_2 = x_3 \begin{pmatrix} -1 \\ 2i \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{pmatrix} -1 \\ 2i \\ 1 \end{pmatrix}$

# Równoczesna diagonalizacja macierzy

**Twierdzenie:** Dwie macierze  $A$  i  $B$  można jednocześnie zdiagonalizować poprzez transformację podobieństwa wtedy i tylko wtedy gdy macierze  $A$  i  $B$  komutują tzn.  $AB=BA$ .

$$\begin{aligned}
 \mathbf{D}^{(\Rightarrow)} : \quad & \mathbf{D}_1 = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{D}_1\mathbf{D}_2 = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{S} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{S} \\
 & \mathbf{D}_2 = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{S} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{D}_2\mathbf{D}_1 = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{S}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{S} \\
 & \mathbf{D}_1\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_2\mathbf{D}_1 = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{S} - \mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{S} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{S} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{S} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{A}\mathbf{B} = \mathbf{B}\mathbf{A}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \mathbf{D}^{(\Leftarrow)} : \quad & \mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S} = \mathbf{D}_1 \quad \mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{S} = \mathbf{B}' \\
 & \mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{S} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{S} = \mathbf{D}_1\mathbf{B}' = \begin{pmatrix} \lambda_1 b'_{11} & \lambda_1 b'_{12} & \cdots & \lambda_1 b'_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_n b'_{n1} & \lambda_n b'_{n2} & \cdots & \lambda_n b'_{nn} \end{pmatrix} \\
 & \mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{S} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{S}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S} = \mathbf{B}'\mathbf{D}_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 b'_{11} & \lambda_2 b'_{12} & \cdots & \lambda_n b'_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_1 b'_{n1} & \lambda_2 b'_{n2} & \cdots & \lambda_n b'_{nn} \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$$\text{Dla } \lambda_i \neq \lambda_j \quad \mathbf{A}\mathbf{B} = \mathbf{B}\mathbf{A} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{D}_1\mathbf{B}' = \mathbf{B}'\mathbf{D}_1 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{B}' = \begin{pmatrix} \lambda_1 b'_{11} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \lambda_n b'_{nn} \end{pmatrix} \equiv \mathbf{D}_2$$



# Równoczesna diagonalizacja macierzy

Dla  $\lambda_i = \lambda_j = \lambda$  mamy

$$S^{-1}AS = D_1 = \begin{pmatrix} \ddots & & 0 & 0 \\ & \lambda & & 0 \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda \\ 0 & 0 & & \ddots \end{pmatrix} \begin{array}{l} \leftarrow i\text{-ty wiersz} \\ \leftarrow j\text{-ty wiersz} \end{array}$$

Ponieważ  $B = B^\dagger \Rightarrow S^{-1}BS = (S^{-1}BS)^\dagger$  więc istnieje unitarna macierz  $T$  taka, że:

$$T^{-1}(S^{-1}BS)T = D_2$$

Z drugiej strony mamy  $T^{-1}(S^{-1}AS)T = T^{-1}D_1T = D_1T^{-1}T = D_1$

A więc istnieje macierz hermitowska  $U=ST$  diagonalizująca jednocześnie  $A$  i  $B$ .

Uwaga: W mechanice kwantowej operatory które można jednocześnie zdiagnozować odpowiadają wielkościom fizycznym, których jednoczesny pomiar nie jest ograniczony zasadą nieoznaczoności.

# Równoczesna diagonalizacja macierzy

Przykład: Znajdź unitarną macierz  $U$  diagonalizującą jednocześnie macierze

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{AB} = \begin{pmatrix} 8 & 7 \\ 7 & 8 \end{pmatrix} = \mathbf{BA}$$

Znajdujemy wartości własne i wektory własne macierzy  $\mathbf{A}$ :

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = \begin{vmatrix} 2 - \lambda & 1 \\ 1 & 2 - \lambda \end{vmatrix} = (\lambda - 1)(\lambda - 3) = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda_1 = 1 \quad \lambda_2 = 3$$

$$\vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \quad \vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

A więc unitarna macierz diagonalizująca to  $\mathbf{S} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \mathbf{S}^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$

Rzeczywiście mamy:

$$\mathbf{S}^{-1}\mathbf{AS} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S}^{-1}\mathbf{BS} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 5 \end{pmatrix}$$

Jednocześnie widać, że wartościami własnymi macierzy  $\mathbf{B}$  są  $\lambda_1=1$  i  $\lambda_2=5$