

Matematyczne Metody Fizyki I

Wykład 8

Diagonalizacja macierzy kwadratowej

Dana jest macierz $A_{n \times n}$. Jej wartości własne λ_i i wektory własne \vec{x}_i spełniają równanie

$$A\vec{x}_i = \lambda_i\vec{x}_i \quad \text{dla} \quad i = 1, \dots, n$$

Każde z równań własnych osobno można zapisać w postaci:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{1i} \\ x_{2i} \\ \vdots \\ x_{ni} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_i x_{1i} \\ \lambda_i x_{2i} \\ \vdots \\ \lambda_i x_{ni} \end{pmatrix}$$

Natomiast wszystkie jednocześnie daje się zapisać w zwartej postaci w formie:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 x_{11} & \lambda_2 x_{12} & \cdots & \lambda_n x_{1n} \\ \lambda_1 x_{21} & \lambda_2 x_{22} & \cdots & \lambda_n x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_1 x_{n1} & \lambda_2 x_{n2} & \cdots & \lambda_n x_{nn} \end{pmatrix} =$$
$$= \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \lambda_2 & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

Diagonalizacja macierzy kwadratowej

Wprowadzając oznaczenia

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_{n1} & x_{n2} & \cdots & x_{nn} \end{pmatrix} \quad \text{oraz} \quad \mathbf{\Lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \lambda_2 & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \lambda_n \end{pmatrix}$$

możemy powyższe równanie macierzowe zapisać w postaci

$$\mathbf{AS} = \mathbf{S}\mathbf{\Lambda} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{S}^{-1}\mathbf{AS} = \mathbf{\Lambda}$$

Wniosek: Wykorzystując macierz zbudowaną z wektorów własnych można za pomocą transformacji podobieństwa przetransformować macierz \mathbf{A} do postaci diagonalnej w której elementami diagonalnymi są wartości własne macierzy \mathbf{A} .

Przykład: Zdiagonalizuj macierz za pomocą transformacji podobieństwa.

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

$$\text{wektory własne: } \vec{v}_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{oraz} \quad \vec{v}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{S}^{-1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S}^{-1}\mathbf{AS} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \lambda_2 \end{pmatrix}$$

Diagonalizacja macierzy kwadratowej

Po znormalizowaniu wektorów własnych utworzona macierz jest unitarna (ortogonalna)

$$\vec{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \text{oraz} \quad \vec{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow U^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Transformację $U^{-1}AU = U^\dagger AU = \Lambda$ nazywamy unitarną transformacją podobieństwa.

Przykład: Zdiagonalizuj macierz za pomocą transformacji podobieństwa.

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 6 & 6 \\ 1 & 3 & 2 \\ -1 & -5 & -2 \end{pmatrix} \quad \det(A - \lambda I) = (\lambda - 1)(\lambda - 2)^2 = 0 \quad \Rightarrow \lambda_1 = 1, \lambda_{2,3} = 2$$

$$\text{Wektory własne:} \quad \lambda_1 = 1: \vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{26}} \begin{pmatrix} -4 \\ -1 \\ 3 \end{pmatrix} \quad \lambda_{2,3} = 2: \vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{14}} \begin{pmatrix} -3 \\ -1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Wniosek: Tej macierzy nie da się zdiagonalizować.

Uwaga: Kompletnym układem wektorów własnych macierzy $A_{n \times n}$ nazywamy każdy układ n liniowo niezależnych wektorów własnych tej macierzy. Macierze które nie posiadają kompletnego układu wektorów własnych nazywamy niekompletnymi.

Uwaga: Macierz $A_{n \times n}$ jest diagonalizowalna wtedy i tylko wtedy gdy posiada kompletny układ wektorów własnych.

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:

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

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 λ_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 $n-1$:

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

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 :

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

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:

$$\mathbf{H}_1 \vec{y}_1 = \lambda_1 \vec{y}_1$$

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

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

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

Jeśli 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:

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

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 λ_1 :

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

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. 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. $AB=BA$.

$$\begin{aligned}
 D^{(\Rightarrow)} : \quad D_1 = S^{-1}AS &\Rightarrow D_1 D_2 = S^{-1}ASS^{-1}BS = S^{-1}ABS \\
 D_2 = S^{-1}BS &\Rightarrow D_2 D_1 = S^{-1}BSS^{-1}AS = S^{-1}BAS \\
 D_1 D_2 - D_2 D_1 = S^{-1}ABS - S^{-1}BAS &\Rightarrow S^{-1}ABS = S^{-1}BAS \Rightarrow AB = BA
 \end{aligned}$$

$$D^{(\Leftarrow)} : \quad S^{-1}AS = D_1 \quad S^{-1}BS = B'$$

$$S^{-1}ABS = S^{-1}ASS^{-1}BS = D_1 B' = \begin{pmatrix} \lambda_1 b'_{11} & \lambda_1 b'_{12} & \cdots & \lambda_1 b'_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_n b'_{n1} & \lambda_n b'_{n2} & \cdots & \lambda_n b'_{nn} \end{pmatrix}$$

$$S^{-1}BAS = S^{-1}BSS^{-1}AS = B' D_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 b'_{11} & \lambda_2 b'_{12} & \cdots & \lambda_n b'_{1n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \lambda_1 b'_{n1} & \lambda_2 b'_{n2} & \cdots & \lambda_n b'_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\text{Dla } \lambda_i \neq \lambda_j \quad AB = BA \Rightarrow D_1 B' = B' D_1 \Rightarrow B' = \begin{pmatrix} \lambda_1 b'_{11} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \lambda_n b'_{nn} \end{pmatrix} \equiv D_2$$

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 $\lambda_2=5$