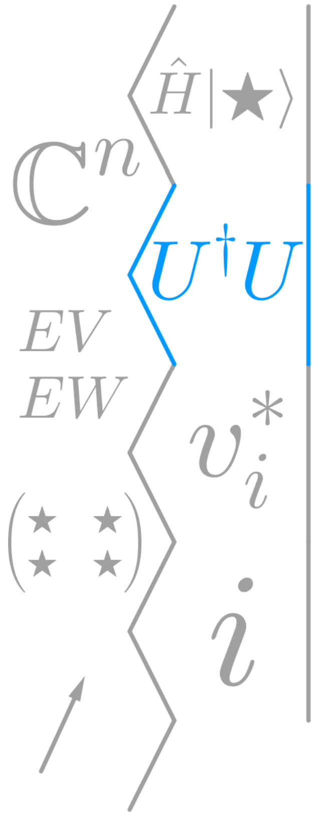
Familie Matrix

18. März 2019



Dieser Baustein widmet sich den vielen verschiedenen und zunächst unübersichtlichen Eigenschaften, die Matrizen aufweisen. Es ist wichtig diese Eigenschaften bestimmen zu können, da damit viele verschiedene physikalische Zusammenhänge verstanden werden können. Besonders wichtig werden uns die Begriffe „unitär“ und „hermitesch“ sein. Beispielsweise kann eine beobachtbare Größe durch eine hermitesche Operator (u.a. eine Matrix) beschrieben werden.
Außerdem bietet der Baustein wichtige Erkennungsmerkmale für bestimmte Eigenschaften.

Einstiegsbeispiele

$$\left\langle U^\dagger U \right|$$

E1 Berechnen Sie $A^5 = A \cdot A \cdot A \cdot A \cdot A$ für die Matrix $A = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$.

E2 Berechnen Sie A^5 für die Matrix $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$.

E3 Berechnen Sie das Matrixexponential der Einheitsmatrix $e^{\mathbb{1}}$.

E4 Berechnen Sie das Matrixexponential der Matrix $M = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}$, also e^M.

E5 Berechnen Sie für die Matrix M aus Aufgabe E4 $\sin\left(\frac{\pi}{2} M\right)$.

E6 Überprüfen Sie, ob M aus Aufgabe E4 symmetrisch oder orthogonal ist. Handelt es sich bei dieser Matrix um eine Projektion?

E7 Überprüfen Sie, ob die Matrix $M = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} i & i \\ i & i \end{pmatrix}$ unitär oder hermitesch ist. Handelt es sich bei dieser Matrix um eine Projektion?

Die nachstehenden Eigenschaften beziehen sich nur auf 2×2-Matrizen. Es gibt Matrizen, die keine der Eigenschaften erfüllen.
Es gibt auch eine gewisse Hierarchie unter den Matrixeigenschaften. Auf diese Hierarchien soll, soweit sie für die Physik wichtig ist, eingegangen werden. Außerdem soll immer wieder ein Bogen zur Quantenmechanik gezogen werden.

1 Diagonalisierbare Matrizen und Basiswechsel

In diesem Kapitel wollen wir uns darüber Gedanken machen, wie man mit Matrizen operieren kann. Wir werden sehen, dass uns das Diagonalisieren dabei helfen kann. Wie der Name bereits vermuten lässt, wollen wir eine beliebige Matrix auf eine Diagonalgestalt

$$\begin{pmatrix} \star & 0 \\ 0 & \star \end{pmatrix}$$

bringen. Wie die Aufgaben E1 und E2 bereits gezeigt haben lässt sich mit solchen Matrizen viel einfacher hantieren. Sehen Sie sich das Ergebnis von der Aufgabe E1 noch einmal genau an. Es würde ausreichen die Elemente der Hauptdiagonalen mit 5 zu potenzieren um auf das richtige Ergebnis zu kommen (Ü1).

Jetzt stellt sich allerdings die Frage, wie wir eine beliebige Matrix in diese Form bringen oder ob das überhaupt möglich ist. In vergangenen Bausteinen haben wir bereits einiges über Abbildungen gelernt und vor allem auch, dass diese durch Matrizen beschrieben werden können. Wir müssen ein Problem daher richtig anschauen. Dazu ein Do-it-yourself Experiment. Bitte lesen Sie diesen Text.

> „Es gab eine Zeit, als Zeitungen sagten, nur zwölf Menschen verständen die Relativitätstheorie. Ich glaube nicht, dass es jemals eine solche Zeit gab. Auf der anderen Seite denke ich, es ist sicher zu sagen, niemand versteht Quantenmechanik.“- Richard Feynman, The Character of Physical Law, MIT-Press 1967, Kapitel 6

Haben Sie den Text versucht auf dem Kopf stehend zu lesen oder haben Sie ihr Blatt auf den Kopf gestellt? Beides ist natürlich eine zulässige Vorgehensweise, jedoch wird es für viele Personen einfacher sein das Blatt zu drehen. Mathematisch gesehen haben Sie mit dieser Strategie einen Basiswechsel durchgeführt. Sie haben Ihr Problem um $180°$ gedreht um es zu vereinfachen. Für viele physikalisch relevante Problemstellungen können Sie ein System finden, indem sich dieses Problem wesentlich vereinfacht. In vielen dieser Fälle kann uns ein Basiswechsel dabei helfen. Wir wollen hier nur die für uns wichtigen Endergebnisse besprechen. Dem interessierten Leser wird dabei ein Buch zur Linearen Algebra empfohlen.

Die Fragestellung lautet nun, wie wir eine gegebene Matrix A, die eine Abbildung beschreibt in zwei verschiedenen Basen $B = \{b_1; b_2\}$ und $B' = \{b_1'; b_2'\}$ darstellen können. Der Einfachheit halber beschreiben wir dies anhand eines Beispiels. Dazu betrachten wir die beiden Basen

$$B = \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$$

und

$$B' = \left\{ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \end{pmatrix} \right\}.$$

Ein beliebiger Vektor kann sowohl in der Basis B als auch in der Basis B' eindeutig dargestellt werden (Ü2). Auch die Matrix A hängt von der jeweils verwendeten Basis ab, wobei der Zusammenhang

$$A' = S^{-1} A S$$

gilt. Die Matrix S wechselt dabei von der Basis B zur Basis B' und die Matrix S^{-1} von der Basis B' zur Basis B. In unserem angegeben Beispiel ist das Finden dieser Matrix S sehr einfach, da die Basis B' um $90°$ gedreht zur Basis B ist. Es gilt daher

$$S = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Durch invertieren der Matrix S erhält man

$$S^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Wir haben gesehen, dass die Standardbasis oft nicht die zweckmäßigste ist und wissen jetzt auch, wie wir zwischen Basen wechseln können. Doch wie finden wir die Basis in der unser Problem am Besten beschrieben werden kann. Zum Rechnen haben wir gesehen, dass es am besten ist, wenn eine Matrix Diagonalgestalt hat. Sehen wir uns daher das folgende Beispiel an.
Wir wollen den Einheitskreis abbilden. Dazu betrachten wir die Abbildungsmatrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Diese bildet den Kreis auf eine Ellipse ab (Abbildung 1). Wie kann man diese Ellipse nun am besten darstellen. Da die Hauptachse der Ellipse nicht auf der x-Achse liegt ist wohl die Standardbasis nicht die einfachste. Wir wollen Basisvektoren, die entlang der

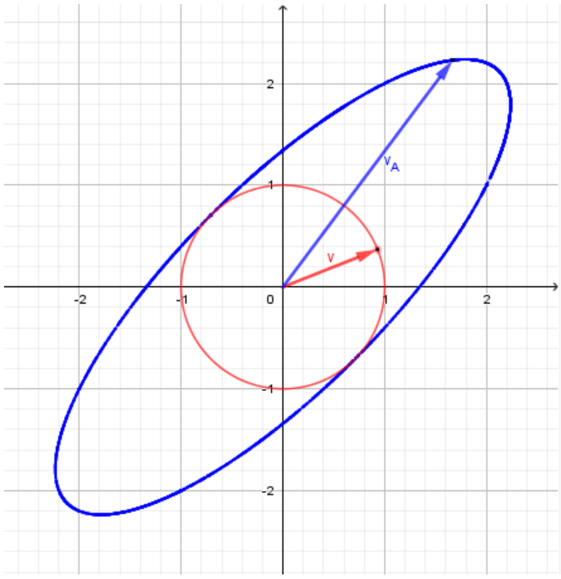


Abbildung 1: Hier sieht man das Bild des Einheitskreises unter der Abbildung, die durch die Matrix A beschrieben wird.

Haupt- beziehungsweise Nebenachse ausgerichtet sind. Aus dem Baustein „Eigenwerte und Eigenvektoren“ wissen wir bereits, dass das genau die Eigenvektoren sind. Da wir von der Standardbasis ausgegangen sind ist es relativ einfach die Basiswechselmatrix aufzustellen, denn sie enthält spaltenweise nur die neuen Basisvektoren. In unserem Fall sind das gerade die (normierten) Eigenvektoren:

$$S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Invertieren wir diese Matrix, so erhalten wir

$$S^{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Wir wollen die Abbildungsmatrix A nun in dieser Basis darstellen und verwenden dazu Gleichung (1). Daraus erhalten wir die Matrix (Ü3)

$$A' = \begin{pmatrix} 3 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Wir erkennen sofort, dass wir auf diese Weise eine Diagonalmatrix gefunden haben. Man kann leicht nachrechnen, dass sie die Eigenwerte der Matrix A enthält. Dieses Verfahren heißt **Diagonalisieren**.

Wir können eine Matrix A in der Form

$$A = SDS^{-1}$$

darstellen. Dabei beinhaltet die Diagonalmatrix D die Eigenwerte und die Matrix S die Eigenvektoren.

Wir müssen uns nun noch fragen, ob dieses Verfahren immer funktioniert. Wir haben einige Fälle kennengelernt, welche bei der Berechnung von Eigenvektoren auftreten können. Die Matrix S muss auf jeden Fall invertierbar sein. Da sie die Eigenvektoren enthält muss es daher möglich sein, aus solchen eine entsprechende Matrix zu kreieren. Für zweidimensionale Matrizen A gilt daher, dass wir auf jeden Fall zwei Eigenvektoren brauchen. Allgemein kann man diese Forderung folgendermaßen formulieren

Die Matrix A ist genau dann diagonalisierbar, wenn ihre geometrische und algebraische Vielfachheit übereinstimmt.

Wir müssen daher noch die Begriffe der Vielfachheit klären:

- **algebraische Vielfachheit:** Man versteht darunter, wie häufig eine bestimmte Nullstelle im charakteristischen Polynom vorkommt.
- **geometrische Vielfachheit:** Dieser Begriff gibt die Dimension des Eigenraums an. Sie liegt zwischen 1 und der algebraischen Vielfachheit eines Eigenwerts.

Funktionen von Matrizen

Mit diesem Wissen ausgestattet können wir noch einmal darüber nachdenken, wie man das Berechnen von Potenzen von Matrizen vereinfachen kann. Wir gehen von einer diagonalisierbaren Matrix A aus. Man kann A daher folgendermaßen schreiben:

$$A = SDS^{-1}$$

Davon ausgehend kann A^2 wie nachstehend geschrieben werde:

$$A^2 = \left(SDS^{-1}\right)\left(SDS^{-1}\right) = SD^2S^{-1}$$

Dies gilt für alle Potenzen von A.

Wir wollen uns im folgenden auch fragen, ob und vor allem wie wir Funktionen auf Matrizen anwenden können. Den Anfang soll die Exponentialfunktion machen. Wir kennen die Taylorreihenentwicklung reeller Funktionen:

$$e^x = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} x^k$$

Ganz analog definieren wir für eine Matrix A das Matrixexponential

$$e^A := \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} A^k$$

Das können wir berechnen, da wir ja schon wissen, wie man Matrizen potenziert. Allerdings kann die Berechnung über die Definition sehr zeitaufwendig sein, weshalb wir uns im folgenden Gedanken darüber machen, wie wir diesen Vorgang vereinfachen können.
Beginnen wir dazu mit dem Matrixexponential einer Diagonalmatrix.

$$e^{\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}} = \exp \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}^k$$

Aus der Übungsaufgabe Ü1 wissen wir bereits, dass

$$\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}^k = \begin{pmatrix} a^k & 0 \\ 0 & b^k \end{pmatrix}$$

gilt. Auch den Vorfaktor können wir in die Matrix multiplizieren und da wir wissen, dass man Matrizen komponentenweise addiert, kann man sich leicht überzeugen, dass

$$\exp \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} a^k & 0 \\ 0 & \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} b^k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^a & 0 \\ 0 & e^b \end{pmatrix}$$

gilt. In diesem Fall darf man das Exponential somit in die Matrix ziehen.
Auch für diagonalisierbare Matrizen ist dies ähnlich einfach:

$$e^A = S e^D S^{-1}$$

Für unsere Zwecke reicht es aus, Funktionen diagonalisierbarer Matrizen zu berechnen. Auch die trigonometrischen Funktionen Sinus und Kosinus können auf Matrizen angewendet werden. Dies funktioniert analog zur Exponentialfunktion

Für diagonalisierbare Matrizen können die folgenden Matrixfunktionen vereinfacht berechnet werden:

- $e^A = Se^D S^{-1}$
- $\sin A = S \sin(D) S^{-1}$
- $\cos A = S \cos(D) S^{-1}$

2 Normale Matrizen

Eine reelle quadratische Matrix A wird normal genannt, wenn

$$A^T A = AA^T$$

Für komplexe Matrizen gilt in diesem Fall

$$A^\dagger A = AA^\dagger$$

Normale Matrizen haben die folgenden Eigenschaften:

1. Normale Matrizen kommutieren mit ihrer Adjungierten/Transponierten.
2. Eine Matrix ist genau dann normal, wenn sie unitär diagonalisierbar ist. Das bedeutet, dass sie diagonalisierbar ist und die Matrix S unitär ist.
3. Reelle symmetrische beziehungsweise komplexe hermitesche Matrizen sind normal.
4. Normale Matrizen sind genau diejenigen, die eine Orthonormalbasis aus Eigenvektoren besitzen.

3 Unitäre und orthogonale Matrizen

Diese beiden Definitionen haben wir bereits bei den „Matrizen“ beziehungsweise bei den „Komplexen Vektoren“ kennengelernt und bemerkt, dass sie sich in vielen Dingen ähnlich sehen. Zur Erinnerung sind nachstehend noch einmal beide Eigenschaften angeführt:

Eine reelle und quadratische Matrix A wird orthogonal genannt, wenn

$$A^T A = AA^T = \mathbb{1}$$

gilt. Aus dieser Bedingung kann man leicht ableiten, dass auch

$$A^T = A^{-1}$$

erfüllt ist.

Eine komplexe und quadratische Matrix A wird unitär genannt, wenn

$$A^\dagger A = AA^\dagger = \mathbb{1}$$

gilt. Aus dieser Bedingung kann man leicht ableiten, dass auch

$$A^\dagger = A^{-1}$$

erfüllt ist.

Durch den Vergleich dieser Definitionen sehen wir, dass alle orthogonalen Matrizen auch unitär sind. Es gibt allerdings orthogonale Matrizen, die nicht unitär sind. Es gilt somit:

$$A \text{ ist orthogonal} \Rightarrow A \text{ ist unitär}$$

Sollte Ihnen diese Aussage nicht sofort klar sein, denken Sie noch einmal darüber nach, dass adjungieren und transponieren bei reellen Matrizen gleichbedeutend ist.
Das Arbeiten mit unitären Matrizen bringt einen weiteren bedeutenden Vorteil. Es ist manchmal mit viel Arbeit verbunden Matrizen zu invertieren. Die Inverse einer Matrix benötigen wir allerdings oft für das Wechseln von einer Basis in eine andere.

4 Hermitesche und symmetrische Matrizen

Ein ähnlicher Zusammenhang wie jenen den die unitären und die orthogonalen Matrizen aufweisen kann auch für die hermiteschen und symmetrischen Matrizen aufgestellt werden.

Eine quadratische Matrix A wird symmetrisch genannt, wenn

$$A = A^T$$

gilt.

Eine komplexe und quadratische Matrix A wird hermitisch genannt, wenn

$$A = A^\dagger$$

gilt.

Da wir im Allgemeinen immer mit komplexen Zahlen rechnen, werden wir eher die zweite dieser Definitionen benötigen. Oft verwendet man auch den Begriff der **selbstadjungierten** Matrix, der im reellen Fall der ersten und im komplexen Fall der zweiten Definition entspricht.
Wir wollen hier einige wichtige Eigenschaften von hermitischen Matrizen besprechen.

1. Hermitische Matrizen haben nur reelle Eigenwerte. Da die Eigenwerte den Erwartungswerten entsprechen bedeutet das, dass wir durch die Verwendung von hermitischen Operatoren nur reelle Messergebnisse erhalten. Eine sehr wünschenswerte Eigenschaft für die Physik.

2. Hermitische Matrizen sind normal. Überlegen Sie sich warum?

3. Hermitische Matrizen sind stets unitär diagonalisierbar. Das bedeutet, dass jede hermitische Matrix A in der Form $A = UDU^\dagger$ geschrieben werden kann. Dabei ist U eine unitäre Matrix und D eine Diagonalmatrix. Die Vorteile dieser Darstellung haben wir im ersten Kapitel dieses Bausteins bereits besprochen.

5 Projektionen

Ein weiterer wichtiger Begriff soll zu guter Letzt noch besprochen werden. Die sogenannte Projektion.

Eine Matrix P wird Projektion genannt, wenn

$$P \cdot P = P$$

gilt.

Beginnen wir wieder mit einem einfachen Beispiel, dass veranschaulichen soll, wie eine Projektion wirkt. Betrachten wir das Bild der Matrix (Ü5)

$$P = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \tag{3}$$

Sie können im File „Figuren abbilden“ versuchen selbst herauszufinden, wie diese Matrix wirkt. In Abbildung 2 ist zu sehen, wie der Einheitskreis unter dieser Abbildung aussieht. Man sieht beziehungsweise kann berechnen, dass die Eigenwerte der Matrix

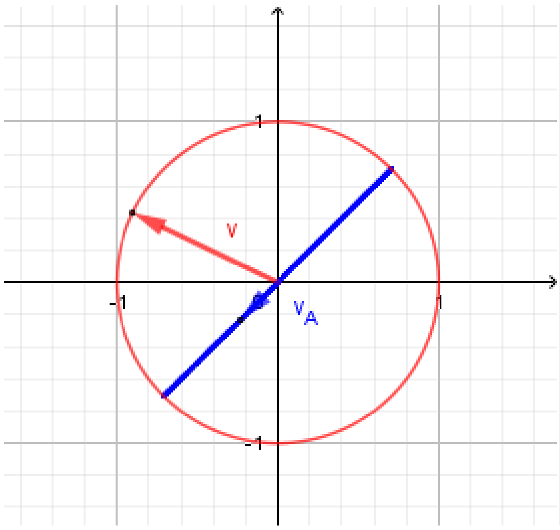


Abbildung 2: Hier sieht man das Bild des Einheitskreises unter der Abbildung, die durch die Projektionsmatrix P beschrieben wird.

P $\lambda_1 = 0$ und $\lambda_2 = 1$ sind. Die Eigenvektoren dazu sind $\vec{v}_1 = \begin{pmatrix} \frac{-1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}^T$ zum Eigenwert λ_1 und $\vec{v}_2 = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}^T$ zum Eigenwert λ_2. Es fällt auf, dass wir hier mit einer entarteten Ellipse zu tun haben. Man kann sich eine Projektion auch als Schatten vorstellen. Dabei gibt der Eigenvektor zum Eigenwert 0 die Projektionsrichtung vor und der Eigenvektor zum Eigenwert 1 die Gerade auf die projiziert wird.

Doch ist es Zufall, dass die Projektionsmatrix P die Eigenwerte 0 und 1 hat oder ist dies eine Eigenschaft, die alle Projektionen teilen? Um diese Frage zu beantworten wollen wir uns die Eigenwertgleichung ansehen

$$Pv = \lambda v. \tag{4}$$

Wir multiplizieren diese Gleichung nun mit P (von links) und erhalten dadurch

$$PPv = \lambda Pv$$

Wir wissen allerdings aus der Definition, dass $P \cdot P = P$ gilt. Auf der rechten Seite können wir Pv durch λv ersetzen.

$$Pv = \lambda^2 v$$

Wenn wir dieses Ergebnis nun mit Gleichung (4) vergleichen erkennen wir, dass

$$\lambda^2 = \lambda$$

gelten muss. Dies gilt allerdings nur für die Werte 0 und 1. Daher gilt Allgemein:

Projektionen haben stets die Eigenwerte 0 und 1.

Übungsaufgaben

$$\left\langle U^\dagger U \right|$$

Ü1 Berechnen Sie A^5 für die Matrix $A = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}$ für beliebige Werte von a und b.

Ü2 Stellen Sie die beiden Vektoren $\vec{v} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$ und $\vec{w} = \begin{pmatrix} -4 \\ 3 \end{pmatrix}$ bezüglich der Basis B in der Basis B' dar.

Ü3 Rechnen Sie Gleichung (2) nach.

Ü4 Zeigen Sie, dass die Paulimatrizen $\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ und $\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ hermitesch und unitär sind.

Ü5 Zeigen Sie, dass es sich bei der Matrix P in Gleichung (3) um eine Projektion handelt.