矩阵对角化、特征向量

赵晓菲

2023 年 7 月 31 日

自伴（厄米）矩阵及其特征值

命题： 自伴（厄米）矩阵的特征值必须是实数。

- 如果一个矩阵 M 是自伴（厄米）矩阵，表示为 $M^\dagger = M$。
- 假设 λ 是它的第 i 个特征值，而 $|v_i\rangle$ 是对应的特征向量，按照特征值问题的定义，我们有：

$$M|v_i\rangle = \lambda|v_i\rangle$$

- 对于向量 $M|v_i\rangle$，我们可以计算其与 $|v_i\rangle$ 的内积，这是 M 将 $|v_i\rangle$ 旋转后的向量：

$$\langle v_i|M|v_i\rangle = \langle v_i|h|v_i\rangle = \lambda\langle v_i|v_i\rangle$$

自伴（厄米）矩阵及其特征值

- 继续，我们可以将上述等式重写为：

$$\langle v_i|M|v_i\rangle = \langle v_i|M|v_i\rangle^* = \lambda\langle v_i|v_i\rangle$$

- 我们可以将 λ 拉出来，因为它只是一个标量。令 (i|i) 为 1，即假设 M 的特征向量是归一化的。注意，(i|i) 表示 $|v_i\rangle$ 的模长的平方。
- 另一方面，我们还知道 $(i|M|i) = (iM^\dagger|i)*$，根据方程 (8.10) 和伴随矩阵的定义，我们交换 bra 和 ket 空间的向量，取 M 的伴随矩阵，并对结果的标量进行复共轭。然而，由于 M 是自伴矩阵，$(i|M^\dagger i)* = (i|M|i)*$。

自伴（厄米）矩阵及其特征值

- 由于 M 是自伴（厄米）矩阵，我们可以进一步推导出：

$$\lambda = \lambda^*$$

- 这意味着 λ 必须是实数，因为它等于其复共轭。
- 因此，我们得出结论：自伴（厄米）矩阵的特征值一定是实数。

矩阵对角化和特征值（第二种方法）

假设我们有一个 $n \times n$ 的矩阵 A，我们希望找到它的特征值。
方法 2：特征值方程
我们可以使用特征值方程来求解特征值。

- 首先，我们需要找到 $A - \lambda I$ 的行列式为零的值，其中 I 是 $n \times n$ 的单位矩阵，λ 是我们要求解的特征值。
- 表示为：$\det(A - \lambda I) = 0$。
- 这个方程称为特征值方程。
- 解特征值方程，我们就能得到 n 个特征值 $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$。

矩阵对角化和特征值（第二种方法）

对角化
如果我们找到了 A 的 n 个线性无关的特征向量 $v_1, v_2, ..., v_n$，对应的特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$，我们可以将 A 对角化。

矩阵对角化和特征值（第二种方法）

- 首先，我们将这些特征向量按列组成一个矩阵 V，称为特征向量矩阵。

$$V = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ v_1 & v_2 & \cdots & v_n \\ | & | & & | \end{bmatrix}$$

- 接下来，我们将特征值按对角线排列成一个对角矩阵 Λ。

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}$$

- 最后，我们可以使用特征向量矩阵 V 和特征值矩阵 Λ 来对角化矩阵 A。

$$A = V\Lambda V^{-1}$$

矩阵对角化和特征值

如果我们用矩阵的特征向量组成的基来表示该矩阵，那么这个矩阵就是对角化的。

对角化

假设矩阵 A 有 n 个线性无关的特征向量 $v_1, v_2, ..., v_n$，对应的特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$，我们可以将 A 对角化。

矩阵对角化和特征值

- 首先，我们将这些特征向量按列组成一个矩阵 V，称为特征向量矩阵。

$$V = \begin{bmatrix} | & | & & | \\ v_1 & v_2 & \cdots & v_n \\ | & | & & | \end{bmatrix}$$

- 接下来，我们将特征值按对角线排列成一个对角矩阵 Λ。

$$\Lambda = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \lambda_n \end{bmatrix}$$

- 最后，我们可以使用特征向量矩阵 V 和特征值矩阵 Λ 来对角化矩阵 A。

$$A = V\Lambda V^{-1}$$

特征值方程
我们还可以通过解特征值方程来找到矩阵的特征值。
假设 A 是一个 $n \times n$ 的矩阵，λ 是我们要求解的特征值，v 是对应的特征向量。
特征值方程为：

$$Av = \lambda v$$

这个方程等价于：

$$(A - \lambda I)v = 0$$

其中 I 是 $n \times n$ 的单位矩阵。
解特征值方程，我们就能得到 n 个特征值 $\lambda_1, \lambda_2, ..., \lambda_n$。

矩阵对角化和特征值

数值示例

考虑矩阵 $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$，我们要找到它的特征值和特征向量。

特征值

特征值满足特征值方程 $(A - \lambda I)v = 0$，其中 I 是单位矩阵。
对于矩阵 A，特征值方程为：

$$\begin{bmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

解这个方程，我们得到两个特征值：$\lambda_1 = 1$ 和 $\lambda_2 = -1$。

矩阵对角化和特征值

特征向量

对于每个特征值，我们要找到对应的特征向量。

对于特征值 $\lambda_1 = 1$，我们需要解方程 $(A - \lambda_1 I)v_1 = 0$：

$$\begin{bmatrix} -1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

解这个方程，我们得到特征向量 $v_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}$。

对于特征值 $\lambda_2 = -1$，我们需要解方程 $(A - \lambda_2 I)v_2 = 0$：

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

解这个方程，我们得到特征向量 $v_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -1 \end{bmatrix}$。

正交矩阵和幺正矩阵

正交矩阵 (Orthogonal Matrix)

一个 $n \times n$ 的实矩阵 U 被称为正交矩阵，如果满足下列条件：

$$U^T U = U U^T = I$$

其中 U^T 表示 U 的转置矩阵，I 是单位矩阵。这个定义可以扩展到复数域上，只需将转置换成厄米共轭转置（Hermitian conjugate）即可。

幺正矩阵 (Unitary Matrix)

一个 $n \times n$ 的复矩阵 U 被称为幺正矩阵，如果满足下列条件：

$$U^\dagger U = U U^\dagger = I$$

其中 $U^\dagger$ 表示 U 的厄米共轭转置（Hermitian adjoint），也称为伴随矩阵。

变换和内积的保持

- 正交矩阵和幺正矩阵都保持向量的长度不变，也就是说它们保持向量的范数（长度）不变。
- 正交矩阵的几何意义是保持向量的长度和夹角不变，它表示一种保持欧几里得空间的旋转和反射操作。
- 幺正矩阵的几何意义是保持内积不变，它表示一种保持向量的长度和夹角不变的线性变换。

内积的保持

正交矩阵和幺正矩阵都保持向量之间的内积（点积）不变。

自伴（厄密）矩阵

自伴（Hermitian）矩阵是一个复数矩阵，其转置的共轭等于它自身。对于一个 $n \times n$ 的矩阵 A，如果满足以下条件，它就是自伴矩阵：

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

其中 $A^{\dagger}$ 表示 A 的厄密共轭（共轭转置）。
自伴矩阵在量子力学中扮演着重要的角色，它们的特征值是实数，而且它们的特征向量是正交的。

如何找到特征向量和特征值/对角化矩阵

对于一个 $n \times n$ 的矩阵 A，特征向量 $|\lambda_i\rangle$ 是满足以下方程的非零向量：

$$A|\lambda_i\rangle = \lambda_i|\lambda_i\rangle$$

其中 λ_i 是特征值，而 $|\lambda_i\rangle$ 是对应于特征值 λ_i 的特征向量。
要找到特征向量和特征值，我们需要求解特征方程 $|A - \lambda_i I\rangle = 0$，其中 I 是单位矩阵。
一旦我们找到了特征向量，我们可以用它们组成矩阵 P，并将 A 对角化为 D：

$$D = P^\dagger A P$$

其中 D 是对角矩阵，其对角线元素是特征值，而 P 是由特征向量构成的矩阵。

更多的 Bra-Ket 运算

在量子力学中，我们使用 Bra-Ket 表示法来描述物理量和态之间的关系。

- Bra：表示为 $\langle\psi|$，是一个行向量，代表态空间中的一个态，如 $|\psi\rangle$ 的厄密共轭。
- Ket：表示为 $|\psi\rangle$，是一个列向量，代表态空间中的一个态。
- 内积：用 $\langle\phi|\psi\rangle$ 表示，表示两个态的内积，也称为态之间的重叠。
- 外积：用 $|\psi\rangle\langle\phi|$ 表示，表示一个态空间中的投影算符。
- 测量：当测量一个物理量时，态会坍缩为对应的特征态，得到特定的测量结果。

Bra-Ket 表示法在量子力学的数学描述中非常常用，它使得表达物理概念更加简洁和直观。

用 Pauli 自旋算符 S_z 在由其特征向量 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 形成的基中表示

考虑 Pauli 自旋算符 S_z，它是一个自伴矩阵。我们有两个特征向量 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$，分别对应于特征值 $+\frac{\hbar}{2}$ 和 $-\frac{\hbar}{2}$。
在这两个特征向量所形成的基中，我们可以表示 S_z 为对角矩阵：

$$S_z = \begin{bmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{bmatrix}$$

其中，$\hbar$ 是普朗克常数。

Unitary Transformation 示例

考虑一个 Unitary Transformation U，它是一个 2×2 的矩阵，表示为：

$$U = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

其中，θ 是一个实数。

Unitary Transformation 示例

考虑一个 Unitary Transformation U，它是一个 2×2 的矩阵，表示为：

$$U = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

其中，θ 是一个实数。
现在，我们来看一个例子：假设我们有一个向量 $|1\rangle$，表示为列向量 $\begin{bmatrix} a \\ B \end{bmatrix}$，经过 Unitary Transformation U 后，它变成了向量 $|0\rangle$，表示为列向量 $\begin{bmatrix} -B \\ a \end{bmatrix}$。

Unitary Transformation 示例

考虑一个 Unitary Transformation U，它是一个 2×2 的矩阵，表示为：

$$U = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

其中，θ 是一个实数。
现在，我们来看一个例子：假设我们有一个向量 $|1\rangle$，表示为列向量 $\begin{bmatrix} a \\ B \end{bmatrix}$，经过 Unitary Transformation U 后，它变成了向量 $|0\rangle$，表示为列向量 $\begin{bmatrix} -B \\ a \end{bmatrix}$。
让我们来验证一下 U 是否是 Unitary Transformation，即 $UU^\dagger = I$。

Unitary Transformation 示例（续）

首先，我们求 U 的厄密共轭 $U^\dagger$，它是：

$$U^\dagger = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

首先，我们求 U 的厄密共轭 $U^\dagger$，它是：

$$U^\dagger = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

然后，我们计算 $UU^\dagger$，结果为：

$$UU^\dagger = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I$$

Unitary Transformation 示例（续）

首先，我们求 U 的厄密共轭 $U^\dagger$，它是：

$$U^\dagger = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

然后，我们计算 $UU^\dagger$，结果为：

$$UU^\dagger = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = I$$

因此，我们可以得出结论：U 是一个 Unitary Transformation。

如何找到变换矩阵

在 n 维空间中，假设旧基的基向量分别为 $|0\rangle, |1\rangle, \ldots, |n-1\rangle$，而新基的基向量为 $|0'\rangle, |1'\rangle, \ldots, |n-1'\rangle$。
将新基的基向量表示为旧基的线性组合，得到变换矩阵 U。矩阵 U 的每一列由新基向量在旧基上的系数组成。
数学上，变换矩阵 U 为：

$$U = \begin{bmatrix} \langle 0'|0\rangle & \langle 0'|1\rangle & \cdots & \langle 0'|n-1\rangle \\ \langle 1'|0\rangle & \langle 1'|1\rangle & \cdots & \langle 1'|n-1\rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle n-1'|0\rangle & \langle n-1'|1\rangle & \cdots & \langle n-1'|n-1\rangle \end{bmatrix}$$

矩阵 U 的每个元素是新基向量与旧基向量的内积。计算完内积并排列成矩阵 U，就得到了用于表示在新基中的向量的变换矩阵。

基的完备性

在线性代数中，如果一个基能够表示向量空间中的每一个向量，则称该基是完备的。对于一个维数为 n 的向量空间，当基由 n 个线性无关的向量组成时，它就是该空间的完备基。

基的完备性

在线性代数中，如果一个基能够表示向量空间中的每一个向量，则称该基是完备的。对于一个维数为 n 的向量空间，当基由 n 个线性无关的向量组成时，它就是该空间的完备基。
举个例子，考虑一个实二维空间。由向量 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 组成的基是完备的，因为这两个基向量可以线性组合表示该空间中的任意向量。

基的完备性

在线性代数中，如果一个基能够表示向量空间中的每一个向量，则称该基是完备的。对于一个维数为 n 的向量空间，当基由 n 个线性无关的向量组成时，它就是该空间的完备基。
举个例子，考虑一个实二维空间。由向量 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 组成的基是完备的，因为这两个基向量可以线性组合表示该空间中的任意向量。
然而，对于一个实三维空间，由 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 组成的基就不完备了。此时，还需要第三个线性无关的向量 $|2\rangle$ 来构成一个完备的基。

基的完备性

在线性代数中，如果一个基能够表示向量空间中的每一个向量，则称该基是完备的。对于一个维数为 n 的向量空间，当基由 n 个线性无关的向量组成时，它就是该空间的完备基。
举个例子，考虑一个实二维空间。由向量 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 组成的基是完备的，因为这两个基向量可以线性组合表示该空间中的任意向量。
然而，对于一个实三维空间，由 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 组成的基就不完备了。此时，还需要第三个线性无关的向量 $|2\rangle$ 来构成一个完备的基。
一般地，对于一个 n 维向量空间，由 n 个线性无关的基向量组成的基可以表示空间中的任意向量。如果 $|V\rangle$ 是该 n 维空间中的一个向量，那么它可以表示为基向量的线性组合：

$$|V\rangle = a_0|0\rangle + a_1|1\rangle + \ldots + a_{n-1}|n-1\rangle$$

其中 $a_0, a_1, \ldots, a_{n-1}$ 是常数，$|0\rangle, |1\rangle, \ldots, |n-1\rangle$ 是基向量。

基的完备性

在线性代数中，如果一个基能够表示向量空间中的每一个向量，则称该基是完备的。对于一个维数为 n 的向量空间，当基由 n 个线性无关的向量组成时，它就是该空间的完备基。
举个例子，考虑一个实二维空间。由向量 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 组成的基是完备的，因为这两个基向量可以线性组合表示该空间中的任意向量。
然而，对于一个实三维空间，由 $|0\rangle$ 和 $|1\rangle$ 组成的基就不完备了。此时，还需要第三个线性无关的向量 $|2\rangle$ 来构成一个完备的基。
一般地，对于一个 n 维向量空间，由 n 个线性无关的基向量组成的基可以表示空间中的任意向量。如果 $|V\rangle$ 是该 n 维空间中的一个向量，那么它可以表示为基向量的线性组合：

$$|V\rangle = a_0|0\rangle + a_1|1\rangle + \ldots + a_{n-1}|n-1\rangle$$

其中 $a_0, a_1, \ldots, a_{n-1}$ 是常数，$|0\rangle, |1\rangle, \ldots, |n-1\rangle$ 是基向量。
通过计算 $|V\rangle$ 与每个基向量 $|i\rangle$ 的内积，我们可以求出线性组合中的系数 a_i。基的完备性保证了我们可以使用这个基来表示空间中的任意向量。

构造由特征向量和特征值组成的算符

如果一个算符 A 有特征值 a_i 和特征向量 $|i\rangle$，其中 i 从 0 到 $n-1$，那么这个算符 A 可以表示为：

$$A = \sum_{i=0}^{n-1} a_i |i\rangle\langle i|$$

具体例子

让我们考虑一个具体的例子，假设 A 的特征向量分别是 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$，对应的特征值分别是 λ 和 -1。那么这个算符 A 可以表示为：

$$A = \lambda|+\rangle\langle+| + (-1)|-\rangle\langle-|$$

即

$$A = \lambda|+\rangle\langle+| - |-\rangle\langle-|$$

这个算符 A 在这个基下的表示是通过用特征向量的外积构造的。特征向量 $|+\rangle$ 和 $|-\rangle$ 是列向量，它们的共轭转置分别是行向量 $\langle+|$ 和 $\langle-|$。通过这些行向量和列向量的外积，我们可以构造出 A 在这个基下的表示。