3. prednáška

Lineárna algebra III – hermitovsky združený operátor, hermitovský operátor, unitárny operátor, vlastné vektory a vlastné hodnoty operátora, tenzorový súčin, projekčné operátory

3.1 Hermitovsky združený operátor

Nech A je lineárny operátor definovaný nad unitárnym priestorom H.

Definícia 3.1. Operátor A^+ sa nazýva ***hermitovsky združený*** operátor k operátoru A vtedy a len vtedy, ak pre každé $\alpha,\beta \in H$ platí

$$(A\alpha,\beta) = (\alpha, A^+\beta)$$

Vlastnosti hermitovsky združeného operátora sú súhrnne obsiahnuté v tejto vete

Veta 3.1.
(1) Ak A je lineárny operátor, potom aj A^+ je lineárny operátor.
(2) Keď operátor A je v ortonormálnej báze $B = \{\beta_1, \beta_2, ..., \beta_n\}$ reprezentovaný maticou $\boldsymbol{A} = \left(A_{ij} = (\beta_i, A\beta_j)\right)$, potom hermitovsky združený operátor A^+ je reprezentovaný maticou $\boldsymbol{A}^+ = \left(A^+_{ij} = (\beta_i, A^+\beta_j)\right)$, pričom maticové elementy $A^+_{ij} = A^*_{ji}$ (hovoríme, že matica $\boldsymbol{A}^+$ je hermitovsky združená k matici $\boldsymbol{A}$.
(3) $(AB)^+ = B^+A^+$.
(4) $(A^+)^+ = A$.
(5) $(A \pm B)^+ = A^+ \pm B^+$.
(6) $(aA)^+ = a^*A^+$.

Táto vetra je dokázaná v príklade 3.1.

Pomocou hermitovsky združeného operátora sa môžu definovať dva druhy operátorov, ktoré majú centrálny význam v kvantovej teórii:

(a) ***Hermitovský operátor***, $A^+ = A$.
(b) ***Unitárny operátor***, $AA^+ = A^+A = E$, kde E je jednotkový operátor.

Unitárny operátor U zachováva vzťahy ortonormality pre množinu ortonormálnych vektorov $\mathcal{B}=\{\beta_1,\beta_2,...,\beta_n\}$, kde $(\beta_i,\beta_j)=\delta_{ij}$. Nech

$$\mathcal{B}'=U\mathcal{B}=\{U\beta_1,U\beta_2,...,U\beta_n\}=\{\beta_i'=U\beta_i;i=1,2,...,n\}$$

je množina vektorov, ktoré vznikla aplikáciou U na vektory množiny $\mathcal{B}$. Jednoducho dokážeme, že vektory $\mathcal{B}'$ tvoria taktiež ortonormálny systém

$$(e_i',e_j')=(Ue_i,Ue_j)=\left(e_i,\underbrace{U^+U}_{E}e_j\right)=(e_i,e_j)=\delta_{ij}$$

Na základe tohto výsledku môžeme aplikáciu unitárneho operátora na systém vektorov interpretovať, ako rotáciu celého systému okolo jedného bodu.

Maticová reprezentácia $\boldsymbol{A}$ hermitovského operátora A vyhovuje podmienke $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^+$, alebo vyjadrené pomocou maticových elementov dostaneme

$$A_{ji}^*=A_{ij} \tag{3.1}$$

To znamená, že hermitovská matica $\boldsymbol{A}$ sa nemení ak ju transponujeme a komplexne združíme. Ilustračný príklad hermitovsky združenej matice je uvedený v príklade 3.2.

Maticová reprezentácia unitárneho operátora vyhovuje podmienkam

$$\boldsymbol{AA}^+=\boldsymbol{A}^+\boldsymbol{A}=\boldsymbol{E}$$

Ak prepíšeme tieto rovnice pomocou riadkov alebo stĺpcov matice tak dostaneme, že platí táto veta:

Veta 3.2. Matica $\boldsymbol{U}$ je unitárna vtedy a len vtedy, ak jej riadky (stĺpce) tvoria ortonormálny systém.

Dôkaz tejto vety je uvedený v príklade 3.3.

Nech A je lineárny operátor nad unitárnym priestorom H. ***Vlastný problém*** pre operátor A má tvar

$$A\alpha=\lambda\alpha \tag{3.2}$$

kde nenulový vektor $\alpha\in H$ sa nazýva ***vlastný vektor*** a skalár $\lambda\in\mathcal{C}$ sa nazýva ***vlastná hodnota***. Použitím Gaussovej fundamentálnej vety algebry je možné dokázať, že pre každý operátor A rovnica (3.2) má aspoň jedno riešenie (t. j. existuje aspoň jedna vlastná hodnota λ a k nej pridružený vlastný vektor α taký, že platí rovnica $A\alpha=\lambda\alpha$).

V našich ďalších úvahách budeme predpokladať, že operátor A je hermitovský. Tento predpoklad umožňuje, aby vlastný problém (3.2) dve dôležité vlastnosti:

Veta 3.3.
(1) Vlastné hodnoty hermitovského operátorta sú realné.
(2) Vlastné vektory vektory α_1 a α_2 patriace rôznym vlastným hodnotám $\lambda_1\neq\lambda_2$ sú ortogonálne, $(\alpha_1,\alpha_2)=0$. Slabšia verzia tejto vlastnosti (A nie je hermitovský operátor) je, že charakteristickické vektory α_1 a α_2 patriace rôznym vlastným hodnotám $\lambda_1\neq\lambda_2$ sú lineárne nezávislé.

Dôkaz tejto vety je vykonaný v príklade 3.4.

Veta 3.4.
(1) Vlastné hodnoty λ_i unitárneho operátora U ležia na jednotkovej kružnici v komplexnej rovine, $|\lambda_i|=1$.

(2) Vlastné vektory α_1 a α_2 patriace rôznym vlastným hodnotám $\lambda_1 \neq \lambda_2$ sú ortogonálne.

Dôkaz tejto vety je vykonaný v príklade 3.5.

Študujme ***sekulárny determinant*** priradený operátoru A

$$det(A-\lambda E) = det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{E}) \tag{3.3}$$

Podobne, ako v predchádzajúcich dvoch prípadoch stopy a determinantu, aj teraz ľahko dokážeme, že hodnota sekulárneho determinantu nezávisí od zmeny báze pri tvorbe maticovej reprezentácie

$$det(\boldsymbol{B}-\lambda\boldsymbol{E}) = det(\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}-\lambda\boldsymbol{E}) = det\left[\boldsymbol{T}^{-1}(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{E})\boldsymbol{T}\right] = det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{E}) \tag{3.4}$$

Výpočtom determinantu na pravej strane upravíme túto formulu do tvaru ***sekulárnej rovnice*** (niekedy aj ***sekulárny polynóm***)

$$det(A-\lambda E) = det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{E}) = \lambda^n + c_1\lambda^{n-1} + \ldots + c_{n-1}\lambda + c_n \tag{3.5}$$

kde $c_1 = Tr(A)$ a $c_n = Det(A)$, ostatné koeficienty $c_2,\ldots,c_{n-1}$ patria taktiež k invariantom operátora A. Podľa Gaussovej fundamentálnej vety algebry, každá algebraická rovnica má aspoň jeden koreň (komplexný), použitím tejto dôležitej vety, môžeme vlastný polynóm prepísať do tvaru

$$det(A-\lambda E) = (\lambda-\lambda_1)^{k_1}(\lambda-\lambda_2)^{k_2}\ldots(\lambda-\lambda_p)^{k_p} \tag{3.6}$$

kde $\lambda_1,\lambda_2,\ldots,\lambda_p$ sú vlastné hodnoty operátora A, exponenty $k_1,k_2,\ldots,k_p \geq 0$ špecifikujú násobnosť vlastných hodnôt, vyhovujú podmienke $k_1+k_2+\ldots+k_p = n$. Ak pre λ_i platí k_i=1 (k_i>1), potom charakteristická hodnota sa nazýva ***nedegenerovaná*** (***degenerovaná***). Význam týchto exponentov spočíva v tom, že špecifikujú dimenziu charakteristického podpriestoru $H_i \subset H$ obsahujúceho vlastné vektory, ktoré sú priradené vlastnej hodnote λ_i

$$dim(H_i) = k_i \tag{3.7}$$

$$\varphi \in H_i \Rightarrow A\varphi = \lambda_i\varphi \tag{3.8}$$

V dôsledku podmienky ortogonálnosti medzi vlastnými vektormi, ktoré sú priradené rôznym charakteristickým hodnotám, podpriestory $H_i \subset H$ sú navzájom ortogonálne. Priama suma týchto podpriestorov špecifikuje priestor H nad ktorým je definovaný operátor A

$$H = H_1 \oplus H_2 \oplus \ldots \oplus H_n \tag{3.9}$$

Podpriestor H_i obsahuje vektoru, ktoré sú riešením homogénneho systému

$$(A-\lambda_i E)\varphi = o \tag{3.10}$$

kde homogénny systém má nenulové (netriviálne) riešenie vtedy, ak $r(A-\lambda_i E) < n$, pričom $n - r(A-\lambda_i E) = k_i$, čiže homogénny systém má práve k_i lineárne nezávislých riešení. Pomocou Schmidtovho ortogonalizačného procesu v každom podpriestore H_i môžeme zostrojiť ortonormálnu bázu $\mathcal{B}_i = \left\{\varphi_1^{(i)},\varphi_2^{(i)},\ldots,\varphi_{k_i}^{(i)}\right\}$, alebo $H_i = span\left(\varphi_1^{(i)},\varphi_2^{(i)},\ldots,\varphi_{k_i}^{(i)}\right)$. Potom priestor H vyjadrený ako priama suma (3.9) vlastných podpriestorov H_i má bázu, ktorá vznikne zjednotením báz týchto vlastných podpriestorov

$$\mathcal{B} = \{\psi_1,\psi_2,\ldots,\psi_n\} = \bigcup_{i=1}^{p} \mathcal{B}_i \tag{3.11}$$

Veta 3.5. (Nazývaná ***veta o úplnosti***) Nech A je hermitovský operátor definovaný nad unitárnym priestorom H, potom ľubovoľný vektor $\varphi \in H$ môže byť vyjadrený ako lineárna kombinácia vektorov ortonormálnej báze $\mathcal{B}$

$$\varphi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + \ldots + a_n\psi_n \tag{3.12}$$

Veta je dokázaná v príklade 3.6.

Nech dva hermitovské operátory A a B definované nad unitárnym priestorom H, navzájom ***komutujú***, $AB = BA$, čo sa alternatívne môže zapísať pomocou operácie komutátora, $[A,B]=0$, kde $[A,B]=AB-BA$. Pre jednoduchosť predpokladajme, že vlastné hodnoty operátorov A a B sú nedegenerované, t. j. vlastné podpriestory $H_i^{(A)}$ a $H_i^{(B)}$ sú jednorozmerné. Nech $A\varphi_i = \lambda_i\varphi_i$, potom $BA\varphi_i = \lambda_i B\varphi_i$, ak využijeme vlastnosť komutácie operátorov A a B, potom taktiež musí platiť $A(B\varphi_i) = \lambda_i(B\varphi_i)$. Z tejto vlastnosti vyplýva, že tak φ_i, ako aj $B\varphi_i$ sú vlastné vektory operátora A, ktoré sú priradené vlastnej hodnote λ_i. Pretože sme postulovali 1-rozmernosť vlastných podpriestorov, potom vektory φ_i, ako aj $B\varphi_i$ sa „kolineárne", t. j. $B\varphi_i = \mu_i\varphi_i$, kde μ_i je reálne číslo, ktoré môžeme interpretovať ako vlastnú hodnotu operátora B.

Veta 3.6. Komutujúce operátory A a B majú spoločný systém vlastných vektorov.

3.2 Tenzorový súčin

Nech H a G sú unitárne priestory, ich ***tenzorový súčin*** je asociatívna binárna operácia, ktorá každej dvojici vektorov $\alpha \in H$ a $\beta \in G$ priradí usporiadanú dvojicu $\alpha \otimes \beta$, pričom platia tieto axiómy:

(1) $(\alpha_1 + \alpha_2)\otimes\beta = \alpha_1\otimes\beta + \alpha_2\otimes\beta$,

(2) $\alpha\otimes(\beta_1+\beta_2) = \alpha\otimes\beta_1 + \alpha\otimes\beta_2$,

(3) $a(\alpha\otimes\beta) = (a\alpha)\otimes\beta = \alpha\otimes(a\beta)$

(4) $(\alpha_1\otimes\beta_1, \alpha_2\otimes\beta_2) = (\alpha_1,\beta_1)(\alpha_2,\beta_2)$

Prvé tri axiómy špecifikujú tenzorový súčin ako „lineárnu operáciu", štvrtá operácia špecifikuje skalárny súčin pre vektory, ktoré vznikli pomocou tenzorového súčinu.

Ak priestory H a G majú bázy $\mathcal{B}_1 = \{\alpha_1,\alpha_2,\ldots,\alpha_n\}$ resp. $\mathcal{B}_2 = \{\beta_1,\beta_2,\ldots,\beta_m\}$, potom tenzorový súčin týchto báz

$$\mathcal{B} = \mathcal{B}_1\otimes\mathcal{B}_2 = \{\alpha_i\otimes\beta_j\,;\, i=1,2,\ldots,n,\ j=1,2,\ldots,m\}$$

je interpretovaný ako báza tenzorového súčinu $H\otimes G$, t. j.

$$F = H\otimes G = span(\mathcal{B}_1\otimes\mathcal{B}_2)$$

To znamená, že každý vektor $\gamma\in H\otimes G$ je určený ako lineárna kombinácia elementov z tenzorového súčinu báz $\mathcal{B} = \mathcal{B}_1\otimes\mathcal{B}_2 = \{\alpha_i\otimes\beta_j\}$

$$\gamma = \sum_{i,j} c_{ij}(\alpha_i\otimes\beta_j) \tag{3.13}$$

Dimenzia priestoru F je špecifikovaná súčinom dimenzií priestorov H a G

$$dim(H\otimes G) = dim(H)\cdot dim(G) \tag{3.14}$$

Veta 3.7. Nech $\mathcal{B}_1=\{\alpha_1,\alpha_2,...,\alpha_n\}$ resp. $\mathcal{B}_2=\{\beta_1,\beta_2,...,\beta_m\}$ sú bázy priestorov H resp. G. Vektory tenzorového súčinu týchto báz sú lineárne nezávislé, t. j. tvoria bázu priestoru $H\otimes G=span(\mathcal{B}_1\otimes\mathcal{B}_2)$.

Dôkaz tejto vety je uvedený v príklade 3.8.

Viacnásobný tenzorový súčin vektorov $\alpha_1,\alpha_2,...,\alpha_n$ môžeme alternatívne interpretovať ako usporiadanú n-ticu vektorov

$$\alpha_1\otimes\alpha_2\otimes...\otimes\alpha_n=\alpha_1\alpha_2...\alpha_n=(\alpha_1,\alpha_2,...,\alpha_n) \tag{3.14}$$

Nech lineárne operátory A a B sú definované v unitárnych priestoroch H resp. G, potom tenzorový súčin operátorov $A\otimes B$ je definovaný nad priestorom $H\otimes G$ spôsobom, ktorý automaticky zabezpečuje jeho lineárnosť

$$(A\otimes B)(\alpha\otimes\beta)=(A\alpha)\otimes(B\beta) \tag{3.15}$$

Maticovú reprezentáciu operátora $A\otimes B$ v priestore $H\otimes G$ zostrojíme v báze $\mathcal{B}_1\otimes\mathcal{B}_2$ takto: Nech maticová reprezentácia operátora A (B) v báze $\mathcal{B}_1=\{\alpha_1,\alpha_2,...,\alpha_n\}$ ($\mathcal{B}_2=\{\beta_1,\beta_2,...,\beta_m\}$) je matica $\boldsymbol{A}$ ($\boldsymbol{B}$), potom

$$\begin{aligned}(A\otimes B)(\alpha_i\otimes\beta_j)&=(A\alpha_i)\otimes(B\beta_j)=\left(\sum_k A_{ki}\alpha_k\right)\otimes\left(\sum_l B_{lj}\beta_l\right)\\&=\sum_{k,l}A_{ki}B_{lj}(\alpha_k\otimes\beta_l)=\sum_{k,l}(A\otimes B)_{kl,ij}(\alpha_k\otimes\beta_l)\end{aligned}$$

alebo

$$(A\otimes B)_{kl,ij}=A_{ki}B_{lj}$$

To znamená, že maticová reprezentácia operátora $A\otimes B$ v báze $\mathcal{B}_1\otimes\mathcal{B}_2$ má tvar vo forme tenzorového (Kroneckerovho) súčinu matíc

$$\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}A_{11} & A_{12} & ... & A_{1n}\\ A_{21} & Aa_{22} & ... & A_{2n}\\ ... & ... & ... & ...\\ A_{n1} & A_{n2} & ... & A_{nn}\end{pmatrix}\otimes\begin{pmatrix}B_{11} & B_{12} & ... & B_{1m}\\ B_{21} & B_{22} & ... & B_{2m}\\ ... & ... & ... & ...\\ B_{m1} & B_{m2} & ... & B_{mm}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}A_{11}\boldsymbol{B} & ... & A_{1n}\boldsymbol{B}\\ ... & ... & ...\\ A_{n1}\boldsymbol{B} & ... & A_{nn}\boldsymbol{B}\end{pmatrix} \tag{3.15}$$

Jednoduchý ilustračný príklad tenzorového súčinu matíc je uvedený v príklade 3.8.

3.3 Projekčné operátory

Nech unitárny priestor H sa rovná priamej sume dvoch podpriestorov H_1 a H_2, $H=H_1\oplus H_2$. To znamená, že každý vektor $\alpha\in H$ môže byť jednoznačne vyjadrený ako suma dvoch vektorov z H_1 resp. H_2,

$$\alpha=\alpha_1+\alpha_2 \tag{3.16}$$

Definícia 3.2. Operátor P_1 sa nazýva ***projekčný operátor*** na podpriestor H_1 vtedy a len vtedy, ak pre každé $\alpha\in H$ platí $P_1\alpha=\alpha_1$.

Podobným spôsobom sa môže definovať aj projektor P_2 na podpriestor H_2, jednotlivé projekčné operátory vyhovujú podmienkam

$$P_1^2 = P_1,\ P_2^2 = P_2 \text{ a } P_1P_2 = 0 \tag{3.17a}$$

$$P_1 + P_2 = 1 \tag{3.17b}$$

Dôkaz týchto vlastností je uvedený v príklade 3.9.

Definíciu projektoru na podpriestor môžeme zovšeobecniť pre všeobecnú priamu sumu podpriestorov

$$H = H_1 \oplus H_2 \oplus \ldots \oplus H_n \tag{3.18}$$

Nech P_i je projektor na podpriestor H_i , potom (3.17) môžeme zovšeobecniť takto

$$P_iP_j = \delta_{ij}P_i \tag{3.18a}$$

$$\sum_{i=1}^{n} P_i = 1 \tag{3.18b}$$

Predpokladajme, že podpriestory z $H = H_1 \oplus H_2$ sú navzájom ortogonálne, to znamená, že

$$\forall(\alpha \in H_1)\forall(\beta \in H_2):(\alpha,\beta) = 0$$

Projektory na tieto podpriestory sú nielen idenpotentné ale aj hermitovské (dôkaz tejto vlastnosti je uvedený v príklade 3.10)

$$P_1^2 = P_1,\ P_2^2 = P_2 \text{ a } P_1P_2 = 0 \tag{3.19a}$$

$$P_1 = P_1^+,\ \ P_2 = P_2^+ \tag{3.19b}$$

$$P_1 + P_2 = 1 \tag{3.19c}$$

Zostrojíme maticovú reprezentáciu projekčného operátora P v ortonormálnych bázach $\mathcal{B}_1 = \{\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n\}$ resp. $\mathcal{B}_2 = \{\alpha'_1, \alpha'_2, \ldots, \alpha'_m\}$, pričom P je projektor na $H_1 = span\{\mathcal{B}_1\}$, ortogonálny komplement k H_1 je označený $H_2 = span\{\mathcal{B}_2\}$, kde $H = H_1 \oplus H_2$. Pre maticové elementy projekčného operátora platí

$$\langle \alpha_i | P | \alpha_j \rangle = \delta_{ij} \quad \left(pre\ \forall \alpha_i, \alpha_j \in \mathcal{B}_1\right) \tag{3.20a}$$

$$\langle \alpha_i | P | \alpha'_j \rangle = 0 \quad \left(pre\ \forall(\alpha_i \in \mathcal{B}_1)\forall(\alpha'_j \in \mathcal{B}_2)\right) \tag{3.20b}$$

$$\langle \alpha'_i | P | \alpha'_j \rangle = 0 \quad \left(pre\ \forall \alpha'_i, \alpha'_j \in \mathcal{B}_2\right) \tag{3.20c}$$

Potom maticová reprezentácia projektora P v bázach $\mathcal{B}_1$ a $\mathcal{B}_2$ má tvar matice

$$\boldsymbol{P} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{E}_1 & \boldsymbol{0}_{12} \\ \boldsymbol{0}_{12}^T & \boldsymbol{0}_{22} \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{ccc|ccc} 1 & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ldots & 1 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & \ldots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & \ldots & 0 & 0 & \ldots & 0 \end{array}\right) \tag{3.21}$$

kde $\boldsymbol{E}_1$ je jednotková matica typu (n,n), $\boldsymbol{0}_{12}$ je nulová matica typu (n,m) a $\boldsymbol{0}_{22}$ je nulová matica typu (m,m).

Veta 3.7. Stopa maticovej reprezentácie $\boldsymbol{P}$ sa rovná stope projektora P

$$Tr(P) = n = dim(H_1) \tag{3.22}$$

Sekulárny determinant (3.6) môžeme prepísať do tvaru

$$det\left(P-\lambda E\right)=\left(\lambda-1\right)^{n}\left(\lambda\right)^{m} \tag{3.23}$$

To znamená, že projektor P má dve vlastné hodnoty: jednotkovú vlastnú hodnotu $\lambda_1=1$, ktorá je n-násobná a nulovú vlastnú hodnotu $\lambda_2=0$, ktorá je m-násobná.

Príklady

Príklad 3.1. Dokážte vlastnosti (1-6) hermitovsky združeného operátora, ktoré sú uvedené vo vete 3.1.

Príklad 3.2. Študujme maticu

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 1+i\\ 1-i & -1\end{pmatrix}$$

Potom hermitovsky združená matica má tvar

$$\boldsymbol{A}^{+}=\begin{pmatrix}1 & \left(1-i\right)^{*}\\ \left(1+i\right)^{*} & -1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 1+i\\ 1-i & -1\end{pmatrix}=\boldsymbol{A}$$

To znamená, že táto matica je hermitovská.

Príklad 3.3. Dokážte vetu 3.2

Príklad 3.4. Dokážte vetu 3.3.

Príklad 3.5. Dokážte vetu 3.4.

Príklad 3.6. Dokážte vetu 3.5.

Príklad 3.8. Zostrojte tenzorový súčin matíc

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix}1 & 2\\ 1 & -1\end{pmatrix} \text{ a } \boldsymbol{B}=\begin{pmatrix}2 & 1 & -1\\ 0 & 1 & 1\\ -2 & 1 & 0\end{pmatrix}.$$

Príklad 3.9. Dokážte vlastnosti (3.17a-b).

Príklad 3.10. Dokážte, že podpriestory H_1 a H_2 z rozkladu $H=H_1\oplus H_2$ sú ortogonálne vtedy a len vtedy, keď projektory na tieto podpriestory sú hermitovské.