Matematyczne Metody Fizyki I

Wykład 12

Relacje rekurencyjne

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

(1) $x_0 = r_0,\quad x_1 = r_1,\quad \ldots,\quad x_{k-1} = r_{k-1},$ gdzie $r_0, r_1, \ldots, r_{k-1}$ są skalarami,

(2) dla $n \ge k,\ x_n = a_1 x_{n-1} + a_2 x_{n-2} + \ldots + a_k x_{n-k},$ gdzie $a_1, a_2, \ldots, a_k$ są skalarami.

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

Przykład: Znajdź 100-tny wyraz ciągu zdefiniowanego dla $n \ge 3$ 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

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

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

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

Teraz już łatwo znajdujemy dowolną potęgę macierzy A:

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

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 $x_n = a x_{n-1} + b x_{n-2}$ oraz niech λ_1 i λ_2 będą wartościami własnymi wynikającymi z równania charakterystycznego $\lambda^2 - a\lambda - b = 0$. Wówczas:

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

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

Dowód:

a) $$x_n - a x_{n-1} - b x_{n-2} = \left(c_1\lambda^n + c_2\lambda^n\right) - a\left(c_1\lambda^{n-1} + c_2\lambda^{n-1}\right) - b\left(c_1\lambda^{n-2} + c_2\lambda^{n-2}\right) =$$

$$= c_1\lambda_1^{n-2}\left(\lambda_1^2 - a\lambda_1 - b\right) + c_2\lambda_2^{n-2}\left(\lambda_2^2 - a\lambda_2 - b\right) = \left\| \lambda_{1,2}^2 - a\lambda_{1,2} - b = 0 \right\| = 0$$

b) $$x_n - a x_{n-1} - b x_{n-2} = \left(c_1\lambda^n + c_2 n\lambda^n\right) - a\left(c_1\lambda^{n-1} + c_2(n-1)\lambda^{n-1}\right) - b\left(c_1\lambda^{n-2} + c_2(n-2)\lambda^{n-2}\right) =$$

$$= c_2\lambda^{n-2}(a\lambda + 2b) = \left\| \begin{array}{c} \lambda^2 - a\lambda - b = 0 \\ \Delta = a^2 + 4b = 0 \;\Rightarrow\; \lambda = a/2 \end{array} \right\| = c_2\lambda^{n-2}\left(\frac{a^2}{2} + 2b\right) = 0$$

Relacje rekurencyjne

Przykład (cd): Znajdź 100-tny 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:

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

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

Relacje rekurencyjne

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

$$\lambda^m - a_1 \lambda^{m-1} - \ldots - a_{m-1}\lambda - a_m = 0$$

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

Wówczas x_n ma ogólną postać:

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

Przykład: Znajdź n-ty wyraz ciągu zdefiniowanego dla $n \geq 2$ relacją rekurencyjną $x_n = 6x_{n-1} - 9x_{n-2}$ z warunkami początkowymi $x_0 = 1,\ x_1 = 6.$

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

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

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

Macierze hermitowskie i symetryczne

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

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

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

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

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 $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\,\mathbf{S} = \Lambda$

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

Niech λ_1 będzie zdegenerowaną wartością własną macierzy hermitowskiej $\mathbf{H}_{n\times n}$ a $\vec{\mathbf{x}}_1$ wektorem własnym do tej wartości własnej.

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

Z wektorów tych budujemy unitarną macierz $\mathbf{U}_1 = \left(\vec{\mathbf{x}}_1 \quad \vec{\mathbf{x}}_2 \quad \ldots \quad \vec{\mathbf{x}}_n\right)$

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

$$\mathbf{0} = \det\left(\mathbf{U}^\dagger\mathbf{H}\mathbf{U} - \lambda\,\mathbf{I}\right) = \det\left(\mathbf{U}^{-1}\left(\mathbf{H} - \lambda\,\mathbf{I}\right)\mathbf{U}\right) = \det\mathbf{U}^{-1}\det\left(\mathbf{H} - \lambda\,\mathbf{I}\right)\det\mathbf{U} =$$

$$= \det\left(\mathbf{U}^{-1}\mathbf{U}\right)\det\left(\mathbf{H} - \lambda\,\mathbf{I}\right) = \det\left(\mathbf{H} - \lambda\,\mathbf{I}\right)$$

Macierz $\mathbf{U}^\dagger\mathbf{H}\mathbf{U}$ jest hermitowska:

$$\left(\mathbf{U}^\dagger\mathbf{H}\mathbf{U}\right)^\dagger = \mathbf{U}^\dagger\mathbf{H}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{U}^\dagger\mathbf{H}\mathbf{U}$$

Diagonalizacja macierzy hermitowskiej

Mamy:

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

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

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

bo jest $\mathbf{U}_1^\dagger \mathbf{H} \mathbf{U}_1$ hermitowska

$$\det(\mathbf{H} - \lambda \mathbf{I}) = \det\left(\mathbf{U}_1^\dagger \mathbf{H} \mathbf{U}_1 - \lambda \mathbf{I}\right) =$$

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

Diagonalizacja macierzy hermitowskiej

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

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

Wśród wartości własnych $\mathbf{H}_1$ musi pojawić się λ_1. Konstruujemy układ $n-1$ ortonormalnych wektorów z których pierwszy jest wektorem własnym macierzy $\mathbf{H}_1$ do wartości własnej λ_1:

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

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

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

Diagonalizacja macierzy hermitowskiej

Wówczas unitarna transformacja podobieństwa za pomocą $\mathbf{U}_2$ daje:

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

$$\mathbf{U}_2^\dagger\left(\mathbf{U}_1^\dagger\mathbf{H}\mathbf{U}_1\right)\mathbf{U}_2 =$$

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

Jeśli λ_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:

$$\mathbf{U}^\dagger\mathbf{H}\mathbf{U} = \Lambda \qquad \mathbf{U} = \mathbf{U}_1\mathbf{U}_2\cdots\mathbf{U}_{n-1}$$

<u>Wniosek:</u> Każda macierz hermitowska (lub rz. symetryczna) stopnia n posiada n ortogonalnych wektorów własnych bez względu na degeneracje wartości własnych.

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

Diagonalizacja macierzy hermitowskiej

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

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

Wartości własne macierzy H są pierwiastkami jej równania charakterystycznego

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

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

Niech $\vec{\mathbf{v}}_1 = (v_1 \ v_2 \ v_3)^{\mathrm{T}}$ będzie jednym z wektorów własnych do wartości własnej λ_1:

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

Wybieramy trzy liniowo niezależne wektory

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

Diagonalizacja macierzy hermitowskiej

Korzystając z metody Grama-Schmidta znajdujemy układ wektorów ortonormalnych:

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

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

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

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

Unitarna transformacja podobieństwa za pomocą macierzy $\mathbf{U}_1 = \begin{pmatrix}\vec{\mathbf{x}}_1 & \vec{\mathbf{x}}_2 & \vec{\mathbf{x}}_3\end{pmatrix}$

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

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

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

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:

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

Kolumny macierzy U są ortonormalnymi wektorami własnymi macierzy H:

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

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

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

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 λ = 3 muszą spełniać warunek

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

W ogólności wektory własne dane są więc przez

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

Jeden z wektorów własnych znajdujemy wybierając np. x_2 = 0: $\vec{\mathbf{u}}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

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

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

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

Równoczesna diagonalizacja macierzy

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

$D^{(\Rightarrow)}$:

$$\begin{matrix} \mathbf{D}_1 = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S} \\ \mathbf{D}_2 = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{S} \end{matrix} \Rightarrow \begin{matrix} \mathbf{D}_1\mathbf{D}_2 = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{S} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{S} \\ \mathbf{D}_2\mathbf{D}_1 = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{S}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{B}\mathbf{A}\mathbf{S} \end{matrix}$$

$$\mathbf{D}_1\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_2\mathbf{D}_1 = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{ABS} - \mathbf{S}^{-1}\mathbf{BAS} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{S}^{-1}\mathbf{ABS} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{BAS} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{AB} = \mathbf{BA}$$

$D^{(\Leftarrow)}$: $\mathbf{S}^{-1}\mathbf{AS} = \mathbf{D}_1 \qquad \mathbf{S}^{-1}\mathbf{BS} = \mathbf{B}'$

$$\mathbf{S}^{-1}\mathbf{ABS} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{ASS}^{-1}\mathbf{BS} = \mathbf{D}_1\mathbf{B}' = \begin{pmatrix} \lambda_1 b'_{11} & \lambda_1 b'_{12} & \cdots & \lambda_1 b'_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_n b'_{n1} & \lambda_n b'_{n2} & \cdots & \lambda_n b'_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S}^{-1}\mathbf{BAS} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{BSS}^{-1}\mathbf{AS} = \mathbf{B}'\mathbf{D}_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 b'_{11} & \lambda_2 b'_{12} & \cdots & \lambda_n b'_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_1 b'_{n1} & \lambda_2 b'_{n2} & \cdots & \lambda_n b'_{nn} \end{pmatrix}$$

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

Równoczesna diagonalizacja macierzy

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

$$S^{-1}AS = D_1 = \begin{pmatrix} \ddots & & & 0 & 0 \\ & \lambda & & & 0 \\ & & \ddots & & \\ 0 & & & \lambda & \\ 0 & 0 & & & \ddots \end{pmatrix}$$

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

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

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

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

<u>Uwaga:</u> W mechanice kwantowej operatory które można jednocześnie zdiagonalizować odpowiadają wielkościom fizycznym, których jednoczesny pomiar nie jest ograniczony zasadą nieoznaczoności.

Równoczesna diagonalizacja macierzy

<u>Przykład:</u> Znajdź unitarną macierz U diagonalizującą jednocześnie macierze

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

Znajdujemy wartości własne i wektory własne macierzy A:

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

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

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

Rzeczywiście mamy:

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

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

Jednocześnie widać, że wartościami własnymi macierzy B są λ_1=1 i λ_2=5