Fizyka dla firm — Matematyka

14. Twierdzenie spektralne

Macierze hermitowskie i unitarne

P. F. Góra

https://zfs.fais.uj.edu.pl/pawel_gora

24 listopada 2022

Potęgowanie macierzy kwadratowych

Naturalne potęgi macierzy definiujemy jako mnożenie macierzy przez siebie:

$$\mathbf{A}^n = \underbrace{\mathbf{A} \cdot \mathbf{A} \cdots \mathbf{A}}_{n \text{ razy}} \tag{1}$$

Dla macierzy odwracalnych można też definiować potęgi ujemne, jako potęgi macierzy odwrotnej. Ponadto dla $\mathbf{A} \neq \mathbf{0}$ przyjmujemy $\mathbf{A}^0 = \mathbb{I}$. W ten sposób mamy zdefiniowane wszystkie całkowitoliczbowe potęgi macierzy (potęgi ujemne nie zawsze istnieją!) i zachodzą zwykłe zasady składania potęg.

Niecałkowite potęgi macierzy można definiować tylko w sensie rozkładu spektralnego, patrz niżej.

Macierze nilpotentne

Wśród macierzy, które **nie** są symetryczne, zdarzają się macierze *nilpotentne*, to znaczy takie, których pewna potęga (a zatem i wszystkie wyższe) są macierzami zerowymi.

Przykłady

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{2a}$$

$$
\begin{aligned}
\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^3 &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad (2b)
\end{aligned}
$$

Macierze idempotentnte

Macierz jest *idempotentna*, jeśli $\mathbf{A}^2 = \mathbf{A}$. Macierz jednostkowa jest idempotentnta. Macierz idempotentna, która nie jest macierzą jednostkową, jest osobliwa.

Przykłady

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 2 & -1 \end{bmatrix}^2 = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4-2 & -2+1 \\ 4-2 & -2+1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} \tag{3a}$$

Operator rzutowy $\mathbf{e}\mathbf{e}^T$, gdzie $\|\mathbf{e}\| = 1$, jest idempotentny. Istotnie,

$$\left(\mathbf{e}\mathbf{e}^T\right)^2 = \mathbf{e}\,\underbrace{\mathbf{e}^T\mathbf{e}}_{=1}\,\mathbf{e}^T = \mathbf{e}\mathbf{e}^T \tag{3b}$$

Inwolucje

Inną "dziwną" klasą macierzy są *inwolucje*, czyli macierze będące swoimi własnymi odwrotnościami: $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{-1} \;\Rightarrow\; \mathbf{A}^2 = \mathbb{I}$.

Przykład: Macierz Hadamarda

$$\mathbf{H} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \tag{4}$$

Rozkład jedności

Niech $\{\mathbf{e}_i\}_{i=1}^n$ stanowi bazę ortonormalną w $\mathbb{R}^n$. Wówczas

$$\sum_{i=1}^{n} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i^T = \mathbb{I}\,. \tag{5}$$

(Zauważmy, że obiekty $\mathbf{e}_i \mathbf{e}_i^T$ to operatory (macierze). Nazywa się je operatorami rzutowymi, gdyż rzutują dowolny wektor na wektor $\mathbf{e}_i$.)

Dowód. Skoro wektory $\{\mathbf{e}_i\}_{i=1}^n$ stanowi bazę, każdy wektor można przedstawić jako kombinację liniową tych wektorów bazowych:

$$\mathbf{v} = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \mathbf{e}_j\,. \tag{6a}$$

Liczymy

$$\begin{aligned}\left(\sum_{i=1}^{n}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i^T\right)\mathbf{v} &= \left(\sum_{i=1}^{n}\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i^T\right)\sum_{j=1}^{n}\alpha_j\mathbf{e}_j = \sum_{i,j=1}^{n}\alpha_j\mathbf{e}_i\underbrace{\mathbf{e}_i^T\mathbf{e}_j}_{\delta_{ij}} \\ &= \sum_{i,j=1}^{n}\alpha_j\delta_{ij}\mathbf{e}_i = \sum_{j=1}^{n}\alpha_j\mathbf{e}_j = \mathbf{v} \qquad \text{(6b)}\end{aligned}$$

a zatem działanie operatora (5) nie zmienia wektora $\mathbf{v}$. Ponieważ zachodzi to dla dowolnego wektora, operator (5) musi być operatorem tożsamościowym, $\mathbb{I}$.

$\square$

Twierdzenie spektralne

Niech $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ będzie macierzą symetryczną, rzeczywistą. $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ są jej wartościami własnymi, a $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n$ odpowiadającymi im unormowanymi wektorami własnymi. Wówczas

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \, \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i^T \,. \tag{7}$$

Operator po prawej stronie (7) nazywam *rozkładem spektralnym* operatora $\mathbf{A}$.

Dowód. Korzystam z reprezentacji (6a) i obliczam

$$\mathbf{A}\mathbf{v} = \mathbf{A} \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \mathbf{e}_j = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \mathbf{A}\mathbf{e}_j = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \lambda_j \mathbf{e}_j \tag{8a}$$

Z drugiej strony

$$\left(\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\,\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i^T\right)\mathbf{v}=\sum_{i,j=1}^{n}\lambda_i\alpha_j\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i^T\mathbf{e}_j=\sum_{i,j=1}^{n}\lambda_i\alpha_j\delta_{ij}\mathbf{e}_i=\sum_{j=1}^{n}\alpha_j\lambda_j\mathbf{e}_j \tag{8b}$$

Ponieważ prawe strony (8a), (8b) są sobie równe i zachodzi to dla *dowolnego* wektora $\mathbf{v}$, równość (7) musi być prawdziwa tożsamościowo.

$\square$

Uwaga: Równość (7) jest najprostszą formą twierdzenia spektralnego. W przypadkach operatorów niehermitowskich oraz w przestrzeniach nieskończenie wymiarowych twierdzenie spektralne przybiera bardziej skomplikowaną formę.

Przykład

Weźmy dwa wektory z $\mathbb{R}^2$:

$$\mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \tag{9a}$$

Jak łatwo sprawdzić, są one wzajemnie ortogonalne i unormowane, stanowią więc bazę w $\mathbb{R}^2$. Mamy

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1\mathbf{e}_1^T + \mathbf{e}_2\mathbf{e}_2^T &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{9b}$$

Podobnie

$$
\begin{aligned}
2\,\mathbf{e}_1\mathbf{e}_1^T + 4\,\mathbf{e}_2\mathbf{e}_2^T &= 2\cdot\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} + 4\cdot\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \\
&= 2\cdot\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} + 4\cdot\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & -1 \\ -1 & 3 \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{9c}
$$

Macierz po prawej stronie (9c) jest symetryczna, rzeczywista, a jej równanie charakterystyczne ma postać $(3-\lambda)^2-1=0$. Wartościami własnymi są $\lambda_1 = 2$, $\lambda_2 = 4$, a wektory (9a) są odpowiadającymi im wektorami własnymi. Wyrażenie po lewej stronie (9c) jest rozkładem spektralnym tej macierzy.

Funkcje macierzy

Niech $\mathbf{A}$ będzie macierzą symetryczną, rzeczywistą, posiadającą rozkład spektralny (7). Niech $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ będzie jakąś funkcją. **Definiuję** funkcję macierzy następująco:

$$f(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^{n} f(\lambda_i)\, \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i^T \tag{10}$$

Definicja (10) ma sens tylko wtedy, gdy dla każdej wartości własnej wyrażenie $f(\lambda_i)$ jest dobrze określone. Na przykład tylko macierze symetryczne i dodatnio określone można w powyższym sensie pierwiastkować lub logarytmować.

Przykład

Rozważmy macierz

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \frac{5}{2} & -\frac{3}{2} \\ -\frac{3}{2} & \frac{5}{2} \end{bmatrix} \tag{11}$$

Czy dla takiej macierzy można zdefiniować $\sqrt{\mathbf{A}}$?

Jest to macierz symetryczna, rzeczywista, więc $\sqrt{\mathbf{A}}$ można zdefiniować w sensie rozkładu spektralnego (10). Przede wszystkim musimy znaleźć wartości własne tej macierzy. W tym celu obliczam

$$\det \begin{bmatrix} \frac{5}{2} - \lambda & -\frac{3}{2} \\ -\frac{3}{2} & \frac{5}{2} - \lambda \end{bmatrix} = \left(\frac{5}{2} - \lambda\right)^2 - \left(\frac{3}{2}\right)^2 = 0 \tag{12}$$

skąd $\lambda = 1$ lub $\lambda = 4$. Obie wartości własne są nieujemne, a więc ich pierwiastkowanie ma sens.

Musimy teraz znaleźć wektory własne. Oznaczam wektor własny przez $[a, b]$. Podstawiając do równania

$$\left(\frac{5}{2} - \lambda\right) a - \frac{3}{2} b = 0 \tag{13}$$

za λ, odpowiednio, 1 i 4, otrzymuję $a = b$ w pierwszym i $a = -b$ w drugim przypadku, co po unormowaniu daje wektory (9a) jako wektory własne macierzy (11).

Obliczam

$$\sqrt{\mathbf{A}} = \sqrt{1} \cdot \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} + \sqrt{4} \cdot \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} =$$
$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} + 2 \cdot \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{3}{2} & -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} & \frac{3}{2} \end{bmatrix} \tag{14}$$

Za pomocą bezpośredniego rachunku łatwo sprawdzić, że $\left(\sqrt{\mathbf{A}}\right)\cdot\left(\sqrt{\mathbf{A}}\right) = \mathbf{A}$.

Macierzowa funkcja wykładnicza

Funkcję wykładniczą *definiujemy* jako sumę nieskończonego szeregu

$$e^x \equiv \exp(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{x^k}{k!} \tag{15}$$

Szereg (15) zawiera wyłącznie naturalne potęgi x^n, nie ma więc przeszkód, by tę definicję uogólnić na dowolne macierze kwadratowe:

$$\exp(\mathbf{A}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\mathbf{A}^k \tag{16}$$

Własności macierzowej funkcji wykładniczej

$$\exp(\mathbf{A}^T) = (\exp(\mathbf{A}))^T \tag{17a}$$

$$\exp(\mathbf{A}^*) = (\exp(\mathbf{A}))^* \tag{17b}$$

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = 0 \Rightarrow \exp(\mathbf{A})\exp(\mathbf{B}) = \exp(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \tag{17c}$$

Ostatnia zależność jest bardzo ważna. Mówi ona, że jeśli dwie macierze komutują, eksponenta ich sumy jest równa iloczynowi eksponent, tak, jak dla liczb. Jeśli macierze nie komutują, eksponenta sumy **nie** jest równa iloczynowi eksponent. Za to zawsze zachodzi

$$\exp(\mathbf{A})\exp(-\mathbf{A}) = \exp(\mathbf{0}) = \mathbb{I} \tag{17d}$$

Przykład

Obliczmy

$$\exp\left(\boldsymbol{\sigma}_z\beta\right) = \exp\left(\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\beta\right) \tag{18a}$$

Zauważmy, że

$$\boldsymbol{\sigma}_z^2 = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = -\mathbb{I} \tag{18b}$$

a wobec tego

$$\boldsymbol{\sigma}_z^3 = -\boldsymbol{\sigma}_z\,, \quad \boldsymbol{\sigma}_z^4 = \mathbb{I}\,, \quad \boldsymbol{\sigma}_z^5 = \boldsymbol{\sigma}_z\,, \quad \text{itd} \tag{18c}$$

Podstawiając do definicji macierzowej funkcji wykładniczej otrzymujemy

$$
\begin{aligned}
\exp\left(\boldsymbol{\sigma}_z\beta\right) &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\beta^k}{k!}\boldsymbol{\sigma}_z^k \\
&= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\beta^{2k}}{(2k)!}\boldsymbol{\sigma}_z^{2k} + \sum_{k=0}^{\infty}\frac{\beta^{2k+1}}{(2k+1)!}\boldsymbol{\sigma}_z^{2k+1} \\
&= \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\beta^{2k}}{(2k)!}\mathbb{I} + \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\frac{\beta^{2k+1}}{(2k+1)!}\boldsymbol{\sigma}_z \\
&= \cos\beta\,\mathbb{I} + \sin\beta\,\boldsymbol{\sigma}_z \\
&= \begin{bmatrix}\cos\beta & -\sin\beta \\ \sin\beta & \cos\beta\end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{18d}
$$

gdzie skorzystaliśmy z rozwinięcia Taylora funkcji sinus i kosinus. Jak widzimy, otrzymalismy macierz obrotu płaskiego, co *nie* jest przypadkową koincydencją ☺.

Zadanie ☺

Oblicz $\exp\left(\mathbf{H}t\right)$, gdzie $\mathbf{H}$ jest macierzą Hadamarda (4).

Funkcja wykładnicza macierzy symetrycznych, rzeczywistych

Jeśli macierz jest symetryczna, rzeczywista, zachodzi

$$\mathbf{A} = \mathbf{S}\,\mathrm{diag}\,\{\lambda_1,\dots,\lambda_n\}\,\mathbf{S}^T \tag{19a}$$

gdzie $\mathbf{S}$ jest ortogonalną macierzą, której kolumnami są kolejne unormowane wektory własne macierzy $\mathbf{A}$. Wobec tego

$$\begin{aligned}\mathbf{A}^k &= \left(\mathbf{S}\,\mathrm{diag}\,\{\lambda_1,\dots,\lambda_n\}\,\mathbf{S}^T\right)^k \\ &= \mathbf{S}\mathrm{diag}\{\dots\}\mathbf{S}^T\mathbf{S}\mathrm{diag}\{\dots\}\mathbf{S}^T\cdots\mathbf{S}\mathrm{diag}\{\dots\}\mathbf{S}^T \qquad (19b)\end{aligned}$$

Wewnątrz tego wyrażenia, pomiędzy każdymi kolejnymi wystąpieniami macierzy diagonalnej $\mathsf{diag}\{\ldots\}$, pojawiają się iloczyny $\mathbf{S}^T\mathbf{S}$, które są równe $\mathbb{I}$. Zatem

$$
\begin{aligned}
\mathbf{A}^n &= \mathbf{S}\,\underbrace{\mathsf{diag}\{\ldots\}\cdots\mathsf{diag}\{\ldots\}}_{k \text{ razy}}\,\mathbf{S}^T \\
&= \mathbf{S}\left(\mathsf{diag}\left\{\lambda_1,\ldots,\lambda_n\right\}\right)^k\mathbf{S}^T \\
&= \mathbf{S}\,\mathsf{diag}\left\{\lambda_1^k,\ldots,\lambda_n^k\right\}\mathbf{S}^T
\end{aligned}
\tag{19c}
$$

Wstawiając to wyrażenie do definicji funkcji wykładniczej dostajemy

$$
\begin{aligned}
\exp(\mathbf{A}) &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\mathbf{A}^k = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\mathbf{S}\mathrm{diag}\left\{\lambda_1^k,\dots,\lambda_n^k\right\}\mathbf{S}^T \\
&= \mathbf{S}\left(\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\mathrm{diag}\left\{\lambda_1^k,\dots,\lambda_n^k\right\}\right)\mathbf{S}^T \\
&= \mathbf{S}\,\mathrm{diag}\left\{\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda_1^k}{k!},\dots,\sum_{k=0}^{\infty} \frac{\lambda_1^k}{k!}\right\}\mathbf{S}^T \\
&= \mathbf{S}\begin{bmatrix} e^{\lambda_1} & & & \\ & e^{\lambda_2} & & \\ & & \ddots & \\ & & & e^{\lambda_n} \end{bmatrix}\mathbf{S}^T
\end{aligned}
\tag{20}
$$

Jest to zgodne z podaną wcześniej definicją funkcji macierzy za pomocą rozwinięcia spektralnego; patrz także niżej, (51).

Przykład

Chcemy obliczyć

$$\exp\left(\begin{bmatrix} 3 & -4 \\ -4 & 3 \end{bmatrix} t\right), \tag{21a}$$

gdzie t jest liczbą rzeczywistą. Liczba ta domnaża macierz, a więc domnaża jej wartości własne, nie wpływając na wektory własne. Równanie charakterystystyczne macierzy, której eksponentę chcemy obliczyć, ma postać

$$\begin{vmatrix} 3-\lambda & -4 \\ -4 & 3-\lambda \end{vmatrix} = (3-\lambda)^2 - 16 = 0 \tag{21b}$$

a więc wartościami własnymi są $\lambda = 7$ i $\lambda = -1$. Jak łatwo sprawdzić, wektorami własnymi są

$$\mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{e}_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \tag{21c}$$

a wobec tego macierzą diagonalizującą jest

$$\mathbf{S} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \tag{21d}$$

Ostatecznie

$$\begin{aligned} \exp\left(\begin{bmatrix} 3 & -4 \\ -4 & 3 \end{bmatrix} t \right) &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{7t} & 0 \\ 0 & e^{-t} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} e^{-t} + e^{7t} & e^{-t} - e^{7t} \\ e^{-t} - e^{7t} & e^{-t} + e^{7t} \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{21e}$$

Sprzężenie hermitowskie

Sprzężenie hermitowskie jest złożeniem sprzężenia zespolonego oraz transpozycji. Dla macierzy rzeczywistych sprzężenie hermitowskie jest zwykłą transpozycją.

Przykłady

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -3i & 4i \end{bmatrix}^\dagger = \begin{bmatrix} 1 & 3i \\ 2 & -4i \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 1 \\ 2i \\ -3i \\ 4 \end{bmatrix}^\dagger = \begin{bmatrix} 1 & -2i & 3i & 4 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & i & 2 \\ -i & -3 & 4i \end{bmatrix}^\dagger = \begin{bmatrix} 1 & i \\ -i & -3 \\ 2 & -4i \end{bmatrix}$$

Własności sprzężenia hermitowskiego

Sprzężenie hermitowskie odwraca kolejność iloczynu:

$$(\mathbf{AB})^\dagger = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger \tag{22}$$

Z tego wynika, że

$$\left(\mathbf{A}^\dagger\right)^k = \left(\mathbf{A}^k\right)^\dagger \tag{23}$$

a zatem

$$\exp\left(\mathbf{A}^\dagger\right) = \left(\exp(\mathbf{A})\right)^\dagger \tag{24}$$

Iloczyn skalarny w $\mathbb{C}^n$

Dopuszczając wektory i skalary zespolone, musimy nieco zmodyfikować definicję iloczynu skalarnego, tak by uwzględniała ona to, że część urojona zmienia znak przy sprzężeniu zespolonym. W szczególności

- $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C} : \mathbf{x} \circ \mathbf{y} = (\mathbf{y} \circ \mathbf{x})^*$.
- $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{C}\,,\ \alpha \in \mathbb{C} : (\alpha \mathbf{x}) \circ \mathbf{y} = \mathbf{x} \circ (\alpha^* \mathbf{y})$

W przypadku rzeczywistych wektorów i skalarów zasady te sprowadzają się do zasad, które już znamy. **Nie zmienia** się wymóg **dodatniej określoności**:

- $\forall \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n\,,\ \mathbf{x} \neq \mathbf{0} : \mathbf{x} \circ \mathbf{x} > 0$.

Jako definicję iloczynu skalarnego w $\mathbb{C}^n$ przyjmujemy uogólnienie definicji “euklidesowej”:

$$\mathbf{x} \circ \mathbf{y} = \mathbf{x}^\dagger \mathbf{y} \tag{25}$$

W tej sytuacji długością wektora jest

$$\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\mathbf{x}^\dagger \mathbf{x}} = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2} \tag{26}$$

Jeżeli $\mathbf{H}$ jest macierzą hermitowską, dodatnio określoną

$$\forall \mathbf{x} \in \mathbb{C}^n , \mathbf{x} \neq \mathbf{0} : \mathbf{x}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{x} > 0 \tag{27a}$$

wyrażenie

$$\mathbf{x} \circ \mathbf{y} = \mathbf{x}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{y} \tag{27b}$$

definiuje *inny* iloczyn skalarny w $\mathbb{C}^n$.

Przykład

Znajdźmy wartości własne i wektory własne macierzy obrotu płaskiego. W tym celu znajdujemy równanie charakterystyczne:

$$\begin{vmatrix} \cos\beta - \lambda & -\sin\beta \\ \sin\beta & \cos\beta - \lambda \end{vmatrix} = (\cos\beta - \lambda)^2 + \sin^2\beta \tag{28}$$

Znaleziony wielomian charakterystyczny nie ma pierwiastków rzeczywistych (poza przypadkiem $\sin\beta = 0$), gdyż jest sumą dwu składników nieujemnych. Istnieją dwa pierwiastki zespolone: $\lambda_1 = \cos\beta + i\sin\beta$, $\lambda_2 = \cos\beta - i\sin\beta$. Zauważmy, że $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$. W celu znalezienia wektorów własnych podstawiamy jedną z wartości własnych do równania definiującego wektory własne:

$$a\left(\cos\beta - (\cos\beta + i\sin\beta)\right) + b\left(-\sin\beta\right) = 0 \tag{29a}$$

$$-ia - b = 0 \tag{29b}$$

Równanie na drugi wektor własny będzie się różnić jedynie znakiem przy i. Wektorami własnymi są

$$\mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{e}_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{i}{\sqrt{2}} \end{bmatrix} \tag{30}$$

Zauważmy, że wektory (30) są unormowane w sensie (26) i ortogonalne w sensie (25).

Sprawdzamy:

$$
\begin{aligned}
\begin{bmatrix} \cos\beta & -\sin\beta \\ \sin\beta & \cos\beta \end{bmatrix} \mathbf{e}_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \cos\beta & -\sin\beta \\ \sin\beta & \cos\beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \cos\beta + i\sin\beta \\ \sin\beta - i\cos\beta \end{bmatrix} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \cos\beta + i\sin\beta \\ -i(i\sin\beta + \cos\beta) \end{bmatrix} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}} (\cos\beta + i\sin\beta) \begin{bmatrix} 1 \\ -i \end{bmatrix} \\
&= (\cos\beta + i\sin\beta)\mathbf{e}_1
\end{aligned}
\tag{31}
$$

i analogicznie dla drugiej pary wartość własna-wektor własny.

Macierze unitarne

Macierz $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ nazywam macierzą unitarną, jeżeli

$$\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{U}\mathbf{U}^\dagger = \mathbb{I} \tag{32}$$

Macierze unitarne są uogólnieniem pojęcia macierzy ortogonalnych na przypadek zespolony. Własności macierzy unitarnych:

1. $\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^\dagger$.
2. $|\det\mathbf{U}| = 1$. Istotnie, $1 = \det\mathbb{I} = \det\left(\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}\right) = \left(\det\mathbf{U}^\dagger\right)(\det\mathbf{U}) = (\det\mathbf{U})^*(\det\mathbf{U}) = |\det\mathbf{U}|^2$.
3. Macierze unitarne w $\mathbb{C}^{n\times n}$ tworzą grupę. Działaniem grupowym jest mnożenie macierzy.

4. Kolumny macierzy unitarnej są unormowane w sensie (26) i wzajemnie prostopadłe w sensie (25). Kolumny macierzy unitarnej tworzą bazę w $\mathbb{C}^n$.

5. Macierz unitarna zachowuje iloczyn skalarny. Istotnie,
$(\mathbf{Uu}) \circ (\mathbf{Uv}) = (\mathbf{Uu})^\dagger (\mathbf{Uu}) = \mathbf{u}^\dagger \mathbf{U}^\dagger \mathbf{U} \mathbf{v} = \mathbf{u}^\dagger \mathbf{v} = \mathbf{u} \circ \mathbf{v}$.

6. Każda *rzeczywista* macierz ortogonalna jest unitarna.

Macierze hermitowskie

Mówię, że macierz $\mathbf{H} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ jest hermitowska, jeżeli

$$\mathbf{H}^\dagger = \mathbf{H} \tag{33}$$

Macierze hermitowskie są uogólnieniem pojęcia macierzy symetrycznych, rzeczywistych na przypadek zespolony i dzielą z nimi szereg własności.

- Każda macierz symetryczna, rzeczywista jest hermitowska.
- Wartości własne macierzy hermitowskich są rzeczywiste, choć odpowiadające im wektory własne mogą być zespolone.

- Wektory własne macierzy hermitowskich do różnych wartości własnych są ortogonalne w sensie (25).
- Unormowane wektory własne macierzy hermitowskiej tworzą bazę w $\mathbb{C}^n$.
- Macierz hermitowską można zdiagonalizować za pomocą *unitarnej transformacji podobieństwa*

$$\text{diag}\left\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\right\} = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{U} \tag{34}$$

  gdzie kolejne unormowane wektory własne $\mathbf{H}$ stanowią kolejne kolumny unitarnej macierzy $\mathbf{U}$.
- Odwrotność macierzy hermitowskiej, jeśli istnieje, jest hermitowska.
- Każda unitarna transformacja podobieństwa (nie tylko transformacja diagonalizująca) zachowuje hermitowskość.
- Jeżeli macierz $\mathbf{H}$ jest hermitowska, macierz $\exp(it\mathbf{H})$ jest unitarna.

Istotnie,

$$(\exp(it\mathbf{H}))^\dagger = \exp\left((it\mathbf{H})^\dagger\right) = \exp\left(-it\mathbf{H}^\dagger\right) = \exp(-it\mathbf{H}) \tag{35a}$$

wobec czego

$$\exp(it\mathbf{H})\,(\exp(it\mathbf{H}))^\dagger = \exp(it\mathbf{H})\,\exp(-it\mathbf{H}) = \mathbb{I} \tag{35b}$$

Przykład

Znajdźmy wartości i wektory własne macierzy

$$\mathbf{H} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{36}$$

Jest to macierz hermitowska. W celu znalezienia wartości własnych obliczamy

$$P(\lambda) = \begin{vmatrix} -\lambda & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -\lambda & i & 0 \\ 0 & -i & -\lambda & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -\lambda \end{vmatrix} \tag{37}$$

Jest to wyznacznik 4×4. Obliczymy go korzystając z rozwinięcia Laplace'a względem pierwszej kolumny

$$
\begin{aligned}
P(\lambda) &= (-\lambda)(-1)^{1+1}\begin{vmatrix} -\lambda & i & 0 \\ -i & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda \end{vmatrix} + 1\cdot(-1)^{4+1}\begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -\lambda & i & 0 \\ -i & -\lambda & 0 \end{vmatrix} \\
&= -\lambda(-\lambda^3+\lambda) - (\lambda^2-1) = \lambda^4 - 2\lambda^2 + 1 \\
&= (\lambda^2-1)^2 = (\lambda-1)^2(\lambda+1)^2 \qquad (38)
\end{aligned}
$$

Wartościami własnymi są $\lambda = 1$, $\lambda = -1$, obie dwukrotnie zdegenerowane.

Aby znaleźć wektory własne odpowiadające $\lambda = 1$ podstawiamy tę wartość i wektor o składowych oznaczonych a, b, c, d do równania $\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$

i otrzymujemy

$$\begin{aligned} -a+d &= =0 && \text{(39a)} \\ -b+ic &= 0 && \text{(39b)} \\ -ib-c &= 0 && \text{(39c)} \\ a-d &= 0 && \text{(39d)} \end{aligned}$$

z których tylko dwa są niezależne. Wektory własne do wartości własnej $\lambda = 1$ zależą od dwóch parametrów i muszą mieć postać

$$\begin{bmatrix} a \\ ic \\ c \\ a \end{bmatrix} \tag{40}$$

i jak długo mają postać (40), można je wybrać dowolnie. *Wygodnie* je dobrać tak, aby były ortogonalne, na przykład (po unormowaniu)

$$\mathbf{e}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{i}{2} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e}_2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{i}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} \tag{41}$$

Powtarzamy tę samą procedurę dla $\lambda = -1$:

$$a + d = 0 \tag{42a}$$
$$b + ic = 0 \tag{42b}$$
$$-ib + c = 0 \tag{42c}$$
$$a + d = 0 \tag{42d}$$

wobec czego wektory własne do wartości własnej $\lambda = -1$ muszą mieć postać

$$\begin{bmatrix} a \\ -ic \\ c \\ -a \end{bmatrix} \tag{43}$$

Zauważmy, że wszystkie wektory postaci (43) są ortogonalne do już znalezionych wektorów $\mathbf{e}_1$, $\mathbf{e}_2$. Jako wzajemnie ortogonalną parę wektorów postaci (43) wybieramy

$$\mathbf{e}_3 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{i}{2} \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{e}_4 = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{i}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \tag{44}$$

Rozkład spektralny macierzy hermitowskiej

Niech $\mathbf{H} \in \mathbb{C}^{n\times n}$ będzie macierzą hermitowską, $\{\lambda_i\}_{i=1}^n$ jej wartościami własnymi, a $\{\mathbf{e}_i\}_{i=1}^n$ odpowiadającymi im unormowanymi wektorami własnymi, tworzącymi bazę w $\mathbb{C}^n$. Wówczas rozkład spektralny macierzy $\mathbf{H}$ ma postać

$$\mathbf{H} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \, \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i^\dagger \,. \tag{45}$$

Rozkład spektralny a funkcja wykładnicza

Przypuśćmy, że jakaś macierz $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{N\times N}$ posiada rozkład spektralny

$$\mathbf{B} = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \, \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j^{\dagger} \tag{46}$$

gdzie wektory $\mathbf{e}_j, j = 1, \dots, N$ spełniają

$$\mathbf{e}_j \circ \mathbf{e}_k = \mathbf{e}_j^{\dagger} \mathbf{e}_k = \delta_{jk} \tag{47}$$

(wektory $\mathbf{e}_j$ są unormowane i wzajemnie ortogonalne). Wiemy, że macierze hermitowskie oraz symetryczne, rzeczywiste posiadają rozkłady spektralne postaci (46), ale także pewne inne macierze posiadają rozkład tego typu.

Wówczas, po pierwsze,

$$
\begin{aligned}
\mathbf{B}\mathbf{e}_l &= \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \, \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j^{\dagger} \mathbf{e}_l = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \, \mathbf{e}_j \, \delta_{jl} \\
&= \lambda_l \, \mathbf{e}_l
\end{aligned}
\tag{48}
$$

czyli wektor $\mathbf{e}_l, l = 1, \dots, N$ jest wektorem własnym macierzy $\mathbf{B}$ do wartości własnej λ_l.

Po drugie,

$$
\mathbf{e}_j \mathbf{e}_j^{\dagger} \cdot \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k^{\dagger} = \mathbf{e}_j \cdot (\mathbf{e}_j \circ \mathbf{e}_k) \cdot \mathbf{e}_k^{\dagger} = \delta_{jk} \, \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k^{\dagger} \tag{49}
$$

Zauważmy, że

$$
\begin{aligned}
\mathbf{B}^{2} &= \left(\sum_{j=1}^{N} \lambda_j \, \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j^{\dagger}\right)^2 = \left(\sum_{j=1}^{N} \lambda_j \, \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j^{\dagger}\right) \left(\sum_{k=1}^{N} \lambda_k \, \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k^{\dagger}\right) \\
&= \sum_{j,k=1}^{N} \lambda_j \lambda_k \, \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j^{\dagger} \cdot \mathbf{e}_k \mathbf{e}_k^{\dagger} = \sum_{j,k=1}^{N} \delta_{jk} \, \lambda_j \lambda_k \, \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k^{\dagger} \\
&= \sum_{j=1}^{N} \lambda_j^{2} \, \mathbf{e}_j \mathbf{e}_j^{\dagger} \qquad (50)
\end{aligned}
$$

i podobnie dla wszystkich potęg $\mathbf{B}^{n}, n \in \mathbb{N}$.

Wobec tego dla dowolnego $a \in \mathbb{C}$

$$\begin{aligned}
\exp\left(a\,\mathbf{B}\right) &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\mathbf{B}^n = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\sum_{j=1}^{N}\lambda_j^n\,\mathbf{e}_j\mathbf{e}_j^{\dagger} \\
&= \sum_{j=1}^{N}\left(\sum_{n=0}^{\infty}\frac{a^n}{n!}\,\lambda_j^n\right)\mathbf{e}_j\mathbf{e}_j^{\dagger} \\
&= \sum_{j=1}^{N} e^{a\lambda_j}\,\mathbf{e}_j\mathbf{e}_j^{\dagger} \qquad (51)
\end{aligned}$$

Jest to zgodne z podaną wyżej, (10), definicją funkcji macierzy poprzez rozwinięcie spektralne.