

Notatki do ćwiczeń z Algebry z Geometrią II

Wojciech Niedziółka

12 Sprzężenie hermitowskie, rzuty ortogonalne, notacja bra-ket

Na początek pewne przypomnienie, algebra z geometrią II jest przedmiotem, w którym zajmujemy się skończone wymiarowymi przestrzeniami wektorowymi, poniższe pojęcia mogą zostać uogólnione do nieskończone wymiarowych przestrzeni wektorowych, ale jest to materiał na inny przedmiot. Niestety mechanika kwantowa "dzieje się" w nieskończone wymiarowych przestrzeniach wektorowych, więc intuicje których tutaj nabierzemy mogą zawodzić, choć powinny być wystarczające dla większości sytuacji.

Definicja 32. Niech V, W będą przestrzeniami wektorowymi z iloczynem skalarnym (zwykle będziemy rozważać $V = W$). Sprzężeniem hermitowskim operatora liniowego (macierzy) $A \in L(V, W)$ nazywamy **jedyny taki operator** $A^\dagger \in L(W, V)$ (czytaj "a krzyż", lub po angielsku "a dagger", jest też czasem oznaczany symbolem A^* w tekstach matematycznych), dla którego zachodzi

$$\forall_{v \in V, w \in W} \langle A^\dagger w | v \rangle_V = \langle w | Av \rangle_W$$

gdzie $\langle \cdot | \cdot \rangle_W$ jest iloczynem skalarnym na przestrzeni wektorowej W , a $\langle \cdot | \cdot \rangle_V$ iloczynem skalarnym na przestrzeni wektorowej V .

Działając na obie strony równości z definicji sprzężeniem zespolonym i korzystając z $\overline{\langle x | y \rangle} = \langle y | x \rangle$ otrzymujemy równość

$$\forall_{v \in V, w \in W} \langle v | A^\dagger w \rangle_V = \langle Av | w \rangle_W$$

Sprzężenie hermitowskie pozwala nam "przerzucić" operator na drugą stronę iloczynu skalarnego, ta operacja pojawia się nągminnie w mechanice kwantowej i jest niemal tak powszechna jak dodawanie i mnożenie.

Fakt 33. Sprzężenie hermitowskie ma następujące własności. Oznaczenia: V, W, W_2 - przestrzenie wektorowe nad $\mathbb{C}$, $A, B \in L(V, W)$, $C \in L(W, W_2)$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$

- $(A^\dagger)^\dagger = A$
- $(A^\dagger)^{-1} = (A^{-1})^\dagger$
- $(\alpha A + \beta B)^\dagger = \bar{\alpha} A^\dagger + \bar{\beta} B^\dagger$
- $(CA)^\dagger = A^\dagger C^\dagger$

Przykład 34. Znajdźmy sprzężenie hermitowskie operatora na $\mathbb{C}^2$ (ze standardowym iloczynem skalarnym i bazą e_1, e_2) danego macierzą

$$A = \begin{pmatrix} 1 & i \\ -3 & 1+i \end{pmatrix}$$

Z definicji mamy, że dla dowolnych wektorów $v, w \in \mathbb{C}^2$ zachodzi $\langle A^\dagger v | w \rangle = \langle v | Aw \rangle$, możemy znaleźć z definicji $A^\dagger$ analizując prawą stronę równania i przekształcając ją do postaci $\langle \tilde{v} | w \rangle$

$$\begin{aligned} RHS &= \langle v | Aw \rangle = \langle v_1 e_1 + v_2 e_2 | (1w_1 + iw_2) e_1 + (-3w_1 + (1+i)w_2) e_2 \rangle \\ &= \overline{v_1} (1w_1 + iw_2) + \overline{v_2} (-3w_1 + (1+i)w_2) \\ &= (\overline{1v_1} - 3\overline{v_2}) w_1 + (\overline{iv_1} + (1+i)\overline{v_2}) w_2 \\ &= \left\langle (\overline{1v_1} - 3\overline{v_2}) e_1 + (\overline{iv_1} + (1+i)\overline{v_2}) e_2 \middle| w_1 e_1 + w_2 e_2 \right\rangle \\ &= \langle \tilde{v} | w \rangle = LHS \\ \tilde{v} &= (1v_1 - 3v_2) e_1 + (-iv_1 + (1-i)v_2) e_2 = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & -3 \\ -i & 1-i \end{pmatrix}}_{=A^\dagger} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Ponieważ $A^\dagger$ jest jednoznaczne, możemy być pewni, że macierz, którą otrzymaliśmy to szukane $A^\dagger$

Okazuje się, że można uogólnić powyższy przykład do następującego faktu

Fakt 35. Niech V, W - przestrzenie wektorowe z bazami ortonormalnymi e, f , a $F \in L(V, W)$ - operator liniowy z V do W . Jeśli $[F]_e^f$ jest macierzą operatora liniowego F w bazach e, f , to macierz operatora $F^\dagger$ jest dana wzorem $[F^\dagger]_f^e = \left([F]_e^f\right)^T$. Tzn jeśli pracujemy w bazach ortonormalnych, to by dostać macierz sprzężenia hermitowskiego wystarczy zadziałać transpozycją i sprzężeniem zespolonym (w dowolnej kolejności)

Definicja 36. Niech V będzie przestrzenią wektorową. Rzutem nazywamy operator $P \in \text{End}(V)$ spełniający $P = P^2$. Dodatkowo, jeśli spełnione jest $P = P^\dagger$, P nazywamy rzutem ortogonalnym

Przykład 37. Niech $V = \mathbb{R}^2$, $A = \begin{pmatrix} -3 & -2 \\ 6 & 4 \end{pmatrix}$ jest macierzą rzutu. Sprawdźmy to

$$A^2 = \begin{pmatrix} -3 & -2 \\ 6 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -3 & -2 \\ 6 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 & -2 \\ 6 & 4 \end{pmatrix} = A$$

Nie jest ona macierzą rzutu ortogonalnego, bo

$$A^\dagger = \begin{pmatrix} -3 & -2 \\ 6 & 4 \end{pmatrix}^\dagger = \begin{pmatrix} -3 & 6 \\ -2 & 4 \end{pmatrix} \neq A$$

Fakt 38. Jeśli P jest rzutem na przestrzeni wektorowej V , zachodzi $V = \ker P \oplus \text{im } P$ (przestrzeń wektorowa jest sumą prostą jądra i obrazu rzutu), tzn dowolny wektor $v \in V$ ma **jednoznaczny** rozkład $v = v_{\ker} + v_{\text{im}}$, gdzie $v_{\ker} \in \ker P$, $v_{\text{im}} \in \text{im } P$. Mamy dodatkowo wzory na składowe v : $v_{\ker} = (\mathbb{1} - P)v$,

$v_{\text{im}} = Pv$. Można je wyprowadzić korzystając z faktu, że v_{ker} jest elementem jądra (P w działaniu na v_{ker} daje zero) i v_{im} jest elementem obrazu (jest postaci Pw dla pewnego w)

$$Pv = \underbrace{Pv_{\text{ker}}}_{=0} + Pv_{\text{im}} = Pv_{\text{im}} = PPw = Pw = v_{\text{im}}$$

$$v_{\text{ker}} = v - v_{\text{im}} = (\mathbb{1} - P)v$$

Jeśli rzut jest ortogonalny, zachodzi dodatkowo $\ker P = (\text{im } P)^\perp$ (jądro jest dopełnieniem ortogonalnym obrazu i vice versa). Okazuje się, że $\mathbb{1} - P$ też jest rzutem, bo $(\mathbb{1} - P)^2 = \mathbb{1} - 2P + P^2 = \mathbb{1} - P$. Jest on zwany dopełnieniem rzutu P , mamy $\text{im}(\mathbb{1} - P) = \ker P$ i $\ker(\mathbb{1} - P) = \text{im } P$

Przykład 37 (cd). Znajdźmy jądro i obraz rzutu $A = \begin{pmatrix} -3 & -2 \\ 6 & 4 \end{pmatrix}$. Przy szukaniu jądra możemy się wspomóc redukcją wierszową, a szukając obrazu redukcją kolumnową

$$\ker(A) = \ker \begin{pmatrix} 3 & 2 \end{pmatrix} = \left\langle \underbrace{\begin{pmatrix} 2 \\ -3 \end{pmatrix}}_{=v_1} \right\rangle$$

$$\text{im}(A) = \text{im} \begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix} = \left\langle \underbrace{\begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}}_{=v_2} \right\rangle$$

v_1, v_2 to liniowo niezależne wektory, więc $\mathbb{R}^2$ faktycznie jest sumą prostą jądra i obrazu rzutu (te wektory tworzą bazę). Dodatkowo łatwo się przekonujemy, że nie są one swoimi dopełnieniami ortogonalnymi (rzut nie jest ortogonalny), $\langle v_1 | v_2 \rangle = -8 \neq 0$

Definicja 39. Notacja bra-ket (notacja Diraca), używana w mechanice kwantowej, to sposób zapisywania elementów przestrzeni wektorowej i dualnej. Możemy to sobie wyobrazić tak, że dzielimy napis $\langle v | w \rangle$ (zwany **braket** po angielsku) na dwie części, lewą $\langle v |$ zwaną bra, oraz prawą $|w\rangle$ zwaną ket. Formalnie mamy przestrzeń wektorową V z iloczynem skalarnym $\langle \cdot | \cdot \rangle$, ket jest oznaczeniem na element przestrzeni wektorowej $w \in V$, piszemy $|w\rangle$. Przyporządkowanie to jest liniowe, tzn $|\alpha w_1 + \beta w_2\rangle = \alpha |w_1\rangle + \beta |w_2\rangle$. Natomiast $\langle v |$ to taki obiekt, który może zadziałać na ket (element przestrzeni wektorowej) i daje w rezultacie element ciała $\mathbb{C}$. Takie obiekty nazywa się elementami przestrzeni dualnej V^* (czyli $\langle v | \in V^*$ i $\langle v | : V \rightarrow \mathbb{C}$), to odwzorowanie jest dane wzorem $\langle v | : |w\rangle \mapsto \langle v | w \rangle$. Ta notacja ułatwia bardzo rachunki. Jeśli pracujemy w bazie ortonormalnej $\{e_1, e_2, \dots, e_n\}$ możemy zapisać w reprezentacji

macierzowej bra, ket, iloczyn skalarny oraz operatory liniowe

$$w = w_1 e_1 + w_2 e_2 + \dots + w_n e_n$$

$$v = v_1 e_1 + v_2 e_2 + \dots + v_n e_n$$

$$|w\rangle = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix}$$

$$\langle v| = (\bar{v}_1 \quad \bar{v}_2 \quad \dots \quad \bar{v}_n)$$

$$\langle v|w\rangle = (\bar{v}_1 \quad \bar{v}_2 \quad \dots \quad \bar{v}_n) \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix} = \bar{v}_1 w_1 + \bar{v}_2 w_2 + \dots + \bar{v}_n w_n$$

$$|w\rangle \langle v| = \begin{pmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_n \end{pmatrix} (\bar{v}_1 \quad \bar{v}_2 \quad \dots \quad \bar{v}_n) = \begin{pmatrix} w_1 \bar{v}_1 & w_1 \bar{v}_2 & \dots & w_1 \bar{v}_n \\ w_2 \bar{v}_1 & w_2 \bar{v}_2 & \dots & w_2 \bar{v}_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_n \bar{v}_1 & w_n \bar{v}_2 & \dots & w_n \bar{v}_n \end{pmatrix}$$

Obiekt $|w\rangle \langle v|$ może działać na element V , bra w działaniu na wektor daje nam liczbę zespoloną, więc w rezultacie otrzymujemy ket pomnożony przez liczbę, czyli element przestrzeni wektorowej, działanie to jest liniowe, więc $|w\rangle \langle v| \in \text{End}(V)$ (ket razy bra jest endomorfizmem - odwzorowaniem liniowym z V do V), ma więc macierz, która jest obliczona powyżej. Dodatkowo dla operatorów liniowych $|w\rangle \langle v|$ zachodzi $(|w\rangle \langle v|)^\dagger = |v\rangle \langle w|$

Zad. 12.1

Sprawdzić, że wektory

$$u = \begin{pmatrix} \frac{1+i}{2} \\ -\frac{1+i}{2} \\ 0 \end{pmatrix} \quad v = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1+i}{2} \end{pmatrix} \quad w = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1+i}{2} \end{pmatrix}$$

stanowią bazę ortonormalną przestrzeni $\mathbb{C}^3$ ze standardowym iloczynem skalarnym. Dla każdego wektora i pary wektorów znajdź macierz rzutu ortogonalnego na podprzestrzeń rozpiętą przez ten wektor/wektory

Rozw. 12.1

Korzystając z tego, że $\overline{\frac{1+i}{2} \frac{1+i}{2}} = \left| \frac{1+i}{2} \right|^2 = \frac{1}{2}$ mamy

$$\begin{aligned}\langle u|v \rangle &= \frac{\overline{1+i}}{2} \frac{1}{2} - \frac{\overline{1+i}}{2} \frac{1}{2} + 0 \frac{1+i}{2} = 0 \\ \langle u|w \rangle &= -\frac{\overline{1+i}}{2} \frac{1}{2} + \frac{\overline{1+i}}{2} \frac{1}{2} + 0 \frac{1+i}{2} = 0 \\ \langle v|w \rangle &= -\frac{\overline{1}}{2} \frac{1}{2} - \frac{\overline{1}}{2} \frac{1}{2} + \frac{\overline{1+i}}{2} \frac{1+i}{2} = 0 \\ \|u\|^2 &= \frac{\overline{1+i}}{2} \frac{1+i}{2} + \frac{\overline{1+i}}{2} \frac{1+i}{2} + 0 = 1 \\ \|v\|^2 &= \frac{\overline{1}}{2} \frac{1}{2} + \frac{\overline{1}}{2} \frac{1}{2} + \frac{\overline{1+i}}{2} \frac{1+i}{2} = 1 \\ \|w\|^2 &= \frac{\overline{-1}}{2} \frac{-1}{2} + \frac{\overline{-1}}{2} \frac{-1}{2} + \frac{\overline{1+i}}{2} \frac{1+i}{2} = 1\end{aligned}$$

Układ u, v, w jest istotnie bazą ortonormalną ($\dim \mathbb{C}^3 = 3$). Żeby znaleźć rzuty ortogonalne na podprzestrzeń rozpiętą przez te wektory posłużymy się notacją bra-ket (oznaczenia, P_u - rzut na podprzestrzeń rozpiętą przez u , podobnie P_v i P_w). Zastanówmy się, jakie własności ma operator liniowy $|u\rangle\langle u|$. Po pierwsze jest to rzut ortogonalny, bo $(|u\rangle\langle u|)^2 = |u\rangle\langle u|u\rangle\langle u| = |u\rangle\langle u|$, oraz $(|u\rangle\langle u|)^\dagger = |u\rangle\langle u|$. Jego obrazem jest przestrzeń rozpiętą przez u , bo jeśli zadziałamy nim na dowolny wektor $u' \in V$, dostaniemy $|u\rangle$ pomnożony przez stałą

$$(|u\rangle\langle u|)|u'\rangle = |u\rangle \underbrace{\langle u|u'\rangle}_{\in \mathbb{C}}$$

Ponieważ to rzut ortogonalny to jądro jest zbiorem wszystkich wektorów ortogonalnych do u (widać to też z powyższego rachunku, warunek należenia do jądra to $\langle u|u'\rangle = 0$). Mamy przepis na rzut ortogonalny na podprzestrzeń rozpiętą przez wektor u , jest to $P_u = |u\rangle\langle u|$, analogicznie dla P_v i P_w

$$\begin{aligned}P_u = |u\rangle\langle u| &= \begin{pmatrix} \frac{1+i}{2} \\ -\frac{1+i}{2} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1-i}{2} & -\frac{1-i}{2} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ P_v = |v\rangle\langle v| &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \\ \frac{1+i}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & \frac{1-i}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1-i}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & \frac{1-i}{4} \\ \frac{1+i}{4} & \frac{1+i}{4} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ P_w = |w\rangle\langle w| &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ \frac{1+i}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1-i}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{1-i}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} & -\frac{1-i}{4} \\ -\frac{1+i}{4} & -\frac{1+i}{4} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Zauważmy, że zachodzi $P_u + P_v + P_w = \mathbb{1}$, jest to przykład tak zwanego rozkładu jedynek. Chcemy jeszcze znaleźć rzuty na podprzestrzeń rozpiętą przez pary wektorów, przeanalizujmy najpierw rzut na

$\langle u, v \rangle$, oznaczmy go $P_{u,v}$. Możemy podejść do tego na dwa sposoby: **I sposób:** zauważmy, że skoro u, v, w to baza ortonormalna, to $\langle u, v \rangle^\perp = \langle w \rangle$. Ponieważ jądro i obraz rzutu ortogonalnego są swoimi dopełnieniami ortogonalnymi, to $\text{im } P_{u,v} = \langle u, v \rangle$, $\text{ker } P_{u,v} = \langle w \rangle$. Z drugiej strony dopełnienie tego rzutu spełnia $\text{im}(\mathbb{1} - P_{u,v}) = \text{ker } P_{u,v} = \langle w \rangle = \text{im } P_w$ i $\text{ker}(\mathbb{1} - P_{u,v}) = \text{im } P_{u,v} = \langle u, v \rangle = \text{ker } P_w$. Rzut $P_{u,v}$ jest związany z rzutem P_w wzorem $P_{u,v} = \mathbb{1} - P_w$. Innymi słowy suma rzutu ortogonalnego na pewną podprzestrzeń W i rzutu ortogonalnego na jej dopełnienie ortogonalne $W^\perp$ wynosi $\mathbb{1}$, $P_W + P_{W^\perp} = \mathbb{1}$. **II sposób:** mamy rzuty P_u i P_v , można się zastanowić czy jest jakiś związek pomiędzy nimi i rzutem $P_{u,v}$. Okazuje się, że $P_u + P_v = P_{u,v}$. Sprawdźmy to, po pierwsze czy ich suma jest rzutem ortogonalnym?

$$(P_u + P_v)^2 = P_u^2 + P_v^2 + P_u P_v + P_v P_u = P_u + P_v + |u\rangle \underbrace{\langle u|v\rangle}_{=0} \langle v| + |v\rangle \underbrace{\langle v|u\rangle}_{=0} \langle u| = P_u + P_v$$

$$(P_u + P_v)^\dagger = P_u^\dagger + P_v^\dagger = P_u + P_v$$

Zgadza się, ich suma jest rzutem ortogonalnym. Czy $P_u + P_v$ jest faktycznie rzutem na podprzestrzeń $\langle u, v \rangle$? Zadziałajmy rzutem $P_u + P_v$ na dowolny wektor x

$$(P_u + P_v)|x\rangle = P_u|x\rangle + P_v|x\rangle = |u\rangle \underbrace{\langle u|x\rangle}_{\in \mathbb{C}} + |v\rangle \underbrace{\langle v|x\rangle}_{\in \mathbb{C}}$$

Obraz to podprzestrzeń rozpięta przez u, v Mamy $\text{ker}(P_u + P_v) = \langle w \rangle$ i $\text{im}(P_u + P_v) = \langle u, v \rangle$, więc faktycznie $P_u + P_v = P_{u,v}$. Stosując dowolną z tych metod obliczamy

$$\begin{aligned} P_{u,v} = P_u + P_v = \mathbb{1} - P_w &= \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} & \frac{1-i}{4} \\ -\frac{1}{4} & \frac{3}{4} & \frac{1-i}{4} \\ \frac{1+i}{4} & \frac{1+i}{4} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ P_{u,w} = P_u + P_w = \mathbb{1} - P_v &= \begin{pmatrix} \frac{3}{4} & -\frac{1}{4} & -\frac{1-i}{4} \\ -\frac{1}{4} & \frac{3}{4} & -\frac{1-i}{4} \\ -\frac{1+i}{4} & -\frac{1+i}{4} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ P_{v,w} = P_v + P_w = \mathbb{1} - P_u &= \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Możemy sobie podsumować ogólne wersje faktów, których użyliśmy (wyprowadziliśmy) w powyższym zadaniu

Fakt 40 (rozkład jedynek). Niech $e_1, e_2, \dots, e_n$ będzie bazą przestrzeni wektorowej V , zachodzi wtedy

$$\sum_{i=1}^n |e_i\rangle \langle e_i| = \mathbb{1}$$

Używając tego faktu, w mechanice kwantowej stosuje się zapis na rozkład wektora w bazie

$$|\Psi\rangle = \mathbb{1} |\Psi\rangle = \sum_{i=1}^n |e_i\rangle \langle e_i|\Psi\rangle$$

Fakt 41. Niech W będzie podprzestrzenią V , P_W rzutem ortogonalnym na tę podprzestrzeń, a $P_{W^\perp}$ rzutem ortogonalnym na jej dopełnienie ortogonalne, wtedy

$$P_W + P_{W^\perp} = \mathbb{1}$$

Fakt 42. Niech $P_1, P_2 \in \text{End}(V)$ - rzuty, mamy wtedy

$$(P_1 + P_2 \text{ jest rzutem}) \Leftrightarrow (P_1 P_2 = 0 = P_2 P_1)$$